



Università degli Studi di Firenze

Facoltà di Ingegneria
Dipartimento di Energetica "*Sergio Stecco*"

DOTTORATO DI RICERCA IN ENERGETICA E TECNOLOGIE
INDUSTRIALI INNOVATIVE
XVI CICLO

SVILUPPO DI MODELLI NUMERICI PER
L'ANALISI DELLA COMBUSTIONE
TURBOLENTA PREMISCELATA NELLE
TURBINE A GAS

Candidato:
Ing. Antonio Andreini

Relatore:
Prof. Ing. Bruno Facchini

Correlatore:
Ing. Roberto Modi

Coordinatore:
Prof. Ing. Francesco Martelli

Ringraziamenti

Desidero innanzitutto ringraziare il Prof. Bruno Facchini per la fiducia che mi ha concesso e per i suoi sempre determinanti suggerimenti; il sincero rapporto di amicizia che si è sviluppato in questi anni ha contribuito in maniera significativa alla mia formazione e alla realizzazione di questo lavoro.

Ringrazio vivamente il mio correlatore, Ing. Roberto Modi, responsabile del reparto combustori di GE-Nuovo Pignone, per i preziosi consigli forniti durante la revisione di questo elaborato e per lo stimolante rapporto di lavoro portato avanti nel corso degli anni. A tal proposito ringrazio gli Ingg. Antonio Asti e Gianni Ceccherini per l'amicizia mostrata e per il sempre coinvolgente rapporto di collaborazione.

Ringrazio inoltre tutti i colleghi ed amici, Ingg. Lorenzo Arcangeli, Alessandro Bacci, Paolo Boncinelli, Carlo Carcasci, Nunzio Colitto, Luca Innocenti, Andrea Magi, Michele Marconcini, Giacomo Migliorini, Filippo Rubichini, Marco Surace, Simone Taddei, Lorenzo Tarchi, Andrea Vacca e Stefano Zecchi per il sempre piacevole ambiente di lavoro che hanno saputo creare nel corso di questi anni, nonostante le numerose difficoltà logistiche incontrate. Ringrazio inoltre il dr. Luca Mangani per la proficua collaborazione oggetto della sua tesi di laurea. Vorrei inoltre ringraziare tutto il corpo docente ed il personale del Dipartimento di Energetica "Sergio Stecco".

Devo poi ringraziare il dr. Dreizler per aver messo a disposizione i dati del testcase "jet". Allo stesso modo esprimo la mia riconoscenza al dr. Nandula per aver fornito tutto il materiale relativo al "VaderBilt Combustor". Un sentito ringraziamento al dr. Herrmann per la disponibilità mostrata e per i preziosi suggerimenti forniti durante le fasi di sviluppo del modello "Level Set". Un grazie infine al Prof. Ertesvag per le preziose pubblicazioni fornite.

Indice

1	Introduzione	15
2	Analisi termo-fluidodinamica dei flussi reattivi	19
2.1	Equazioni di conservazione	21
2.2	Flussi turbolenti	23
2.2.1	Campi di moto turbolenti	23
2.2.2	Approcci alla soluzione dei flussi turbolenti	25
2.2.3	RANS	28
2.2.3.1	Chiusura delle RANS	31
2.3	Cinetica chimica	36
2.3.1	Modello cinetico di Arrhenius	36
2.3.2	Meccanismi di reazione	39
2.3.3	Cinetica chimica in regime turbolento	40
3	Combustione premiscelata turbolenta	43
3.1	Influenza della turbolenza sulla combustione	44
3.1.1	Meccanismi di stabilizzazione	46
3.2	Fiamme premiscelate laminari	48
3.2.1	<i>Flame stretch</i>	52
3.2.1.1	Effetto dello <i>stretching</i> sulla velocità di fiamma	54
3.3	Classificazione delle fiamme premiscelate turbolente	57
3.3.1	Scale e grandezze caratteristiche	58
3.3.2	Diagramma spettrale	60
3.4	Modelli di combustione turbolenta per l'approccio RANS	65
3.4.1	Modelli <i>local source</i>	68
3.4.2	Approccio Flamelet	69
3.4.2.1	Il modello <i>Bray-Moss-Libby</i> (BML)	69
3.4.2.2	Trasporto turbolento	73

3.4.2.3	<i>Level Set Method</i>	77
3.4.3	<i>Turbulent flame stretch</i>	78
4	Eddy Dissipation Concept	81
4.1	Introduzione	82
4.2	Il modello EDC	82
4.2.1	<i>Fast Chemistry</i>	84
4.3	Modelli EDC e cinetica chimica	87
4.3.1	Modelli EDC ibridi	88
4.3.1.1	<i>Hybrid reaction rate</i>	88
4.3.1.2	<i>Combined time scale</i>	89
4.3.1.3	<i>Unmixedness factor</i>	90
4.3.2	Modello EDC-DC <i>Detailed Chemistry</i>	91
4.3.2.1	Isteresi del reattore PSR	94
4.4	Implementazione nel codice STAR-CD™	98
4.4.1	Integrazione con il solutore CFD	103
4.5	Validazione del modello	106
4.5.1	Modelli di turbolenza impiegati nei test di validazione	110
4.5.2	<i>Bluff Body Burner</i>	111
4.5.2.1	Simulazioni in condizioni reattive	113
4.5.3	<i>Jet Flame</i>	119
4.5.3.1	Simulazioni in condizioni reattive	120
4.5.4	<i>Vitiated Coflow Burner</i>	126
4.5.5	<i>Vanderbilt Combustor</i>	135
4.5.5.1	Simulazioni in condizioni reattive	139
4.5.6	Bruciatore k160a NP	157
4.5.6.1	Simulazioni in condizioni reattive	158
4.6	Considerazioni finali	168
5	La chiusura di Kolmogorov-Petrovski-Piskunov (KPP)	171
5.1	Introduzione	172
5.2	KPP	173
5.2.1	Chiusura dello schema BML mediante l'analisi KPP	174
5.3	Implementazione del modello KPP	177
5.4	Validazione del modello	182
5.4.1	<i>Vanderbilt Combustor</i>	182
5.4.2	Bruciatore k160a NP	193

5.5	Considerazioni finali	195
6	Il modello Level Set Flamelet	197
6.1	Introduzione	198
6.2	Basi teoriche del modello <i>Level Set Flamelet</i>	199
6.2.1	Approccio <i>Level Set</i> per fiamme laminari	200
6.2.1.1	Approccio <i>Level Set</i> per i regimi <i>Corrugated</i> e <i>Thin Reaction zone</i>	203
6.2.2	Modello RANS per la combustione turbolenta premi- scelata basato sull'approccio <i>Level Set</i>	204
6.2.2.1	Equazioni RANS per il valore medio e la va- rianza di G	208
6.2.3	La velocità di fiamma turbolenta	210
6.2.3.1	<i>Flame Surface Area Ratio</i>	211
6.2.4	Flamelet per la combustione premiscelata	213
6.2.4.1	Equazioni per flamelet	214
6.2.5	Approccio <i>presumed PDF</i>	217
6.3	Implementazione del modello <i>Level Set</i> nel codice STAR-CD™	218
6.3.1	Implementazione della <i>G-equation</i>	219
6.3.1.1	Re-inizializzazione di G	220
6.3.2	Varianza di G e <i>surface area ratio</i>	223
6.3.2.1	Redistribuzione scalari	224
6.3.3	Librerie Flamelet	227
6.3.3.1	Soluzione delle flamelet laminari	228
6.3.4	Generazione della <i>flamelet library</i>	229
6.3.4.1	Integrazione della PDF e <i>postprocessing</i> . . .	232
6.4	Validazione del modello	234
6.4.1	<i>Vanderbilt Combustor</i>	235
6.4.1.1	Effetto dello <i>stretching</i> e del <i>wrinkling</i> sulle emissioni di CO	241
6.4.2	Bruciatore k160a NP	254
6.5	Considerazioni finali	257
7	Il combustore GE10 (K-ONE DLN)	261
7.1	Introduzione	262
7.2	Descrizione del combustore	262
7.3	Simulazione numerica	264

7.3.1	Impostazioni del modello EDC-DC	268
7.3.1.1	Impostazione del modello KPP	268
7.4	Risultati delle simulazioni	269
7.4.1	Analisi della fiamma	271
7.4.2	Meccanismo di stabilizzazione	272
7.4.3	Composizione allo scarico. Completamento della reazione	274
7.5	Considerazioni finali	276
8	Conclusioni	279
 Appendici		 285
A	Proprietà termo-fluidodinamiche dei flussi reattivi	1
A.1	Equazioni di conservazione	1
A.1.1	Conservazione della massa	1
A.1.2	Conservazione della quantità di moto	3
A.1.3	Conservazione dell'energia	3
A.1.4	Proprietà termodinamiche e di trasporto	4
A.1.4.1	Trasporto	4
A.1.4.2	Equazione di stato e proprietà termodinamiche	5
A.2	Descrizione statistica dei flussi turbolenti	6
A.3	I modelli eddy viscosity/diffusivity EVM	9
A.3.1	Il modello $k - \varepsilon$	11
A.3.2	Altri modelli EVM	13
B	Strumenti software	15
B.1	Il codice STAR-CD TM	15
B.2	Le librerie Chemkin TM II	18
B.2.1	Il codice EQUIL	21
C	Analisi asintotica approssimata	23
D	Basi teoriche del modello EDC	27
E	Level Set Flamelet Method	31
E.1	Derivazione della <i>G-equation</i> nei regimi <i>corrugated flamelet</i> e <i>thin reaction zone</i>	31
E.2	Derivazione delle equazioni RANS valide nei due regimi flamelet	33

Elenco delle figure

2.1	RANS, LES e DNS	26
2.2	Rappresentazione schematica della relazione fra fronte di fiamma istantaneo e <i>flame brush</i>	29
2.3	Andamento qualitativo dei profili di temperatura e velocità di reazione laminari e turbolenti	30
2.4	Esempio di meccanismi chimici globali	40
3.1	Definizione di velocità di fiamma turbolenta.	45
3.2	Stabilizzazione mediante <i>flame-holder</i>	46
3.3	Stabilizzazione mediante fiamma pilota.	46
3.4	Stabilizzazione mediante <i>swirler</i>	47
3.5	Struttura di una fiamma laminare premiscelata (riadattato da [56]).	49
3.6	Definizione generale di spessore di fiamma laminare.	51
3.7	Definizione generalizzata della velocità di propagazione di una fiamma laminare premiscelata.	53
3.8	<i>Counter flow twin flame</i>	53
3.9	<i>Freely propagating spherical flame</i>	54
3.10	Andamento del numero di Lewis delle principali specie in una fiamma stechiometrica metano-aria laminare.	55
3.11	Effetto del numero di Le sulla dipendenza tra S_L e K	56
3.12	flamelet	61
3.13	Diagramma di Borghi	62
3.14	Definizione di <i>mixture fraction</i>	66
3.15	Intermittenza del valore di c nel generico punto x	70
3.16	Significato delle lunghezza di <i>wrinkling</i> L_y	72
3.17	Effetto della turbolenza sul trasporto turbolento	75

3.18	Individuazione dei regimi di GD e CGD sul diagramma di Borghi	76
3.19	Impostazione della simulazione DNS in [49]	79
4.1	Rappresentazione schematica della struttura FS-SF	92
4.2	Schema del reattore PSR	92
4.3	Isteresi del reattore PSR. Meccanismo di reazione ridotto a 5 passi. Solutore D-VODE [46]	95
4.4	Esistenza di stati stazionari multipli in un PSR	96
4.5	Isteresi del reattore PSR. Meccanismo di reazione <i>skeletal</i> (16 specie, 24 reazioni) [70]. Solutore TWOPOINT	97
4.6	Struttura del modello EDC-DC implementato	99
4.7	Schematizzazione del processo di combustione turbolenta	102
4.8	Integrazione EDC-STAR-CD TM	105
4.9	Schematizzazione delle fiamme TNF e dominio di calcolo	109
4.10	<i>Bluff Body Burner: geometria del combustore e immagini della fiamma</i>	111
4.11	Rappresentazione schematica delle tre zone distintive della fiamma bbody	112
4.12	Mesh per il test case bbody	114
4.13	Profili radiali di temperatura, bruciatore bbody	115
4.14	Profili radiali delle principali specie in $Z = 13$ mm, bruciatore bbody	115
4.15	Profili radiali delle principali specie in $Z = 45$ mm, bruciatore bbody	116
4.16	Profili radiali delle principali specie in $Z = 90$ mm, bruciatore bbody	116
4.17	Contour plot modello EDC-DC, bruciatore bbody	117
4.18	Contour plot modello EDC-DC, bruciatore bbody	118
4.19	Geometria del bruciatore per testcase jet	119
4.20	Mesh per il testcase jet	121
4.21	Profili assiali di temperatura per il testcase jet	122
4.22	Profili radiali in $Z/D = 5$ per il testcase jet	122
4.23	Profili radiali in $Z/D = 20$ per il testcase jet	123
4.24	Profili radiali in $Z/D = 40$ per il testcase jet	123
4.25	Contour plot relativi alla simulazione con modello EDC-DC del testcase jet	124

4.26	Profili assiale ($r=0$) e radiale ($Z/D = 20$) della componente assiale di velocità	125
4.27	Schema del testcase vcb	126
4.28	Rappresentazione schematica di una fiamma tripla	127
4.29	Mesh di calcolo per il testcase vcb	129
4.30	Profili radiali in $Z/D = 1$ per il testcase vcb	130
4.31	Profili radiali in $Z/D = 8$ per il testcase vcb	130
4.32	Profili radiali in $Z/D = 11$ per il testcase vcb	131
4.33	Profili radiali in $Z/D = 14$ per il testcase vcb	131
4.34	Campo di temperatura predetto dai modelli EDC-FC e EDC-DC per il testcase vcb	132
4.35	Distribuzione dei radicali OH e HO_2	133
4.36	Schema del combustore vdb e immagine della fiamma [52]	136
4.37	Rappresentazione schematica della fiamma nel combustore vdb	137
4.38	Mesh di calcolo per il testcase vdb : 10000 celle esaedriche	140
4.39	Combustore vdb : profili radiali della temperatura media	141
4.40	Combustore vdb : profili radiali della temperatura media	142
4.41	Combustore vdb : mappe di temperatura media	143
4.42	Combustore vdb : a) mappa del fattore di <i>stretching</i> nelle zone 2 e 3 del combustore; b) mappa del tempo di residenza τ^* nelle FS; c) visualizzazione della bolla di ricircolo: l'estensione predetta dal calcolo è pari a circa 1.2 volte il diametro D del <i>bluff-body</i>	144
4.43	Combustore vdb : mappa del fattore η (<i>unmixedness factor</i>)	145
4.44	Combustore vdb : profili radiali della frazione molare di CH_4	147
4.45	Combustore vdb : profili radiali della frazione molare di CH_4	148
4.46	Combustore vdb : profili radiali della frazione molare di H_2O	149
4.47	Combustore vdb : profili radiali della frazione molare di H_2O	150
4.48	Combustore vdb : profili radiali della frazione molare di CO	151
4.49	Combustore vdb : profili radiali della frazione molare di CO	152
4.50	Combustore vdb : profili radiali della concentrazione del radicale OH	155
4.51	Combustore vdb : profili radiali della concentrazione del radicale OH	156
4.52	Geometria del bruciatore NP k160a	157

4.53	Campo di moto a freddo del combustore k160a per due diversi angoli di swirl	158
4.54	Rappresentazione schematica della fiamma del combustore k160a	159
4.55	Profili di velocità e turbolenza in ingresso al combustore k160a	160
4.56	Modello del combustore k160a e dettaglio della mesh di calcolo	161
4.57	Contour plot della distribuzione di temperatura predetta dai modelli EDC 462 , 562 e 662 per i tre valori di λ considerati. La temperatura è espressa in Kelvin	163
4.58	Contour plot della distribuzione di temperatura predetta dal modello EDC-DC per i quattro valori di λ considerati. Per maggiore chiarezza abbiamo ricostruito una sezione completa del combustore.	165
4.59	Contour plot della frazione in massa della specie H_2 nei tre casi studiati per il combustore k160a	166
4.60	Combustore k160a : mappe di temperatura con <i>color scale</i> centrata in corrispondenza della temperatura di equilibrio . . .	166
4.61	Combustore k160a : dettaglio del processo di stabilizzazione della fiamma	167
4.62	Confronto delle emissioni di CO allo scarico per il combustore k160a	168
5.1	Validazione di S_T stimata tramite la correlazione di Schmid et al [68]	176
5.2	Variazione della temperatura di equilibrio e della velocità laminare di fiamma per la combustione metano aria	179
5.3	Diagramma schematico dell'interazione tra il modello KPP, il codice STAR-CD TM e i codici ausiliari. Nel riquadro tratteggiato sono riportati i codici e le librerie esterne al modello e non direttamente interrogati durante la simulazione CFD . . .	181
5.4	Mappa del fattore di <i>stretching</i> definito in 5.10	184
5.5	Combustore vdb , modello KPP: profili radiali della temperatura media	185
5.6	Combustore vdb , modello KPP: profili radiali della temperatura media	186
5.7	Combustore vdb , modello KPP: mappa del numero di <i>Bray</i> per due diversi valori della costante α	187

5.8	Combustore vdb , modello KPP: mappa del termine di trasporto turbolento per tre diversi valori della costante α	188
5.9	Combustore vdb , modello KPP: profili radiali della frazione molare di CH_4	189
5.10	Combustore vdb , modello KPP: profili radiali della frazione molare di CH_4	190
5.11	Combustore vdb , modello KPP: profili radiali della frazione molare di H_2O	191
5.12	Combustore vdb , modello KPP: profili radiali della frazione molare di H_2O	192
5.13	Combustore k160a : confronto delle distribuzioni di temperatura dei modelli KPP e EDC-DC per i tre casi analizzati. E' riportata una porzione della mesh di calcolo corrispondente alla lunghezza effettiva del combustore.	194
6.1	G_0 curva di livello che definisce il fronte di fiamma laminare .	200
6.2	A sinistra: PDF della frequenza del fronte di fiamma nella generica posizione x . Le misure si riferiscono ad una fiamma premiscelata magra stabilizzata mediante <i>swirler</i> . A destra: Confronto tra una PDF misurata sperimentalmente ed una distribuzione Gaussiana [56]	205
6.3	Differenza di curvatura del fronte di fiamma rispetto ai lati <i>burned</i> e <i>unburned</i>	206
6.4	Distribuzione Gaussiana di \bar{G}	206
6.5	Rappresentazione delle linee iso-varianza rispetto al fronte di fiamma medio	208
6.6	Schema di una fiamma turbolenta premiscelata in un condotto monodimensionale	210
6.7	Relazione tra l'area ratio e σ	212
6.8	Wrinkling di una fiamma e distanza dal fronte di fiamma medio e dal fronte di fiamma istantaneo	215
6.9	Rappresentazione schematica del modello <i>Level Set Flamelet</i> .	218
6.10	Ricostruzione della rosa della cella n° 14	222
6.11	Procedura di individuazione del livello $G = 0$	223
6.12	Redistribuzione nel campo di moto del generico scalare condizionato	225
6.13	Banda per la redistribuzione del generico scalare condizionato .	226

6.14	Schema algoritmo modificato con Θ generico scalare	226
6.15	Diagramma per la soluzione degli scalari G , G''^2 e σ_t	227
6.16	Esempi di configurazioni geometriche per flamelet	228
6.17	Errore nella valutazione approssimata del calore specifico	232
6.18	Diagramma complessivo dell'implementazione del modello <i>Level Set</i>	233
6.19	Flamelet per il combustore vdb	235
6.20	Variazione della velocità laminare con K nel combustore vdb	236
6.21	Analisi di sensibilità alla mesh, combustore vdb , modello <i>Level Set</i>	237
6.22	Analisi di sensibilità alla mesh, combustore vdb , modello <i>Level Set</i>	238
6.23	Mappa di temperatura e dello scalare G , combustore vdb	239
6.24	Andamento di σ_T e δ_T sul fronte di fiamma	240
6.25	Distribuzione delle isolinee di G e della varianza	241
6.26	Confronto tra i modelli EDC-DC, KPP e <i>Level Set</i> , profili di T , combustore vdb	242
6.27	Confronto tra i modelli EDC-DC, KPP e <i>Level Set</i> , profili di CH_4 , test vdb	243
6.28	Confronto tra i modelli EDC-DC, KPP e <i>Level Set</i> , profili di H_2O , test vdb	244
6.29	Variazione della concentrazione finale di CO nella flamelet al variare dello <i>strain</i>	245
6.30	Effetto dello <i>stretching</i> sul campo di temperatura, combustore vdb	246
6.31	Effetto dello <i>stretching</i> sulla concentrazione di CO , combustore vdb	247
6.32	Effetto sul campo di <i>stretching</i> dell'estensione della zona di ricircolo	248
6.33	Concentrazione di CO con e senza modello di <i>wrinkling</i> , combustore vdb	250
6.34	Confronto zona di ricircolo, modelli $k - \varepsilon$ standard e RNG, combustore vdb	251
6.35	Concentrazione di CO , modello <i>Level Set</i> , $k - \varepsilon$ RNG e coordinate normalizzate, combustore vdb	252

6.36	Profili di temperatura, modello <i>Level Set</i> , $k - \varepsilon$ RNG, coordinate normalizzate	253
6.37	Confronto tra i modelli <i>Level Set</i> e KPP nei tre casi selezionati del bruciatore k160a	256
6.38	Isolinee dello scalare G per il test A	257
7.1	Rappresentazione schematica del turbogas GE10 (fonte GE-NP)	262
7.2	Rappresentazione schematica del combustore GE10 (proprietà GE-NP)	263
7.3	Mesh di calcolo usata per la simulazione del combustore GE10 (proprietà GE-NP)	265
7.4	Rappresentazione schematica del modello usato per il combustore GE10 con raffigurazione della struttura della fiamma (proprietà GE-NP)	267
7.5	Flamelet per il modello KPP usate nella simulazione del combustore GE10	269
7.6	Distribuzione di λ nel condotto di premiscelazione.	270
7.7	Shear Layers	270
7.8	Visione d'insieme dei campi di temperatura predetti dai modelli KPP e EDC-DC	272
7.9	Vector plot nella zona di ricircolo	273
7.10	<i>Lift</i> della fiamma diffusiva di stabilizzazione	273
7.11	Distribuzione del rapporto di equivalenza λ nel combustore GE10	275
7.12	Distribuzione del del numero di <i>Damköhler</i> nella zona di stabilizzazione della fiamma, modello KPP, combustore GE10	276
B.1	Tipologia di dati necessari alla gestione delle specie chimiche e delle reazioni	18
B.2	Struttura del programma interprete	19
C.1	Struttura di una fiamma laminare premiscelata secondo un'analisi RRA con meccanismo globale a passo singolo.	24
D.1	Rappresentazione schematica del processo di <i>Energy Cascade</i>	27
D.2	Rappresentazione schematica delle FS all'interno di un vortice	28

Elenco delle tabelle

4.1	Condizioni al contorno del reattore PSR	95
4.2	Parametri di efflusso per il test reattivo del bruciatore bbody	113
4.3	Composizione del combustibile e dell'aria nel test reattivo bbody	113
4.4	Dati nominali del testcase reattivo jet	120
4.5	Composizione in massa di combustibile e aria nel testcase jet	120
4.6	Dati nominali del testcase vcb	127
4.7	Composizione in massa di combustibile e <i>coflow</i> nel testcase vcb	128
4.8	Dati per il combustore vdb	138
4.9	Temperatura e composizione molare all'equilibrio per il combustore vdb	146
4.10	Test matrix delle simulazioni reattive svolte sul bruciatore k160a . Il parametro λ è l'inverso del rapporto di equivalenza convenzionale ($\lambda = 1/\phi$	160
4.11	Caratteristiche nominali della fiamma per i tre valori di λ considerati per il combustore k160a . Le velocità di fiamma l_{min} sono state ottenute tramite la correlazione di Bui-Pham	162
4.12	Temperature adiabatiche di equilibrio per i tre casi del combustore k160a	164
5.1	Dati per la simulazione del combustore vdb usando il modello KPP	182
5.2	Caratteristiche nominali delle tre fiamme analizzate per il combustore vdb con il modello KPP	193
6.1	Valori delle costanti per l'equazione del <i>surface area ratio</i> . . .	213

6.2	Velocità laminari <i>unstretched</i> calcolate dal solutore Chem1D, combustore k160a	255
6.3	Dimensioni caratteristiche delle <i>flamelet libraries</i> impiegate per il testcase vdb	260
7.1	Condizioni al contorno del combustore in condizioni di carico nominale	264
7.2	Classificazione delle varie inlet per il combustore GE10.	266
7.3	Composizione in massa del combustibile e dell'aria per la simulazione del combustore GE10	268
7.4	Comparazione delle caratteristiche principali della fiamma per le due simulazioni	271
A.1	Coefficienti del modello $k - \varepsilon$ standard	12
C.1	Coefficienti per l'equazione C.1	24

Capitolo 1

Introduzione

L'oggetto del presente lavoro di tesi, è la descrizione delle principali fasi di sviluppo, messa a punto e validazione di una libreria di modelli numerici per l'analisi CFD¹ reattiva dei combustori per turbine a gas (TAG). Gran parte del lavoro costituisce l'argomento di una collaborazione di ricerca tra l'Università degli Studi di Firenze e la società GE-Nuovo Pignone. L'esigenza da parte della società di dotarsi di strumenti di simulazione all'avanguardia per quanto riguarda l'ottimizzazione fluidodinamica dei propri prodotti, e l'interesse da parte dell'ateneo nei confronti della possibilità di applicare sul campo il proprio know-how scientifico nell'ambito delle turbine a gas, ha dato il via ad una proficua collaborazione.

L'obiettivo del lavoro, come dicevamo, è la messa a punto di una libreria di modelli di combustione turbolenta per l'analisi fluidodinamica reattiva dei combustori per turbina a gas. I modelli e le formulazioni adottate rispondono alle esigenze dell'industria e si adattano ai campi di impiego richiesti per l'analisi dei moderni combustori. Il lavoro affronta essenzialmente lo studio delle fiamme turbolente premiscelate o parzialmente premiscelate, che interessano la quasi totalità dei combustori per TAG terrestri e, in misura sempre maggiore negli anni a venire, i combustori dei motori aeronautici. Il principale target tecnologico nella progettazione dei combustori per TAG è infatti, ormai da almeno 15 anni, il contenimento delle emissioni di ossidi di azoto (NO_x); data la forte dipendenza delle velocità di formazione degli NO_x dalla temperatura (di tipo esponenziale), è necessario un preciso controllo della composizione dei reagenti, in modo da evitare le disuniformità

¹ *Computational Fluid Dynamics*

del campo di temperatura e contenerne il valore massimo. Questo tipo di controllo può essere garantito solamente ricorrendo alla premiscelazione dei reagenti, aria e combustibile (*Lean Premixed Combustor* - LPC). I sempre più stringenti limiti sulle emissioni imposti agli impianti termici stazionari imposti nella maggior parte dei paesi industrializzati (ormai inferiori alle 25 ppmvd@15O₂²), richiedono il contenimento della temperatura di fiamma entro valori molto prossimi ai limiti di estinzione delle reazioni. I combustori LPC che operano in prossimità del limiti di *lean blow-off* della fiamma sono soggetti ad effetti di oscillazioni termo-acustiche che determinano pulsazioni di pressione spesso così intense da pregiudicare, non solo il corretto funzionamento del dispositivo, ma la sua stessa integrità strutturale. Come avremo modo di vedere in maniera dettagliata nei prossimi capitoli, i combustori reali non possono essere operati con stabilità senza il ricorso a fiamme pilota, spesso di tipo diffusivo.

La progettazione del combustore e dei suoi principali sottosistemi (sistema di iniezione premiscelazione, sistema di stabilizzazione della fiamma, sistemi di raffreddamento e sistema di diluizione), non può prescindere dal ricorso alla simulazione fluidodinamica tridimensionale. L'uso dei codici CFD costituisce ormai uno dei principali strumenti di investigazione, soprattutto in condizioni reattive, dati l'elevato costo e la complessità della sperimentazione a caldo e in condizioni macchina. E' per questo motivo che negli ultimi 25 anni lo studio delle fiamme turbolente ha costituito uno degli argomenti maggiormente indagati nella comunità scientifica, divenendo uno delle principali branche delle fluidodinamica numerica.

Anche se i principali prodotti software commerciali mettono a disposizione modelli per lo studio di fiamme turbolente premiscelate e non premiscelate, il continuo sviluppo della ricerca nel settore, pone le metodologie sviluppate dai centri di ricerca su un livello superiore di accuratezza. Le esigenze di semplicità di utilizzo e di rapidità di generazione di mesh di calcolo su geometrie complesse, tipiche dell'utenza industriale, rende tuttavia spesso problematico l'abbandono dei software commerciali e il ricorso a codici interamente universitari; le avanzate capacità di "*user programming*" messe a disposizione dai moderni codici CFD permettono di implementare complessi modelli ausiliari, come appunto i modelli di combustione, mantenendo inalterate le principali funzionalità del software. I modelli adottati in questo lavoro sono

²*part per million - volume dry*

stati tutti implementati nel codice CFD industriale STAR-CD™, del quale verrà data una rapida descrizione in appendice.

I modelli presi in considerazione in questo lavoro, sono stati tutti valutati ed implementati nel solo contesto delle RANS³. Benché, infatti, lo studio dei fenomeni instazionari che sono alla base dell'interazione termo-acustica fra la combustione e la fluidodinamica responsabile dei citati problemi di pulsazioni di pressione, possano essere analizzati in maniera quantitativamente corretta solo con calcoli instazionari (tipicamente LES⁴), l'uso delle equazioni di moto mediate e del calcolo stazionario, costituisce il principale strumento di indagine numerica, e, presumibilmente, lo sarà ancora per lungo tempo. Le fasi iniziali della progettazione dei combustori richiedono una mappa del campo di temperatura media, per il dimensionamento, ad esempio, del sistema di raffreddamento e per la stima del profilo di temperatura in uscita dalla camera. Il calcolo stazionario è ancora il principale strumento di indagine per individuare la struttura della fiamma e la dinamica della sua stabilizzazione, soprattutto in presenza di campi di moto complessi come quelli prodotti dagli *swirler*. La stima delle emissioni inquinanti, infine, è di fatto prerogativa dei soli codici RANS: solo, infatti, con una simulazione stazionaria mediata, i tempi di calcolo in presenza di una descrizione dettagliata della chimica del sistema rimangono compatibili con le esigenze dell'industria.

Per i motivi sopra elencati, quindi, nel presente lavoro verranno richiamate le nozioni di base relative alle sole equazioni RANS, limitando la descrizione dei soli modelli turbolenza adottati nelle simulazioni svolte (essenzialmente chiusure del primo ordine). Effettueremo, invece, numerose considerazioni sulla fisica delle fiamme premiscelate e riporteremo un'ampia panoramica dei principali modelli di combustione turbolenta per questo tipo di fiamme. Analizzeremo quindi nel dettaglio le tre famiglie di modelli adottati, descrivendone lo sviluppo e l'implementazione nel codice CFD STAR-CD™. I modelli presi in considerazione nel seguente lavoro, nell'ordine con cui verranno descritti, sono:

- Modelli *Eddy Dissipation Concept*. Come principali strumenti di simulazione in ambito industriale e come dotazione standard di tutti i pacchetti CFD commerciali, abbiamo codificato, in un'unica vasta libreria, le formulazioni più accurate dei modelli EDC sviluppate negli

³ *Reynolds Averaged Navier-Stokes*

⁴ *Large Eddy Simulation*

ultimi anni. Abbiamo quindi affiancato a questi una recente variante dello schema EDC che consente l'adozione di meccanismi chimici dettagliati.

- Modello *Bray-Moss-Libby*. Una modalità di chiusura per la variabile di progresso (su cui si basa l'approccio BML), è stata recentemente proposta come conseguenza del teorema di Kolmogorov-Petrovski-Piskunov. In questo lavoro è stata formulata una variante del modello che permette lo studio di fiamme parzialmente premiscelate.
- Modello *Level Set Flamelet*. L'uso dei modelli *laminar flamelet* permette di affiancare alla semplicità dei modelli basati sull'approccio BML, la descrizione chimica dettagliata della fiamma. La formulazione *laminar flamelet* formalmente più corretta è quella che si basa sulla cosiddetta *G-equation*, che consente l'individuazione diretta della posizione del fronte di fiamma medio tramite il trasporto di uno scalare non reattivo, evitando così i noti problemi della variabile di progresso nella chiusura del termine di trasporto turbolento. Uno schema basato sulla soluzione della *G-equation*, con un completo accoppiamento a flamelet laminari, è stato sviluppato in questo lavoro.

Per le tre famiglie di modelli considerate, riporteremo una serie di test di validazione e mostreremo, infine, i principali risultati dell'analisi CFD reattiva di un combustore LPC completo per TAG terrestre.

Capitolo 2

Analisi termo-fluidodinamica dei flussi reattivi

Contenuto

2.1	Equazioni di conservazione	21
2.2	Flussi turbolenti	23
2.2.1	Campi di moto turbolenti	23
2.2.2	Approcci alla soluzione dei flussi turbolenti	25
2.2.3	RANS	28
2.2.3.1	Chiusura delle RANS	31
2.3	Cinetica chimica	36
2.3.1	Modello cinetico di Arrhenius	36
2.3.2	Meccanismi di reazione	39
2.3.3	Cinetica chimica in regime turbolento	40

Prima di affrontare la descrizione dei modelli per la combustione turbolenta premiscelata, descrivendo nel dettaglio i modelli implementati in questo lavoro, crediamo sia necessario effettuare un breve richiamo delle equazioni che governano il moto dei fluidi, le equazioni di Navier-Stokes (d'ora in poi solo NS). Richiameremo brevemente anche i principali modelli necessari a descrivere i fenomeni di trasporto molecolare (massa, quantità di moto e calore) e la notazione utilizzata per la corretta rappresentazione delle proprietà termochimiche del fluido.

Come noto l'uso diretto delle equazioni di NS per la simulazione dei flussi turbolenti (Direct Numerical Simulation, DNS), in tempi compatibili con le esigenze dell'industria, richiede potenze di calcolo ad oggi non disponibili. E' pertanto necessario adottare una descrizione semplificata dei campi di moto turbolenti tramite la risoluzione delle equazioni di NS nella loro forma mediata nel tempo (RANS). Dopo un breve richiamo delle principali caratteristiche dei campi di moto turbolenti, analizzeremo nel dettaglio la struttura delle RANS e descriveremo i principali modelli di turbolenza utilizzati nei codici CFD per rendere "chiusi" le RANS.

Le equazioni di NS verranno qui presentate nella loro forma "completa" che prevede la soluzione del seguente sistema di equazioni:

- 1 equazione di conservazione della massa
- K equazioni di conservazione per ciascuna delle K specie chimiche considerate
- 3 equazioni di conservazione per le 3 componenti della quantità di moto
- 1 equazione di conservazione dell'energia
- 1 equazione di stato

Come vedremo meglio più avanti, la maggior parte dei modelli per la combustione turbolenta prevede la soluzione di un sistema costituito da un minor numero di equazioni, mediante la definizione di variabili ausiliarie che si sostituiscono, tipicamente, alle K equazioni di conservazione delle specie, sotto opportune ipotesi semplificative.

In appendice B riporteremo una descrizione del codice CFD STAR-CDTM accennando ai suoi algoritmi di soluzione e descrivendo le sue funzionalità di

“*user programming*” evidenziando gli aspetti necessari alla implementazione di modelli di combustione aggiuntivi. Introduciamo quindi le principali funzionalità delle librerie di pubblico dominio ChemkinTM II necessarie alla manipolazione dei database termochimici delle specie coinvolte nei modelli di combustione e per la codifica dei meccanismi di reazione.

2.1 Equazioni di conservazione

In questa sezione descriveremo le equazioni di conservazione per la massa, la quantità di moto (equazioni di NS propriamente dette) e l’energia, nella forma generalmente adottata nell’ambito della risoluzione dei flussi reattivi. Ci limiteremo in questa fase a riportare le equazioni laminari nella loro forma completa, introducendo il formalismo adottato nel presente lavoro. Rimandiamo quindi all’appendice A per una descrizione dettagliata dei modelli di trasporto molecolare (massa, quantità di moto ed energia) e delle proprietà termochimiche delle specie che vanno a integrarsi con le equazioni di conservazione. Per quanto riguarda il significato dei vari simboli, dove non espressamente dichiarato, rimandiamo all’apposita nomenclatura in appendice.

Le equazioni verranno riportate seguendo il classico formalismo tensoriale cartesiano, descrivendo le varie grandezze in un riferimento euleriano. Ricordiamo a questo proposito la consueta convenzione delle somme estese all’indice ripetuto. Salvo ove esplicitamente indicato, il formalismo introdotto in questa fase verrà seguito in tutta la restante parte del documento.

Conservazione della massa La conservazione globale della massa nel sistema è espressa da:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

essendo u_i la generica componente del vettore velocità e ρ la densità media della miscela. Detta Y_k la frazione in massa della generica specie nella miscela, possiamo esprimere la sua conservazione tramite:

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho Y_k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \rho \dot{\omega}_k \quad k = 1 \dots K \quad (2.2)$$

dove $\dot{\omega}_k$ descrive la reattività chimica della specie. Fra la densità media della miscela e la frazione in massa delle K specie costituenti sussiste

la relazione:

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho} \quad \sum_{k=1}^K Y_k = 1$$

essendo ρ_k la densità parziale della generica specie.

Quantità di moto Nell'ipotesi di fluido Newtoniano, la conservazione della quantità di moto nelle tre direzioni dello spazio è espressa da:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ji} \right] \quad j = 1, 2, 3 \quad (2.3)$$

dove si sono trascurate le forze di massa.

Energia Esprimendo la conservazione in termini di entalpia statica avremo:

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho h u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial (p u_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu}{\text{Pr}} \left(1 - \frac{1}{\text{Le}} \right) \sum_{k=1}^K h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right] + TV \quad (2.4)$$

dove i termini TV (“viscous heating”) e $\partial(pu_i)/\partial(u_i)$ nell'equazione dell'energia, possono essere trascurati nei problemi coinvolgenti la combustione se $Ma^2 \ll 1.0$. La frequente semplificazione $\text{Pr}=\text{Sc}=\text{Le}=1$ permette di ottenere un'equivalenza sostanziale tra l'equazione dell'energia e la conservazione delle specie: come vedremo questa approssimazione è lecita, in alcuni casi, esclusivamente in regime turbolento.

Generalmente si adotta la conservazione dell'entalpia nella sua definizione generalizzata, ossia come somma del contributo sensibile e dell'entalpia di formazione della miscela:

$$h(T) = \int_{T_{ref}}^T \bar{c}_p(T) dT + \sum_{k=1}^K \tilde{Y}_k \Delta h_k^0 \quad (2.5)$$

essendo \bar{c}_p il calore specifico medio della miscela dato da:

$$\bar{c}_p = \sum_{k=1}^K \tilde{Y}_k c_{p_k}$$

mentre Δh_k^0 è l'entalpia di formazione della generica specie.

Equazione di stato Il gas viene considerato un gas perfetto, con peso molecolare medio \bar{W} ; l'equazione di stato porge:

$$p = \frac{\rho RT}{\bar{W}} \quad (2.6)$$

2.2 Flussi turbolenti

Prima di descrivere le modalità con cui modificheremo le equazioni di NS per poter risolvere flussi turbolenti, riteniamo necessaria una breve introduzione al fenomeno della turbolenza in modo da introdurre i concetti e le grandezze fondamentali. Premettiamo che gran parte delle considerazioni a cui accenneremo in questa fase, verranno riprese successivamente quando analizzeremo i meccanismi di interazione fra combustione e turbolenza.

2.2.1 Campi di moto turbolenti

La caratteristica principale dei campi di moto turbolenti è l'irregolarità della loro evoluzione temporale. A questa sono poi associate un alto livello di diffusività delle grandezze estensive (massa, quantità di moto ed entalpia), ed una forte tridimensionalità apprezzabile su scale più piccole di quelle associate al moto nel suo insieme. In particolare, l'aspetto che più influisce sull'evoluzione di una miscela reagente è l'elevata diffusività che accentua il processo di miscelazione fra le diverse specie chimiche.

La definizione dei diversi fenomeni che caratterizzano la turbolenza passa, generalmente, attraverso l'analisi degli effetti sulla velocità del gas. Il principale parametro in questo senso è l'energia cinetica turbolenta. Essa è definita come l'energia cinetica della componente fluttuante di velocità. Data la dipendenza irregolare (*random*) della velocità dal tempo, il suo valore istantaneo viene calcolato come somma di un valore medio \bar{u} (in cui l'operazione di media deve essere eseguita su un intervallo di tempo teoricamente infinito proprio a causa della natura *random* della dipendenza) e di un valore fluttuante u' . In maniera analoga, l'energia cinetica può essere scomposta in un valore medio E_k e in valore fluttuante (turbolento) k . Come dicevamo, il fenomeno della turbolenza si svolge su scale spaziali diverse da quelle del moto complessivo e i valori di queste scale includono, tipicamente, diversi ordini di grandezza.

Per descrivere i vari regimi di turbolenza si introducono due scale spaziali estreme che consentono di giustificare l'intera evoluzione del fenomeno. La scala integrale di turbolenza L_T può essere interpretata come una misura della grandezza di un insieme di molecole che si muovono con un minimo identificabile grado di coerenza o, più comunemente, come la dimensione dei vortici più grandi del campo di moto. Nell'ambito delle camere di combustione essa può essere associata, ad esempio, ad una misura caratteristica dell'organo di iniezione. L'altra scala spaziale è la cosiddetta scala di Kolmogorov, L_k , che definisce la dimensione minima dei vortici per la quale i fenomeni di trasporto turbolento (di natura convettiva) e molecolare (associato alla diffusività molecolare delle specie componenti), si equivalgono. Alle scale spaziali L_T e L_k sono associate anche diverse scale di velocità. La scala integrale di velocità (detta anche velocità turbolenta) è così calcolata:

$$V_T = \sqrt{k_x + k_y + k_z} \quad (2.7)$$

essendo k_x , k_y e k_z le energie cinetiche turbolente delle tre componenti della velocità. Per come è stata definita la scala di Kolmogorov, la velocità ad essa correlata, V_k , viene ricavata imponendo che il numero di Reynolds locale (basato sulla componente fluttuante della velocità) sia unitario:

$$\text{Re}_k = \frac{V_k L_k}{\nu} = 1 \quad (2.8)$$

E' possibile dimostrare che in condizioni di turbolenza omogenea (nella quale le quantità fluttuanti non dipendono dalla posizione) e isotropa (nella quale si possono ritenere uguali le tre componenti spaziali delle fluttuazioni), sussiste il seguente legame fra la scala integrale e la scala di Kolmogorov:

$$\frac{L_T}{L_k} = \text{Re}_T^{3/4} \quad (2.9)$$

$$\text{Re}_T = \frac{V_T L_T}{\nu} = \frac{\sqrt{\left(\frac{2}{3}k\right) L_T}}{\nu} \quad (2.10)$$

dove abbiamo indicato con Re_T il numero di Reynolds turbolento.

I campi di moto turbolenti sono fortemente dissipativi nel senso che l'energia cinetica associata alla componente turbolenta viene progressivamente trasformata in energia interna. Le fluttuazioni di temperatura che ne derivano inducono ulteriori irregolarità nelle componenti medie del moto, sottraendo da esse l'energia necessaria al sostentamento del regime turbolento

(se così non fosse il moto turbolento tenderebbe spontaneamente a tornare laminare).

Il meccanismo di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta può essere descritto immaginando che le strutture vorticoso macroscopiche interagiscano fra loro per dare vortici di dimensione via via minore. Quando la dimensione dei microvortici è prossima alla scala di Kolmogorov, il loro moto deve essere, per quanto detto, considerato laminare e subisce quindi l'azione dissipativa dovuta alla viscosità.

La grandezza che esprime l'entità di energia cinetica (quantità di moto) trasferita nell'unità di tempo all'energia interna viene indicata tipicamente con ε ed è deducibile direttamente dalle equazioni di NS. L'analisi dimensionale del termine che definisce ε nelle suddette equazioni permette di scrivere, tenendo conto della definizione del numero di Reynolds:

$$\varepsilon = \nu \frac{V_k^2}{L_k^2} = \frac{V_k^3}{L_k} = \frac{\nu^3}{L_k^4} \quad (2.11)$$

Dall'eq. 2.9 è possibile osservare come all'aumentare del Re aumenti il *range* di scale spaziali su cui il meccanismo di trasferimento di energia descritto si realizza (*energy cascade*). Nei capitoli successivi osserveremo come sia possibile dedurre il comportamento reattivo di un flusso nell'ambito dell'*energy cascade*.

Data la natura *random* dei campi turbolenti, l'approccio matematicamente più corretto si basa su un'analisi statistica che permetta la determinazione dei valori ingegneristicamente più utili delle varie grandezze (valor medio e varianza). L'analisi statistica dei flussi turbolenti è possibile solo se è nota la distribuzione stocastica delle varie grandezze che richiede la conoscenza della funzione densità di probabilità, detta PDF¹. Rimandiamo all'appendice A per una descrizione dettagliata dell'approccio statistico alla soluzione dei flussi turbolenti, sulla quale si basano numerosi modelli di combustione.

2.2.2 Approcci alla soluzione dei flussi turbolenti

Le equazioni di NS (2.2, 2.3, 2.4), accoppiate ad un opportuno modello di cinetica chimica, permettono una completa descrizione del generico efflusso reattivo. Tuttavia, in regime turbolento, la natura *random* delle grandezze in

¹Probability Density Function

gioco, rende spesso necessario ricorrere ad approcci semplificati. In generale si distinguono tre diversi livelli di soluzione delle NS:

RANS L'approccio RANS prevede la soluzione delle NS istantanee opportunamente mediate nel tempo, in modo da descrivere la variazione delle sole grandezze medie (vedi fig. 2.1). Come vedremo in dettaglio in seguito, l'operazione di media introduce alcuni termini incogniti (tra i quali i termini che quantificano il rilascio termico dovuto alla reazione chimica e le velocità di conversione delle specie) che devono essere valutati con opportuni modelli, spesso di natura empirica, derivati in base all'osservazione del fenomeno fisico ("chiusure").

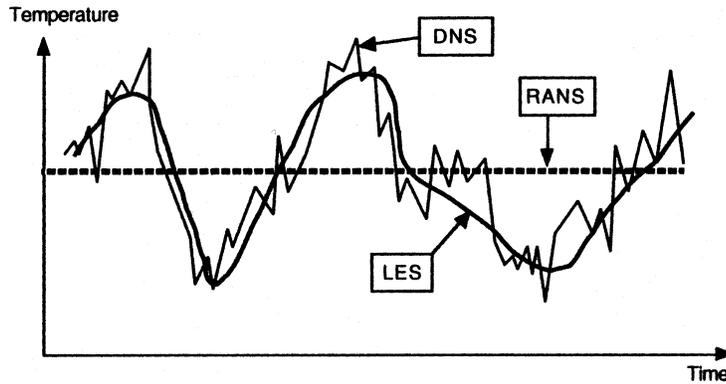


Figura 2.1: Evoluzione temporale della temperatura locale calcolata con simulazioni RANS, LES e DNS di una *jet flame* [59]

LES La *Large Eddy Simulation* prevede la simulazione diretta, senza il ricorso ad alcun modello, delle fluttuazioni turbolente associate alle scale spaziali (e temporali) più grandi (dell'ordine della scala integrale L_T). Il moto alle scale spaziali più piccole (Kolmogorov), viene risolto mediante modelli analoghi a quelli usati per le RANS: l'uso di tali modelli limitatamente alle scale spaziali più piccole è senza dubbio più efficiente date le loro intrinseche proprietà di isotropia e similarità. Le equazioni usate nell'approccio LES vengono ottenute mediante un'operazione di filtraggio delle equazioni NS istantanee. L'interazione tra le scale spaziali risolte e quelle non risolte si esplica tramite alcuni termini incogniti che vengono valutati tramite opportuni modelli: questi tensori agiscono sulle equazioni filtrate come vere proprie tensioni e vengono

comunemente chiamati *Sub-Grid Stress* (SGS). Come è possibile osservare in figura 2.1, l'approccio LES permette di cogliere le fluttuazioni temporali di frequenza più bassa associate alla variabile *random* [59].

DNS La *Direct Numerical Simulation*, prevede la soluzione diretta completa, istazionaria e tridimensionale, delle NS istantanee, per tutte le scale spaziali, senza l'ausilio di nessun modello aggiuntivo (vedi fig. 2.1). Il calcolo è in grado di cogliere tutte le fluttuazioni delle grandezze estensive e di quantificarne direttamente gli effetti sulla combustione. La DNS si è resa possibile negli ultimi venti anni grazie agli enormi progressi della tecnologia informatica. Essa è infatti limitata all'analisi di configurazioni di stretto interesse accademico: lo studio di una fiamma premiscelata turbolenta a pressione atmosferica richiede, per un volume di 5 mm^3 , 2 milioni di celle di calcolo. L'analisi RANS dei processi di combustione di interesse tecnico può essere svolta con celle di calcolo aventi dimensioni caratteristiche comprese tra 1 e 5 mm , mentre per la DNS sono necessarie celle comprese tra 10 e 50 μm . Inoltre, è da tenere presente la dipendenza del peso computazionale dal numero di Reynolds turbolento: si verifica facilmente che il numero di celle per una simulazione DNS sia proporzionale a $\text{Re}_T^{9/4}$ [59].

Come abbiamo già avuto modo di accennare, nelle simulazioni svolte in questo lavoro è stato preso in considerazione il solo approccio RANS. L'esigenza, infatti, di mettere a punto strumenti di simulazioni in grado di analizzare con buona accuratezza e con tempi di calcolo compatibili con le esigenze industriali, i campi di moto reattivi di combustori reali, ha di fatto precluso il ricorso alla DNS. Un discorso a parte merita, a nostro avviso la LES. Nonostante i tempi di calcolo per una simulazione di un combustore reale siano di almeno un ordine di grandezza superiori a quelli necessari per un calcolo RANS e che vi siano tipicamente numerose incertezze sulle condizioni al contorno (*inlet conditions*) [54], le capacità predittive di questo approccio, nell'ambito specifico delle fiamme turbolente, possono essere estremamente utili alla progettazione industriale. L'aspetto senza dubbio più interessante è la capacità di cogliere le più lente fluttuazioni istazionarie di natura turbolenta che sono generalmente associate ai fenomeni di oscillazioni termo-acustiche vero limite operativo dei moderni combustori LPC [75].

Inoltre, la soluzione diretta delle fluttuazioni turbolente integrali, permette di valutare l'effetto della turbolenza sulla combustione (almeno in

alcuni regimi [56]) evitando le incertezze intrinseche dell'approccio RANS, che richiede una modellazione specifica delle variabili stocastiche in gioco (tipicamente tramite l'assunzione della PDF [59]). Tuttavia, nonostante le ottime prospettive che lascia intravedere, l'uso sistematico a livello industriale dell'approccio LES è ancora alle primissime fasi e, in generale, anche pensando ad enormi progressi della tecnologia informatica, difficilmente diverrà completamente sostitutivo delle simulazioni RANS per via dell'enorme mole di dati che ciascuna simulazione LES genera e della estrema complessità dell'interpretazione dei risultati.

2.2.3 RANS

La descrizione della generica variabile *random* in un campo di moto turbolento, può essere svolta separando la sua componente media nel tempo (ottenuta mediando su intervallo di tempo idealmente infinito) e la sua componente fluttuante. Considerando la velocità, ad esempio, il suo valore istantaneo sarà dato da:

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

dove la componente media è ottenuta tramite la seguente operazione (nell'ipotesi di flusso medio stazionario):

$$\bar{u}(\vec{x}) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} u(\vec{x}, t) dt$$

Si parla di operazione di media alla *Reynolds* [64].

Nell'ambito dei flussi comprimibili, per i quali cioè l'evoluzione sia accompagnata da sensibili variazioni della densità, risulta conveniente adottare la seguente operazione di media (*mass averaged*), detta media alla Favre:

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

avendo indicato con s la generica grandezza scalare. In maniera analoga al caso incomprimibile è possibile valutare il valore istantaneo dello scalare tramite:

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

Applicando la media alla Favre alle equazioni di NS (vedi eq. 2.2 e seguenti) si ottengono equazioni apparentemente molto simili alle equazioni di partenza

ma che contengono alcuni termini (detti “*correlazioni*”) che quantificano l’effetto delle componenti fluttuanti (e quindi della turbolenza) sul moto medio.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Sc_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k'' u_i''}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{\omega}_k \quad k = 1 \dots K \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\tau}_{ji} - \bar{\rho} \tilde{u}_j'' u_i'' \right] \quad j = 1, 2, 3 \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_i}{\partial x_i} &= \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \right) - \\ &\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu}{Pr} \left(1 - \frac{1}{Le} \right) \sum_{k=1}^K \tilde{h}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{h}'' u_i'') + \bar{T} \bar{V} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Prima di affrontare il problema della “chiusura” delle RANS, operazione necessaria a causa dei nuovi termini incogniti che in esse compaiono, crediamo sia necessario soffermarci sul significato di *Reynolds (Favre) average* e delle sue implicazioni nell’ambito dei flussi reattivi. Consideriamo la fiam-

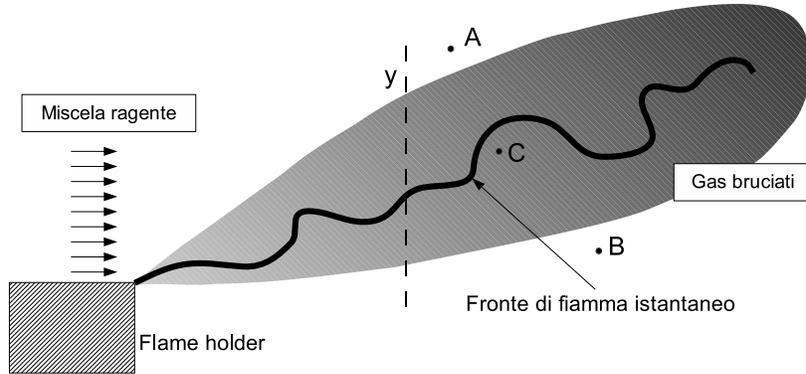


Figura 2.2: Rappresentazione schematica della relazione fra fronte di fiamma istantaneo e *flame brush*

ma premiscelata turbolenta illustrata in figura 2.2: si tratta della classica fiamma premiscelata stabilizzata mediante il ricircolo di gas caldi sulla miscela reagente per opera della zona di ricircolazione indotta dal gradino. In

figura è riportata una generica rappresentazione del fronte di fiamma istantaneo. La fiamma è intrinsecamente instazionaria a causa della turbolenza ma, utilizzando un approccio RANS, si cerca di individuarne le caratteristiche medie. La zona tratteggiata rappresentata in figura 2.2 costituisce il luogo dei punti occupati dal fronte di fiamma istantaneo e viene comunemente definito *flame brush* (letteralmente “pennellata”): la sua ampiezza è determinata dall’involuppo delle posizioni assunte dal fronte di fiamma istantaneo [59].

La generica simulazione RANS della fiamma descritta, predirà un profilo di temperatura media \tilde{T} variabile all’interno del *brush*. Facendo riferimento ad una fiamma magra metano-aria, ciò implica uno spessore medio della fiamma turbolenta, descritto dall’ampiezza del *brush*, dell’ordine di pochi centimetri, contro uno spessore della fiamma laminare inferiore e 0.1 mm . Dal momento che la fiamma istantanea può tipicamente essere descritta come un insieme di fiamme laminari soggette al campo di turbolenza esterno (regime flamelet), una simulazione instazionaria completa (LES) richiederebbe una griglia con risoluzione molto maggiore di quella necessaria alla stima della fiamma media (RANS). La distribuzione del profilo di temperatura media su una regione più ampia, determina un diverso andamento del termine di reazione tra fiamma laminare e fiamma turbolenta: in figura 2.3 è possibile osservare un confronto qualitativo tra i profili di temperatura e del tasso di reazione nella sezione trasversa della fiamma indicata in figura 2.2 [59]. Il

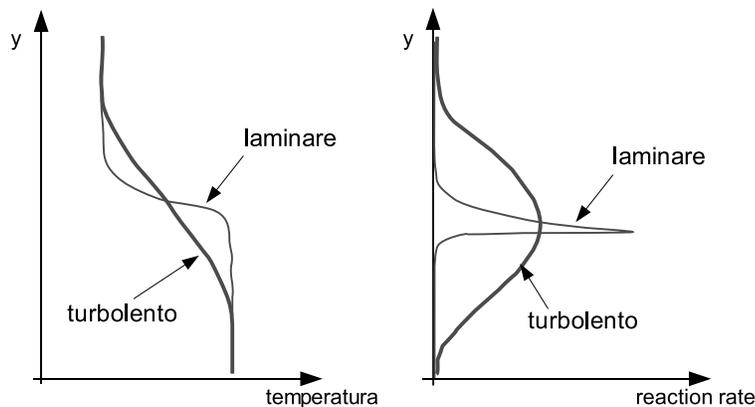


Figura 2.3: Andamento qualitativo dei profili di temperatura e velocità di reazione laminari e turbolenti

campo di turbolenza determina, come detto, una instazionarietà intermittente del fronte di fiamma istantaneo: se i punti “A” e “B” rappresentati in figura 2.2 descrivono zone appartenenti, rispettivamente, alla miscela fresca e ai prodotti di combustione, il segnale di temperatura idealmente rilevato nel punto “C”, descriverebbe una intermittenza tra il valore di T dei gas caldi e della miscela fresca (assumendo che lo spessore del fronte di fiamma istantaneo sia sufficientemente piccolo rispetto alle fluttuazioni turbolente). Questo comportamento ha alcune importanti conseguenze [59]:

- Il valore medio di temperatura, \widetilde{T} , stimato dal calcolo RANS non è rappresentativo della temperatura istantanea, ma quantifica la probabilità che il generico punto si trovi nella miscela fresca o nei gas caldi (nel caso di fiamme non premiscelate \widetilde{T} descrive la probabilità che il punto si trovi nella corrente di combustibile o in quella di aria).
- Questo comportamento intermittente determina un’intermittenza di tutte le proprietà della miscela reagente, sia quelle molecolari, sia quelle turbolente. Spesso le proprietà possono differire in maniera sostanziale tra le due situazioni opposte e l’operazione di media non è in grado di descrivere correttamente questo effetto.
- Nell’interpretare un calcolo RANS, zone a bassa temperatura non implicano necessariamente assenza di elevati carichi termici, almeno per brevi periodi di tempo, ma solo che si hanno basse probabilità di avere valori alti di T . Questo aspetto deve essere tenuto presente quando si usano le RANS come strumento per dimensionare i sistemi di raffreddamento.

2.2.3.1 Chiusura delle RANS

Al termine dell’operazione di media, le equazioni di NS contengono i seguenti termini di correlazione, incogniti (vedi eq. 2.12 e seguenti):

$$\widetilde{\rho Y_k'' u_i''} \quad \widetilde{\rho u_j'' u_i''} \quad \widetilde{\rho h'' u_i''} \quad (2.15)$$

che, come accennato, quantificano l’effetto della turbolenza sul moto medio. In particolare i 9 termini che compaiono nell’equazione di conservazione della quantità di moto, vengono detti *sforzi di Reynolds*, in quanto agiscono sulle componenti medie della velocità in maniera analoga agli sforzi viscosi. Essi

non sono tuttavia esplicitamente noti in funzione delle variabili dipendenti e pertanto il sistema costituito dalle 2.12 e seguenti, e dall'equazione di stato, non è più chiuso presentando un numero non corrispondente di incognite. Si tratta del noto problema della chiusura delle RANS che richiede l'introduzione di modelli aggiuntivi, i cosiddetti modelli di turbolenza.

La logica modalità di chiusura delle RANS prevede la risoluzione di ciascun termine incognito, tramite un'opportuna equazione di trasporto; modelli di questo tipo vengono detti *Reynolds Stress Models* (RSM) o modelli del secondo ordine. I modelli RSM rappresentano quanto di più accurato è possibile ottenere dalla risoluzione delle RANS, ma tuttavia essi non hanno ancora raggiunto un grado di maturità ed affidabilità tali da consentirne un impiego su vasta scala per la risoluzione di flussi complessi quali ad esempio i flussi reattivi, soprattutto per via della elevata "rigidezza" numerica (*stiffness*) che contraddistingue le equazioni di conservazione per i vari componenti del tensore [29].

In questo lavoro prenderemo in considerazione i soli modelli del primo ordine (in particolare i modelli a due equazioni) universalmente usati nei codici CFD. Una descrizione dettagliata delle basi teoriche dei modelli a due equazioni e la derivazione della loro struttura di base, verrà fornita in appendice A.

In questa sede ci limiteremo a descrivere le basi della chiusura delle equazioni RANS mediante l'ipotesi di *eddy viscosity/diffusivity* (Boussinesq). Per una più dettagliata derivazione rimandiamo all'appendice A.

Continuità delle specie. Il termine incognito $\bar{\rho} \widetilde{Y_k''} u_i''$ descrive l'effetto della turbolenza sul trasporto della specie Y_k . In analogia al trasporto molecolare, il flusso turbolento viene supposto proporzionale al gradiente della concentrazione media (*gradiente di diffusione*):

$$\bar{\rho} \widetilde{Y_k''} u_i'' = -\bar{\rho} D_k^T \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i}$$

essendo D_k^T la diffusività turbolenta della specie k , spesso assunta uguale per tutte le specie. Con queste ipotesi l'equazione di conservazione mediata diviene:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y}_k \widetilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} (\bar{D}_k^m + D^T) \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \bar{\rho} \widetilde{\omega}_k \quad k = 1 \dots K$$

(2.16)

Il termine $\widetilde{R}_k = \widetilde{\rho\omega}_k$ costituisce il valore medio del *reaction rate* della specie k : lo sviluppo di modelli di combustione turbolenta è interamente incentrato sulla sua definizione. Come vedremo meglio in seguito, l'ipotesi di gradiente di diffusione (ossia di *eddy diffusivity*) cade in difetto nel caso fiamme premiscelate a basso livello di turbolenza (si parla di *counter gradient diffusion*, [59])

Quantità di moto. L'ipotesi di Boussinesq, alla base delle chiusure al primo ordine, assume per il tensore degli sforzi di Reynolds una forma del tutto coincidente al tensore degli sforzi viscosi, espresso in funzione delle velocità medie. Il legame tra sforzi e deformazioni è quantificato tramite una viscosità turbolenta μ_T (*eddy viscosity*), ricavata a partire dal valore di alcuni parametri caratteristici della turbolenza, tipicamente l'energia cinetica turbolenta, k e la sua velocità di dissipazione ε . Nei modelli $k - \varepsilon$ si assume:

$$\mu_T = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

essendo C_μ un costante. La conservazione della quantità di moto per la generica componente j ($j = 1, 2, 3$) viene quindi espressa da:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u}_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u}_j \widetilde{u}_i)}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[2(\mu + \mu_T) \widetilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \left((\mu + \mu_T) \frac{\partial u_l}{\partial x_l} + \bar{\rho} \widetilde{k} \right) \delta_{ij} \right] \quad (2.17)$$

Nell'equazione abbiamo introdotto la deformazione media S_{ij} , definita da:

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

Energia. In maniera analoga a quanto fatto per il trasporto turbolento di massa, il trasporto di calore viene stimato assumendo una proporzionalità con il gradiente della grandezza media:

$$\bar{\rho} \widetilde{h'' u_i''} = - \frac{\lambda^T}{c_p} \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_i}$$

essendo λ^T una conducibilità turbolenta del flusso. Nell'ipotesi alti numeri di Reynolds si assume generalmente $Le = 1$. Risulta poi

conveniente introdurre un numero di Lewis turbolento:

$$\text{Sc}_T = \frac{\mu_T}{\bar{\rho} D^T} \quad \text{Pr}_T = \frac{\mu_T c_p}{\lambda^T} \quad \text{Le}_T = \frac{\text{Sc}_T}{\text{Pr}_T}$$

Assumendo unitario il Le_T , la conservazione dell'entalpia statica (sensibile + formazione), diviene:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{p} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\frac{\mu}{\text{Pr}} + \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \right) + \tilde{T}\tilde{V} \quad (2.18)$$

dove il termine $\tilde{T}\tilde{V}$ esprime il valore mediato del *viscous heating*.

Il sistema di equazioni è chiuso una volta nota la distribuzione della viscosità turbolenta μ_T . Nel modello $k - \varepsilon$, ad esempio, essa viene determinata dal campo di turbolenza, espresso dall'energia cinetica k e dalla dissipazione ε , per le quali è prevista la soluzione di due specifiche equazioni di trasporto, matematicamente equivalenti alla classica equazione di conservazione per una grandezza scalare. La derivazione ed un'analisi dettagliata di queste equazioni è riportata in appendice A.

Il modello $k - \varepsilon$ è senza dubbio il modello di turbolenza che ha riscontrato il maggior successo applicativo. Ciò è dovuto alla sua estrema semplicità di implementazione (le equazioni di trasporto per k ed ε sono matematicamente analoghe alle NS) e alla relativa facilità di utilizzo (i modelli $k - \varepsilon$ sono impiegati con discreto successo in una vasta gamma di applicazioni, dallo scambio termico alla combustione [64], [29]). I principali difetti ed inconvenienti dei modelli $k - \varepsilon$ risiedono principalmente nell'ipotesi di *eddy viscosity* e nella natura empirica dell'equazione di ε [64]. Non ci soffermeremo, in questa sede, sulle problematiche connesse al trattamento specifico della regione prossima alle pareti (di scarso interesse nelle tipologie di flusso incontrate durante questo lavoro), necessario con i modelli $k - \varepsilon$; i valori delle costanti del modello e la forma stessa dell'equazione di cambiano profondamente in prossimità della regione viscosa a parete, rendendo necessaria una modifica allo schema di chiusura (“*Wall Functions*”, approcci “*Two Layer*” e approcci “*Low-Re*”). Ci preme invece sottolineare quali sono i limiti di accuratezza dei modelli EVM che possono in qualche modo influenzare i processi di combustione.

L'ipotesi di Boussinesq (*eddy viscosity*, vedi eq. A.31) prevede un perfetto allineamento fra il tensore di Reynolds e la velocità di deformazione media del

flusso² [36]. In altre parole essa assume una totale isotropia degli sforzi ([29]). Questa ipotesi può essere ritenuta valida solo nel caso di flussi "semplici", ossia flussi bidimensionali in cui vi sia il solo sforzo di taglio (*shear flows*). E' evidente, quindi, una certa inadeguatezza del modello in presenza di flussi fortemente tridimensionali (*swirling flows*), in corrispondenza di punti di ristagno (*impingement*), e in generale in presenza di accentuate curvature che introducono forti deformazioni nel flusso.

L'inadeguatezza dell'ipotesi di viscosità turbolenta, si traduce in una tendenza alla sovrastima della produzione di energia cinetica turbolenta, dal momento che la stessa equazione di trasporto per k è chiusa con l'ipotesi di gradiente diffusione. Questo inconveniente si traduce, ad esempio, nella sovrastima dei tassi di diffusione delle grandezze scalari (il cosiddetto *spreading*) nei getti assialsimmetrici. E' un aspetto, questo, che può influenzare pesantemente la simulazione del processo di combustione, specialmente se il modello utilizzato sfrutta le grandezze ε e k per stimare un tempo turbolento caratteristico (tipicamente ε/k).

Il modello $k - \varepsilon$, ma in generale tutti i modelli EVM, presentano, inoltre, notevoli limitazioni nella predizione di flussi separati quali, ad esempio, le zone di ricircolazione a valle di corpi non aerodinamici. La sovrastima dell'energia cinetica turbolenta porta tipicamente ad una sottostima dell'estensione della zona di ricircolazione, con una sottostima della portata in essa entrante [64]. La simulazione di dispositivi di combustione che utilizzino corpi non aerodinamici (*bluff body*) per la stabilizzazione della fiamma, può portare pertanto alla erronea predizione di una estinzione del processo a causa della insufficiente portata di gas caldi ricircolati sulla miscela fresca [22]. Per le stesse ragioni il modello $k - \varepsilon$ risulta scarsamente sensibile agli effetti delle fluttuazioni intermittenti a frequenze più basse (*large scales motion*) con una conseguente sottostima degli effetti diffusione e miscelamento che queste producono (*flame brush*) [59].

La principale causa di difetto del modello $k - \varepsilon$, risiede quindi nella tendenza a sovrastimare la produzione di energia cinetica turbolenta. In alcuni casi è pertanto possibile correggere il modello, agendo sull'equazione di conservazione di ε che, come più volte detto, quantifica la trasformazione di k in energia interna. Sulla base delle modifiche apportate all'equazione di con-

²Si parla di velocità di deformazione del flusso (dal termine inglese "*strain rate*") intendendo la parte simmetrica del tensore $\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$

servazione di ε (valore dei coefficienti empirici o aggiunta di nuovi termini), è possibile individuare una serie di nuovi modelli EVM. Non entreremo, in questa fase, nel dettaglio dei vari modelli e delle possibili modifiche all'equazione di ε , salvo riprendere questi concetti durante l'analisi di quei test di validazione che eventualmente abbiano richiesto interventi in questo senso. In ogni caso, i campi di applicabilità dei modelli $k - \varepsilon$ "tuned" sembrano, in generale, essere più ristretti di quelli del modello standard [64].

2.3 Cinetica chimica

2.3.1 Modello cinetico di Arrhenius

Nei precedenti paragrafi abbiamo introdotto i principali modelli matematici necessari alla simulazione dei flussi reattivi turbolenti, tralasciando la descrizione del termine che quantifica il tasso di produzione delle varie specie, in base al particolare meccanismo di reazioni a cui sono soggette. Con riferimento alle equazioni di NS in forma laminare (non mediata), il termine $\rho \dot{\omega}_k$ esprime la produzione/distruzione della specie chimica k nell'unità di volume e nell'unità di tempo:

$$\dot{R}_k = \rho \cdot \dot{\omega}_k \quad \left[\frac{kg_k}{m^3s} \right] \quad (2.19)$$

La valutazione di \dot{R}_k richiede, necessariamente, l'introduzione di un modello di cinetica chimica: nell'ambito della chimica inorganica classica è universalmente accettato il modello cinetico di Arrhenius. I modelli di combustione turbolenta qui descritti, si servono delle librerie ChemkinTM II per la gestione delle proprietà termodinamiche e cinetiche del sistema e, pertanto, la descrizione del modello di Arrhenius verrà svolta facendo riferimento al formalismo utilizzato nelle suddette librerie, ormai divenuto uno standard.

Consideriamo la generica reazione chimica:



La velocità della reazione è esprimibile tramite la variazione nell'unità di tempo della concentrazione di una qualsiasi specie in gioco pesata con il proprio coefficiente stechiometrico:

$$q = -\frac{1}{\nu'_1} \frac{dc_1}{dt} = -\frac{1}{\nu'_2} \frac{dc_2}{dt} = \dots = \frac{1}{\nu''_1} \frac{dc_1}{dt} = \dots = \frac{1}{\nu''_k} \frac{dc_k}{dt}$$

dove con c_k abbiamo indicato la concentrazione molare della generica specie. La velocità complessiva della reazione è, come detto, determinata dalla risultante delle velocità delle reazioni diretta e inversa e cioè³:

$$q = q_f - q_r$$

All'equilibrio, le concentrazioni delle specie sono costanti e deve, quindi, essere nulla la velocità della reazione risultando $q_f = q_r$. La velocità della reazione viene tipicamente espressa attraverso un'espressione monomia (legge di potenza) del tipo:

$$q_f = k_f \prod_{k=1}^K c_k^{\lambda_k}$$

$$q_r = k_r \prod_{k=1}^K c_k^{\lambda_k}$$

Le costanti k_f e k_r sono dette *costanti cinetiche* della reazione (o *velocità specifiche*) e dipendono, in generale, dalla temperatura, mentre gli esponenti k rappresentano l'ordine della reazione rispetto ai diversi componenti, mentre la loro somma:

$$\lambda = \sum_{k=1}^K \lambda_k$$

l'ordine totale della reazione. I valori degli ordini di reazione esprimono la sensibilità del sistema alla variazione di concentrazione di ciascun reagente ([10]) e sono generalmente ricavati per via empirica sulla base dei dati sperimentali. Essi variano tipicamente fra -2 e +2 e, in generale, non coincidono con i coefficienti stechiometrici delle rispettive specie nell'equazione chimica e non possono, quindi, essere da essa dedotti. La coincidenza dell'ordine della reazione con i suoi coefficienti stechiometrici, è vera solo in presenza di "reazioni elementari": si parla di reazioni elementari quando la reazione globale che porta i reagenti a trasformarsi in prodotti, è scomposta in un certo numero di processi intermedi che, insieme, costituiscono il meccanismo chimico complessivo [33].

La velocità di una reazione dipende dalla temperatura e dalle concentrazioni delle specie chimiche in gioco, esattamente come la costante di equilibrio dedotta da considerazioni termodinamiche; esiste, infatti, uno stretto legame fra la velocità della reazione e la costante di equilibrio. La dipendenza dalla

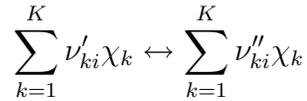
³i pedici f e r derivano dai termini anglosassoni *forward* e *rearward*

temperatura della costante cinetica della reazione è generalmente espressa tramite l'equazione di Arrhenius:

$$k = AT^\beta \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (2.20)$$

dove A è detto fattore di frequenza mentre E_a è l'Energia di attivazione (espressa in kJ/kg). I parametri A , e E_a sono costanti caratteristiche di ogni reazione [77]. L'espressione 2.20 è stata ricavata empiricamente sulla base della teoria delle collisioni a sua volta dedotta dai risultati sperimentali.

Consideriamo un meccanismo chimico composto da I reazioni elementari:



Abbiamo già osservato che la velocità della generica reazione, q_i , è determinata dalla differenza fra la velocità diretta, q_{fi} , e la velocità inversa, q_{ri} . Trattandosi di reazioni elementari possiamo esprimere le velocità tramite le espressioni:

$$q_{fi} = k_{fi} \prod_{k=1}^K c_k^{\nu'_{ki}} \quad (2.21)$$

$$q_{ri} = k_{ri} \prod_{k=1}^K c_k^{\nu''_{ki}} \quad (2.22)$$

Essendo gli ordini λ_{ki} coincidenti con i coefficienti stechiometrici ν_{ki} . Considerando tutte le I reazioni del meccanismo, si può ricavare il tasso di produzione della generica specie k andando a sommare i contributi di tutti i processi elementari:

$$\frac{dc_k}{dt} = \dot{R}_k = \sum_{i=1}^I \nu_{ki} (q_{fi} - q_{ri}) \quad (2.23)$$

Il termine \dot{R}_k è il termine sorgente della specie k ed in esso sono contenute tutte le informazioni relative alla reattività chimica della specie nel meccanismo considerato.

2.3.2 Meccanismi di reazione

Abbiamo definito “meccanismo chimico” l’insieme strutturato di reazioni elementari in grado di giustificare la presenza, la durata e le concentrazioni di tutte le specie chimiche rilevate sperimentalmente. I meccanismi chimici ricavati secondo quest’approccio vengono chiamati meccanismi *dettagliati* o *completi*. Per ogni reazione chimica introdotta, vengono ricavate sperimentalmente le tre grandezze caratteristiche A , β e E_a dell’espressione di Arrhenius per la costante cinetica. L’espressione precisa dell’equazione chimica e la conoscenza delle grandezze cinetiche, permette di risolvere analiticamente l’intera sequenza chimica, ossia di determinare i tassi di produzione $\dot{\omega}_k$ di tutte le K specie che prendono parte al meccanismo chimico.

In letteratura sono pubblicati numerosi meccanismi chimici dettagliati per la combustione dei principali idrocarburi: nell’ambito di questo lavoro abbiamo frequentemente utilizzato i meccanismi di reazione del *Gas Research Institute* - GRI, validi per la combustione di Idrogeno e idrocarburi di classe C_1 e C_2 , con la possibilità di caratterizzare la chimica di formazione degli ossidi d’azoto. Come descriveremo meglio nei prossimi capitoli, i meccanismi sono generalmente codificati seguendo lo standard ChemkinTM ([33]), che permette di gestire il complesso dei parametri termochimici di tutte le specie coinvolte.

I meccanismi presentati offrono un gran livello di dettaglio ma risultano piuttosto pesanti da un punto di vista numerico, soprattutto per il gran numero di specie chimiche contemplate (tipicamente si hanno decine di specie chimiche con centinaia di reazioni elementari). Nell’ambito della risoluzione di flussi reattivi con codici CFD, si preferisce generalmente utilizzare meccanismi semplificati, in modo da contenere il numero di specie chimiche da gestire. Possiamo individuare due tipologie di meccanismi chimici semplificati:

- **Meccanismi ridotti**
- **Meccanismi globali**

I meccanismi **ridotti** sono ottenuti a partire dai meccanismi dettagliati, dai quali vengono prima rimosse le specie considerate meno importanti (in base alle necessità dell’indagine), quindi viene effettuato uno studio di sensibilità per valutare l’influenza delle singole reazioni elementari in determinati

intervalli di temperatura e pressione. Si eliminano quindi le reazioni e le specie intermedie ritenute meno influenti approssimando la loro concentrazione con il valore ottenuto dopo aver imposto una condizione di equilibrio parziale nello stato stazionario ricercato [46]. Nell’ambito delle simulazioni svolte in questo lavoro, sono stati utilizzati alcuni meccanismi semplificati, ottenuti dalla riduzione dei meccanismi dettagliati del GRI.

I meccanismi **globali** sono invece determinati generalmente per via empirica, sulla base di procedimenti di “*tuning*” su meccanismi dettagliati o su dati sperimentali. I meccanismi globali non sono generalmente costituiti da reazioni elementari; accanto all’equazione chimica deve quindi essere specificata l’espressione della velocità di reazione, in quanto questa non può essere dedotta dalle eq. 2.21 e 2.22.

In letteratura sono pubblicati numerosi meccanismi globali che, a fronte di una notevole semplificazione nella gestione numerica del codice, presentano una scarsa versatilità essendo validi in un ristretto *range* di condizioni. In figura 2.4 riportiamo un resoconto di alcuni fra i più usati meccanismi globali per la combustione del metano [53].

Units are kmoles, cubic meters, seconds, and Kelvin	
Dryer and Glassman (1973)	
$\text{CH}_4 + \frac{3}{2}\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$	$R = 10^{11.70} \exp\left(\frac{-24358}{T}\right) [\text{CH}_4]^{0.7} [\text{O}_2]^{0.8}$
$\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO}_2$	$R = 10^{12.35} \exp\left(\frac{-20131}{T}\right) [\text{CO}]^0 [\text{H}_2\text{O}]^{0.5} [\text{O}_2]^{0.25}$
$\text{CO}_2 \Rightarrow \text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2$	$R = 10^{12.50} \exp\left(\frac{-21641}{T}\right) [\text{CO}]^0 [\text{H}_2\text{O}]^{0.5} [\text{O}_2]^{0.25}$
DuPont, Pourkashanian and Williams (1993)	
$\text{CH}_4 + \frac{3}{2}\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$	$R = 10^{10.0} \exp\left(\frac{-12019}{T}\right) [\text{CH}_4]^0 [\text{O}_2]^0$
$\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO}_2$	$R = 10^{10.0} \exp\left(\frac{-12019}{T}\right) [\text{CO}]^0 [\text{O}_2]^0$
Jones and Lindstedt (1988)	
$\text{CH}_4 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2$	$R = 10^{8.48} \exp\left(\frac{-15098}{T}\right) [\text{CH}_4]^{0.5} [\text{O}_2]^{0.25}$
$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	$R = 10^{9.44} \exp\left(\frac{-10065}{T}\right) [\text{CO}]^0 [\text{H}_2\text{O}]^0$
$\text{H}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \Leftrightarrow \text{H}_2\text{O}$	Reverse rate calculated from equilibrium $R = 10^{15.83} T^{-1.0} \exp\left(\frac{-30131}{T}\right) [\text{H}_2]^{0.25} [\text{O}_2]^{0.5}$ Reverse rate calculated from equilibrium
Westbrook and Dryer (1984)	
$\text{CH}_4 + \frac{3}{2}\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$	$R = 10^{9.45} \exp\left(\frac{-24358}{T}\right) [\text{CH}_4]^{-0.3} [\text{O}_2]^{0.3}$
$\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO}_2$	$R = 10^{12.35} \exp\left(\frac{-20131}{T}\right) [\text{CO}]^0 [\text{H}_2\text{O}]^{0.5} [\text{O}_2]^{0.25}$
$\text{CO}_2 \Rightarrow \text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2$	$R = 10^{8.70} \exp\left(\frac{-20131}{T}\right) [\text{CO}_2]^0$

Figura 2.4: Esempio di meccanismi chimici globali

2.3.3 Cinetica chimica in regime turbolento

La risoluzione delle equazioni di NS per flussi reattivi in regime turbolento richiede, come visto, la conoscenza del valore medio di \dot{R}_k . Data la forte non

linearità dell'espressione di \dot{R}_k risulta:

$$\dot{R}_k(\bar{T}, \tilde{\rho}, \bar{Y}_k) \neq \overline{\dot{R}_k}$$

In altre parole la valutazione del valor medio di \dot{R}_k a partire dai corrispondenti valori medi di temperatura, pressione e concentrazioni (trascurando quindi il contributo delle componenti fluttuanti delle grandezze) comporta una errata valutazione del tasso di produzione della specie k , con forti sottostime specialmente in presenza di alti livelli di turbolenza.

Una prima soluzione al problema consiste nell'approssimare l'espressione di \dot{R}_k tramite un'espansione in serie di Taylor, introducendo la scomposizione dei valori istantanei delle grandezze scalari in componente media e fluttuante. Si tratta di un approccio *diretto* alla chiusura di \dot{R}_k (detto “*moment closure*” che, tuttavia, trova scarse possibilità di applicazione. L'operazione di espansione in serie di Taylor, infatti, introduce una serie di nuove correlazioni fra i termini fluttuanti (come ad esempio $\overline{Y_k'' T''}$) che non possono essere trascurate a priori, e che richiedono una modellazione specifica di tipo algebrico difficilmente generalizzabile [75].

Normalmente, quindi, si preferisce chiudere l'espressione di $\overline{\dot{R}_k}$ tramite modelli aggiuntivi che tengano conto, in maniera più o meno empirica, della fisica del problema: si parla di “modelli di combustione turbolenta” [6].

Capitolo 3

Combustione premiscelata turbolenta

Contenuto

3.1	Influenza della turbolenza sulla combustione . . .	44
3.1.1	Meccanismi di stabilizzazione	46
3.2	Fiamme premiscelate laminari	48
3.2.1	<i>Flame stretch</i>	52
3.2.1.1	Effetto dello <i>stretching</i> sulla velocità di fiamma	54
3.3	Classificazione delle fiamme premiscelate turbo- lente	57
3.3.1	Scale e grandezze caratteristiche	58
3.3.2	Diagramma spettrale	60
3.4	Modelli di combustione turbolenta per l'approc- cio RANS	65
3.4.1	Modelli <i>local source</i>	68
3.4.2	Approccio Flamelet	69
3.4.2.1	Il modello <i>Bray-Moss-Libby</i> (BML) . . .	69
3.4.2.2	Trasporto turbolento	73
3.4.2.3	<i>Level Set Method</i>	77
3.4.3	<i>Turbulent flame stretch</i>	78

In questo capitolo descriveremo le principali basi teoriche della combustione turbolenta premiscelata operando diverse classificazioni dei vari regimi con cui il fenomeno si realizza. Individueremo quindi la posizione dei combustori LPC per TAG nei vari regimi introdotti, in modo da poter valutare l'idoneità dei modelli di combustione che analizzeremo. Come apparirà chiaro dalla descrizione dei principali modelli per la chiusura dell'NS in presenza di fiamme premiscelate turbolente, è necessaria una preventiva valutazione dettagliata della struttura delle fiamme laminari.

3.1 Influenza della turbolenza sulla combustione

Il principale effetto di un campo di moto turbolento sul processo di combustione (sia esso connesso ad una fiamma premiscelata o non premiscelata) è l'aumento del tasso di reazione e del processo di *mixing* fra i componenti, siano essi i reagenti, aria e combustibile, di una fiamma diffusiva o sacche di gas caldi e miscela fresca in una fiamma premiscelata [59], [56].

Consideriamo, per semplificare la trattazione, una fiamma diffusiva; aria e combustibile dovranno risultare miscelati su scala molecolare perché la reazione chimica possa aver luogo. L'azione dei vortici determinati dal campo di turbolenza esterno controlla il processo di *mixing*: da un lato infatti, i vortici di dimensione paragonabile alla scala dissipativa (L_k , vedi equazione 2.9) agiscono direttamente sul trasporto molecolare, dall'altro le strutture vorticosi più grandi determinano forti azioni di taglio e forti deformazioni delle strutture di moto che localmente accentuano i gradienti di concentrazione, aumentando quindi la velocità del processo di interdiffusione molecolare (come visto proporzionale ai gradienti di concentrazione, A.4) Come vedremo meglio in seguito, i due diversi meccanismi di azione della turbolenza sul *mixing* determinano distinti regimi di combustione e caratterizzano differenti famiglie di modelli.

Nell'ambito delle fiamme premiscelate, il metodo più chiaro per quantificare l'effetto della turbolenza sul processo di combustione consiste nel confrontare le velocità di propagazione della fiamma in un campo di moto laminare (la *laminar burning velocity*, S_L) e in un campo di moto a turbolenza costante (*turbulent burning velocity*, S_T). In figura 3.1 è riportato uno

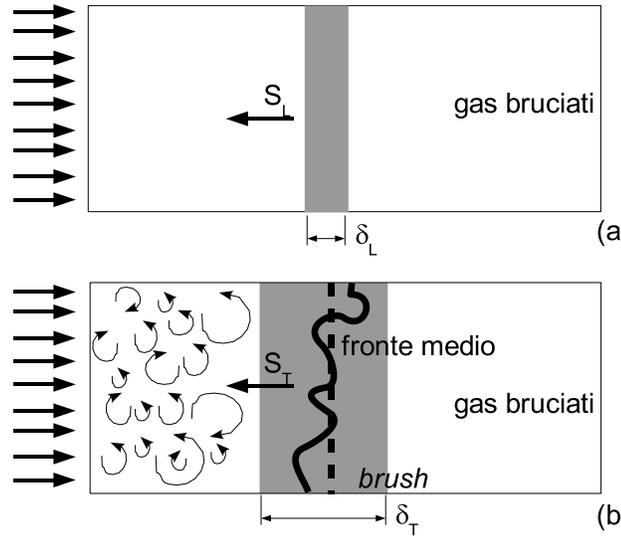


Figura 3.1: Definizione di velocità di fiamma turbolenta.

schema di fiamma monodimensionale laminare (a) e turbolenta (b): la velocità S_T è la velocità con cui il fronte di fiamma medio si muove in direzione opposta ai gas reagenti ed è direttamente confrontabile con il valore laminare S_L . Benché la misura sperimentale di S_T sia piuttosto complessa per via della notevole dispersione dei dati ([34]), si osserva approssimativamente una dipendenza del tipo [59]:

$$\frac{S_T}{S_L} \approx 1 + \frac{u'}{S_L} \quad (3.1)$$

dove u' è il RMS¹ della fluttuazione di velocità. Da questa espressione si deduce come la combustione premiscelata sia fortemente influenzata dalla turbolenza: per valori molto alti di u' , S_T perde la dipendenza da S_L , e si ha $S_T \approx u'$. In un combustore per TAG, S_T supera S_L di circa un ordine di grandezza permettendo di contenere il volume complessivo di combustione e quindi la superficie complessiva di parete da raffreddare [54]. Si verifica sperimentalmente inoltre che lo spessore medio della fiamma turbolenta δ_T è sempre maggiore del corrispondente laminare δ_L .

¹root mean square. u' coincide con la radice quadrata dell'energia cinetica turbolenta

3.1.1 Meccanismi di stabilizzazione

Nei dispositivi di interesse pratico che lavorano con fiamme premiscelate turbolente statisticamente stazionarie (sono quindi esclusi i motori a combustione interna), nasce l'esigenza di stabilizzare il fronte di fiamma in una ben definita zona del combustore. La stabilizzazione della fiamma può essere effettuata agendo su due diversi meccanismi:

Zona a bassa velocità Creando nel campo di moto zone con velocità locali bassa (paragonabile a S_T) la fiamma è in grado di sostenere il flusso di reagenti: L'effetto è generalmente realizzato disponendo nella corrente principale un ostacolo (*flame-holder*). La zona a bassa velocità si identifica nella zona di ricircolazione a valle dell'ostacolo (figura 3.2).

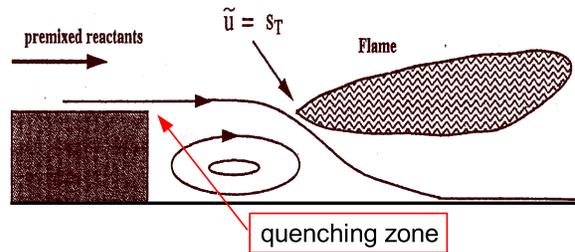


Figura 3.2: Stabilizzazione mediante *flame-holder*.

Accensione continua La fiamma viene stabilizzata fornendo alla corrente dei reagenti una sorgente di energia, costituita tipicamente dai prodotti di una fiamma pilota (vedi figura 3.3).

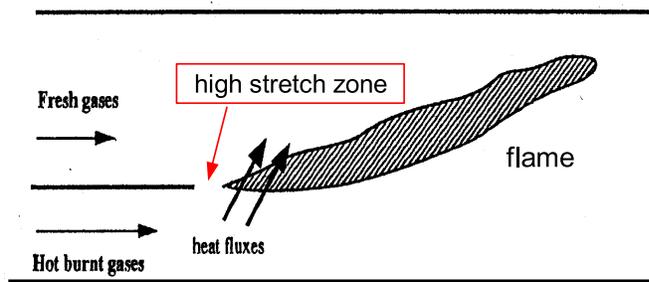


Figura 3.3: Stabilizzazione mediante fiamma pilota.

Nei dispositivi reali la stabilizzazione della fiamma viene generalmente realizzata operando una combinazione dei due sistemi. Nell'ambito delle turbine a gas è assai frequente il ricorso alla stabilizzazione mediante *swirler*. La figura 3.4 riporta la simulazione di un campo di moto di un combustore reale, nel quale si osserva come la zona di ricircolazione centrale prodotta dal meccanismo di *vortex-breakdown* ([39]) realizzati, di fronte alla zona di iniezione della miscela reagente, una vasta area a bassa velocità interessata dal ricircolo di una frazione dei gas caldi (fonte GE-NP).

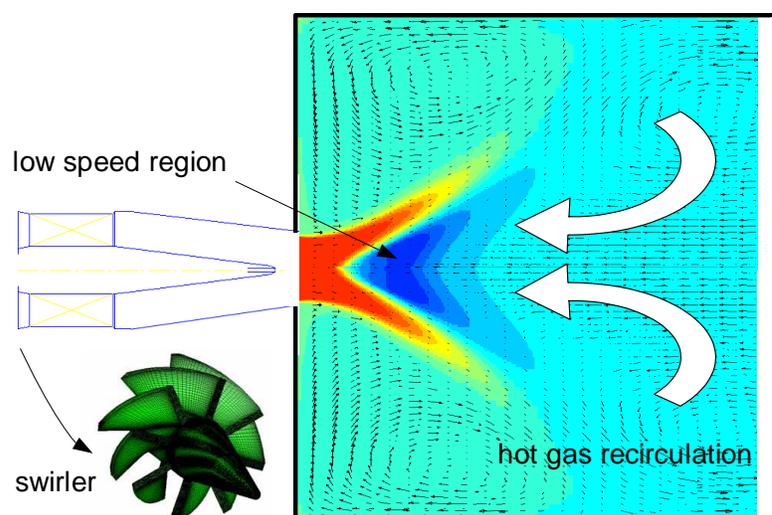


Figura 3.4: Stabilizzazione mediante *swirler*.

Nonostante l'indubbia rilevanza che il meccanismo di stabilizzazione possiede nel contesto del funzionamento di un dispositivo di combustione, la quasi totalità dei modelli RANS per fiamme premiscelate non è in grado di predire con accuratezza il reale processo di stabilizzazione ed ancoraggio delle fiamme [59]. Ciò non significa che sia impossibile analizzare fiamme stazionarie, ma nella maggior parte dei casi non verrà predetto il corretto punto di ancoraggio. Questo inconveniente è legato alla estrema complessità del processo di accensione delle fiamme in regime turbolento a cominciare dai meccanismi di reazione, estremamente più complessi dei consueti schemi chimici validi per condizioni stazionarie ad alta temperatura. Ma l'aspetto senza dubbio più difficoltoso è legato alle particolari condizioni di flusso che interessano le zone in cui si realizza l'ancoraggio. Nell'esempio di figura 3.2 la zona di stabilizzazione è posta in prossimità di una parete solida: il

calore sottratto localmente dalla parete, inevitabilmente più fredda dei gas, produrrà fenomeni locali di **quenching** (raffreddamento istantaneo) con conseguenti spegnimenti della fiamma. La presenza della parete, inoltre, può dar luogo a fenomeni locali di rilaminarizzazione del flusso giustificando una successiva fase di nuova transizione al regime turbolento [59]. Nell'esempio di figura 3.3, l'elevata sollecitazione di taglio che si sviluppa subito a valle del setto che separa il getto pilota dal getto primario, produce effetti locali di **stretching** ("stiramento") della fiamma che determinano lo spostamento a valle del punto di accensione [54].

La capacità di simulare la complessa interazione chimica-turbolenza che caratterizza le zone di stabilizzazione della fiamma è quindi di fondamentale importanza per poter descrivere con modelli RANS quei fenomeni che intervengono nel momento in cui il meccanismo di stabilizzazione fallisce. Ci riferiamo al problema del **flashback** e del **blow-off** della fiamma. Il primo comporta la risalita della fiamma verso i dispositivi di iniezione, tipicamente a causa di una instabilità del flusso principale (forti escursioni di velocità o di composizione), mentre il blow-off, anch'esso determinato da mutate caratteristiche del flusso reagente, comporta lo spegnimento della fiamma, trascinata via dalla corrente principale [54]. Nei moderni combustori di TAG, che lavorano con miscele estremamente magre, prossime al limite inferiore di infiammabilità, piccole fluttuazioni nelle caratteristiche della miscela reagente (portata, composizione e temperatura), possono portare a forti escursioni nella posizione del fronte di fiamma: le elevate fluttuazioni di pressione che ne conseguono (per via delle forti escursioni di temperatura e densità) portano, tipicamente, all'innescio dei già citati fenomeni di risonanza termo-acustica [16].

3.2 Fiamme premiscelate laminari

Lo studio delle fiamme premiscelate laminari riveste una notevole importanza nel contesto generale della combustione turbolenta. L'analisi di fiamme laminari monodimensionali, infatti, permette di eseguire confronti estremamente dettagliati tra esperimenti in laboratorio, valutazioni teoriche e calcoli numerici [59]. La semplificazione del campo di moto, inoltre, permette di testare e validare meccanismi di reazione dettagliati, consentendo accurate analisi di sensibilità [56]. Come vedremo meglio in seguito le fiamme turbo-

lente possono essere considerate, almeno in alcuni regimi, come un insieme di fiamme laminari distinte soggette al campo di turbolenza (*flamelet*): lo studio della singola fiamma laminare in condizioni fluidodinamiche equivalenti è quindi propedeutica alla messa a punto di questa famiglia di modelli [54]. Per analizzare la struttura di una fiamma laminare monodimensionale, ci riferiremo ad una fiamma piana in libera propagazione (*freely propagating laminar flame*), anche se, come vedremo, spesso si utilizzano altre configurazioni (fiamme contrapposte): le considerazioni che effettueremo presentano in ogni caso validità generale.

In figura 3.5 sono riportati gli andamenti delle principali grandezze in una fiamma laminare metano-aria. Si individua una zona di preriscaldamento (*preheat zone*) nella quale, per opera dei gradienti di temperatura, si ha la diffusione di calore verso la miscela reagente con conseguente innesco della reazione. La tendenza del fronte di fiamma a muoversi verso la miscela fresca con velocità S_L è determinata dalla diffusione, nella *preheat zone*, di specie radicaliche altamente reattive: l'equilibrio locale tra diffusione di calore e specie radicaliche e la reattività della miscela (limitata dalla portata di combustibile) determina la stabilizzazione del fronte di fiamma [75]. La *preheat zone* viene considerata generalmente inerte dal punto di vista chimico.

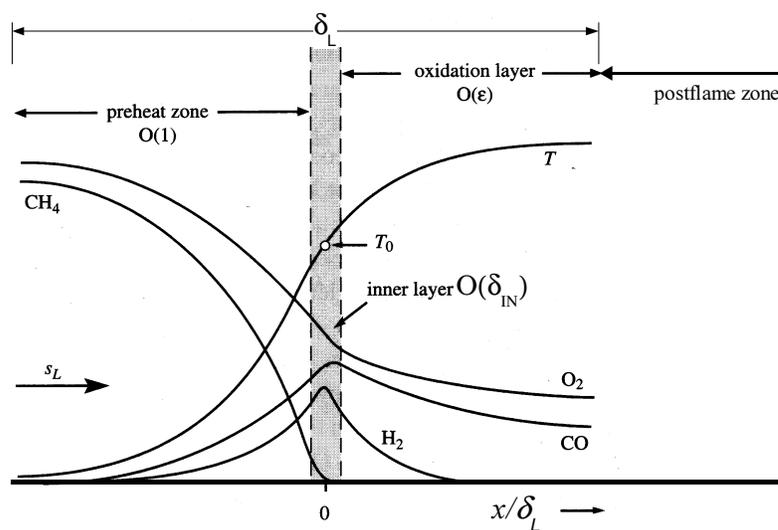


Figura 3.5: Struttura di una fiamma laminare premiscelata (riadattato da [56]).

La zona di reazione può essere suddivisa in due parti: il cosiddetto *inner layer* e la zona di ossidazione (*oxidation zone*). L'*inner layer* determina la

quasi totale scomparsa del combustibile iniziale con la formazione di specie intermedie (principalmente CO e H_2) che vengono consumate nella successiva zona di ossidazione. Lo spessore della *reaction zone* (*inner layer + oxidation zone*) è tipicamente inferiore di almeno un ordine di grandezza rispetto alla *preheat zone*, che di fatto costituisce l'effettivo spessore della fiamma (δ_L) [56].

La velocità di propagazione della fiamma S_L viene generalmente riferita ai gas incombusti. In condizioni stazionarie, per la continuità, vale²:

$$\rho_u S_L = \rho_b S_{Lb}$$

La velocità di propagazione riferita ai gas combustibili è quindi inferiore ad S_L di un fattore ρ_b/ρ_u . Per gli idrocarburi leggeri (metano, propano) S_L varia tra 0.1 m/s e 1.0 m/s .

Lo spessore della fiamma laminare premiscelata può essere stimato utilizzando criteri diversi. Considerando S_L come un fattore di scala per la velocità, è possibile definire lo spessore della fiamma laminare δ_L come il rapporto tra la diffusività termica della miscela e S_L stesso:

$$\delta_L = \frac{D_t}{S_L} \quad (3.2)$$

essendo $D_t = \lambda/(\rho c_p)$. Dal momento che S_L è definita rispetto alla miscela incombusta, D_t deve essere valutata anch'essa nei gas incombusti [59]. Da un punto di vista teorico la corretta definizione di δ_L dovrebbe essere legata al reale profilo di temperatura. Con riferimento alla figura 3.6, tipicamente si considera [59], [27]:

$$\delta_L^0 = \frac{(T_b - T_u)}{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{max}} \quad (3.3)$$

L'espressione 3.3, tuttavia, non può essere valutata a priori, ma richiede la conoscenza dell'esatto profilo di temperatura, risultando così inadatta alla simulazione numerica (lo spessore della fiamma è necessario per stimare le dimensioni della mesh di calcolo, [59]). Per tener conto della variazione della diffusività termica nello spessore, si può usare la seguente espressione, dovuta a Blint ([4]):

$$\delta_L^b = 2\delta_L \cdot \left(\frac{T_b}{T_u}\right)^{0.7} \quad (3.4)$$

²da questo momento in poi utilizzeremo i pedici "b" e "u" per identificare grandezze riferite ai gas *burned* e *unburned*

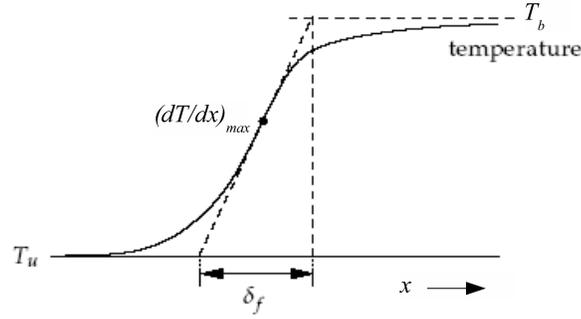


Figura 3.6: Definizione generale di spessore di fiamma laminare.

I valori dello spessore stimati tramite la 3.2 sono generalmente troppo bassi rispetto a δ_L^0 : la 3.4 costituisce una buona approssimazione [59]. Per le fiamme metano-aria lo spessore del fronte di fiamma assume valori compresi tra 0.1 mm e 1 mm mentre lo spessore relativo dell'*inner layer*, rispetto a δ_L , varia tra 0.1 a pressione atmosferica e 0.03 a 30 bar. Lo spessore dell'*oxidation layer* è circa tre volte quello dell'*inner layer* [56].

E' possibile individuare una interessante relazione tra la velocità S_L , lo spessore δ_L e la viscosità cinematica ν :

$$Re_L = \frac{\delta_L \cdot S_L}{\nu} \approx 4 \quad (3.5)$$

Il numero di Reynolds della fiamma laminare è quindi approssimativamente costante [75]. Inoltre, utilizzando S_L e δ_L come scale di velocità e spaziale, è possibile stimare un tempo caratteristico della fiamma:

$$\tau_L = \frac{\delta_L}{S_L} \quad (3.6)$$

Come vedremo nel dettaglio nei prossimi paragrafi, numerosi modelli di combustione turbolenta per fiamme premiscelate fanno uso diretto dei valori di S_L e δ_L . La velocità di propagazione e lo spessore della fiamma laminare possono essere valutati risolvendo le equazioni di conservazione viste nel paragrafo §2.1, adottando un opportuno meccanismo di reazione. Data la complessità dei meccanismi di reazione per gli idrocarburi, le equazioni 2.2, 2.3 e 2.4, una volta ridotte al caso monodimensionale, devono essere risolte per via numerica. Normalmente, quindi, la dipendenza di S_L e δ_L dai principali parametri operativi (composizione, temperatura dei reagenti e pressione) viene valutata considerando soluzioni analitiche approssimate della fiamma

monodimensionale, dalle quali si possano dedurre correlazioni per la velocità di propagazione e dello spessore [75]. Sono stati proposti numerosi modelli per lo studio analitico semplificato delle fiamme laminari (vedi per esempio [59]), ma l'approccio senza dubbio più usato è la *rate-ratio asymptotic analysis* (RRA) dovuta essenzialmente a Peters e Williams [57], [56] e [80]. In appendice C riportiamo una descrizione più accurata della RRA, illustrando un esempio di correlazione per S_L .

3.2.1 Flame stretch

Lo *stretching* di una fiamma laminare premiscelata costituisce l'insieme di effetti tridimensionali di distorsione che agiscono a perturbare la superficie del fronte, sottoponendolo ad uno "stiramento" che condiziona il processo di combustione che in esso si realizza [27]. Le deformazioni del fronte di fiamma che determinano lo *stretching* in regime laminare, sono generate dalle modalità di propagazione del fronte stesso e dalla sua interazione cinematica con il campo di moto.

Lo *stretching* viene generalmente quantificato introducendo un apposito parametro così definito (fattore di *stretching*):

$$K = \frac{1}{A} \cdot \frac{dA}{dt} \quad (3.7)$$

dove A è la superficie del fronte di fiamma. Se ci riferiamo al caso di fiamma laminare tridimensionale, è possibile dedurre un'espressione più generale del fattore di *stretching*. In figura 3.7 è riportato uno schema della generica superficie di fiamma nello spazio. Detti \vec{u} e \vec{n} , rispettivamente il vettore velocità e il versore normale alla superficie (diretto verso la miscela fresca) nel generico punto P , la velocità di propagazione del fronte di fiamma vale:

$$\vec{w} = \vec{u} + S_L \vec{n}$$

Detti R_1 e R_2 i due raggi di curvatura della superficie nel punto P , è possibile esprimere il fattore di *stretching* tramite:

$$K = \nabla_t \cdot \vec{u} - S_L \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = \nabla_t \cdot \vec{u} + S_L \nabla_t \cdot \vec{n} \quad (3.8)$$

dove l'operatore ∇_t definisce la componente tangente alla superficie della fiamma. I due termini che compaiono nella 3.8 assumono il seguente significato:

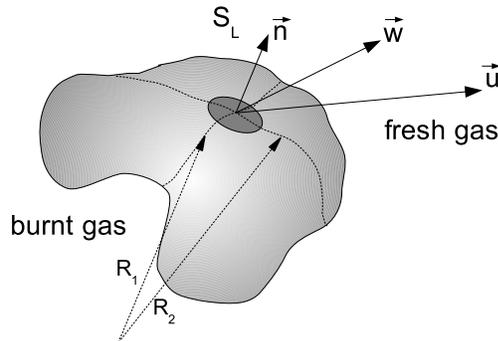


Figura 3.7: Definizione generalizzata della velocità di propagazione di una fiamma laminare premiscelata.

- il primo termine, $\nabla_t \cdot \vec{u}$, descrive l'effetto di distorsione della superficie del fronte di fiamma per opera dei gradienti di velocità della miscela reagente. Si tratta di un termine legato alla disuniformità del flusso ed è presente anche in fiamme stazionarie: viene comunemente chiamato *strain*. L'esempio più comune di fiamma soggetta al solo effetto dello

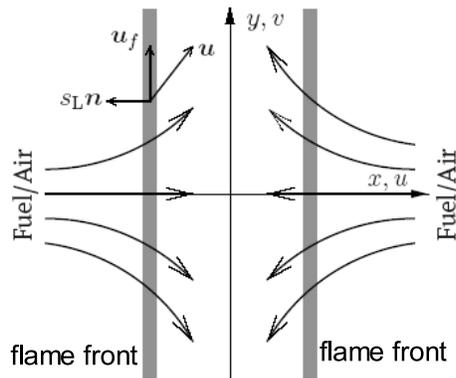


Figura 3.8: Counter flow twin flame.

strain è la geometria simmetrica *counter flow*, illustrata in figura 3.8. Si tratta di una fiamma stabilizzata mediante due getti di reagenti contrapposti nella quale il fronte di fiamma si stabilizza parallelamente all'asse di simmetria, coincidente con il piano di ristagno [27]. Il fronte di fiamma subisce uno *stretching* pari a:

$$a = \frac{dv}{dy}$$

Come vedremo meglio nei prossimi capitoli si tratta di una tipologia di fiamma frequentemente studiata nell'ambito dei modelli flamelet per combustione turbolenta in quanto permette di definire chiaramente le condizioni di *stretching*, semplicemente fissando lo *strain* a in ingresso [59].

- il secondo termine dell'equazione 3.8 è dovuto agli effetti di curvatura della superficie di fiamma. Un esempio di fiamma soggetta a questo tipo di *stretching*, ma priva degli effetti dello *strain* ($\nabla_t \cdot \vec{u}$), è rappresentato da una fiamma sferica in fase di libera espansione (vedi figura 3.9).

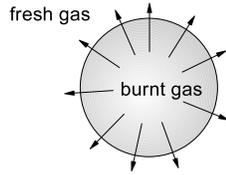


Figura 3.9: *Freely propagating spherical flame.*

E' facile dimostrare che in questo caso lo *stretching* è determinato da [59]:

$$K = \frac{2}{r} \frac{dr}{dt}$$

In base alle definizioni date, risulta chiaro che una qualsiasi fiamma stazionaria avente fronte con versore normale allineato alla direzione del flusso risulta per definizione priva di *stretching*.

3.2.1.1 Effetto dello *stretching* sulla velocità di fiamma

Dal momento che lo *stretching* a cui sono soggette le fiamme reali altera il processo di combustione, per via dell'azione di distorsione del fronte di fiamma, risulta inevitabile un effetto anche sulla velocità di propagazione S_L . La definizione di S_L e le espressioni analitiche dedotte in precedenza per la sua valutazione, devono essere riferite ad una fiamma priva di *stretching* (*unstretched flame*): per questo valore si usa tipicamente il simbolo S_L^0 .

Dal momento che lo *stretching* altera i gradienti di tutte le grandezze in corrispondenza del fronte di fiamma (incrementandoli), l'aumento della

velocità di diffusione delle specie reagenti (proporzionale ai gradienti di concentrazione), determina, in prima analisi, un aumento della velocità di fiamma. Per lo stesso motivo, tuttavia, l'aumento del gradiente di temperatura determina un più intenso raffreddamento della fiamma, con conseguente tendenziale riduzione della sua velocità di propagazione. L'effetto complessivo dello *stretching* sulla velocità di propagazione della fiamma, dipende quindi dal peso relativo dei processi di diffusività molecolare e termica; il rapporto tra i coefficienti caratteristici dei due fenomeni (D_t e D) è espresso dal numero di Lewis, Le . In figura 3.10 è riportato l'andamento del numero di Lewis di alcune specie chimiche in una fiamma laminare monodimensionale metano-aria [59].

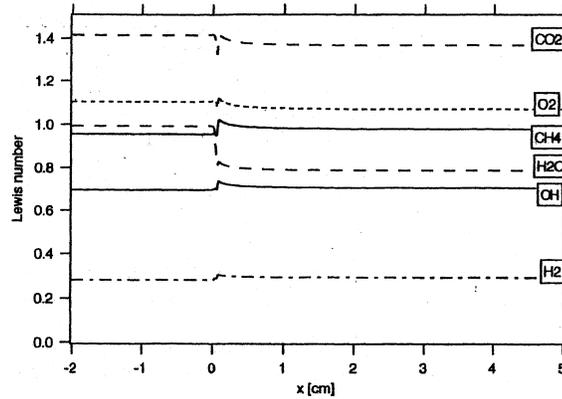


Figura 3.10: Andamento del numero di Lewis delle principali specie in una fiamma stechiometrica metano-aria laminare.

Per quantificare l'effetto dell *stretching* su S_L è possibile servirsi nuovamente della RRA ([27] e [75]): nell'ipotesi di effetti di *stretching* contenuti (piccoli valori di *strain* e curvatura) e di fiamma monodimensionale, è possibile stimare il valore di S_L tramite relazioni lineari tra S_L^0 e il fattore di *stretching* K , [56]:

$$\frac{S_L}{S_L^0} = 1 - \frac{\mathcal{L}}{S_L^0} K \quad (3.9)$$

Il parametro \mathcal{L} ha le dimensioni di una lunghezza con valori prossimi allo spessore del fronte di fiamma δ_L ed è detta *lunghezza di Markstein*. Tipicamente si fa riferimento al suo rapporto con δ_L che costituisce il numero adimensionale $\mathcal{M} = \mathcal{L}/\delta_L$ detto numero di *Markstein*:

$$\frac{S_L}{S_L^0} = 1 - \mathcal{M} \frac{K \delta_L}{S_L^0} \quad (3.10)$$

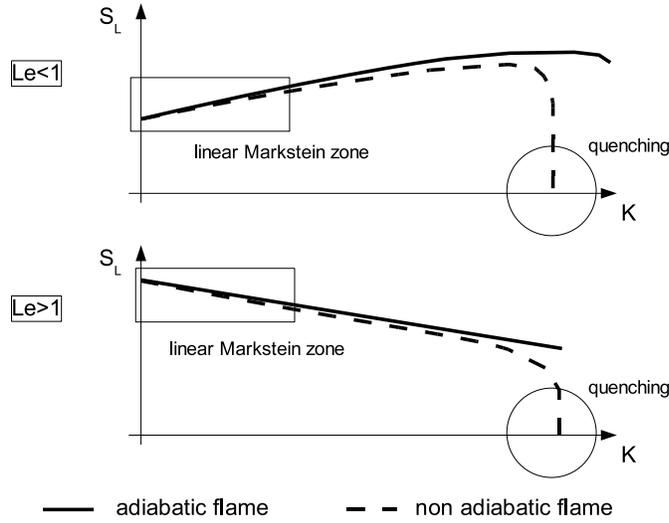


Figura 3.11: Effetto del numero di Le sulla dipendenza tra S_L e K .

L'effetto dello *stretching* sulla velocità di propagazione della fiamma è quindi determinato dal segno e dal modulo del numero di *Markstein*. Sfortunatamente la misura sperimentale di \mathcal{M} risulta assai problematica, per via della difficoltà di realizzare fiamme in cui la variazione di S_L sia governata unicamente dallo *stretching* [59]. Sfruttando ancora una volta la RRA, è possibile ricavare alcune espressioni semplificate per \mathcal{M} , [50], [56], [59]:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{2}\beta(Le - 1) \left(\frac{T_u}{T_b - T_u} \right) \int_0^{T_b - T_u/T_u} \frac{\ln(1+x)}{x} dx \quad (3.11)$$

L'espressione 3.11 mostra come il segno di \mathcal{M} sia essenzialmente determinato da $(Le - 1)$. Ricordando quanto detto in precedenza, possiamo distinguere i seguenti casi:

$Le < 1$ Risulta $\mathcal{M} < 0$. Per piccoli valori di *stretching* si assiste ad un incremento di S_L all'aumentare di K . Fiamme con questo comportamento sono, ad esempio, le fiamme magre idrogeno-aria per le quali si può assistere ad un raddoppiamento della velocità di propagazione quando sottoposte a *stretching*.

$Le > 1$ Risulta $\mathcal{M} > 0$. In questo caso all'aumentare del fattore di *stretching* K si ha un aumento del calore disperso dalla fiamma, con una rapida riduzione di S_L . Tuttavia le fiamme degli idrocarburi impiegati nei comuni processi tecnici, difficilmente presentano $Le \gg 1$ e l'effetto non risulta mai tale da provocare lo spegnimento della reazione [59].

In figura 3.11 è rappresentata graficamente la dipendenza di S_L dal numero di Le , con la distinzione tra fiamma adiabatica e non adiabatica. In generale, infatti, non è possibile trascurare il calore ceduto dalla fiamma, specialmente il calore scambiato per irraggiamento. Inoltre, come mostrato in figura 3.11, lo scambio termico caratterizza il comportamento della fiamma ad alti valori di *stretching*, ponendo un limite alla variazione di S_L costituito dall'estinzione della fiamma per *quenching* [59]. Anche nell'ipotesi di $Le = 1$, frequentemente adottata nelle simulazioni numeriche, per la quale risulta $\mathcal{M} = 0$ con dipendenza nulla di S_L da K , l'aumento dello scambio termico radiativo all'aumentare dello *stretching* (essenzialmente per l'aumento della superficie di fiamma), determina il *quenching* della reazione ad alti valori di *stretching*.

3.3 Classificazione delle fiamme premiscelate turbolente

Come visto nel paragrafo §2.3.3, la valutazione diretta del termine sorgente - *reaction rate* - mediante espansioni in serie di Taylor, introduce un numero estremamente elevato di grandezze incognite (correlazioni tra i termini fluttuanti delle concentrazioni e delle temperatura). Si rende quindi necessario lo sviluppo di opportuni modelli di combustione turbolenta, a partire da osservazioni fenomenologiche e dall'analisi delle diverse modalità di interazione tra la fiamma e il campo di turbolenza. A causa della estrema diversità con cui può realizzarsi l'interazione turbolenza-combustione, è impensabile poter mettere a punto modelli di validità generale ed occorre quindi operare una classificazione dei vari regimi di combustione turbolenta. La classificazione viene effettuata mettendo in relazione, su opportuni diagrammi, le grandezze di scala chiave della turbolenza e della combustione, tramite la definizione di numeri adimensionali caratteristici. La definizione di questi diagrammi permette di definire il campo di validità dei vari mo-

delli, confrontandoli con i punti di funzionamento dei dispositivi reali che si intende analizzare [52].

3.3.1 Scale e grandezze caratteristiche

Prima di descrivere i principali regimi di combustione, introduciamo le grandezze di scala e i numeri adimensionali caratteristici.

Detta r la dimensione del generico vortice del campo di turbolenza in esame³ (compresa quindi tra la lunghezza di scala di Kolmogorov, L_k e la lunghezza di scala integrale, L_T), la velocità di dissipazione dell'energia cinetica associata ai vortici di dimensione r è espressa da:

$$\frac{u'(r)^3}{r} = \varepsilon$$

In maniera analoga possiamo definire un tempo caratteristico del processo di *mixing* turbolento associato ai vortici di dimensione r ⁴:

$$\tau_m(r) = \frac{r}{u'(r)} = \frac{r^{2/3}}{\varepsilon^{1/3}}$$

Possiamo adesso confrontare questo tempo caratteristico con quello di una fiamma laminare (avente spessore δ_L e velocità S_L^0) che si propaga nel campo di turbolenza descritto ($\tau_L = \delta_L/S_L^0$), costruendo un numero adimensionale, detto numero di *Damköhler*:

$$Da(r) = \frac{\tau_m(r)}{\tau_L}$$

Generalmente il numero di *Damköhler* vero e proprio, Da , corrisponde al caso di $r = L_T$ (a cui corrisponde $\tau_m(r) = \tau_T = k/\varepsilon$, essendo $k = RMS(u')$ l'energia cinetica turbolenta):

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_L} \tag{3.12}$$

Ricordando le definizioni di τ_T e τ_L si verifica facilmente che:

$$Da = \frac{L_T S_L^0}{\delta_L u'} \tag{3.13}$$

³supposta per semplicità isotropa in questo tipo di analisi

⁴l'inverso di questo tempo è la frequenza delle fluttuazioni turbolente (vortici) di ampiezza r

Il numero di *Damköhler* permette di determinare immediatamente due condizioni limite. Per $Da \gg 1$ le reazioni chimiche hanno velocità molto maggiore del *mixing* turbolento, determinando quindi un fronte di fiamma solo lievemente distorto dal campo di turbolenza, ma ancora perfettamente laminare nella sua struttura interna. Si tratta del cosiddetto regime *flamelet*, in cui si può descrivere la combustione tramite una reazione a passo singolo avente velocità infinita (*fast chemistry*). Per $Da \ll 1$ le reazioni chimiche sono estremamente più lente del processo di *mixing* turbolento ed il sistema può essere descritto sotto le ipotesi del *Perfectly Stirred Reactor* (vedi paragrafo §4.3.2), in cui il *reaction rate* medio viene stimato utilizzando nell'espressione di Arrhenius i valori medi di temperatura a concentrazioni [75].

Per descrivere l'interazione del fronte di fiamma con vortici aventi dimensioni pari a alla lunghezza di scala di Kolmogorov L_k (microvortici), si introduce il numero di *Karlovitz*, Ka :

$$Ka = \frac{1}{Da(L_k)} = \frac{\tau_L}{\tau_k} \quad (3.14)$$

essendo $\tau_k = \sqrt{\varepsilon/\nu}$, il tempo caratteristico dei microvortici. Ricordando che $\tau_k = V_k/L_k$ e riprendendo la definizione di V_k data dalla 2.11 si ottiene facilmente che:

$$Ka = \left(\frac{L_T}{\delta_L}\right)^{-1/2} \left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^{3/2} \quad (3.15)$$

da cui deriva immediatamente che:

$$Re_T = Da^2 Ka^2$$

e che:

$$Ka = \left(\frac{\delta_L}{L_k}\right)^2 \quad (3.16)$$

Il numero di *Karlovitz* è quindi proporzionale al rapporto tra lo spessore della fiamma laminare e la dimensione caratteristica dei vortici di microscala. La condizione $Ka=1$ costituisce il cosiddetto criterio di *Klimov-Williams* che delimita il regime di combustione *flamelet*. Per $Ka < 1$ anche i più piccoli vortici presenti nel campo di moto sono più grandi dello spessore del fronte di fiamma che conserva quindi interamente la sua struttura laminare. Per $Ka > 1$, i microvortici hanno dimensione paragonabile a quella del fronte di fiamma ed

iniziano quindi ad interagire con la struttura interna della fiamma laminare. Per descrivere più accuratamente questa fase, è opportuno introdurre un numero di *Karlovitz* basato sullo spessore dell'*inner layer* della fiamma (δ_{IN}):

$$Ka_{IN} = \left(\frac{\delta_{IN}}{L_k} \right)^2 \quad (3.17)$$

Ricordando che $\delta_{IN} \approx 0.1 \cdot \delta_L$, risulta:

$$Ka_{IN} \approx \frac{Ka}{100} \quad (3.18)$$

Fintantochè $Ka < 100$ (ossia $Ka_{IN} < 1$), l'*inner layer* della fiamma non viene interessato dall'azione dei vortici, conservando la sua struttura laminare. La nuova classificazione proposta da Peters ([56]) prevede l'estensione del regime flamelet all'intervallo $1 < Ka < 100$ nel quale i microvortici hanno dimensione inferiore allo spessore di diffusione del fronte di fiamma (δ_L), potendo così penetrare nella *preheat zone* (vedi figura 3.5), ma hanno dimensione inferiore alla zona di reazione (*inner layer* e *oxidation layer*) che rimane ancora sostanzialmente coincidente a quella di una fiamma laminare. Il regime delimitato dall'intervallo $1 < Ka < 100$ prende il nome di *Thin Reaction Zone* e si parla di *Thickened-Wrinkled Flamelets* [56], [59]. La diversa interazione dei microvortici con il fronte di fiamma laminare descritta nei due regimi flamelet viene illustrata schematicamente in figura 3.12.

3.3.2 Diagramma spettrale

I regimi di combustione individuati nel paragrafo precedente possono essere più chiaramente rappresentati su opportuni diagrammi spettrali il cui uso è stato inizialmente proposto da Borghi (si parla in effetti di diagrammi di Borghi), al quale si deve la prima classificazione sistematica delle fiamme premiscelate turbolente [54]. La schematizzazione proposta da Borghi è stata ritenuta completa per molti anni ma oggi, grazie alle numerose indagini sperimentali e numeriche (DNS), è universalmente accettata la già citata nuova classificazione proposta da Peters, alla quale ci atterremo anche in questo lavoro.

Il diagramma viene costruito ponendo in ascissa il rapporto L_T/δ_L ed in ordinata il rapporto u'/S_L^0 ed utilizzando una doppia scala logaritmica (vedi figura 3.13). Sul diagramma si individuano i seguenti regimi:

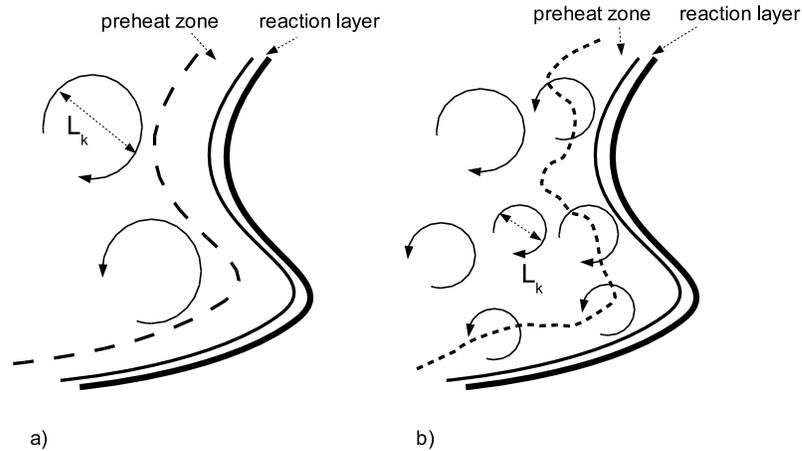


Figura 3.12: Rappresentazione schematica dei due regimi di flamelet. Per $Ka < 1$ si parla di *corrugated flamelet* (a) mentre per $1 < Ka < 100$ si hanno le *thickened flamelets* (b).

- **$Ka < 1$: Flamelets regime.** Sono generalmente utilizzate le seguenti due ulteriori suddivisioni:

$u'/S_L^0 < 1$: *wrinkled flamelets*. Le strutture di moto turbolente di dimensione maggiore, a cui si può associare una velocità di rotazione u' , non sono in grado di corrugare la fiamma in modo tale da costituire una vera e propria interazione; la fiamma propaga in modalità sostanzialmente laminare

$u'/S_L^0 > 1$: *corrugated flamelets (wrinkled flames with pockets)*. All'aumentare di u' le strutture di moto turbolente sono in grado di corrugare la fiamma fino a determinare locali interazioni dei vortici con il fronte di fiamma: si individuano sacche (*pockets*) separati di miscela fresca e gas bruciati

- **$1 < Ka < 100$: thin reaction zones (thickened wrinkled flamelets).** Come visto in precedenza, le dimensioni dei vortici di microscala (L_k) permettono alle fluttuazioni turbolente di penetrare la *preheat zone* della fiamma laminare, lasciando tuttavia inalterata la *reaction zone* che si mantiene ben delineata e di spessore contenuto, proprio come in regime laminare. L'effetto complessivo è un ispessimento della flamelet (*thickened*) ancora soggetta all'azione di corrugamento (*wrinkling*) esercitata dai macrovortici (dimensione L_T).
- **$Ka > 100$: Distributed reaction (perfectly stirred reactor).** La dimensione dei microvortici è tale che l'intera struttura della fiamma laminare è sottoposta all'azione delle fluttuazioni turbolente: il processo di *mixing* turbolento si sposta su scale inferiori a quelle della *reaction zone* con completa distruzione di ogni identificabile struttura laminare. La fiamma, come accennato in precedenza, tende progressivamente alla condizione di *Perfectly Stirred Reactor* nella quale si può ritenere infinitamente veloce il processo di *mixing* lasciando alle reazioni chimiche

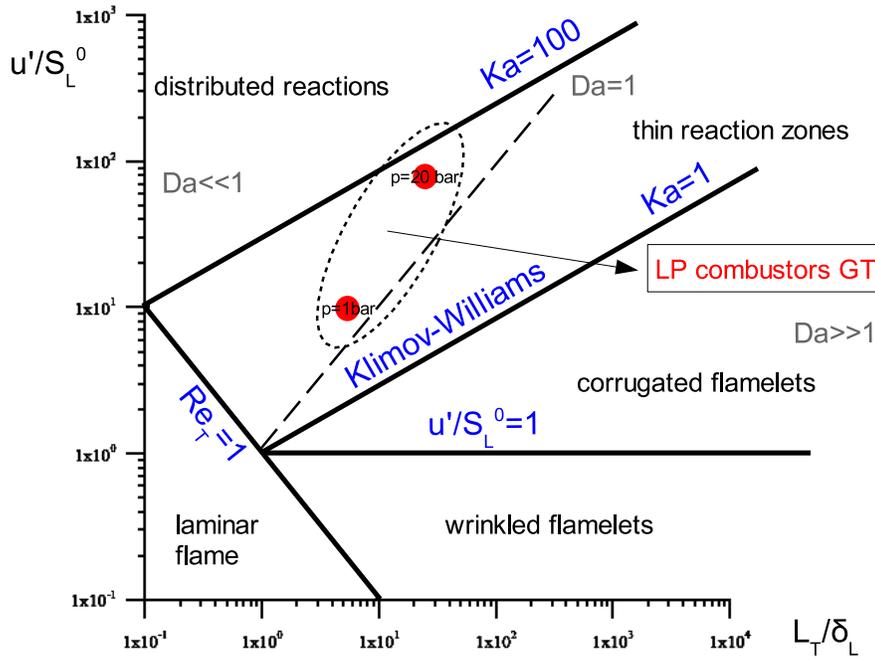


Figura 3.13: Diagramma di Borghi secondo la nuova classificazione proposta da Peters [56].

il controllo dell'evoluzione del processo. La possibilità di realizzare dispositivi che operino con fiamme completamente collocate nella *Distributed Reaction Zone*, è di fatto preclusa dai fenomeni di *quenching* che contraddistinguono questo regime di combustione. La distruzione della struttura laminare interna, e quindi dello strato di separazione tra miscela reagente e gas combusti, determina un *mixing* eccessivo tra *unburned* e *burned* gas, che giustifica locali fenomeni di spegnimento della reazione (si parla anche di *broken reactions*). Esistono tuttavia numerosi dispositivi che lavorano in prossimità del confine tra *Thin Reaction Zone* e *Distributed Reaction Zone*, primi fra tutti i combustori per turbina a gas: poter spingere il regime di combustione quanto più possibile nel regime *Distributed Reaction*, consente di contenere le dimensioni della zona di reazione e quindi dell'intero dispositivo; questa tendenza è limitata, oltre che dall'insorgere di fenomeni di *quenching* e quindi di instabilità nel processo di combustione, dalle inevitabili perdite di carico che gli alti livelli di turbolenza determinano.

Lo scopo dell'inquadramento sul diagramma di Borghi dei principali regimi di combustione, è la possibilità di confrontare i punti di funzionamento dei dispositivi reali con il campo di applicabilità dei vari modelli di combustione turbolenta per fiamme premiscelate. La maggior parte dei processi di combustione di interesse tecnico (TAG terrestri, post-bruciatori, caldaie, motori a combustione interna) lavora nel regime *Thin Reaction Zone* o, meno

frequentemente, nel regime *Corrugated Flamelets* ([52], [61], [5], [55]). Prima di analizzare con gli strumenti introdotti il regime dei combustori LPC per TAG, dobbiamo precisare le ipotesi e le approssimazioni che stanno alla base della classificazione proposta in figura 3.13 [75]:

- L'analisi che porta alla individuazione dei vari regimi di combustione si basa sull'assunzione che il campo di turbolenza sia isotropo ed omogeneo e che non risulti alterato dal processo di combustione. E' evidente che le ampie variazioni di densità imposte dal rilascio di calore e l'aumento della viscosità molecolare con la temperatura, condizionano significativamente il campo di turbolenza.
- Le condizioni limite che definiscono i vari regimi sono basate su stime degli ordini di grandezza dei vari gruppi adimensionali e non su valutazioni precise. Il criterio di Klimov-Williams ($Ka=1$), ad esempio, può corrispondere, a seconda della geometria, a $Ka=0.1$ o a $Ka=10$.
- Nella definizione dei regimi di combustione non vengono tipicamente presi in considerazione alcuni effetti fondamentali quali lo *stretching* della fiamma laminare e l'instazionarietà del processo di combustione. Calcoli DNS ([59]) hanno mostrato che il regime flamelet (*Corrugated Flamelets*) sembra estendersi oltre la condizione imposta dal criterio di Klimov-Williams ($Ka=1$).
- La deduzione dei regimi di combustione viene svolta basandosi implicitamente su una singola reazione chimica irreversibile a passo singolo, che giustifica il singolo tempo chimico caratteristico τ_L . Nei processi di combustione reali la reazione chimica si sviluppa attraverso numerosi passi elementari, caratterizzati, in generale, da scale temporali molto diverse tra loro.

In figura 3.13 abbiamo evidenziato la zona in cui operano i combustori a fiamma premiscelata per turbina a gas, distinguendo le condizioni di funzionamento a pressione atmosferica (indicative dei comuni test di sperimentazione del combustore) e ad una pressione di 20 bar (valore intermedio tra le macchine *heavy-duty* e le turbine aeroderivate). Possiamo giustificare la scelta fatta considerando i parametri di funzionamento di un combustore LPC stabilizzato mediante *swirler*.

In condizioni atmosferiche, possiamo supporre un valore della temperatura della miscela reagente $T_u = 600\text{ K}$, un valore del rapporto di equivalenza $\phi = 0.5$ ed una velocità media nel tubo di fiamma (con diametro $D \approx 0.1\text{ m}$) $U = 35\text{ m/s}$. In queste condizioni, con una viscosità cinematica $\nu = 5 \cdot 10^{-5}\text{ m}^2/\text{s}$, risulta un numero di Reynolds pari a $7 \cdot 10^{-4}$. La stabilizzazione mediante *swirler* (vedi figura 3.4) induce forti azioni di taglio sul flusso, giustificando valori piuttosto elevati dell'intensità di turbolenza: si può stimare un'intensità di turbolenza $u'/U \approx 0.25$ che determina un RMS della componente fluttuante $u' \approx 9\text{ m/s}$. La lunghezza di scala integrale può essere dedotta dalla dimensione minima all'interno dello *swirler*, determinata dalle dimensioni degli organi palettati: si può stimare un valore $L_T \approx 5\text{ mm}$ a cui corrisponde un tempo caratteristico $\tau_T = 0.6\text{ ms}$. In queste condizioni risulta un numero di Reynolds turbolento $Re_T \approx 800$ che giustifica una dimensione caratteristica della dissipazione viscosa (*Kolmogorov*) pari a $L_k \approx 0.05\text{ mm}$.

Per una fiamma laminare metano-aria con $\phi = 0.5$ si possono stimare $S_L^0 = 0.8\text{ m/s}$ e $\delta_L = 0.4\text{ mm}$ che determinano un tempo caratteristico $\tau_L = 0.5\text{ ms}$. Risulta quindi un numero di *Damköhler* prossimo all'unità. Il numero di *Karlovitz* può essere stimato utilizzando l'equazione 3.15: risulta $Ka \approx 8$. Sul diagramma di figura 3.13 il dispositivo si pone quindi nella *Thin Reaction Zone*: il valore del numero di *Damköhler* prossimo all'unità non consente, come vedremo, di utilizzare modelli completamente “*turbulence controlled*”.

In condizione macchina ($p = 20\text{ bar}$) si ha un sensibile aumento del numero di Reynolds (a causa della riduzione di ν) che determina una maggiore separazione delle scale turbolente (vedi eq. 2.9) con una drastica riduzione della lunghezza di Kolmogorov, L_k . All'aumentare della pressione operativa si ha una diminuzione della velocità di fiamma laminare S_L^0 e del suo spessore δ_L . Complessivamente, quindi, si ha un deciso aumento del numero di *Karlovitz* ed un più contenuto incremento del numero di *Damköhler*. Il dispositivo lavora quindi nella parte superiore della *Thin Reaction Zone* con frequenti casi di fiamme localmente operanti nel regime *Distributed Reaction*.

Complessivamente si osserva che la maggior parte dei combustori per TAG opera in uno dei due regimi in cui è valida l'ipotesi di flamelet, tipicamente nella *Thin Reaction Zone* (che costituisce un'estensione del regime flamelet vero e proprio). Esistono tuttavia frequenti casi in cui, dati gli alti livelli di

turbolenza ($u'/S_L^0 > 40$), il motore si trova ad operare nelle *Distributed Reaction Zone*. Non esistono di fatto combustori che possano essere inquadrati nel regime di *Wrinkled Flamelet* [55], [82], [67].

3.4 Modelli di combustione turbolenta per l'approccio RANS

Prima di descrivere nel dettaglio i modelli di combustione sviluppati nell'ambito di questo lavoro, crediamo sia necessario effettuare una breve classificazione dei principali approcci messi a disposizione dalla comunità scientifica per la soluzione, nel contesto delle RANS, delle fiamme premiscelate e parzialmente premiscelate che interessano i combustori delle moderne TAG.

Possiamo, in linea del tutto generale, operare la seguente classificazione dei modelli di combustione turbolenta per fiamme premiscelate:

- **Modelli *Local Source***
- **Approccio *Flamelet***
- **Trasporto della PDF**

In questa sede ci limiteremo a descrivere in maniera sufficientemente dettagliata solo i primi due approcci che raccolgono la quasi totalità dei modelli correntemente applicati nello studio della combustione nelle TAG.

Un metodo di validità generale per la chiusura del termine sorgente incognito $\widetilde{\dot{R}}_k$ consiste nel valutarne il valor medio a partire dalla sua PDF. Ad esempio, per la semplice reazione a passo singolo, $F + O \rightarrow P$, il valor medio di \dot{R}_k può essere valutato tramite ([75], [77] e [31]):

$$\widetilde{\dot{R}}_k = - \int_0^1 \dots \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty k_R C_F C_O \cdot PDF(\rho, T, Y_k, \vec{x}) d\rho \cdot dT \cdot dY_k \quad (3.19)$$

Il problema di questo tipo di approccio è, naturalmente, la conoscenza della PDF. Esistono vari metodi per la valutazione semplificata della PDF di \dot{R}_k che costituiscono altrettanti modelli di combustione. In generale, sia per le fiamme premiscelate sia per quelle diffusive, si preferisce sostituire al sistema completo costituito dalle equazioni di conservazione per tutte le specie chimiche in gioco, un set limitato di grandezze scalari che siano rappresentative

dello stato evolutivo del sistema: la scelta delle grandezze scalari di riferimento viene effettuata in relazione alla inevitabile semplificazione adottata del meccanismo di reazione.

Nell'ambito delle fiamme non premiscelate, ad esempio, si introduce la cosiddetta *mixture fraction* ξ (frazione di miscela). La definizione di ξ , dovuta

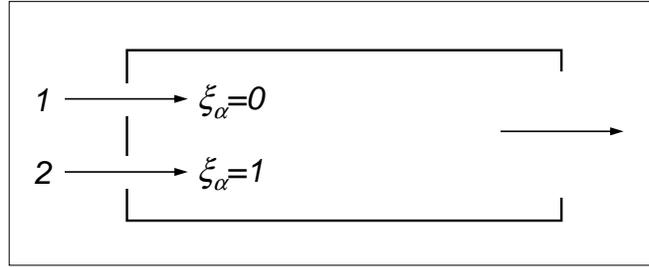


Figura 3.14: Definizione di *mixture fraction*

a Bilger (1976), è, nel semplice caso di miscelazione tra due correnti con concentrazione distinta e costante dello scalare α (vedi figura 3.14):

$$\xi_\alpha = \frac{z_\alpha - z_{\alpha_1}}{z_{\alpha_1} - z_{\alpha_2}}$$

dove z_α denota la frazione in massa della specie α . Per come è definita, la frazione di miscela è uno scalare passivo che viene unicamente trasportato e diffuso nel campo di moto, variando tra 0 (nella corrente n°1) e 1 (nella corrente n°2) (scalare conservato in senso stretto). Generalmente si costruisce la frazione di miscela della specie combustibile, che indica immediatamente il grado di avanzamento della reazione qualora le due correnti siano costituite da ossidante e combustibile.

La natura non reattiva dello scalare ξ rende possibile assumere a priori la forma della PDF con buona accuratezza. Tipicamente si considera una *Beta Function*, supposta funzione del valor medio di ξ e della sua varianza ξ''^2 . Le due grandezze sono ricavate dalla soluzione di due equazioni di trasporto che permettono di definire localmente il valore della PDF.

Nel caso delle fiamme premiscelate, viceversa, l'uso pressoché obbligato di scalari reattivi, rende assai più complessa la scelta di una forma ottimale e di validità generale per la PDF. Per la generica reazione a passo singolo infinitamente veloce $F + O \rightarrow P$, è possibile descrivere l'evoluzione del sistema tramite la grandezza scalare c , detta variabile di progresso, che vale 0 nella

miscela fresca, e 1 nei gas combustibili. Generalmente si costruisce la variabile di progresso in termini di temperatura o di frazione in massa di combustibile:

$$c = \frac{T - T_{unburnt}}{T_{burnt} - T_{unburnt}} \quad c = \frac{Y_F - Y_{F_{unburnt}}}{Y_{F_{burnt}} - Y_{F_{unburnt}}} \quad (3.20)$$

E' facile dimostrare che nell'ipotesi di $Le = 1$ e c_p costante, le due definizioni sono del tutto equivalenti e la fiamma è pertanto interamente descritta dalla soluzione di una equazione di trasporto per c [75]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{c} u_i) = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{c}'' u_i'') + \tilde{\Omega}_c \quad (3.21)$$

essendo $\tilde{\Omega}_c = \bar{\rho} \tilde{\omega}_c$. Come vedremo, l'uso della variabile di progresso è quasi universalmente abbinato ad una PDF costituita da due delta di Dirac (in $c = 0$ e $c = 1$) a cui corrisponde l'assunzione di una reazione chimica infinitamente veloce (approccio di *Bray-Moss-Libby* BML).

Il sistema più corretto ed elegante per valutare la distribuzione nel tempo e nello spazio della PDF, consiste nel risolvere una opportuna equazione di trasporto che è possibile ricavare in analogia alle equazioni di conservazione per le specie chimiche. Tuttavia, per evitare di dover chiudere i termini incogniti di questa nuova equazione utilizzando l'ipotesi di gradiente di diffusione, spesso si preferisce risolvere il trasporto di una *Joint*-PDF, ossia la funzione di densità di probabilità per velocità, temperatura e concentrazioni, modellando contemporaneamente anche la natura turbolenta del flusso [75]. L'equazione di trasporto per la *Joint*-PDF risulta chiusa nella maggior parte dei suoi termini (compreso il termine di sorgente chimica): rimangono da modellare alcuni termini legati al trasporto dovuto agli sforzi viscosi, alla fluttuazione di pressione e alla diffusività molecolare [22]. Questi termini vengono generalmente chiusi con metodologie analoghe a quelle usate per chiudere i termini nelle equazioni di trasporto per i termini del tensore di Reynolds [22], [75]. La soluzione numerica della *Joint*-PDF viene effettuata con metodi di tipo stocastico nei quali viene valutato il trasporto di un elevato numero di particelle che rappresentano diverse realizzazioni del flusso: le singole equazioni di trasporto vengono risolte con metodi di tipo Monte-Carlo ([77], [64]).

3.4.1 Modelli *local source*

I modelli *Local Source* prevedono la modellazione diretta del termine sorgente \widetilde{R}_k sulla base di espressioni empiriche basate su osservazioni di tipo fenomenologico. L'esempio classico di modello *Local Source* è il modello *Eddy Break Up* (d'ora in poi EBU) ideato da Spalding [59]. Il modello ipotizza che la reattività chimica possa essere descritta dalla reazione infinitamente veloce a passo singolo:



Si assume implicitamente che risulti $Re_T \gg 1$ e $Da \gg 1$: sotto queste ipotesi il tasso di produzione/distruzione della generica specie è dipendente unicamente al tasso di miscelazione turbolenta fra miscela fresca e prodotti di reazione ([75] e [6]). Ricordando che la frequenza caratteristica della miscelazione turbolenta è $\omega_T = (1/\tau_T) = (\varepsilon/k)$, avremo:

$$\widetilde{R}_k \propto \frac{\sqrt{\overline{Y_P''^2}}}{\tau_T}$$

Il RMS della fluttuazione $\overline{Y_P''^2}$ (che nell'ipotesi di reazione veloce a passo singolo è sufficiente a descrivere l'intera chimica del sistema) deve essere modellata così da poter essere espressa in funzione di grandezze medie. Generalmente si utilizza la seguente espressione:

$$\widetilde{R}_k = -\bar{\rho} C_{EBU} \frac{1}{\tau_T} \frac{\widetilde{Y}_F}{\widetilde{Y}_F^0} \left(1 - \frac{\widetilde{Y}_F}{\widetilde{Y}_F^0} \right)$$

dove \widetilde{Y}_F^0 è la concentrazione di combustibile nella miscela fresca e C_{EBU} è una costante empirica del modello.

Il modello può essere riformulato anche in termini di variabile di progresso c : in questo caso occorre fornire un'espressione per il termine sorgente $\Omega_c = \bar{\rho} \widetilde{\omega}_c$ nel quale compare la grandezza incognita $\overline{c''^2}$. Solitamente si usa la seguente espressione [59]:

$$\widetilde{\Omega}_c = \bar{\rho} \widetilde{\omega}_c = +\bar{\rho} C_{EBU} \frac{1}{\tau_T} \widetilde{c} (1 - \widetilde{c}) \quad (3.22)$$

Il modello EBU è ampiamente utilizzato nei codici CFD commerciali grazie alla estrema semplicità di implementazione. Il limite principale del modello è la totale mancanza di dipendenza dalla cinetica chimica del sistema,

che porta a frequenti sovrastime del tasso di reazione in tutte quelle zone interessate da elevato *stretching* (alti valori di ε/k). Tipico è il caso delle pareti solide dove l'ipotesi $Da \gg 1$ non è più valida e la fiamma è localmente laminare, lasciando alla cinetica chimica il controllo dell'evoluzione del sistema.

L'idea alla base del modello EBU è stata successivamente ripresa da Magnussen e Hjertager ([44]) per lo sviluppo del modello EDC, valido anche nel caso di fiamme non premiscelate. Più recentemente il modello EDC è stato ripreso da Magnussen e Gran ([23], [24]) rendendo possibile la gestione di meccanismi chimici dettagliati.

3.4.2 Approccio Flamelet

I modelli flamelet si basano direttamente sulle osservazioni che giustificano gli omonimi regimi di combustione individuati sul diagramma spettrale di Borghi. La fiamma turbolenta viene descritta come un insieme di flamelet, ossia di strutture laminari reattive/diffusive di spessore limitato, soggette ad un campo di turbolenza, idealmente non influenzato dalla combustione, avente scale spaziali caratteristiche maggiori dello spessore della flamelet [31]. Nei regimi in cui questa assunzione è verificata sperimentalmente (*Corrugated Flamelet* e *Thin Reaction Zone*), è possibile sostanzialmente disaccoppiare la soluzione della flamelet laminare da quella del campo di moto. La posizione della flamelet, ossia l'individuazione del fronte di fiamma medio, viene effettuata tramite la soluzione di opportuni scalari soggetti al campo di moto turbolento (ad esempio la variabile di progresso c), per i quali è necessario assumere la distribuzione probabilistica (PDF). Una volta individuata la posizione del fronte di fiamma, viene valutata la soluzione della fiamma laminare che descrive la flamelet, realizzando così il riaccoppiamento della struttura interna del fronte di fiamma, al campo di moto turbolento.

3.4.2.1 Il modello *Bray-Moss-Libby* (BML)

L'approccio BML, introdotto nel 1977 da Bray, Moss e Libby, si basa sulla variabile di progresso c definita in 3.20, alla quale vengono associati i valori di ogni altra grandezza scalare (temperatura e specie chimiche). Il modello, infatti, assume che il sistema reagisca secondo una reazione a passo singolo

infinitamente veloce ($F + O \rightarrow P$) ammettendo, implicitamente, che risulti $Da \gg 1$.

L'ipotesi di chimica infinitamente veloce corrisponde a ritenere che la flumelet abbia spessore infinitesimo e che la sua struttura interna preveda il passaggio istantaneo dalla condizione *unburnt* alla condizione *burnt*.

Dato lo spessore infinitesimo della flumelet, il modello assume che la probabilità di avere stati intermedi tra le condizioni *burnt* e *unburnt* sia virtualmente nulla, decretando una PDF costituita da due delta di Dirac posti, rispettivamente, in $c = 0$ e $c = 1$. L'approccio BML prevede, in altre parole, che l'ipotetico segnale costituito dal valore istantaneo di c nella generica posizione x , corrisponda alla distribuzione bimodale riportata in figura 3.15 [59].

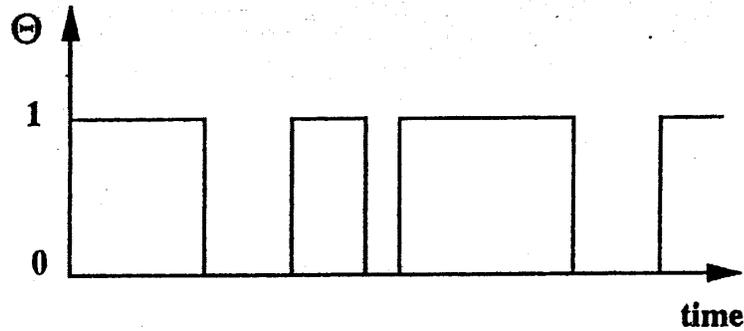


Figura 3.15: Intermittenza del valore di c nel generico punto x

Il modello BML prevede inoltre l'ulteriore ipotesi di pressione costante che porta alla seguente espressione per l'equazione di stato:

$$\rho_u T_u = \rho_b T_b$$

Generalmente si introduce il termine di rilascio termico (*heat release factor* o *expansion factor*), τ :

$$\tau = \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 = \frac{T_b}{T_u} - 1 \quad (3.23)$$

Dette $\alpha(\vec{x}, t)$ e $\beta(\vec{x}, t)$ le probabilità di avere $c = 0$ e $c = 1$, per la distribuzione bimodale assunta risulta:

$$\alpha(\vec{x}, t) + \beta(\vec{x}, t) = 1$$

Pertanto le densità media (*Reynolds averaged*) è determinata da:

$$\bar{\rho} = \alpha \rho_u + \beta \rho_b = (1 - \beta) \rho_u + \beta \rho_b$$

Osservando che risulta:

$$\bar{\rho c} = \bar{\rho} \tilde{c} = \rho_b \beta = \rho_b \bar{c}$$

Si ha immediatamente:

$$\bar{\rho} = \left(\frac{(1 - \tilde{c})}{\rho_u} + \frac{\tilde{c}}{\rho_b} \right)^{-1} = \rho_b \frac{1 + \tau}{1 + \tau \tilde{c}} = \frac{\rho_u}{1 + \tau \tilde{c}}$$

Da cui derivano:

$$\alpha = \frac{1 - \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}} \quad \beta = \frac{(1 + \tau) \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}}$$

In base alla relazione mostrata tra *Favre averaged* e *Reynolds averaged* di c , risulta, per la generica grandezza scalare Q [59]:

$$\tilde{Q} = \alpha \frac{\rho_u}{\bar{\rho}} \bar{Q}^u + \beta \frac{\rho_b}{\bar{\rho}} \bar{Q}^b = (1 - \tilde{c}) \bar{Q}^u + \tilde{c} \bar{Q}^b \quad (3.24)$$

dove \bar{Q}^u e \bar{Q}^b sono le medie condizionate di Q , rispettivamente, al valore di c nella miscela reagente e nei gas bruciati:

$$\bar{Q}^u = \int_{-\infty}^{+\infty} Q P(Q|c=0) dQ \quad \bar{Q}^b = \int_{-\infty}^{+\infty} Q P(Q|c=1) dQ$$

dove la funzione $P(Q|c = c^*)$ descrive la distribuzione probabilistica di Q (funzione di c), condizionata al valore $c = c^*$. Dal momento che le grandezze scalari quali temperatura (T) e concentrazione della generica specie k (Y_k), sono associate ai corrispondenti valori della flamelet laminare che, per le ipotesi fatte, ammette i soli valori *unburnt* e *burnt*, le due medie condizionate di T e Y_k , coincidono con i corrispondenti valori nella miscela fresca e nei gas bruciati, ed avremo quindi:

$$\tilde{T} = (1 - \tilde{c}) T_u + \tilde{c} T_b \quad \tilde{Y}_k = (1 - \tilde{c}) Y_{ku} + \tilde{c} Y_{kb}$$

Pertanto, per l'individuazione del campo di temperatura e concentrazioni, è sufficiente la soluzione dell'equazione di conservazione per la media Favre di c (vedi equazione 3.21). L'espressione incognita del termine sorgente $\tilde{\Omega}_c$ non può tuttavia essere dedotta dall'integrazione della PDF (per via della inconsistenza analitica della sua espressione matematica), ma deve essere costruita tramite opportune "chiusure". Nei prossimi paragrafi descriveremo i principali approcci utilizzati per la chiusura della 3.21, rimandando ai prossimi capitoli per la descrizione più accurata del modello adottato in questo lavoro.

Flame Surface Density

L'approccio forse più seguito per la chiusura del termine sorgente della 3.21 consiste nel far riferimento all'area della superficie del fronte di fiamma, stimando $\tilde{\Omega}_c$ tramite il prodotto tra la *Flame Surface Density* Σ (i.e. la quantità di superficie di fiamma per unità di volume [m^2/m^3]) e la velocità della reazione per unità di superficie del fronte di fiamma, ω_L :

$$\tilde{\Omega}_c = \bar{\rho}_u \omega_L \Sigma$$

Il valore di ω_L deve essere valutato risolvendo la fiamma laminare corrispondente alla flamelet locale, tenendo conto dello *stretching* a cui è soggetta nel campo di moto turbolento. L'espressione più semplice per ω_L è quella proposta da Bray [18]:

$$\omega_L = I_0 S_L^0$$

dove I_0 è il fattore di *stretching* della fiamma laminare, che richiede un modello specifico.

Per valutare Σ è possibile utilizzare semplici espressioni algebriche, come ad esempio quella proposta dallo stesso Bray [59]:

$$\Sigma = \frac{g}{\sigma_y} \frac{\tilde{c} (1 - \tilde{c})}{L_y}$$

dove g e σ_y sono costanti del modello e L_y , detta lunghezza di *wrinkling* (vedi figura 3.16), viene spesso assunta proporzionale alla lunghezza di scala integrale di turbolenza L_T .

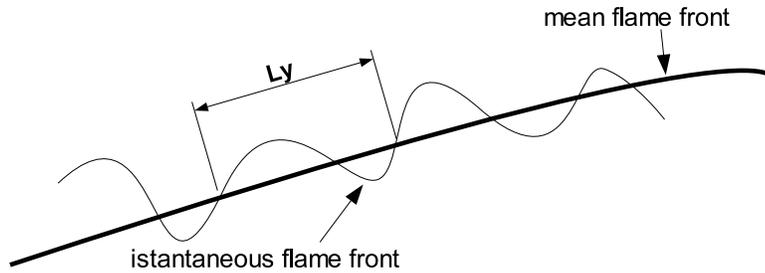


Figura 3.16: Significato della lunghezza di *wrinkling* L_y

Il *Coherent Flame Model*, inizialmente definito da Marble e Broadwell [31], prevede la valutazione puntuale di Σ tramite una specifica equazione di trasporto. Nel corso degli anni sono state proposte numerose formulazioni

per l'equazione di trasporto di Σ [18], [59]; è possibile fare riferimento alla seguente espressione generale:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\Sigma}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{\Sigma} \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{Sc} \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + \bar{\rho} (k_m \Sigma + k_t \Sigma - D) \quad (3.25)$$

dove k_m e k_t rappresentano gli effetti di *stretching* sulla superficie di fiamma indotti dal flusso medio e dal campo di turbolenza, mentre D è un generico termine di “consumo” necessario per limitare i valori di Σ . In letteratura sono stati proposte numerose “chiusure” per i termini incogniti k_m , k_t e D : una loro sistematica classificazione ed i risultati di un test di confronto sono riportati in [18] e [65].

Turbulent Flame Closure

Il modello basato sulla Turbulent Flame Closure (TFC), prevede la chiusura di $\tilde{\Omega}_c$ tramite l'uso di un'espressione algebrica, di natura empirica, per la velocità di propagazione turbolenta S_T [82]:

$$\tilde{\Omega}_c = \bar{\rho}_u S_T F_k |\nabla \tilde{c}| \quad (3.26)$$

dove il termine F_k è un fattore che permette di tenere conto dello *stretching* della fiamma laminare ($0 < F_k < 1$). L'espressione proposta per S_T è la seguente:

$$S_T = A u^{3/4} S_L^{0^{1/2}} D_t^{-1/4} L_T^{1/4}$$

dove A è una costante del modello tipicamente assunta pari a 0.5 [82].

E' interessante osservare che a causa della natura bimodale della PDF di c risulta:

$$|\nabla \tilde{c}| \approx \frac{\tilde{c} (1 - \tilde{c})}{L_b}$$

dove L_b è una lunghezza caratteristica della fiamma, dell'ordine dello spessore del *flame brush*. E' facile verificare che con questa semplificazione il modello TFC coincide con il *Flame Surface Density*, senza tuttavia prevedere una specifica equazione per Σ .

3.4.2.2 Trasporto turbolento

Per poter risolvere l'equazione 3.21, che descrive la conservazione della variabile di progresso \tilde{c} , occorre chiarire le modalità con cui si realizza il trasporto turbolento e definire un'espressione per il flusso turbolento incognito:

$$\bar{\rho} \widetilde{c'' u''_i} \quad (3.27)$$

A differenza delle comuni grandezze scalari inerti, la variabile di progresso c , ma in generale un qualsiasi scalare reattivo definito nell'ambito delle fiamme premiscelate, non consente di chiudere il trasporto turbolento, garantendo una validità generale, con la consueta ipotesi di gradiente di diffusione:

$$\bar{\rho} \widetilde{c'' u''_i} = -\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \quad (3.28)$$

E' infatti possibile verificare che in alcune condizioni, le fluttuazioni turbolente determinano una diffusione di c di verso opposto a quello stabilito dal segno del gradiente di c (*Gradient Diffusion*, GD): si parla comunemente di *Counter Gradient Diffusion* (CGD).

Per giustificare la tendenza al CGD, è utile richiamare il concetto di media condizionale. Indichiamo con \bar{u}_i^u e \bar{u}_i^b i valori medi condizionali delle tre componenti del vettore velocità. Per la 3.24 risulta:

$$\bar{\rho} \widetilde{c'' u''_i} = \bar{\rho} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) (\bar{u}_i^b - \bar{u}_i^u) \quad (3.29)$$

Dal momento che nel passaggio attraverso il fronte di fiamma risulta $\rho_b < \rho_u$, è lecito aspettarsi un'accelerazione del gas che rende positivo il segno di $\bar{\rho} \widetilde{c'' u''_i}$ secondo la 3.29. Tuttavia per la 3.28, essendo positivo il gradiente di \tilde{c} , il flusso turbolento presenta segno negativo [75].

La condizione $\bar{u}^b > \bar{u}^u$ non è vera sempre, in quanto dipende dalle caratteristiche del campo di moto e della fiamma: in altre parole la media condizionale del vettore velocità non ha un valore univoco come visto per temperatura e concentrazioni. Per questo motivo è necessario stabilire dei criteri che permettano di indicare i regimi nei quali si ha GD o CGD [59]. Purtroppo le valutazioni sperimentali di questo fenomeno risultano assai complesse ([56], [59]) mentre risultano estremamente esplicativi i pochi risultati di simulazioni DNS disponibili in letteratura [75] [49].

Dall'analisi dei calcoli di Rutland e Trouvè, emergono le seguenti considerazioni sulle caratteristiche del trasporto turbolento:

- All'aumentare dell'intensità di turbolenza si ha il progressivo passaggio dalla condizione di GD a quella di CGD. In particolare è possibile osservare una dipendenza dal parametro u'/S_L^0 .

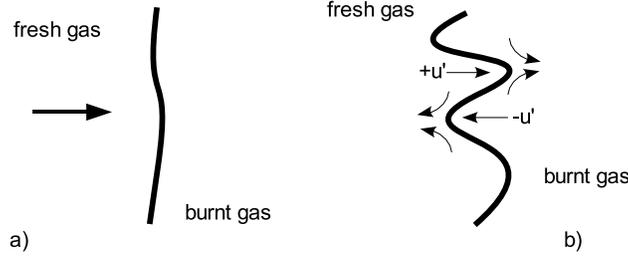


Figura 3.17: Effetto della turbolenza sul trasporto turbolento

Bassa turbolenza Il fronte di fiamma è moderatamente corrugato (vedi figura 3.17 (a)) e il salto di velocità $\bar{u}^b - \bar{u}^u$ è comandato principalmente dall'espansione indotta dal processo di combustione, quantificabile quindi dai corrispondenti valori laminari:

$$\bar{u}^b - \bar{u}^u \approx \tau S_L^0$$

Alta turbolenza Il fronte di fiamma viene fortemente corrugato dall'azione delle fluttuazioni di velocità (figura 3.17 (b)): il salto di velocità può essere stimato con la semplice espressione lineare:

$$\bar{u}^b - \bar{u}^u \approx 2\alpha u'$$

dove la costante α ha valori prossimi all'unità per alte intensità di turbolenza, tendendo progressivamente a zero al ridursi di u' [75].

- Sulla base delle considerazioni svolte è possibile definire un numero adimensionale caratteristico del trasporto turbolento di c , che permette di stabilire un criterio di transizione tra GD e CGD. Il numero di Bray è definito da:

$$N_b = \frac{\tau S_L^0}{2\alpha u'} \quad (3.30)$$

per valori sufficientemente alti dell'intensità di turbolenza ($N_b < 1$) la fiamma non è in grado di alterare la consueta dinamica del trasporto turbolento (proporzionale al gradiente dello scalare, GD), mentre per valori bassi di turbolenza ($N_b > 1$), l'espansione dovuta al rilascio di calore, e quindi l'inversione del trasporto, domina sul meccanismo turbolento, decretando il CGD. Per valori di τ compresi tra 5 e 7 (tipici dei comuni campi di impiego), si ha CGD per $u'/S_L^0 < 3$ [75].

- E' interessante visualizzare i regimi GD e CGD sul diagramma spettrale di Borghi, seguendo la schematizzazione proposta da Veynante [75] (vedi figura 3.18). A seconda dell'intensità del rilascio termico (τ), la linea di separazione tra GD e CGD si sposta tra i regimi di *Wrinkled Flamelet* e *Corrugated Flamelet*: il regime *Thin Reaction Zone* non sembra poter essere compatibile con il trasporto contro gradiente, almeno per valori sufficientemente alti del numero di Reynolds Turbolento ($Re_T > 100$).

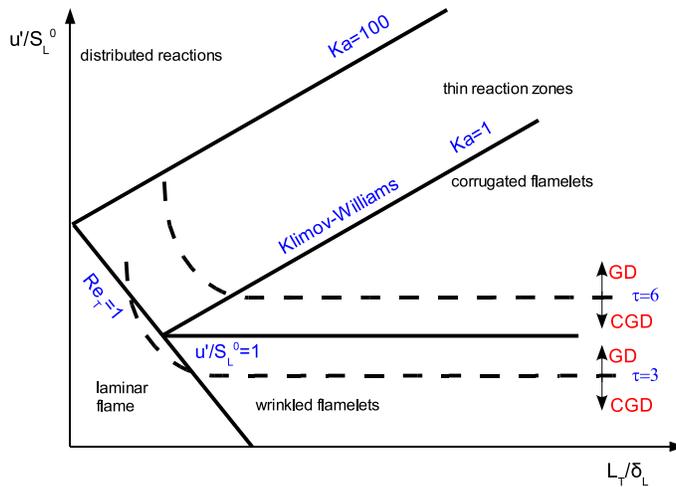


Figura 3.18: Individuazione dei regimi di GD e CGD sul diagramma di Borghi

- L'analisi svolta presuppone una pressione costante: la presenza di gradienti di pressione positivi verso i gas bruciati, tende a favorire il regime CGD. Inoltre, la metodologia proposta per individuare il meccanismo di trasporto turbolento, è valida solo in relazione alle caratteristiche nominali della fiamma, rilevate con riferimento alla miscela reagente. Non si può quindi escludere che per fiamme nominalmente operanti nel regime GD, possano localmente essere interessate da CGD: zone soggette a laminarizzazione (pareti, scie) e l'aumento della dissipazione viscosa nelle regioni ad alta temperatura, possono giustificare meccanismi di trasporto locale contro gradiente.
- Dobbiamo precisare che le considerazioni fin qui svolte si basano essenzialmente su analisi DNS svolte negli ultimi 8-10 anni e benché siano stati individuati i criteri generali che regolano la transizione tra GD e CGD, molti aspetti rimangono ancora da chiarire.

Nonostante la rilevanza che il CGD sembra manifestare, almeno in alcuni regimi di combustione, non esistono attualmente modelli capaci di predire il CGD con sufficiente generalità in simulazioni RANS tridimensionali [56]. L'approccio utilizzato è, in ogni caso, basato sulla soluzione del flusso turbolento $\bar{\rho} \widetilde{c'' u''_i}$ mediante una specifica equazione di trasporto. L'equazione viene derivata e chiusa in combinazione con la soluzione completa di tutti i termini del tensore di Reynolds (*Reynolds Stress Model*) [3], [47] e [1]. L'operazione di chiusura richiede la modellazione di numerosi termini incogniti, rendendo estremamente incerta la procedura obbligando al contempo all'uso di schemi di discretizzazione di ordine elevato per via della estrema rigidità numerica che accompagna la soluzione diretta dei momenti di ordine superiore [59]. Nell'analisi comparativa dei risultati fra chiusura secondo il gradiente di diffusione e mediante il trasporto dei momenti, si osservano differenze apprezzabili solo in presenza di forti rilasci termici ($\tau > 6 - 7$) a fronte di un sensibile aumento dei tempi di calcolo (più che raddoppiati) [47].

Dobbiamo inoltre rilevare che il campo di indagine del presente lavoro è la combustione magra premiscelata nelle moderne turbine a gas che, come visto nel paragrafo §3.3.2, operano in una zona del diagramma spettrale difficilmente interessata dal CGD (bassi valori di τ [3 - 4] ed elevata intensità di turbolenza [$u'/S_L^0 < 10$]). Riteniamo quindi che le complicazioni necessarie alla trattazione del CGD esulino dagli scopi della presente indagine e, quando ci riferiremo all'approccio BML, riterremo quindi valida la consueta chiusura con l'ipotesi di gradiente di diffusione.

3.4.2.3 *Level Set Method*

Per poter descrivere il fronte di fiamma istantaneo senza ricorrere all'uso di uno scalare reattivo, che abbiamo visto determina numerose incertezze nella chiusura del termine di trasporto turbolento, è possibile definire un apposito scalare non reattivo G che costituisce il valore della generica curva di livello della fiamma. In regime laminare è possibile dedurre un'equazione di trasporto dello scalare G dal bilancio cinematico fra la velocità del flusso e la velocità di propagazione del fronte di fiamma, descritto, convenzionalmente, dalla isolina $G = G_0$:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = S_L |\nabla G| \quad (3.31)$$

L'equazione 3.31 (denominata semplicemente *G-equation*) descrive l'evoluzione del fronte di fiamma attraverso il valore dello scalare G : l'equazione è formalmente valida solo in corrispondenza di $G = G_0$ ed è del tutto indipendente dai valori di G al di fuori del fronte. Generalmente si definisce la funzione $G(\vec{x}, t)$ (per $G \neq G_0$) come la distanza dal fronte di fiamma: in questo modo il significato fisico di G è proprio quello di una curva di livello della fiamma premiscelata [56].

La *G-equation* si presta assai bene alla soluzione di fiamme premiscelate nell'ambito di simulazioni DNS e LES ([59]), mentre risulta meno chiara la sua formulazione *Favre averaged*. La definizione di una teoria per applicare la *G-equation* alla soluzione delle RANS è interamente dovuta al recente lavoro di Peters ([56]), che propone una formulazione unificata della *G-equation* valida nei regimi *Corrugated Flamelet* e *Thin Reaction Zone*: nei capitoli successivi verranno analizzate in maniera dettagliata le basi teoriche dell'approccio derivato da Peters e verrà descritta l'implementazione qui proposta di un modello flamelet basato sulla *G-equation*.

3.4.3 Turbulent flame stretch

Nel paragrafo §3.2.1 abbiamo introdotto il concetto di *stretching* ed analizzato i suoi effetti su una fiamma laminare. In una fiamma turbolenta, almeno finché risulta valido il regime di flamelet, è necessario stimare l'effetto del campo di turbolenza sullo *stretching*. Il valore locale dello *stretching* in una fiamma laminare è quantificato dall'equazione 3.8, che riportiamo qui per chiarezza, con il significato di *stretching* istantaneo in regime turbolento:

$$K = \nabla_t \cdot \vec{u} + S_L \nabla_t \cdot \vec{n}$$

In linea di principio è possibile applicare alla 3.2.1 la definizione di media alla Favre ma la forte non linearità dei termini $u_i n_i$ presenti richiederebbe la chiusura di numerose correlazioni rimaste incognite dopo l'operazione di media, analogamente a quanto necessario per la chiusura delle RANS. Generalmente, quindi, si preferisce quantificare lo *stretching* tramite opportuni modelli che esprimano lo *strain* medio del flusso con grandezze caratteristiche del campo di turbolenza [54].

Questo modo di procedere deve essere interpretato in maniera del tutto analoga alla modellazione della frequenza turbolenta caratteristica che

viene considerata in numerosi modelli per fiamme premiscelate. Ci riferiamo, ad esempio, ai modelli EBU, EDC e BML che assumono (nell'ipotesi di $Da \gg 1$) una proporzionalità tra il *reaction rate* e l'inverso di un tempo turbolento caratteristico ($1/\hat{\tau}$). Anche nel caso dei modelli flamelet, quindi, si quantifica lo *stretching* a cui è sottoposta la struttura laminare interna (avente le dimensioni [s^{-1}]), con una frequenza turbolenta caratteristica [59].

Un primo criterio per valutare lo *stretching* medio consiste nel considerare una proporzionalità con l'inverso della scala temporale integrale di turbolenza (modelli EBU):

$$\tilde{K} \approx \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.32)$$

Alcuni autori propongono invece di stimare \tilde{K} tramite la lunghezza di scala di Kolmogorov (ad esempio i modelli EDC):

$$\tilde{K} \approx \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} \quad (3.33)$$

L'espressione 3.33 porta generalmente a valori dello *stretching* medio superiori (di un fattore $\sqrt{\text{Re}_T}$) a quelli predetti dalla 3.32, determinando una sovrastima dell'effetto in condizioni di *strain* elevato (ad esempio a parete). Infatti, benché i microvortici abbiano frequenza caratteristica molto più alta, giustificando uno *stretching* più elevato, la loro vita media è molto minore di quella delle strutture di moto integrali [54].

Non esistono tuttavia motivi validi per assumere a priori che il fenomeno sia governato da l'una o l'altra scala ma è lecito supporre che siano coinvolte un gran numero di scale temporali da quelle di Kolmogorov alla scala integrale. Basandosi sui risultati di una simulazione DNS nella quale viene

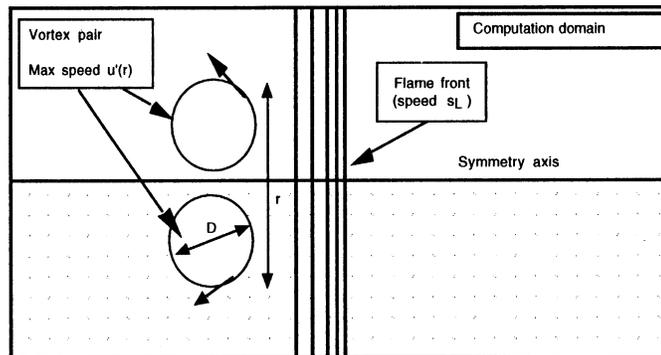


Figura 3.19: Impostazione della simulazione DNS in [49]

investigata l'interazione tra due vortici controrotanti e un fronte di fiamma laminare (vedi figura 3.19), Meneveau e Poinso ([49]) hanno dedotto una correlazione per tenere conto dell'azione sulla fiamma di un ampio *range* di scale temporali: la correlazione viene espressa come funzione di efficienza da applicare alla definizione di *stretching* medio data dalla 3.33:

$$\tilde{K} = \alpha_0 \Gamma_k \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.34)$$

essendo α_0 una costante. La funzione Γ_k , detta ITNFS (*Intermittent Net Flame Stretch*), viene valutata tramite:

$$s = \log \left(\frac{L_T}{\delta_L} \right) \quad \sigma_1 = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{2} \exp \left[- \left(\frac{u'}{S_L^0} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \right)$$

$$\log(\Gamma_k) = -\frac{1}{(s+0.4)} \exp[-(s+0.4)] + \{1 - \exp[-(s+0.4)]\} (\sigma_1 s - 0.11)$$

La funzione presenta una forte dipendenza dal rapporto L_T/δ_L ed una più contenuta dipendenza da u'/S_L^0 : è interessante notare come Γ_K cresca indefinitamente al crescere di L_T/δ_L , in modo da rendere ragione del continuo aumento di Re_T [59].

Il modello ITNFS può essere usato in un qualsiasi approccio flamelet, in modo da avere una stima fisicamente consistente dello *stretching* medio.

Capitolo 4

Eddy Dissipation Concept

Contenuto

4.1	Introduzione	82
4.2	Il modello EDC	82
4.2.1	<i>Fast Chemistry</i>	84
4.3	Modelli EDC e cinetica chimica	87
4.3.1	Modelli EDC ibridi	88
4.3.1.1	<i>Hybrid reaction rate</i>	88
4.3.1.2	<i>Combined time scale</i>	89
4.3.1.3	<i>Unmixedness factor</i>	90
4.3.2	Modello EDC-DC <i>Detailed Chemistry</i>	91
4.3.2.1	Isteresi del reattore PSR	94
4.4	Implementazione nel codice STAR-CD™	98
4.4.1	Integrazione con il solutore CFD	103
4.5	Validazione del modello	106
4.5.1	Modelli di turbolenza impiegati nei test di validazione	110
4.5.2	<i>Bluff Body Burner</i>	111
4.5.2.1	Simulazioni in condizioni reattive	113
4.5.3	<i>Jet Flame</i>	119
4.5.3.1	Simulazioni in condizioni reattive	120
4.5.4	<i>Vitiated Coflow Burner</i>	126
4.5.5	<i>Vanderbilt Combustor</i>	135
4.5.5.1	Simulazioni in condizioni reattive	139
4.5.6	Bruciatore k160a NP	157
4.5.6.1	Simulazioni in condizioni reattive	158

4.6 Considerazioni finali 168

In questo capitolo, illustreremo le basi teoriche la classificazione e l'implementazione di una libreria di modelli basati sull'Eddy Dissipation Concept. Descriveremo le recenti estensioni al modello proposte da vari ricercatori, che consentono di adottare una chimica complessa e meccanismi chimici dettagliati.

4.1 Introduzione

Il modello EDC si basa sull'assunzione che il processo di combustione possa effettivamente realizzarsi solamente alle scale spaziali più piccole, dove il miscelamento fra i componenti (nel senso più generale, ossia i vari reagenti nelle fiamme di diffusione o i gas combustibili con i gas freschi nelle fiamme premiscelate) si sviluppa a livello molecolare (si tratta della scala spaziale L_k di Kolmogorov già introdotta in § 2.2.1, eq. 2.9). In base alla classica teoria *Energy Cascade*, la velocità del processo di miscelamento turbolento è proporzionale a ε/k . Come accennato nel capitolo precedente, l'Eddy Dissipation Concept deriva dal modello Eddy Break Up di Spalding: la principale differenza consiste nel supporre che la reazione non possa svilupparsi a meno che i reagenti non siano fra loro miscelati a livello molecolare e a temperature sufficientemente alte. Con questa assunzione, il modello EDC originale assume una dipendenza diretta tra il termine sorgente e la concentrazione della specie localmente limitante (reagente o prodotto).

Come vedremo più avanti, il modello è stato ulteriormente sviluppato in modo da poter gestire meccanismi chimici dettagliati: l'idea è quella di trattare le microstrutture di moto, nelle quali si realizzano le condizioni idonee alla reazione chimica secondo le modalità prima esposte, come dei reattori perfettamente miscelati o *Perfectly Stirred Reactor* (d'ora in poi solo PSR).

4.2 Il modello EDC

E' noto che nei flussi turbolenti, i cosiddetti fenomeni di microscala, responsabili del miscelamento molecolare fra le varie specie e della dissipazione di energia cinetica turbolenta in energia interna, sono fortemente disuniformi

e concentrati in isolate zone dello spazio il cui volume costituisce una piccola parte del volume complessivo del sistema [19].

Queste regioni, chiamate generalmente *Fine Structures* (d'ora i poi solo FS), sono rappresentabili tipicamente da vortici o filetti piani (la loro struttura geometrica è in ogni caso fortemente dipendente dal campo di moto e dalla geometria in esame) ed hanno dimensioni caratteristiche dell'ordine di L_k , la lunghezza di scala di Kolmogorov [42].

Le FS sono responsabili della dissipazione di energia meccanica in energia interna. E' pertanto possibile assumere che all'interno delle FS, le varie specie chimiche siano fra loro miscelate a livello molecolare: esse costituiscono quindi la "zona di reazione" in un flusso turbolento¹, sia in presenza di reagenti non uniformemente distribuiti (fiamme non premiscelate), sia in condizioni di frazione di miscela costante (fiamme premiscelate) [43]. Una tale distribuzione delle zone di reazione è stata osservata sperimentalmente con metodi ottici da Bilger (1988).

Per poter sfruttare queste considerazioni nell'ambito di un modello di combustione, è necessario poter quantificare le entità del volume occupato dalle FS e della portata scambiata fra le FS e il fluido circostante. Sfruttando le conclusioni di un'analisi dimensionale del processo di *energy cascade* (riportata in appendice D), Magnussen [42] ha dedotto alcune espressioni per quantificare le grandezze cercate. In particolare è possibile valutare il rapporto fra il volume occupato dalle FS e il fluido circostante tramite [19]:

$$\gamma^* = \left(\frac{3C_{D2}}{4C_{D1}^2} \right)^{3/4} \left(\frac{\nu\varepsilon}{k^2} \right)^{3/4} \quad (4.1)$$

La massa scambiata nell'unità di tempo fra le FS e il fluido circostante, per unità di massa contenuta nelle FS, è data da:

$$\dot{m}^* = \left(\frac{3}{C_{D2}} \right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2} \quad (4.2)$$

¹lo schema EDC descritto da Magnussen e in una recente review da Ertesvag ([19]) costituisce una diversa spiegazione del regime flamelet. Le FS, come le flamelet, costituiscono la sola regione della fiamma turbolenta in cui si esplica la reazione chimica. Il modello EDC, tuttavia, non prevede la soluzione di una fiamma laminare vera e propria per le FS, ma assume localmente una condizione di *mixing* perfetto, lasciando alla cinetica chimica il controllo dell'evoluzione del processo. Per non alterare lo schema proposto dagli autori continueremo, nell'ambito del modello EDC, ad utilizzare il termine FS

Essa ha le dimensioni di $[s^{-1}]$ è rappresenta quindi la frequenza di svuotamento delle FS o, in altre parole, il tempo di residenza del fluido al suo interno:

$$\tau^* = \frac{1}{\dot{m}^*} = \left(\frac{C_{D2}}{3} \right)^{1/2} \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (4.3)$$

E' possibile, infine, esprimere la massa scambiata fra FS e fluido circostante, nell'unità di tempo per unità di massa complessiva:

$$\dot{m} = \dot{m}^* \cdot \gamma^* = \left(\frac{3}{4C_{D1}} \right) \left(\frac{12C_{D2}}{C_{D1}^2} \right)^{3/4} \left(\frac{\nu\varepsilon}{k^2} \right)^{3/4} \frac{\varepsilon}{k} \quad (4.4)$$

I valori delle costanti del modello dedotti dagli autori sono [22], [19]:

$$C_{D1} = 0.135 \quad (4.5)$$

$$C_{D2} = 0.5 \quad (4.6)$$

Come confermato da molti autori, nell'applicazione su casi pratici, è spesso necessario intervenire sui valori delle costanti [59], anche a causa della frequente incertezza sulle condizioni al contorno delle grandezze turbolente caratteristiche.

4.2.1 *Fast Chemistry*

Nell'ipotesi che il processo di combustione possa essere descritto dalla reazione infinitamente veloce a passo singolo $F + O \rightarrow P$, l'evoluzione del sistema sarà limitata esclusivamente dallo scambio di massa tra le FS e il fluido circostante. Supponendo che la reazione si sviluppi in tutte le FS, avremo [45]:

$$\widetilde{R}_F = \widetilde{\rho} \cdot \dot{m} \cdot \bar{Y}_{\min}$$

dove:

$$\hat{Y}_{\min} = \min \left[\bar{Y}_F, \frac{\bar{Y}_O}{r_F} \right]$$

rappresenta la specie limitante.

Il termine r_F rappresenta il quantitativo stechiometrico di ossigeno richiesto per la reazione, in modo che risulti:



Per semplificare la trattazione introdurremo le seguenti normalizzazioni:

$$\hat{Y}_F = \frac{\bar{Y}_F}{1.0} \quad \hat{Y}_O = \frac{\bar{Y}_O}{r_F} \quad \hat{Y}_P = \frac{\bar{Y}_P}{1 + r_F}$$

Generalmente non tutte le FS hanno temperatura sufficientemente alta per reagire: la frazione di FS in grado di reagire può essere stimata considerando la frazione di prodotti di reazione presente nel volume di controllo:

$$\chi = \frac{(\hat{Y}_P)}{(\hat{Y}_P + \hat{Y}_F)} \quad (4.7)$$

Pertanto, il tasso di produzione si modifica come segue [45]:

$$\boxed{\tilde{R}_F = \tilde{\rho} \frac{\gamma^* \cdot \chi \cdot \hat{Y}_{\min}}{\tau^*}} \quad (4.8)$$

L'eq. 4.8 rappresenta l'espressione originale del modello EDC di Magnussen, nell'ipotesi di chimica veloce². Il modello, in questa sua forma, è stato implementato in numerosi codici di calcolo commerciali, ed è stato utilizzato con successo in numerose applicazioni ([6]).

Nel corso degli anni, Magnussen ed altri ricercatori hanno modificato l'espressione del *reaction rate* con l'intento, principalmente, di valutare in maniera più corretta la frazione χ delle FS in grado di reagire. Nell'ambito del presente lavoro utilizzeremo due espressioni, proposte dallo stesso Magnussen:

1. **Magnussen78** - Magnussen et al., 1978
2. **Magnussen89** - Magnussen, 1989

Di seguito riporteremo le espressioni del tasso di produzione per i due modelli. Considerando i valori dei coefficienti C_{D1} e C_{D2} riportati nella eq. 4.5 e segg., risultano comuni ai due modelli le seguenti espressioni per γ^* , τ^* :

$$\gamma^* = 9.7 \cdot \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{3/4} \quad (4.9)$$

²d'ora in poi ci riferiremo ai modelli EDC per chimica veloce, usando l'acronimo EDC-FC (*Fast Chemistry*)

$$\tau^* = 0.41 \cdot \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \quad (4.10)$$

I due modelli si intendono applicati al caso di reazione chimica infinitamente veloce a passo singolo del tipo $F + O \rightarrow P$, per la quale il termine r_F rappresenta la massa stechiometrica di ossidante.

Magnussen78 Come accennato in precedenza si tratta del modello originale ideato da Magnussen. Riportiamo per chiarezza le espressioni complete:

$$\begin{aligned} \widetilde{\dot{R}}_F &= \widetilde{\rho} \frac{\gamma^* \cdot \chi \cdot \hat{Y}_{\min}}{\tau^*} \\ \chi &= \frac{(\hat{Y}_P)}{(\hat{Y}_P + \hat{Y}_F)} \\ \hat{Y}_{\min} &= \min \left[\bar{Y}_F, \frac{\bar{Y}_O}{r_F} \right] \end{aligned}$$

Magnussen89 La frazione di FS in grado di reagire viene in questo caso valutata tramite:

$$\chi = \frac{(\hat{Y}_P / \gamma^{*2/3})}{(\hat{Y}_P + \hat{Y}_F)} \cdot R_{ij} \quad (4.11)$$

dove è stato aggiunto il termine R_{ij} che permette di tenere conto della non premiscelazione dei reagenti. Il suo valore viene valutato tramite:

$$R_{ij} = \frac{(\hat{Y}_{\min} + \hat{Y}_P)^2}{(\hat{Y}_F + Y_P)(\hat{Y}_O + \hat{Y}_P)} \quad (4.12)$$

E' facile verificare che R_{ij} vale 1.0 nel caso di fiamma premiscelata stechiometrica. L'espressione consigliata da Magnussen per il *reaction rate* è:

$$\widetilde{\dot{R}}_F = \widetilde{\rho} \frac{\gamma^* \cdot \chi \cdot \eta \cdot \hat{Y}_{\min}}{\tau^* \cdot (1 - \chi \cdot \gamma^*)} \quad (4.13)$$

Il fattore $\eta \geq 1$ è stato introdotto per tenere conto della sottostima del tasso di reazione nelle zone di rilassamento delle fiamme premiscelate (“*postflame*”) ([43]). Il fattore correttivo η viene valutato tramite:

$$\eta = \frac{1}{\gamma^{*2/3}}$$

con la seguente limitazione:

$$\eta \cdot \frac{\hat{Y}_{min}}{\hat{Y}_P + \hat{Y}_F} \leq 1$$

4.3 Modelli EDC e cinetica chimica

La limitazione imposta dalla totale indipendenza dei modelli EDC-FC dalla stechiometria della reazione e dalla reale velocità della chimica in gioco, rende questa famiglia di modelli di fatto inutilizzabile nello studio di dispositivi di combustione di interesse tecnico. Abbiamo infatti più volte osservato come i combustori per TAG operino con numeri di *Damköhler* prossimi all’unità per i quali non si può ritenere trascurabile la cinetica chimica.

Inoltre, come vedremo poi dall’analisi dei risultati, i combustori reali sono caratterizzati da frequenti fenomeni di estinzione locale della fiamma, anche in zone dove la struttura del campo di moto giustificherebbe la presenza della fiamma. Questo comportamento è legato sia alla disuniformità della composizione della miscela reagente sia all’effetto di *quenching* indotto dalle pareti raffreddate del combustore.

La necessità di abbinare alle buone prestazioni e alla facilità di implementazione dei modelli EDC-FC, la capacità di cogliere gli effetti descritti, ha spinto numerosi ricercatori nel corso degli ultimi 10-15 anni, a ideare una serie di formulazioni approssimate per tenere conto, in qualche misura, del valore finito della velocità di reazione. Descriveremo quindi i tre approcci utilizzati nell’ambito di questo lavoro, rimandando alle parti dedicate al commento dei risultati per una valutazione critica delle loro caratteristiche.

Concluderemo questa sezione descrivendo l’estensione allo schema EDC classico che permette di abbinare al modello meccanismi chimici dettagliati.

4.3.1 Modelli EDC ibridi

4.3.1.1 Hybrid reaction rate

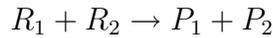
Il sistema più usato nel corso degli anni per sopperire ai limiti del modello EDC-FC, consiste nell'assumere, localmente, un tasso di reazione effettivo pari al minimo fra il *reaction rate* predetto dal modello EDC-FC, e il *reaction rate* predetto dal modello cinetico di Arrhenius (vedi [32], [53], [74], [60] e [73]). Nelle stesse ipotesi di reazione a passo singolo indicate nella sezione precedente, avremo:

$$\widetilde{R}_F = - \min \left[\overline{R}_{FEDC}, \overline{R}_{Fk} \right] \quad (4.14)$$

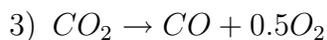
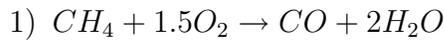
dove \overline{R}_{FEDC} , rappresenta il reaction rate predetto dal modello EDC-FC semplice. Con questo approccio è possibile rendere sensibile lo schema numerico alla velocità finita delle reazioni in gioco. E' chiaro che questo modo di procedere deve essere usato con cautela, in quanto si basa sull'assunzione che il termine cinetico \overline{R}_{Fk} , possa essere valutato utilizzando grandezze medie.

E' possibile rendere più efficiente l'approccio EDC ibrido, ammettendo la possibilità che la combustione possa svilupparsi attraverso numero di reazioni chimiche. Questo consente, ad esempio, di poter gestire miscele costituite da diverse specie combustibili e permette di valutare, in maniera in ogni caso approssimata, la concentrazione di specie chimiche intermedie (quali ad esempio *CO*).

E' quindi possibile usare meccanismi di reazione globali (vedi ad esempio 2.4), costituiti da reazioni organizzate nella forma:



Per quanto riguarda la combustione del gas naturale si utilizzano, tipicamente, meccanismi con un massimo di 4 reazioni costitutive. Nell'ambito di questo lavoro, abbiamo frequentemente fatto riferimento al seguente meccanismo globale codificato da Nicol e collaboratori [53]:



I *reaction rate* globali delle 3 reazioni sono espressi da:

$$\dot{R}_1 = 10^{15.220} [CH_4]^{1.460} [O_2]^{0.5217} \exp\left(-\frac{20643}{T}\right) \quad (4.15)$$

$$\dot{R}_2 = 10^{14.902} [CO]^{1.6904} [O_2]^{1.570} \exp\left(-\frac{11613}{T}\right) \quad (4.16)$$

$$\dot{R}_3 = 10^{14.349} [CO_2]^{1.0} \exp\left(-\frac{62281}{T}\right) \quad (4.17)$$

il meccanismo è stato ottenuto mediante un procedimento di *tuning* dei parametri caratteristici di Arrhenius confrontando le soluzioni di un reattore chimico ($\phi \leq 0.7$) ottenute con un meccanismo di reazione dettagliato e con lo schema a 3 passi proposto [53]. Il meccanismo è stato utilizzato dagli autori per lo studio di un combustore LPC di TAG con buoni risultati [53].

Dal momento che l'introduzione di un meccanismo di reazione, anche se semplificato, decreta la capacità del modello complessivo di apprezzare la reale stechiometria del sistema, è corretto eliminare le limitazioni imposte ai *reaction rate* delle espressioni originarie, pensate come condizioni di realizzabilità fisica dei modelli ED-FC. Con riferimento, ad esempio, al modello **Magnussen89** basterà imporre $\chi = 1$ nell'equazione 4.13.

4.3.1.2 Combined time scale

Un secondo metodo per poter tenere conto del valore finito della velocità di reazione, consiste nell'alterare il valore della frequenza di miscelazione delle FS, $1/\tau^*$, in modo che risulti influenzato anche dal tempo caratteristico della reazione chimica [42], [58].

Supponendo, ad esempio, uno meccanismo globale a tre passi come quello descritte dalle 4.15 e seguenti, è possibile stimare, per ciascuna reazione, un tempo cinetico caratteristico:

$$\tau_j = \frac{\tilde{\rho} \bar{Y}_{R1j}}{|\dot{R}_{jk}|} \quad j = 1 \dots 3$$

Ricordando che il tempo caratteristico, τ_{EDC} , del modello EDC è sostanzialmente proporzionale a $1/\dot{m}$ (vedi eq. 4.4), possiamo considerare, come tempo caratteristico per l'evoluzione del processo, il contributo combinato di τ_{EDC} e τ_k . Il tempo caratteristico della reazione sarà perciò dato da:

$$\tau_R = \tau_{EDC} + \tau_k \quad (4.18)$$

A questo punto il *reaction rate* complessivo della reazione viene valutato con la classica espressione EDC-FC, in una delle formulazioni viste in precedenza (vedi eq. 4.8, 4.13).

4.3.1.3 *Unmixedness factor*

Per tenere conto delle reali condizioni locali in cui si sviluppa la fiamma, Polifke e collaboratori ([61]) hanno proposto un modello, basato su una formulazione analoga di Phillip et al. ([58]), per valutare il *reaction rate* effettivo a partire dai valori \dot{R}_{jEDC} e \dot{R}_{jkin} stimati, per la generica reazione j dall'espressione EDC-FC e da un modello cinetico. L'espressione proposta è la seguente:

$$\frac{1}{\dot{R}_j} = \frac{\eta}{\dot{R}_{EDC}} + \frac{(1-\eta)}{\dot{R}_{kin}} \quad (4.19)$$

dove è stato introdotto il termine η detto *unmixedness factor* valutato tramite l'espressione:

$$\eta = \tanh \left(C_\eta \left| \nabla \tilde{T} \right| \frac{L_T}{\tilde{T}} \right) \quad (4.20)$$

dove la funzione \tanh è stata scelta in quanto pone una condizione di realizzabilità al modello essendo analiticamente limitata tra 0 e 1. L'idea alla base del modello proposto è quella di supporre che nelle zone in cui il gradiente di \tilde{T} è elevato ($\eta \rightarrow 1$), e quindi presumibilmente elevate le fluttuazioni di temperatura, la reazione sia comandata dal *mixing* turbolento. Viceversa, nelle zone caratterizzate da bassi gradienti di \tilde{T} ($\eta \rightarrow 0$), si può ritenere che l'evoluzione sia limitata dalla cinetica chimica, potendo inoltre stimare il *reaction rate* medio a partire dai valori medi per via delle contenute fluttuazioni di temperatura.

Abbiamo implementato in abbinamento ad un meccanismo di reazione a 3 passi analogo a quello visto in precedenza, seguendo le stesse indicazioni già chiarite per il modello EDC *hybrid*, per quanto riguarda il trattamento delle condizioni di realizzabilità per il termine EDC-FC.

Benché richieda un frequente aggiustamento della costante caratteristica C_η (compresa tra 5 e 10, [35] e [60]), il modello è in grado di descrivere con buona accuratezza la struttura della fiamma senza tuttavia apportare significative migliorie, per quanto riguarda la stima delle concentrazioni di CO , rispetto agli approcci visti in precedenza.

4.3.2 Modello EDC-DC *Detailed Chemistry*

Abbiamo accennato all'inizio di questo paragrafo alle modalità con cui è possibile dotare il modello EDC classico della capacità di gestire una chimica complessa e, quindi, dei meccanismi dettagliati di reazione. Vediamo adesso nel dettaglio la struttura del modello EDC-DC (*Detailed Chemistry*).

Nella descrizione del modello di dissipazione dei vortici proposto da Magnussen, abbiamo più volte ricordato che esso si basa sull'assunzione che la reazione chimica possa svilupparsi solo in corrispondenza delle scale spazio temporali più piccole (Kolmogorov), e che le regioni dello spazio interessate da tali strutture sono dette *Fine Structures* - FS. Solo nelle FS, infatti, i reagenti (in senso lato) raggiungono il grado di miscelazione necessario allo sviluppo della reazione chimica.

Sotto queste ipotesi, pertanto, l'evoluzione del processo di combustione, è limitato dalla velocità con cui il fluido contenuto nelle FS si miscela con il fluido circostante. In altre parole, possiamo esprimere il tasso di produzione/distruzione della generica specie k tramite [22], [78]:

$$\boxed{\tilde{R}_k = \tilde{\rho}\tilde{\omega}_k = -\tilde{\rho}\frac{\tilde{\gamma}^{*2/3}}{\tau^*} (Y_k^0 - Y_k^*)} \quad (4.21)$$

dove l'apice "0" verrà usato d'ora in poi per indicare le grandezze relative al fluido circostante le FS, al quale ci riferiremo con l'acronimo SF (*Surrounding Fluid*).

Il legame fra la concentrazione media della generica specie k e i corrispondenti valori nel SF e nelle FS è dato da:

$$\bar{Y}_k = (1 - \gamma^*) \cdot Y_k^0 + \gamma^* \cdot Y_k^* \quad (4.22)$$

Ossia la composizione media locale è data dalla media pesata fra la composizione del SF e delle FS ([43], [22], [78])

L'idea alla base del modello EDC-DC consiste nel considerare le FS come dei reattori chimici omogenei a pressione costante. Ricordando le ipotesi di perfetta miscelazione dei reagenti all'interno delle FS, il reattore che le descrive è un reattore Perfettamente Miscelato o *Perfectly Stirred Reactor* - PSR. In figura 4.1 è riportata una rappresentazione schematica della discretizzazione proposta. La geometria del reattore è univocamente determinata una volta fissato il tempo di residenza nominale pari a:

$$\tau = \frac{\rho \cdot V}{\dot{m}}$$

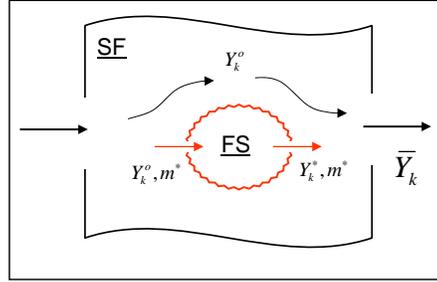


Figura 4.1: Rappresentazione schematica della struttura FS-SF

Ricordando che la frequenza di svuotamento delle FS è quantificabile tramite $\dot{m}^* = 1/\tau^*$, risulta chiaro che il tempo di residenza del reattore PSR corrispondente sarà pari proprio a τ^* .

Il reattore chimico PSR realizza una discretizzazione zerodimensionale del flusso e può essere assimilato ad un *vessel* nel quale le N correnti di gas in ingresso, subiscono un istantaneo miscelamento e l'evoluzione del processo è interamente governata dalla cinetica chimica (vedi figura 4.2). Nel caso in esame il reattore è sempre costituito da un singolo ingresso. Il flusso è inte-

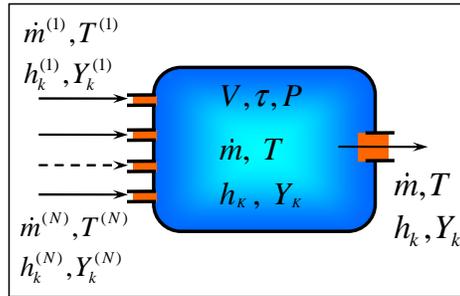


Figura 4.2: Schema del reattore PSR

ramente descritto una volta risolta l'equazione che esprime la conservazione dell'energia e una volta risolte le equazioni di continuità per ciascuna delle K specie chimiche contemplate nel meccanismo considerato:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{\tau^*} \sum_{k=1}^K (h_k(T^*) \cdot Y_k^* - h_k(T^o) \cdot Y_k^o) \quad (4.23)$$

$$\frac{dY_k^*}{dt} = \frac{1}{\tau^*} (Y_k^0 - Y_k^*) + \frac{W_k \cdot \dot{\omega}_k^*}{\rho^*} \quad k = 1 \dots K \quad (4.24)$$

In condizioni stazionarie dovranno risultare nulle le derivate nel tempo di h e delle varie Y_k^* . La temperatura T^* della FS, ottenuta risolvendo la conservazione dell'energia per il reattore, è necessaria per calcolare il *reaction rate* nelle FS $\dot{\omega}_k^*$:

$$\dot{\omega}_k^* = f(T^*, Y_k^*)$$

Le equazioni 4.23 e 4.24 costituiscono un sistema di equazioni differenziali ordinarie (ODE³) può essere risolto con un approccio **Unsteady**, che prevede l'integrazione nel tempo fino al raggiungimento dello stato stazionario (si tratta di un classico problema ai valori iniziali). In alternativa è possibile risolvere direttamente il sistema algebrico che si ottiene dalle 4.23 e 4.24 ponendo uguali a zero il termine evolutivo (approccio **Steady**). Analizziamo con maggiore chiarezza le caratteristiche dei due approcci:

Unsteady Il sistema di ODE di K+1 equazioni in K+1 incognite costituito dalle eqq. 4.23 e 4.24, può essere generalizzato alla seguente forma:

$$\frac{dZ}{dt} = F(Z) \quad Z = \{T^*, Y_1^*, Y_2^* \dots Y_K^*\} \quad (4.25)$$

Data la natura *stiff* delle equazioni (autovalori della matrice Jacobiana aventi valori in modulo molto diversi tra loro, in relazione alle diverse velocità di conversione delle specie), il sistema 4.25 deve essere obbligatoriamente risolto ricorrendo a schemi impliciti a passo multiplo con capacità di adattamento dinamico del passo di integrazione. Gli algoritmi di questo tipo rientrano nella famiglia della *Backward Differentiation Formula* avente la seguente espressione generale:

$$\sum_{k=0}^{\nu} \alpha_k Z^{i+k} = h\beta_{\nu} F(Z^{i+\nu})$$

Per la risoluzione del reattore PSR necessario al modello EDC-DC oggetto di questo lavoro, è stato utilizzato, fra gli altri, l'algoritmo di pubblico dominio D-VODE (1997) [7].

Steady La soluzione numerica del sistema algebrico:

$$F(Z) = 0 \quad Z = T^*, Y_1^*, Y_2^* \dots Y_K^*$$

³ Ordinary Differential Equation

deve essere svolta adottando metodi iterativi espressamente indicati per i sistemi non lineari, basati solitamente sull'algoritmo di NEWTON: la generica iterazione permette di valutare il valore aggiornato del vettore soluzione ($Z^{(m+1)}$) tramite la seguente espressione:

$$Z^{(m+1)} = Z^{(m)} - \left(\frac{\partial F}{\partial Z} \right)_{Z^{(m)}}^{-1} \cdot F(Z^{(m)})$$

nella quale il termine $\partial F/\partial Z$ rappresenta la matrice Jacobiana del sistema. La velocità di convergenza del metodo iterativo è legata in gran parte alla tecnica utilizzata per il calcolo e l'inversione della matrice Jacobiana che viene solitamente valutata per via numerica calcolando le derivate parziali tramite differenze finite; esistono metodi di Newton modificati nei quali la matrice Jacobiana non viene calcolata ad ogni iterazione ma si utilizza la stessa per un certo numero di passi nei quali si adottano opportuni coefficienti di rilassamento (vedi metodo di NEWTON-RAPHSON, [26]).

La soluzione più efficiente del reattore PSR, specialmente nel suo funzionamento in prossimità del limite di estinzione/accensione, la si ottiene combinando le due tecniche descritte: l'integrazione nel tempo del sistema 4.25 viene svolta in modo parziale, senza ottenere le condizioni stazionarie, utilizzando il campo di concentrazioni e temperatura così ottenuto come soluzione d'innescio per il metodo di Newton. Una tecnica analoga a quella descritta è implementata nell'algoritmo di pubblico dominio TWOPOINT, ampiamente usato nell'ambito di questo lavoro.

4.3.2.1 Effetto delle condizioni iniziali: isteresi del reattore PSR

L'aspetto sicuramente più complesso nella individuazione dello stato stazionario di un reattore PSR, è la sua tendenza a manifestare isteresi in corrispondenza delle condizioni di estinzione/accensione. Il comportamento è dovuto alla dipendenza della soluzione stazionaria individuata dalle condizioni iniziali adottate [22], [6].

E' possibile osservare l'effetto descritto, facendo riferimento alla soluzione di una reazione metano-aria, a partire dalle condizioni al contorno elencate in tabella 4.1.

In queste condizioni di funzionamento, il reattore esibisce il limite di estinzione/accensione proprio nell'intervallo di rapporti di equivalenza indi-

T_u [K]	P [bar]	τ [ms]	ϕ [-]
300.0	1.01325	1.0	$0.45 \div 0.65$

Tabella 4.1: Condizioni al contorno del reattore PSR

cato ($0.45 < \phi < 0.65$). A seconda del set di condizioni iniziali scelto per l'integrazione nel tempo delle eqq. 4.23 e 4.24, il solutore fornisce valori diversi del rapporto di equivalenza di soglia. In figura 4.3, è possibile osservare chiaramente l'effetto di isteresi descritto. Al variare del rapporto di equi-

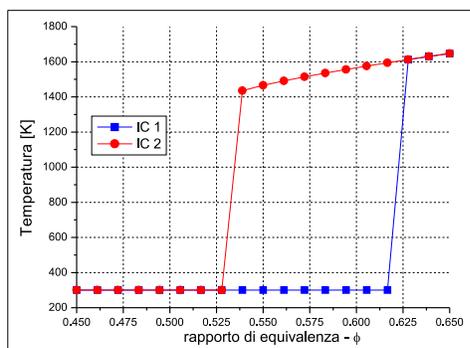


Figura 4.3: Isteresi del reattore PSR. Meccanismo di reazione ridotto a 5 passi. Solutore D-VODE [46]

valenza, mantenendo fissate tutte le altre condizioni al contorno, i due set di condizioni iniziali (denominati IC1 e IC2) decretano un diverso punto di accensione del reattore. Esse corrispondono ai seguenti stati iniziali:

IC1 Temperatura e composizione corrispondenti allo stato di equilibrio chimico della miscela reagente

IC2 Composizione di equilibrio per la miscela reagente e temperatura fissata ad un arbitrario valore elevato (nella fattispecie 2500 K)

Il comportamento mostrato è un noto effetto dei reattori PSR non isotermini⁴, ed è legato alla instabilità dell'equilibrio fra il bilancio di massa e il bilancio di entalpia che giustifica l'esistenza di stati stazionari multipli a

⁴il reattore PSR, sia come dispositivo reale sia come modello matematico, è largamente impiegato nell'industria chimica

partire dalle stesse condizioni al contorno [76]. Per spiegare meglio questo comportamento, è utile introdurre il parametro:

$$x = \frac{[A]_{in} - [A]}{[A]_{in}} \quad (4.26)$$

che descrive la conversione, in condizioni stazionarie, del generico reagente A ($[X]$ esprime la concentrazione molare del reagente X). Nell'ipotesi in cui il *reaction rate* possa essere espresso tramite la semplice *power law* $k = \exp(a - b/T)$, si può verificare che, per la conservazione della massa, risulta:

$$x = \frac{k\tau}{1 + k\tau} \quad (4.27)$$

essendo τ il tempo di residenza del reattore. Sotto le stesse ipotesi, assumendo costanti i calori specifici, si può verificare che l'equazione di conservazione dell'energia, in termini di entalpia, descrive una dipendenza lineare di x da T :

$$x = q_1 + q_2 T \quad (4.28)$$

Pertanto, l'equilibrio complessivo del sistema, in un piano $x - T$, è dato dai punti di intersezione delle curve che descrivono il bilancio di massa (4.27) ed il bilancio di energia (4.28). In figura 4.4 sono riportati gli andamenti del tutto indicativi delle due funzioni. Come è possibile osservare, esistono

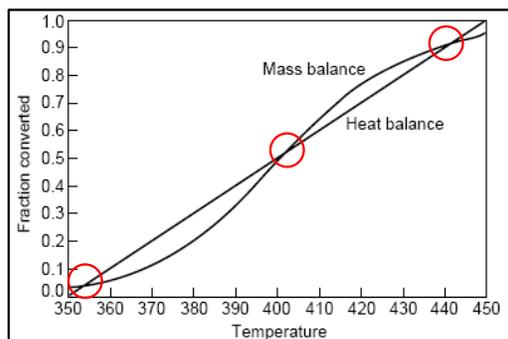


Figura 4.4: Esistenza di stati stazionari multipli in un PSR

almeno 3 punti che sono matematicamente compatibili con la condizione di bilancio, necessaria nello stato stazionario, e l'individuazione dell'una o dell'altra condizione stazionaria è legata al tipo di condizioni iniziali scelte.

Nell'ambito delle reazioni di combustione, l'instabilità di funzionamento descritta in figura 4.4, è tipicamente circoscritta alle condizioni di funzionamento prossime al limite di estinzione/accensione. Questo comportamento ha alcuni importanti conseguenze sull'uso del reattore PSR come strumento per risolvere la reazione nelle FS:

- La generalizzazione del comportamento illustrato è estremamente dipendente dal meccanismo di reazione adottato e dalle impostazioni del solutore. In figura 4.5 riportiamo lo stesso test svolto per le curve di figura 4.3 ma utilizzando un diverso meccanismo di reazione: la dipendenza dalle condizioni iniziali è fortemente ridotta per via del maggior dettaglio dello schema chimico.

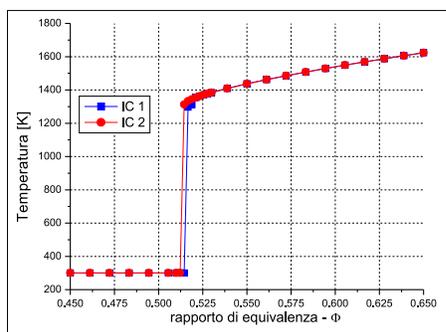


Figura 4.5: Isteresi del reattore PSR. Meccanismo di reazione *skeletal* (16 specie, 24 reazioni) [70]. Solutore TWOPOINT

- L'instabilità del reattore PSR in prossimità del limite di estinzione (accensione) rende estremamente onerosa la sua soluzione numerica soprattutto tenendo conto che per la soluzione di una fiamma turbolenta tipica occorrono circa 10^6 valutazioni dello stato stazionario del reattore. Gli elevati tempi di calcolo che ne conseguono rendono problematico lo svolgimento di analisi di sensibilità alle condizioni iniziali.
- L'isteresi di estinzione/accensione del reattore, e la conseguente esistenza di stati stazionari multipli, può determinare una dipendenza della soluzione finale della fiamma turbolenta dalle condizioni iniziali adottate. Per eliminare l'incertezza della scelta potrebbe essere indispensabile, in alcuni casi, ricorrere a simulazioni instazionarie, che

permettano di tenere conto della reale “storia” della fiamma e quindi dei reattori caratteristici dell FS [22].

- Nelle simulazioni svolte in questo lavoro non si è mai riscontrata una significativa dipendenza dalle condizioni iniziali (sempre dei tipi IC1 e IC2 descritti in precedenza). Ciò è probabilmente casuale in quanto non è escluso che ulteriori set di condizioni iniziali avessero potuto produrre differenze significative nei risultati. Abbiamo sperimentato casi in cui il modello non è stato in grado di predire l’ancoraggio e la stabilizzazione della fiamma: vi è la possibilità che una differente scelta della soluzione di innesco produca esiti diversi, stabilizzando la fiamma.

Come suggerito da Gran [22], la capacità del modello EDC di predire soluzioni diverse, per effetto di un marcato fenomeno di isteresi del reattore PSR nelle particolari condizioni di funzionamento, può essere assunto come indicativo della instabilità intrinseca della fiamma e della precarietà del suo ancoraggio.

4.4 Implementazione nel codice STAR-CD™

In figura 4.6 è riportata la struttura a blocchi del set di routine che costituiscono la libreria di modelli della famiglia EDC implementati. Possiamo osservare che il modello prevede tre diverse modalità di lavoro:

1. **IGNITION**
2. **EDC**
3. **EDC-DC**

Prima di analizzare le singole modalità, è necessario premettere che l’intero modello è stato implementato abbinandolo intimamente alle librerie Chemkin™ (vedi §B.2) che richiedono una fase di preprocessing esterna al modello necessaria a generare il database termochimico contenente i parametri caratteristici del meccanismo utilizzato.

IGNITION. La simulazione numerica dei processi di combustione mediante i modelli *local source*, richiede l’adozione di uno specifico meccanismo di accensione (*ignition*) della reazione. Nei comuni sistemi di combustione, infatti, per motivi di sicurezza e stabilità, la miscela reagente

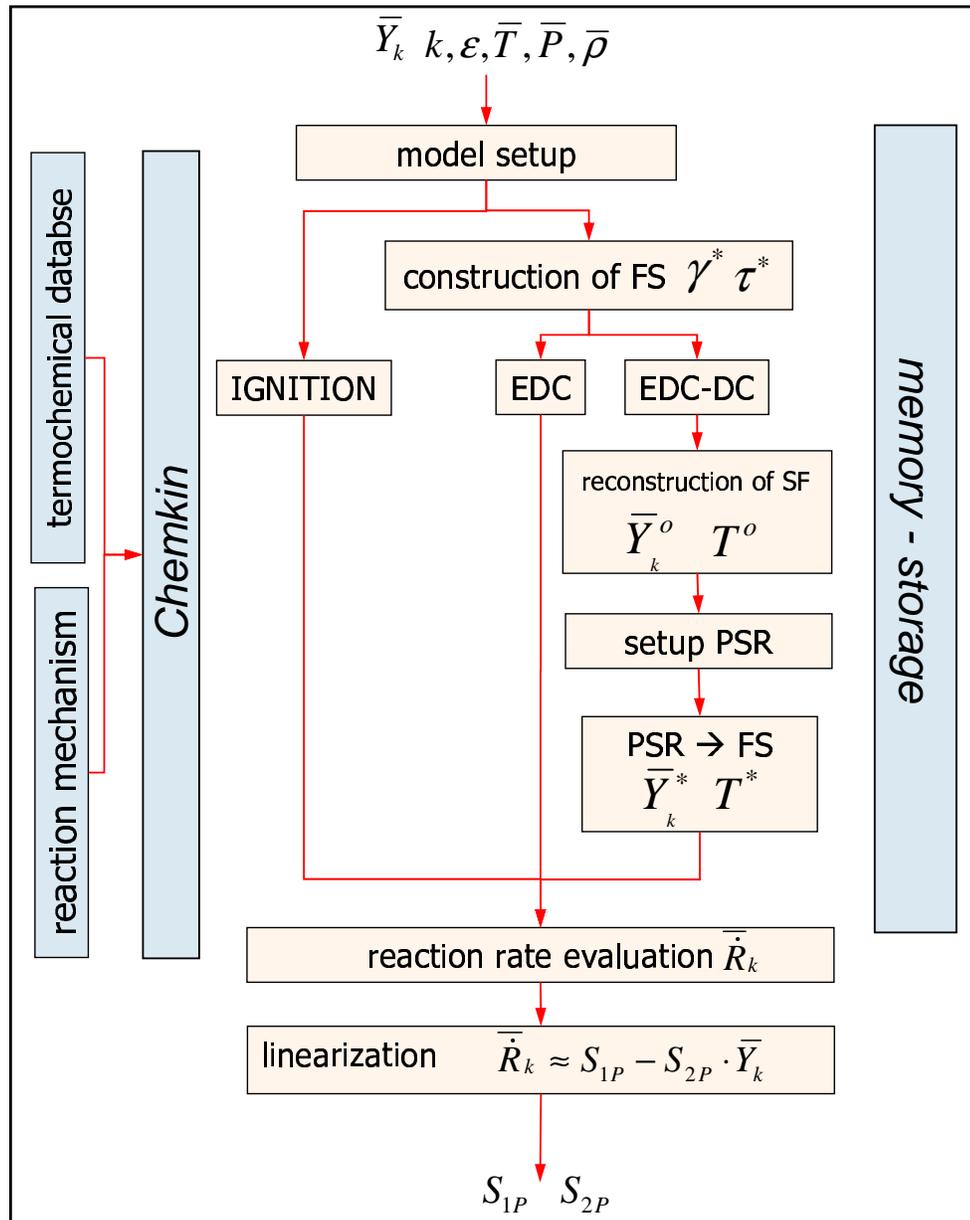
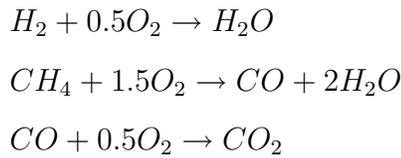


Figura 4.6: Struttura del modello EDC-DC implementato

non ha le caratteristiche di temperatura e composizione idonee all'autoaccensione. L'innesco della reazione viene effettuato tramite sorgenti localizzate di calore che, localmente, abbassano l'energia di attivazione delle reazioni di ossidazione.

Nel nostro caso, non interessa la reale evoluzione del processo transitorio di accensione, ma è sufficiente portare, rapidamente, la miscela nelle condizioni di autosostenere la reazione. Abbiamo ideato un modello semplificato di accensione che prevede l'assegnazione, da parte dell'utente, di una *velocità di reazione fittizia* ω_x , e di un *fattore di decadimento della specie combustibile* φ_x . Il modello di accensione si appoggia al seguente meccanismo di reazione globale:



Ad ogni iterazione, la frazione in massa delle tre specie combustibili viene ridotta di un fattore φ_x e viene assunta pari a ω_x , la velocità con cui il sistema evolve in questa direzione. In altre parole, detta Y_{F1} la concentrazione attuale della specie combustibile n°1, e Y'_{F1} la nuova concentrazione, avremo:

$$Y'_{F1} = (1 - \varphi_x) \cdot Y_{F1}$$

$$\widetilde{R}_{F1} \simeq \frac{Y'_{F1} - Y_{F1}}{\Delta t} \simeq \widetilde{\rho}(1 - \varphi_x) \cdot Y_{F1} \cdot \omega_x$$

Espressioni del tutto analoghe sono usate per le altre due specie combustibili: il reaction rate per i prodotti di reazione viene valutato seguendo la stechiometria del meccanismo globale sopra riportato.

All'utente è demandata la scelta dei parametri ω_x e φ_x : occorre una certa sensibilità per assegnare valori coerenti per i due parametri, in base alle condizioni termodinamiche della miscela reagente. Valori tipici dei due parametri, impiegati nel corso delle simulazioni svolte sono individuabili nei seguenti intervalli:

$$\omega_x = 10^3 \div 10^5$$

$$\varphi_x = 0.15 \div 0.50$$

Il processo di accensione deve essere portato avanti per un numero iterazioni sufficiente ad interessare la maggior parte del campo di moto: è possibile specificare il numero di iterazioni durante le quali il codice applica il modello di innesco, passando poi autonomamente al modello di combustione preselezionato. Nei comuni sistemi di combustione non sono richieste più di 50÷100 iterazioni per ottenere un'accensione efficace.

EDC Come accennato in precedenza, sono state implementati tre diversi modelli EDC denominati ibridi:

1. **Hybrid Reaction Rate**
2. **Combined Time Scale**
3. **Unmixedness Factor**

I tre modelli prevedono altrettante modalità di accoppiamento fra il *reaction rate* dovuto unicamente al *mixing* turbolento (vedi espressioni 4.13 e 4.8) e il *reaction rate* predetto da un meccanismo di reazione globale. Nel corso di questo lavoro abbiamo spesso utilizzato i seguenti meccanismi globali:

DPW Meccanismo di Dupont, Pourkashanian e Williams (1993) [53]

NM98 Meccanismo di Nicol, Malte e collaboratori (1998) [53]

Pol98 Meccanismo di Polifke e collaboratori (1998) [63]

Will99 Meccanismo di Li, Williams e Gebert (1999) [37]

EDC-DC. L'implementazione del modello EDC-DC ha richiesto la definizione di vari sottomodelli necessari alla caratterizzazione di alcune grandezze intermedie, che costituiscono la struttura Surrounding Fluid / Fine Structures.

Dopo aver valutato i parametri rappresentativi delle FS (tramite il calcolo di γ^* e τ^*) è necessario ricostruire la composizione del SF che, ricordiamo, costituisce il fluido in ingresso al reattore PSR corrispondente alle FS. La media pesata della composizione delle FS e del SF fornisce la composizione media risultante della cella di calcolo (vedi eq. 4.22:

$$\bar{Y}_k = (1 - \gamma^*) \cdot Y_k^0 + \gamma^* \cdot Y_k^*$$

Dal momento che il codice STAR-CDTM, ad ogni iterazione, passa al modello EDC la composizione e la temperatura medie attuali della cella, occorre stabilire un criterio che permetta di ricavare la composizione del SF. Abbiamo ideato due sistemi ai quali ci riferiamo con i termini **EXPLICIT** e **IMPLICIT**: il significato di questa terminologia apparirà chiaro dopo le relative spiegazioni.

EXPLICIT Il modello EDC-DC, prevede una determinata suddivisione in eventi del processo di combustione. In particolare, possiamo identificare i seguenti passaggi⁵:

1. Nascita della struttura FS - SF per opera del normale processo di dissipazione in cascata dei vortici.
2. Evoluzione della reazione chimica all'interno delle FS.
3. Miscelazione delle FS con il SF ed alterazione della composizione media del volume di controllo.

Questa sequenza di eventi è rappresentata schematicamente in figura 4.7. Essa si realizza nell'arco di una singola iterazione CFD.

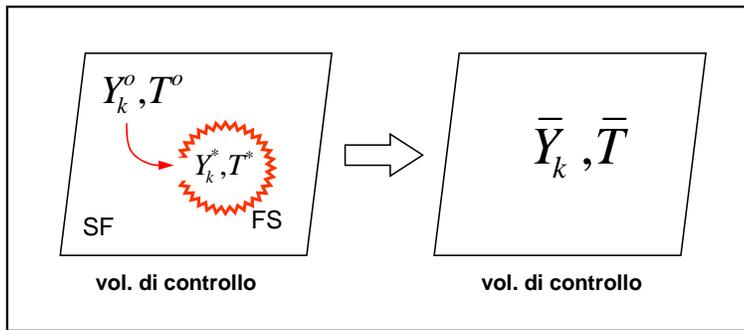


Figura 4.7: Schematizzazione del processo di combustione turbolenta

Possiamo pertanto ritenere che all'inizio della i -esima iterazione, la composizione del SF coincida di fatto con la composizione media del volume di controllo. In altre parole, quindi, nell'approccio esplicito assumeremo:

$$Y_k^0 \simeq \bar{Y}_k$$

$$T^0 \simeq \bar{T}$$

⁵si tratta di una schematizzazione logica che non necessariamente ha una corrispondente sequenza fisica di eventi

IMPLICIT Aniché riferirsi alla formale suddivisione in eventi del processo di combustione, possiamo ricavare la nuova composizione del SF, memorizzando la composizione delle FS all'iterazione precedente. Indicando con un apice “ ’ ” le grandezze relative alla iterazione precedente, stimeremo Y_k^0 e T^0 tramite⁶:

$$Y_k^0 = \frac{\bar{Y}_k' - \gamma^{*'} Y^{*'}}{1 - \gamma^{*'}}$$

$$T^0 = \frac{\bar{T}' - \gamma^{*' T^{*'}}}{1 - \gamma^{*'}}$$

Le grandezze medie del volume di controllo all'iterazione precedente (\bar{Y}_k' e \bar{T}'), coincidono, di fatto, con quelle attuali passate dal codice STAR-CDTM.

E' evidente che in condizioni stazionarie risulta sempre rispettato il bilancio della struttura SF-FS (vedi eq. 4.22)

Da un punto di vista strettamente numerico, appare chiaro che lo schema implicito proposto è più coerente, in quanto rispetta il bilancio delle FS in condizioni stazionarie. Tuttavia dalle numerose prove svolte, è emersa una maggiore stabilità numerica dell'approccio esplicito. A nostro avviso ciò è dovuto al fatto che le simulazioni con chimica dettagliata, sono sempre state svolte partendo da una soluzione a chimica veloce, e quindi già sufficientemente vicino alla soluzione finale.

4.4.1 Integrazione con il solutore CFD

In ciascuna modalità di esecuzione, una volta valutato il *reaction rate* per ogni specie chimica, è necessario, come premesso, linearizzare \tilde{R}_k per poterlo passare al solutore CFD. Abbiamo pensato, dopo alcuni tentativi, di operare una linearizzazione che parta dalla seguente definizione del *reaction rate*:

$$\tilde{R}_k \approx \frac{d\bar{Y}_k}{dt}$$

Discretizzando la derivata nel tempo della frazione in massa avremo (indichiamo con l'apice “ ’ ” la concentrazione al tempo $t + \Delta t$):

$$\tilde{R}_k \approx \bar{\rho} \frac{\bar{Y}_k' - \bar{Y}_k}{\Delta t}$$

⁶in realtà la valutazione di T^0 non può essere effettuata direttamente con l'espressione riportata, ma occorre passare attraverso l'entalpia media della miscela.

Tenendo presente che la sola scala temporale definita nel nostro modello è τ^* , possiamo assumere:

$$\tilde{R}_k \approx \bar{\rho} \frac{\bar{Y}'_k - \bar{Y}_k}{\tau^*}$$

Possiamo così stimare la nuova frazione in massa con:

$$\bar{Y}'_k \approx \bar{Y}_k + \tilde{R}_k \cdot \frac{\tau^*}{\bar{\rho}}$$

che di fatto fornisce già l'espressione linearizzata per \bar{R}_k :

$$\tilde{R}_k \approx \frac{\bar{\rho}}{\tau^*} \bar{Y}'_k - \frac{\bar{\rho}}{\tau^*} \bar{Y}_k$$

Dal momento che STAR-CDTM richiede una linearizzazione del tipo:

$$\tilde{R}_k \simeq S_{1P} - S_{2P} \cdot \bar{Y}_k$$

sarà sufficiente passare al solutore i seguenti coefficienti:

$$S_{1P} = \bar{Y}'_k \cdot \frac{\bar{\rho}}{\tau^*} \quad (4.29)$$

$$S_{2P} = \frac{\bar{\rho}}{\tau^*} \quad (4.30)$$

Per quanto riguarda la valutazione del calore rilasciato dalla combustione, sono stati presi in considerazione due distinti approcci, corrispondenti a due diverse modalità di soluzione dell'equazione dell'energia:

- Risolvendo la conservazione dell'entalpia generalizzata (entalpia sensibile + entalpia di formazione della miscela, vedi equazione 2.5), non è necessaria nessuna procedura aggiuntiva, in quanto la progressiva riduzione dell'entalpia media di formazione giustifica l'aumento di temperatura atteso
- Conservando la sola entalpia sensibile è necessario calcolare esplicitamente il calore di reazione e fornirlo al solutore come termine sorgente aggiuntivo. Il calore di reazione è dato da:

$$\dot{\Omega}_T = \sum_{k=1}^K \tilde{R}_k \Delta h_k^0 \quad \left[\frac{W}{m^3} \right] \quad (4.31)$$

essendo Δh_k^0 l'entalpia di formazione della generica specie k . Il termine sorgente $\dot{\Omega}_T$ viene passato al solutore dopo una opportuna linearizzazione svolta utilizzando un procedimento del tutto analogo a quello descritto per i termini \tilde{R}_k .

La conservazione dell'energia sottoforma di entalpia generalizzata è in generale da preferirsi in quanto rende lo scalare risolto esente da brusche variazioni all'interno del campo di moto (a meno di significativi fenomeni di scambio termico radiativo o convettivo) risultando numericamente più stabile. Tuttavia la stretta dipendenza del valore dell'entalpia dalla composizione locale della miscela (tramite la 2.5), può dare alcuni problemi di stabilità durante le fasi iniziali di un calcolo reattivo, soprattutto in presenza di mesh fortemente distorte. In questi casi, infatti, non è infrequente la possibilità di avere localmente valori negativi per le concentrazioni di alcune specie risultando in contributi non fisici all'espressione dell'entalpia. Benché in linea di principio si possano adottare condizioni di realizzabilità ponendo dei limiti alle frazioni in massa $0 < \tilde{Y}_k < 1$, risulta molto più agevole attivare la soluzione della sola entalpia sensibile ed operare un controllo sul valore locale di Ω_T .

Possiamo, a questo punto, illustrare il diagramma complessivo che descrive in maniera schematica l'interazione fra il modello di combustione EDC e il codice STAR-CDTM.

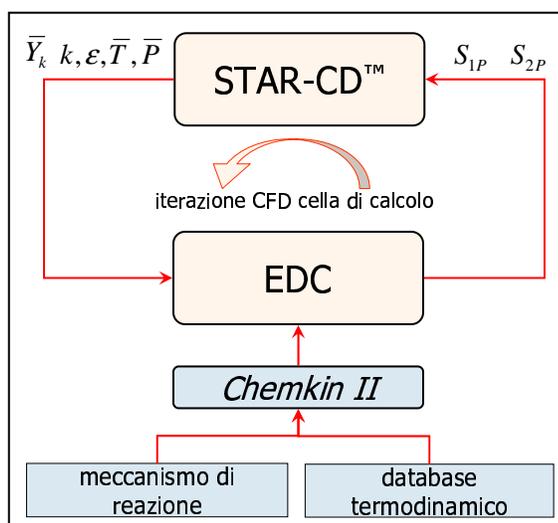


Figura 4.8: Integrazione EDC-STAR-CDTM

Il ciclo indicato in figura 4.8, riferito alla generica iterazione, viene ripetuto per ogni cella di calcolo e tutte le K specie di cui STAR-CDTM valuta la conservazione. Le K equazioni aggiuntive vengono risolte in modalità *segregated*, assumendo cioè un disaccoppiamento dei singoli campi scalari. Questa modalità rende sicuramente più semplice l'implementazione ma incide pe-

santemente sul tempo di calcolo che richiede, tipicamente, un numero di iterazioni dell'ordine di 10^3 per ottenere la convergenza.

Il disaccoppiamento delle equazioni di conservazione obbliga a valutare i *reaction rate* di ogni specie k in un'unica fase, memorizzando i valori ottenuti e assegnandoli poi alle singole equazioni man mano che vengono risolte. Utilizzando nel solutore CFD gli schemi numerici SIMPISO e PISO (vedi [28] per maggiori dettagli), il termine sorgente di ogni equazione viene valutato, ad ogni iterazione, per i vari passi *predictor-corrector* preimpostati. Per limitare i tempi di calcolo, il *reaction rate* di ogni cella, e con esso il reattore PSR, viene calcolato alla prima chiamata utile di ogni iterazione e memorizzato per i vari sottopassi. Per il classico algoritmo SIMPLE, invece, si ha una sola chiamata del termine sorgente per ogni iterazione.

4.5 Validazione del modello

Per testare l'efficacia dei modelli implementati e la validità delle assunzioni fatte, abbiamo operato una serie di simulazioni per la validazione del modello. La validazione è stata effettuata su un certo numero di testcase pubblicati in letteratura, per i quali sono disponibili datai sperimentali dettagliati.

I testcase considerati costituiscono per lo più fiamme di laboratorio che, pur avendo una geometria semplificata, presentano le caratteristiche fluidodinamiche e di turbolenza tipiche dei combustori di turbina a gas.

I casi sono stati scelti in modo da testare il codice in tutte le tipologie di fiamma gestibili dal modello: fiamme non premiscelate, fiamme parzialmente premiscelate e fiamme premiscelate. Come è noto, in letteratura non sono frequenti misure sperimentali dettagliate di fiamme magre premiscelate, per via della estrema difficoltà della loro sperimentazione e degli immediati ritorni commerciali della loro utilità che spesso preclude ai centri di ricerca la pubblicazione dei risultati ottenuti con i finanziamenti dell'industria

Ben più cospicua è la mole di dati disponibile in letteratura per quanto riguarda le fiamme non premiscelate e, per certi versi, per le fiamme parzialmente premiscelate. Tutti i testcase di questa tipologia di fiamma sono stati ottenuti dagli atti del *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames* (d'ora in poi TNF). Si tratta di un workshop aperto (ormai dal 1996) che mira a riunire le esperienze in-

ternazionali dei ricercatori, sperimentali e numerici, nel campo delle fiamme turbolente non premiscelate e parzialmente premiscelate. Uno dei principali obiettivi del TNF è proprio quello di creare un database di fiamme di laboratorio che possano servire da testcase di riferimento per la validazione di nuovi modelli numerici. Gli atti dei vari incontri biennali e il database con i dati sperimentali sono facilmente reperibili in rete al sito:

<http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop.html>

Per quanto riguarda l'analisi di fiamme premiscelate, abbiamo fatto riferimento a due testcase dei quali solo il primo corredato da misure sperimentali dettagliate.

Complessivamente i testcase considerati sono:

Fiamme Non Premiscelate.

- Bluff Body Flame (d'ora in poi **bbody**), codice HM1E,
- Jet Flame (d'ora in poi **jet**), codice H3.

Fiamme Parzialmente Premiscelate.

- Vitiated Coflow Burner (d'ora in poi **vcb**). Fiamma di recente sperimentazione (Agosto, 2002) alla quale non è ancora stato assegnato un codice.

Fiamme Premiscelate.

- VanderBilt Combustor (d'ora in poi **vdb**). Combustore con fiamma premiscelata turbolenta stabilizzata mediante bluff-body. Il dispositivo, oggetto di una recentissima campagna di misure sperimentali, lavora con una miscela magra metano/aria e realizza una fiamma nel regime di combustione tipico delle turbine a gas.
- Combustore **k160a** Nuovo Pignone. Bruciatore da laboratorio realizzato da GE-NP come modello in scala del combustore del turbogas GE10.

L'intera campagna di validazione del modello è stata effettuata con l'intento principale di mostrare il benefico effetto della chimica dettagliata (modello EDC-DC) sull'accuratezza della predizione, rispetto al semplice modello con chimica veloce. Il criterio di valutazione è stato, dove possibile, il confronto con i dati sperimentali.

E' stato adottato questo criterio essenzialmente per due motivi. Innanzitutto dobbiamo rilevare che il modello EDC-DC rappresenta un'estensione del modello EDC standard, ed è quindi necessario il confronto tra i due, nell'ambito dello stesso solutore CFD. Inoltre, i modelli EDC con chimica veloce, costituiscono la dotazione standard degli attuali codici CFD industriali: il confronto quindi fra i modelli EDC-FC⁷ e il nuovo modello EDC-DC, costituisce un indicatore diretto della maggior accuratezza che la chimica dettagliata permette di ottenere.

Per i testcase **vdb** e **k160a** abbiamo confrontato i risultati ottenuti con i modelli EDC ibridi implementati. Infatti, benché essi siano in parte già disponibili nei modelli nativi del codice, essi costituiscono lo strumento di più frequente impiego in ambito industriale per via della estrema riduzione dei tempi di calcolo rispetto al modello EDC-DC e, come vedremo, della soddisfacente risposta in termini di accuratezza. Peraltro alcune varianti di modelli EDC ibridi si basano su lavori e ricerche molto recenti ed ancora quindi solo parzialmente testati.

I molti *jobs* svolti su ciascun testcase non hanno avuto come obiettivo la sola messa a punto dei vari modelli EDC, ma, naturalmente, sono serviti alle varie analisi di sensibilità richieste da ogni simulazione CFD.

Stiamo parlando, naturalmente, delle analisi di sensibilità al numero di celle della mesh e, in alcuni casi, al valore delle condizioni al contorno non dichiarate nelle pubblicazioni di riferimento. Dobbiamo rilevare, tuttavia, che per tutti i testcase tratti dal TNF, abbiamo sempre utilizzato come condizioni al contorno i valori rilevati sperimentalmente: profili di velocità, concentrazioni, temperatura, e parametri caratteristici della turbolenza (k e ε , o Intensità di turbolenza, $Tu \equiv u'/\bar{u}$ e lunghezza di dissipazione, $L = C_\mu^{3/4} k^{3/2} \varepsilon^{-1}$) non hanno quindi generalmente richiesto nessuna indagine di sensibilità.

La maggior parte dei testcase risolti, possono essere descritti come fiamme turbolente in atmosfera libera a pressione atmosferica, caratterizzati, generalmente, da un getto di combustibile e da un *coflow* (costituito da aria o da una fiamma premiscelata). In figura 4.9 è riportata una rappresentazione schematica comune dei vari casi.

Data la comune assialsimmetria dei dispositivi, abbiamo sempre assunto la simmetria cilindrica del flusso, considerando quindi un dominio di calcolo

⁷salvo dove espressamente specificato i test denominati EDC-FC sono stati svolti utilizzando l'espressione **Magnussen78**

limitato, in direzione circonferenziale, a pochi decine di gradi (30° - 40°) imponendo la ripetibilità sulle facce nei piani $r - Z$. Meno chiara è invece la

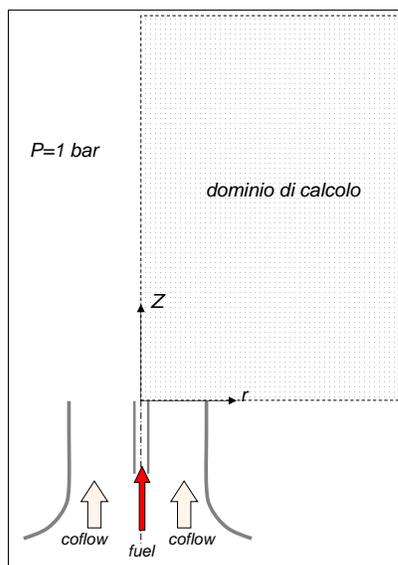


Figura 4.9: Schematizzazione delle fiamme TNF e dominio di calcolo

scelta dell'ampiezza del dominio di calcolo, fortemente dipendente dall'estensione in direzione assiale e in direzione radiale della fiamma. Spesso neppure le indicazioni riportate nelle pubblicazioni di riferimento del testcase, hanno permesso di assumere, al primo tentativo, domini di calcolo sufficientemente ampi da risultare coerenti con le condizioni al contorno di pressione uniforme imposte alla frontiera. Pertanto l'analisi di sensibilità all'estensione del dominio nelle direzioni r e Z , si dimostrata, quasi sempre, più problematica della sensibilità al numero di celle di calcolo.

Anche la forma stessa del dominio di calcolo ha subito in alcuni casi modifiche rispetto al semplice settore circolare di figura 4.9. Per quei testcase in cui non è dato il profilo di velocità in direzione radiale agli sbocchi dei due getti, ma solo il valore della *bulk velocity*, è stato infatti necessario discretizzare parzialmente i condotti di alimentazione dei due orifici, in modo da avere, allo scarico, profili completamente sviluppati.

Più chiara è la schematizzazione del dominio di calcolo nel caso delle fiamme premiscelate testate. Si tratta sempre di bruciatori affiancati a camere di combustione dalla geometria bidimensionale (tipicamente tubi di fiamma), dei quali sono note le dimensioni principali. In questo caso le analisi di sen-

sibilità richieste hanno comportato il test di diverse densità di mesh e delle diverse tipologie di condizioni al contorno messe a disposizione dal codice.

Premettiamo, dunque, che, per ragioni di sintesi, non riporteremo l'enorme mole di dati ottenuti per ciascun testcase, limitandoci ad analizzare le grandezze che maggiormente caratterizzano il modello di combustione.

Se non esplicitamente specificato, le grandezze che riporteremo nelle prossime pagine (temperature, frazioni in massa, velocità), sia di origine sperimentale, sia di provenienza numerica, sono da intendersi come valori mediati alla Favre.

4.5.1 Modelli di turbolenza impiegati nei test di validazione

Per quanto riguarda i modelli di turbolenza adottati nelle simulazioni RANS svolte per la validazione di tutti i modelli di combustione sviluppati (non solo il modello EDC qui trattato), ci siamo riferiti, in maniera quasi esclusiva, al solo modello $k - \varepsilon$ standard, nell'implementazione messa a disposizione dal codice STAR-CDTM [28]. Benché consci delle sue limitazioni nell'analisi di molte tipologie di flusso che interessano i testcase esaminati (getti assialsimmetrici, zone di ricircolazione), il modello $k - \varepsilon$ costituisce il principale strumento impiegato nello studio RANS dei dispositivi di combustione reali. Nella maggior parte dei testcase simulati avremmo potuto migliorare l'accuratezza complessiva dei risultati andando di volta in volta a considerare i modelli (varianti del $k - \varepsilon$ o altra formulazione del primo ordine), più idonei alla particolare geometria investigata. Riteniamo tuttavia più significativo utilizzare, per quanto possibile, il modello che comunemente costituisce lo strumento primario, quando, in ambito industriale, ci sia appresta ad analizzare nuove geometrie o configurazioni, proprio perché ampiamente testato su numerose tipologie di flusso.

Abbiamo pertanto fatto sempre riferimento al solo modello $k - \varepsilon$ standard (con uso delle Wall functions a parete) senza nessuna modifica dei coefficienti costitutivi, in modo da poter svolgere considerazioni e comparazioni dei soli modelli di combustione turbolenta, intimamente legati al modello di chiusura delle RANS.

Durante l'analisi dei vari testcase, per tenere conto delle limitazioni poste dall'uso del modello $k - \varepsilon$, abbiamo di volta in volta evidenziato quelle

inaccuratezze e situazioni critiche che abbiamo potuto con certezza ritenere effetti esclusivi del modello di turbolenza. Tuttavia, in quei pochi casi in cui l'uso del modello $k - \varepsilon$ ha pregiudicato l'accuratezza dell'intero modello di combustione (essenzialmente durante la stima della concentrazione di CO con il modello *Level Set Flamelet*), abbiamo testato specifiche varianti del modello $k - \varepsilon$ in modo da mostrare le effettive potenzialità dell'approccio.

4.5.2 Bluff Body Burner

Il bruciatore **bbody** costituisce uno dei migliori esempi di fiamma di laboratorio per lo studio dell'interazione turbolenza-combustione. Come accennato in precedenza si tratta di un dispositivo dalla geometria estremamente semplice ma che riproduce le caratteristiche fluidodinamiche tipiche di un combustore reale.

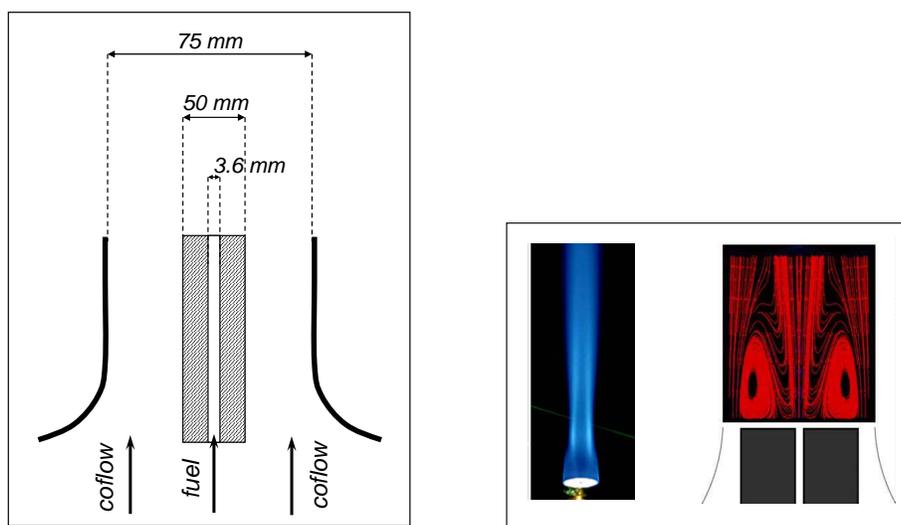


Figura 4.10: *Bluff Body Burner: geometria del combustore e immagini della fiamma*

Il bruciatore, costituito da un corpo non aerodinamico di sezione circolare, è centrato in una corrente di aria (*coflow*), e presenta nel centro un orificio dal quale viene iniettato il combustibile (vedi figura 4.10 dove sono riportate le principali dimensioni del bruciatore [12]).

A valle del *bluff-body* si forma un complesso campo di moto, costituito da una vasta zona di ricircolazione che determina la presenza, nelle zone iniziali della reazione, di un sufficiente quantitativo di gas caldi per stabilizzare

la fiamma (in figura 4.10 è riportata una visualizzazione di flusso ed una fotografia della fiamma).

Il bruciatore viene alimentato con una miscela CH_4/H_2 (1:1 in volume), caratterizzata da una *mixture fraction* stechiometrica $\xi_s = 0.04997$. Il *coflow* è costituito da aria alla temperatura di 300 K.

La fiamma in esame costituisce un testcase sufficientemente complesso. La sola predizione della estensione della zona di ricircolazione, costituisce già un difficile test per i modelli di turbolenza a due equazioni: l'entità della portata ricircolata è in questo caso di fondamentale importanza per la stima della stabilizzazione della fiamma.

Inoltre, il basso valore della *mixture fraction* stechiometrica (connesso all'elevato potere calorifico del combustibile), può causare forti discrepanze nel campo termico anche a seguito di modesti errori nei profili di concentrazione delle specie combustibili.

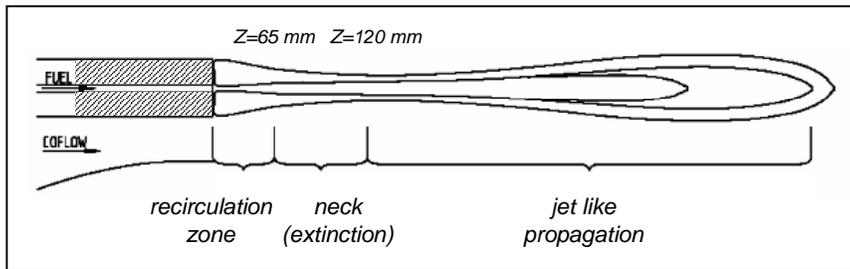


Figura 4.11: Rappresentazione schematica delle tre zone distintive della fiamma **body**

Nelle particolari condizioni di velocità del caso simulato (ricordiamo il codice HM1E del database TNF), la fiamma è interessata da tre distinte zone (vedi figura 4.11):

1. La zona di ricircolo nella quale sono predominanti gli effetti di miscelamento turbolento
2. Una zona nella quale la fiamma è prossima all'estinzione, subito a valle della bolla di ricircolo. In questa fase il flusso torna ad uniformarsi assumendo nuovamente la struttura a getto: in questa zona la reattività chimica della miscela è il fenomeno limitante.
3. Ancora più a valle la fiamma riacquista stabilità (di fatto si riaccende)

grazie alla riduzione del *mixing* turbolento che permettono una vera e propria propagazione a getto.

Passiamo adesso ad analizzare nel dettaglio le simulazioni reattive svolte.

4.5.2.1 Simulazioni in condizioni reattive

Come ricordato in precedenza, il testcase reattivo svolto costituisce la fiamma HM1E del database TNF. Nella tabella sottostante riportiamo le condizioni di efflusso del getto e del *coflow*:

	JET	COFLOW
V [<i>m/s</i>]	118	40
T [<i>K</i>]	300	300
ρ [<i>kg/m³</i>]	0.366	1.18

Tabella 4.2: Parametri di efflusso per il test reattivo del bruciatore **bbody**

I due valori di densità corrispondono alle seguenti composizioni in massa delle due correnti:

	FUEL		AIR
<i>CH₄</i>	0.1116	<i>O₂</i>	0.233
<i>H₂</i>	0.8884	<i>N₂</i>	0.767

Tabella 4.3: Composizione del combustibile e dell'aria nel test reattivo **bbody**

In figura 4.12 riportiamo l'immagine di una delle mesh utilizzate, nella fattispecie quella più densa. E' una mesh composta interamente da esadetri per un totale di 16130 elementi. Le condizioni al contorno alle due inlet, sono state assegnate imponendo i profili sperimentali per le due componenti della velocità e per l'energia cinetica turbolenta. Per quanto riguarda la seconda condizione di turbolenza, abbiamo imposto la seguente lunghezza di dissipazione:

$$L = 0.07 \cdot R_{jet} = 0.13 \quad [\text{mm}]$$

I dati sperimentali saranno confrontati, in questa sede, con i risultati delle simulazioni svolte con il modello EDC-FC (utilizzando l'espressione standard, denominata in precedenza **Magnussen78**) e con il modello EDC-DC.

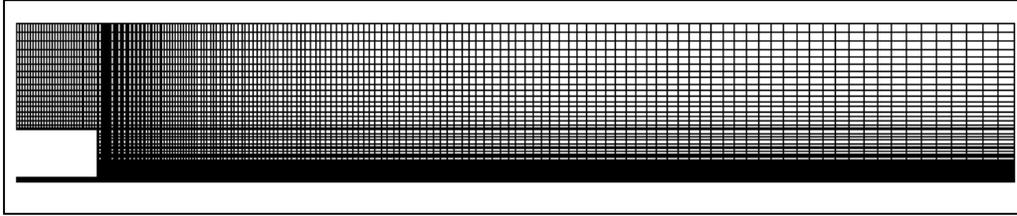


Figura 4.12: Mesh per il test case **bbody**

In particolare la simulazione con il modello EDC-DC è stata svolta utilizzando un meccanismo chimico dettagliato del Gas Research Institute (GRI). E' stata utilizzata la versione 1.2 che contempla 32 specie chimiche per un totale di 177 reazioni. Si tratta di un meccanismo capace di gestire la combustione stazionaria ad alta temperatura, di metano ed idrogeno, ma non contempla i meccanismi di formazione degli ossidi d'azoto (di scarso interesse in questa fase del lavoro).

Sono stati considerati solo questi due modelli in quanto costituiscono le due estremità nel *range* di accuratezza messo a disposizione dall'insieme degli schemi implementati.

Per quanto riguarda il modello di turbolenza, le simulazioni sono state svolte utilizzando il modello $k - \varepsilon$ standard. Riporteremo, nelle figure 4.13 e seguenti, i profili radiali della temperatura e delle frazioni in massa di CO , H_2O , CO_2 ed OH .

Possiamo commentare i risultati tramite le seguenti considerazioni:

- Il passaggio dal modello EDC-FC al modello EDC-DC comporta un significativo aumento dell'accuratezza della predizione. Il motivo è da ricercarsi, prevalentemente, nella ottima predizione della concentrazione di CO che comporta una corretta stima dei profili di temperatura e delle altre specie chimiche. E' interessante notare la tendenza del modello EDC-FC a sovrastimare la reattività della miscela, che comporta una pesante sottostima del CO ed una diffusa sovrastima della temperatura.

La corretta predizione del CO è evidentemente collegata all'elevato grado di dettaglio del meccanismo chimico: l'assunzione di singola reazione chimica infinitamente veloce connessa allo schema EDC-FC è totalmen-

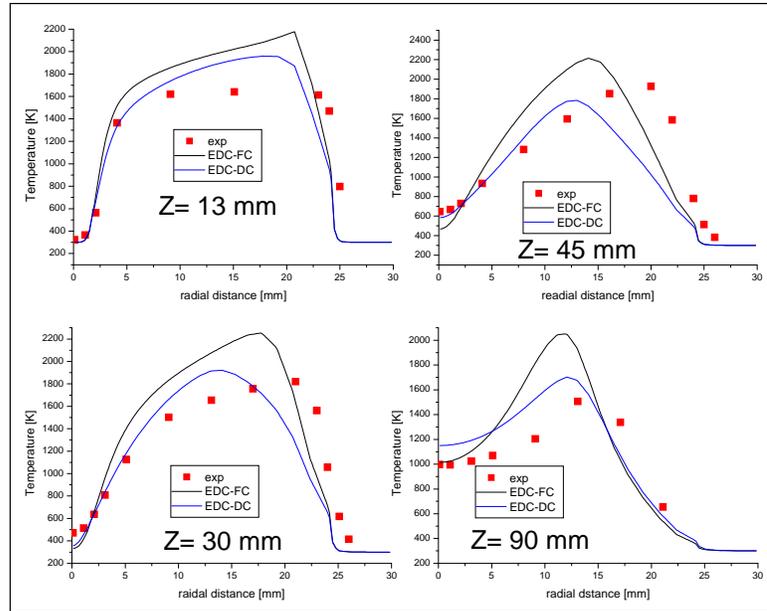


Figura 4.13: Profili radiali di temperatura, bruciatore **bbody**

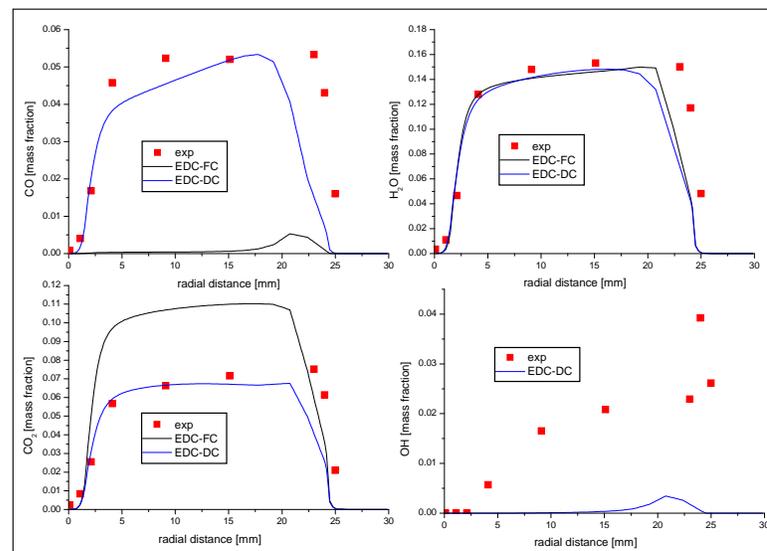


Figura 4.14: Profili radiali delle principali specie in $Z = 13$ mm, bruciatore **bbody**

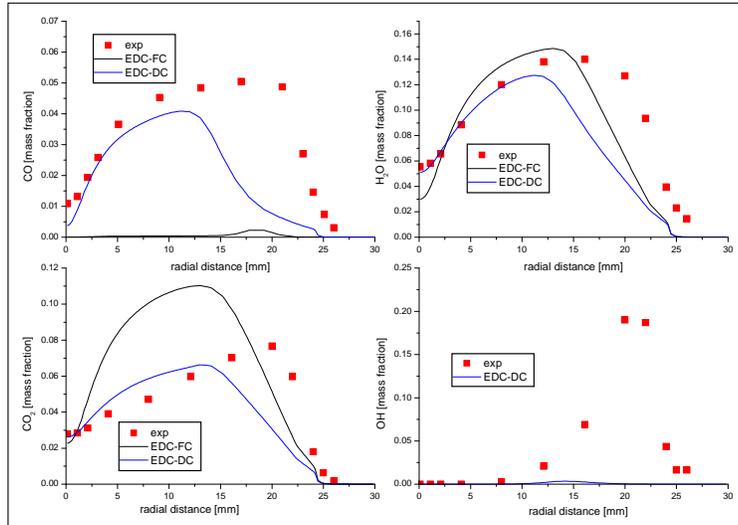


Figura 4.15: Profili radiali delle principali specie in $Z = 45$ mm, bruciatore **bbody**

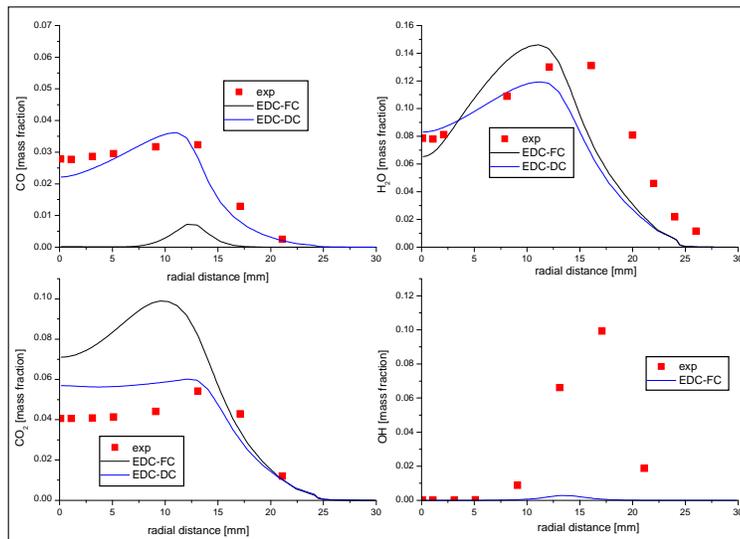


Figura 4.16: Profili radiali delle principali specie in $Z = 90$ mm, bruciatore **bbody**

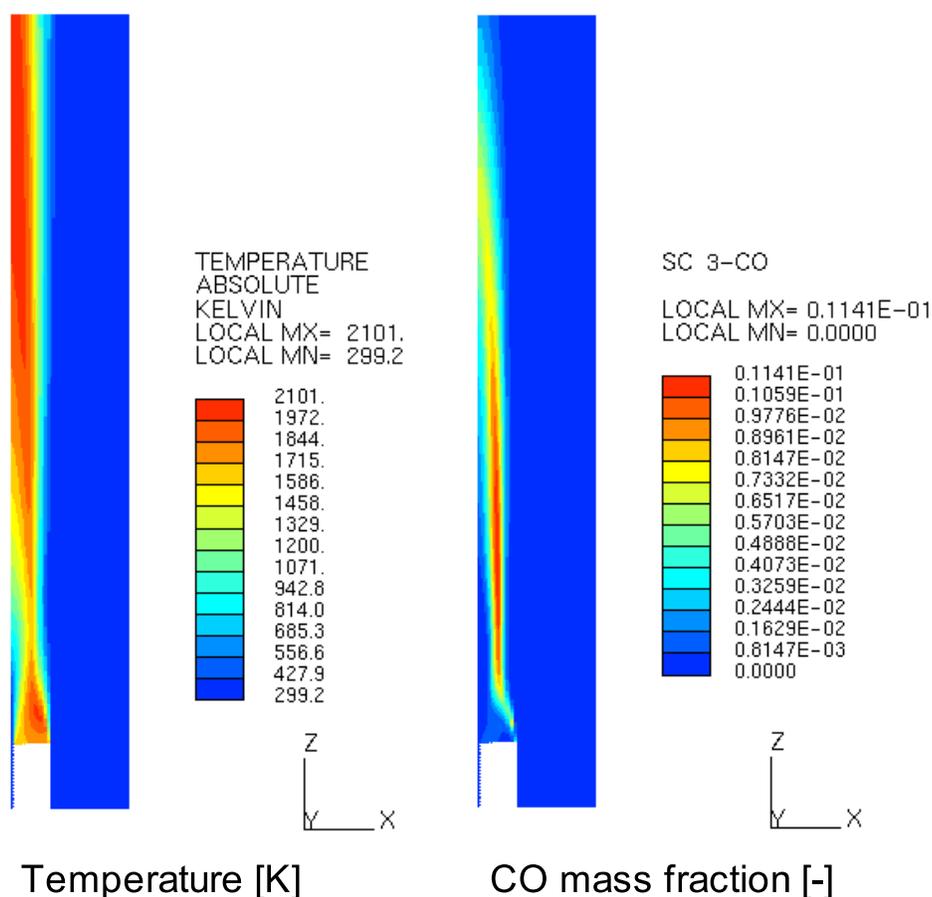


Figura 4.17: Contour plot modello EDC-DC, bruciatore **bbody**

te inadeguata in questo tipo di fiamma, caratterizzata da vaste regioni in condizioni prossime all'estinzione.

- Nelle zone a valle della bolla di ricircolo ($Z \geq 30$ mm) si assiste, in entrambe i modelli numerici, ad un sostanziale *shift* in direzione radiale delle varie grandezze scalari: si tratta di un effetto della nota tendenza alla sovrastima dello *spreading* radiale del modello $k - \varepsilon$.
- Il modello EDC-DC tende a sottostimare in maniera accentuata la concentrazione del radicale OH, soprattutto in corrispondenza della zona di ricircolo. Si tratta di un effetto assai complesso da giustificare e che trova spiegazione, a nostro avviso, nel comportamento prossimo all'estinzione di gran parte della fiamma. Ricordiamo che il modello

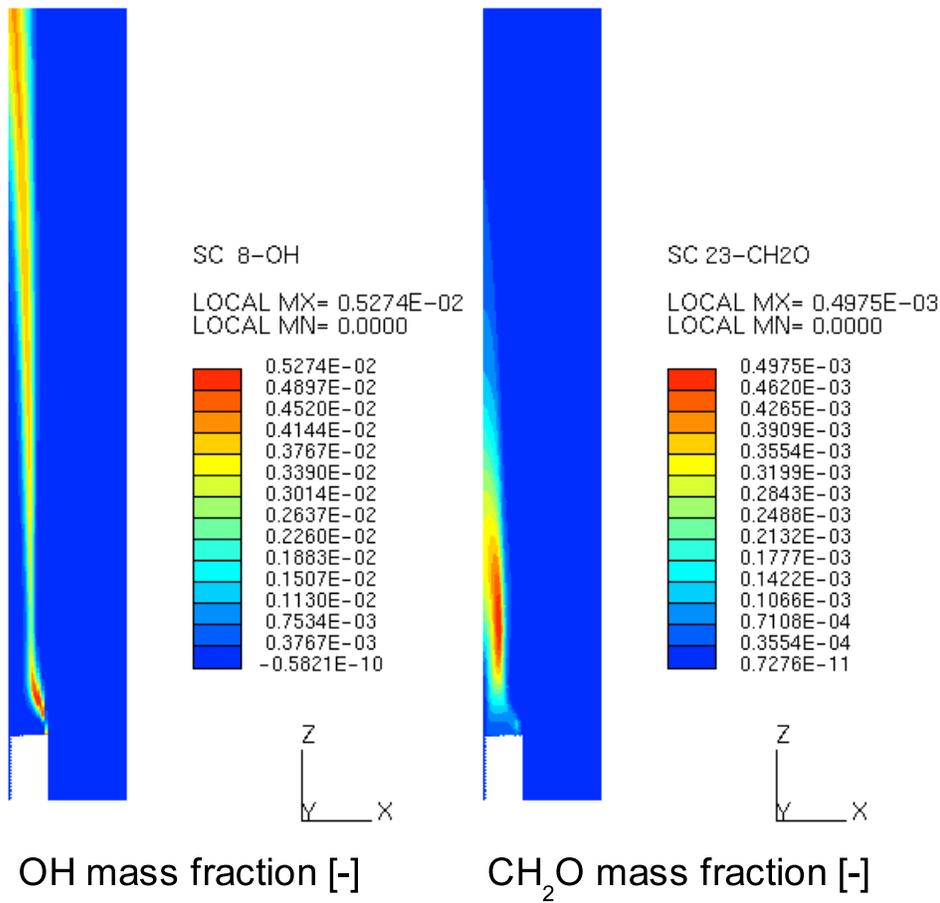


Figura 4.18: Contour plot modello EDC-DC, bruciatore **bbody**

EDC-DC predice l'estinzione in base al tempo di residenza del reattore PSR corrispondente alle FS, il cui valore è stimato in base ai valori di k ed ε . Nella valutazione delle specie radicali, minimi errori nel calcolo del campo di turbolenza, determinano forti discrepanze nelle concentrazioni.

Nelle immagini delle figure 4.17 e 4.18, riportiamo alcuni *contour plot* del calcolo con il modello EDC-DC. E' interessante osservare come il modello predica in maniera assai precisa le tre diverse zone in cui è possibile suddividere la fiamma: la zona di stabilizzazione in corrispondenza della bolla di ricircolo, la zona di estinzione in corrispondenza della uniformazione del flusso e la zona di riaccensione della fiamma in corrispondenza della acqui-

zione della struttura a getto (si parla, infatti, di fiamma a getto stabilizzata mediante *bluff-body*).

La struttura è deducibile anche dagli andamenti complementari delle due specie radicali OH (ossidrilie) e CH_2O (formaldeide): l'ossidrilie è presente laddove la reazione è limitata dall'equilibrio $CO - CO_2$, e quindi nelle zone in cui la fiamma è stabile; la formaldeide rappresenta una delle specie intermedie di pirolisi dell'idrocarburo iniziale (metano in questo caso), ed è quindi caratteristica delle regioni prossime all'estinzione.

4.5.3 Jet Flame

Il testcase in esame (avente codice H3 nel database TNF), costituisce il classico esempio di fiamma turbolenta a getto [48], [17]. In figura 4.19 riportiamo uno schema del bruciatore.

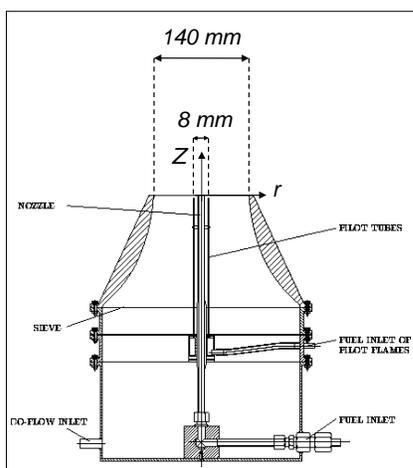


Figura 4.19: Geometria del bruciatore per testcase **jet**

Il dispositivo è costituito da due condotti concentrici: il più interno costituisce l'ugello di iniezione del combustibile (*nozzle*), quello più esterno apporta la massa di ossidante (*coflow*).

Il combustibile usato in questo esperimento è costituito da una miscela H_2/N_2 (1:1 in volume) avente frazione di miscela stechiometrica $\xi_s = 0.30426$. Il valore molto alto di ξ_s (corrispondente ad un rapporto stechiometrico aria/combustibile $\alpha_s = 2.287$), e la ridotta complessità della chimica associata alla combustione dell'idrogeno, rendono questo testcase decisamente meno complesso del precedente.

Il campo di moto è caratterizzato dalla classica struttura a dardo dei getti in atmosfera libera. Il numero di Reynolds associato al diametro del *nozzle* è pari a 10000: si tratta di quindi di un valore che pone il sistema in pieno regime turbolento.

Per questo testcase non sono disponibili data sperimentali a freddo, e pertanto procediamo direttamente con la descrizione delle simulazioni in condizioni reattive.

4.5.3.1 Simulazioni in condizioni reattive

In tabella 4.4 riportiamo i dati nominali della fiamma **jet**.

	FUEL	AIR
V [<i>m/s</i>]	34.8	0.2
T [<i>K</i>]	300	300
ρ [<i>kg/m³</i>]	0.61	1.18

Tabella 4.4: Dati nominali del testcase reattivo **jet**

La composizione in massa delle due correnti è riportata in tabella 4.5.

	FUEL		AIR
H_2	0.06713	O_2	0.233
N_2	0.93287	N_2	0.767

Tabella 4.5: Composizione in massa di combustibile e aria nel testcase **jet**

Per quanto riguarda le condizioni al contorno all'uscita del *nozzle*, abbiamo imposto i profili di velocità e turbolenza rilevati sperimentalmente. Il dominio di calcolo ha dimensioni (in [mm]) 120×800 nel piano $r - Z$. In figura 4.20 riportiamo un'immagine della mesh più densa utilizzata. E' costituita da 13450 celle esaedriche ed ha un'estensione circonferenziale di 30° .

Il database TNF mette a disposizione, per questa fiamma, i profili radiali di temperatura e delle principali specie chimiche nelle seguenti posizioni assiali (normalizzate rispetto al diametro D del *nozzle*):

$$Z/D = 5 \quad 20 \quad 40 \quad 60 \quad 80$$

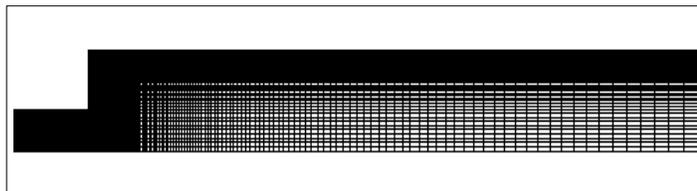


Figura 4.20: Mesh per il testcase jet

Nelle stesse sezioni sono disponibili anche misure complete di velocità. Sono inoltre disponibili i profili assiali di temperatura e velocità in corrispondenza dell'asse ($r = 0$).

I dati sperimentali sono stati confrontati con i valori calcolati utilizzando i seguenti modelli EDC affiancati dal modello $k - \varepsilon$ standard:

EDC-FC Modello EDC con chimica veloce (schematizzata dalla semplice reazione $H_2 + 0.5O_2 \rightarrow H_2O$) utilizzando l'espressione **Magnussen78**.

EDC-DC Modello EDC con chimica dettagliata. In questo caso è stato utilizzato il seguente meccanismo chimico sviluppato presso i *SANDIA National Lab*:

```

ELEMENTS H O N END
SPECIES H2 H O2 O OH HO2 H2O2 H2O N2 END
REACTIONS
H2+O2=2OH          0.170E+14  0.00  47780
OH+H2=H2O+H       0.117E+10  1.30  3626
O+OH=O2+H         0.400E+15  -0.50  0
O+H2=OH+H         0.506E+05  2.67  6290
H+O2+M=HO2+M     0.361E+18  -0.72  0
H2O/18.6/ H2/2.86/ N2/1.26/
OH+HO2=H2O+O2    0.750E+13  0.00  0
H+HO2=2OH         0.140E+15  0.00  1073
O+HO2=O2+OH      0.140E+14  0.00  1073
2OH=O+H2O        0.600E+09  1.30  0
H+H+M=H2+M      0.100E+19  -1.00  0
H2O/0.0/ H2/0.0/
H+H+H2=H2+H2     0.920E+17  -0.60  0
H+H+H2O=H2+H2O  0.600E+20  -1.25  0
H+OH+M=H2O+M    0.160E+23  -2.00  0
H2O/5/
H+O+M=OH+M      0.620E+17  -0.60  0
H2O/5/
O+O+M=O2+M      0.189E+14  0.00  -1788
H+HO2=H2+O2     0.125E+14  0.00  0
HO2+HO2=H2O2+O2 0.200E+13  0.00  0
H2O2+M=OH+OH+M  0.130E+18  0.00  45500
H2O2+H=HO2+H2   0.160E+13  0.00  3800
H2O2+OH=H2O+HO2 0.100E+14  0.00  1800
END

```

Il meccanismo contempla 9 specie chimiche per un totale di 20 reazioni elementari.

Riportiamo il profilo assiale di temperatura (figura 4.21) e i profili radiali di temperatura, H_2 , H_2O e OH nelle posizioni $Z/D = 5$, $Z/D = 20$ e $Z/D = 40$ (figure 4.22, 4.23, 4.24).

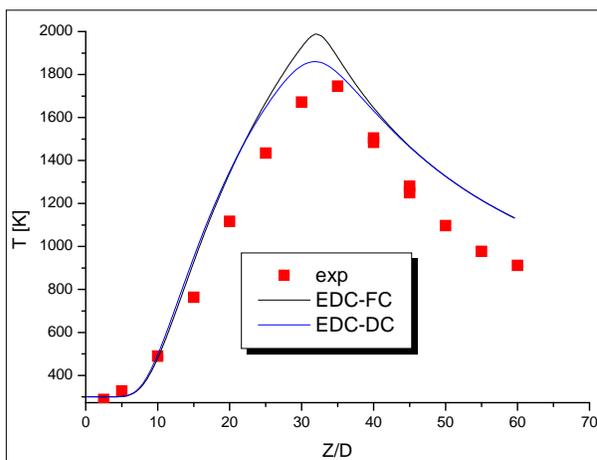


Figura 4.21: Profili assiali di temperatura per il testcase jet

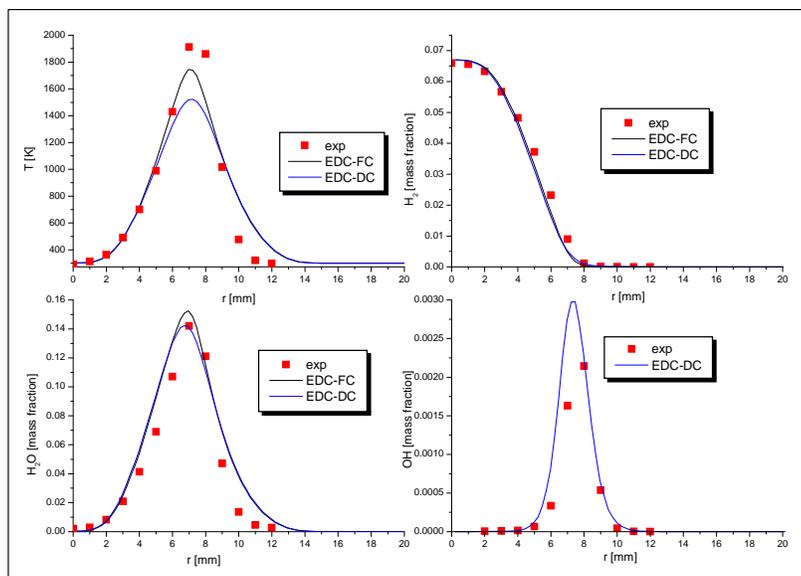


Figura 4.22: Profili radiali in $Z/D = 5$ per il testcase jet

Analizzando i risultati delle varie simulazioni, possiamo effettuare le seguenti considerazioni:

- Si osserva, in generale, una certa tendenza di entrambe i modelli a sovrastimare la reattività della miscela. Come cercheremo di giustificare

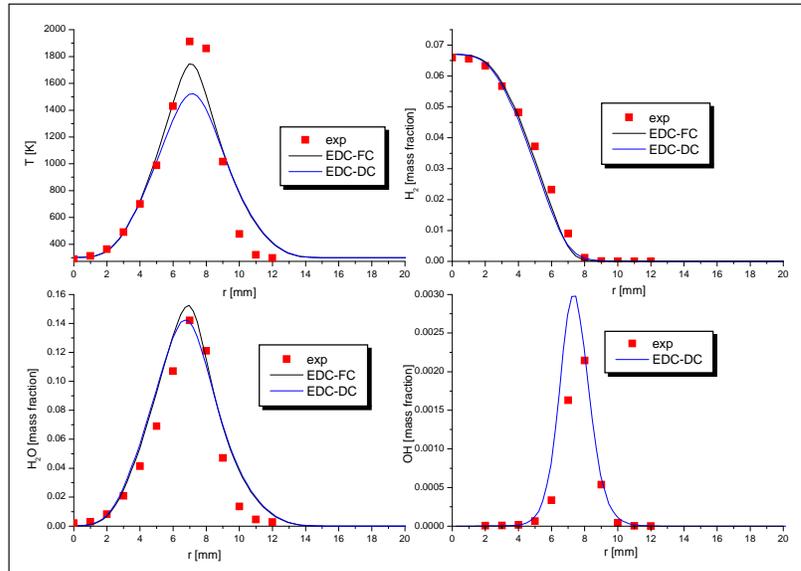


Figura 4.23: Profili radiali in $Z/D = 20$ per il testcase jet

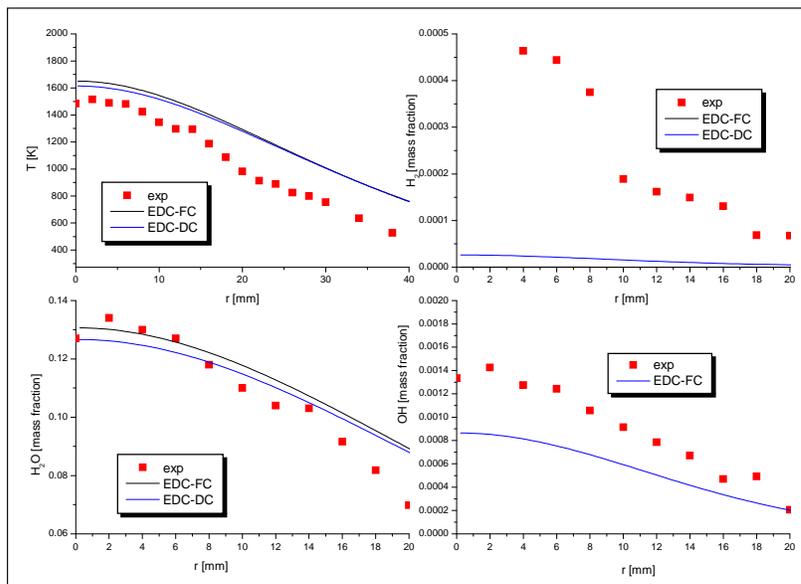


Figura 4.24: Profili radiali in $Z/D = 40$ per il testcase jet

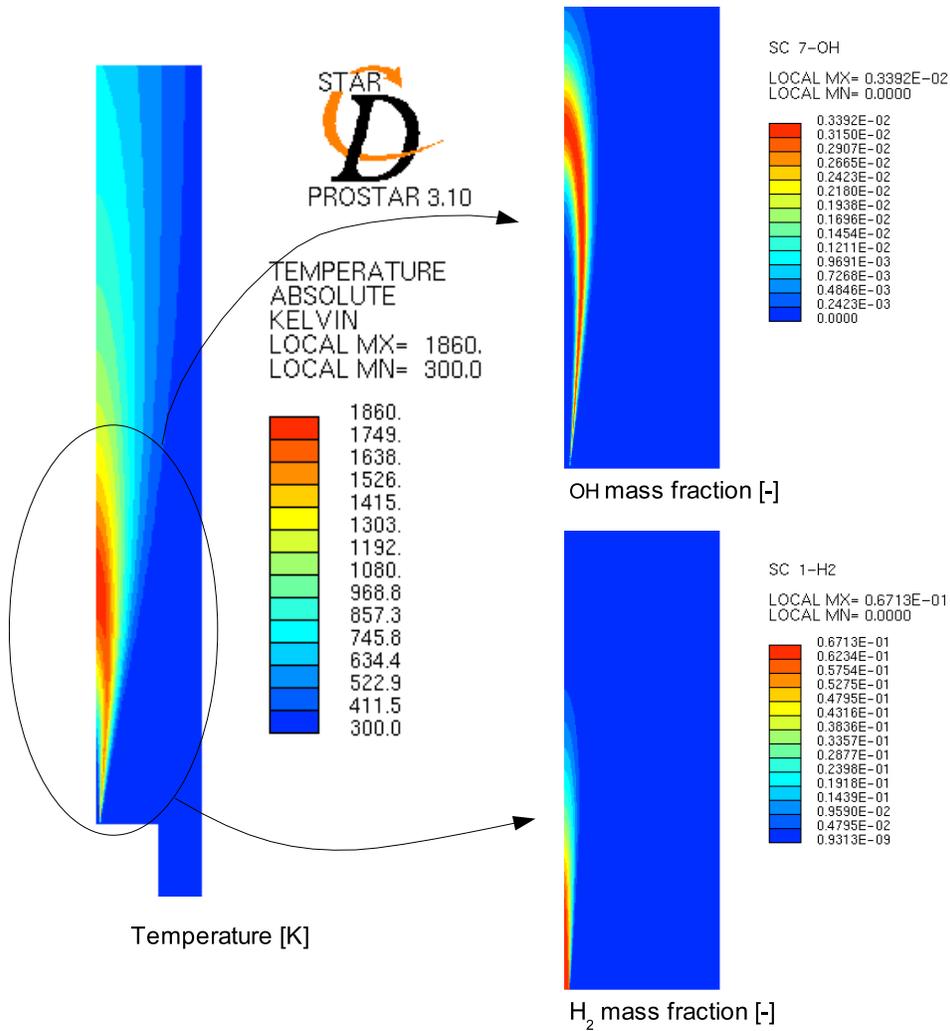


Figura 4.25: Contour plot relativi alla simulazione con modello EDC-DC del testcase jet

in seguito, questo comportamento sembra essere dovuto ai noti problemi del modello $k - \varepsilon$ nell'analisi dei getti assialsimmetrici. Ciò si ripercuote sia sulla corretta predizione della distribuzione radiale delle varie specie, sia direttamente su valore del *reaction rate* stimato dal modello EDC.

- Anche in questo caso il modello EDC-DC permette di predire in maniera più precisa il campo di temperatura, laddove l'evoluzione chimica del processo è il fenomeno limitante ($20 < Z/D < 40$). Osserviamo come il modello EDC-FC sovrastimi la temperatura massima della fiamma di circa 250 °C, mentre la sovrastima del modello EDC-DC è contenuta in meno di 100 °C.

In alcune zone (figura 4.22), i due modelli sottostimano la temperatura: si tratta della regione immediatamente a valle del *nozzle* dove la fiamma si è appena stabilizzata in corrispondenza dello *shear layer* fra getto e *coflow*.

Osserviamo, in questo caso, un buon accordo fra i dati sperimentali e quelli calcolati per quanto riguarda la concentrazione del radicale *OH*. Questo è probabilmente dovuto alla chimica più semplice che caratterizza la combustione dell'idrogeno.

- Nelle regioni molto valle del punto di iniezione, i due modelli predicono una prematura scomparsa della specie combustibile (H_2). E' un effetto della diffusa sovrastima della reattività già rilevata in precedenza. Per spiegare meglio l'origine di questo comportamento, è sufficiente osservare i grafici riportati in figura 4.26.

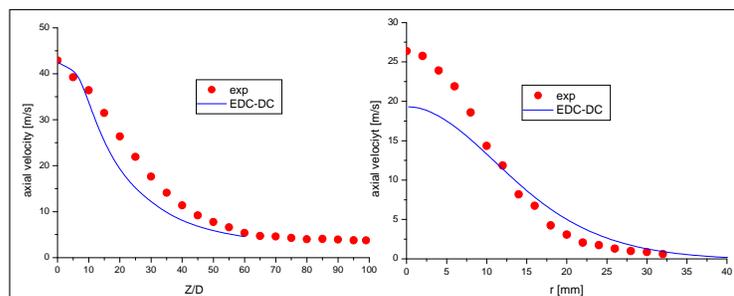


Figura 4.26: Profili assiale ($r=0$) e radiale ($Z/D = 20$) della componente assiale di velocità

Il modello $k - \varepsilon$ predice un'eccessivo *spreading* radiale del getto che si traduce in un decadimento troppo veloce in direzione assiale.

Nella figura 4.25 riportiamo alcuni *contour plot* della simulazione svolta con il modello EDC-DC, nei quali è possibile apprezzare la struttura complessiva della fiamma.

4.5.4 Vitiated Coflow Burner

Il testcase in esame affronta lo studio di una fiamma parzialmente premiscelata costituita da un getto di combustibile alimentato da i prodotti di una fiamma magra premiscelata (*vitiated coflow*). L'effetto risultante è una *lifted flame*, ossia una fiamma diffusiva che si stabilizza molto a valle del punto di iniezione.

Il testcase è ancora in fase di studio presso la *University of California* (Berkeley), e i dati riportati in questa sede costituiscono la prima campagna di misure ([9]).

In figura 4.27 riportiamo lo schema del dispositivo illustrato dagli stessi autori del test.

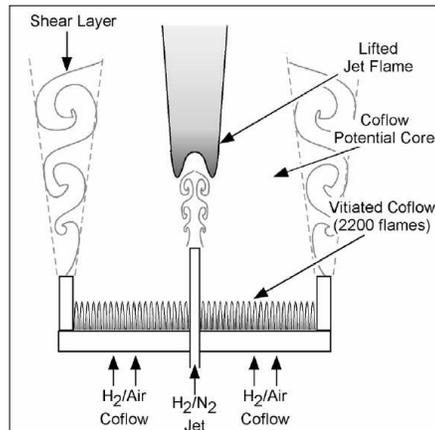


Figura 4.27: Schema del testcase **vcb**

Nella tabella 4.6 riportiamo le principali caratteristiche geometriche e fluidodinamiche del dispositivo.

Come è possibile osservare in figura 4.27, la caratteristica principale del campo di moto è il sollevamento (*lift*) della fiamma a valle del ugello. Si tratta di un fenomeno caratteristico delle fiamme parzialmente premiscelate

	Getto centrale	Coflow
D [mm]	4.57	210
V [m/s]	107.0	3.5
T [K]	305.0	1045.0
ρ [kg/m ³]	0.86	0.322
Re [-]	23600	18600

Tabella 4.6: Dati nominali del testcase **vcb**

per il quale sono state proposte numerose spiegazioni, ma che rimane tuttavia ancora in fase di parziale definizione.

Il processo che porta la fiamma a stabilizzarsi a valle dell'ugello è sicuramente determinato da una profonda interazione tra il ritardo di accensione della miscela (caratteristica termochimica) e la penetrazione dei vortici caldi del *coflow* nel getto (miscelazione turbolenta)

Peters ([51] e [56]) ha proposto un modello per giustificare e simulare le *lifted flames* che si basa sul concetto di “fiamma tripla”. Peters introduce, per questo tipo di fiamma, il concetto di *partially premixed burning velocity*. E' possibile infatti mostrare che questo tipo di fiamme si stabilizzano in corrispondenza di regioni prossime alla composizione stechiometrica, che separano due zone nelle quali si propagano, rispettivamente, una fiamma premiscelata magra ed una ricca (vedi figura 4.28).

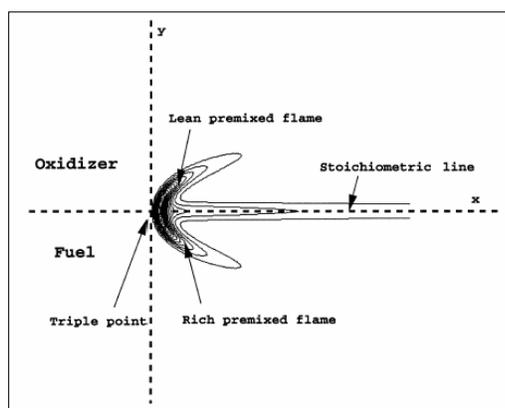


Figura 4.28: Rappresentazione schematica di una fiamma tripla

Queste strutture, dette “punti tripli”, rappresentano i nuclei di stabilizza-

zione del sistema. A valle del punto triplo, la reazione prosegue propagandosi in maniera molto prossima ad una fiamma diffusiva.

La spiegazione di Peters, in altre parole, giustifica la stabilizzazione delle fiamme parzialmente premiscelate, con un meccanismo analogo alla stabilizzazione delle fiamme premiscelate pure. La predizione dell'altezza di stabilizzazione, pertanto, è sinonimo di una corretta stima della fittizia *partially premixed burning velocity* introdotta da Peters.

Questo tipo di simulazione permette di testare il modello EDC in un regime di combustione turbolenta tipico dei recenti combustori di turbina a gas, caratterizzati da complesse fiamme parzialmente premiscelate. Nel capitolo finale di questo lavoro riporteremo un esempio di combustore di TAG interessato da stabilizzazione mediante fiamma tripla.

Il testcase **vcb** che ci accingiamo a descrivere, elimina alcune complicazioni tipiche dei combustori reali (zone di ricircolazione), e permette di verificare la struttura a “fiamma tripla” semplificando notevolmente la chimica del sistema, ricorrendo a H_2 come combustibile.

La fiamma premiscelata (H_2 /aria) che va a costituire il *coflow*, è stabilizzata mediante un “*perforated plate*” che di fatto determina la nascita di 2200 piccole fiamme premiscelate caratterizzate da un rapporto di equivalenza $\phi = 0.25$. L'apice dell'ugello presenta un'elevazione di 70 mm rispetto al piano del *perforated plate*, pertanto, come consigliano gli stessi autori del test (artefici anche di simulazioni numeriche su questa stessa geometria, [9]), è plausibile considerare, ai fini del calcolo, il *coflow* costituito dai prodotti della completa ossidazione delle 2200 fiamme premiscelate.

In altre parole, quindi, non andremo a simulare la stabilizzazione del *coflow* (peraltro geometricamente assai complessa), ma imporreemo le condizioni di flusso uniforme assegnando ai due getti le composizioni in massa riportate in tabella 4.7:

	Central Jet		Coflow
H_2	0.0234	O_2	0.17082
N_2	0.9766	N_2	0.76466
		H_2O	0.066453

Tabella 4.7: Composizione in massa di combustibile e *coflow* nel testcase **vcb**

Sperimentalmente si osserva un'altezza di *lift* pari a $H/D_{jet} = 10$. E'

interessante notare come il valore sia in buon accordo con quello predetto dalla seguente correlazione (Kalghatgi, 1984):

$$H_K = 50 \left(\frac{\nu_{jet} V_{jet}}{S_{L_{max}}^2} \right) \left(\frac{T_{coflow} W_{jet}}{T_{jet} W_{coflow}} \right)^{1.5}$$

W_{coflow} e W_{jet} sono le masse molari del *coflow* e del getto, mentre ν_{jet} è la viscosità cinematica del getto. Con i valori caratteristici della geometria in esame la correlazione predice un rapporto $H_K/D_{jet} = 11.4$

Per il presente testcase, i dati sperimentali a disposizione sono costituiti dai profili radiali della temperatura e delle concentrazioni delle principali specie chimiche nelle seguenti posizioni assiali:

$$Z/D = 1 \quad 8 \quad 11 \quad 14$$

Abbiamo confrontato i dati sperimentali con i risultati delle simulazioni svolte con gli stessi due modelli EDC utilizzati per il testcase **jet** (EDC-FC e EDC-DC). Anche in questo caso il confronto mira a mostrare la necessità del ricorso ad una chimica dettagliata, per poter apprezzare i complessi fenomeni di interazione chimica-turbolenza che caratterizzano questo tipo di fiamme.

In figura 4.29 riportiamo un'immagine della mesh più densa utilizzata in questo testcase: è costituita da 23000 celle esaedriche ed il dominio di calcolo ha un'estensione 60x200 [mm] nel piano $r - Z$ centrato allo sbocco dell'ugello centrale, ed un'estensione di 30° in direzione circonferenziale.

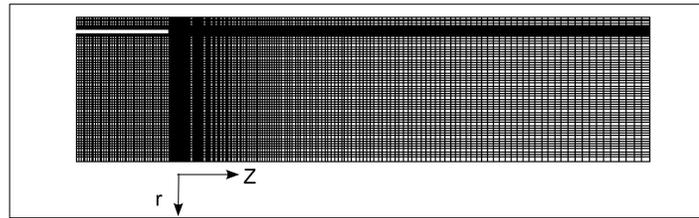


Figura 4.29: Mesh di calcolo per il testcase **vcb**

Nelle figure seguenti (4.30, 4.31, 4.32, 4.33), riportiamo i profili radiali della temperatura e delle frazioni in massa di H_2 , H_2O e OH , nelle quattro sezioni assiali prima indicate⁸. Dall'analisi dei risultati delle simulazioni, possiamo effettuare le seguenti considerazioni:

⁸in realtà nella posizione $Z/D = 1$, non riporteremo il profilo radiale della frazione in massa di OH , in quanto non pubblicato dagli autori.

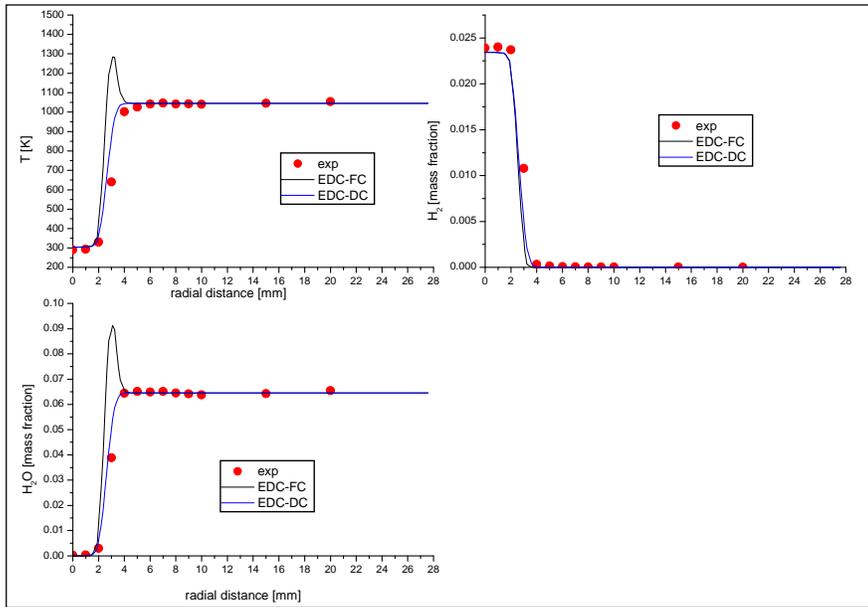


Figure 4.30: Profili radiali in $Z/D = 1$ per il testcase **vcb**

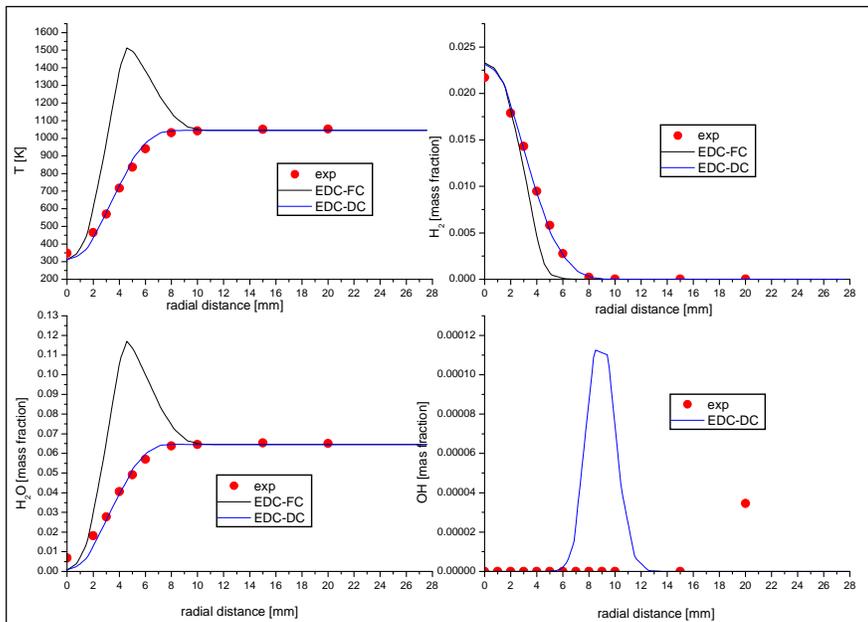


Figure 4.31: Profili radiali in $Z/D = 8$ per il testcase **vcb**

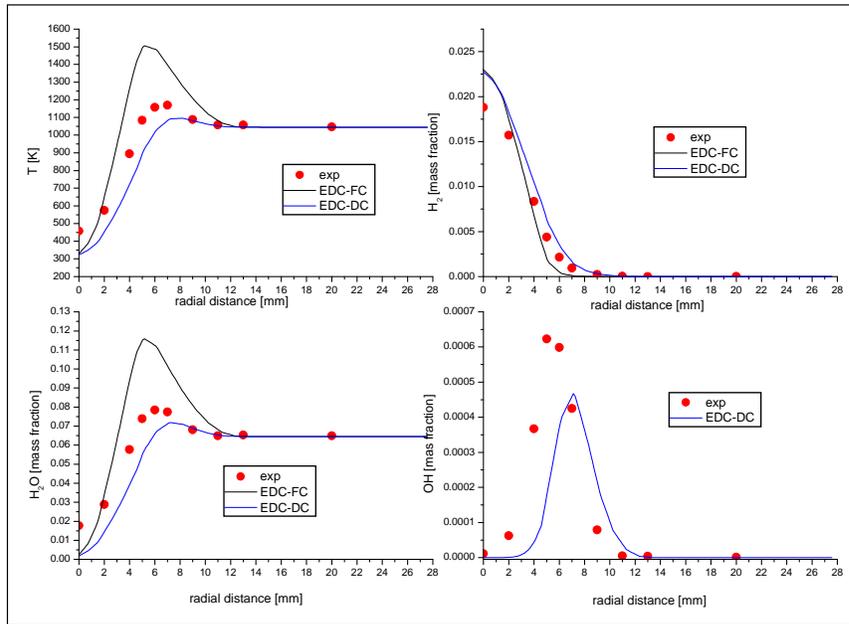


Figura 4.32: Profili radiali in $Z/D = 11$ per il testcase vcb

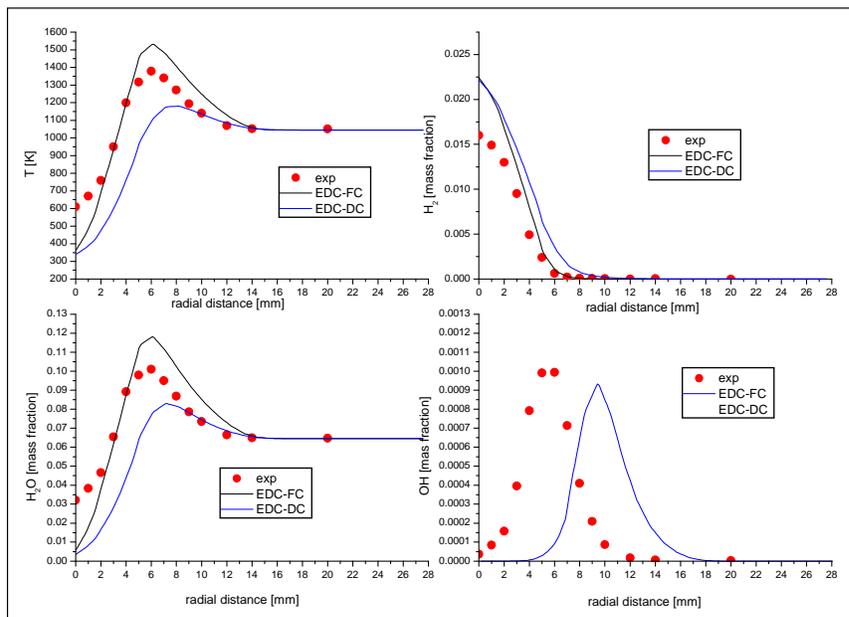


Figura 4.33: Profili radiali in $Z/D = 14$ per il testcase vcb

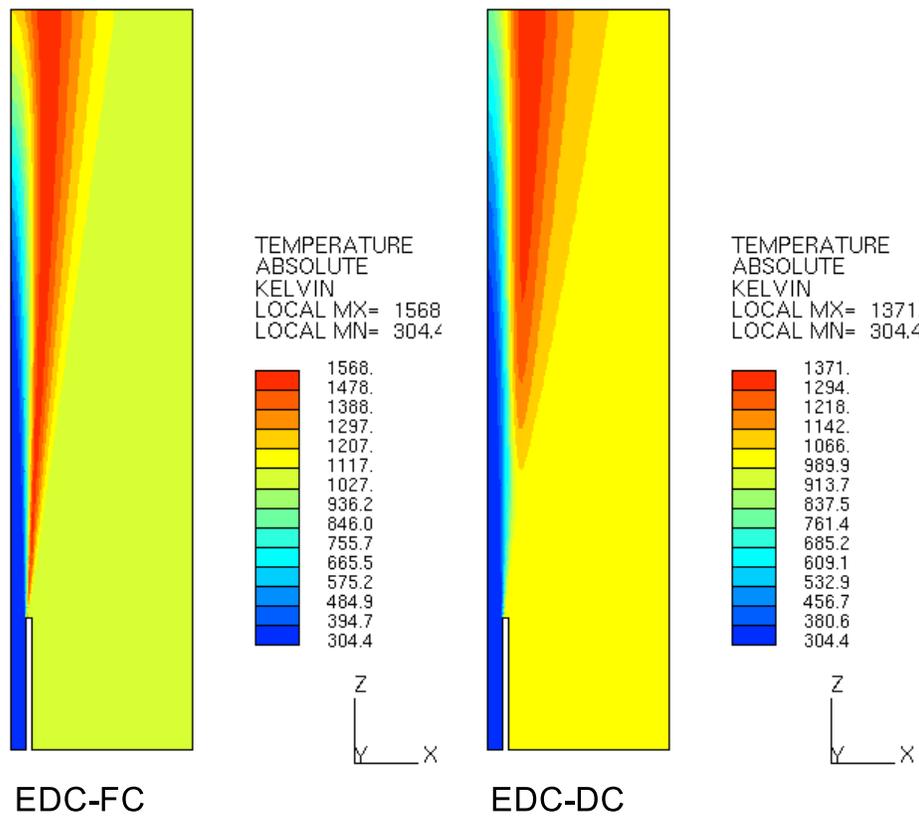


Figura 4.34: Campo di temperatura predetto dai modelli EDC-FC e EDC-DC per il testcase **vcb**

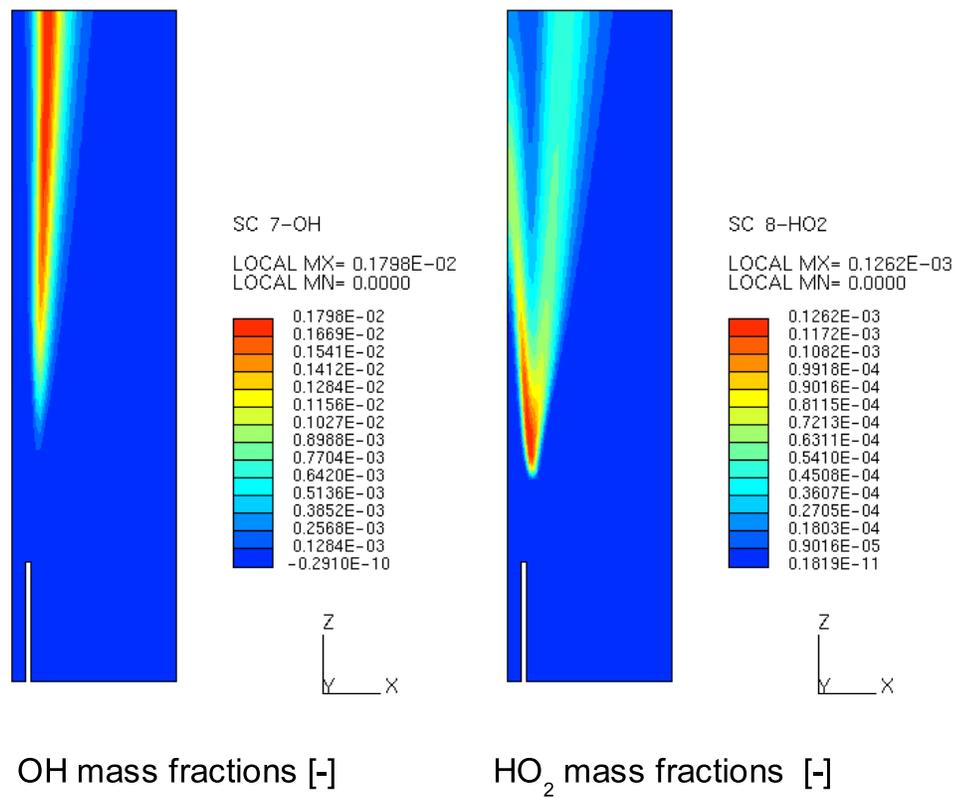


Figura 4.35: Distribuzione dei radicali OH e HO₂

- Il modello EDC-DC predice un'altezza di *lift* pari a $H_{EDC}/D_{jet} = 8 \div 9$ che risulta in ottimo accordo con il valore 10 rilevato sperimentalmente. Il parametro per individuare l'altezza di stabilizzazione è la concentrazione del radicale OH (come consigliano gli stessi autori dell'esperimento, [9]). In figura 4.31 si osserva come il modello EDC-DC anticipi la formazione del radicale OH rispetto ai valori sperimentali, giustificando la sottostima dell'altezza di *lift*.

E' interessante notare come il modello EDC-FC non predica nessun tipo di *lift*, riportando una fiamma perfettamente stabilizzata già un solo diametro a valle dell'ugello. Questo aspetto testimonia la profonda interazione tra chimica e turbolenza nella zona di accensione-stabilizzazione della fiamma.

- In entrambe i modelli, a valle della zona di stabilizzazione, si osserva una tendenza alla sottostima della reattività della miscela in corrispondenza dell'asse della fiamma. Si tratta, questo, di un fenomeno in controtendenza con il consueto comportamento imposto dal modello $k - \varepsilon$ che, come più volte ricordato, tende ad accelerare il decadimento del getto in direzione assiale.

E' un effetto che può essere giustificato con la particolare struttura del campo di moto determinata dal *lift* della fiamma: la stabilizzazione può indurre delle disuniformità nel campo di densità e pressione che introdurrebbero ulteriori difficoltà per il modello $k - \varepsilon$. Questa giustificazione spiegherebbe anche il miglior comportamento del modello EDC-FC a valle della stabilizzazione, proprio perché, di fatto, non influenzato da essa.

Nelle figura 4.34 abbiamo modo di apprezzare la struttura della fiamma e osservare la netta distinzione, stavolta, nel campo di temperatura predetto dai due modelli.

In figura 4.35 riportiamo i campi delle concentrazioni dei radicali OH e HO_2 . Il radicale OH , come anticipato, viene usato come indicatore della attività della reazione: la sua distribuzione descrive in maniera molto chiara il *lift* della fiamma. La distribuzione del radicale HO_2 , invece, è estremamente efficiente nel mostrare come la situazione simulata possa essere inquadrata nell'ambito delle fiamme triple definite da Peters (cfr figura 4.28).

4.5.5 *VanderBilt Combustor*

Nel paragrafo §3.3.2 abbiamo analizzato il regime caratteristico di un combustore LPC di turbina a gas, individuando la regione del diagramma spettrale di Borghi in cui questi dispositivi operano. Tipicamente si hanno numeri di *Damköhler* inferiori od uguali all'unità, con valori dei parametri u'/S_L^0 e L_T/δ_L tali da determinare un regime di flamelet ispessite, denominato *thin reaction zone*.

In precedenza (§3.1.1), abbiamo osservato come uno dei principali sistemi per stabilizzare una fiamma premiscelata turbolenta consista nel realizzare una zona di ricircolazione che, oltre a creare una zona di bassa velocità in cui la fiamma possa ancorarsi, determini il continuo ricircolo di gas caldi sulla miscela fresca favorendo il processo di accensione.

Appare quindi evidente l'importanza di avere a disposizione misure sperimentali dettagliate di fiamme operanti nel regime indicato e stabilizzate mediante ricircolo di gas caldi, sia per una migliore comprensione del fenomeno fisico sia per la necessità di metter a punto i modelli numerici. Nonostante ciò la comunità scientifica ha prodotto pochissimi lavori in questo campo, principalmente per via della estrema difficoltà di una sperimentazione efficiente di questi dispositivi. Si deve infatti tenere presente che sia le misure di velocità e turbolenza, sia le misure di temperatura e concentrazione devono essere effettuate con strumenti, non intrusivi, ad alta risoluzione ed alta velocità di acquisizione, per via delle piccole scale temporali in gioco (alti livelli di turbolenza) e dei bassi valori di concentrazione delle specie di maggiore interesse (e.g. $NO \approx 2 - 3$ ppm e $CO \approx 1000$ ppm) [52].

Il lavoro della *VanderBilt University* (Nashville, Tennessee USA) si prefigge di colmare le lacune indicate proponendo lo studio sperimentale dettagliato di un combustore, operante in condizioni ambiente, che riproduce le principali caratteristiche, chimiche e turbolente, di una camera di combustione *lean premixed* a gas naturale. Il lavoro ha costituito l'oggetto di un dottorato di ricerca (2003) e vogliamo qui ringraziare il dott. Nandula per aver messo a disposizione la geometria del combustore e i dati misurati, ancora solo parzialmente pubblicati [52].

Il **VanderBilt Combustor (vdb)** è costituito da un condotto a sezione quadrata con pareti quarzo, nel quale si realizza un fiamma premiscelata metano aria, stabilizzata mediante l'interposizione di un corpo non aerodinamico (*bluff-body*). In figura 4.36 è riportata una rappresentazione schematica

del dispositivo ed una fotografia della fiamma. A valle del *bluff-body* (dia-

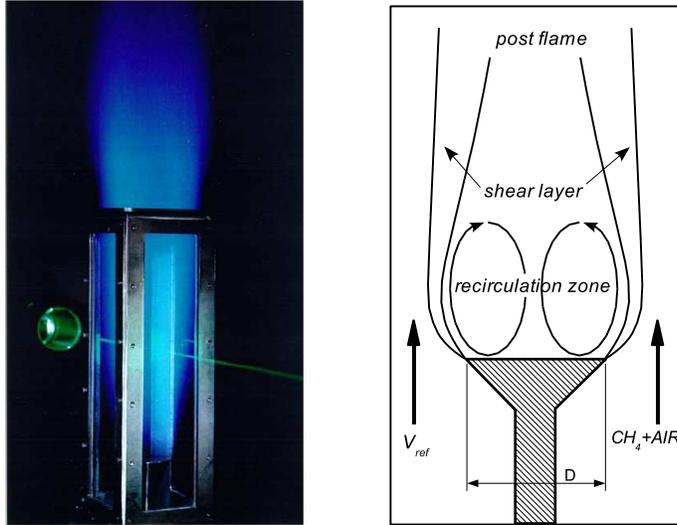


Figura 4.36: Schema del combustore **vdb** e immagine della fiamma [52]

metro $D = 44.45$ mm) si forma una zona di ricircolazione toroidale che si estende a valle per circa un diametro. Il combustore presenta un fattore di bloccaggio, definito come la superficie del *bluff-body* rispetto all'area totale del condotto, pari al 25%. Si tratta di un valore analogo a quello ottenuto nelle zone di ricircolazione dei combustori LPC stabilizzati mediante *swirler*: il campo di moto prodotto dal *vortex breakdown* (vedi figura 3.4) è del tutto equivalente a quello descritto in figura 4.36. Come accennato in precedenza, la zona di ricircolazione svolge le tre seguenti funzioni:

1. sviluppo di una zona a bassa velocità
2. lunghi tempi di residenza con possibilità di ancoraggio della fiamma
3. continuo apporto di una sorgente di accensione costituita dalla frazione di gas caldi ricircolata

Attorno alla zona di ricircolo si sviluppa uno *shear layer*, di forma anulare, determinato dall'azione del flusso principale sulla regione a bassa velocità centrale. All'interno dello *shear layer* si realizza la fiamma, alimentata dalla miscela fresca, proveniente dalla corrente principale, e dall'azione di strutture vorticosi di grandi dimensioni che apportano gas caldi provenienti dalla zona centrale (vedi figura 4.37). Possiamo descrivere la fiamma del **vdb**

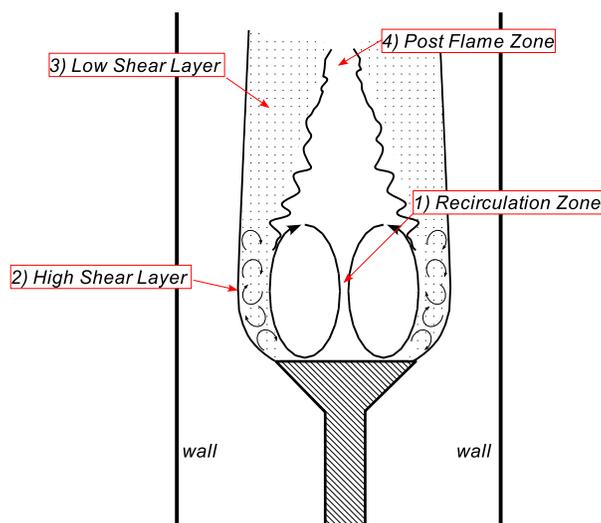


Figura 4.37: Rappresentazione schematica della fiamma nel combustore **vdb**

individuando 4 zone caratteristiche [52]:

1. **Recirculation zone.** In questa zona, caratterizzata da ampi tempi di residenza, si possono assumere le condizioni di equilibrio per le specie primarie (CH_4 , CO_2 e H_2O) e per la temperatura, a meno di eventuali perdite di calore sulla superficie del piattello. Qui si forma anche la quasi totalità degli NO_x del combustore e si ha una concentrazione di CO ben al di sopra del valore di equilibrio.
2. **High Shear layer.** Come accennato, in questa zona si ha lo sviluppo di una fiamma sottile, sostenuta unicamente dalla penetrazione di sacche di gas caldi provenienti dalla zona centrale. L'elevato *stretching* ($400\ s^{-1}$) a cui è sottoposta la fiamma in questa zona rendono la reazione piuttosto debole e dominata unicamente dal *mixing*.
3. **Low Shear Layer.** A valle della zona di ricircolo l'azione di taglio nello *shear layer* si riduce e con essa le *stretching* a cui è soggetta la fiamma che, progressivamente, viene ad essere interessata da flamelet totalmente *unstretched*.
4. **Post Flame Zone.** Nella zona centrale, a valle della bolla di ricircolo, si ritrovano progressivamente le condizioni di equilibrio, con la ricombinazione dei radicali in eccesso provenienti dalle zone precedenti

(principalmente la ricombinazione di OH in H_2O e del CO in CO_2). Allo scarico del combustore (circa 6 diametri a valle), sono misurati 1000 ppm circa di CO , 10 ppm circa di NO ed una frazione di circa il 7% di miscela non reagita.

V_{ref} [m/s]	15
ϕ [-]	0.586
D [mm]	44.45
T [K]	294.0
P [bar]	1.0
TU %	24.0
L_T [mm]	3.6
Re (D) [-]	43400
Re $_T$ [-]	625

Tabella 4.8: Dati per il combustore **vdb**

In tabella 4.8 sono riportati i dati nominali principali del combustore. La velocità di riferimento V_{ref} , l'intensità di turbolenza TU , la lunghezza di scala integrale (stimata pari alla dimensione dei fori della griglia inserita a monte per stabilizzare il flusso principale) devono essere considerati nella sezione di prova, immediatamente a monte della zona di ricircolo. Il rapporto di equivalenza adottato, 0.586, è rappresentativo del funzionamento di un combustore LPC reale in quanto poco al di sopra del limite di estinzione della fiamma, posto, in queste condizioni operative, a $\phi_{WE} = 0.53$ [52].

E' interessante inquadrare la fiamma del bruciatore **vdb** nel diagramma di Borghi, assumendo come grandezze di riferimento quelle rilevate nella sezione di gola del dispositivo (in corrispondenza del piatto del *bluff-body*). Per $\phi = 0.586$ possiamo stimare una velocità di fiamma laminare *unstretched* $S_L^0 = 11$ cm/s, che implica $u'/S_L^0 = 28$. Stimando lo spessore del fronte di fiamma laminare tramite la 3.2 avremo $L_T/\delta_L = 10$. Abbiamo quindi un numero di *Damköhler* pari a:

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_L} \approx \frac{L_T}{u'} \cdot \frac{S_L^0}{\delta_L} \approx 0.5$$

Il combustore si trova quindi ad operare, relativamente alle condizioni nominali, proprio nella *thin reaction zone*, esattamente dove abbiamo collocato

i tipici combustori LPC per turbogas. Questo non esclude che, localmente, la fiamma possa realizzarsi secondo regimi piuttosto diversi. In particolare possiamo ritenere che all'interno della zona di ricircolo l'ipotesi di *flamelet combustion* non sia più valida, ma che si realizzi la condizione di *perfectly stirred reactor*. Viceversa nella regione 3 descritta in precedenza, la fiamma può essere descritta come un insieme di *corrugated flamelet*.

4.5.5.1 Simulazioni in condizioni reattive

Abbiamo operato una serie di simulazioni reattive del combustore utilizzando le seguenti varianti del modello EDC⁹:

462 Modello EDC **Hybrid Reaction Rate** con meccanismo NM98 [53]

562 Modello EDC **Combined Time Scale** con meccanismo NM98 [53]

662 Modello EDC **Unmixedness Factor** con meccanismo NM98 [53]

DC Modello EDC **Detailed Chemistry** con meccanismo *skeletal* di Smooke (16 specie, 25 reazioni elementari) [70]

Nella presente simulazione sono state usate le seguenti costanti per i vari modelli:

$$C_{D1} = 0.135 \quad C_{D2} = 2.0 \quad C_{\eta} = 7.0 \quad (\text{valida solo per EDC 662})$$

Per semplificare la generazione della mesh abbiamo ricondotto il tubo di fiamma a sezione quadrata ad un condotto a sezione circolare con sezione di efflusso equivalente. In questo modo abbiamo potuto assumere la completa assialsimmetria del combustore e, data l'assenza di componenti di *swirl*, ricorrere ad una simulazione bidimensionale. Dal momento che i quattro angoli del condotto reale sono opportunamente smussati in modo da limitare la formazione di vortici secondari, l'approssimazione fatta di condotto cilindrico non introduca errori significativi.

In figura 4.38 è riportata una delle mesh utilizzate, che rappresenta una porzione angolare di 10° dell'intera geometria cilindrica.

Il combustore reale ha una lunghezza, misurata a partire dal piano del *bluff-body* dove posizioneremo l'origine del nostro sistema di riferimento, di

⁹i codici identificativi 462, 562 e 662 corrispondono alle flag usate nel codice per attivare i diversi modelli e sono qui usate per comodità di descrizione

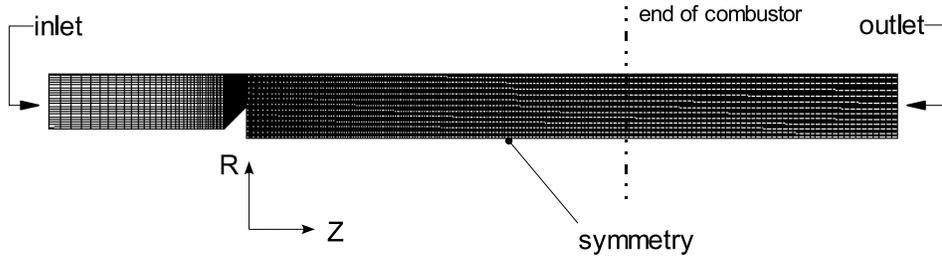


Figura 4.38: Mesh di calcolo per il testcase **vdb**: 10000 celle esaedriche

circa 6 diametri ($L = 267$ mm), mentre la mesh di calcolo è stata estesa per una lunghezza di 460 mm in modo da limitare l'effetto dell'incertezza delle condizioni sulla *boundary* di uscita.

Le condizioni al contorno imposte sono congruenti con quelle riportate in tabella 4.8: l'incertezza maggiore risiede nel valore della lunghezza di scala integrale, non direttamente misurata dagli autori. Gli stessi autori, tuttavia, assumono per L_T il valore corrispondente all'ampiezza dei fori della *turbulence grid* posta a monte della camera [52].

Il combustore è stato oggetto di una dettagliata campagna di misure sperimentali che hanno permesso la mappatura, sottoforma di profili radiali, delle seguenti grandezze:

- Temperatura
- Frazione molare CH_4 , CO_2 , O_2 e H_2O
- ppm in volume di CO , H_2 , OH e NO

I profili radiali sono stati estratti nelle seguenti stazioni assiali:

$$Z/D = \quad 0.1 \quad 0.3 \quad 0.8 \quad 1.0 \quad 1.2 \quad 1.5 \quad 2.0 \quad 6.0$$

Le tecniche ottiche utilizzate nella sperimentazione consistono nello scattering *Raman* (specie principali e CO) e *Rayleigh* (temperatura) e nella *Laser Induced Fluorescence LIF* (OH e NO) [52]. Nelle prossime pagine riporteremo, per le principali grandezze, i confronti tra i valori misurati e calcolati, a seconda del modello usato.

Come è possibile osservare dalle figure 4.39 e 4.40 l'accordo complessivo fra il campo di temperatura predetto dai vari modelli e quello rilevato sperimentalmente è più che soddisfacente. Tutti i modelli riescono a cogliere

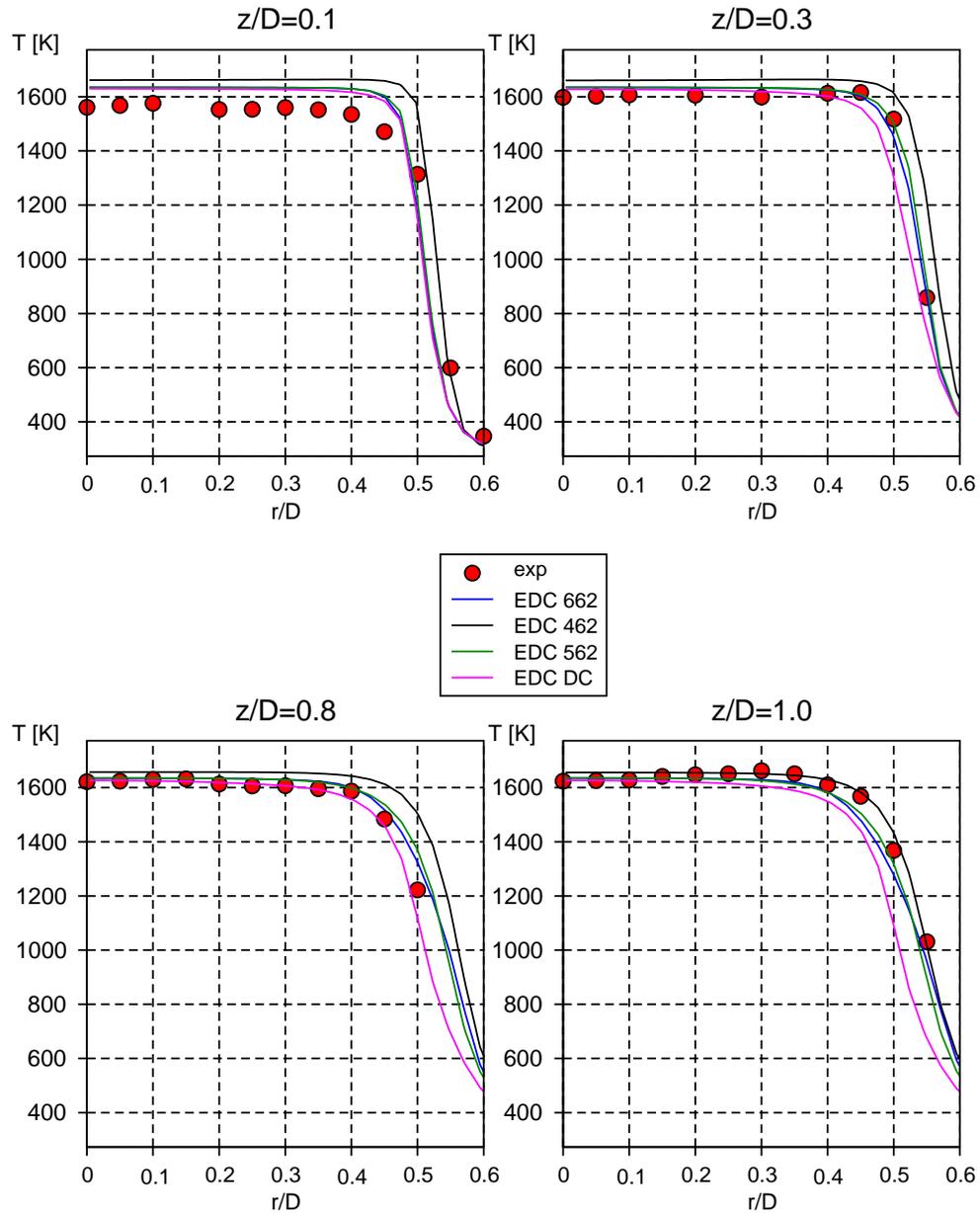


Figura 4.39: Combustore vdb: profili radiali della temperatura media

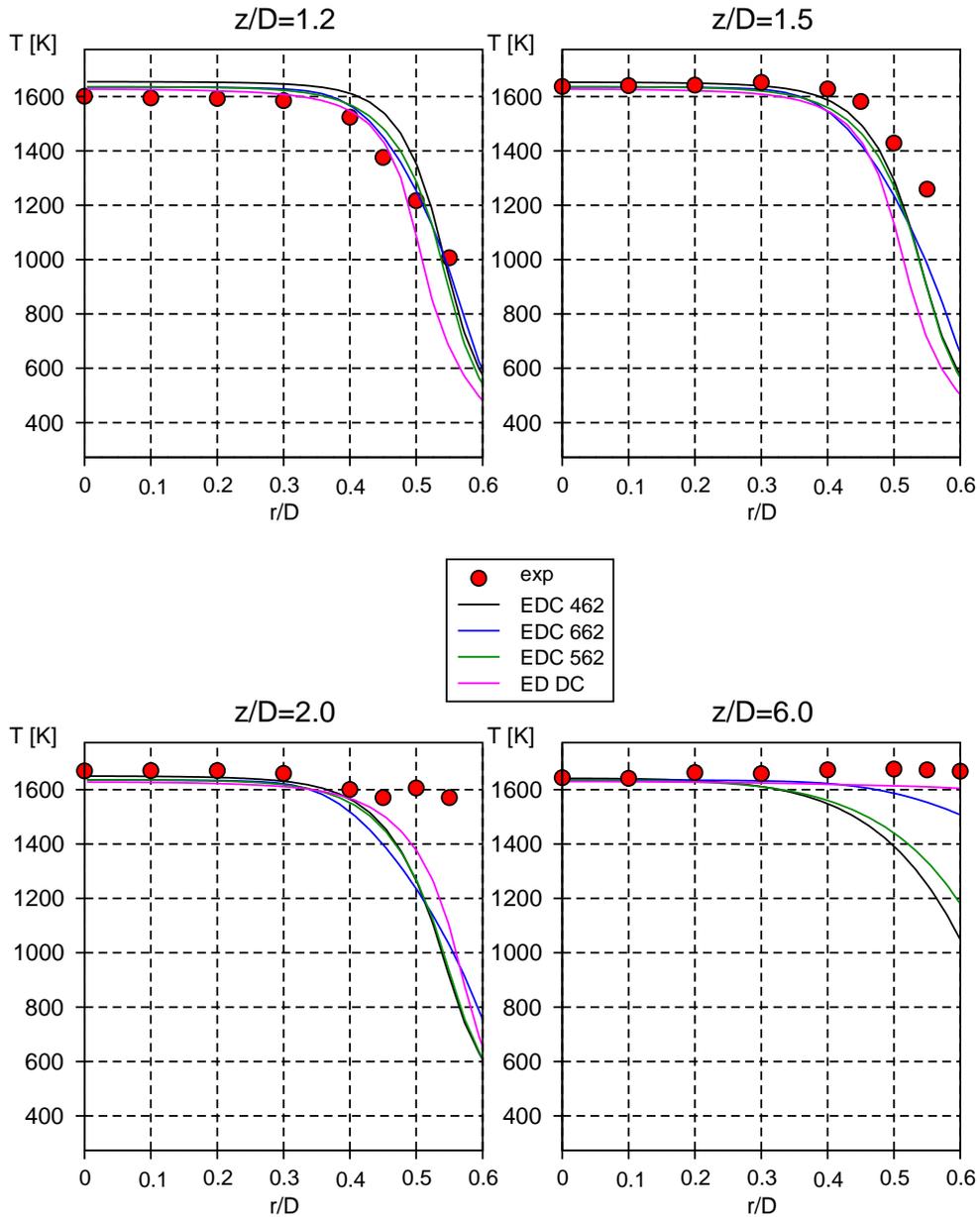


Figura 4.40: Combustore vdb: profili radiali della temperatura media

la struttura iniziale della fiamma ($z/D < 1.5$), descrivendone correttamente il meccanismo di ancoraggio. Tuttavia solamente il modello DC e, in parte, il modello **662**, riescono a predire la corretta lunghezza della fiamma, predicendo un completamento della reazione per $z/D \approx 6$.

In figura 4.41 sono riportate le mappe di temperatura ottenute con i 4 modelli; si osserva chiaramente come i modelli **462** e **562** sottostimino la lunghezza della fiamma che, al termine del combustore ($z/D = 6$) risulta completamente attaccata a parete.

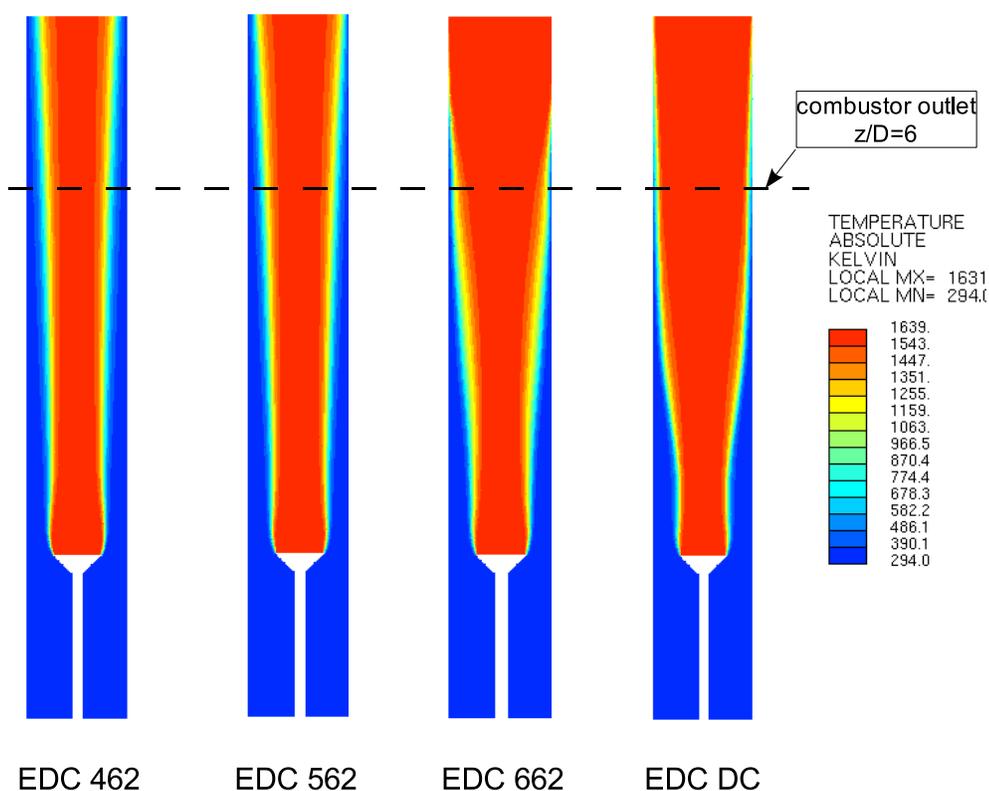


Figura 4.41: Combustore **vdb**: mappe di temperatura media

Nelle figure 4.44, 4.45 e 4.46, 4.47 sono riportati, rispettivamente, i confronti tra le frazioni molari di CH_4 e H_2O , espressi tramite i consueti profili radiali. Dall'analisi critica dei risultati fin qui mostrati emergono le seguenti considerazioni:

- Per $z/D < 0.3$ tutti i modelli sovrastimano la temperatura nella zona di ricircolo. La simulazione numerica predice, in ogni caso, una tempe-

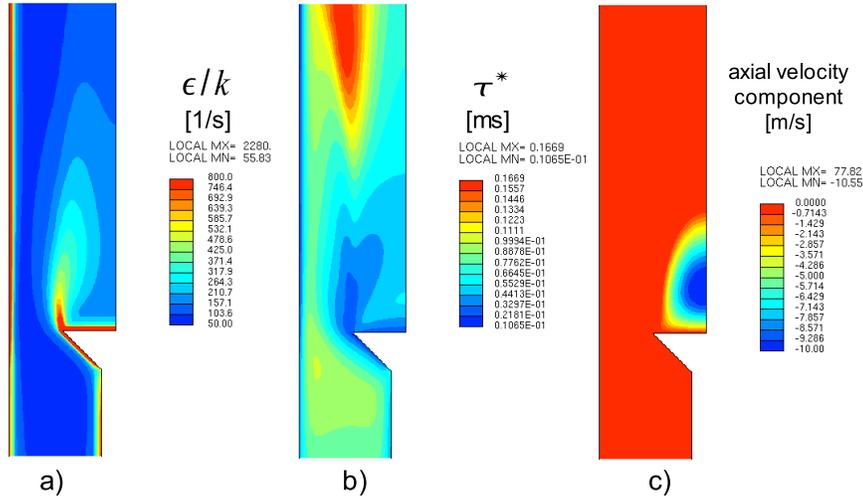


Figura 4.42: Combustore *vdb*: a) mappa del fattore di *stretching* nelle zone 2 e 3 del combustore; b) mappa del tempo di residenza τ^* nelle FS; c) visualizzazione della bolla di ricircolo: l'estensione predetta dal calcolo è pari a circa 1.2 volte il diametro D del *bluff-body*

ratura di circa 1640 K, corrispondente alla temperatura di equilibrio, mentre viene rilevata sperimentalmente una temperatura di circa 1560 K. Ciò è dovuto, come descritto dagli autori delle misure, al raffreddamento dei gas caldi sulla superficie, metallica e non isolata, del piatto del *bluff-body*. Gli autori stimano che, nelle regioni prossime a parete della zona di ricircolo ($z/D < 0.3$), il fluido perda circa il 6% della sua entalpia, giusticando la riduzione di circa il 5 – 10% della temperatura di equilibrio locale [52]. La sovrastima mostrata è coerente con l'assunzione, comune a tutte le simulazioni svolte, di pareti solide perfettamente adiabatiche.

- E' interessante osservare come tutti i modelli siano in grado di mostrare le 4 zone fondamentali con cui abbiamo suddiviso il campo di moto (vedi figura 4.37. La regione più critica per la simulazione numerica è, a nostro avviso, la fase di transizione tra la zona 2 e la zona 3, costituita dallo *shear layer* in corrispondenza della parte terminale della zona di ricircolo ($0.8 < z/D < 1.2$). Qui si osserva, da parte del modello DC, una sensibile sottostima della reattività che determina una contrazione della fiamma portando ad un incipiente cambio di concavità della superficie che descrive il fronte di fiamma (vedi figura 4.41. L'ef-

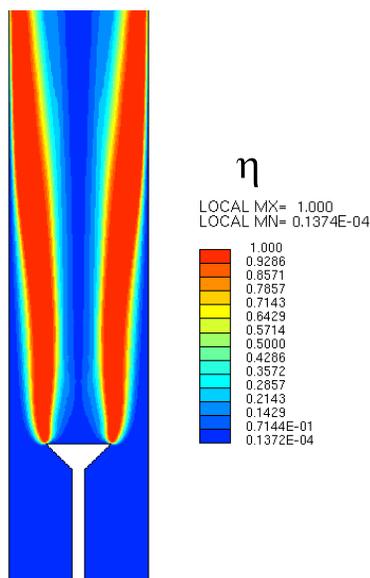


Figura 4.43: Combustore **vdb**: mappa del fattore η (*unmixedness factor*)

fetto è spiegabile confrontando (figura 4.42.a e 4.42.b) la distribuzione del fattore di *stretching* ε/k , e il tempo di residenza delle FS, τ^* : si osserva come in tutta la regione ad alto *stretching* corrispondente allo *shear layer*, il modello DC lavori con bassi tempi di residenza per i reattori delle FS, giustificando la contrazione della fiamma. In figura 4.42.c è riportata la mappa dei valori negativi della componente assiale di velocità, capace di isolare con chiarezza l'estensione della zona di ricircolo.

- L'effetto preponderante dell'ispessimento dello *shear layer* nella zona 3 (vedi fig. 4.37), è l'aumento dello spessore del fronte di fiamma turbolento (*flame brush*). Questo comportamento è descritto, in misura diversa, da tutti i modelli. Come si evince dai profili radiali di temperatura per $z/D = 1.5$ e $z/D = 2.0$ (figura 4.39), il modello **662** sembra riprodurre il fenomeno con accuratezza maggiore degli altri. Questo è dovuto all'uso del termine η (*unmixedness factor*) che svolge il ruolo di “peso” tra il contributo cinetico e il contributo dovuto al *mixing* turbolento nella stima del *reaction rate*. Come è possibile osservare in figura 4.43 η assume valori prossimi all'unità proprio nell'area interessata dallo *shear layer*, consentendo una corretta stima dell'effetto del

mixing turbolento proprio nella zona interessata dal fronte di fiamma. Nel presente lavoro è stato utilizzato un valore $C_\eta = 7$ per la costante del modello **662** (vedi equazione 4.20), così come suggerito da Krüger e collaboratori [35].

Per completare l'analisi del combustore **vdb** riportiamo nelle figure 4.48 e 4.49, i profili radiali della concentrazione di CO , misurata e calcolata, espressa in ppm in volume.

Il primo aspetto che occorre sottolineare è l'estrema incertezza dei dati sperimentali: nella zona di ricircolo (per $z/D = 0.3$) il valore misurato della concentrazione di CO , circa 1000 ppm, deve essere considerato ± 400 ppm a causa della scarsa efficienza della tecnica *Raman* in presenza di piccole concentrazioni [52] (vedi figura 4.48 in $z/D = 0.1$).

Dall'analisi dei risultati si rileva un comune comportamento di tutti i modelli a sottostimare il CO in corrispondenza della zona di ricircolo e a sovrastimarne nello *shear layer*. Per chiarire questo comportamento risulta utile fare riferimento alle caratteristiche all'equilibrio della miscela reagente, riportate in tabella 4.9

T [K]	1639.4
CH_4	≈ 0
O_2	0.082
CO_2	0.058
H_2O	0.116
CO [ppm]	6.7
OH [ppm]	202.0

Tabella 4.9: Temperatura e composizione molare all'equilibrio per il combustore **vdb**

La sottostima della concentrazione di CO in corrispondenza della zona di ricircolo, stimata da tutti i modelli EDC, è, a nostro avviso, dovuta al particolare regime di combustione che vi si realizza. Le ipotesi alla base dei modelli EDC, inclusa anche la variante a chimica dettagliata, DC, sono valide solamente nei regimi *flamelet* (*corrugated flamelet* e *thin reaction zone* e in generale per numeri di *Damköhler* maggiori o uguali ad 1, [60]), laddove cioè la reazione chimica possa ritenersi governata da particolari strutture di moto (FS \sim *flamelet*) che interessano porzioni limitate dell'intero volume fluido. Nella zona di ricircolo, viceversa, la reazione può ritenersi distribuita su tutto

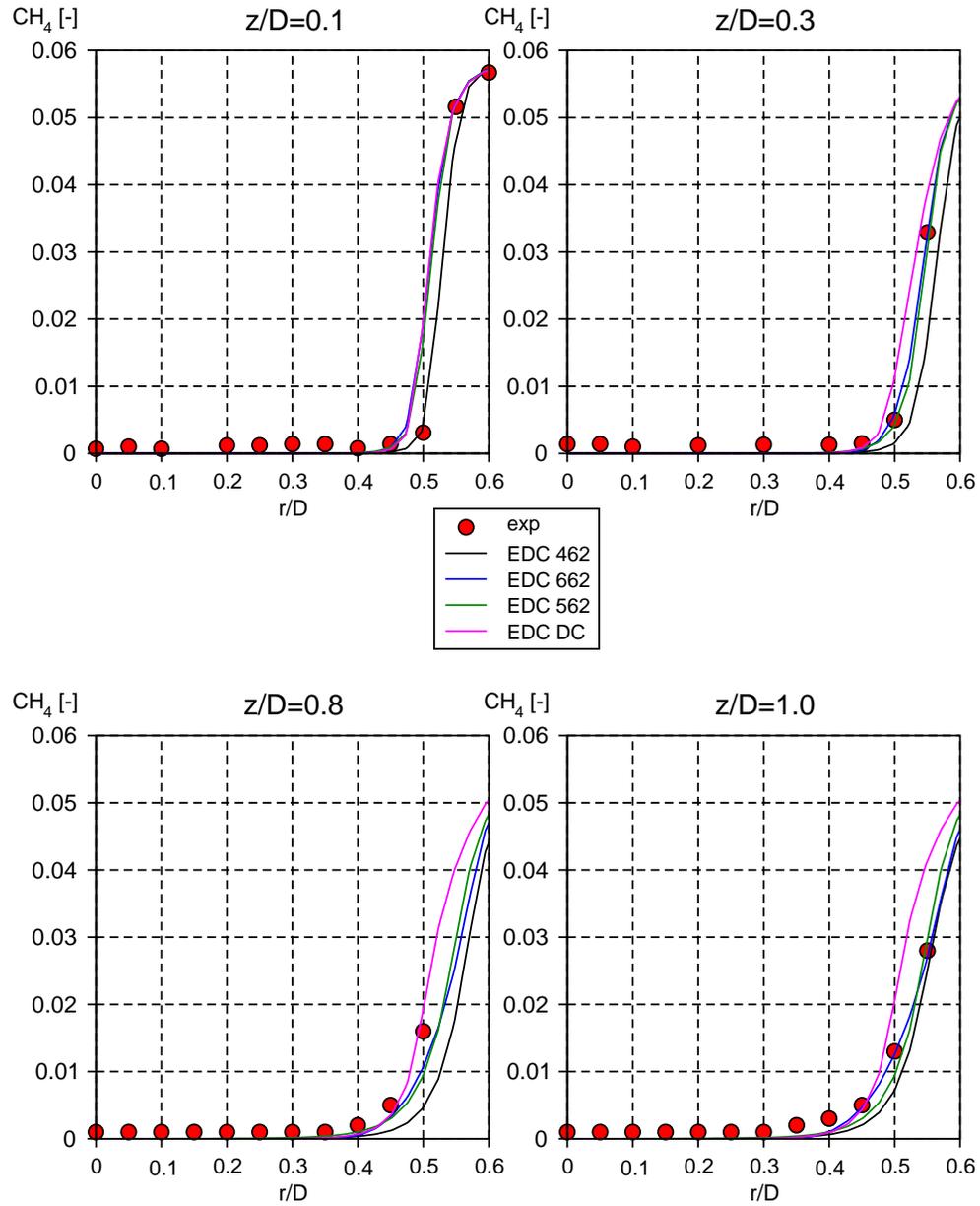


Figura 4.44: Combustore vdb: profili radiali della frazione molare di CH_4

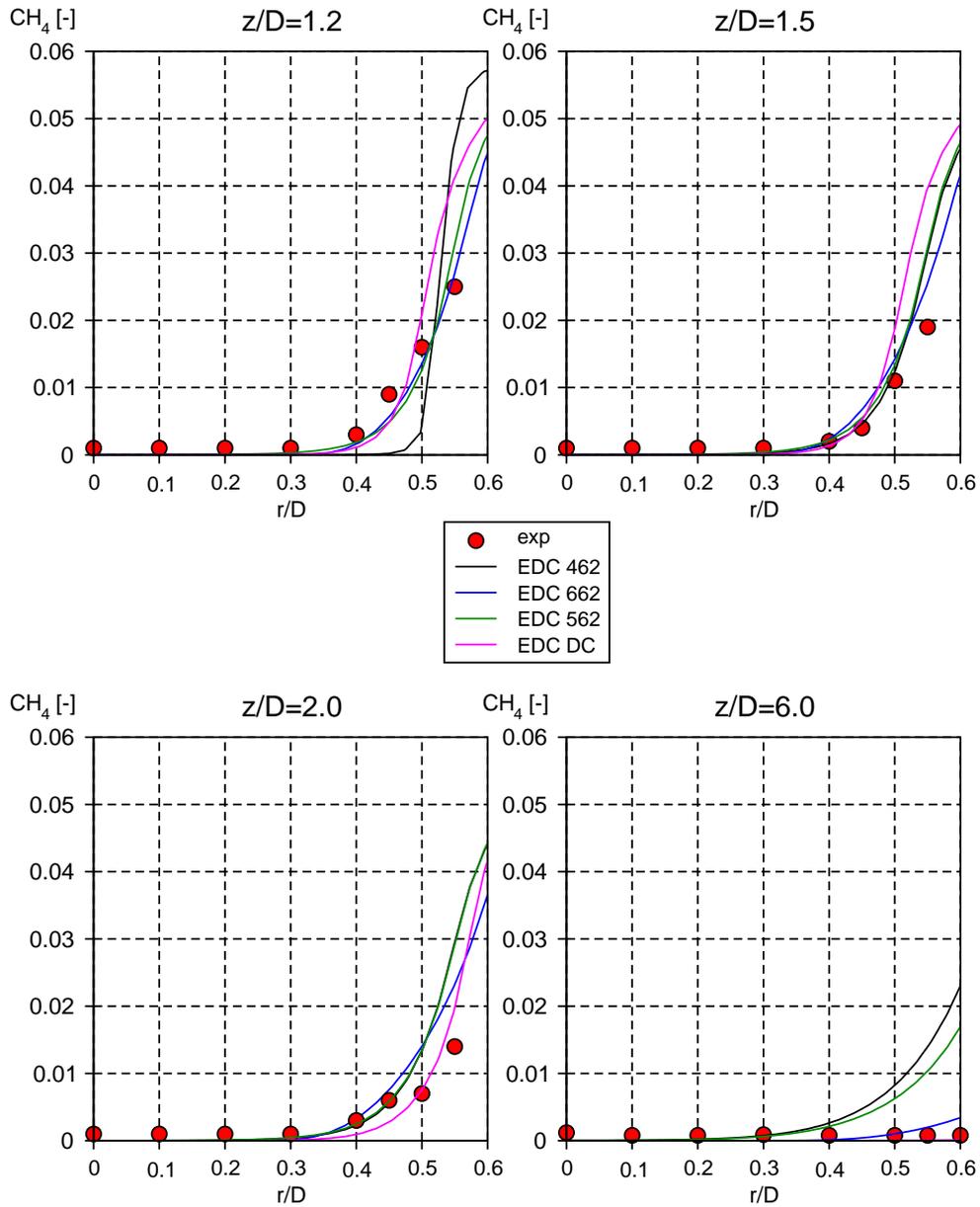


Figura 4.45: Combustore vdb: profili radiali della frazione molare di CH_4

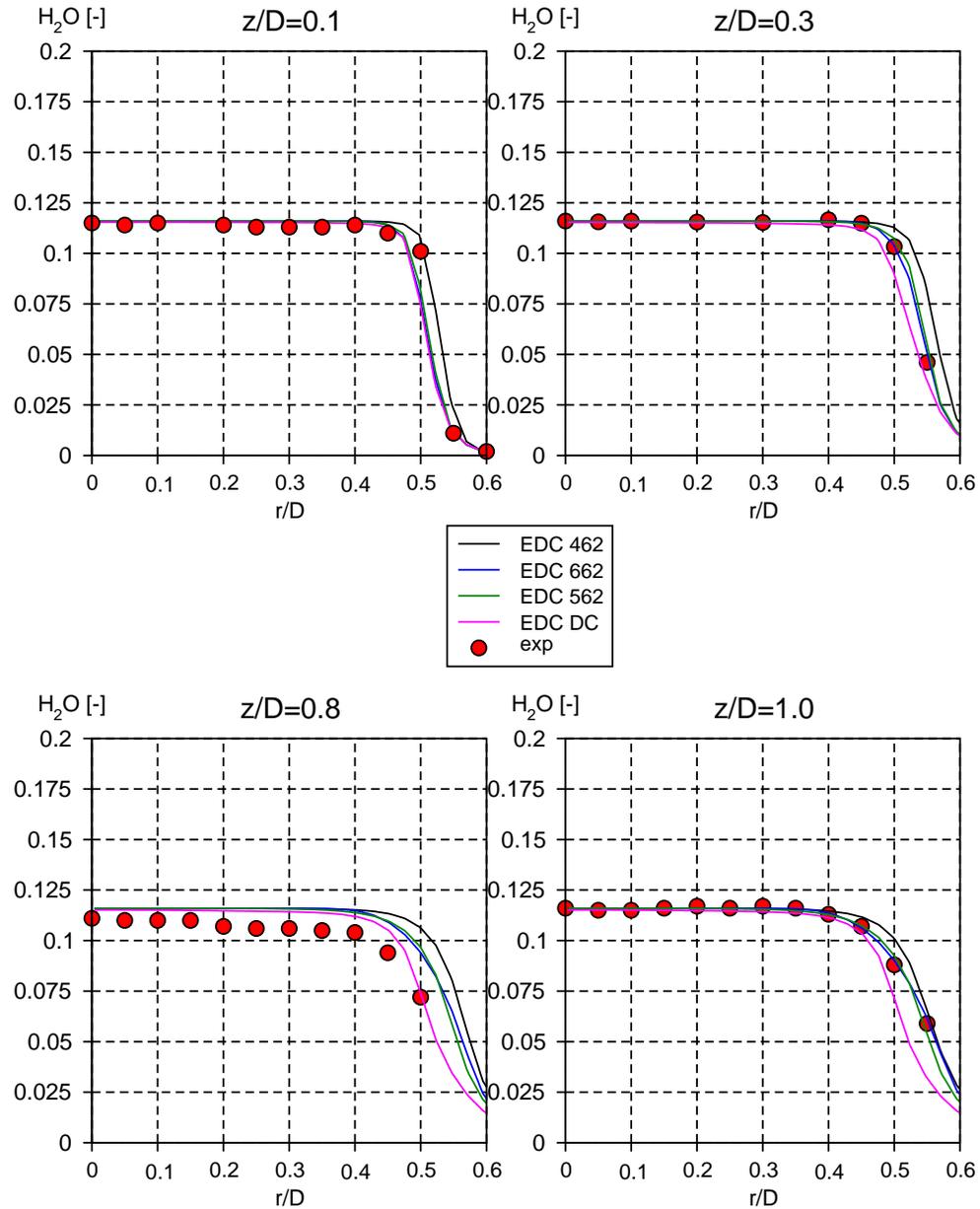


Figura 4.46: Combustore vdb: profili radiali della frazione molare di H_2O

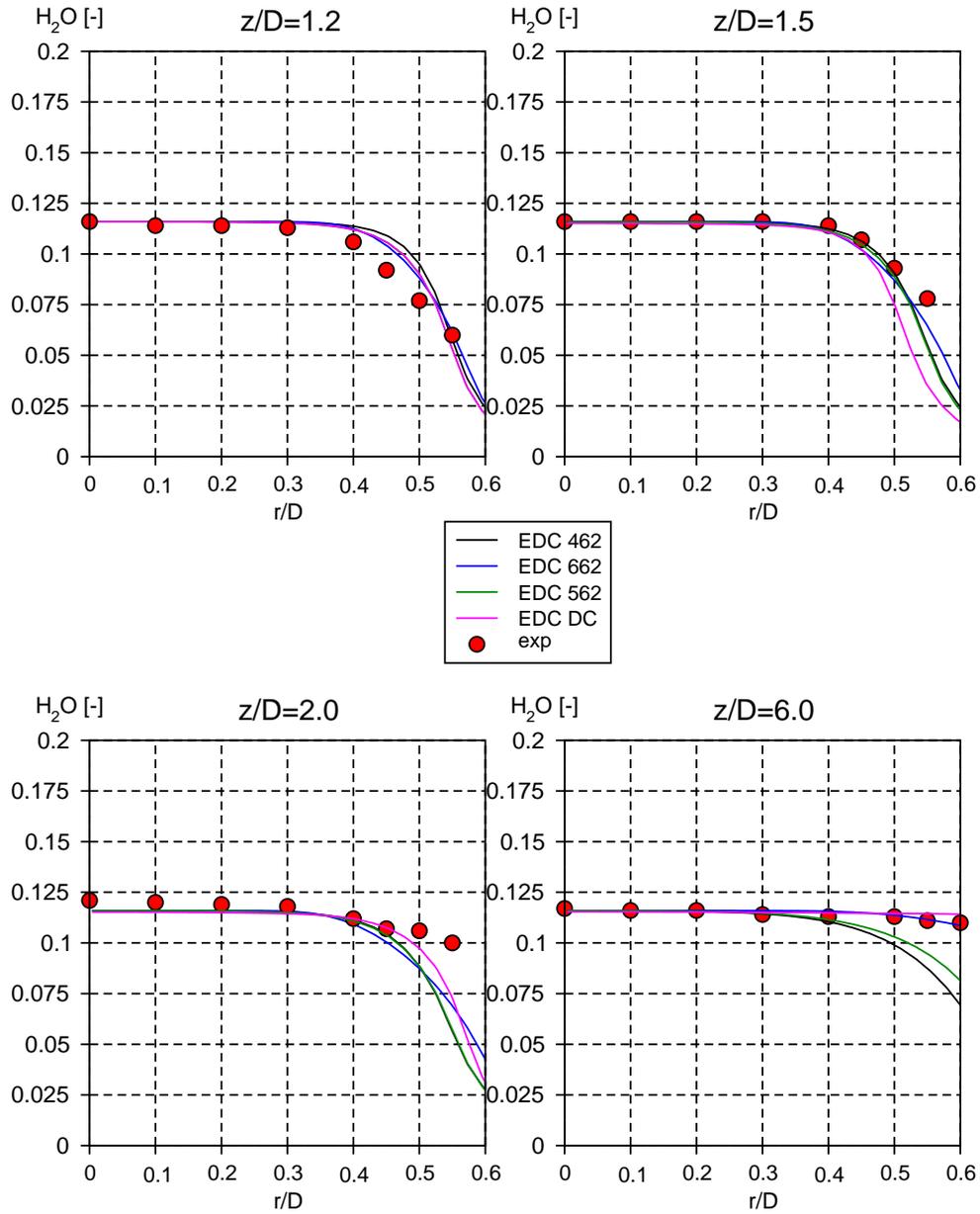


Figura 4.47: Combustore vdb: profili radiali della frazione molare di H_2O

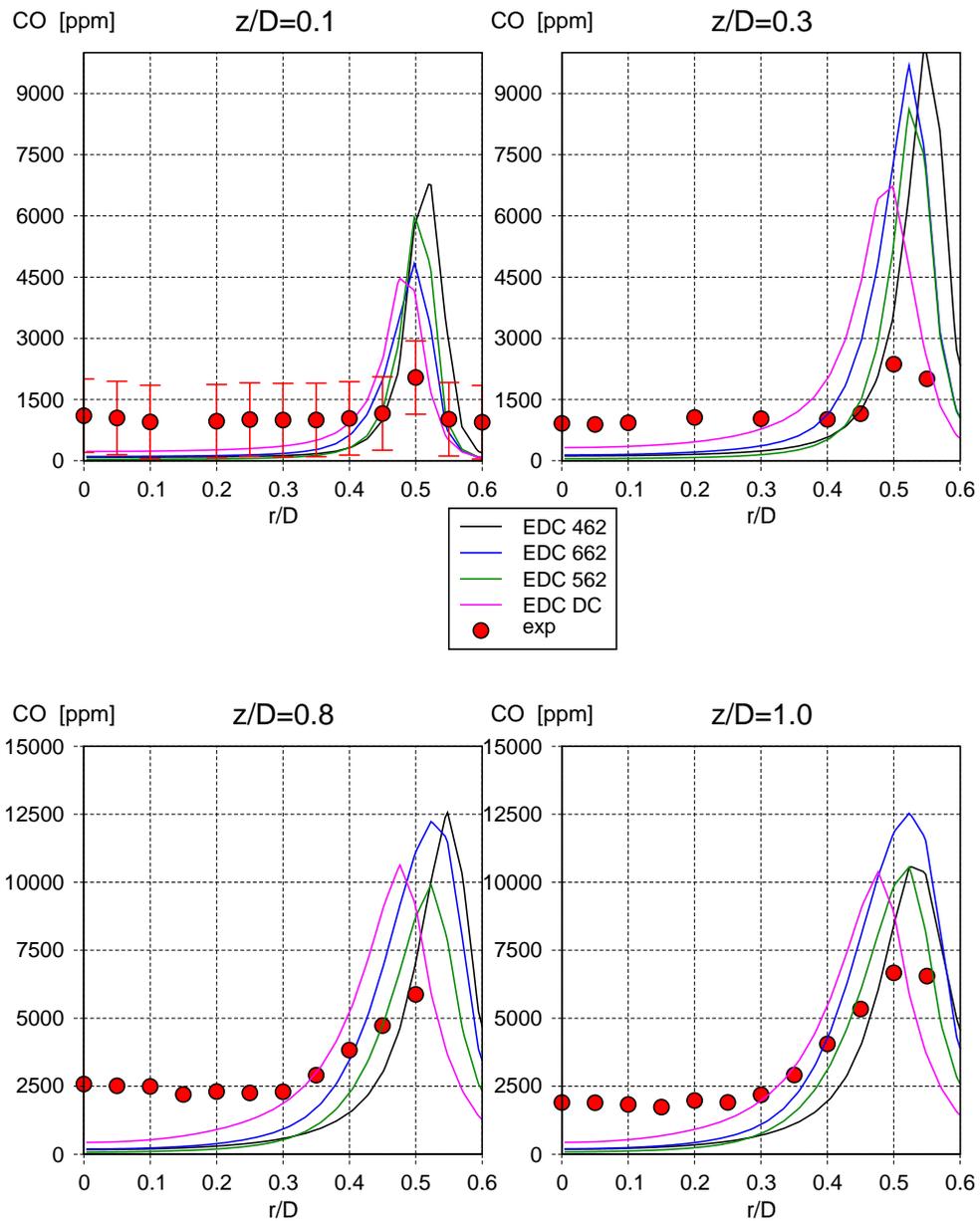


Figura 4.48: Combustore vdb: profili radiali della frazione molare di CO

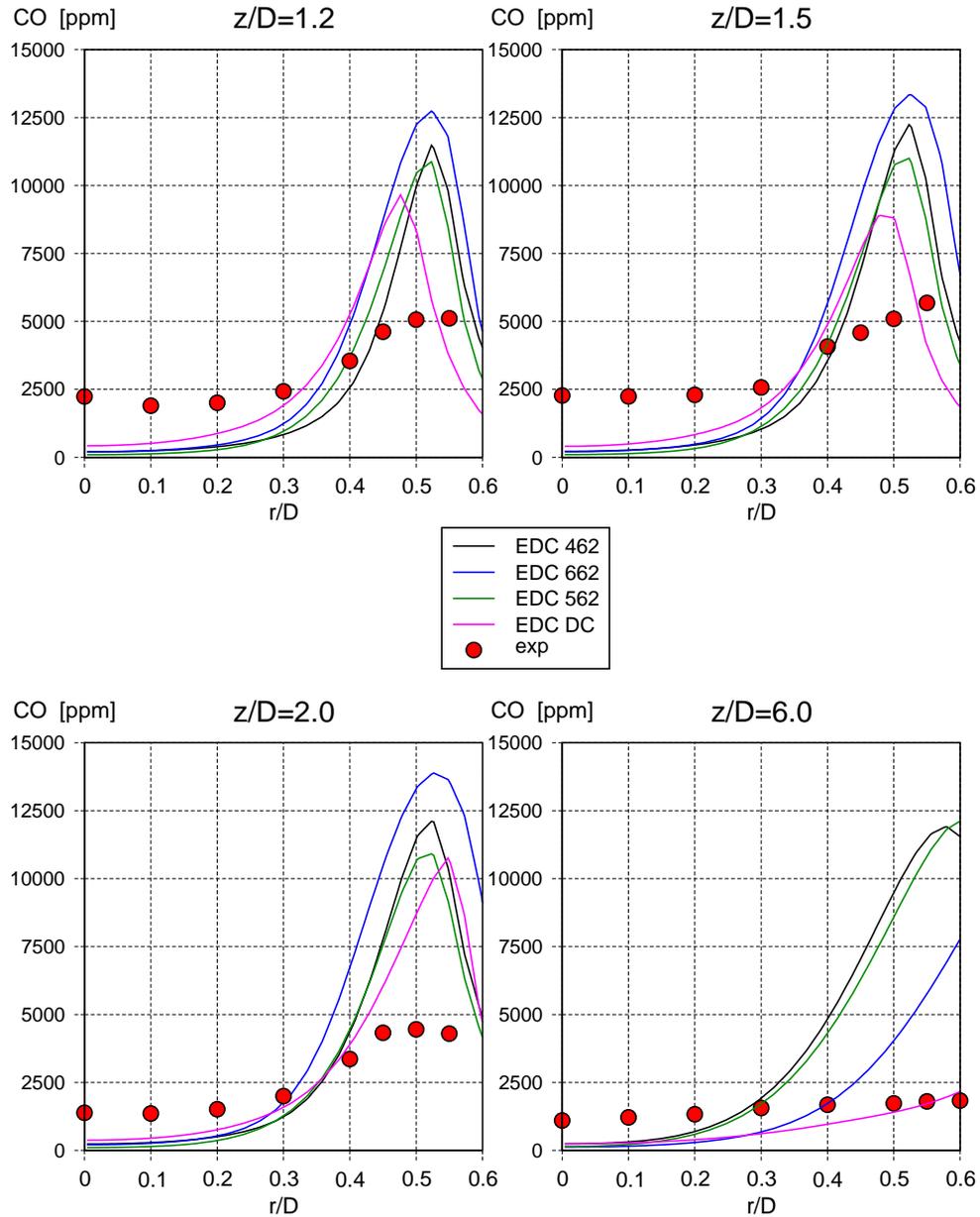


Figura 4.49: Combustore vdb: profili radiali della frazione molare di CO

il volume, con una totale scomparsa dei gradienti delle principali grandezze, come confermato in maniera chiara dalle misure sperimentali (bassi numeri di *Damköhler*). In altre parole la fiamma nella zona di ricircolo opera nel regime definito *distributed reactions* (figura 3.13) nel quale la migliore rappresentazione del sistema è quella di un unico reattore PSR.

L'intenso ricircolo di gas caldi, aventi CO_2 praticamente all'equilibrio, spostano la reazione di ossidazione del CO verso i reagenti, giustificando le elevate concentrazioni misurate. Nei modelli EDC, viceversa, l'effetto preponderante è l'elevato tempo di residenza nella zona di reazione che sposta la concentrazione del CO verso i valori di equilibrio. Dobbiamo rilevare, peraltro, che il comportamento migliora significativamente passando dai modelli EDC ibridi al modello DC. Quest'ultimo predice una concentrazione di CO di circa 400 ppm contro un valore misurato attorno a 1200 ppm : tenendo conto della forte incertezza delle misure sperimentali possiamo ritenere ragionevole il risultato.

Sulla base delle medesime considerazioni, lo stesso Nandula riporta i risultati di simulazioni dell'intero combustore effettuate tramite reti di reattori chimici nelle quali la zona di ricircolo viene schematizzata mediante opportune combinazioni di reattori PSR e PFR¹⁰ che mostrano un ragionevole accordo con le misure sperimentali [52].

Per quanto riguarda la sovrastima della concentrazione di CO in corrispondenza del picco nello *shear layer (flame brush)*, riteniamo si tratti di un effetto dovuto alla inaccuratezza dei meccanismi di reazione globali adottati, come conferma il deciso miglioramento che si ha passando dai modelli EDC ibridi al modello DC.

La tendenza dei modelli EDC, in presenza di fiamme premiscelate, a sovrastimare la concentrazione di CO sul fronte di fiamma e a predirne una eccessiva equilibratura nelle zone di ricircolo è stata verificata da numerosi ricercatori e descritta, ad esempio in [59], [54], [60] e [53]. L'effetto è legato alla stima del contributo cinetico al *reaction rate* medio, utilizzando grandezze medie (temperatura e concentrazioni) (per un chiarimento qualitativo vedi figura 2.3).

¹⁰ *Plug Flow Reactor*. Si tratta di un reattore monodimensionale nel quale si trascura il contributo del trasporto molecolare, determinando un efflusso interamente convettivo (a pistone)

Completiamo l'analisi del testcase **vdb** commentando la distribuzione del radicale OH . Come più volte osservato nell'analisi dei precedenti test, il radicale OH può essere utilizzato come indicatore per determinare la posizione e le dimensioni del fronte di fiamma [56]. In figura 4.50 ed in figura 4.50 riportiamo i consueti profili radiali confrontando la concentrazione di OH (ppm) misurata e stimata dal modello DC.

La concentrazione di OH misurata nella zona di ricircolo (≈ 160 ppm) è appena al di sotto del valore di equilibrio: in realtà, come rilevato da Nandula, OH si trova effettivamente in condizioni di equilibrio, che devono essere però valutate nella condizione locale di temperatura, affetta dal raffreddamento dei gas sulla parete del *bluff-body*, e dal *quenching* della reazione a parete per via dell'alto *stretching*.

La sottostima della concentrazione di OH da parte del modello DC è coerente con la sottostima di temperatura osservata nella stessa zona di ricircolo. Per $z/D = 0.3$ e in $r/D = 0$ il modello DC stima infatti una temperatura di 1627 K inferiore di 13° rispetto alla temperatura di equilibrio in condizioni adiabatiche: la analoga sottostima delle concentrazioni H_2O e CO_2 ci consentono di dedurre che il calcolo non predice una completa condizione di equilibrio per la temperatura, le principali specie (H_2O e CO_2) ed OH . Data l'estrema reattività del radicale OH , è sufficiente un minimo scostamento dalle condizioni di equilibrio per avere forti sovrastime delle concentrazioni, come si osserva per $z/D < 1$. Al di fuori della zona di ricircolo la discrepanza si attenua significativamente a conferma della criticità della zona e del suo regime di combustione per il modello EDC.

E' interessante notare, in ogni caso, che la distribuzione radiale di OH predetta dal modello DC è sempre qualitativamente in accordo con i valori misurati e, a valle della zona di ricircolo, il calcolo è capace di descrivere con buona precisione l'ampiezza del fronte di fiamma medio (*brush*), frequentemente ricavato proprio a partire dal profilo di OH ¹¹. Per $z/D = 0.3$ lo spessore del brush è circa 2.45 mm per arrivare quasi a triplicare a valle della zona di ricircolo [52].

¹¹il procedimento adottato è identico a quello illustrato in figura 3.6 valido per fiamme laminari

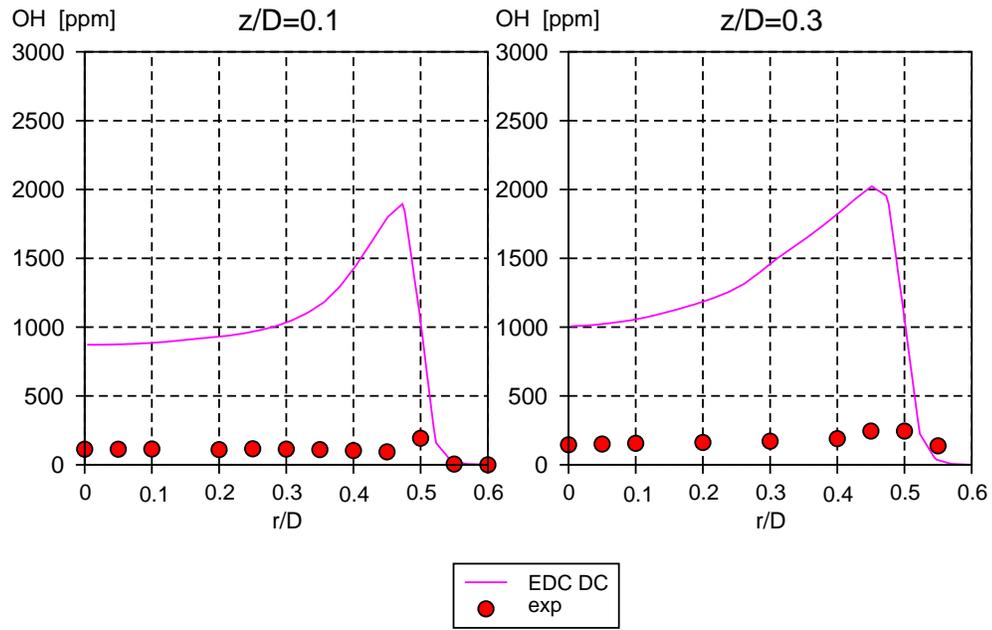


Figura 4.50: Combustore **vdb**: profili radiali della concentrazione del radicale OH

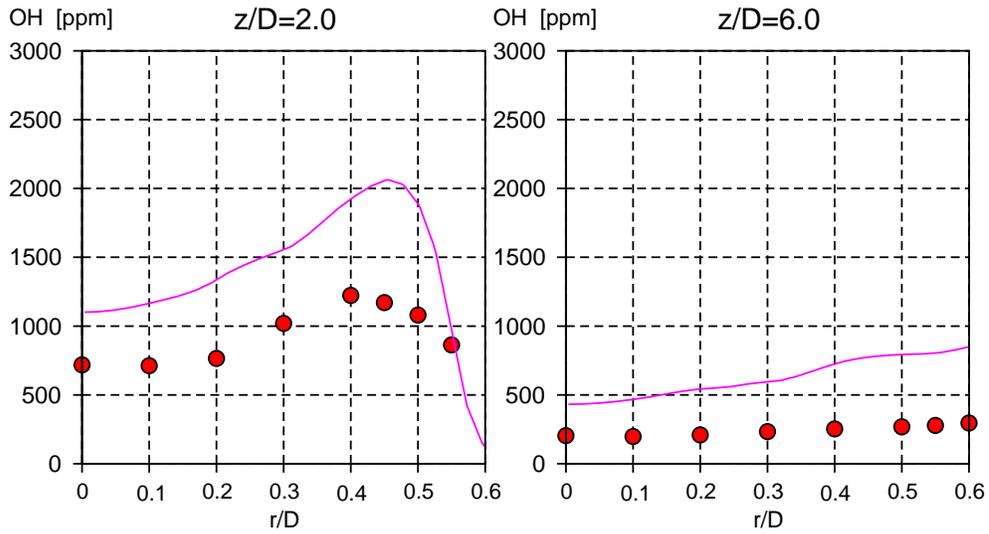
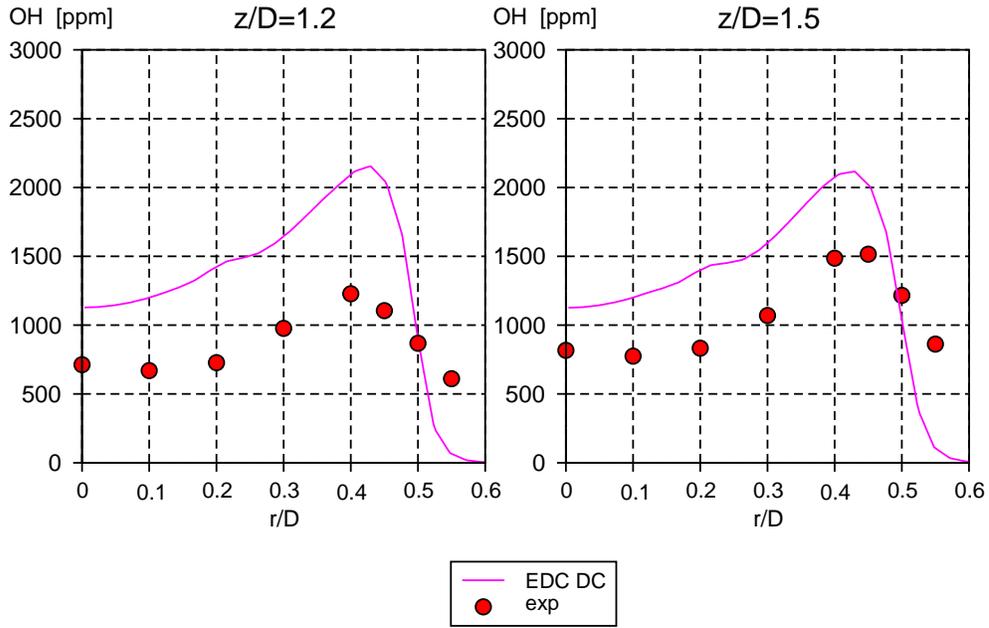


Figura 4.51: Combustore vdb: profili radiali della concentrazione del radicale OH

4.5.6 Bruciatore k160a NP

Il bruciatore che andremo a descrivere costituisce un dispositivo di laboratorio progettato dalla società GE-Nuovo Pignone, denominato **k160a**. Si tratta di un bruciatore assialsimmetrico premiscelato, che presenta la notevole caratteristica di poter variare il grado di *swirl* della miscela in ingresso.

In figura 4.52 riportiamo una rappresentazione schematica del dispositivo.

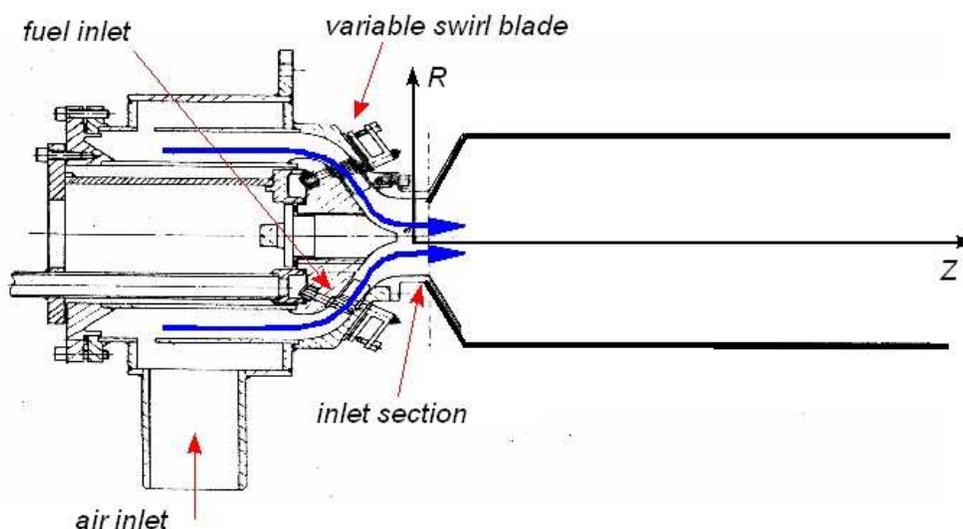


Figura 4.52: Geometria del bruciatore NP k160a

Il combustore è costituito da un tubo di fiamma cilindrico, sagomato con una superficie conica nella sua parte iniziale, accoppiato tramite una sezione circolare al bruciatore vero e proprio. Quest'ultimo è caratterizzato da una forma piuttosto complessa per la quale il flusso principale, inizialmente guidato da un meato a sviluppo anulare, viene convogliato sulla sezione circolare in ingresso al tubo di fiamma. Nel meato sono posti i dispositivi di iniezione del gas metano, che si premiscela in maniera pressoché perfetta all'aria comburente prima dell'ingresso nel combustore. Nello stesso meato sono realizzati degli organi palettati a calettamento variabile tramite i quali è possibile regolare la componente di *swirl* in ingresso alla zona di reazione.

L'angolo di *swirl* imposto alla miscela reagente condiziona pesantemente il campo di moto all'interno del combustore. In figura 4.53 riportiamo alcuni profili radiali della componente assiale di velocità (asse Z di figura 4.52)

per due diversi angoli di swirl, 0° e 40° . La figura mostra il confronto tra i valori misurati sperimentalmente (a freddo) e i corrispondenti valori calcolati (modello $k - \varepsilon$ standard). Nel caso di swirl nullo il combustore è interessato dalla sola zona di ricircolo toroidale che si forma nell'angolo del dispositivo per via del brusco allargamento. Viceversa con angolo di 40° si supera il numero di swirl critico e si ha la nascita della zona di ricircolo centrale.

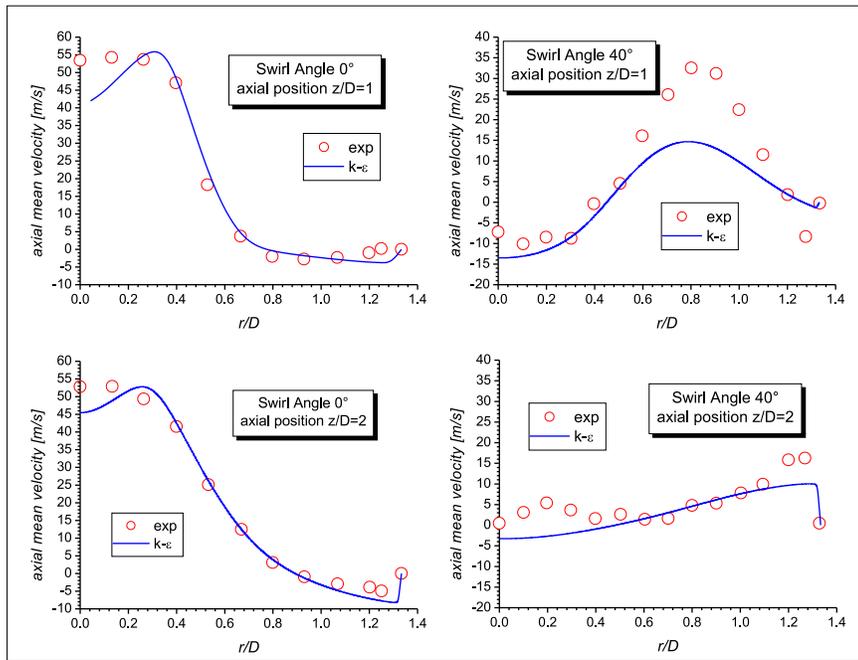


Figura 4.53: Campo di moto a freddo del combustore **k160a** per due diversi angoli di swirl

4.5.6.1 Simulazioni in condizioni reattive

Il combustore **k160a** rappresenta una versione in scala e a pressione atmosferica, del combustore tubolare ad asse verticale montato sul turbogas industriale GE10 (macchina mono o bialbero da 10 MW di potenza nominale). Il dispositivo permette quindi di analizzare la struttura della fiamma del combustore reale, evitando le complicazioni di una modellazione completa della camera.

Purtroppo non sono disponibili dati sperimentali dettagliati in condizioni reattive fatte salve le misure dei profili di velocità e turbolenza nella sezione di ingresso e la misura delle emissioni globali allo scarico. Nonostante ciò,

l'analisi del combustore **k160a** è comunque significativa perché ci consente di operare una valutazione comparativa dei vari modelli sviluppati, tramite lo studio di una geometria del tutto analoga alla macchina completa.

Il bruciatore **k160a** viene operato, in questo test, con una componente di *swirl* molto contenuta (10°) tale da determinare un campo di moto del tutto analogo al caso privo di *swirl* visto in figura 4.53. Ne deriva quindi una fronte di fiamma sostanzialmente conico che si stabilizza in maniera molto simile ad un classico bruciatore *bunsen* (vedi figura 4.54). La fiamma presenta quindi un significativo sviluppo assiale, che rende ragione dell'elevato ingombro in direzione Z del combustore. Come vedremo la fiamma sviluppata dal bruciatore **k160a** è sostanzialmente analoga a quella realizzata nel combustore completo.

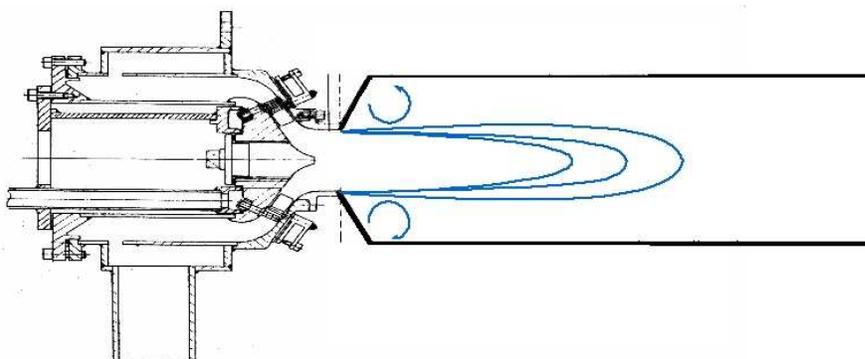


Figura 4.54: Rappresentazione schematica della fiamma del combustore **k160a**

Uno degli aspetti più interessanti che è possibile ricavare dallo studio numerico del combustore, è la variazione della forma e della lunghezza del fronte di fiamma conico al variare del rapporto di equivalenza della miscela reagente, simulando il comportamento del combustore al variare della potenza erogata dalla macchina. Con riferimento ad una campagna di prove sperimentali svolte da NP, abbiamo simulato il combustore nelle 3 condizioni descritte in tabella 4.10.

La grandezza U_{ref} è la velocità con cui sono stati scalati i profili delle componenti assiale (U_z) e tangenziale (U_θ) misurate nella sezione d'ingresso (vedi figura 4.55.a). In figura 4.55.b sono riportati i profili misurati delle componenti assiale e tangenziale delle fluttuazioni di velocità, ciascuna normalizzata con il corrispondente valore di velocità media. I valori misurati sperimentalmente sono stati adottati per le condizioni al contorno del

	λ [-]	T_{in} [K]	P [Pa]	U_{ref} [m/s]
test A	1.31	288	101325	32.5
test B	1.48	288	101325	36.7
test C	1.66	288	101325	40.5

Tabella 4.10: Test matrix delle simulazioni reattive svolte sul bruciatore **k160a**. Il parametro λ è l'inverso del rapporto di equivalenza convenzionale ($\lambda = 1/\phi$

vettore velocità e dell'energia cinetica turbolenta ($k = 0.5 (U'_z{}^2 + U'_\theta{}^2)$). La distribuzione di ε è stata valutata assumendo una lunghezza di dissipazione pari al 7% del raggio idraulico del combustore, sfruttando poi la seguente definizione:

$$\varepsilon = C_\mu^{\frac{3}{4}} \frac{k^{\frac{3}{2}}}{L_T}$$

Nella tre prove il combustore è stato alimentato con gas naturale (assunto nella simulazione come puro metano) ed è stata assunta una perfetta omogeneità della miscela reagente nella sezione di ingresso (confermata dalle misure sperimentali).

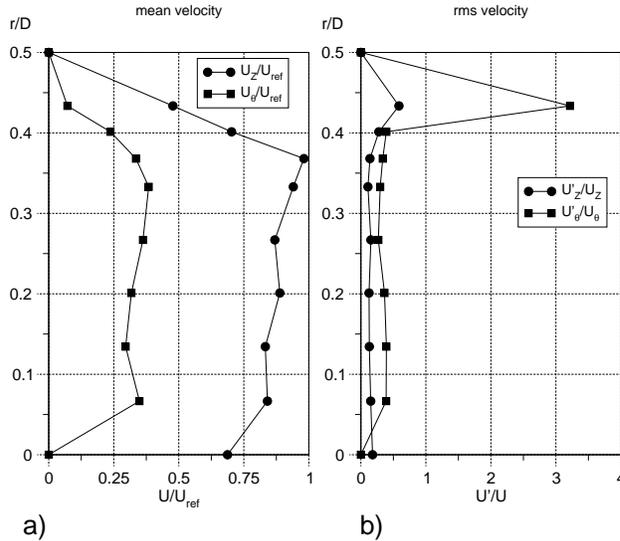


Figura 4.55: Profili di velocità e turbolenza in ingresso al combustore **k160a**

Come accennato in precedenza il dispositivo possiede una simmetria assiale, che è stata assunta anche nella realizzazione della mesh di calcolo, limitata

alla discretizzazione di una porzione angolare di 10° . In figura 4.56 riportiamo uno schema del modello realizzato con un particolare di una delle mesh usate, realizzata con circa 16000 celle esaedriche. Così come nel dispositivo reale le pareti del combustore sono state assunte perfettamente adiabatiche.

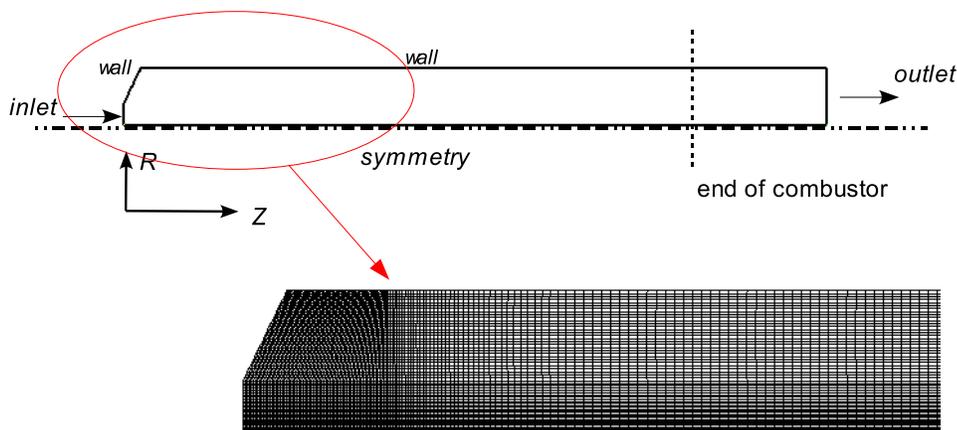


Figura 4.56: Modello del combustore **k160a** e dettaglio della mesh di calcolo

Abbiamo deciso di confrontare, in questo testcase, gli stessi modelli analizzati per il combustore **vdb**, senza nessuna alterazione delle costanti caratteristiche ed utilizzando gli stessi meccanismi di reazione.

L'aspetto su cui abbiamo voluto porre l'attenzione nello studio di questo caso, in mancanza di dati sperimentali dettagliati, è la sensibilità dei vari modelli alla variazione della composizione della miscela reagente in combinazione alla variazione del livello di turbolenza del flusso in ingresso. Infatti, come riportato in tabella 4.10 i tre valori di λ corrispondono a tre diversi valori della velocità di riferimento U_{ref} che è usata come parametro di scala sia per i moduli delle due componenti medie di velocità, e, indirettamente per le loro fluttuazioni. Ne consegue una variazione del Reynolds turbolento nei tre casi, in aumento al ridursi del λ . In tabella 4.11 riportiamo i tre gruppi adimensionali caratteristici, riferiti alle condizioni ingresso, per i valori di λ considerati.

Solamente nel test **A** il combustore opera in pieno regime flamelet mentre nel test **C** le condizioni sono già probabilmente in piena *distributed reactions zones* con il test **B** al limite fra i due regimi. Le tre fiamme che ne conse-

	λ	Re_T	S_L^0 [cm/s]	Da	Ka
test A	1.31	700	20.2	≈ 1	≈ 25
test B	1.48	800	13.7	≈ 0.4	≈ 70
test C	1.66	900	8.4	≈ 0.15	> 100

Tabella 4.11: Caratteristiche nominali della fiamma per i tre valori di λ considerati per il combustore **k160a**. Le velocità di fiamma laminare S_L^0 sono state ottenute tramite la correlazione di Bui-Pham

guono lavorano in condizioni di interazione combustione-turbolenza piuttosto diverse fra loro.

In figura 4.57 riportiamo le mappe di temperatura, nei tre casi, per ciascuno dei tre modelli EDC ibridi considerati (**462**, **562** e **662** vedi 4.5.5.1).

L'aspetto che appare subito evidente è la quasi totale insensibilità dei modelli **462** e **562** all'aumentare dell'eccesso d'aria e la maggiore lunghezza del loro cono di fiamma rispetto alla predizione del modello **662**. Quest'ultimo aspetto è spiegabile con la tendenza a sottostimare il *reaction rate* già mostrata dalle due formulazioni nello studio del testcase **vdb**.

Per quanto riguarda la sensibilità al valore del rapporto di equivalenza, dobbiamo prendere in considerazione la conseguente variazione dei regimi i combustione imposta nei test eseguiti. Possiamo in generale esprimere la velocità di propagazione della fiamma premiscelata turbolenta mediante la semplice relazione:

$$S_T = a \cdot S_L^0 + b \cdot u'$$

I parametri a e b sono, in generale, strettamente legati al regime in cui si realizza la fiamma e al modello usato per rappresentarla. Nei test **A**, **B** e **C** in esame, la riduzione di S_L^0 legata all'aumento di λ è parzialmente bilanciata dall'aumento del Reynolds turbolento. Nei tre modelli EDC testati, inoltre, si stima il *reaction rate* effettivo combinando, con criteri diversi, il contributo turbolento (che rappresenta il termine $b \cdot u'$) ed il contributo chimico (legato al termine $a \cdot S_L^0$). Tuttavia, data l'ipotesi di alti numeri di *Damköhler* ed alti Re_T alla base di tutti i modelli, il contributo turbolento viene sovrastimato, proprio per le due fiamme più magre caratterizzate da $Da \ll 1$, determinan-

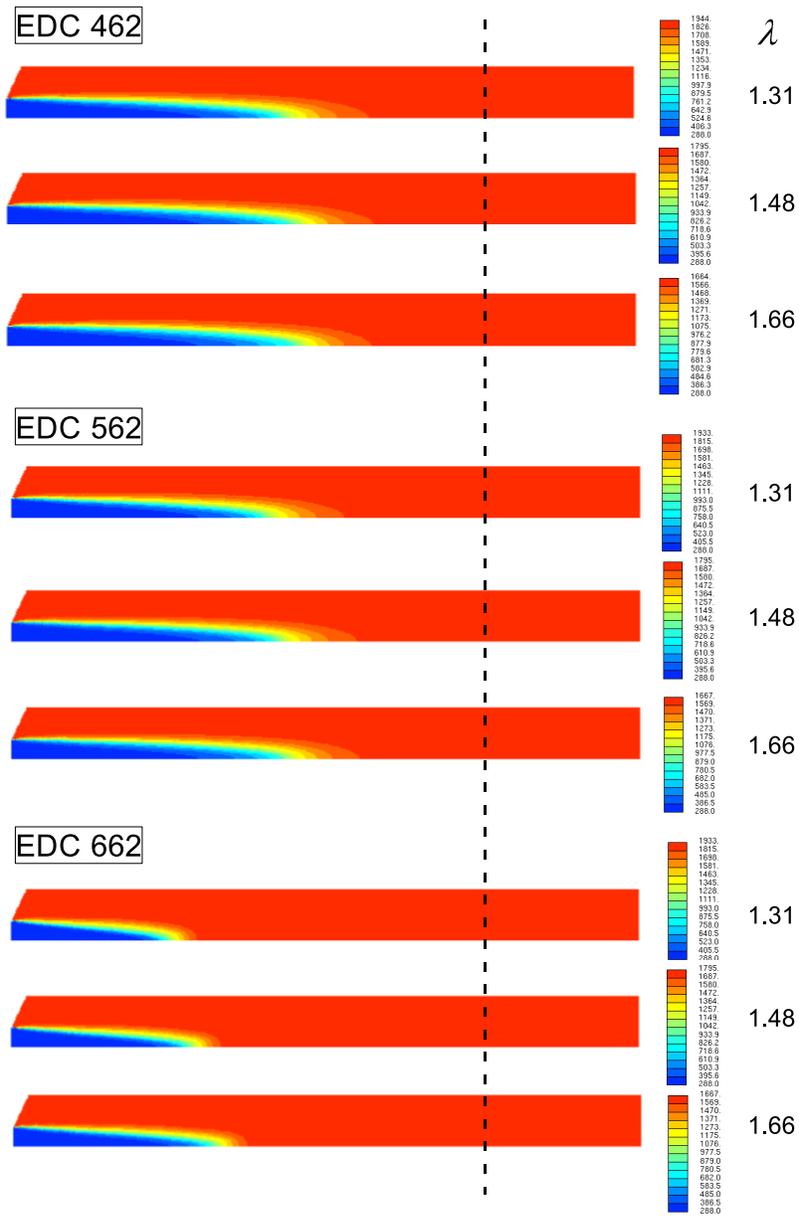


Figura 4.57: Contour plot della distribuzione di temperatura predetta dai modelli EDC 462, 562 e 662 per i tre valori di λ considerati. La temperatura è espressa in Kelvin

do la sostanziale insensibilità della fiamma al valore di λ mostrata in figura 4.57.

Il miglior comportamento del modello **662** conferma l'efficienza del parametro η (*unmixedness factor*) per il *blending* dei contributi turbolento e chimico al *reaction rate*: una possibile miglioramento del modello potrebbe essere ottenuto introducendo una dipendenza di η dalla *mixture fraction*.

In figura 4.58 riportiamo le mappe di temperatura ottenute, nei tre casi descritti, con il modello EDC-DC: per completare l'analisi abbiamo riportato anche la struttura della fiamma con $\lambda = 2$ che rappresenta il limite di estinzione del dispositivo¹².

Non avendo a disposizione dati sperimentali dettagliati non è possibile stabilire con esattezza la bontà dei risultati ottenuti, ma possiamo rilevare una corretta sensibilità del modello alla riduzione del rapporto di equivalenza (con conseguente aumento della lunghezza del cono di fiamma), affiancato da un aumento dello spessore della fiamma turbolenta (*flame brush*) determinato dall'aumento del Re_T e dal progressivo passaggio al regime di *distributed reactions*.

	λ	T_{eq} [K]
test A	1.31	1933.2
test B	1.48	1793.4
test C	1.66	1664.8

Tabella 4.12: Temperature adiabatiche di equilibrio per i tre casi del combustore **k160a**

Per meglio apprezzare la struttura della fiamma descritta dal modello DC, riportiamo, in figura 4.59 la frazione in massa della specie H_2 che, come visto nel §3.2, costituisce una delle principali sostanze intermedie nel processo di ossidazione di CH_4 , individuando, in corrispondenza del suo picco, l'*inner layer* della fiamma laminare (vedi figura 3.5). Anche in regime turbolento, quindi, possiamo utilizzare la composizione *Favre averaged* come tracciante per individuare la posizione del fronte di fiamma medio.

Per dettagliare ulteriormente il campo di temperatura predetto dal modello DC, riportiamo, in figura 4.60 tre mappe di temperatura con una scala

¹²il caso $\lambda = 2.0$ non è riportato nei dati forniti da NP ed abbiamo considerato come condizioni in ingresso per velocità e turbolenza le stesse del caso con $\lambda = 1.66$

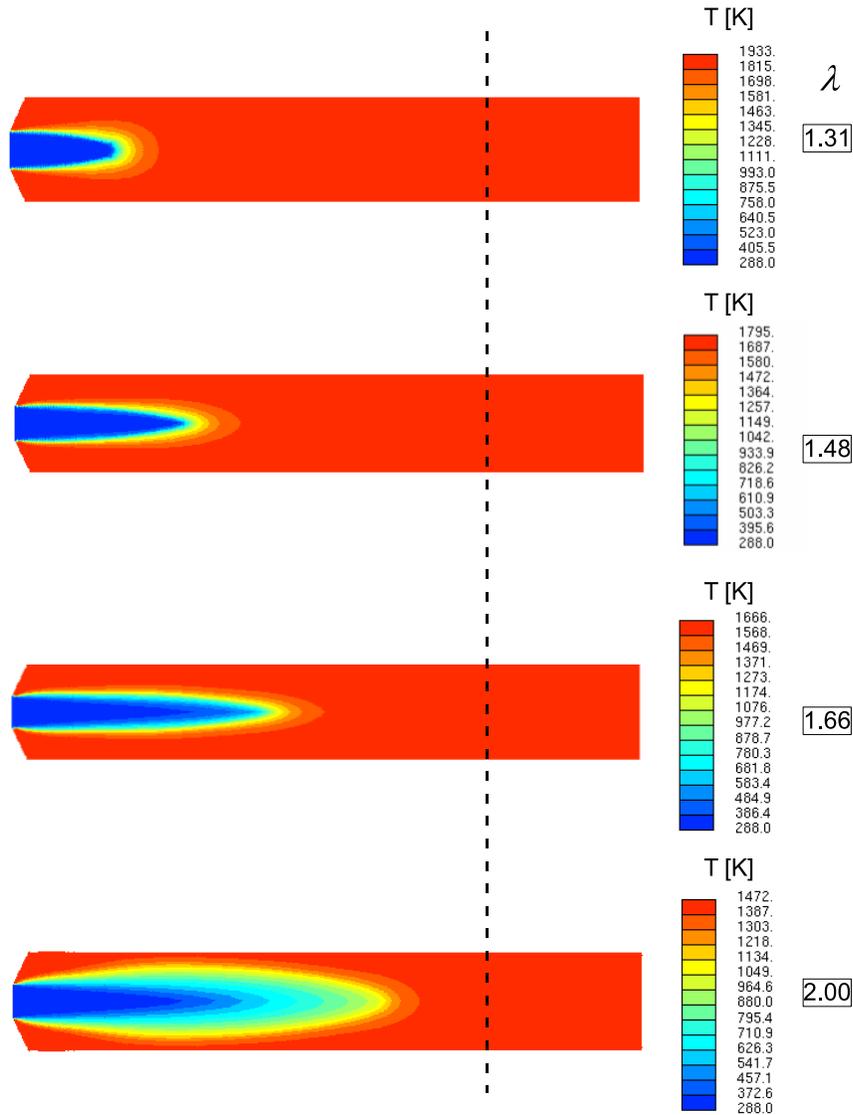


Figura 4.58: Contour plot della distribuzione di temperatura predetta dai modelli EDC-DC per i quattro valori di λ considerati. Per maggiore chiarezza abbiamo ricostruito una sezione completa del combustore.

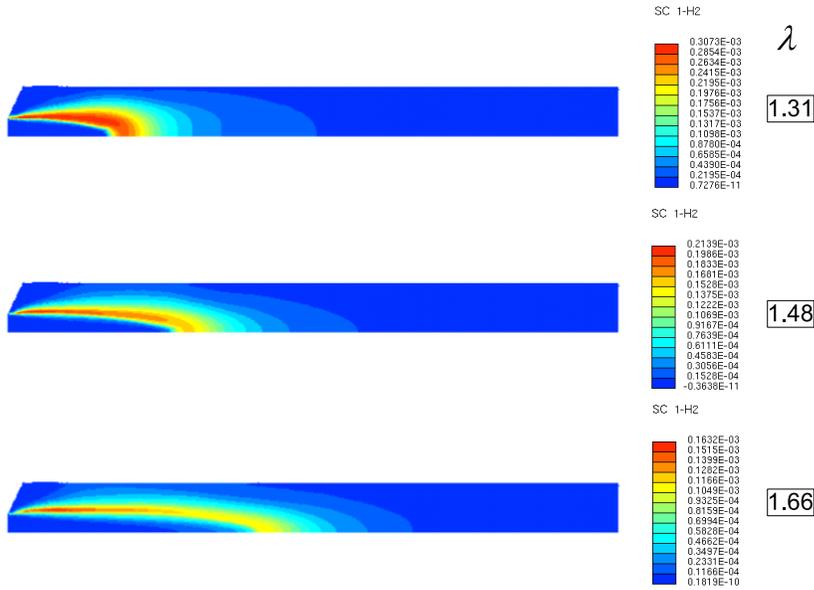


Figura 4.59: Contour plot della frazione in massa della specie H_2 nei tre casi studiati per il combustore **k160a**

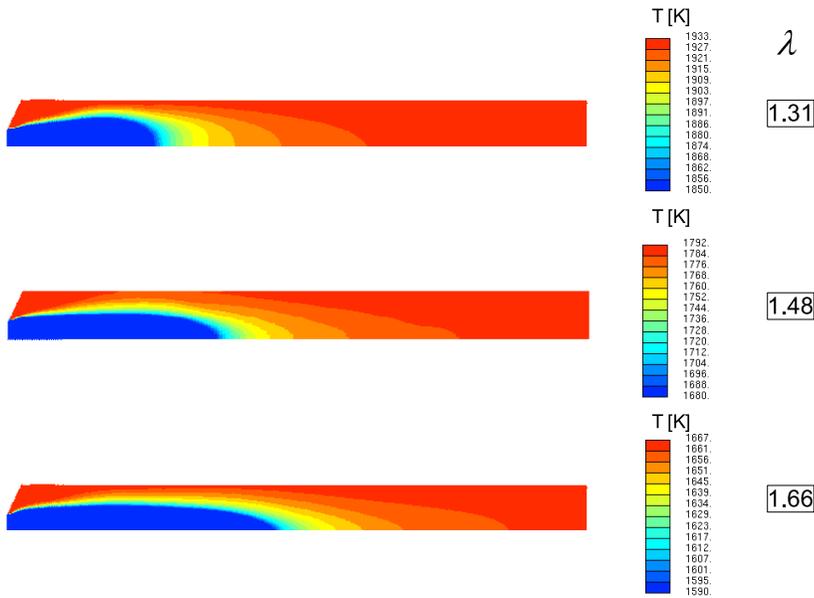


Figura 4.60: Combustore **k160a**: mappe di temperatura con *color scale* centrata in corrispondenza della temperatura di equilibrio

di colori ristretta attorno alle rispettive temperature di equilibrio. Questa visualizzazione ci consente di osservare le fasi di completamento della reazione nelle varie zone del dispositivo. In tabella 4.12 riportiamo le temperature di equilibrio adiabatico per i tre valori di λ analizzati.

Rileviamo che in tutti e tre i casi il calcolo predice una combustione completa allo scarico del combustore, come confermano i valori pressoché nulli per le concentrazioni di CH_4 . E' importante osservare come gli alti tempi di residenza nella zona di ricircolo laterale consentano il raggiungimento delle condizioni di equilibrio permettendo alla massa di gas convogliata sulla miscela reagente di agire da punto di ancoraggio per la fiamma (vedi figura 4.61).

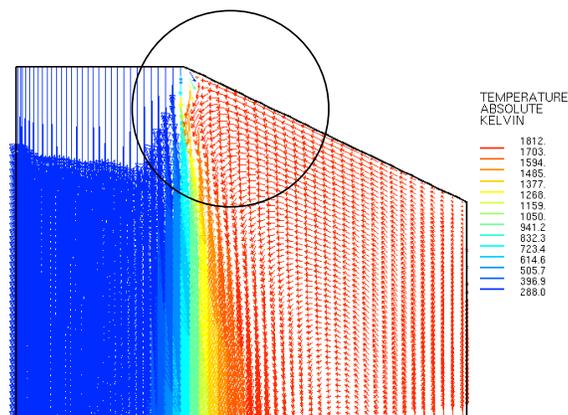


Figura 4.61: Combustore **k160a**: dettaglio del processo di stabilizzazione della fiamma

Concludiamo l'analisi del testcase **k160a** confrontando le emissioni di CO allo scarico predette dal calcolo con i valori misurati sperimentalmente. In figura 4.62 è mostrato l'andamento del CO (ppm) al variare di λ .

L'aspetto più interessante è la capacità del modello DC di cogliere l'effetto della ridotta velocità di reazione che, per alti valori di λ , determina una forte riduzione della conversione di CO con conseguenti alte concentrazioni allo scarico. Prima di questa fase la concentrazione allo scarico di CO è essenzialmente legata ai valori all'equilibrio, con una progressiva riduzione dell'emissione all'aumentare dell'eccesso d'aria.

L'accordo con i dati sperimentali è complessivamente buono, tenendo anche conto della frequente sottostima delle misure sperimentali ottenute mediante il prelievo di un volume di gas. Il calcolo mostra una transizione equilibrio-cinetica attorno a $\lambda \approx 1.65$ mentre sperimentalmente si rileva

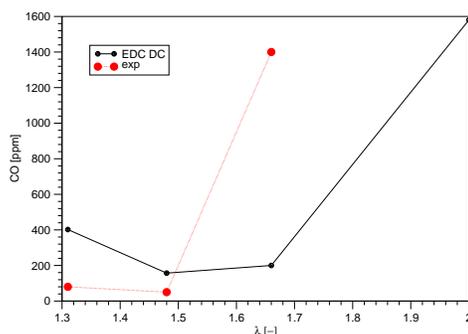


Figura 4.62: Confronto delle emissioni di CO allo scarico per il combustore **k160a**

un valore di circa 1.55, con una pendenza maggiore della curva nella zona governata dalla cinetica chimica.

4.6 Considerazioni finali

Dall’analisi dei testcase di validazione selezionati emergono, complessivamente, buone capacità del modello EDC a chimica dettagliata (DC), dimostratosi capace di analizzare con buona accuratezza fiamme premiscelate operanti nel regime di combustione che interessa i combustori LPC di turbogas, ma anche fiamme diffuse e fiamme parzialmente premiscelate, riuscendo a cogliere complessi aspetti dell’interazione combustione-turbolenza. Questa serie di test ha messo comunque in evidenza alcuni inconvenienti, comuni a tutti i modelli basati sulle chiusure *local source*, ed alcuni problemi specifici del modello EDC-DC.

L’impiego dei modelli EDC nello studio di geometrie e configurazioni in condizioni “macchina” è avvantaggiato da alcune particolarità del modello:

- Possibilità di trattare un qualsiasi tipo di combustibile, variando unicamente il meccanismo di reazione, gestito dalle librerie ChemkinTM sottoforma di database esterno.
- Capacità intrinseca di trattare fiamme parzialmente premiscelate. In un combustore reale le condizioni non possono mai essere ricondotte al caso di pura fiamma premiscelata o pura fiamma di diffusione sia per la necessità di stabilizzare la miscela reagente mediante get-

ti pilota di combustibile, sia per la inevitabile iniezione di aria per il raffreddamento delle pareti e la diluizione dei prodotti di combustione.

- Per come è stato implementato il modello EDC non assume a priori l'adiabaticità dell'efflusso, permettendo di stimare il carico termico convettivo sulle pareti della camera e, mediante i modelli specifici del solutore STAR-CDTM che lo accoglie, quantificare il calore irraggiato dalla fiamma sulle pareti e stimarne quindi l'effetto sulla temperatura dei gas in uscita.

Nel descrivere le fasi di implementazione e validazione del modello ne abbiamo di volta in volta messo in luce i principali inconvenienti e i problemi riscontrati, che andiamo qui a riassumere:

- Come accennato nel §4.3.2.1 in alcuni casi è possibile osservare un certa dipendenza della soluzione finale dalle condizioni iniziali adottate per l'individuazione della soluzione stazionaria del reattore PSR, in relazione al fenomeno di isteresi del ciclo di estinzione/accensione del reattore.
- Il modello richiede in alcuni casi la correzione delle costanti caratteristiche. In particolare abbiamo osservato che il set di costanti proposto dagli autori (vedi eqq. 4.5) non è adeguato allo studio di fiamme premiscelate, per via della tendenza a stimare tempi di residenza eccessivamente bassi nelle FS: nel §4.5.5 sono riportate le costanti utilizzate in questo lavoro per le studio di fiamme premiscelate (testcase **vdb** e **k160a**). Non è possibile escludere a priori che la modifica delle costanti caratteristiche del modello, possa comportare un'influenza sulla dipendenza della soluzione dei reattori PSR dalle condizioni iniziali.
- L'aspetto senza dubbio più problematico del modello EDC con chimica dettagliata (DC) è legato al forte impatto sui tempi di calcolo. Il problema specifico è imputato non tanto alla necessità di risolvere la conservazione di un numero significativo di scalari, ma proprio alla soluzione del set di equazioni differenziali che descrivono il reattore PSR (vedi eqq. 4.23 e 4.24). Come descritto in precedenza la loro soluzione numerica è condizionata dalla natura *stiff* del sistema, e l'efficienza degli algoritmi si riduce notevolmente proprio in corrispondenza del limite di estinzione/accensione.

Lo stato stazionario del reattore deve essere individuato, in linea di principio, per ogni cella ad ogni iterazione (almeno una volta, a seconda dell'algoritmo di soluzione adottato dal solutore CFD), costituendo quindi la fase più lenta dell'intero schema. In alcuni casi, tipicamente per fiamme che prevedano ampie variazioni della *mixture fraction*, è possibile porre un controllo evitando la soluzione del reattore in quelle zone del dominio interessate da composizioni locali al di fuori dei limiti di infiammabilità (correnti di aria o combustibile), ed è possibile stabilire, di volta in volta, un tempo di residenza di soglia al di sotto del quale evitare la soluzione del reattore che si presume non riesca a stabilizzare la reazione. Con questi controlli è possibile ridurre il numero di chiamate alle routine di integrazione del PSR limitando in qualche misura i tempi di calcolo.

Un'altra soluzione che abbiamo adottato consiste nel calcolare il termine sorgente di ogni cella, ossia il *reaction rate* di ogni scalare, ogni N iterazioni, con $N \geq 1$: si mantiene cioè costante per N iterazioni il *reaction rate* in ogni cella per ogni specie. Abbiamo osservato che la soluzione rimane stabile solo per $N \leq 4$, con la possibilità di diradare ulteriormente il calcolo del termine sorgente quando la soluzione dell'intero campo di moto è già sufficientemente stabile.

Per dare un ordine di grandezza dei tempi di calcolo richiesti dai modelli EDC implementati, possiamo riferirci al testcase **k160a** (circa 16000 celle esaedriche, soluzione 3D). La soluzione completa, partendo da una soluzione isoterma a convergenza, utilizzando una delle varianti "ibride" (**462**, **562** e **662**) richiede circa 9 ore su una workstation x86 a 2.4 GHz. La soluzione con il modello DC (utilizzando un meccanismo da 16 specie e 25 reazioni), partendo da una delle soluzioni reattive ottenute con i modelli ibridi, comporta tempi di calcolo di circa 1 ordine di grandezza superiori richiedendo approssimativamente 90 ore di CPU.

Capitolo 5

La chiusura di Kolmogorov- Petrovski-Piskunov (KPP)

Contenuto

5.1	Introduzione	172
5.2	KPP	173
5.2.1	Chiusura dello schema BML mediante l'analisi KPP	174
5.3	Implementazione del modello KPP	177
5.4	Validazione del modello	182
5.4.1	<i>Vanderbilt Combustor</i>	182
5.4.2	Bruciatore k160a NP	193
5.5	Considerazioni finali	195

5.1 Introduzione

La necessità di superare alcuni problemi incontrati nell'utilizzo su casi pratici del modello EDC a chimica dettagliata, legati essenzialmente al forte impatto sui tempi di calcolo, ha giustificato lo sviluppo di un nuovo modello di combustione. Il requisito principale della nuova formulazione deve essere la capacità di predire con buona accuratezza e con tempi di calcolo estremamente contenuti, principalmente la distribuzione di temperatura media, restringendo il campo di utilizzo alle sole fiamme premiscelate o, come vedremo, parzialmente premiscelate.

L'esigenza di uno strumento di questo tipo nasce dalla possibilità di visualizzare, in tempi estremamente contenuti, la struttura del sistema di fiamme nelle fasi di sviluppo di nuove geometrie di combustori LPC per turbina a gas. Abbiamo intenzionalmente parlato di sistema fiamme per evidenziare la tendenza progettuale degli attuali combustori che prevedono il ricorso al frazionamento della fiamma principale mediante l'uso di bruciatori pilota dalla forma e dalla dislocazione sempre più complesse. L'obiettivo è la continua riduzione della temperatura di fiamma (per contenere gli NO_x) realizzata mediante una sempre maggiore riduzione del rapporto di equivalenza della miscela reagente, che deve però essere accompagnata da un attento studio del processo di stabilizzazione per limitare l'insorgere di oscillazioni termoacustiche. Ecco quindi la possibilità di utilizzare bruciatori pilota non più costituiti da semplici ugelli per l'iniezione di una frazione di combustibile puro nella zona di reazione, ma da dispositivi che realizzano fiamme premiscelate o parzialmente premiscelate estremamente complesse, tipicamente stabilizzate mediante *swirler*.

Il campo di temperatura nell'intero combustore è quindi determinato dalla complessa interazione fra le singole fiamme dei bruciatori pilota e la combustione premiscelata della miscela reagente primaria. Ne conseguono geometrie di calcolo intrinsecamente tridimensionali, che richiedono mesh non strutturate estremamente pesanti (milioni di elementi). Si deve inoltre tenere presente che nelle fasi iniziali della progettazione di un nuovo combustore, o di una nuova configurazione, l'obiettivo principale è la determinazione del campo di temperatura, in modo da valutare la stabilizzazione della fiamma e stimare il carico termico sulle pareti per dimensionare il sistema di raffreddamento.

Il nuovo modello si posiziona così in questo scenario, senza tuttavia essere

sostitutivo dell'approccio EDC con chimica dettagliata, comunque utile nella fase finale dell'iter progettuale, quando è richiesta la conoscenza del campo di concentrazioni.

Il modello adottato è basato, in buona parte, su una proposta di Schmid e collaboratori ([68]), e prevede la formulazione di una chiusura per il termine sorgente nel contesto dell'approccio BML, tramite la definizione di una velocità di propagazione turbolenta S_T . L'espressione del *reaction rate* viene valutata mediante l'applicazione del teorema di Kolmogorov-Petrovski-Piskunov, formulato negli anni '30, e riscoperto negli anni '80 per la definizione dei modelli di combustione turbolenta.

Abbiamo messo a punto una formulazione del modello che consente di studiare fiamme premiscelate nelle quali, tuttavia, la miscela reagente non sia perfettamente omogenea, come tipicamente accade nei dispositivi reali; la formulazione proposta permette, come vedremo, di valutare anche locali fenomeni di combustione per diffusione.

La validazione del modello è stata effettuata tramite lo studio dei testcase **vdb** e **k160a** già analizzati con il modello EDC.

5.2 KPP

Consideriamo l'equazione di conservazione per la variabile di progresso c , nella sua forma mediata alla Favre, assumendo valida l'ipotesi di diffusione secondo gradiente per il termine di trasporto turbolento, e semplifichiamola al caso di fiamma piana monodimensionale stazionaria:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\bar{\rho} \tilde{c} u) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{\rho} D^T \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \right) + \tilde{\Omega}_c \quad (5.1)$$

Nell'ipotesi di turbolenza costante e isotropa (campo di turbolenza non influenzato dalla combustione, [59]), e supponendo che la fiamma propaghi con una velocità S_T , consideriamo un sistema di riferimento solidale al fronte di fiamma. L'idea alla base dell'analisi KPP consiste nel cercare una soluzione della 5.1 nel punto in cui $\tilde{c} \rightarrow 0$. Arrestando al prim'ordine l'analisi asintotica della 5.1, avremo:

$$\bar{\rho}_u S_T \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \bar{\rho}_u D^T \left(\frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x^2} \right) + \tilde{\Omega}_c^* \quad (5.2)$$

dove:

$$\tilde{\Omega}_c^* = \left(\frac{\partial \tilde{\Omega}_c}{\partial x} \right)_{\tilde{c} \rightarrow 0}$$

Il teorema KPP dimostra che una possibile soluzione dell'equazione 5.2 è data da (vedi per maggiori dettagli [59], [38] e [68]):

$$S_T = 2 \left(D^T \cdot \tilde{\Omega}_c^* \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.3)$$

La validità dell'equazione 5.3 è limitata, oltre che dalle ipotesi fatte in precedenza, dal valore positivo del coefficiente di diffusività turbolenta D^T . Il teorema KPP non è quindi in grado di giustificare fiamme che prevedano zone interessate localmente da trasporto controgradiente.¹

Il problema principale nell'uso dell'espressione 5.3 per la stima della velocità di propagazione turbolenta, è la valutazione del legame $\tilde{\Omega}(\tilde{c})$. La semplificazione più comunemente adottata si basa sul modello BML per il quale lo spessore infinitesimo del *reaction layer*, decreta una distribuzione bimodale della variabile di progresso, descritta dal semplice legame parabolico:

$$\tilde{\Omega}(\tilde{c}) \sim \bar{\rho}_u \tilde{c} (1 - \tilde{c})$$

Il modello che andiamo a descrivere, basato sulla formulazione KPP per la velocità di propagazione turbolenta, sfrutta l'ipotesi di BML.

5.2.1 Chiusura dello schema BML mediante l'analisi KPP

L'idea alla base del modello KPP implementato, si basa sulla proposta di Schmid e collaboratori ([68]), che prevede di considerare la seguente espressione per il *reaction rate* della variabile di progresso:

$$\tilde{\Omega}(\tilde{c}) \approx \frac{S_T^2}{D^T} \bar{\rho}_u \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (5.4)$$

E' facile dimostrare che l'espressione 5.4 soddisfa il teorema KPP, restituendo un'identità quando sostituita nella 5.3. Il problema è quindi interamente demandato alla determinazione della velocità di propagazione turbolenta, S_T . E' interessante osservare che assumendo per S_T una dipendenza

¹si può dimostrare che assumendo $D^T < 0$, la soluzione espressa dalla 5.3 può essere ritrovata conducendo un'analisi asintotica per $\tilde{c} \rightarrow 1$

del tipo:

$$S_T \approx u'$$

valida per $Da \gg 1$, l'espressione 5.4 fornisce un *reaction rate* per la variabile di progresso pari a:

$$\tilde{\Omega}_c(\tilde{c}) \approx \frac{\varepsilon}{k} \bar{\rho}_u \tilde{c} (1 - \tilde{c})$$

coincidente con il modello EBU descritto dalla 3.22.

Per determinare una espressione fenomenologicamente consistente per S_T , possiamo ricordare le considerazioni svolte nel §4.2, che giustificano lo sviluppo del processo di combustione solamente qualora si realizzi una miscelazione a livello molecolare dei componenti. In regime turbolento questo evento si accompagna al processo di dissipazione dei vortici (*energy cascade*) ed è quindi associato alla frequenza caratteristica della turbolenza, τ_T . Come stabilito nella definizione dei modelli EDC, la velocità di reazione del generico scalare reattivo è quindi determinata dalla sovrapposizione della frequenza di *mixing* τ_T , e dalla frequenza caratteristica della reazione chimica, τ_L .

Diversamente da quanto fatto nei modelli EDC-DC, Schmid et al. assumono in questo caso una combinazione quadratica dei tempi caratteristici:

$$\tau_c = \sqrt{(\tau_T^2 + \tau_L^2)}$$

che permette di tener conto in qualche misura del fatto che i due eventi non si realizzano consecutivamente ma agiscono simultaneamente, realizzando un passaggio graduale tra i vari fenomeni che di volta in volta costituiscono il limite all'evoluzione della reazione (*mixing* turbolento o reattività chimica).

Analogamente a quanto fatto per la definizione dei modelli EDC, possiamo utilizzare la relazione appena identificata per stimare il *reaction rate* [68]:

$$\tilde{\omega}_c \approx (\tau_T^2 + \tau_L^2)^{-\frac{1}{2}}$$

Sfruttando questa proporzionalità per il *reaction rate* e ricordando la soluzione dell'analisi KPP (eq. 5.3), si ottiene:

$$\boxed{S_T = S_L^0 + u' \cdot (1 + Da^{-2})^{\frac{1}{4}}} \quad (5.5)$$

essendo $Da = \tau_t/\tau_L$ il numero di *Damköhler* locale. Al valore S_T predetto dall'analisi KPP è stato aggiunta, per consistenza, la componente laminare S_L^0 della velocità di propagazione. L'equazione 5.5 costituisce l'espressione

cercata per la velocità di propagazione turbolenta. La dipendenza diretta di S_T dal numero di *Damköhler*, calcolato localmente nel campo di moto, implica un controllo prevalente del *reaction rate* da parte del *mixing* turbolento, per $Da \gg 1$, e dalla cinetica chimica per $Da \ll 1$. L'espressione trovata per S_T consente quindi di coprire, formalmente, l'intero diagramma di Borghi: in realtà l'ipotesi di gradiente di diffusione e di distribuzione intermittente delle variabile di progresso (BML), alla base dell'intera formulazione, restringono il campo di validità del modello alle sole regioni, sia per $Da < 1$ sia per $Da > 1$, in cui è valida l'ipotesi di flamelet [38].

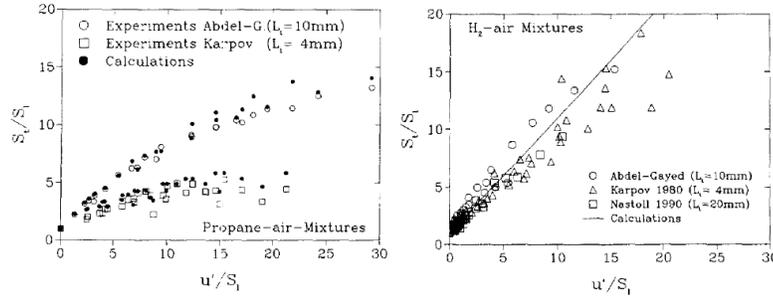


Figura 5.1: Validazione di S_T stimata tramite la correlazione di Schmid et al [68]

In figura 5.1 riportiamo i principali risultati della campagna di validazione della correlazione 5.5 svolta dagli stessi autori [68]: i grafici mostrano il confronto con numerosi dati sperimentali, per varie tipologie di combustibile e per varie tipologie di fiamma, rilevano un buon accordo sia qualitativo sia quantitativo.

L'espressione della velocità di fiamma turbolenta appena ricavata, può quindi essere inserita nell'equazione 5.4 dedotta per il *reaction rate*, per ottenere la formulazione complessiva:

$$\tilde{\Omega}_c = \bar{\rho}_u C_{KPP} \frac{S_T^2}{DT} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (5.6)$$

La grandezza C_{KPP} costituisce la costante caratteristica del modello ed è stata stimata dagli autori ($C_{KPP} = 0.75$) mediante il *tuning* su un singolo esperimento, rappresentato dalla libera propagazione di una fiamma di forma sferica [68].

L'equazione di conservazione della variabile di progresso è a questo punto completamente determinata, osservando che il coefficiente di diffusività

turbolenta D^T ed il numero di *Damköhler* vengono così stimati:

$$D^T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \text{Da} = \frac{\tau_T}{\tau_L} \approx \frac{L_T}{u'} \cdot \frac{S_L^0}{\delta_L}$$

essendo:

$$L_T = C_\mu \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad C_\mu = 0.09$$

E' interessante osservare come si modifica l'espressione del *reaction rate* nei due casi limite di grandi e piccoli numeri di *Damköhler*. Per $\text{Da} \gg 1$ si ha:

$$\tilde{\Omega}_c = \bar{\rho}_u \frac{2}{3} \frac{C_{KPP}}{C_\mu} \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{S_L^0}{u'} + 1 \right) \tilde{c} (1 - \tilde{c})$$

che costituisce un'espressione analoga al classico EBU, ma con una sensibilità al contributo chimico tramite S_L^0 . Per $\text{Da} \ll 1$ risulta:

$$\tilde{\Omega}_c = \bar{\rho}_u \frac{2}{3} \frac{C_{KPP}}{C_\mu} \frac{1}{\tau_L} \tilde{c} (1 - \tilde{c})$$

per la quale il *reaction rate* complessivo è interamente controllato dal termine cinetico.

5.3 Implementazione del modello KPP

L'implementazione del modello KPP all'interno di un codice CFD², nell'ambito dell'approccio RANS, si presenta estremamente più semplice di quanto visto per i modelli EDC. Nel formalismo di BML, infatti l'unica grandezza scalare che deve essere conservata è la variabile di progresso \tilde{c} , per la quale deve essere stimato il termine sorgente mediante l'espressione caratteristica del modello. L'ipotesi di diffusione secondo gradiente, alla base dell'analisi KPP, rende immediata la soluzione di \tilde{c} come generico scalare aggiuntivo al consueto set di equazioni RANS.

Come accennato in precedenza è stata adottata una formulazione del modello che consente di tenere conto della non perfetta omogeneità della miscela reagente. L'obiettivo è rendere il modello in grado di analizzare tutti quei casi, assai frequenti nei dispositivi reali, in cui gli organi di premiscelazione non realizzino una perfetta omogeneità dei reagenti, e in quei casi in cui il

²anche in questo caso il codice di riferimento è STAR-CD™

ricorso a fiamme pilota di tipo diffusivo renda disuniforme la distribuzione del combustibile, giustificando locali processi di combustione per diffusione

Nell'ambito dell'approccio BML, il campo di temperatura e densità è univocamente determinato dal valore locale della variabile di progresso \tilde{c} . Tenendo conto della non uniformità della miscela reagente, le relazioni caratteristiche del modello BML, già introdotte nel §3.4.2.1, si modificano come segue:

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_u(\tilde{\xi})}{1 + \tau(\tilde{\xi})\tilde{c}} \quad (5.7)$$

$$\tilde{T} = (1 - \tilde{c}) T_u(\tilde{\xi}) + \tilde{c} T_b(\tilde{\xi}) \quad (5.8)$$

La disuniformità della miscela reagente introduce una dipendenza della densità e della temperatura dalla *mixture fraction* locale, che si manifesta nella dipendenza da $\tilde{\xi}$ dei valori di $\bar{\rho}$ e \tilde{T} nei gas *unburned* (*mixing* tra aria e combustibile) e *burned* (condizioni adiabatiche di equilibrio). Il valore medio della *mixture fraction*, conservata in senso stretto nel campo di moto, viene valutato risolvendo una opportuna equazione di trasporto:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{\xi}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{\xi}u_i) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{S_{CT}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right) \quad (5.9)$$

Dovranno poi essere stimate le dipendenze da ξ delle grandezze caratteristiche della fiamma laminare. Ci riferiamo alla variazione della velocità di fiamma laminare S_L^0 al variare della concentrazione di combustibile, e alla analoga dipendenza dello spessore della fiamma laminare δ_L . La dipendenza di S_L^0 da ξ può essere stimata in vari modi, non ultimo l'uso di codici per la soluzione di fiamme laminari tramite meccanismi di reazione estremamente dettagliati (vedi ad esempio [13]). In questo caso, limitatamente alla combustione del gas naturale in aria, abbiamo preferito servirci di opportune correlazioni del tutto analoghe a quella descritta dettagliatamente in appendice C, dedotta tramite la *Rate-Ratio Asymptotic Analysis* ([8] e [50])

L'approccio seguito nel presente lavoro per valutare l'effetto della disuniformità del campo di *mixture fraction*, trascura l'effetto delle fluttuazioni turbolente dello scalare ξ , e ne assume una distribuzione statistica con varianza nulla. Il valor medio della generica grandezza funzione di ξ viene quindi stimato a partire dal valore medio $\tilde{\xi}$:

$$\overline{Q(\xi)} \approx Q(\tilde{\xi})$$

Questo modo di procedere consente una estrema semplificazione della formulazione complessiva del modello, ma introduce una semplificazione considerevole in quanto trascura gli effetti delle fluttuazioni turbolente sulla concentrazione di combustibile. In un combustore reale l'effetto può assumere un peso rilevante in corrispondenza dei limiti di estinzione, dove eventuali ampie fluttuazioni della concentrazione di combustibile, possono determinare spegnimenti locali, pregiudicando la stabilità della fiamma media. L'errore commesso è comunque generalmente accettabile, almeno lontano dal limite di estinzione del combustore, e la presente formulazione è largamente impiegata nello studio dei combustori LPC per turbina a gas (vedi ad esempio [62], [82]).

La dipendenza della densità, della temperatura e delle quantità caratteristiche della fiamma laminare dal valor medio di ξ , viene valutata esternamente al modello e memorizzata in un opportuno database, nel quale sono discretizzate le funzioni:

$$\rho_u(\xi) \quad \rho_b(\xi) \quad T_u(\xi) \quad T_b(\xi) \quad S_L^0(\xi) \quad \delta_L(\xi)$$

In figura 5.2 riportiamo alcuni esempi delle funzioni $T_b(\xi)$ e $S_L^0(\xi)$, per una fiamma metano-aria a pressione atmosferica.

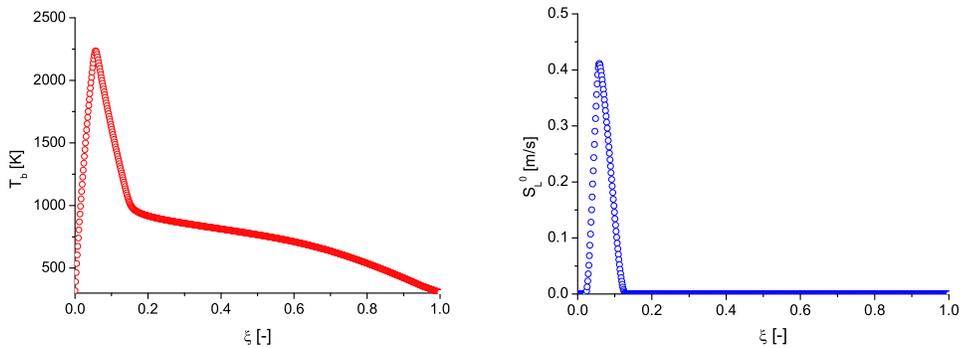


Figura 5.2: Variazione della temperatura di equilibrio e della velocità laminare di fiamma per la combustione metano aria

L'implementazione del modello KPP nel codice STAR-CDTM segue le stesse regole generali già ampiamente indicate per l'implementazione dei modelli EDC. L'interazione tra il modello di combustione e il solutore CFD si sviluppa attraverso i seguenti passi principali:

- Generazione del database chimico valido nelle specifiche condizioni operative del calcolo (composizione, pressione e temperatura delle correnti di aria e combustibile). L'operazione viene svolta servendosi di uno specifico codice, sviluppato come strumento ausiliario al modello di combustione vero e proprio. Il codice, denominato **Eflame**, si serve delle librerie ChemkinTM per la gestione delle proprietà termochimiche delle specie, ed individua le condizioni di equilibrio della miscela reagente servendosi, in maniera del tutto automatica, dello specifico componente delle librerie ChemkinTM (codice EQUILTM descritto in appendice B.2.1). Come accennato in precedenza, all'interno del codice sono state implementate alcune correlazioni per la valutazione della velocità di fiamma laminare per le principali specie combustibili [8] e [50].
- Attivazione nel codice CFD di due equazioni di conservazione aggiuntive per le due grandezze scalari caratteristiche, \tilde{c} e $\tilde{\xi}$
- Attivazione nel codice CFD della routine che permette la definizione del termine sorgente per lo scalare \tilde{c} .
- Attivazione nel codice CFD della routine per l'assegnazione del valore della densità. Nell'approccio BML l'equazione di stato è sostituita dall'eq. 5.7
- Attivazione nel codice CFD della routine per l'assegnazione di un termine sorgente aggiuntivo nell'equazione di conservazione dell'entalpia statica. Tramite questa routine è possibile forzare il campo di temperatura, assegnando il valore determinato dalla combinazione lineare dei valori T_u e T_b secondo l'approccio BML.

Per quanto riguarda l'interrogazione del database chimico (interamente contenuto in una *look up table* esterna memorizzata nel file *flame.bin*), le grandezze, funzione unicamente di ξ , sono lette dal file all'avvio della simulazione e memorizzate in opportuni blocchi di memoria: il valore puntuale delle singole quantità (T , ρ , S_L^0 e δ_L) viene valutato tramite interpolazione lineare nei corrispondenti array memorizzati.

Analogamente a quanto descritto per i modelli EDC, anche nel caso del modello KPP è richiesta l'implementazione di una specifica tecnica per l'accensione della miscela reagente, che realizzi una fase di *ignition* numerica

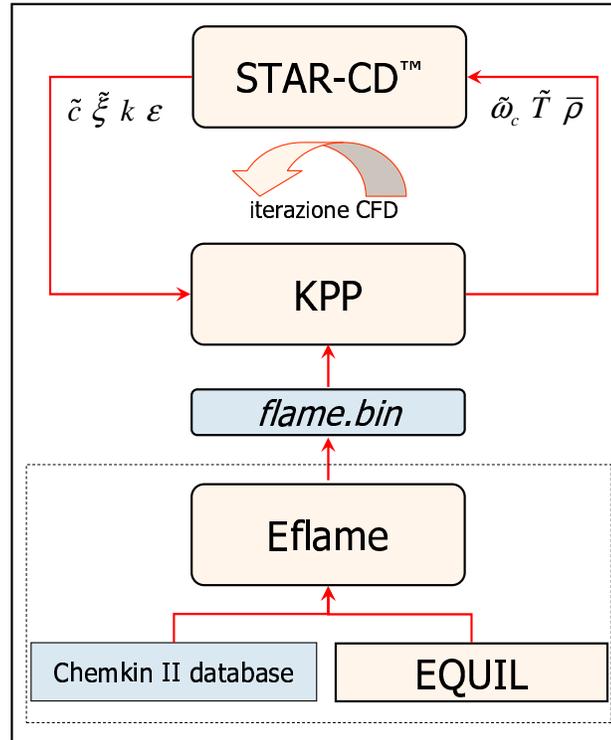


Figura 5.3: Diagramma schematico dell'interazione tra il modello KPP, il codice STAR-CD™ e i codici ausiliari. Nel riquadro tratteggiato sono riportati i codici e le librerie esterne al modello e non direttamente interrogati durante la simulazione CFD

della fiamma, permettendo successivamente al modello di combustione di stabilizzare la reazione. Il meccanismo di *ignition* implementato nel modello KPP è del tutto analogo a quello ideato per i modelli EDC, e rimandiamo quindi al paragrafo §4.4 per una descrizione dettagliata.

In figura 5.3 riportiamo un diagramma esplicativo dell'implementazione del modello nel codice STAR-CD™ e delle sue interconnessioni con gli strumenti ausiliari descritti.

L'ipotesi di reazione chimica infinitamente con cui si assumono evolvere le flamelet nell'approccio BML, rende di fatto non necessaria la valutazione durante il calcolo della concentrazione delle specie chimiche. La reazione globale a passo singolo su cui si basa il modello, giustifica la presenza delle sole specie principali, reagenti e prodotti della reazione stechiometrica, ma la loro distribuzione è direttamente determinata dal campo di \tilde{c} , unico scalare reattivo, e può essere ricavata al termine della simulazione, in fase di *postprocessing*. Dette $Y_{k_u}(\xi)$ e $Y_{k_b}(\xi)$ le funzioni che descrivono la dipenden-

za dalla *mixture fraction* della generica specie k negli *unburned gas* (dove saranno identicamente nulle le frazioni in massa di tutti i prodotti di reazione) e nei *burned gas* (dove le composizioni coincidono con i rispettivi valori all'equilibrio), stimeremo la concentrazione locale tramite:

$$\tilde{Y}_k = (1 - \tilde{c}) Y_{k_u}(\tilde{\xi}) + \tilde{c} Y_{k_b}(\tilde{\xi})$$

5.4 Validazione del modello

Per testare l'accuratezza del modello e valutarne la risposta per quanto riguarda i tempi di calcolo, abbiamo operato una serie di simulazioni sui due testcase con fiamma premiscelata, **vdb** e **k160a**, già descritti in precedenza. Potremo pertanto confrontare i risultati ottenuti con i dati sperimentali disponibili (essenzialmente per il combustore **vdb**) e con i risultati già commentati ricavati dalle simulazioni con i modelli EDC.

5.4.1 *VanderBilt Combustor*

La geometria e le caratteristiche principali del combustore **vdb** sono già state descritte in maniera dettagliata nel paragrafo §4.5.5, ci limiteremo pertanto ad evidenziare le impostazioni specifiche per la simulazione tramite il modello KPP.

La simulazione è stata svolta utilizzando la stessa mesh di calcolo e le stesse condizioni al contorno già descritte per la simulazione con i modelli EDC. La miscela reagente è assunta perfettamente omogenea, rendendo così formalmente inattiva la conservazione della *mixture fraction* ξ . In tabella 5.1 riportiamo i valori delle principali grandezze necessarie alla simulazione.

ξ	ρ_u	ρ_b	T_u	T_b	S_L^0	δ_L
[—]	[kg/m ³]	[kg/m ³]	[K]	[K]	[cm/s]	[mm]
0.03309	1.150	0.206	294.0	1639.4	10.8	0.187

Tabella 5.1: Dati per la simulazione del combustore **vdb** usando il modello KPP

Come descritto nel paragrafo §3.4.3, la valutazione della frequenza caratteristica del *mixing* turbolento (o in altre parole dello *stretching* in regime

turbolento) può essere effettuata utilizzando parametri diversi a cui sono associati criteri distinti. In generale i due approcci universalmente adottati prevedono la stima del *turbulent mixing time* tramite i parametri ε/k o $\sqrt{\varepsilon/\nu}$. Nel modello KPP implementato, come visto, viene considerato il parametro ε/k , direttamente associato alle strutture di moto con dimensioni paragonabili alla lunghezza integrale di turbolenza. In ogni caso, indipendentemente dal parametro considerato, l'uso di un *turbulent mixing time* caratteristico porta a frequenti sovrastime del *reaction rate* in alcune zone critiche per i consueti modelli di turbolenza per l'approccio RANS (pareti, scie) [59]. Nel paragrafo §3.4.3 abbiamo descritto la funzione di efficienza ITNFS, derivata da Meneveau e Poinso [49], che corregge il valore di ε/k sulla base dei risultati di una simulazione DNS: come accennato la funzione ITNFS viene spesso utilizzata nell'ambito dei modelli flamelet.

Nel presente lavoro abbiamo deciso di utilizzare un diverso criterio di correzione, osservando che il modello impiegato si basa sulla definizione di una velocità di fiamma turbolenta, per la quale non sono stati presi in considerazione gli effetti dello *stretching*. E' possibile stimare l'effetto dello *stretching* sulla velocità turbolenta S_T , utilizzando un semplice modello, proposto da Peters ([56] e [54]), che si basa su un'analogia con l'espressione 3.10, introdotta in §3.2.1 per quantificare lo *stretching* sulla velocità laminare di fiamma. Detta S_T^0 la velocità di fiamma priva di *stretching* definita dall'equazione 5.5, valuteremo la velocità di fiamma effettiva tramite:

$$\frac{S_T}{S_T^0} = \left(1 - 1.4 \mathcal{M} \frac{\delta_L u'}{L_T S_L^0} \right) \quad (5.10)$$

essendo \mathcal{M} il numero di *Markstein* della miscela reagente. Nel caso del combustore **vdb**, che ricordiamo prevede un rapporto di equivalenza $\phi = 0.586$, possiamo stimare un numero di *Markstein* pari a 0.15 [50].

Per mostrare l'effetto del parametro di *stretching* introdotto, riportiamo, in figura 5.4, una mappa del rapporto S_T/S_T^0 .

Il parametro assume correttamente valori molto lontani dall'unità solo in quelle zone interessate da alto *stretching* localizzate nello *shear layer* in corrispondenza della zona di ricircolo (cfr. figura 4.42.a).

Nelle figure 5.5 e 5.6 riportiamo il confronto con i dati sperimentali per i profili radiali della temperatura media.

Nel commentare i risultati, possiamo riportare le seguenti considerazioni:

- L'accordo con i dati sperimentali è complessivamente molto buono. Il

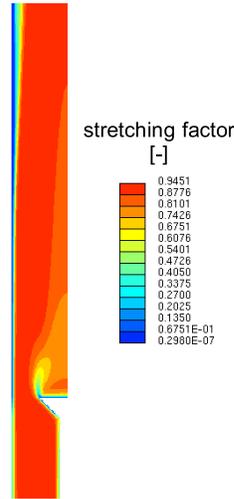


Figura 5.4: Mappa del fattore di *stretching* definito in 5.10

modello predice il completamento della reazione all'uscita del combustore ($z/D = 6$), cogliendo la stabilizzazione del profilo di temperatura. I dati sperimentali riportano un profilo radiale di temperatura già sensibilmente piatto in $z/D = 2$, mentre il modello tende a sottostimare la temperatura nei raggi più esterni.

- Il modello sovrastima la temperatura nella zona di ricircolo per $z/D < 0.1$. Si tratta di un fenomeno rilevato anche per i modelli EDC ed è legato all'assunzione di adiabaticità delle pareti: ricordiamo che gli autori delle prove sperimentali stimano una perdita di calore di circa il 6% sulle pareti solide del *bluff-body* [52]. I modelli EDC e KPP, inoltre, non prevedono controlli specifici sugli effetti di *quenching* della fiamma indotta dagli alti *stretching* a parete.
- Complessivamente si osserva che il modello KPP tende a sovrastimare l'ampiezza del *flame brush*, determinando profili radiali di temperatura con una pendenza lievemente inferiore a quella mostrata dai dati sperimentali. Crediamo che questo comportamento, più vistoso nelle zone $0.5 < z/D < 1.0$ e $z/D > 2.0$, sia dovuto alla incapacità del modello di apprezzare locali contributi contro gradiente al trasporto turbolento. In figura 5.7, riportiamo la distribuzione del numero di *Bray* nel campo id moto, per due diversi valori della costante α (rispettivamente 0.5 e 0.125). Una stima della costante α può essere effettuata sfruttando

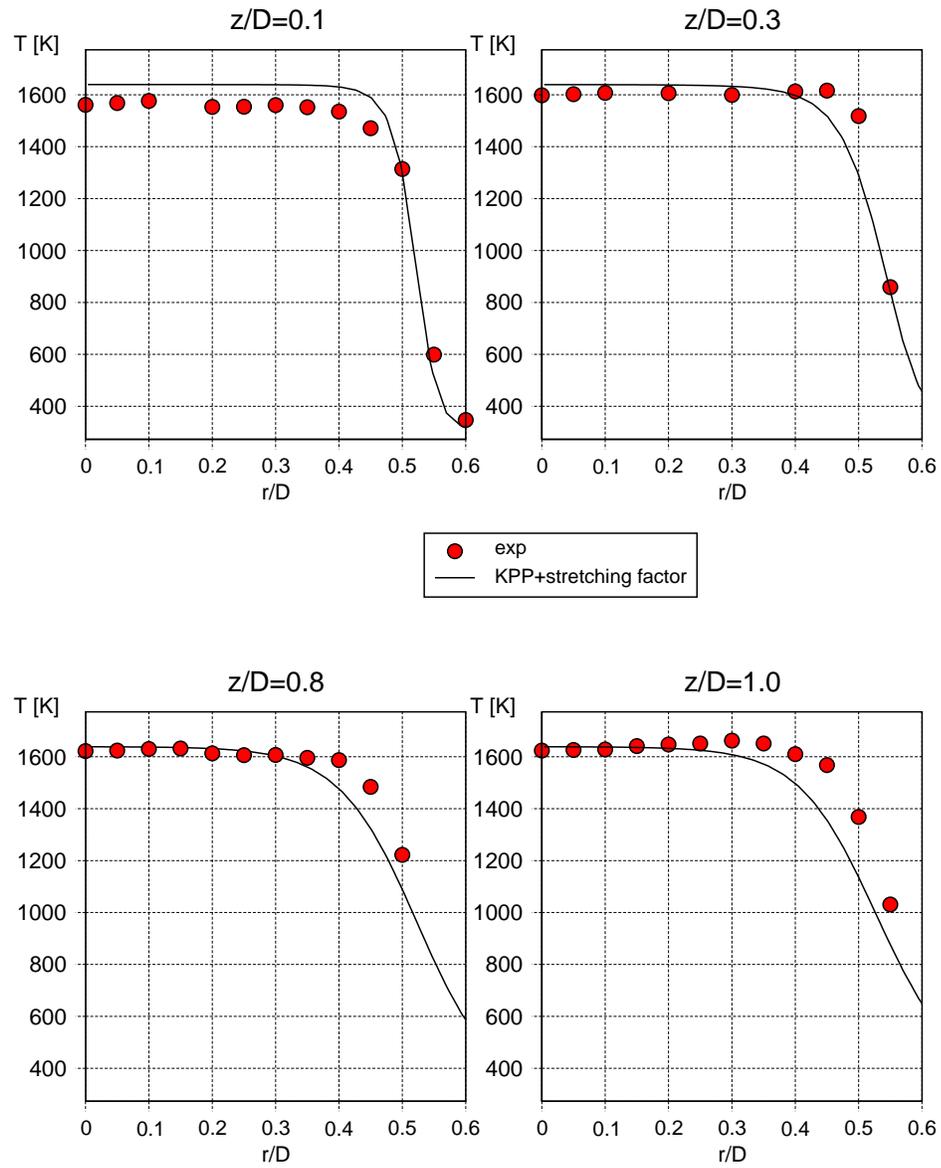


Figura 5.5: Combustore **vdb**, modello KPP: profili radiali della temperatura media

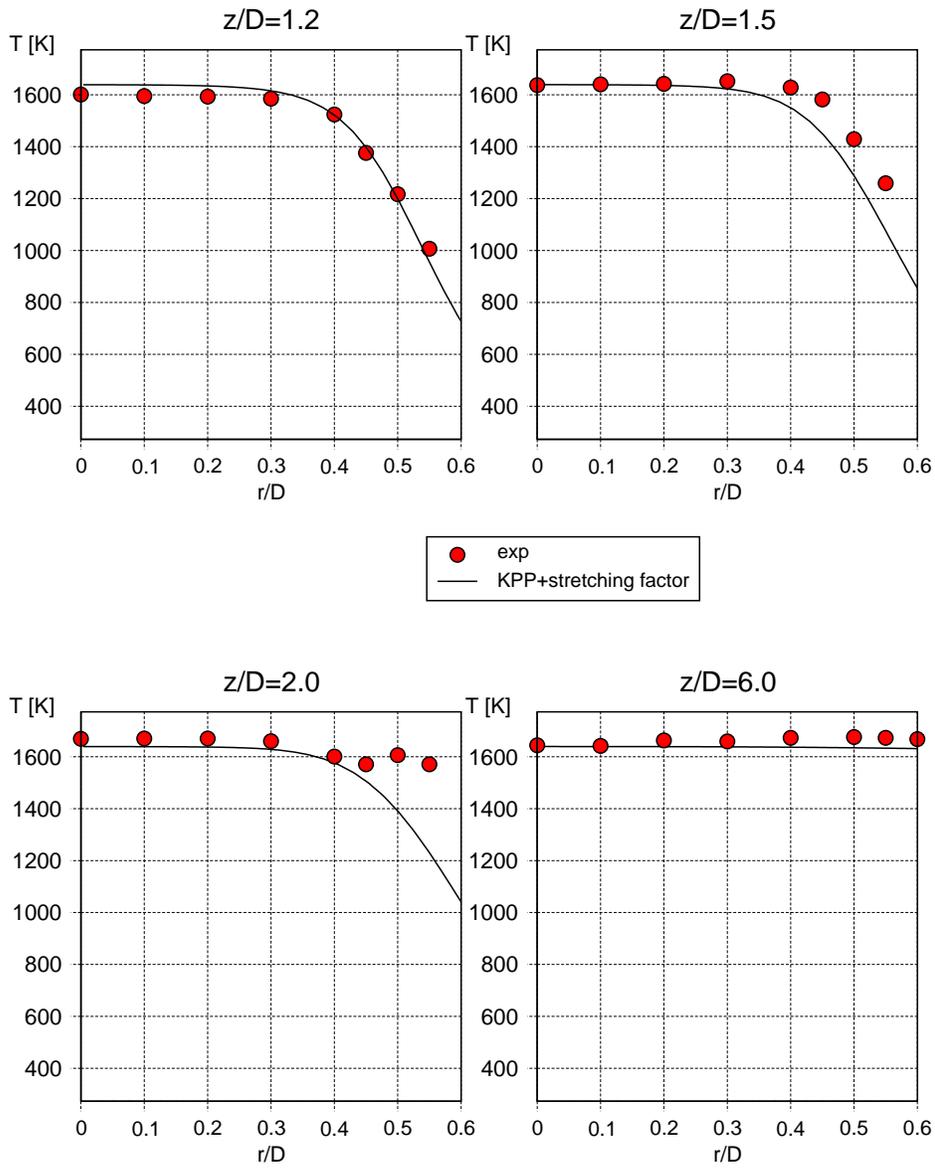


Figura 5.6: Combustore vdb, modello KPP: profili radiali della temperatura media

i risultati di una simulazione DNS dovuta a Veynante e collaboratori [75]. Gli autori correlano il valore di α al rapporto L_T/δ_L : per il valore $L_T/\delta_L = 10$ stimato per il testcase **vdb** risulta $\alpha \approx 0.5$. Il valore $\alpha = 0.125$ considerato per tenere conto dell'incertezza del modello, deve essere interpretato come cautelativo in quanto compare a denominatore nell'espressione di N_b (vedi equazione 3.30).

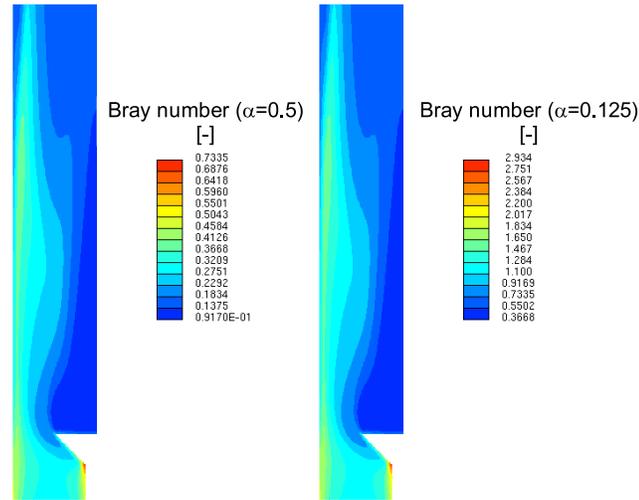


Figura 5.7: Combustore **vdb**, modello KPP: mappa del numero di *Bray* per due diversi valori della costante α

Osserviamo come, complessivamente, nella zona di reazione, il parametro sia sempre inferiore all'unità, decretando un trasporto turbolento diretto prevalentemente secondo il gradiente di \tilde{c} . Nonostante ciò, localmente si possono avere contributi sensibili delle componenti contro gradiente sul trasporto turbolento, che rendono quantitativamente non precisa la consueta assunzione di *eddy diffusivity*: l'effetto usualmente rilevato è proprio una sovrastima della diffusività turbolenta con conseguente sovrastima dell'ampiezza del *flame brush*. Nel caso in esame riteniamo che l'effetto possa avere un peso significativo nella sovrastima del *flame brush* per $z/D > 2$, dove si rileva la regione con i valori più alti del numero di Bray.

Una spiegazione ancora più chiara della tendenza al CGD nelle zone finali della fiamma, può essere fornita stimando l'entità del termine di

trasporto turbolento $\widetilde{u''c''}$ tramite la seguente espressione [75]:

$$\widetilde{u''c''} = \widetilde{c}(1 - \widetilde{c}) (\tau S_L^0 - 2\alpha u')$$

L'espressione costituisce una conseguenza della definizione del numero di Bray, il cui valore definisce il segno del secondo termine nel RHS. In figura 5.8 riportiamo l'andamento del termine $\widetilde{u''c''}$ nel campo di moto per tre diversi valori della costante α .

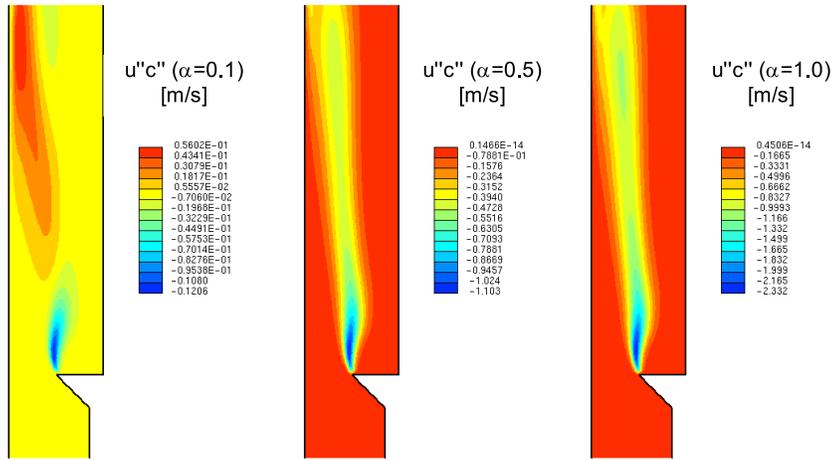


Figura 5.8: Combustore **vdb**, modello KPP: mappa del termine di trasporto turbolento per tre diversi valori della costante α

E' interessante osservare come valori molto bassi della costante α giustifichino fenomeni di locale trasporto turbolento contro gradiente ($\widetilde{u''c''} < 0$) proprio nelle zone finali della fiamma. Per i valori di α stimati per le attuali condizioni operative, il trasporto rimane complessivamente diretto come il gradiente di \widetilde{c} .

Concludiamo l'analisi dei risultati mostrando, nelle figure 5.9 e seguenti, i profili radiali delle specie CH_4 e H_2O .

I risultati mostrano lo stesso livello di accordo con i dati sperimentali già mostrato dai profili di temperatura, risultando infatti anch'essi determinati unicamente a partire dalla distribuzione della variabile di progresso \widetilde{c} .

Nel capitolo 6, quando riporteremo i risultati del testcase **vdb** ottenuti con il modello *Level Set* qui sviluppato, riporteremo un confronto fra i vari modelli e le misure sperimentali, qui omesso per ragioni di chiarezza espositiva.

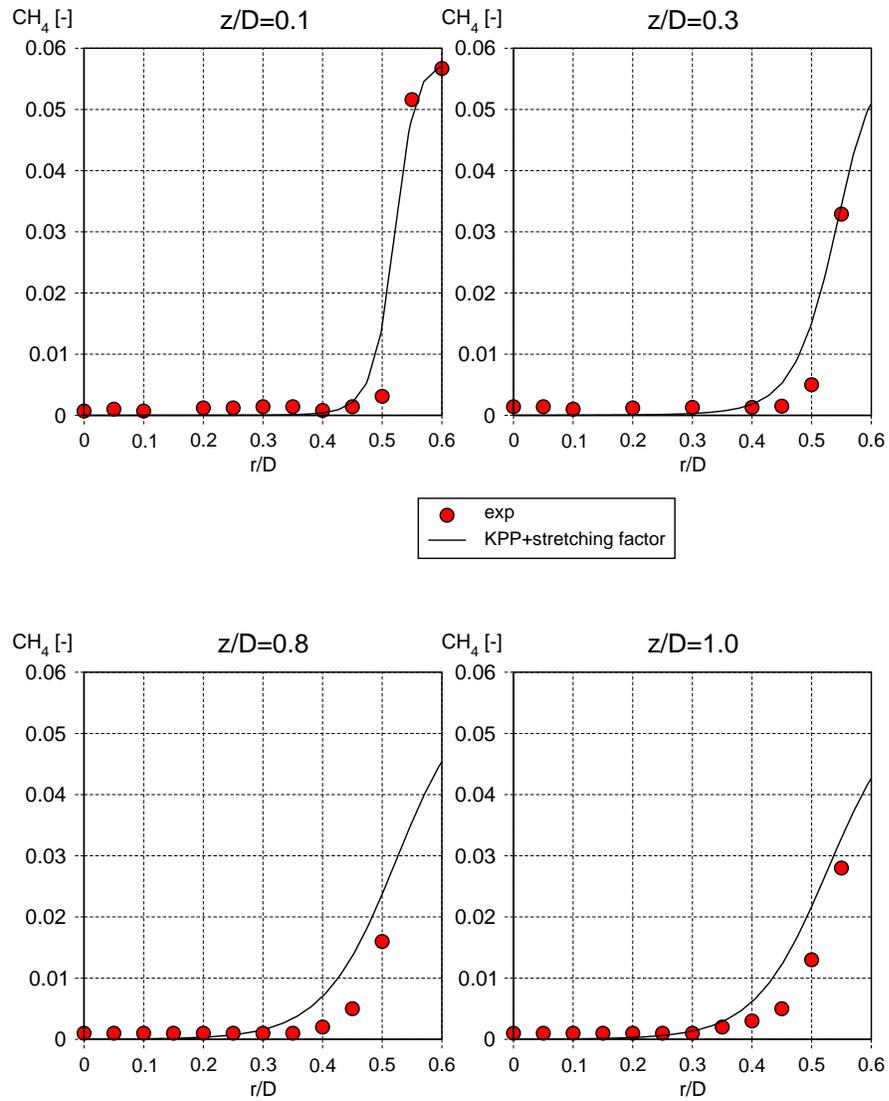


Figura 5.9: Combustore vdb , modello KPP: profili radiali della frazione molare di CH_4

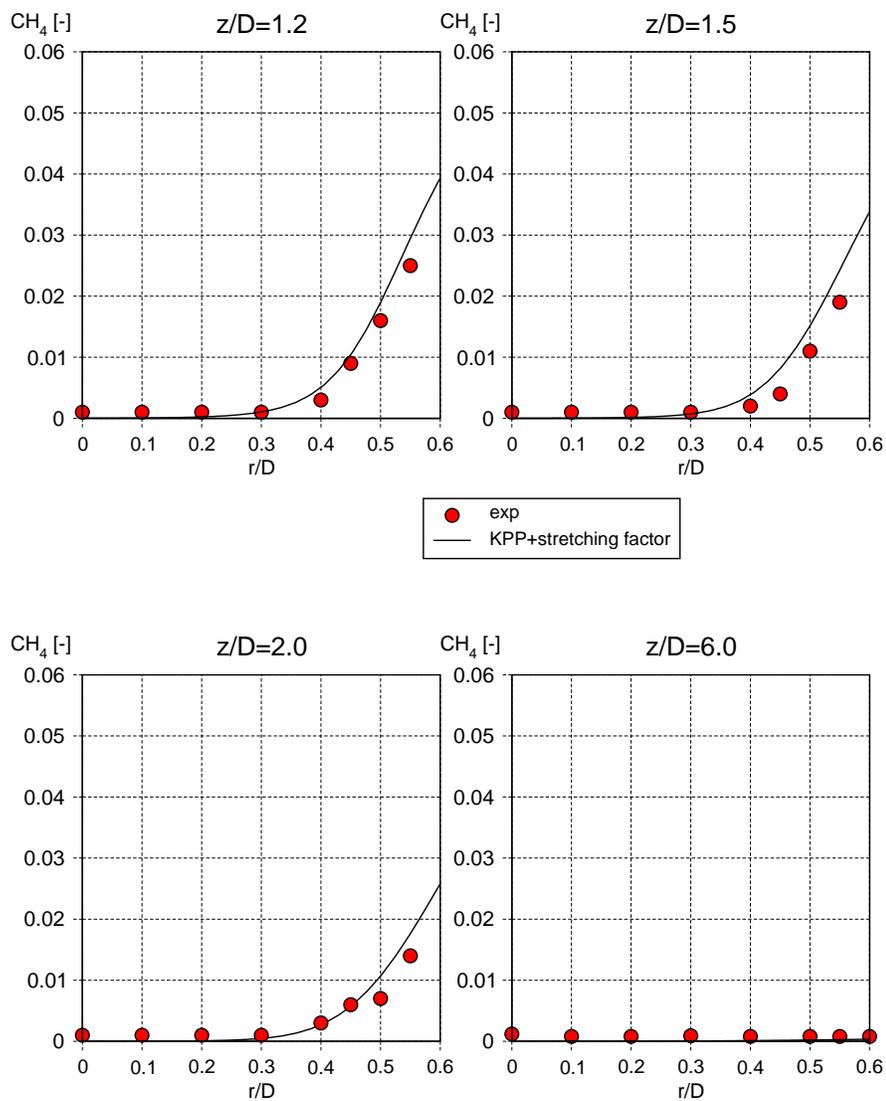


Figura 5.10: Combustore vdb, modello KPP: profili radiali della frazione molare di CH_4

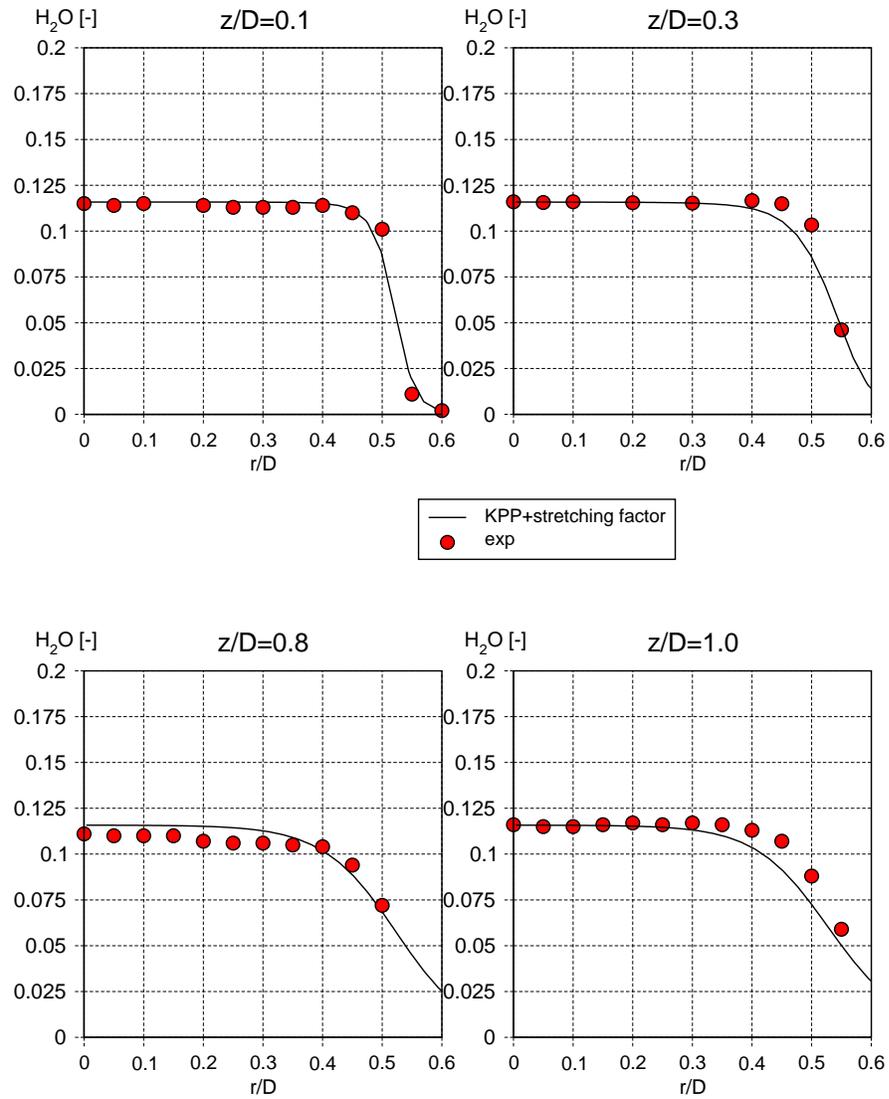


Figura 5.11: Combustore vdb, modello KPP: profili radiali della frazione molare di H_2O

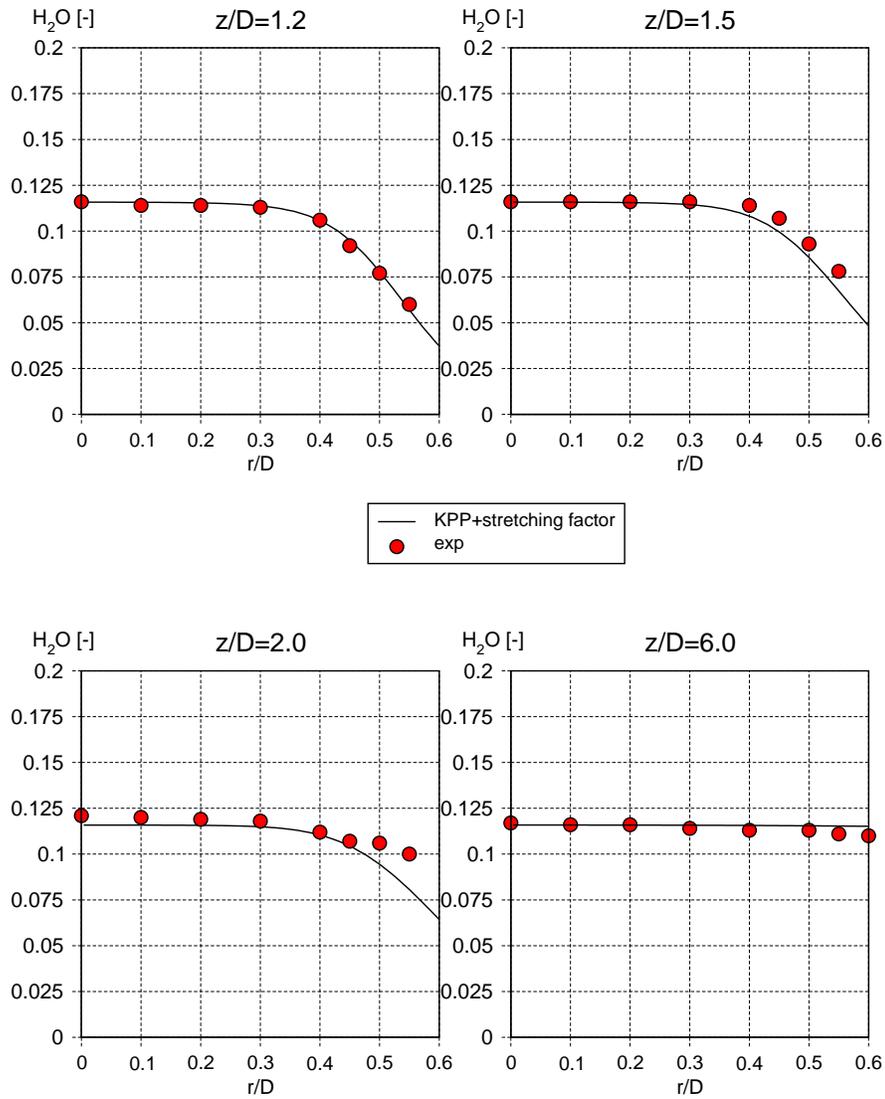


Figura 5.12: Combustore vdb, modello KPP: profili radiali della frazione molare di H_2O

5.4.2 Bruciatore k160a NP

Dal momento che anche il presente testcase è stato illustrato dettagliatamente per la simulazione con il modello EDC, rimandiamo al paragrafo §4.5.6 per la descrizione delle condizioni al contorno e della mesh di calcolo utilizzata, limitandoci in questa sede a riportare le condizioni al contorno e le impostazioni specifiche del modello KPP.

In tabella 5.2 riportiamo le caratteristiche nominali delle tre fiamme (**A**, **B** e **C**) analizzate per il combustore **k160a**.

	λ [—]	ξ [—]	ρ_u [kg/m ³]	ρ_b [kg/m ³]	T_u [K]	T_b [K]	S_L^0 [cm/s]
test A	1.31	0.04270	1.165	0.173	288	1938.54	20.2
test B	1.48	0.03797	1.169	0.188	288	1793.96	13.7
test C	1.66	0.03399	1.173	0.203	288	1664.70	8.4

Tabella 5.2: Caratteristiche nominali delle tre fiamme analizzate per il combustore **vdb** con il modello KPP

Data la totale carenza di dati sperimentali dettagliati per le tre fiamme analizzate, ci limiteremo, in questa fase, a mostrare i campi di temperatura individuati dal modello KPP nei tre casi, rilevando le principali differenze con gli analoghi risultati ottenuti con il modello EDC-DC.

In figura 5.13 riportiamo un confronto diretto tra i campi di temperatura predetti, nei tre casi, dal modello KPP e dal modello EDC-DC (vedi §4.5.6). Per rendere direttamente confrontabili le due distribuzioni, abbiamo composto, per ciascun caso, una sezione completa del combustore riportando sul lato sinistro le isolinee del modello KPP e sul lato destro quelle del modello EDC, utilizzando per le due mappe le stesse scale di temperatura.

Alla luce dei risultati mostrati possiamo effettuare le seguenti considerazioni:

- I modelli dimostrano, complessivamente, un buon accordo, predicendo, nei tre casi fiamme che discostano in lunghezza, l'una dall'altra, di non più del 15%. Anche l'ampiezza del *flame brush* è, nei tre casi, in discreto accordo, con una tendenza del modello EDC-DC a predire *brush* più

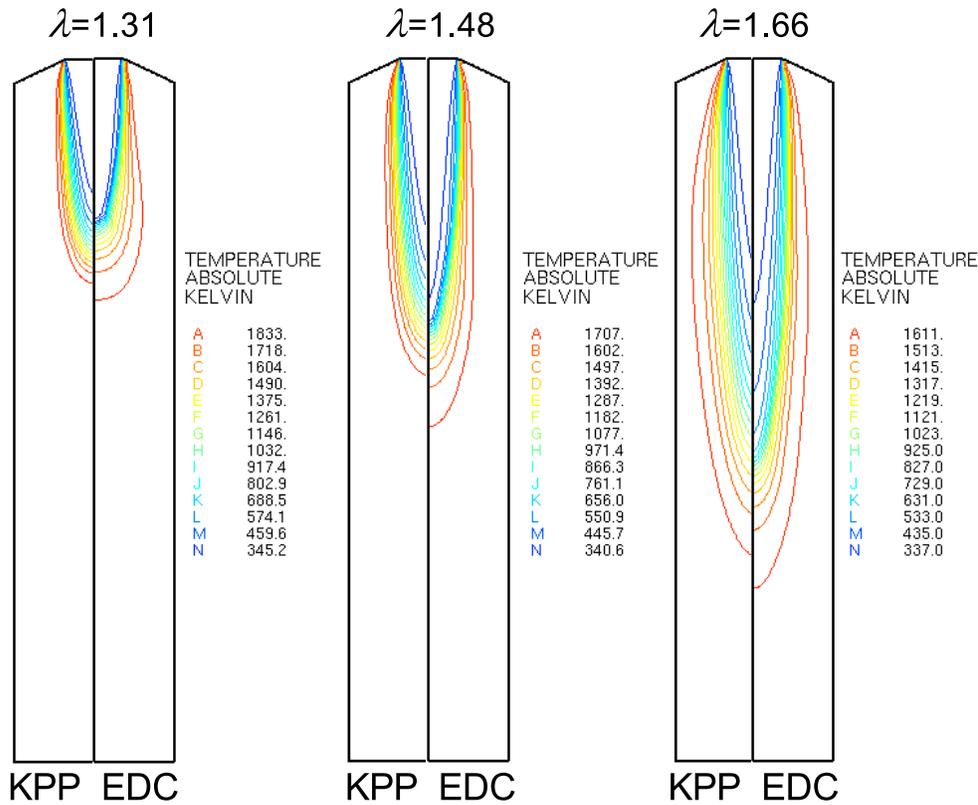


Figura 5.13: Combustore **k160a**: confronto delle distribuzioni di temperatura dei modelli KPP e EDC-DC per i tre casi analizzati. E' riportata una porzione della mesh di calcolo corrispondente alla lunghezza effettiva del combustore.

ampi per le miscele più ricche e con una tendenza del modello KPP a diffondere maggiormente la fiamma per miscele magre.

- I due modelli dimostrano un'analogia sensibilità al rapporto di equivalenza della miscela, stimando variazioni paragonabili della lunghezza della fiamma e del *flame brush*. Ricordiamo che i casi **A**, **B** e **C** differiscono, oltre che per il λ della miscela, anche per l'intensità di turbolenza in ingresso, risultando fortemente diversi i numeri di *Damköhler* nelle tre situazioni (vedi tabella 4.11). L'analogia risposta alle variazioni del numero di *Damköhler* per i due modelli, dimostra la bontà dell'espressione individuata per la velocità di fiamma turbolenta S_T e del fattore di *stretching* introdotto.

- In generale osserviamo che il modello KPP predice una reattività maggiore della miscela, delineando in ogni caso fiamme più corte. Alla luce della sovrastima delle emissioni di CO mostrata dal modello EDC-DC (vedi figura 4.62) e della inevitabile sottostima del modello KPP (per via dell'assunzione di chimica infinitamente veloce), possiamo supporre che la discrepanza sia determinata in parte da una bassa reattività del modello EDC-DC ed in parte da una sovrastima del modello KPP.

5.5 Considerazioni finali

L'analisi dei testcase di validazione selezionati decreta, complessivamente, un buon comportamento del modello KPP nello studio di fiamme premiscelate turbolente, rispondendo così in maniera esauriente, alle necessità che ne hanno determinato lo sviluppo. Dal confronto con i dati sperimentali e con i risultati del modello EDC-DC descritto in precedenza, risulta una buona capacità del modello di cogliere la struttura della fiamma, stimando in maniera qualitativamente e quantitativamente corretta il campo di temperatura.

Per quanto riguarda il contenimento dei tempi di calcolo, che costituiva uno dei requisiti fondamentali, il modello si è confermato estremamente efficiente: una simulazione completa del testcase **vdb** con convergenza allo zero di macchina, richiede circa 3 ore di CPU (x86 a 2.4 GHz), risultando così circa 30 volte più veloce del modello EDC-DC e 3 volte più veloce dei modelli EDC ibridi.

Il limite maggiore del modello, oltre alla non idoneità alla stima delle emissioni di CO per via dell'ipotesi di chimica infinitamente veloce, è legato alla impossibilità di cogliere gli effetti del trasporto turbolento controgradiente (CGD). Anche in presenza di fiamme fortemente turbolente, interessate da numeri di *Bray* inferiori all'unità (vedi testcase **vdb**), il contributo locale del CGD, benché non determinante, può condizionare la struttura della fiamma. Abbiamo visto che l'effetto dell'assunzione di GD generalizzata determini una diffusa sovrastima dell'ampiezza del *flame brush*, confermando analoghe considerazioni effettuate da altri autori [47]. L'uso del modello KPP, in questa sua formulazione, deve quindi sempre essere accompagnato da una stima preliminare del regime di combustione turbolenta, in modo da valutare l'eventuale impatto del CGD sul campo di temperatura predetto. L'uso dell'espressione approssimata del termine di trasporto turbolento proposta

da Bray, benché non direttamente utilizzabile per la chiusura, può essere impiegata in fase di *postprocessing* come ulteriore controllo.

E' auspicabile una ulteriore fase di sviluppo del modello in modo da intervenire sui seguenti aspetti:

- Adozione di un approccio PDF per la stima del campo di *mixture fraction* e del processo di miscelazione dei reagenti. Il metodo generalmente adottato prevede l'assunzione a priori della distribuzione probabilistica di ξ , descritta da una PDF solitamente funzione dei primi due momenti statistici, valor medio, $\tilde{\xi}$ e varianza $\tilde{\xi}''$, valutati tramite due specifiche equazioni di trasporto. Nota la distribuzione stocastica di ξ , il valor medio della generica grandezza scalare Q funzione della composizione, viene così valutato:

$$\tilde{Q} = \int_0^1 Q(\xi) \cdot PDF(\tilde{\xi}, \tilde{\xi}'') \cdot d\xi$$

- Nella sua formulazione attuale il modello assume implicitamente l'adiabaticità del sistema, risolvendo il campo di temperatura a partire dalla soluzione della temperatura ridotta \tilde{c} , per la quale sono preclusi eventuali fenomeni di scambio termico. E' tuttavia possibile riformulare il modello, seguendo un approccio non isentalpico, in modo che il termine $\tilde{\Omega}_c$, che descrive il *reaction rate* complessivo, possa essere usato per stimare il calore di reazione, permettendo così la soluzione dell'equazione di conservazione dell'entalpia.

Capitolo 6

Il modello *Level Set Flamelet*

Contenuto

6.1	Introduzione	198
6.2	Basi teoriche del modello <i>Level Set Flamelet</i> . .	199
6.2.1	Approccio <i>Level Set</i> per fiamme laminari	200
6.2.1.1	Approccio <i>Level Set</i> per i regimi <i>Corrugated</i> e <i>Thin Reaction zone</i>	203
6.2.2	Modello RANS per la combustione turbolenta premiscelata basato sull'approccio <i>Level Set</i>	204
6.2.2.1	Equazioni RANS per il valore medio e la varianza di G	208
6.2.3	La velocità di fiamma turbolenta	210
6.2.3.1	<i>Flame Surface Area Ratio</i>	211
6.2.4	Flamelet per la combustione premiscelata	213
6.2.4.1	Equazioni per flamelet	214
6.2.5	Approccio <i>presumed PDF</i>	217
6.3	Implementazione del modello <i>Level Set</i> nel codice STAR-CDTM	218
6.3.1	Implementazione della <i>G-equation</i>	219
6.3.1.1	Re-inizializzazione di G	220

6.3.2	Varianza di G e <i>surface area ratio</i>	223
6.3.2.1	Redistribuzione scalari	224
6.3.3	Librerie Flamelet	227
6.3.3.1	Soluzione delle flamelet laminari	228
6.3.4	Generazione della <i>flamelet library</i>	229
6.3.4.1	Integrazione della PDF e <i>postprocessing</i>	232
6.4	Validazione del modello	234
6.4.1	<i>Vanderbilt Combustor</i>	235
6.4.1.1	Effetto dello <i>stretching</i> e del <i>wrinkling</i> sulle emissioni di CO	241
6.4.2	Bruciatore k160a NP	254
6.5	Considerazioni finali	257

6.1 Introduzione

Per completare l'analisi dei modelli di combustione per lo studio di fiamme premiscelate turbolente, abbiamo deciso di affrontare lo sviluppo e la successiva implementazione, di uno schema di calcolo basato sull'approccio *Level Set Flamelet* derivato da Peters nel corso degli ultimi 4-5 anni. Infatti solo la più recente formulazione del modello permette una sua estensione al regime di combustione *thin reaction zone* e l'implementazione nel contesto delle RANS, rendendo possibile un suo utilizzo per l'analisi dei combustori LPC di turbina a gas.

L'obiettivo che ci poniamo nello sviluppo di un modello basato sulle *laminar flamelet*, è quello di superare i limiti dei due approcci visti fin'ora. Il modello EDC-DC, infatti, permette di stimare con una buona accuratezza la concentrazione di specie chimiche intermedie (principalmente CO), ma pone alcuni inconvenienti legati agli effetti di isteresi del reattore PSR e alla necessità di intervenire in alcuni casi sulle costanti caratteristiche; il limite principale del modello EDC-DC è in ogni caso l'estrema lentezza dello schema numerico. Il modello KPP, al contrario, permette di individuare con estrema rapidità e buona accuratezza la struttura complessiva della fiamma in termi-

ni di temperatura e specie principali (essenzialmente CO_2 , H_2O), ma non è in grado di stimare le concentrazioni di specie intermedie e di valutare effetti legati al ritardo di accensione della miscela. L'inconveniente maggiore del modello KPP proposto è legato all'incapacità di gestire il meccanismo di trasporto turbolento controgradiente, che condiziona l'uso dello scalare reattivo \tilde{c} in condizioni di bassi livelli di turbolenza.

Il modello *Level Set* basato sulla *G-equation*, ha sulla carta le capacità di rispondere alle esigenze descritte grazie all'uso di *look-up-table* esterne, che consentono di gestire meccanismi di reazione complessi senza incidere in maniera determinante sui tempi di calcolo, e risolvendo alla base il problema del CGD fondandosi su uno scalare non reattivo. Rimane parzialmente da testare, nella letteratura specializzata, l'impiego del modello per lo studio delle fiamme premiscelate che interessano le turbine a gas, e crediamo che questo lavoro possa contribuire a colmare questa lacuna.

6.2 Basi teoriche del modello *Level Set Flamelet*

Il modello *Level Set* per fiamme premiscelate è basato, come ogni altro modello flamelet, sull'ipotesi che la fiamma istantanea turbolenta possa essere descritta da un insieme di strutture laminari in cui coesista un sostanziale equilibrio tra diffusività e reattività che non viene alterato dall'azione dei vortici e delle fluttuazioni turbolente. Tali strutture sono denominate flamelet e solo in alcuni casi particolari possono essere rappresentate correttamente da fiamme laminari monodimensionali.

A differenza dei modelli flamelet basati sulla variabile di progresso e sull'approccio BML, il modello *Level Set* non assume a priori una chimica infinitamente veloce, e non prevede quindi una discontinuità in corrispondenza del fronte di fiamma, ma ricostruisce la struttura interna della fiamma associandola alle caratteristiche di una flamelet laminare, risolta separatamente utilizzando meccanismi chimici dettagliati.

Il funzionamento del modello è basato sulla individuazione della posizione del fronte di fiamma nel campo di moto. Tramite la definizione di un apposito scalare non reattivo, (G) , è possibile descrivere le superfici di livello della fiamma, determinando una rappresentazione geometrica completa

della sua struttura. A partire dalla conoscenza delle iso-superfici della fiamma è possibile associare alle grandezze fondamentali (temperatura densità e composizione) nella zona reattiva del campo di moto, i valori ottenuti dalla soluzione di un insieme di flamelet laminari, mediate tramite opportune PDF.

L'approccio *Level Set* è valido, nella sua formulazione proposta da Peters, nell'intera regione in cui è corretta l'ipotesi di flamelet, ossia nella *corrugated flamelet zone* e nella *thin reaction zone* dove la struttura interna della flamelet (*reaction layer*), rimane sostanzialmente inalterata dall'azione del campo turbolento esterno.

Prima di descrivere la formulazione del modello *Level Set* per l'approccio RANS, richiameremo il significato fisico della *G-equation* partendo dalla sua definizione in regime laminare.

6.2.1 Approccio *Level Set* per fiamme laminari

Come accennato nel paragrafo §3.4.2.3 lo scalare G è una grandezza non reattiva definita come una superficie di livello della fiamma laminare premiscelata:

$$G(\mathbf{x}, t) = G_0 \quad G_0 \in \mathfrak{R} \quad (6.1)$$

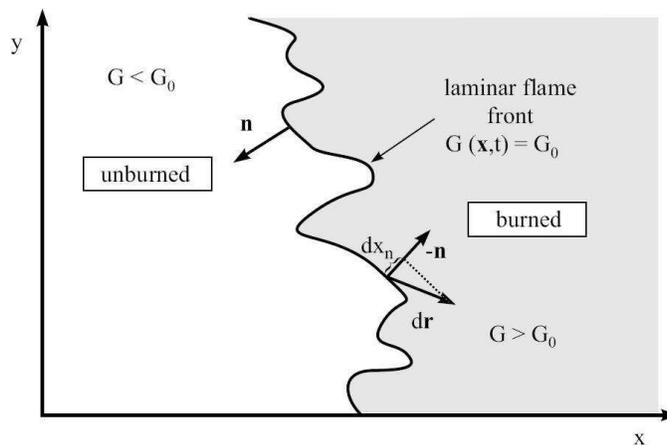


Figura 6.1: G_0 curva di livello che definisce il fronte di fiamma laminare

Per come è definita, la funzione G_0 individua in ogni istante t la posizione del fronte di fiamma nello spazio fisico: trattandosi di una funzione

distanza (lineare) G_0 può assumere un valore qualsiasi. La figura 6.1 mostra come la superficie di livello G_0 divida il campo di moto in gas bruciati, *burned*, $G(\mathbf{x}, t) > G_0$ e miscela reagente, *unburned*, $G(\mathbf{x}, t) = G_0$. In generale esiste sempre un'equilibrio cinematico per la velocità della fiamma in un sistema di riferimento assoluto. Per la definizione data sopra si ha la relazione cinematica:

$$\mathbf{v}_p = \mathbf{v} + s_L \mathbf{n} \quad (6.2)$$

dove \mathbf{v}_p è la velocità di propagazione della curva di livello (iso-superficie) G_0 definita da:

$$\mathbf{v}_p = \left. \frac{d\mathbf{x}}{dt} \right|_{G=G_0} \quad (6.3)$$

essendo s_L è la velocità di fiamma laminare. Il vettore normale alla iso-superficie G_0 è determinato dallo scalare G a partire da:

$$\mathbf{n} = \left. \frac{\nabla G}{|\nabla G|} \right|_{G=G_0} \quad (6.4)$$

Combinando questa equazione con le 6.2 e 6.3, risulta determinata l'equazione di trasporto per la iso-superficie G_0 :

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = s_L |\nabla G| \quad (6.5)$$

L'equazione è nota come *G-equation* ed è stata introdotta per la prima volta da Williams ([81]). Lo scalare G è definito soltanto sulla superficie della fiamma, mentre nel resto del campo di moto non è univocamente definito. Ciò deriva dal fatto che il bilancio cinematico dell'equazione 6.2 descrive la dinamica di una superficie bidimensionale mentre la *G-equation* è un'equazione nello spazio tridimensionale. In questo aspetto la funzione $G(\mathbf{x}, t)$ differisce dalla *mixture fraction* $\xi(\mathbf{x}, t)$ in quanto scalare non reattivo "ben definito" su tutto il campo di moto.

Su questa linea il dibattito sulla definizione dello scalare G è ancora aperto. Infatti se si utilizza l'equazione della continuità o di conservazione della massa, si può riscrivere in forma conservativa l'equazione 6.5:

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} G) = s_L |\nabla G| \quad (6.6)$$

L'equazione è formalmente identica a quella di conservazione della generica specie chimica o della *mixture fraction* che comporterebbe l'attributo

di scalare conservato alla grandezza G . In linea di principio ciò è errato in quanto il campo scalare G è condizionato al valore sul fronte di fiamma ma la correttezza matematica della definizione dissipa comunque ogni dubbio al riguardo.

Occorre ancora una volta precisare che la G -equation è definita solo e soltanto sul fronte di fiamma. L'equazione 6.5 teoricamente non dipende in alcun modo dai valori al di fuori della iso-superficie G_0 . Si definisce in modo univoco la distanza x_n sulla superficie della fiamma nella direzione normale al fronte in direzione dei gas bruciati come:

$$dx_n = -\mathbf{n} \cdot d\mathbf{r} = \frac{\nabla G}{|\nabla G|} \cdot d\mathbf{r} \quad (6.7)$$

dove, vedi (figura 6.1), $d\mathbf{r}$ è il differenziale di un generico vettore in direzione uscente dalla superficie di livello. Supponendo un campo stazionario di G , il differenziale dG lungo $d\mathbf{r}$ è dato da:

$$dG = \nabla G \cdot d\mathbf{r} \quad (6.8)$$

Introducendo questa dentro la 6.7 e assumendo il gradiente di G come:

$$\sigma = |\nabla G|_{G=G_0} \quad (6.9)$$

la distanza differenziale dal fronte di fiamma può essere scritta come:

$$dx_n = \frac{dG}{\sigma} \quad (6.10)$$

Al fine di rendere la G -equation gestibile con i consueti schemi numerici per scalari conservati, è necessario definire il campo di G anche al di fuori di $G = G_0$. L'estensione può assumere qualsiasi forma purché G_0 continui ad indicare la posizione del fronte di fiamma.

Intuitivamente la scelta più conveniente per estendere il campo di G è quella di considerare la funzione di distanza cartesiana, norma di grado secondo, e di conseguenza si ha che:

$$|\nabla G| = \sigma = 1 \quad (6.11)$$

L'uso del gradiente unitario per $G \neq G_0$ caratterizza il campo scalare $G(\mathbf{x}, t)$ come il valore della distanza di un punto di coordinate \mathbf{x} dal fronte di fiamma. E' evidente che questa assunzione è la più naturale in quanto è

proprio la distanza dalla fiamma che caratterizza i profili di temperatura e le concentrazioni delle specie nel campo di moto.

Restano da descrivere le modalità di valutazione della velocità di fiamma laminare S_L (6.5) che normalmente viene definita rispetto ai gas *unburned* come:

$$S_L = S_L^0 - S_L^0 \mathcal{L} \kappa - \mathcal{L} S \quad (6.12)$$

dove S_L^0 è la velocità di una fiamma laminare premiscelata piana *unstretched*, \mathcal{L} è la lunghezza di Markstein, già introdotta in §3.2. Rispetto alla stessa definizione data dall'equazione 3.10 vista in precedenza, abbiamo qui riformulato il termine di *stretching* K nelle due componenti S , *strain*, e κ , curvatura, che, rispetto allo scalare G , hanno la seguente formulazione:

$$S = -(\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})|_{G=G_0} \quad (6.13)$$

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} = - \left[\nabla \cdot \left(\frac{\nabla G}{|\nabla G|} \right) \right] \Big|_{G=G_0} \quad (6.14)$$

6.2.1.1 Approccio *Level Set* per i regimi *Corrugated* e *Thin Reaction zone*

Come accennato in precedenza la ricostruzione della fiamma turbolenta mediante un insieme (mediato) di *thin reaction-diffusive layer* (flamelet laminari), passa dalla conoscenza della posizione del fronte di fiamma, ottenuta mediante la soluzione di una equazione di trasporto per la sua superficie di livello. La struttura della fiamma nei regimi in cui è valida l'ipotesi di flamelet (*Corrugated* e *Thin Reaction zone*), rende le superfici di livello delle superfici "ben definite"¹

L'applicazione del modello *Level Set* nei due regimi *thin reaction zone* e *corrugated flamelet* richiede la definizione di un'equazione per lo scalare G che si adatti alla diversa struttura delle flamelet nei due casi. La recente

¹una superficie di livello risulta ben definita se è ben definita la propria velocità di propagazione. Poinsoot e Veynante definiscono il regime flamelet come un campo di moto reattivo in cui la generica linea che congiunga due punti, A e B, posti rispettivamente negli *unburned* e nei *burned*, intersechi almeno un volta il fronte di fiamma

formulazione dovuta a Peters ([56]), permette di derivare una *G-equation* valida nei due regimi, che qui riportiamo in forma completa:

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} G) = (\rho S_L^0) \sigma - (\rho D) \kappa \sigma \quad (6.15)$$

In appendice E è riportata la derivazione dettagliata dell'equazione 6.15.

Prima di estendere l'approccio *Level Set* appena formulato, alla soluzione mediata dei flussi turbolenti (RANS), è necessario chiarire il concetto di scalare condizionato e le implicazioni nello studio dei campi turbolenti mediati.

6.2.2 Modello RANS per la combustione turbolenta premiscelata basato sull'approccio *Level Set*

Una semplice estensione della *G-equation* all'analisi RANS dei flussi turbolenti consiste nella applicazione della classica operazione di media (alla Reynolds o alla Favre) all'equazione 6.15. Sfortunatamente questa procedura non è valida in quanto, nonostante l'apparente forma di semplice scalare non reattivo, lo scalare G non è definito nell'intero campo di moto, dominio dell'operazione matematica di media.

Per chiudere il problema è conveniente tralasciare, almeno per ora, i problemi relativi alla non unicità di G fuori di $G(\mathbf{x}, t) = G_0$. In tal modo la *G-equation* ha proprietà simili alle equazioni di campo usate nella fluidodinamica e nella descrizione di un generico scalare.

Si definisce quindi nella generica posizione \mathbf{x} al tempo t nel campo di moto, una funzione di densità di probabilità $P(G; \mathbf{x}, t)$ per lo scalare G . Tramite la PDF $P(G; \mathbf{x}, t)$ si definiscono i primi due momenti statistici di G , media e varianza come:

$$\bar{G}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G P(G; \mathbf{x}, t) dG \quad (6.16)$$

$$\overline{G'^2}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} (G - \bar{G})^2 P(G; \mathbf{x}, t) dG \quad (6.17)$$

In linea di principio il problema potrebbe essere chiuso assumendo la forma della PDF come funzione dei suoi primi due momenti statistici (media e varianza), e risolvendo il campo di $\bar{G}(\mathbf{x}, t)$ e $\overline{G'^2}(\mathbf{x}, t)$ tramite due equazioni di trasporto. Tuttavia, data la non unicità di G al di fuori del fronte di fiamma

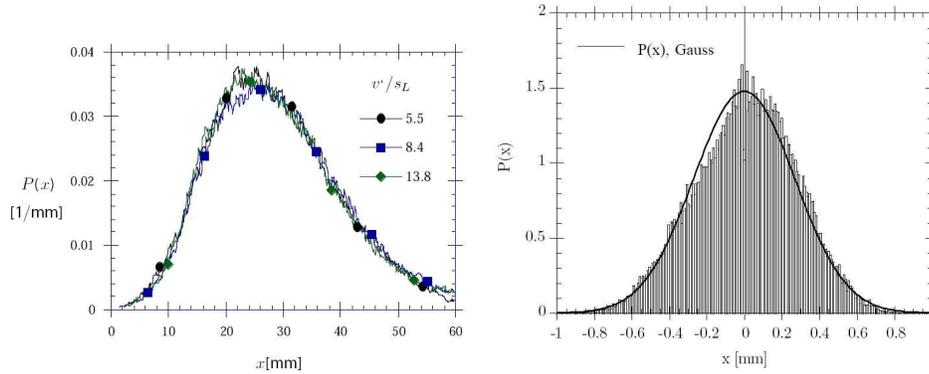


Figura 6.2: A sinistra: PDF della frequenza del fronte di fiamma nella generica posizione x . Le misure si riferiscono ad una fiamma premiscelata magra stabilizzata mediante *swirler*. A destra: Confronto tra una PDF misurata sperimentalmente ed una distribuzione Gaussiana [56]

($G(\mathbf{x}, t) = G_0$), l’approccio è destinato a fallire in quanto la distribuzione del valor medio e della varianza di G sono a loro volta influenzati dall’errore legato alla mancanza di unicità dello scalare.

A partire dalla PDF di G è tuttavia possibile definire una grandezza statistica che risulta “ben definita”. Essa è costituita dalla probabilità di individuare il fronte di fiamma nella generica posizione \mathbf{x} , al tempo t . La densità di probabilità di questa grandezza è data da:

$$P(G_0; \mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(G - G_0) P(G; \mathbf{x}, t) dG = P(\mathbf{x}, t) \quad (6.18)$$

La grandezza introdotta ha un ben preciso significato fisico in quanto può essere misurata indirettamente, misurando, ad esempio, la frequenza della presenza della fiamma in un volume ΔV di coordinate \mathbf{x} ad istanti di tempo Δt . Nel grafico di sinistra di figura 6.2 è mostrato un esempio di misura sperimentale della PDF introdotta.

Nel grafico di destra di figura 6.2 è riportato un confronto tra una PDF misurata sperimentalmente ed una distribuzione Gaussiana: si osserva come l’andamento sperimentale non sia perfettamente simmetrico ma lievemente spostato verso i gas incombusti. Il fatto è dovuto al fronte di fiamma che assume curvature diverse nei gas bruciati rispetto a quelli incombusti, conseguenza della non simmetria della velocità di fiamma laminare a cavallo del fronte di fiamma. Di solito si hanno raggi di curvatura ampi verso gli *unburned* e curvature elevate (o punti angolosi) nei *burned* (vedi figura

6.3): Il fenomeno è tuttavia di lieve entità ed è quindi possibile assumere un

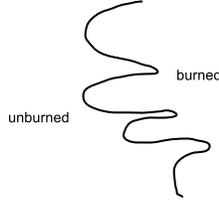


Figura 6.3: Differenza di curvatura del fronte di fiamma rispetto ai lati *burned* e *unburned*

distribuzione Gaussiana per la PDF del fronte di fiamma $P(G_0; \mathbf{x}, t)$, senza introdurre errori che non rientrino nell'approssimazione complessiva del modello (vedi figura 6.4).

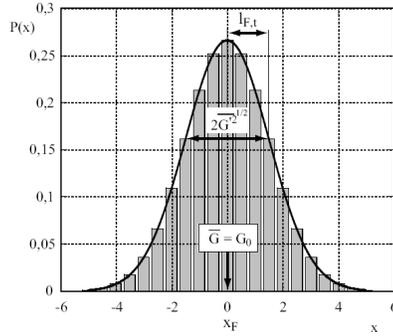


Figura 6.4: Distribuzione Gaussiana di \bar{G}

Senza perdere di generalità consideriamo il caso di una fiamma monodimensionale stazionaria che si propaga nella direzione x . Introduciamo la coordinata normale al fronte di fiamma in modo che tutte le grandezze in esame risultino funzione solamente di x . La PDF della posizione del fronte di fiamma nella generica ascissa x dentro il *flame brush* è semplicemente $P(G_0; x)$, che riscriviamo con maggiore semplicità $P(x)$.

Per sua definizione la PDF ha la seguente normalizzazione:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = 1 \tag{6.19}$$

Possiamo così definire la posizione media del fronte di fiamma (ossia il fronte di fiamma medio) come:

$$x_f = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x)dx = 1 \tag{6.20}$$

L'ampiezza del *flame brush*, $l_{F,t}$, sarà, per sua stessa definizione, determinato dalla dispersione statistica del fronte di fiamma istantaneo e quindi dalla varianza della posizione x :

$$\overline{(x - x_f)^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - x_f)^2 P(x) dx = 1 \quad (6.21)$$

ossia:

$$l_{F,t} = \sqrt{\overline{(x - x_f)^2}} \quad (6.22)$$

Si nota quindi come dalla probabilità condizionale $P(x)$, è possibile individuare due parametri fondamentali della fiamma turbolenta premiscelata, ovvero la posizione del fronte di fiamma medio e lo spessore del *flame brush*.

A questo punto siamo in grado di estendere il valore medio dello scalare $\bar{G}(x)$ e della sua varianza $\overline{G'^2}(x)$ all'intero dominio, chiudendo così il problema dell'unicità di G . E' infatti possibile associare le due grandezze alla posizione del fronte di fiamma medio, x_f e allo spessore del *flame brush*, $l_{F,t}$, assumendo, ancora una volta, una dipendenza lineare di \bar{G} da x :

$$\bar{G}(x) - G_0 = x - x_f \quad (6.23)$$

La posizione del fronte di fiamma medio, $x = x_f$, è così individuata da $\bar{G}(x = x_f) = G_0$ e grazie alla dipendenza lineare è possibile estendere, dal caso laminare a quello turbolento, la condizione di gradiente unitario in tutto il campo di $\bar{G}(\mathbf{x}, t) \neq G_0$:

$$|\nabla \bar{G}| = 1 \quad (6.24)$$

Lo scalare $\bar{G}(x, t) \neq 0$ assume, come ne caso laminare, il valore della distanza rispetto alla superficie di livello $\bar{G}(x, t) = G_0$ che identifica il fronte di fiamma medio.

La definizione di distanza (6.23) consente di mettere in relazione le fluttuazioni spaziali $(x - x_f)$ della fiamma istantanea, con la fluttuazione dello scalare \bar{G} , ($G' = G - \bar{G}$) essendo:

$$G' = G - G_0 - (x - x_f) \quad (6.25)$$

Dato che \bar{G} è definita soltanto sul fronte di fiamma risulta $G = G_0$, e si ottiene:

$$G' = -(x - x_f) \quad (6.26)$$

L'equazione mostra che le fluttuazioni spaziali del fronte di fiamma (\sim *flame brush*) corrispondono alle fluttuazioni dello scalare G , condizionato al valore $G(\mathbf{x}, t) = G_0$. Ricordando la definizione di varianza data dall'equazione 6.16 ed osservando che lo spessore del *flame brush* è indipendente dalla posizione x nel *brush* stesso, la grandezza:

$$\overline{G'^2}_0 = \overline{(x - x_f)^2} \tag{6.27}$$

assume il significato di varianza condizionale, distinta dalla varianza non condizionale, $\overline{G'^2}(\mathbf{x}, t)$, ottenuta dalla definizione generica dell'equazione 6.16. Operativamente, tuttavia, è assai più semplice dedurre un'equazione per la varianza non condizionale. Nelle simulazioni numeriche, una volta risolto il campo di varianza non condizionale, si recupera il valore sul fronte di fiamma medio $\bar{G}(\mathbf{x}, t) = G_0$ (che costituisce la varianza condizionale cercata), e si lo si assegna, costante, a tutti i punti che giacciono sulle isolinee normali alle isolinee di G . L'operazione viene svolta con tecniche di reinizializzazione o

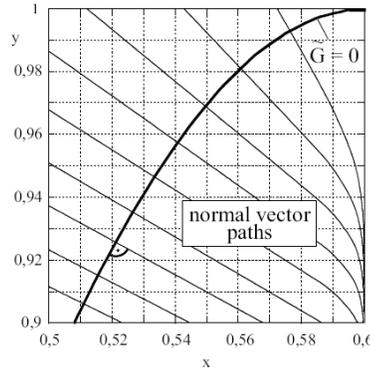


Figura 6.5: Rappresentazione delle linee iso-varianza rispetto al fronte di fiamma medio

redistribuzione, che prevedono l'individuazione delle curve iso-varianza seguendo la direzione normale definita dal gradiente di G (vedi figura 6.5). È importante osservare che $(\overline{G'^2})_0$, benché costante sulle linee normali al fronte, può variare considerevolmente in direzione tangenziale (corrispondentemente alla variazione dello spessore del fronte di fiamma).

6.2.2.1 Equazioni RANS per il valore medio e la varianza di G

Possiamo a questo punto generalizzare la teoria appena descritta al caso tridimensionale, utilizzando una formulazione consistente con l'uso della

media alla Favre per i flussi turbolenti. Scomponiamo G e il vettore delle velocità \mathbf{v} nelle componenti medie e fluttuanti:

$$G = \tilde{G} + G'' \quad \mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}} + \mathbf{v}'' \quad (6.28)$$

Le equazioni di trasporto per \tilde{G} e $\widetilde{G''^2}$ possono essere dedotte supponendo inizialmente che G sia uno scalare non condizionato, recuperando poi in una fase successiva i valori condizionati al fronte di fiamma. La forma finale delle equazioni cercate è la seguente:

$$\boxed{\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{G}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{G}) = (\tilde{\rho} S_T^0) |\nabla \tilde{G}| - \tilde{\rho} D_t \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}|} \quad (6.29)$$

$$\boxed{\frac{\partial \tilde{\rho} \widetilde{G''^2}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \widetilde{G''^2}) = \nabla_{\parallel} \cdot (\tilde{\rho} D_t \nabla_{\parallel} \widetilde{G''^2}) + 2 \tilde{\rho} D_t (\nabla \tilde{G})^2 - c_s \tilde{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{G''^2}} \quad (6.30)$$

La derivazione dettagliata delle due equazioni, comprendente le considerazioni necessarie per ottenere la chiusura dei termini incogniti di trasporto turbolento, è riportata in appendice E.

È facile osservare che l'equazione 6.29 ha la stessa forma della 6.15 e ne conserva quindi le stesse proprietà matematiche. La velocità di propagazione laminare S_L^0 è stata sostituita dalla velocità turbolenta S_T^0 osservando che, sul fronte di fiamma vale:

$$\boxed{(\tilde{\rho} S_T^0) |\nabla \tilde{G}| = (\rho S_L^0) \tilde{\sigma}} \quad (6.31)$$

dove $\tilde{\sigma} = \widetilde{\nabla G}$ è il gradiente medio di G .

La 6.29 è un'equazione condizionata e quindi valida formalmente solo sulla superficie $\tilde{G}(\mathbf{x}, t) = G_0$, mentre la soluzione al di fuori di tale superficie dipende dalla funzione di distanza che viene assunta per $\tilde{G}(\mathbf{x}, t)$. Dal momento che l'uso della distribuzione Gaussiana delle possibili posizioni del fronte di fiamma, richiede che \tilde{G} descriva la distanza cartesiana dal fronte di fiamma medio, al di fuori di $\tilde{G} = \tilde{G}_0$ dovrà valere:

$$|\nabla \tilde{G}| = 1 \quad (6.32)$$

Le stesse considerazioni valgono per la 6.30. Nell'equazione 6.27 la radice quadrata della varianza è una misura dello spessore del *flame brush* della

fiamma, $l_{F,t}$, che per un valore arbitrario di $|\nabla\tilde{G}|$ nel fronte di fiamma, è definito come:

$$l_{F,t} = \frac{(\widetilde{G''^2}(\mathbf{x}, t))^{1/2}}{|\nabla\tilde{G}|} \Bigg|_{\tilde{G}=\tilde{G}_0} \quad (6.33)$$

Per la condizione di unicità della PDF è necessario che $\widetilde{G''^2}$ rimanga costante in direzione normale al fronte di fiamma medio; al di fuori di $\tilde{G} = \tilde{G}_0$ deve valere la condizione:

$$\boxed{\nabla\widetilde{G''^2} \cdot \nabla\tilde{G} = 0} \quad (6.34)$$

Per risolvere la 6.29 è necessario un modello per la velocità turbolenta S_T^0 . Si possono usare correlazioni di tipo sperimentale, analoghe a quella dedotta per il modello KPP, oppure, sapendo che S_T^0 è funzione di $\tilde{\sigma}$ (equazione 6.31) è possibile determinare un'equazione di trasporto per il gradiente medio $\tilde{\sigma}$. Questa scelta risolve il problema in maniera analitica e quindi garantisce la completa generalità della formulazione.

6.2.3 La velocità di fiamma turbolenta

La velocità di fiamma turbolenta è l'elemento chiave su cui ruota tutta la fisica del modello *Level Set*, che basato sull'analisi diretta della propagazione del fronte di fiamma turbolento. Essa è, in analogia al caso laminare, la velocità con cui il fronte di fiamma turbolento si propaga normale a se stesso. Nell'ambito di questo genere di modelli, si assume anche che S_T^0 sia una grandezza ben definita dipendente solamente dalle quantità medie locali.

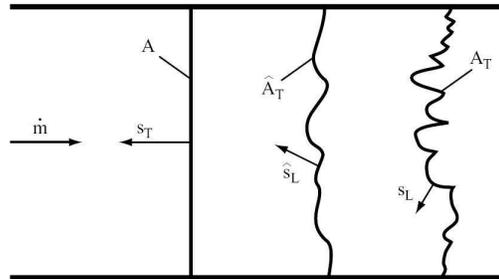


Figura 6.6: Schema di una fiamma turbolenta premiscelata in un condotto monodimensionale

Riprendiamo l'analisi svolta nel paragrafo §3.1 (pubblicata la prima volta da *Damköhler*), e consideriamo una fiamma turbolenta stazionaria che propaga in un condotto monodimensionale (vedi figura 6.6). La portata \dot{m} , attraverso il fronte di fiamma turbolento istantaneo di superficie A_T con velocità laminare S_L , è uguale al flusso di massa attraverso la sezione A del condotto con velocità S_T :

$$\dot{m} = \rho_u S_L A_T = \bar{\rho}_u S_T A \quad (6.35)$$

dove sia S_L che S_T sono calcolate rispetto ai gas *unburned* aventi densità ρ_u , e $\bar{\rho}_u$, rispettivamente. Dalla 6.35 segue che, assumendo costante la densità della miscela reagente, il rapporto tra le due velocità, è proporzionale al rapporto delle superfici (*flame surface area ratio*), definito da:

$$\frac{S_T}{S_L} = \frac{A_T}{A} \quad (6.36)$$

L'equazione 6.36 è alla base delle comuni correlazioni per S_T^0 .

Recenti studi DNS ([56] e [75]), hanno mostrato che il termine $\tilde{\sigma} = |\widetilde{\nabla G}|$ coincide proprio con il *flame surface area ratio*: è quindi possibile dedurre un'equazione di trasporto per $\tilde{\sigma}$, con la quale ricavare, localmente S_T .

6.2.3.1 Equazione di trasporto per il *flame surface area ratio*

Per verificare che il gradiente medio di G è proprio uguale al *flame surface area ratio*, facciamo riferimento alla figura 6.7, che mostra l'area di un fronte di fiamma istantaneo bidimensionale, A_T . Se la funzione $G = G_0$ è parametrizzata come $G = x + F(y, t) = G_0$ allora il gradiente σ si calcola nello spazio bidimensionale come:

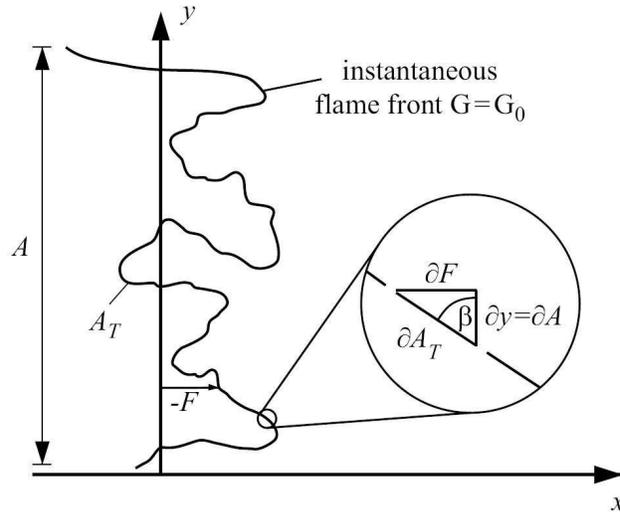
$$\sigma = \left(1 + \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right)^2 \right)^{1/2} \quad (6.37)$$

Dalla figura 6.7 si deduce inoltre che $\tan \beta = \partial F / \partial y$. Da cui segue:

$$\sigma = \frac{1}{|\cos \beta|} = \frac{\partial A_T}{\partial A} \quad (6.38)$$

L'incremento dell'area della fiamma per unità di incremento dell'area della sezione è proprio σ . Inoltre:

$$\int_0^A \sigma dA = \int_0^A \frac{\partial A_T}{\partial A} dA \quad (6.39)$$


 Figura 6.7: Relazione tra l'area ratio e σ

$$A\bar{\sigma} = A_t \quad (6.40)$$

essendo poi $\bar{\sigma} \sim \tilde{\sigma}$, abbiamo infine:

$$\tilde{\sigma} = \frac{A_t}{A} \quad (6.41)$$

E' possibile immaginare che il termine che individua l'*area ratio* $\tilde{\sigma}$ sia composto da un termine laminare ed uno turbolento. Riprendendo l'equazione E.25 possiamo scrivere:

$$\tilde{\sigma} = |\nabla \tilde{G}| + \tilde{\sigma}_t \quad (6.42)$$

con $\tilde{\sigma}_t \rightarrow 0$ per $v' \rightarrow 0$.

E' sufficiente quindi dedurre un'equazione per il solo contributo turbolento $\tilde{\sigma}_t$ alla *surface area ratio*. Mediante un procedimento analogo a quello utilizzato per dedurre l'equazione di trasporto per $\widetilde{G''^2}$, Peters propone la seguente equazione di trasporto per $\tilde{\sigma}_t$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\sigma}_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\sigma}_t) = & \nabla_{\parallel} \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla_{\parallel} \tilde{\sigma}_t) + c_0 \bar{\rho} \frac{(-\tilde{\mathbf{v}}'' \tilde{\mathbf{v}}'') : \nabla \tilde{\mathbf{v}}}{k} \tilde{\sigma}_t + \\ & + c_1 \bar{\rho} \frac{D_t (\nabla \tilde{G})^2}{\widetilde{G''^2}} \tilde{\sigma}_t^2 - c_2 \bar{\rho} \frac{S_L^0 \tilde{\sigma}_t^2}{(\widetilde{G''^2})^{1/2}} - c_3 \bar{\rho} \frac{D \tilde{\sigma}_t^3}{\widetilde{G''^2}} \end{aligned} \quad (6.43)$$

Essendo $\tilde{\sigma}$ un valore condizionato sul fronte di fiamma, lo sarà anche la sua componente turbolenta $\tilde{\sigma}_t$. Questo significa che, come per $\widetilde{G''^2}$, il valore di $\tilde{\sigma}_t$ deve rimanere costante in direzione normale al fronte di fiamma. Anche in questa circostanza è stato quindi eliminato il termine di diffusione normale dalla chiusura del termine di trasporto turbolento. Ciò è possibile in quanto, in analogia con la varianza, il valore dello scalare è indipendente dalla coordinata normale alla fiamma.

Nota la distribuzione di $\tilde{\sigma}_t$, si valuta la velocità di propagazione turbolenta tramite:

$$S_T^0 = S_L^0 (1 + \tilde{\sigma}_t) \quad (6.44)$$

ricordando che risulta $|\nabla \tilde{G}| = 1$

In tabella 6.1 riportiamo i valori delle costanti usate per le equazioni 6.43 e 6.30.

c_s	2.00
c_0	0.44
c_1	4.63
c_2	1.01
c_3	4.63

Tabella 6.1: Valori delle costanti per l'equazione del *surface area ratio*

6.2.4 Flamelet per la combustione premiscelata

Abbiamo più volte osservato che la prerogativa fondamentale dei modelli flamelet consista nella sostanziale separazione fra il campo di moto turbolento esterno e la struttura laminare interna della fiamma. Quest'ultima è quindi risolta separatamente e a monte della soluzione CFD, consentendo così l'impiego di meccanismi chimici dettagliati. La soluzione delle flamelet, ossia della struttura laminare interna della fiamma turbolenta, viene nuovamente accoppiata al campo di moto a partire dalla conoscenza della posizione del fronte di fiamma medio e tramite opportune medie pesate con le funzioni di densità di probabilità PDF.

Il sistema di equazioni costituito dalle 6.29, 6.30 e 6.43 permette la determinazione della posizione del fronte di fiamma medio e del suo spessore nel campo di moto a partire dalla conoscenza dei valori di S_L^0 e D (reazione e diffusione), che rappresentano l'effetto, sulla fiamma turbolenta complessiva, della combustione laminare nelle flamelet.

La fiamma laminare con cui si va descrivere localmente la struttura interna della fiamma turbolenta, detta flamelet, è rappresentata, tipicamente, da opportune fiamme laminari quasi-1D. Si parla di fiamme “quasi” monodimensionali in quanto le loro equazioni sono dedotte dalle equazioni reattive tridimensionali, mediante analisi asintotiche nell'intorno del fronte di fiamma. Quello che ne deriva è una struttura analiticamente monodimensionale, ma che contiene in sé determinanti effetti tridimensionali. Come vedremo, il principale parametro che distingue una flamelet da una fiamma laminare monodimensionale è lo *stretching*. La principale azione, essenzialmente cinematica, del campo turbolento nel quale l'insieme di flamelet si realizza è costituito proprio dallo *stretching*, alle quali le strutture laminari devono risultare sensibili.

6.2.4.1 Equazioni per flamelet

Ricaveremo adesso due set di equazioni per flamelet laminari validi singolarmente nei regimi *Corrugated* e *Thin Reaction Zone*, per poi dedurre un'equazione di validità generale per l'approccio flamelet.

Nel regime ***Corrugated***, la fiamma turbolenta può essere ricostruita, nella sua intera zona reattiva, tramite strutture laminari quasi monodimensionali.

Partendo dalle equazioni di NS reattive laminari, si opera un'analisi asintotica nell'intorno del fronte di fiamma, nella direzione normale al fronte stesso, trascurando i termini infinitesimi di ordine superiore (si tratta sostanzialmente di uno sviluppo in serie, [56]). La conservazione della generica specie chimica viene quindi espressa da:

$$(\rho S_L^0)\sigma \frac{\partial Y_i}{\partial G} = \frac{\partial}{\partial G} \left(\rho D_i \sigma^2 \frac{\partial Y_i}{\partial G} \right) + \omega_i \quad (6.45)$$

Un'equazione analoga descrive la continuità globale della flamelet. Il termine σ tiene conto del *wrinkling* della fiamma e non dello *stretching*, come potrebbe sembrare in analogia allo *scalar dissipation rate* χ presente nelle flamelet

diffusive. Occorre infatti tenere presente che lo spessore di una fiamma turbolenta è molto maggiore di quello di una flamelet laminare. Com'è mostrato in figura 6.8 il fronte istantaneo è in generale fortemente ondulato, *wrinkled*, comportando quindi che la distanza G^* di un punto P dal fronte di fiamma istantaneo, è sempre minore rispetto alla distanza \tilde{G} dal fronte medio.

L'uso diretto del valore \tilde{G} come coordinata normale per valutare nelle flamelet il valore laminare degli scalari (temperatura e concentrazioni) può comportare, per forti *wrinkling* della fiamma, errori significativi.

Peters suggerisce quindi di considerare proprio il valore di G^* come distanza effettiva per il calcolo degli scalari. Il suo valore è approssimato tramite $G^* = \tilde{G}/\sigma$, [56]. Per come abbiamo definito G , la distanza normale dal fronte

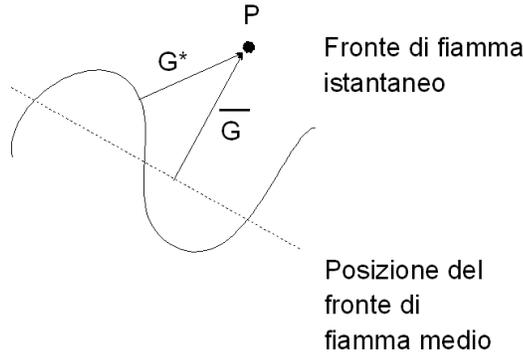


Figura 6.8: Wrinkling di una fiamma e distanza dal fronte di fiamma medio e dal fronte di fiamma istantaneo

di fiamma può quindi essere valutata tramite:

$$x_n = \frac{G - G_0}{\sigma} \quad (6.46)$$

sostituendo la 6.46 nella 6.45 si ottiene la seguente equazione per la conservazione della generica specie:

$$(\rho S_L^0) \frac{\partial Y_i}{\partial x_n} = \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_n} \right) + \omega_i \quad (6.47)$$

Da notare come l'equazione così derivata non contiene i termini di curvatura e di *stretching*, considerati effetti del primo ordine e che non compaiono nei termini principali dell'equazione. Il lavoro di De Goeij e Boonkamp, [15] e [14], ha permesso la derivazione di una equazione per flamelet che contiene gli effetti dello *strain* e della curvatura:

$$\frac{\partial(\rho \varsigma S_L Y_i)}{\partial x_n} = \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\varsigma \rho D_i \sigma^2 \frac{\partial Y_i}{\partial x_n} \right) + \omega_i - \varsigma \rho K Y_i \quad (6.48)$$

dove ς è l'effetto della curvatura sulla fiamma. K descrive l'effetto dello *strain* e può essere calcolato come:

$$\rho K = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \quad (6.49)$$

dove \mathbf{v} è la velocità relativa della fiamma rispetto al flusso.

Come abbiamo accennato nel paragrafo §3.2.1.1, descrivendo l'effetto dello *stretching* sulle fiamme laminari, la configurazione di flamelet quasi-1D a cui tipicamente ci si riferisce per descrivere la struttura interna della fiamma turbolenta è costituita dalle cosiddette *Counter flow flame*. Per questo tipo di fiamme lo *stretching* è costituito solamente dalla componente di *strain*, risultando nullo l'effetto della curvatura, il che implica $\varsigma = 1$.

Nella **Thin Reaction Zone**, i microvortici hanno dimensioni inferiori allo spessore della fiamma l_F e possono penetrare all'interno della struttura laminare, limitatamente alla *preheat zone*, senza però raggiungere dimensioni tali da penetrare nell'*inner layer*. Con queste ipotesi solo l'*inner layer* può assumere una caratteristica di superficie di livello, e quindi di fiamma "quasi-1D" intorno alla quale eseguire un'analisi asintotica delle NS laminari.

L'equazione flamelet ricavata per il regime *corrugated*, non è più applicabile in quanto condizionata al comportamento della iso-superficie costituita dall'intera fiamma. Occorre quindi formulare equazioni differenti per l'*inner layer* e la *preheat zone*.

Applicando l'analisi asintotica limitatamente all'*inner layer*, si ottiene la seguente equazione per la generica specie:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial G} \left(\rho D_i \sigma^2 \frac{\partial Y_i}{\partial G} \right) + \omega_i \quad (6.50)$$

Per ottenere un set di equazioni valide sia nella *corrugated* che nella *thin reaction zone*, si combinano le equazioni 6.45 e 6.50:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho S_L Y_i)}{\partial G} = \frac{\partial}{\partial G} \left(\rho D_i \sigma^2 \frac{\partial Y_i}{\partial G} \right) + \omega_i - \rho K Y_i \quad (6.51)$$

L'equazione è valida per entrambi i regimi, rimanendo in ogni caso limitata all'*inner layer* per quanto riguarda la *thin reaction zone*. Questa limitazione pone alcuni problemi nella soluzione numerica delle flamelet risultando diverse nei due regimi le condizioni al contorno. Ulteriori dettagli sulla derivazione e la soluzione delle flamelet si possono trovare in [15] e [14].

6.2.5 Approccio *presumed* PDF

Per determinare la composizione media del campo turbolento occorre mediare l'insieme di flamelet. Come osservato in precedenza la PDF del fronte di fiamma istantaneo (probabilità di trovare la fiamma in un generico punto \mathbf{x} nello spazio e al tempo t) può essere ragionevolmente approssimata con distribuzione Gaussiana, funzione di forma a due parametri, che è completamente determinata, dati \tilde{G} e $\widetilde{G''^2}$, come:

$$P(G; \mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\widetilde{G''^2})^{1/2}} \exp\left(-\frac{(G - \tilde{G}(\mathbf{x}, t))^2}{2\widetilde{G''^2}}\right) \quad (6.52)$$

dove G è lo spostamento normale del fronte di fiamma istantaneo rispetto al fronte di fiamma medio. $\widetilde{G''^2}$ è la varianza condizionata a $\tilde{G} = G_0$.

La soluzione delle flamelet, costituite come detto da fiamme laminari quasi-1D, è rappresentata, per il generico scalare, da funzioni del tipo:

$$Y_k = f\left(\frac{G - G_0}{\sigma}, K, t\right)$$

che esprimono la dipendenza di Y_k dalla coordinata normale al fronte di fiamma, $(G - G_0)/\sigma$, dal fattore di *stretching* (K) e dal tempo (eliminata in simulazioni stazionarie) Il valore medio dello scalare si ottiene quindi tramite la seguente operazione di media:

$$\tilde{Y}_k(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} Y_k\left(\frac{G - G_0}{\sigma}, K, t\right) P(G; \sigma, K, \mathbf{x}, t) dK d\sigma dG \quad (6.53)$$

dove $P(G, \sigma, K, \mathbf{x}, t)$ è in generale una densità di probabilità combinata (*joint PDF*). Una comune semplificazione consiste nel ritenere statisticamente indipendenti K , G e σ , risultando in una *joint PDF* data dal prodotto delle tre PDF parziali. Generalmente si assumono per K e σ PDF coincidenti con δ di Dirac (essendo di fatto noti i soli valori medi delle grandezze) che restituiscono una PDF complessiva coincidente con la Gaussiana $P(G)$:

$$\tilde{Y}_k(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} Y_k\left(\frac{G - G_0}{\tilde{\sigma}}, \tilde{K}, t\right) P(G; \mathbf{x}, t) dG \quad (6.54)$$

Il modello è a questo punto chiuso. E' infatti sufficiente definire il criterio con cui valutare il fattore di *stretching* \tilde{K} nella flamelet, a partire dalle caratteristiche aerodinamiche e turbolente del campo di moto nel quale la fiamma

si realizza. Come abbiamo descritto dettagliatamente nel paragrafo §3.2.1.1, esistono criteri diversi per stimare il fattore di *stretching*, ma in generale esso viene stimato tramite una frequenza turbolenta caratteristica: nell'ambito di questo lavoro abbiamo utilizzato il modello $\tilde{K} = \tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$.

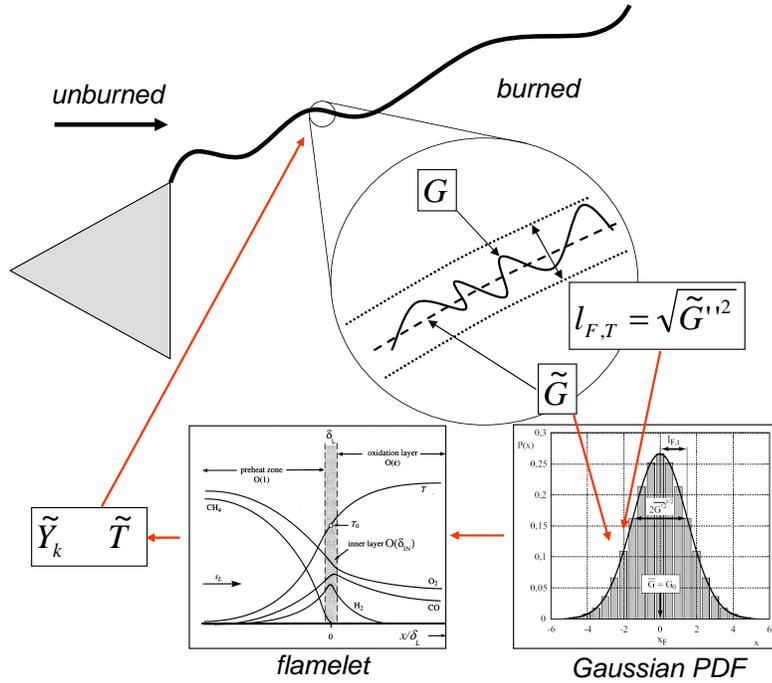


Figura 6.9: Rappresentazione schematica del modello *Level Set Flamelet*

In figura 6.9 riportiamo una rappresentazione schematica del funzionamento del modello *Level Set Flamelet*. Nella prossima sezione descriveremo le principali fasi di implementazione del modello nel codice CFD STAR-CD™, descrivendo le ulteriori assunzioni e semplificazioni fatte.

6.3 Implementazione del modello *Level Set* nel codice STAR-CD™

Illustreremo in questa sezione le fasi principali dell'implementazione delle routine per la risoluzione del modello *Level Set* all'interno del codice commerciale STAR-CD™.

6.3.1 Implementazione della *G-equation*

Abbiamo visto nelle precedenti sezioni come l'equazione di trasporto per la funzione G pur essendo formalmente identica a quella di un semplice scalare conservato, assuma caratteristiche completamente diverse. La proprietà di comportamento condizionale di tale equazione rende molto difficile e onerosa la soluzione numerica. Nel dettaglio teorico abbiamo visto come solo la superficie $\tilde{G} = G_0 = \text{cost.}$ abbia significato fisico. Al di fuori di questo iso-livello la funzione G può assumere qualsiasi valore senza che l'equazione 6.55 possa cambiare soluzione. Ovviamente tale tesi si mantiene vera soltanto in un dominio analitico continuo di esistenza della funzione.

Da una discretizzazione di tale dominio per una soluzione numerica dell'equazione 6.55 deriva una negazione della proprietà di indipendenza dai valori di $G(\mathbf{x}, t) \neq G_0$. Infatti con il passaggio da un dominio continuo ad uno discreto e la conseguente schematizzazione per la soluzione numerica delle derivate della 6.55, si ha una dipendenza dai valori di G al di fuori di $\tilde{G} = G_0$. La condizione necessaria è quindi definire funzioni note al di fuori di $\tilde{G} = G_0$ affinché il risultato dell'equazione 6.55 non venga alterato. Da un punto di vista numerico possiamo pensare di utilizzare uno schema di redistribuzione dello scalare G che si basi sull'assunzione già vista di mantenere unitario il modulo della norma del gradiente di G al di fuori di $G(\mathbf{x}, t) \neq G_0$. Il campo di $\tilde{G}(\mathbf{x}, t)$ è quindi determinato dalle due equazioni qui ripetute:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{G}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{G}) = (\bar{\rho} s_T^0) |\nabla \tilde{G}| - \bar{\rho} D_t \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}| \quad (6.55)$$

$$|\nabla \tilde{G}| = 1 \quad (6.56)$$

Per risolvere questo sistema di equazioni esistono due procedure principali. La prima si basa sulla soluzione dell'eq. 6.55 sull'intero dominio seguita dalla soluzione della funzione distanza eq. 6.32 che prende il nome di “re-initialization”, reinizializzazione.

La seconda procedura si basa sulla definizione di una nuova velocità turbolenta, *extension velocity*, che sia valida anche al di fuori di $\tilde{G} = G_0$ e che si mantenga costante lungo la direzione normale ([69]):

$$s_T^* = s_T^0 - \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_i} \quad (6.57)$$

l'equazione da risolvere diventa:

$$\nabla_{s_T^*} \cdot \nabla \tilde{G} = 0 \quad (6.58)$$

In questo lavoro di tesi è stato adottato il metodo di reinizializzazione in quanto più compatibile con l'approccio ai volumi finiti utilizzato nel codice STAR-CDTM.

6.3.1.1 Re-inizializzazione di G

Il metodo di re-inizializzazione dell'equazione 6.55 è stato adottato in quanto l'unica possibilità offerta dalle funzionalità di *user-programming* di STAR-CDTM è quella di risolvere l'equazione di generici scalari in forma conservativa, eq.2.16.

Si permette quindi al codice di risolvere lo scalare G su tutto il campo di moto, per poi risolvere mediante un codice esterno la condizione di reinizializzazione (equazione 6.32). Il campo di G così determinato al di fuori del fronte di fiamma, viene riassegnato al solutore principale all'inizio dell'iterazione successiva.

Entriamo nel dettaglio della soluzione dell'equazione 6.32. In letteratura si individuano due approcci principali per imporre la funzione distanza al di fuori di $\tilde{G} = G_0$:

- Metodo Differenziale
- Metodo Geometrico

Il metodo Differenziale ([71]), ([20]), ([72]), nasce dall'impiego dell'approccio *Level Set* per lo studio di flussi bifasici o tra due fluidi di diversa natura. In questo caso l'interfaccia tra i fluidi assume il valore di superficie di livello; risulta perciò anche in questo caso naturale la scelta di una funzione distanza da imporre all'esterno. Rimandiamo ai riferimenti citati per dettagli maggiori sul metodo differenziale.

L'approccio geometrico, adottato nell'ambito di questo lavoro, si basa principalmente su considerazioni di carattere topologico. Tale tecnica, che in generale è stata scartata in letteratura, è stata scelta in quanto nell'ambito dello studio dei combustori l'esigenza di reinizializzazione sono abbastanza diverse da quelle comuni. La differenza risiede nel fatto che nel caso di combustori completi non basta applicare la funzione distanza in un'intorno di G_0 ,

ma la reinizializzazione deve essere svolta nell'intero dominio computazionale poiché anch'esso assume un carattere fisico ben definito². La scelta inoltre è stata adottata in quanto è l'unica possibile permessa dalle funzionalità di *user programming* del codice proprietario usato.

Lo schema geometrico, implementato nel codice secondario può essere sintetizzato in tre passaggi:

1. Individuazione di tutte le celle adiacenti alla cella di analisi. Occorre in particolare individuare tutte le celle che hanno in comune almeno un vertice con la cella in esame. E' facile dimostrare che nel caso di celle esaedriche l'insieme cercato è costituito da 27 elementi (comprendendo anche la cella esaminata)
2. Individuazione delle celle in cui $\tilde{G} = G_0$.
3. Per tutte le celle eccetto quelle identificate nel passaggio precedente imporre la funzione distanza.

Il primo passo consiste nell'individuazione tutte le celle adiacenti alla cella di analisi; tale insieme verrà nel seguito definito "rosa". Il codice STAR-CDTM è un solutore non-strutturato, e tutte le scelte devono quindi essere vincolate alla connettività che compete a tale approccio. Mentre per una griglia strutturata la ricostruzione topologica della rosa è estremamente semplificata per via della sua intrinseca indicizzazione, nel caso di griglie non-strutturate occorrono metodi più complessi.

Ogni cella è caratterizzata da un numero ordinale identificativo che non ha, in generale, alcun legame con la sua disposizione geometrica. E' stato quindi necessario ricostruire la connettività delle singole celle attraverso un complesso algoritmo, vedi figura 6.10. Come si evince dalla figura la ricostruzione della rosa della cella è di carattere tridimensionale ma è in grado di lavorare, al momento, soltanto su celle esaedriche.

E' a questo punto possibile individuare l'eventuale passaggio del fronte di fiamma nella rosa selezionata. Assunto per $G(\mathbf{x}, t) = G_0$ il valore $G_0 = 0$, basterà operare il prodotto del valore dello scalare $G(n)$ individuato nel centroide³ della cella in analisi, con i valori di G in tutti i centroidi che

²Tale approccio è già stato impiegato in letteratura per griglie strutturate, ([31])

³il termine centroide identifica il baricentro della generica cella di calcolo, consistente all'approccio cell-centered seguito dal solutore

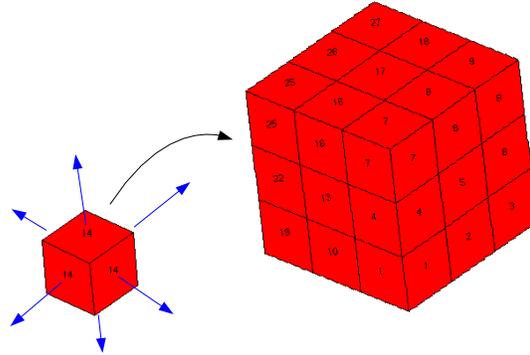


Figura 6.10: Ricostruzione della rosa della cella n° 14

compongono la rosa. Per ogni valore del prodotto sarà sufficiente controllare il segno decidendo sui seguenti casi:

- Segno positivo: il fronte di fiamma non passa tra le due celle.
- Segno negativo: il fronte di fiamma passa tra le due celle.
 - Se $|G|(n) < |G|(iR)$, alla cella in analisi viene assegnato il valore di zero e si passa alla cella $n + 1$.
 - Se $|G|(n) > |G|(iR)$, si passa al prodotto con la cella $iR + 1$.

Si noti come l'individuazione del fronte tratti solamente la cella in esame e non le celle della rosa. Questo non toglie generalità nè genera singolarità, in quanto vengono considerate tutte le celle presenti nel dominio di calcolo. Inoltre l'approssimazione sulla posizione della fiamma è di ordine zero. La fiamma viene posizionata direttamente nella cella più vicina; non vi è alcuna ricostruzione di ordine superiore attraverso le coordinate dei centroidi. Tale scelta si giustifica in quanto esiste una sostanziale onerosità e complessità computazionale per operare ricostruzioni di ordine superiore allo zero in griglie non strutturate tali da non giustificare il grado di accuratezza che ne deriva. Gli indici delle celle che “vedono” il passaggio del fronte di fiamma vengono quindi memorizzate in un opportuno array. Un semplice schema della procedura è riportato in figura 6.11.

Bisogna adesso andare ad imporre la funzione distanza all'intero dominio di calcolo. Viene prima di tutto valutata, per ogni cella del dominio, la distanza da tutte le celle che compongono la superficie di fiamma: lo scalare G

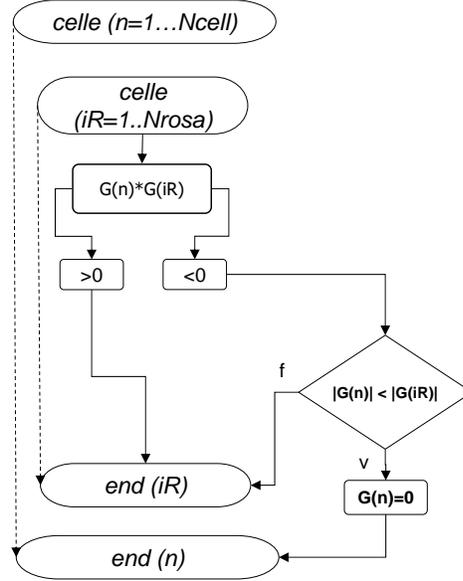


Figura 6.11: Procedura di individuazione del livello $G = 0$

assumerà, nella cella in esame, il valore pari alla minima distanza individuata. Questa procedura permette di rispettare la condizione imposta dall'equazione 6.32, ovvero proprio la distanza dall'iso-superficie $G = G_0$.

Lo schema messo a punto benché piuttosto semplice, è numericamente abbastanza oneroso: supponendo che le celle che compongono la superficie di fiamma siano pari all'1% delle celle totali si può calcolare che ad ogni iterazioni il numero di operazioni risulti dell'ordine di $O(\frac{N^2}{50})$, con N numero totale di celle.

6.3.2 Varianza di G e *surface area ratio*

Anche in per gli scalari \widetilde{G}''^2 e $\widetilde{\sigma}_t$ le equazioni, se pur formalmente identiche alla conservazione del generico scalare, necessitano di una ridefinizione del campo al di fuori del fronte di fiamma. Riportiamo qui per chiarezza le due equazioni

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{G}''^2}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}} \widetilde{G}''^2) = \nabla_{\parallel} \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla_{\parallel} \widetilde{G}''^2) + 2\bar{\rho} D_t (\nabla \widetilde{G})^2 - c_s \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{G}''^2 \quad (6.59)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\sigma}) &= \nabla_{\parallel} \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla_{\parallel} \tilde{\sigma}_t) + c_0 \bar{\rho} \frac{(-\tilde{\mathbf{v}}'' \tilde{\mathbf{v}}'') : \nabla \tilde{\mathbf{v}}}{k} \tilde{\sigma}_t + \\
 &+ c_1 \bar{\rho} \frac{D_t (\nabla \tilde{G})^2}{\widetilde{G''^2}} \tilde{\sigma}_t^2 - c_2 \bar{\rho} \frac{s_L^0 \tilde{\sigma}_t^2}{(\widetilde{G''^2})^{1/2}} - \\
 &- c_3 \bar{\rho} \frac{D \tilde{\sigma}_t^3}{\widetilde{G''^2}}
 \end{aligned} \tag{6.60}$$

Per la natura dello scalare G e della sua distribuzione statistica, abbiamo più volte osservato la necessità che i due scalari, $\widetilde{G''^2}$ e $\tilde{\sigma}_t$, assumano valori costanti in direzione normale al fronte di fiamma. La redistribuzione dei due scalari per $\tilde{G} \neq \tilde{G}_0$ corrisponde, matematicamente, ad imporre la seguente condizione:

$$\nabla \Theta \cdot \nabla \tilde{G} = 0 \tag{6.61}$$

essendo Θ il generico scalare.

Il problema principale nel risolvere le 6.59 e 6.60 è la determinazione dell'operatore ∇_{\parallel} . Data l'impossibilità di intervenire sui sorgenti del solutore CFD, dobbiamo sottostare al consueto schema numerico che prevede la valutazione completa dell'operatore ∇ . E' tuttavia interessante osservare che, imponendo la condizione di redistribuzione al generico scalare Θ (espressa dalla 6.61), il contributo normale al fronte di fiamma del termine di trasporto turbolento (vedi equazione E.19) è identicamente nullo, rimanendo diversa da zero la sola componente tangenziale.

6.3.2.1 Redistribuzione scalari

Abbiamo definito "redistribuzione" la condizione espressa dalla 6.61 perché l'operazione ridistribuisce, in tutto il dominio, i valori degli scalari sul fronte di fiamma, $\Theta|_{\tilde{G}=\tilde{G}_0}$, in direzione normale al fronte di fiamma stesso.

Lo schema numerico adottato è basato su considerazioni puramente geometriche, ed è già stato proposto per mesh strutturate da Herrmann ([31]), mentre crediamo sia la prima volta che lo schema viene adottato su mesh non strutturate

Lo schema di redistribuzione può essere sintetizzato in tre step fondamentali:

1. A partire da ogni cella i della mesh, si individua la direzione definita dal versore \mathbf{n} normale all'iso-superficie G locale, e si sposta il controllo

nella cella adiacente il cui centroide è posto sulla direzione individuata. Il cammino viene proseguito fino all'intercettazione del fronte di fiamma medio.

2. Giunti sul fronte di fiamma si recupera il valore dello scalare $\Theta|_{\tilde{G}=G_0}$ e lo si memorizza.
3. Si impone allo scalare Θ nella cella i di partenza il valore dello scalare sul fronte di fiamma individuato al passo precedente sul fronte di fiamma

Il versore normale è definito come:

$$\tilde{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = -\frac{\nabla\tilde{G}(\mathbf{x})}{|\nabla\tilde{G}(\mathbf{x})|} \quad (6.62)$$

Il processo di avanzamento a partire dalla cella i verso il fronte di fiamma, viene definito da:

$$\mathbf{x}_{\alpha+1} = \mathbf{x}_\alpha + \Delta l \cdot \tilde{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_\alpha) \quad \alpha = 0 \dots N_{step} \quad (6.63)$$

che si concluderà quando verrà soddisfatta la condizione (vedi figura 6.12):

$$\tilde{G}(\mathbf{x}_\alpha) \cdot \tilde{G}(\mathbf{x}_{\alpha+1}) \leq 0 \quad (6.64)$$

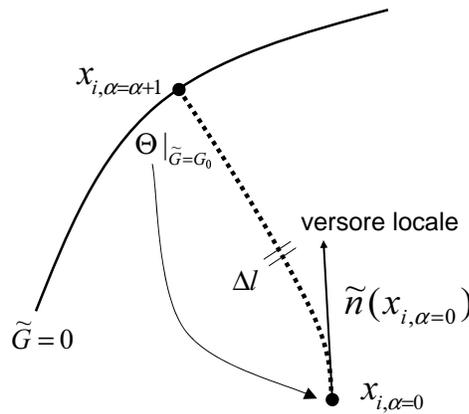


Figura 6.12: Redistribuzione nel campo di moto del generico scalare condizionato

Lo schema proposto si presenta piuttosto oneroso dal punto di vista computazionale e la sua convergenza risulta estremamente sensibile alla scelta

del passo di avanzamento Δl , legato alla dimensione caratteristica delle celle di calcolo.

L'efficienza può essere migliorata andando a limitare la banda di redistribuzione intorno alla posizione del fronte medio. La condizione da noi imposta limita la redistribuzione a bande di ampiezza r pari a(vedi figura 6.12):

$$r = C_k \cdot \sqrt{\max(\tilde{G}''^2 |_{\tilde{G}=G_0})} \quad (6.65)$$

con C_k compreso tra i valori $20 < C_k < 100$.

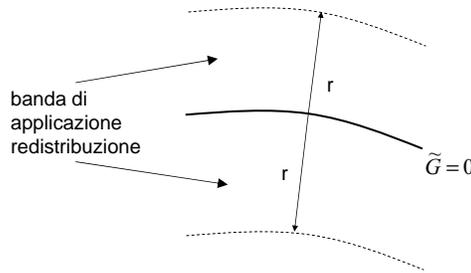


Figura 6.13: Banda per la redistribuzione del generico scalare condizionato

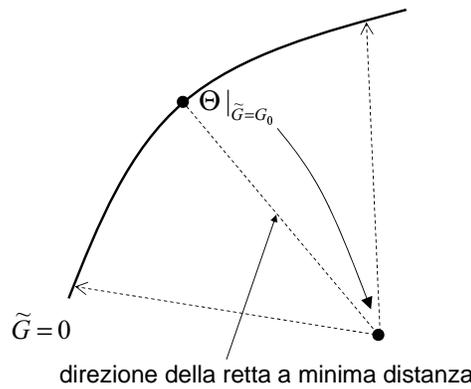


Figura 6.14: Schema algoritmo modificato con Θ generico scalare

L'algoritmo è stato ulteriormente perfezionato durante la fase di validazione, con una significativa riduzione dei tempi di calcolo. Abbiamo infatti osservato che, operando la redistribuzione degli scalari dopo la fase di reinizializzazione di G , la direzione definita dal gradiente di G (versore $\tilde{\mathbf{n}}$), coincide con la direzione definita dalla retta che segna la minima distanza tra la cella i e il fronte di fiamma medio. E' pertanto possibile operare la redistribuzione degli scalari direttamente durante la fase di reinizializzazione di G : è

infatti sufficiente memorizzare i valori dello scalare Θ nel punto del fronte di fiamma intercettato dalla retta di minima distanza della generica cella i , ed assegnarli alla stessa cella i (vedi figura 6.14). Questa nuova modalità è consistente con l'approssimazione di ordine zero utilizzata per individuare il fronte di fiamma.

In figura 6.15 riassumiamo lo schema complessivo che descrive l'interazione tra il solutore STAR-CDTM ed il codice esterno nel quale sono stati implementati gli algoritmi di reinizializzazione e redistribuzione.

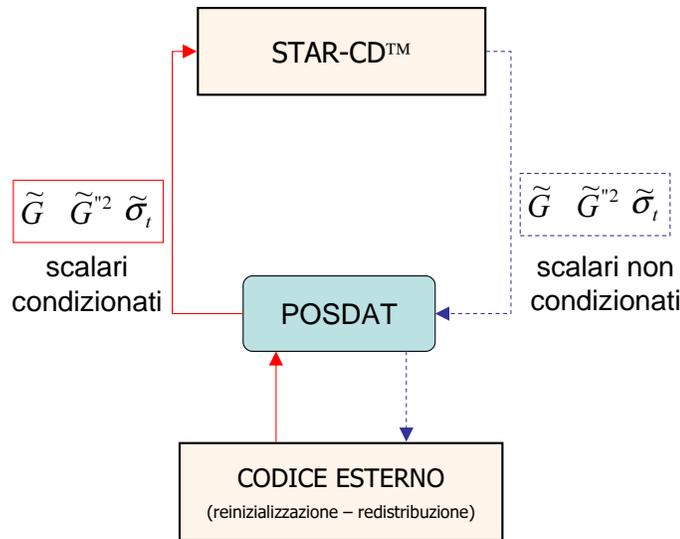


Figura 6.15: Diagramma per la soluzione degli scalari G , G''^2 e σ_t

6.3.3 Librerie Flamelet

Come abbiamo più volte accennato, la soluzione delle flamelet viene svolta interamente in una fase di *preprocessing* del calcolo, che comprende, a valle della soluzione delle fiamme laminari quasi-1D, la valutazione dei valori medi delle principali grandezze termochimiche tramite l'integrazione della PDF (vedi equazione 6.54). Il risultato è la scrittura di una serie di librerie (*flamelet libraries*) che verranno interrogate come *look-up-table* durante la soluzione della fiamma turbolenta.

6.3.3.1 Soluzione delle flamelet laminari

Le flamelet vengono valutate tramite la soluzione di fiamme laminari quasi-1D, ottenute semplificando le equazioni di NS 3D a particolari configurazioni geometriche. Le configurazioni normalmente considerate differiscono dalla fiamma laminare monodimensionale propriamente detta (*freely propagating flame*), per gli effetti dello *stretching*. Nel paragrafo §3.2.1.1 abbiamo descritto dettagliatamente il fenomeno, ed abbiamo illustrato alcuni casi particolari. In figura 6.16 riportiamo le due configurazioni normalmente usate per la soluzione delle flamelet: la *counter flow twin flame* e la *counter flow opposed flame*. Nel presente lavoro sono state considerate la sole *twin flames*, le cui equazioni caratteristiche sono già state descritte in §6.2.4.1.

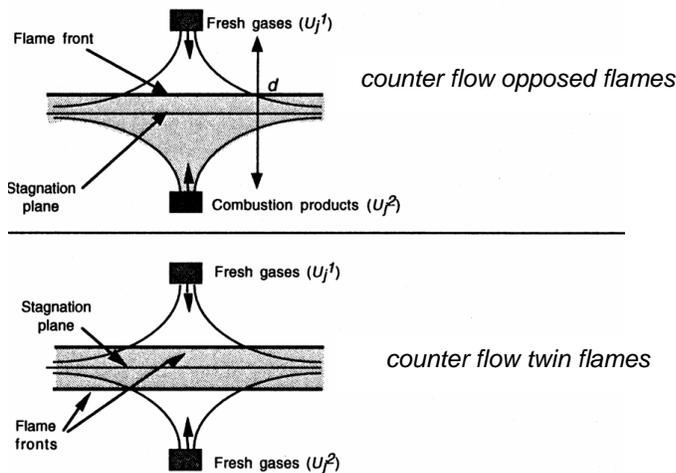


Figura 6.16: Esempi di configurazioni geometriche per flamelet

La soluzione efficiente delle equazioni caratteristiche delle flamelet, generalmente abbinate all'impiego di meccanismi di reazione dettagliati, necessita di metodi numerici piuttosto efficienti. Nell'ambito di questo lavoro la soluzione delle flamelet è stata condotta utilizzando il codice **Chem1D**, gentilmente messo a disposizione da de Goey [13]. Il codice **Chem1D** implementa un algoritmo di Newton usando uno schema di discretizzazione esponenziale del secondo ordine su griglie adattative. Il programma è basato sulle librerie ChemkinTM e consente l'impiego di meccanismi di reazione dettagliati.

Definito il set di condizioni operative della fiamma in esame, determinato dalle caratteristiche termodinamiche della miscela reagente (temperatura, pressione e composizione), le *twin flames* devono essere risolte al variare

del fattore di *stretching* (che in questo caso si riduce alla sola componente di *strain*), tipicamente nell'intervallo che va dalla condizione di *stretching* nullo (*freely propagating flame*), alla condizione di massimo *stretching* oltre il quale si ha il *quenching* della fiamma. L'output del codice **Chem1D** è quindi costituito dalle funzioni:

$$T = T(x_n, K) \quad (6.66)$$

$$Y_k = Y_k(x_n, K) \quad (6.67)$$

$$S_L = S_L(K) \quad (6.68)$$

che esprimono i profili di temperatura e composizione nella flamelet al variare dello *stretching* (utilizzando la coordinata normalizzata x_n , vedi equazione 6.46) e la dipendenza della velocità di fiamma laminare S_L dallo *stretching*.

6.3.4 Generazione della *flamelet library*

Per la generazione della libreria (*look-up-table*), occorre integrare le soluzioni della flamelet laminare per tutti i possibili valori che i tre scalari di controllo, \tilde{G} , \tilde{G}''^2 e \tilde{K} vengono ad assumere durante la soluzione del campo di moto turbolento (vedi equazione 6.54). Una prima conseguenza è l'elevata richiesta di risorse che l'allocazione in memoria della libreria richiede.

Per contenere il numero di matrici da memorizzare, limitando anche i tempi di calcolo con la riduzione del numero di chiamate alla *look-up-table*, è possibile riformulare l'accoppiamento tra flamelet laminari e fiamma turbolenta, evitando di dover trasportare l'intero set di specie chimiche contemplate. Possiamo infatti osservare che l'effetto sul campo di temperatura e densità della variazione della composizione locale della miscela per opera della reazione chimica, si può valutare tramite la distribuzione delle seguenti tre grandezze:

- Peso molecolare medio della miscela, \overline{W} :

$$\overline{W} = \left(\sum_{k=1}^N \frac{\tilde{Y}_k}{\overline{W}_k} \right)^{-1} \quad (6.69)$$

che permette di determinare la densità tramite l'equazione di stato:

$$\tilde{\rho} = \frac{\tilde{P} \overline{W}}{R \tilde{T}} \quad (6.70)$$

- Entalpia di formazione media della miscela, $\tilde{\psi}$:

$$\tilde{\psi} = \sum_{k=1}^K \tilde{Y}_k \Delta h_k^0 \quad (6.71)$$

essendo Δh_k^0 l'entalpia di formazione della generica specie k .

- Calore specifico medio integrale della miscela, $\tilde{c}_p(T)$:

$$\tilde{c}_p(T) = \frac{1}{T - T_{ref}} \int_{T_{ref}}^T \bar{c}_p(T) dT \quad (6.72)$$

essendo \bar{c}_p il calore specifico della miscela determinato da:

$$\bar{c}_p(T) = \sum_{k=1}^K \tilde{Y}_k c_{p_k}(T)$$

dove $c_{p_k}(T)$ è il calore specifico della generica specie k .

Noti $\tilde{c}_p(T)$ e $\tilde{\psi}$ è possibile determinare in ogni punto il valore dell'entalpia della miscela:

$$\tilde{h} = \sum_{k=1}^K h_k = \tilde{c}_p(T) (T - T_{ref}) + \tilde{\psi} \quad (6.73)$$

Le grandezze W e ψ possono essere dedotte direttamente dalla soluzione delle flamelet laminari come combinazione delle funzioni $Y_k(x_n, K)$: i loro valori medi possono quindi essere ricavati integrando la PDF:

$$\tilde{Q} = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(x_n, \tilde{K}) P(x_n; \mathbf{x}) dx_n$$

Risultano così funzioni del tipo:

$$\tilde{Q} = \tilde{Q}(\tilde{G}, \tilde{G}''^2, \tilde{K})$$

che realizzano *look-up-table* tridimensionali. Dal momento che la tabella viene interrogata per ogni cella ad ogni iterazione, abbiamo deciso di ottimizzare la procedura utilizzando matrici strutturate dalle quali il valore della grandezza viene estratto mediante interpolazione trilineare. Di seguito riportiamo

lo schema di interpolazione seguito.

$$\tilde{G}_i = \begin{cases} \alpha_0 & i \leq i_0 \\ \alpha_1 + \alpha_2 i & i_{\max} > i > i_0 \\ \alpha_3 & i \geq i_{\max} \end{cases} \quad (6.74)$$

$$\widetilde{G''^2}_j = \begin{cases} \beta_0 & j \leq j_0 \\ \beta_1 + \beta_2 j & j_{\max} > j > j_0 \\ \beta_3 & j \geq j_{\max} \end{cases} \quad (6.75)$$

$$\tilde{K}_k = \begin{cases} \gamma_0 & k \leq k_0 \\ \gamma_1 + \gamma_2 k & k_{\max} > k > k_0 \\ \gamma_3 & k \geq k_{\max} \end{cases} \quad (6.76)$$

Per quanto riguarda il calore specifico medio integrale, dobbiamo tenere conto della dipendenza dalla temperatura e dalla composizione locale della miscela. In una fiamma non adiabatica, nella quale sia quindi possibile stimare gli effetti dello scambio termico, è necessario svincolare la dipendenza alla temperatura del calore specifico dalla relazione imposta dalla flamelet. In altre parole il calore specifico medio (ossia il valore ottenuto tramite l'integrazione della PDF), oltre alla dipendenza dagli scalari di controllo \tilde{G} , $\widetilde{G''^2}$ e \tilde{K} , che mantengono il legame con la composizione e la temperatura della flamelet, deve conservare una dipendenza esplicita dalla temperatura, in modo da apprezzarne le variazioni determinate nel campo turbolento dallo scambio termico. Ne consegue una matrice a 4 dimensioni del tipo:

$$c_p = c_p(\tilde{G}, \widetilde{G''^2}, \tilde{K}, \tilde{T})$$

Questo tipo di dipendenza ci avrebbe costretto a rivedere l'intera procedura di interpolazione adottata, ed abbiamo pertanto deciso di operare la seguente semplificazione.

Dal momento che il modello è in grado di gestire, nella presente formulazione, solo fiamme perfettamente premiscelate, in cui cioè la miscela reagente sia perfettamente omogenea, abbiamo congelato la dipendenza del calore specifico dalla composizione, associandolo alla miscela reagente ed ammettendo una dipendenza locale dalla sola temperatura.

Si tratta di una approssimazione valida fintantochè la miscela risulta perfettamente omogenea e con rapporti di equivalenza $\phi \leq 1$. In figura 6.17 riportiamo una stima dell'errore sul valore del c_p : le curve sono state ottenute valutando l'errore percentuale tra il c_p calcolato alla temperatura di

equilibrio con la composizione della miscela reagente, e il c_p calcolato con la temperatura e la composizione all'equilibrio, al variare della temperatura e della pressione dei reagenti.

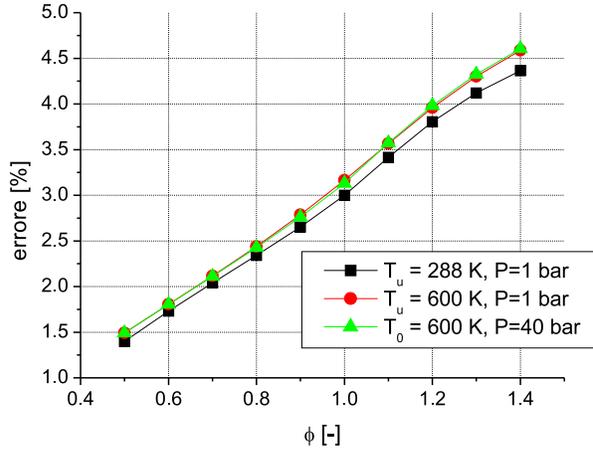


Figura 6.17: Errore nella valutazione approssimata del calore specifico

Rileviamo che per $\phi < 1$ l'errore è sempre inferiore al 3%. Il calore specifico medio integrale, \tilde{c}_p , può quindi essere memorizzato nella flamelet library come semplice funzione:

$$\tilde{c}_p = \tilde{c}_p(T)$$

che determina una *look-up-table* monodimensionale, nella quale si opera una interpolazione lineare.

Occorre infine memorizzare in una opportuna tabella la dipendenza della velocità laminare di fiamma dal parametro di *stretching*. In questo caso si ha direttamente la semplice *look-up-table* monodimensionale:

$$S_L = S_L(\tilde{K})$$

6.3.4.1 Integrazione della PDF e *postprocessing*

L'intera procedura di integrazione delle flamelet laminari e di generazione delle *look-up-table* descritte è stata unificata ed implementata in codice ausiliario denominato **prePDF**. Il codice legge direttamente l'output del solutore **Chem1D** e provvede all'integrazione delle grandezze termochimiche

di collegamento ($\tilde{\psi}$ e \overline{W}). L'integrazione viene svolta mediante l'algoritmo di Simpson, risultando in una precisione del terzo ordine.

Per rendere possibile l'analisi in fase di *postprocessing* della composizione della miscela, il codice **prePDF** realizza l'integrazione della frazione in massa della generica specie chimica, memorizzando in specifiche tabelle le funzioni:

$$\tilde{Y}_k = \tilde{Y}_k(\tilde{G}, \tilde{G}''^2, \tilde{K})$$

Il codice denominato **postPDF** recupera i campi di \tilde{G} , \tilde{G}''^2 e \tilde{K} dalla soluzione turbolenta, e, per ogni cella, ricalcola la frazione in massa della specie k interpolando dalle tabelle calcolate in precedenza dal **prePDF**.

In figura 6.18 riportiamo un diagramma complessivo del funzionamento del modello *Level Set* implementato e delle interconnessioni con il codice STAR-CDTM e con i codici ausiliari sviluppati.

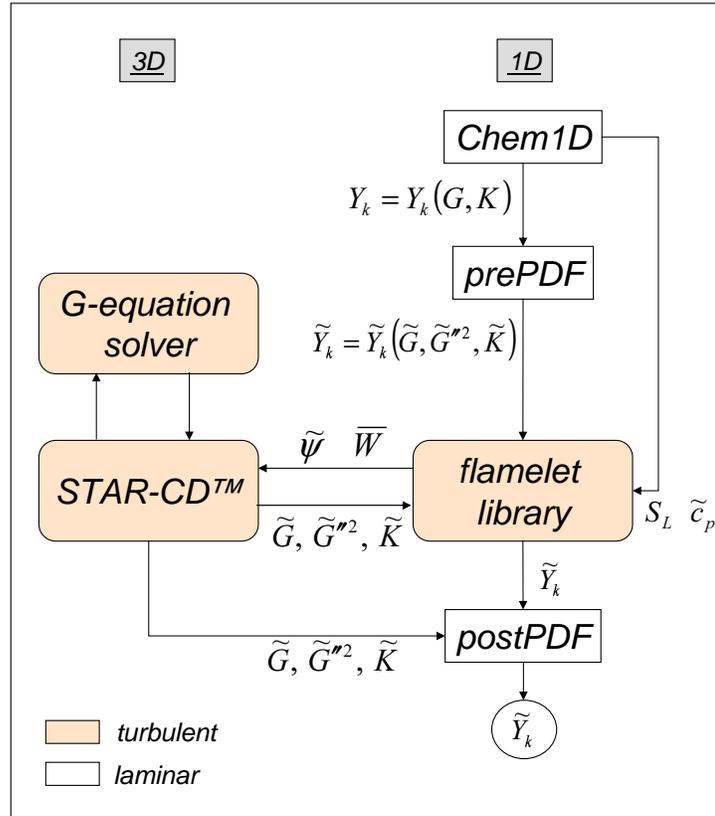


Figura 6.18: Diagramma complessivo dell'implementazione del modello *Level Set*

6.4 Validazione del modello

La formulazione proposta del modello *Level Set* consente la sola analisi di fiamme perfettamente premiscelate: il modello assume la costanza della *mixture fraction* nel campo di moto. L'applicazione del modello *Level Set* al caso di fiamme parzialmente premiscelate (vedi [56], [30], [50] e [66]) presenta infatti ancora numerosi interrogativi di natura teorica, legati essenzialmente alla valutazione della distribuzione probabilistica di alcune grandezze dipendenti dalla composizione locale (principalmente S_L e δ_L) che rendono inattuabile la trattazione completa valida per fiamme perfettamente omogenee. Il modello viene semplificato eliminando le equazioni di trasporto per la varianza e il *surface area ratio* ($\tilde{\sigma}$), assumendo espressioni algebriche per $\widetilde{G''^2}$ e correlazioni per S_T (vedi [50],[30] e [66]). Lo stesso scalare G viene di fatto snaturato per essere interpretato localmente come una variabile di progresso. La derivazione di una variante del modello *Level Set* capace di gestire fiamme non omogenee, mantenendo tuttavia lo schema complessivo qui descritto, costituisce uno dei principali punti di sviluppo del presente lavoro.

Date le caratteristiche attuali del modello, limiteremo i test di validazione all'analisi del bruciatore **vdb** essenzialmente per le seguenti motivazioni:

- Disponibilità di misure sperimentali sufficientemente dettagliate
- Fiamma turbolenta operante nel regime *thin reaction zone*, dove le possibilità di impiego del modello *Level Set* sono state dedotte da Peters solo negli ultimissimi anni (2000-2003), risultando estremamente limitati i lavori pubblicati che validino tali ipotesi
- Il combustore **vdb** presenta condizioni operative tipiche dei combustori *lean premixed* delle turbine a gas terrestri, verso i quali è puntato l'obiettivo dell'intero lavoro di tesi.

Vogliamo osservare che la formulazione proposta per il modello *Level Set* e la sua implementazione nel codice STAR-CD™ hanno comportato lo sviluppo di un gran numero di procedure e codici ausiliari, in alcuni casi del tutto originali. Ci riferiamo principalmente all'ideazione di una procedura interamente geometrica valida per mesh non strutturate, per il condizionamento della *G-equation* e per la redistribuzione degli scalari, e alla formulazione approssimata della *flamelet library* per quanto riguarda il calore specifico del gas.

Una campagna di validazione completa richiederebbe l'analisi di numerosi casi in modo da poter testare lo schema su geometrie complesse (completamente 3D), studiando fiamme nei vari regimi di combustione in cui il modello può lavorare.

I risultati e le considerazioni qui riportate costituiscono quindi la fase preliminare di un ampio processo di validazione e test del modello *Level Set* che è attualmente in corso.

6.4.1 *VanderBilt Combustor*

Per quanto riguarda le condizioni al contorno e la descrizione della geometria del bruciatore rimandiamo alla descrizione dettagliata svolta nel paragrafo §4.5.5.

Il primo passo per un'analisi tramite il modello *Level Set* è la generazione della libreria flamelet. Come più volte accennato attualmente il modello si serve della soluzione di flamelet laminari *counter flow* in configurazione *twin*, ottenuta tramite il codice Chem1D.

Nel caso specifico la libreria è stata generata a partire da 91 soluzioni laminari, corrispondenti ad altrettanti valori di *stretching* imposto alla flamelet, dalla condizione di fiamma *unstretched* ($K = 0$) alla condizione di *quenching* (ottenuta per $K = 450 \text{ s}^{-1}$), con passi di 5 s^{-1} . In figura 6.19 riportiamo gli andamenti della temperatura e della frazione molare di H_2 per tre diversi valori dello *stretching*, mentre in figura 6.20 è descritta la variazione della velocità di fiamma laminare S_L con K . Per questa simulazione è stato utilizzato il meccanismo skeletal di Smooke [70], già impiegato con il modello EDC-DC.

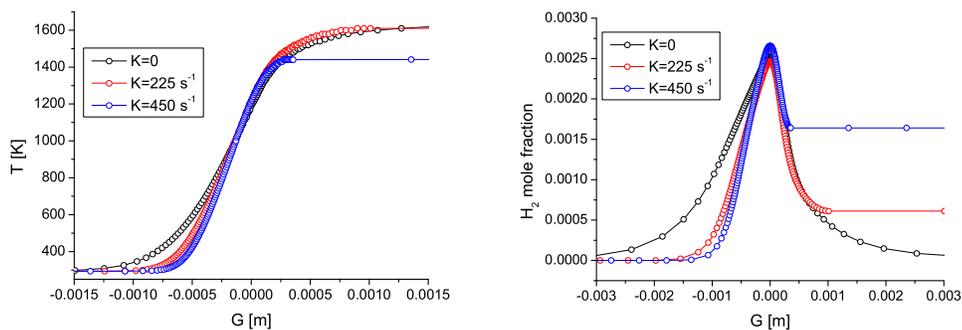


Figura 6.19: Flamelet per il combustore vdb

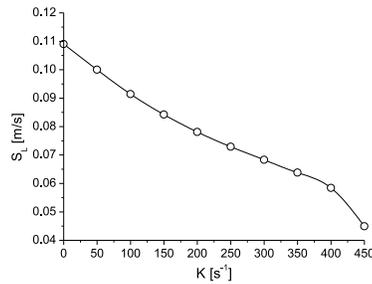


Figura 6.20: Variazione della velocità laminare con K nel combustore **vdb**

Il primo aspetto investigato è la sensibilità alla densità della mesh di calcolo. Ricordiamo che il metodo geometrico ideato individua la posizione della fiamma con un'approssimazione di ordine zero rispetto alle coordinate dei centroidi delle celle: è quindi da aspettarsi una certa sensibilità della soluzione dalla dimensione caratteristica degli elementi. La natura stessa dello schema numerico, basato su un approccio cinematico, rende ragione di una dipendenza dalla mesh di calcolo superiore a quanto visto per i modelli precedenti.

Abbiamo confrontato la soluzione ottenuta sulla mesh già descritta per i modelli EDC e KPP (mesh A, circa 9600 celle esaedriche) ed una mesh ottenuta dimezzando nelle due direzioni del piano la dimensione del generico elemento (mesh B da circa 38400 celle): teniamo a sottolineare che, benché la geometria sia bidimensionale, l'impossibilità da parte del codice STAR-CDTM di operare su mesh effettivamente 2D, consegna al presente test la valenza di un'analisi 3D per quanto riguarda lo schema di reinizializzazione e redistribuzione proposto. Come per tutte le altre simulazioni reattive fin qui mostrate, è stato adottato anche in questo caso il modello $k - \varepsilon$ standard.

Nelle figure 6.21 e 6.22 riportiamo i consueti profili radiali di temperatura nei quali si apprezza il confronto tra le due mesh ed i valori sperimentali.

Osserviamo, innanzitutto, un ottimo accordo complessivo tra i dati calcolati e quelli misurati: l'accuratezza è maggiore di quella rilevata con i modelli EDC e KPP. Nel passaggio dalla mesh A alla mesh B si assiste ad un percepibile aumento dell'accuratezza della soluzione, senza tuttavia rilevare in nessuna sezione uno stravolgimento della struttura della fiamma, a conferma della stabilità complessiva dell'algorithmo che tuttavia è sensibile, come previsto, alla dimensione della cella di calcolo.

Le due mesh sono state realizzate utilizzando elementi con *aspect ratio*

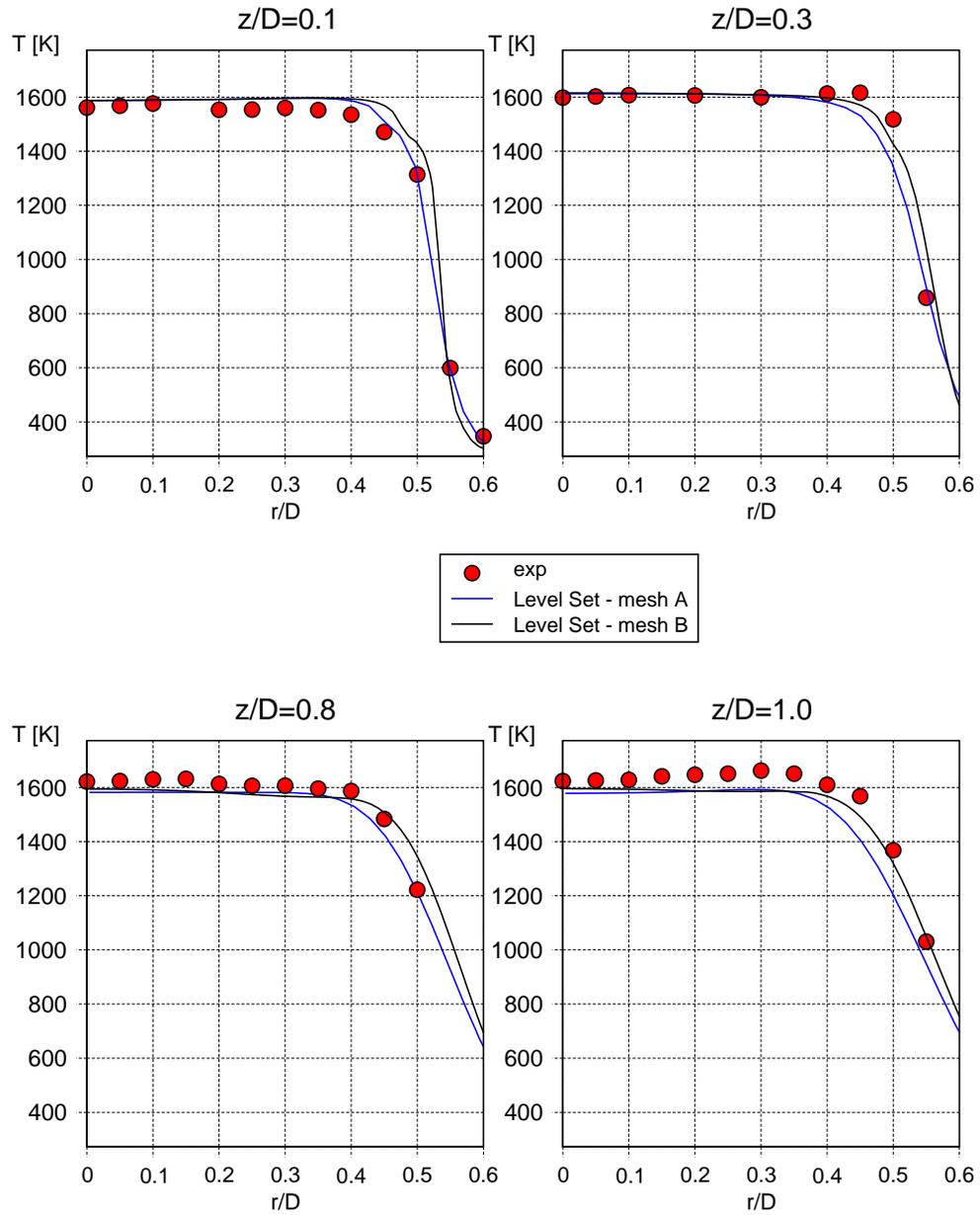


Figura 6.21: Analisi di sensibilità alla mesh, combustore **vdb**, modello *Level Set*

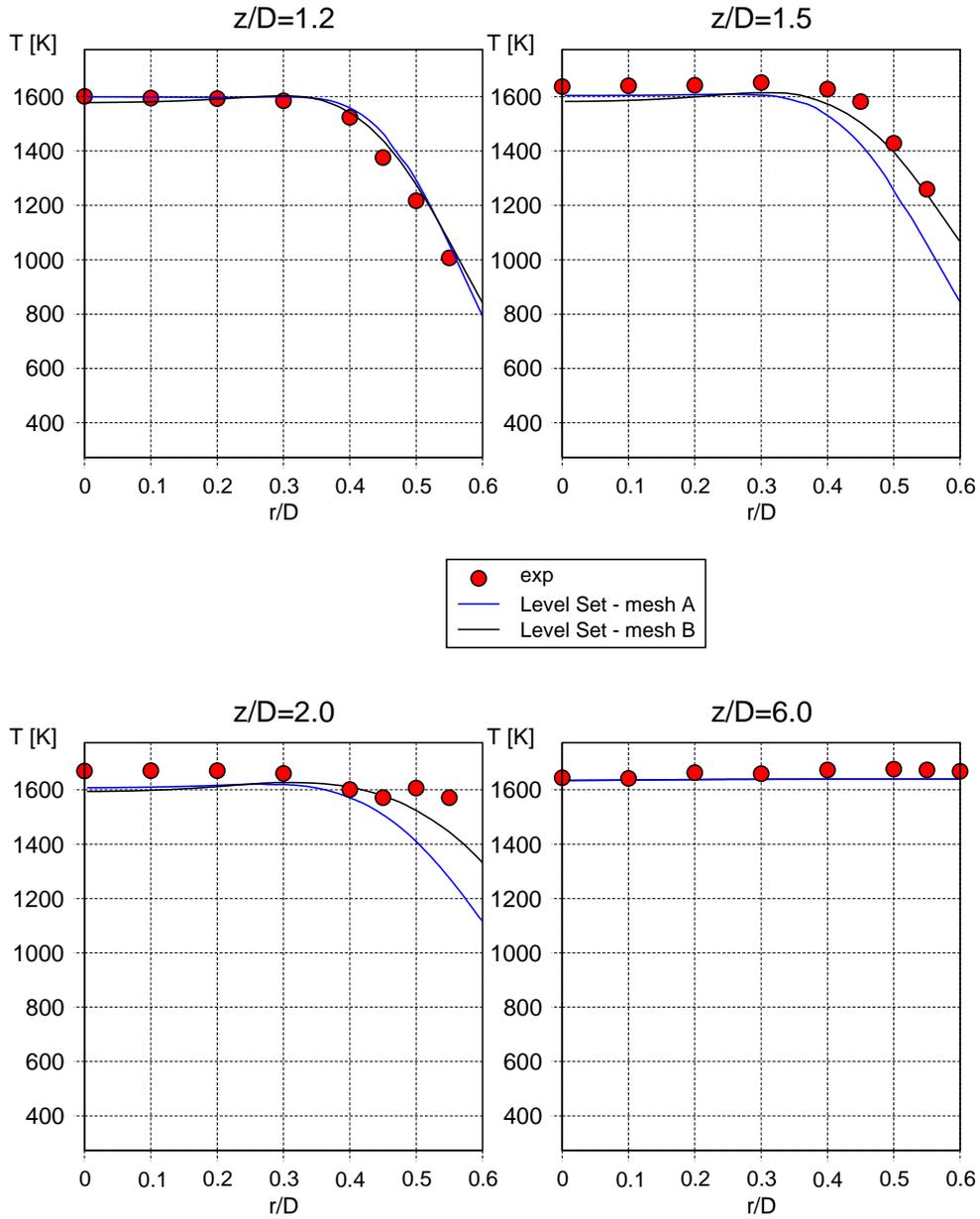


Figura 6.22: Analisi di sensibilità alla mesh, combustore **vdb**, modello *Level Set*

pressochè unitario in tutto il campo di moto, con dimensione caratteristica del lato, Δl , pari a 1 mm per la mesh A e 0.5 mm per la mesh B. L'errore massimo sulla temperatura, rilevato nelle sezioni illustrate, è del 15%, individuato nella sezione $z/D = 2.0$ dove si rileva anche il massimo scostamento dai dati sperimentali.

Analizziamo adesso nel dettaglio la soluzione ottenuta con la mesh B. In figura 6.23 riportiamo una mappa completa di temperatura, ed una visualizzazione del campo dello scalare G , con scala centrata in $G = 0$, evidenziando così la posizione del fronte di fiamma. Osserviamo il corretto sviluppo del *flame brush*, con valori nella parte terminale della fiamma molto maggiori di quelli predetti dal modello EDC-DC (vedi figura 4.41) ma inferiori a quelli stimati dal modello KPP. Lo scalare G , al contrario della variabile di progresso, non è uno scalare trasportato, e non è quindi soggetto al CGD; l'approccio PDF, basato su una distribuzione rilevata sperimentalmente, elimina l'empiricità alla base del modello EDC che sottostima l'effetto delle fluttuazioni turbolente sul fronte di fiamma.

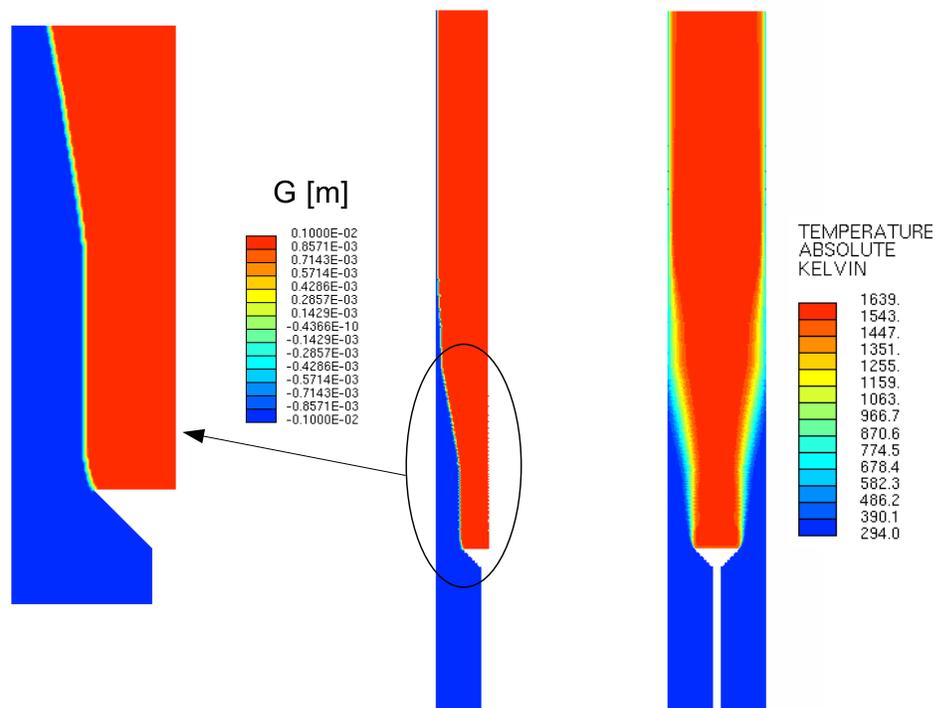


Figura 6.23: Mappa di temperatura e dello scalare G , combustore **vdb**

In figura 6.24 riportiamo l'andamento, sul fronte di fiamma, dello scalare $\tilde{\sigma}_T$ (a cui è associata S_T) e dello spessore della fiamma turbolenta, $\delta_T = \widetilde{G''^2}^{1/2}$: le curve sono state ottenute in funzione di un'ascissa curvilinea definita sul fronte di fiamma.

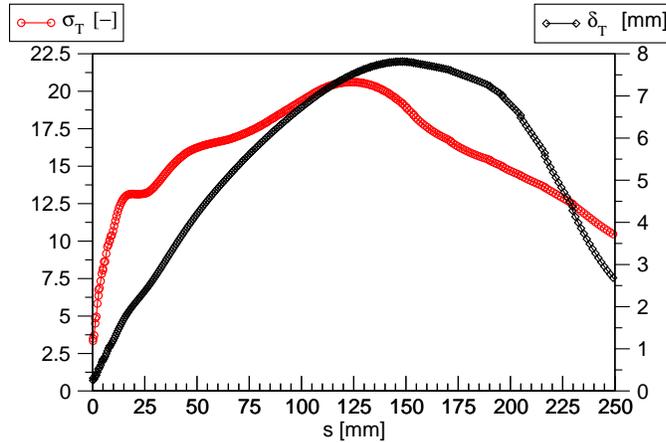


Figura 6.24: Andamento di σ_T e δ_T sul fronte di fiamma

E' interessante rilevare il progressivo aumento del *flame brush* fino all'attacco della fiamma a parete, dove l'elevato *stretching* provoca la sostanziale estinzione della reazione. Gli andamenti mostrati in figura 6.24 sono qualitativamente in accordo con quelli rilevati da Herrmann, [31].

In figura 6.25 riportiamo una visualizzazione delle curve di livello della fiamma, espresse dalle isolinee di \tilde{G} . Rileviamo la forte curvatura in corrispondenza del punto di attacco della fiamma: la curva $\tilde{G} = 0$ degenera di fatto in un punto, determinando un campo di isolinee costituito localmente da un insieme di circonferenze. Nella stessa figura sono riportate le curve iso-varianza, che si presentano sempre ortogonali alle isolinee \tilde{G} .

Concludiamo la prima fase dell'analisi del combustore **vdb**, mostrando, tramite i profili radiali di T , CH_4 e H_2O , un confronto tra i modelli EDC-DC, KPP e *Level Set* (figura 6.26 e seguenti).

Osserviamo la conferma di quanto accennato inizialmente, rilevando la complessiva maggiore accuratezza del modello *Level Set* nella ricostruzione del campo di temperatura, come confermano i profili delle specie chimiche principali.

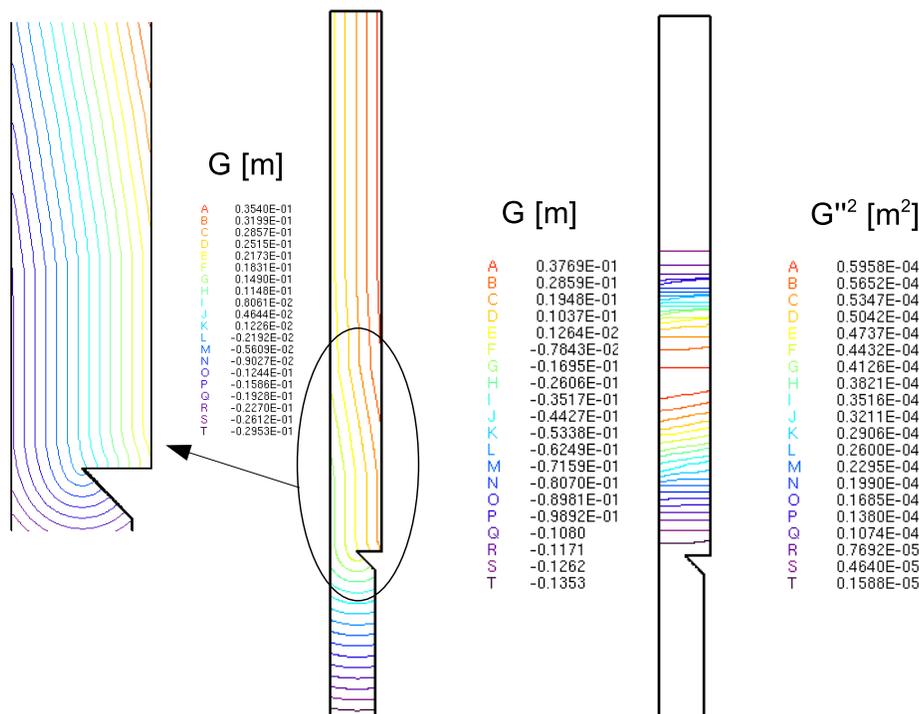


Figura 6.25: Distribuzione delle isolinee di G e della varianza

6.4.1.1 Effetto dello *stretching* e del *wrinkling* sulle emissioni di CO

La principale caratteristica del modello *Level Set*, rispetto ai modelli flamelet basati sulla variabile di progresso e sull'approccio BML, è la capacità di predire le concentrazioni delle specie intermedie, principalmente CO , grazie alla soluzione completa della struttura laminare interna della fiamma.

Il sostanziale disaccoppiamento della chimica laminare dalla fiamma turbolenta consente l'adozione di meccanismi chimici dettagliati, senza tuttavia incidere sui tempi di calcolo in maniera determinante come nel modello EDC-DC.

La predizione accurata della concentrazione di CO è delle varie specie intermedie, al contrario della stima del campo di temperatura, risulta estremamente sensibile alle due principali approssimazioni del modello *Level Set*; ci riferiamo allo stratagemma per quantificare lo *stretching* sulla flamelet laminare ed al modello per stimare una distanza dal fronte di fiamma medio

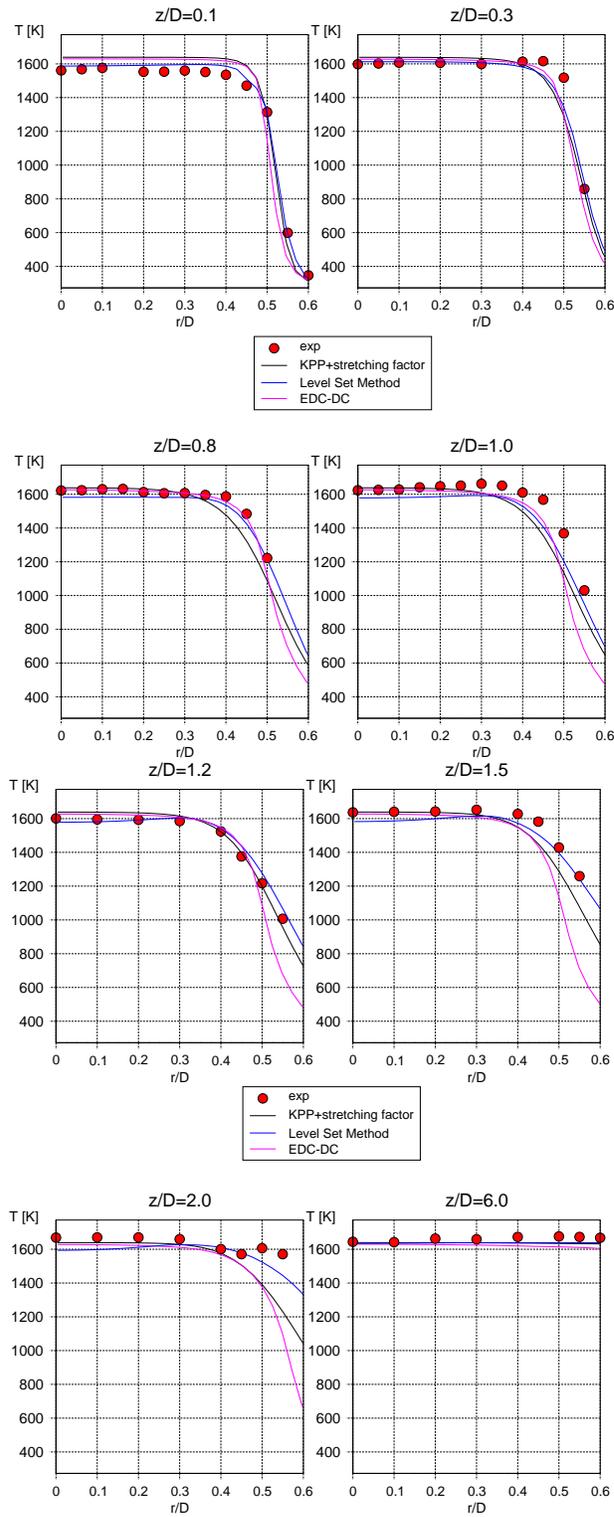


Figura 6.26: Confronto tra i modelli EDC-DC, KPP e *Level Set*, profili di T , combustore vdb

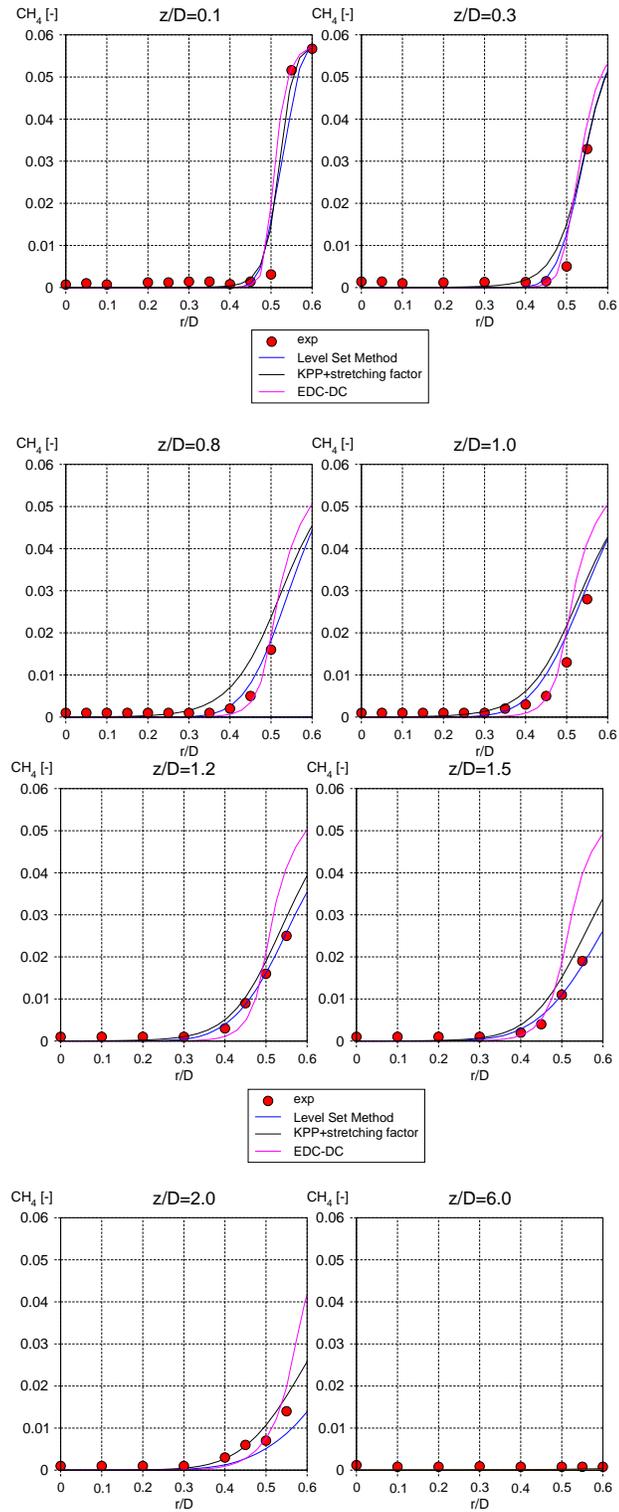


Figura 6.27: Confronto tra i modelli EDC-DC, KPP e *Level Set*, profili di CH_4 , test vdb

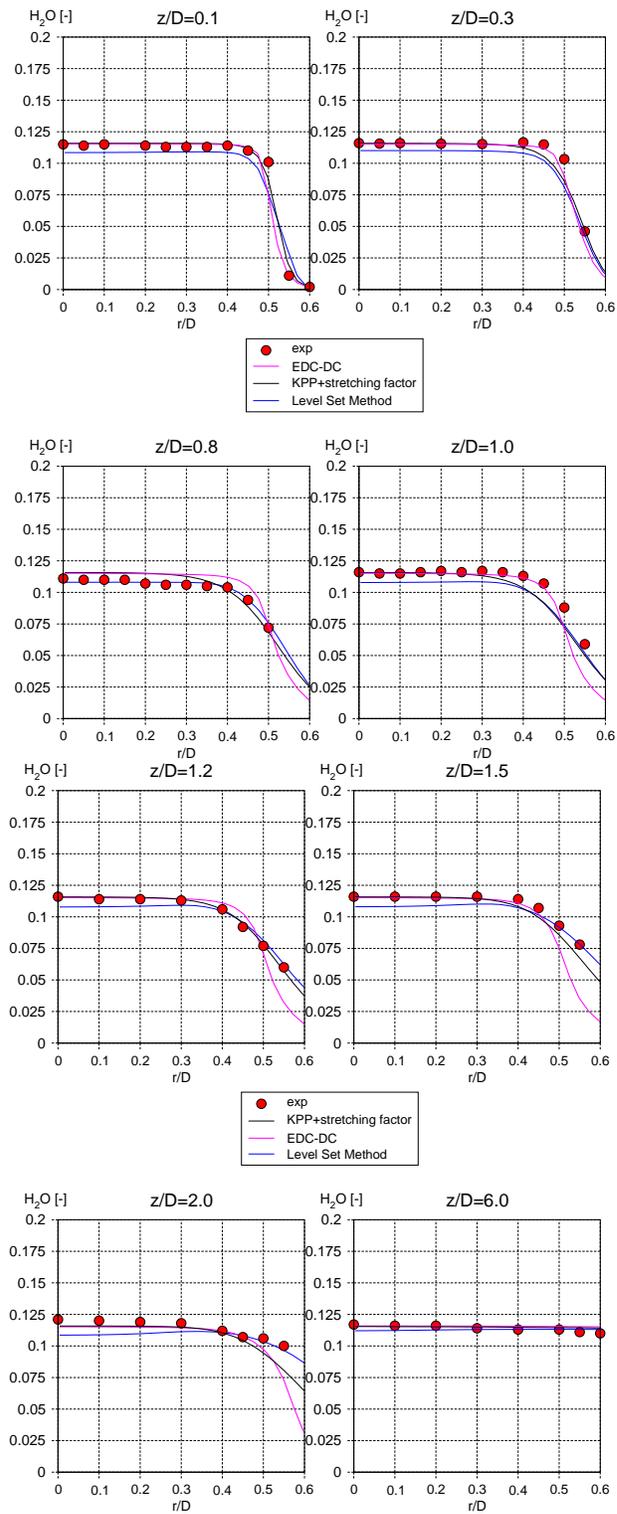


Figura 6.28: Confronto tra i modelli EDC-DC, KPP e *Level Set*, profili di H_2O , test vdb

che tenga conto del corrugamento (*wrinkling*) della fiamma istantanea.

La stima dello *strain* K della flamelet tramite la frequenza turbolenta caratteristica, ε/k , determina una forte dipendenza dal campo di turbolenza e quindi dal modello usato per chiudere le RANS. In figura 6.29 riportiamo la variazione del CO nelle flamelet, al variare dello *strain* K : la concentrazione è rilevata nel punto di ristagno della *twin flame*. La notevole variazione

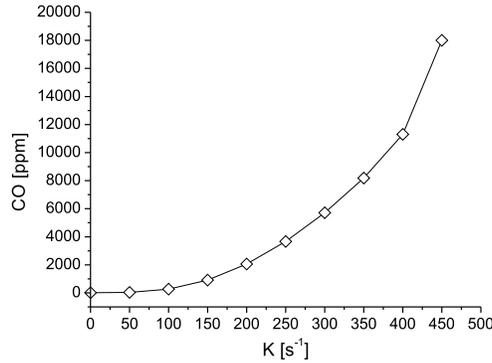


Figura 6.29: Variazione della concentrazione finale di CO nella flamelet al variare dello *strain*

della concentrazione laminare di CO si ripercuote direttamente sulla fiamma turbolenta tenendo anche conto che K viene stimato direttamente tramite $\tilde{K} = \varepsilon/k$, avendo assunto un delta di Dirac per la PDF dello *stretching*.

Lo stesso modello di *wrinkling* proposto da Peters, costituisce in realtà la soluzione più semplice di un fenomeno non ancora del tutto chiarito: l'ipotesi che il *flame surface area ratio*, $\tilde{\sigma}$ descriva il corrugamento della fiamma istantanea rispetto al fronte medio è sicuramente accettabile (vedi figura 6.6), ma la stima della distanza corretta tramite la semplice normalizzazione $\tilde{G}^* = \tilde{G}/\tilde{\sigma}$ non ha alcun riscontro fisico [56].

Analizziamo per primo l'effetto dello *stretching*. Nelle figure 6.30 e 6.31 riportiamo i profili radiali di T e CO , nelle varie sezioni, confrontando i risultati del calcolo *Level Set* già descritto (comprendente l'effetto dello *stretching* ma senza l'uso del modello di *wrinkling*) con i risultati della simulazione in cui è stato posto $K = 0$ ovunque, trascurando quindi gli effetti dello *stretching*.

L'effetto dello *stretching* consente di cogliere il *quenching* della reazione in prossimità della parete del *bluff-body* ($z/D < 0.3$) dove la temperatura stimata dal modello *Level Set* (1586 K) è superiore al valore sperimentale (1561 K) per il solo contributo del calore ceduto dal gas alla parete, assun-

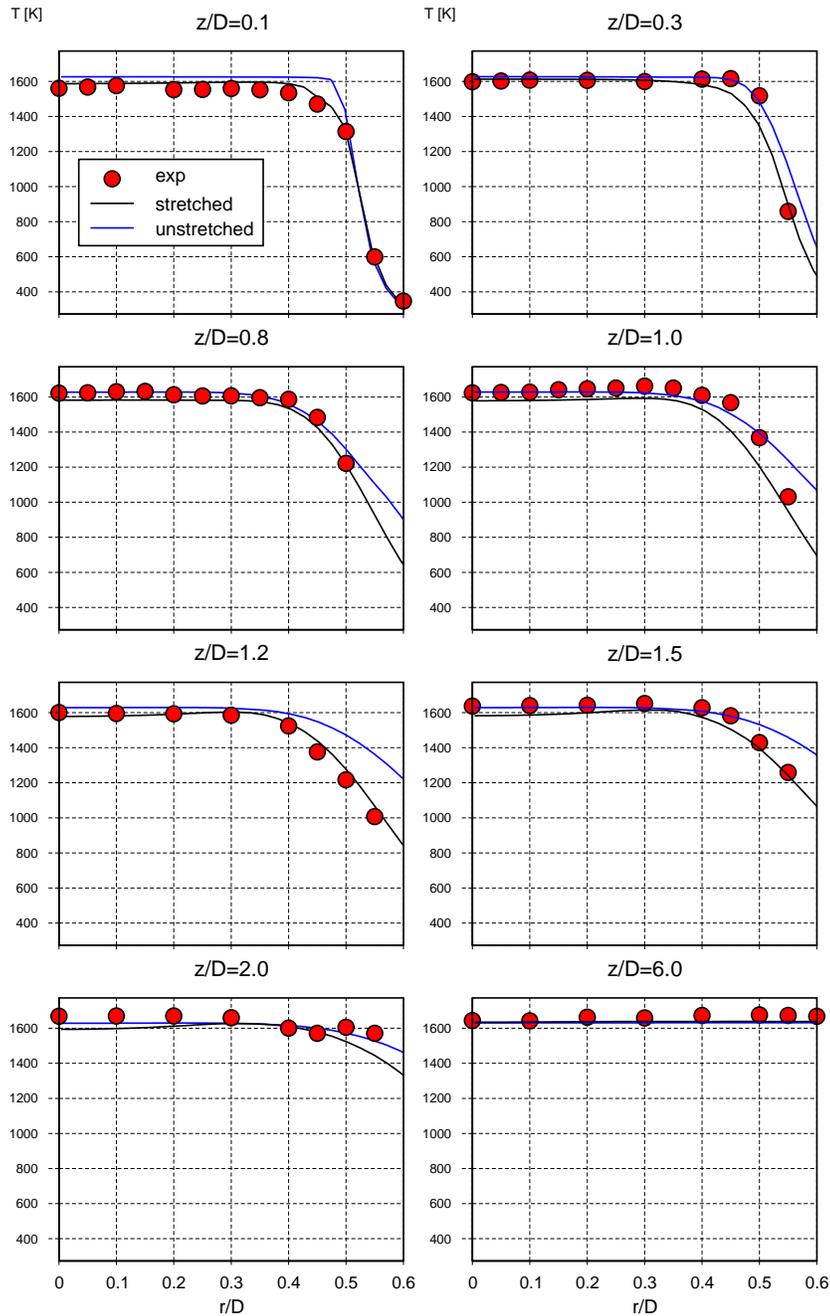


Figura 6.30: Effetto dello *stretching* sul campo di temperatura, combustore *vdb*

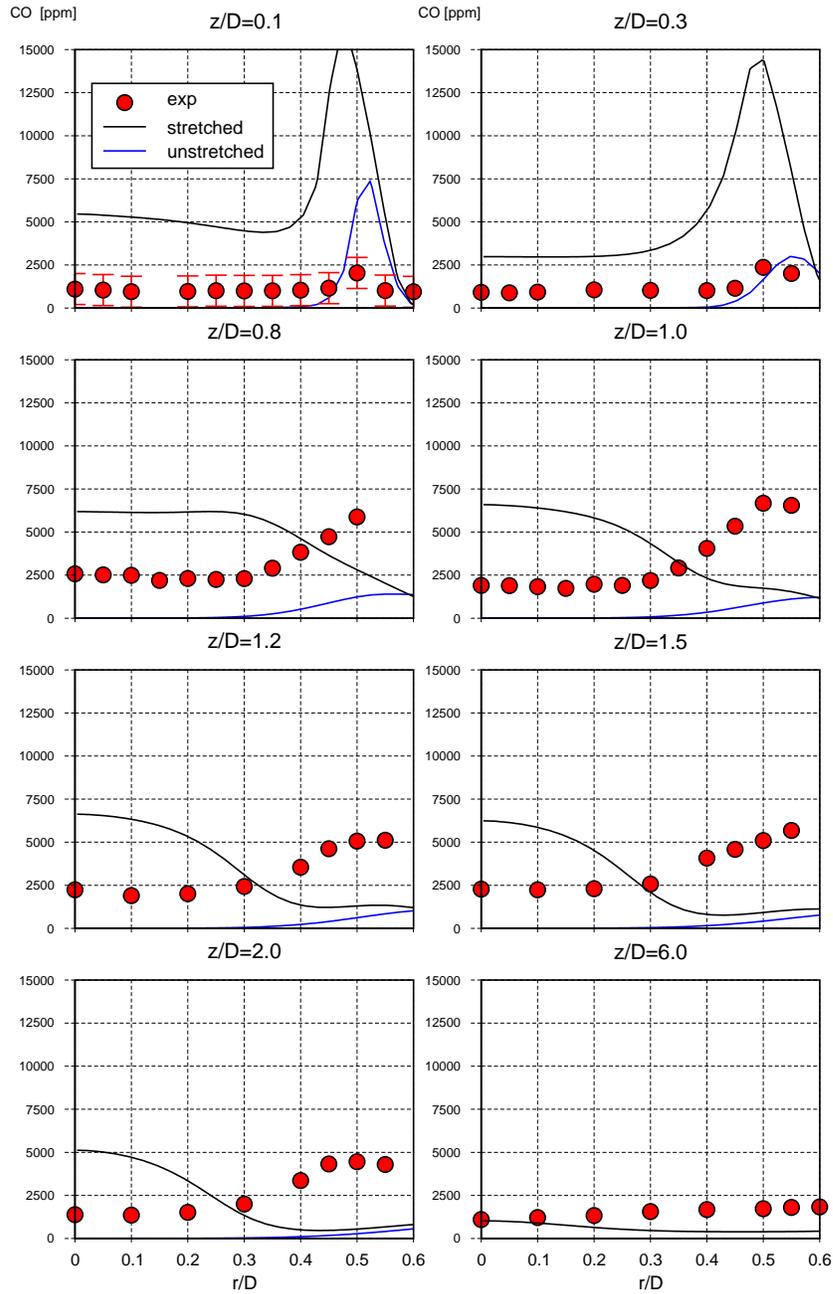


Figura 6.31: Effetto dello *stretching* sulla concentrazione di CO , combustore vdb

ta adiabatica nel calcolo. Nel calcolo senza *stretching* il modello predice, localmente, le condizioni di equilibrio (1639 K). In generale la perdita di sensibilità allo *stretching* determina una sensibile sovrastima della reattività complessiva, provocando una visibile riduzione della lunghezza della fiamma (circa il 15%).

Per quanto riguarda il *CO* osserviamo la diffusa sottostima nel caso di simulazione *unstretched*, ma l'aspetto che dobbiamo rilevare è la erronea riproduzione del campo di *CO*, anche nel caso di simulazione con effetti di *stretching*. Prendendo come riferimento la sezione $z/D = 1.0$, possiamo individuare i seguenti inconvenienti:

- Nella zona prossima all'asse del combustore ($r/D < 0.3$) i valori di *CO* stimati dal modello coincidono sostanzialmente con i valori della flamelet laminare per $\tilde{G} \gg 0$, essendo molto bassi i valori della varianza \tilde{G}''^2 . La sovrastima di *CO* in questa zona è quindi interamente legata al campo di *stretching*. In figura 6.32 riportiamo una visualizzazione combinata del fattore di *stretching*, \tilde{K} , e dell parte negativa della componente assiale di velocità. In figura è riportata l'estensione

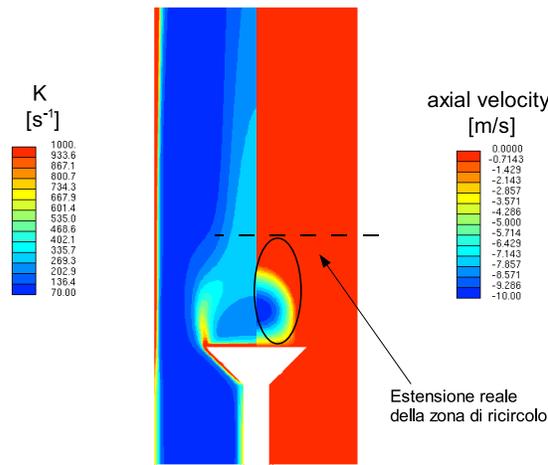


Figura 6.32: Effetto sul campo di *stretching* dell'estensione della zona di ricircolo

rilevata sperimentalmente della zona di ricircolo, mostrando una chiara sottostima da parte del calcolo. Si tratta di un effetto adducibile principalmente al modello di turbolenza, che tende a sovrastimare la produzione k . L'estensione della zona di ricircolo risultante dal calcolo con il modello EDC (figura 4.42) risulta più vicina al valore sperimenta-

le: è quindi rilevata una certa interazione tra il modello di combustione ed il modello di turbolenza, dal momento che i due calcoli (EDC e *Level Set*) sono del tutto coincidenti per quanto riguarda mesh e condizioni al contorno.

La sottostima delle dimensioni della zona di ricircolo, sia in direzione assiale che in direzione radiale, influenza la forma dello *shear layer*, che tende a chiudersi eccessivamente dietro la bolla di ricircolo: i valori alti di *stretching* in corrispondenza dell'asse del combustore giustificano la sovrastima di *CO*.

- Nella zona interessata dal *flame brush* ($r/D > 0.3$) la sottostima di *CO* è dovuta essenzialmente all'effetto del *wrinkling* della fiamma. Come mostrato in figura 6.8, il corrugamento della fiamma istantanea determina una distanza effettiva dal fronte inferiore a quella stimata dal valore medio di G . Ciò significa che la frequenza con cui viene visto il fronte di fiamma nella generica posizione dello spazio, è maggiore del valore previsto [54]: è così spiegabile la sottostima del *CO*, di fatto concentrato nell'*inner layer* della fiamma laminare. Come accennato il modello proposto da Peters prevede di normalizzare la distanza \tilde{G} tramite $\tilde{\sigma}$, il che significa porsi nel sistema di coordinate della flamelet laminare ($x_n = (G - G_0)/\sigma$) stimando il valore laminare di σ tramite il valore turbolento medio [56].

Nelle figure 6.33 riportiamo l'andamento del *CO* ottenuto mediante l'uso delle coordinate normalizzate, in modo da quantificare gli effetti del *wrinkling* della fiamma.

Come previsto la normalizzazione delle coordinate ha effetto solo in corrispondenza del *flame brush*, lasciando inalterata la sovrastima in corrispondenza dell'asse del combustore, ancora influenzata dall'errato campo di *stretching*. L'andamento ottenuto utilizzando coordinate normalizzate è qualitativamente in buon accordo con i valori sperimentali, rimanendo tuttavia una diffusa sovrastima: si tratta di un fenomeno rilevato anche in altri studi, dipendente, a nostro avviso, da una non accurata predizione dello *stretching*, e da una eccessiva semplicità del modello di *wrinkling*.

Per cercare di correggere l'effetto legato allo *stretching*, abbiamo operato una simulazione utilizzando una variante del modello $k - \varepsilon$ standard: il modello $k - \varepsilon$ RNG (*ReNormalization Group*). Il modello RNG si propone di

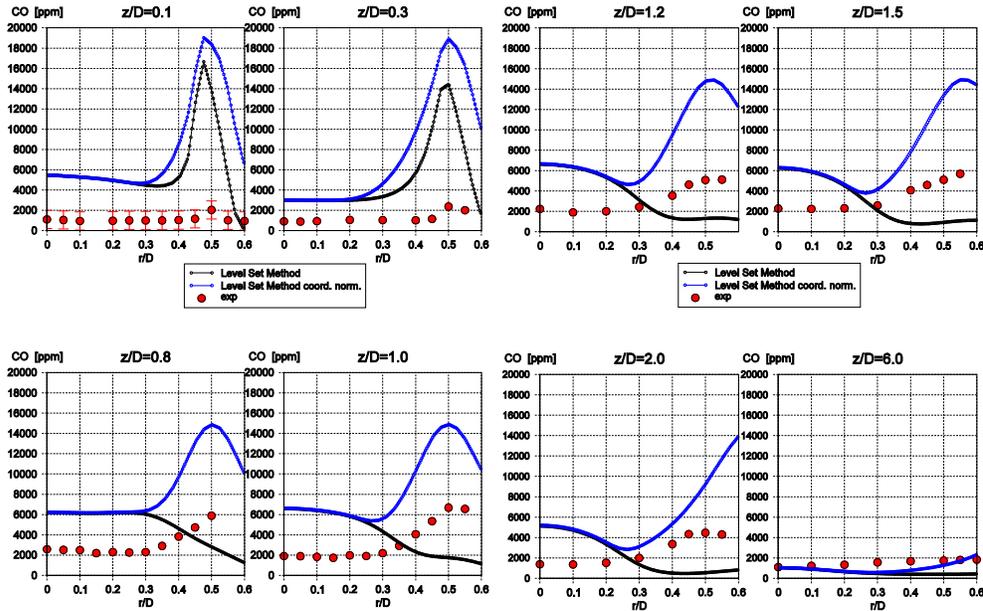


Figura 6.33: Concentrazione di CO con e senza modello di *wrinkling*, combustore vdb

limitare la sovrapproduzione di energia cinetica turbolenta laddove gli effetti di anisotropia delle fluttuazioni allontanano le condizioni locali dal campo di validità dell'ipotesi di *eddy viscosity* [29]. Operativamente il modello RNG interviene esclusivamente sull'equazione di ε (essendo la conservazione di k dedotta dalla stesse NS), introducendo un ulteriore termine sorgente dipendente dallo *strain* locale [29]. Il modello fornisce risultati mediamente più accurati del modello standard in quelle situazioni in cui gli effetti di distorsione del campo di moto sono predominanti (punti di ristagno, zone di ricircolazione).

La simulazione è stata svolta variando unicamente il modello di turbolenza e attivando l'uso delle coordinate normalizzate: le *look-up-table* sono state preparate utilizzando lo stesso set di soluzioni laminari usato per il modello $k - \varepsilon$.

In figura 6.35 riportiamo i profili radiali per la concentrazione di CO , mentre in figura 6.36 mostriamo gli andamenti della temperatura media. Per quanto riguarda il CO rileviamo un deciso miglioramento dell'accuratezza complessiva, con una corretta stima della concentrazione sull'asse del bruciatore ed una più contenuta sovrastima nella *flame brush*, soprattutto per le sezioni più a valle: è interessante osservare il buon accordo per le concentrazioni allo scarico del combustore ($z/D = 6.0$).

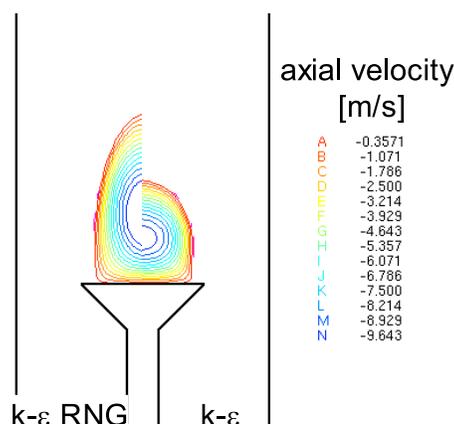


Figura 6.34: Confronto zona di ricircolo, modelli $k-\varepsilon$ standard e RNG, combustore **vdb**

A conferma delle considerazioni fatte in precedenza, riportiamo in figura 6.34 il confronto tra le estensioni della zona di ricircolo predette dai modelli $k-\varepsilon$ standard e RNG: il modello RNG stima uno sviluppo assiale della bolla in linea con i valori sperimentali.

Per quanto riguarda il campo di temperatura rileviamo alcune variazioni rispetto alla simulazione con il modello $k-\varepsilon$, di entità comunque contenuta e non tali da pregiudicare l'accuratezza complessiva.

Concludiamo questa analisi rilevando che una sicura causa della sovrastima della concentrazione di CO nel *flame brush* è la parziale inadeguatezza delle flamelet con configurazione *twin flame* impiegate in questo lavoro. Nelle condizioni operative del combustore, le flamelet usate presentano un *stretching* critico (*quenching*) pari a circa $500s^{-1}$: ampie zone della fiamma sono caratterizzati da valori di \tilde{K} prossimi al limite di estinzione, con conseguenti alte concentrazioni di CO . Come confermato dagli stessi autori delle misure sperimentali, la configurazione più adeguata è la *counter flow opposed flame* (vedi figura 6.16), interessata da valori dell'*stretching* critico molto più elevati. La configurazione *twin flame* rimane indicata per la zona finale della fiamma (*post flame*, $z/D > 2.0$) dove si rileva infatti una accuratezza maggiore nella stima della concentrazione di CO .

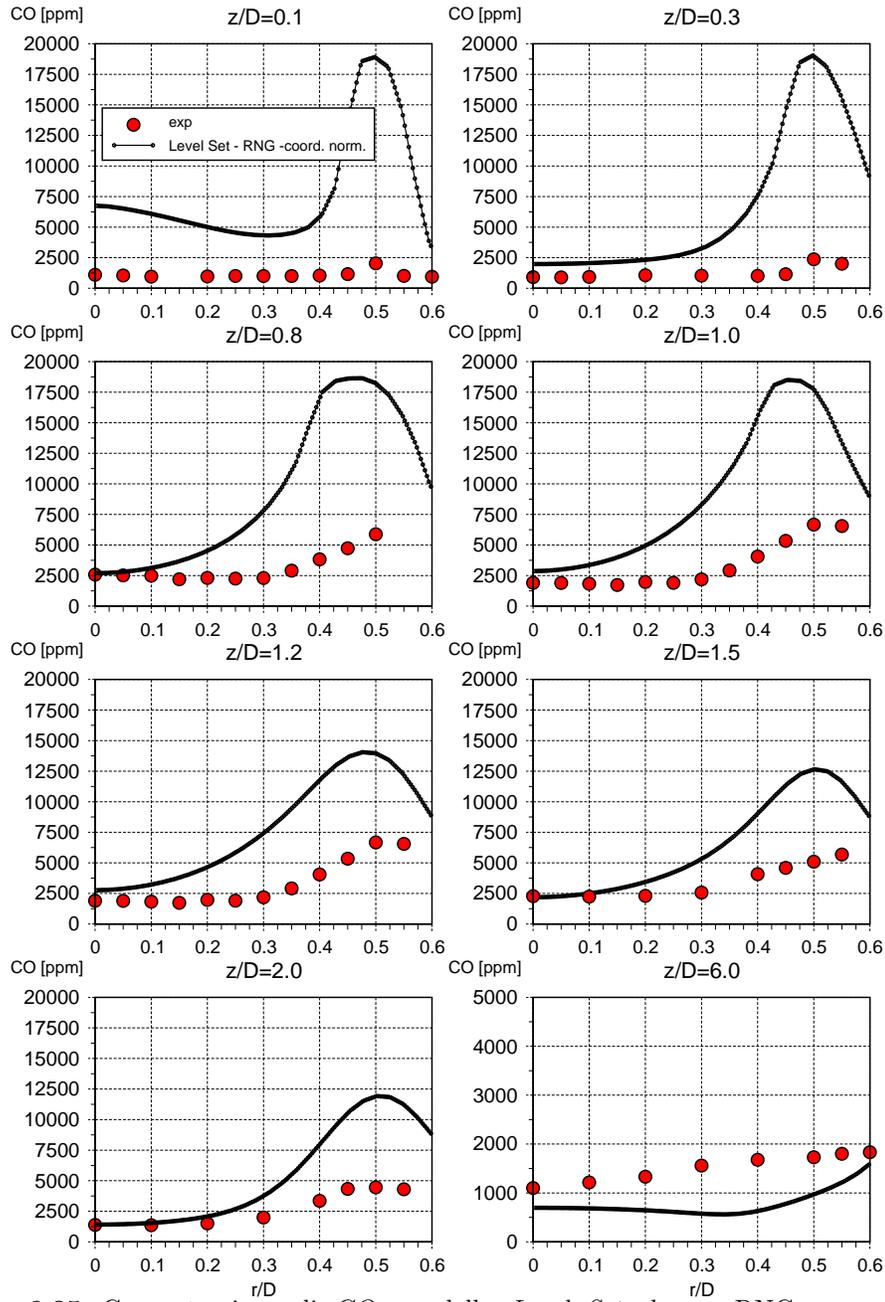


Figura 6.35: Concentrazione di CO, modello *Level Set*, $k - \varepsilon$ RNG e coordinate normalizzate, combustore **vdb**

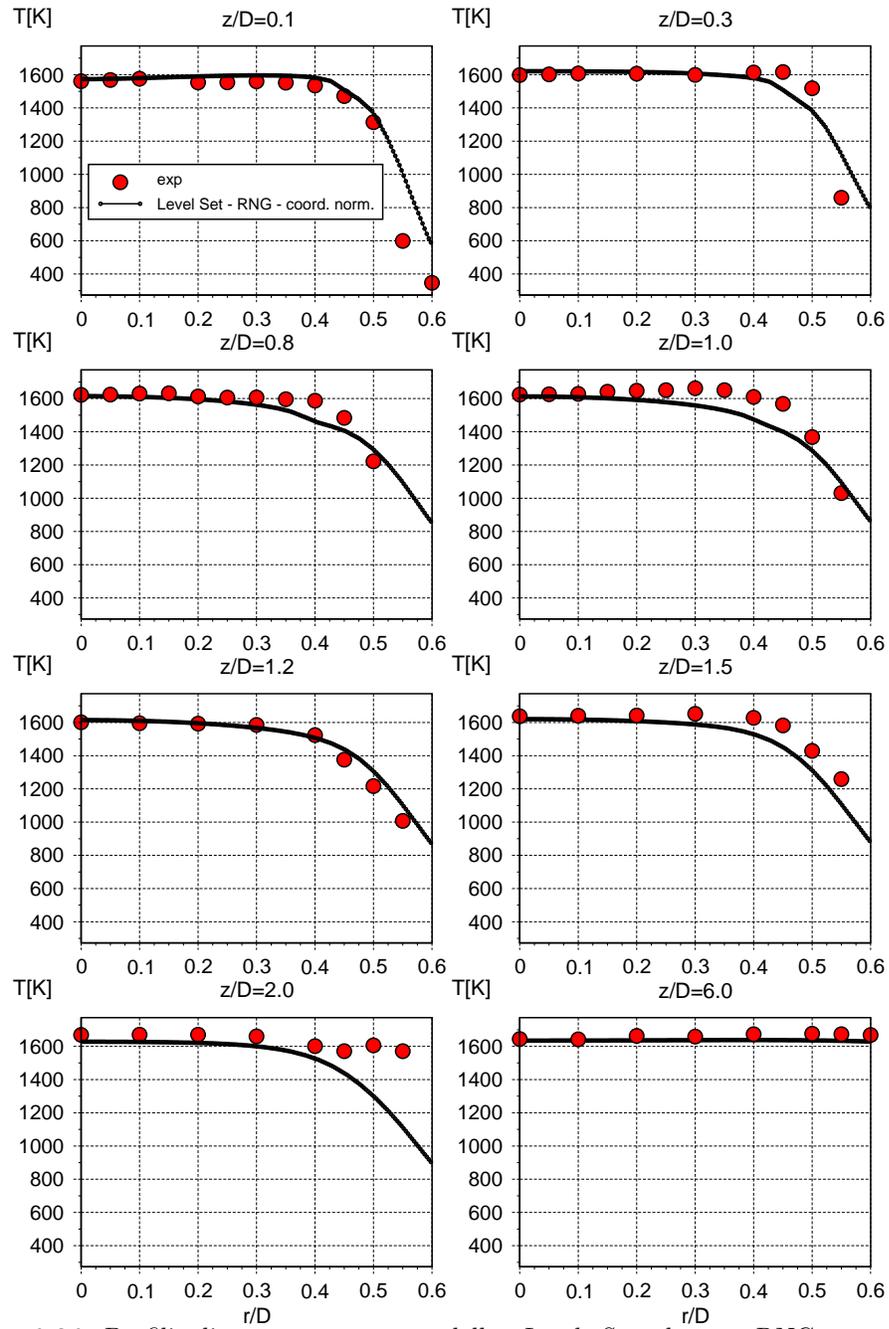


Figura 6.36: Profili di temperatura, modello *Level Set*, $k - \varepsilon$ RNG, coordinate normalizzate

6.4.2 Bruciatore k160a NP

Concludiamo l'analisi del modello *Level Set* sviluppato, confrontando i risultati ottenuti nelle simulazioni del combustore sperimentale NP **k160a**, che, ricordiamo, costituisce un modello in scala, e a pressione atmosferica, del combustore tubolare del turbogas GE10. Per una descrizione della geometria del dispositivo e delle condizioni al contorno delle prove, rimandiamo al paragrafo §4.5.6.

La mesh utilizzata per la presente simulazione è la stessa descritta in precedenza. Lo schema prevede il posizionamento della *inlet boundary* numerica proprio in corrispondenza della sezione di ingresso del combustore (vedi figura 4.56): il motivo di questa scelta è legato alla necessità di sfruttare i profili di velocità e turbolenza rilevati sperimentalmente proprio in corrispondenza della sezione di gola.

Nella simulazione con il modello *Level Set*, il posizionamento della *inlet* numerica proprio in corrispondenza del punto di ancoraggio della fiamma ha causato alcune difficoltà di convergenza. Ciò è dovuto, essenzialmente, alla discontinuità imposta al campo dello scalare \tilde{G} dal processo di reinizializzazione, che si colloca proprio sulla frontiera numerica. Da momento che al campo di \tilde{G} è associato il termine sorgente nell'equazione dell'energia, il solutore CFD è incapace di rispettare la condizione al contorno per la temperatura, imposta pari a T_u su tutta la sezione.

Si tratta di un inconveniente che può essere risolto, in condizioni normali, spostando la *inlet* numerica del modello più a monte, prevedendo lo studio dell'intero canale di premiscelazione. La necessità, tuttavia, di utilizzare i profili di temperatura e turbolenza sperimentali, misurati proprio sulla sezione di gola, e di confrontare i risultati con gli altri modelli di combustione, ci ha spinto ad operare una semplificazione dello schema *Level Set* per questo caso.

Anziché risolvere la conservazione dell'energia e l'equazione di stato, recupereremo dalla libreria flamelet direttamente i valori di $\bar{\rho}$ e \tilde{T} , ottenuti mediante l'integrazione della PDF e memorizzati come funzione dei tre scalari caratteristici del modello, \tilde{G} , $\widetilde{G''^2}$ e \tilde{K} . Abbiamo quindi messo a punto una versione semplificata del modello nella quale la libreria flamelet è costituita dalle seguenti funzioni:

$$\tilde{T} = \tilde{T}(\tilde{G}, \widetilde{G''^2}, \tilde{K}) \quad \bar{\rho} = \bar{\rho}(\tilde{G}, \widetilde{G''^2}, \tilde{K}) \quad S_L = S_L(\tilde{K})$$

Con questo approccio, utilizzato anche in altri lavori ([54] e [66]), lo scalare \tilde{G} viene utilizzato in maniera analoga alla variabile di progresso \tilde{c} , imponendo l'adiabaticità complessiva del sistema.

Abbiamo risolto il combustore **k160a** nelle tre condizioni operative descritte in tabella 4.10, confrontando le fiamme così ottenute con i risultati del modello KPP. Dobbiamo tuttavia precisare che i valori di velocità laminare *unstretched*, S_L^0 , risultanti dal calcolo delle tre librerie flamelet per i casi **A**, **B** e **C**, sono leggermente diversi dai valori dedotti dalla correlazione di Bui-Pham ed usati nella simulazione descritta in §5.4.2: per rendere omogeneo il confronto abbiamo risolto nuovamente i 3 casi tramite il modello KPP usando i valori di S_L^0 forniti dal codice Chem1D, nel quale è stato impiegato il meccanismo *skeletal* [70] (vedi tabella 6.2).

	λ [-]	S_L^0 [cm/s]
test A	1.31	22.72
test B	1.48	16.58
test C	1.66	11.46

Tabella 6.2: Velocità laminari *unstretched* calcolate dal solutore Chem1D, combustore **k160a**

La simulazione è stata svolta adottando il modello di turbolenza $k - \varepsilon$ standard, esattamente come per il modello KPP.

In figura 6.37 riportiamo alcuni confronti tra la fiamma calcolata dal modello *Level Set* e dal modello KPP nei tre casi: per chiarezza, per ogni caso è stata composta una sezione completa del combustore, utilizzando per le due metà le isolinee di temperatura ottenute con i due modelli.

Osserviamo un buon accordo tra i due modelli per quanto riguarda la lunghezza interna del cono di fiamma al variare del rapporto di equivalenza. Possiamo inoltre rilevare una analoga ampiezza del *flame brush* nella parte iniziale dello *shear layer*, nei tre casi, osservando uno spessore di fiamma maggiore per il modello KPP in corrispondenza dell'apice (*tip*) della fiamma. Questa differenza può essere giustificata osservando che, in corrispondenza dell'apice della fiamma, i due modelli hanno comportamento opposto:

- Il modello KPP tende a sovrastimare l'ampiezza del *flame brush* in prossimità del *tip* della fiamma: il progressivo aumento del numero di

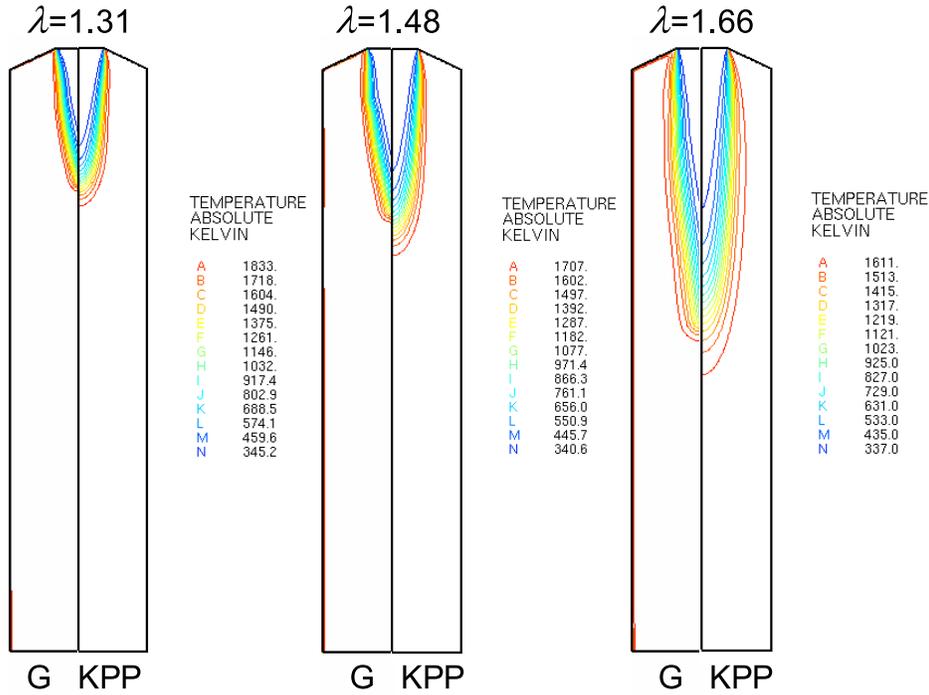


Figura 6.37: Confronto tra i modelli *Level Set* e KPP nei tre casi selezionati del bruciatore **k160a**

Damköhler e la progressiva riduzione del numero di *Karlovitz* lungo il fronte, per via della riduzione della turbolenza ad opera dell'azione dissipativa della fiamma, portano il sistema a lavorare in prossimità della zona interessata dal CGD. Il modello KPP tende quindi a sovrastimare l'ampiezza del fronte di fiamma, assumendo la sola componente lungo gradiente del trasporto turbolento.

- La versione semplificata del modello *Level Set* qui utilizzata, che assume una perfetta adiabaticità, trascura la diffusione termica nel gas. L'azione della diffusione termica nel *flame brush* è particolarmente accentuata nel *tip* della fiamma imponendo un rilassamento dei gradienti di temperatura e determinando quindi spessori di fiamma più ampi [59].

Concludiamo l'analisi del testcase riportando, in figura 6.38, le isolinee dello scalare \tilde{G} che definiscono la struttura della fiamma.

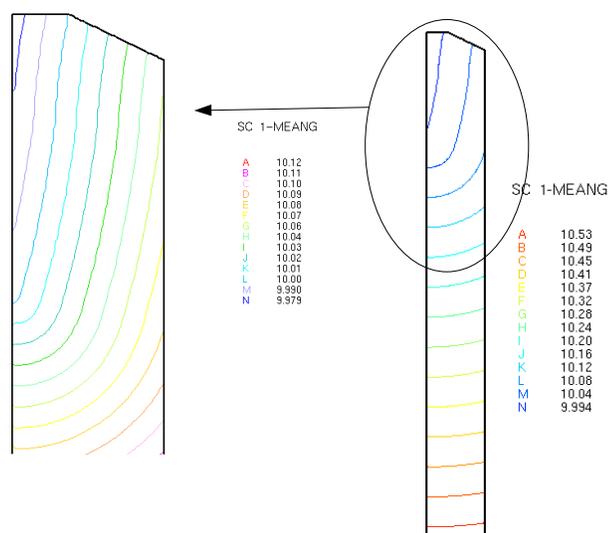


Figura 6.38: Isolinee dello scalare G per il test A

6.5 Considerazioni finali

Concludiamo questa parte del lavoro, riepilogando l'attività svolta:

- Sviluppo di un modello basato sull'approccio *Level Set Flamelet* valido per fiamme premiscelate turbolente operanti nei regimi flamelet (*corrugated zone* e *thin reaction zone*). Il modello, basato sulle recenti teorie formulate da Peters ([56]), si basa sulla soluzione di un apposito scalare non reattivo, \tilde{G} , che quantifica la posizione del fronte di fiamma turbolento medio, permettendo inoltre di stabilire, per ogni punto dello spazio, la distanza dal fronte di fiamma stesso. In quanto scalare non reattivo G non può risentire di eventuali fenomeni di trasporto turbolento contro gradiente.

La velocità di propagazione della fiamma turbolenta viene stimata tramite la soluzione di un'apposita equazione di trasporto per il *flame surface area ratio* ($\tilde{\sigma}_T = S_T/S_L - 1$).

La fiamma istantanea turbolenta è descritta come un insieme di strutture laminari sottili nelle quali sono concentrate le reazioni chimiche in gioco (*thin reactive diffusive layer* o flamelet), soggette al campo turbolento esterno, assunto chimicamente inerte. Queste flamelet sono valutate esternamente al modello e sono risolte mediante lo studio di fiam-

me laminari quasi-1D nelle quali si tiene conto degli effetti di *stretching* aerodinamico a cui sono soggette nel campo di moto turbolento.

La composizione della fiamma turbolenta, e quindi la valutazione degli effetti delle fluttuazioni turbolente sulle flamelet, passa attraverso l'assunzione della forma della PDF della distanza dal fronte di fiamma turbolento. Si considera una distribuzione Gaussiana (confermata sperimentalmente) per la quale è necessario risolvere un'ulteriore equazione di trasporto per la varianza $\widetilde{G''^2}$.

- Implementazione del modello nell'ambito del codice CFD commerciale STAR-CDTM. La soluzione delle tre grandezze scalari caratteristiche, \widetilde{G} , $\widetilde{G''^2}$ e $\widetilde{\sigma}_T$, non può essere condotta con i consueti schemi numerici validi per i generici scalari trasportati. La natura di grandezze condizionate ai valori sul fronte di fiamma e le condizioni di esistenza ed unicità della PDF assunta, richiedono l'adozione di opportuni schemi di reinizializzazione (\widetilde{G}) e redistribuzione ($\widetilde{G''^2}$ e $\widetilde{\sigma}_T$) al termine di ogni iterazione del solutore principale. Sono stati ideati alcuni schemi numerici basati su un approccio interamente geometrico, per il quale non esistono in letteratura esempi precedenti applicati a mesh non strutturate.
- L'analisi delle flamelet laminari viene affidata al solutore Chem1D, gentilmente messo a disposizione da de Goey ([13]): nello stato attuale vengono contemplate fiamma laminari quasi-1D nella configurazione *counter flow twin flame*. La soluzione delle flamelet viene pre-integrata tramite la PDF di G e memorizzata sottoforma di *look-up-tables* in una serie di *flamelet library*.

Lo studio di validazione del modello, ancora parzialmente in corso, è stato condotto principalmente mediante l'analisi del *Vanderbilt Combustor*, ampiamente descritto nelle sezioni precedenti. Il test si rivela particolarmente interessante in quanto premette di testare l'approccio *Level Set* nel regime di combustione tipico delle turbine a gas a basse emissioni di NO_x : rispetto a studi analoghi mostrati in letteratura, il test in esame opera con valori del Re_T molto elevati determinando valori molto alti del *surface area ratio* ($\widetilde{\sigma}_T > 15 - 20$).

Il confronto con i dati sperimentali e con i risultati ottenuti con i modelli EDC-DC e KPP qui analizzati, mette in luce un ottimo comportamento

del modello *Level Set* nella ricostruzione del campo di temperatura e delle principali specie chimiche. Si rileva una prevista sensibilità alla dimensione delle celle di calcolo, per via dell'approssimazione di ordine zero, rispetto alle coordinate dei centroidi delle celle, nella ricostruzione della posizione del fronte di fiamma turbolento.

Per quanto riguarda la stima delle specie intermedie, essenzialmente *CO*, rileviamo la necessità di una precisa stima del campo di *strain* nella zona di ricircolo della fiamma, dal momento che la configurazione di flamelet usata determina una forte sensibilità allo *stretching* della concentrazione di *CO* nei prodotti di reazione. Abbiamo visto come l'adozione di modelli $k - \varepsilon$ avanzati (RNG) permetta di stimare correttamente l'estensione della zona di ricircolo e quindi il campo del fattore di *stretching* ε/k , determinando un deciso miglioramento nella stima del *CO*. Per la corretta risoluzione del profilo di *CO* nel *flame brush* occorre, come visto, ricorrere all'impiego di un processo di normalizzazione della coordinata \tilde{G} , in modo da tenere conto dell'effetto di corrugamento (*wrinkling*) del fronte di fiamma istantaneo nella stima della distanza dal fronte di fiamma medio. Abbiamo rilevato, tuttavia, che il processo di normalizzazione può in parte influenzare la stima del campo di temperatura, qualora si abbiano valori molto alti del *surface area ratio* scaturiti da sovrastime dell'energia cinetica turbolenta: anche in questo caso, l'uso di un modello di turbolenza capace di porre condizioni di realizzabilità allo schema $k - \varepsilon$ standard in presenza di zone di separazione (RNG), rende ragione del miglior comportamento dell'intero modello *Level Set*.

Nell'analisi del testcase **k160a**, abbiamo rilevato un buon accordo con il modello KPP basato sull'approccio flamelet di *Bray-Moss-Libby*: la semplificazione adottata in questo caso per il modello *Level Set*, che prevede l'imposizione locale diretta della temperatura media a partire dai valori di \tilde{G} e \tilde{G}''^2 (adiabaticità), non sembra influenzare significativamente l'accuratezza complessiva della soluzione, rilevando unicamente una probabile sottostima dell'ampiezza dello spessore della fiamma turbolenta.

Per quanto riguarda i tempi di calcolo, occorre distinguere tra il tempo necessario alla preparazione delle librerie flamelet e il tempo per la soluzione CFD completa. In tabella 6.3 riportiamo le dimensioni dell'look-up-table usate per il testcase **vdb**.

La preparazione delle tabelle richiede, con una CPU x86 a 2.4 GHz, circa 8 ore di calcolo, partendo dalla soluzione delle fiamme laminari e concludendo

	N	min.	max.	passo
\tilde{G}	601	-0.025 m	+0.025 m	$8.333e^{-5}m$
$\widetilde{G''^2}$	101	$0.1e^{-7} m^2$	$0.1e^{-7} m^2$	$0.1e^{-5} m^2$
\tilde{K}	91	$0 s^{-1}$	$450 s^{-1}$	$5 s^{-1}$

Tabella 6.3: Dimensioni caratteristiche delle *flamelet libraries* impiegate per il testcase **vdb**

con la loro integrazione tramite la PDF. La richiesta di memoria per l'allocazione delle tabelle è di circa 200 Mbyte, contro un'allocazione richiesta per i modelli EDC di circa 30 Mbyte.

La soluzione del combustore **vdb**, sulla stessa mesh usata per i modelli EDC e KPP, richiede circa 4 ore di calcolo, paragonabili al tempo richiesto dal modello KPP. Complessivamente, quindi, il ricorso alle *look-up-table* consente di gestire una chimica estremamente dettagliata con un notevole contenimento del tempo macchina, incidendo unicamente sulla memoria allocata. Il tempo macchina necessario alla generazione delle flamelet, può essere ammortizzato nel contesto di una campagna di test numerici che non prevedano l'alterazione delle caratteristiche termodinamiche e stechiometriche complessive.

Capitolo 7

Esempio applicativo: il combustore del turbogas GE10 (K-ONE DLN)

Contenuto

7.1	Introduzione	262
7.2	Descrizione del combustore	262
7.3	Simulazione numerica	264
7.3.1	Impostazioni del modello EDC-DC	268
7.3.1.1	Impostazione del modello KPP	268
7.4	Risultati delle simulazioni	269
7.4.1	Analisi della fiamma	271
7.4.2	Meccanismo di stabilizzazione	272
7.4.3	Composizione allo scarico. Completamento della reazione	274
7.5	Considerazioni finali	276

7.1 Introduzione

Coccludiamo il lavoro, descrivendo in questo capitolo lo studio del combustore K-ONE DLN della turbina a gas GE10 di produzione GE-Nuovo Pignone. Si tratta di un combustore monotubolare o “a silos”, disposto con asse ortogonale all’asse della macchina (vedi figura 7.1) nel quale il rilascio termico viene realizzato mediante una fiamma premiscelata magra aria-metano, stabilizzata mediante un getto pilota diffusivo. Il dispositivo rientra quindi nella categoria dei combustori *Dry-Low NO_x* basati sulla tecnologia *lean premixed*.

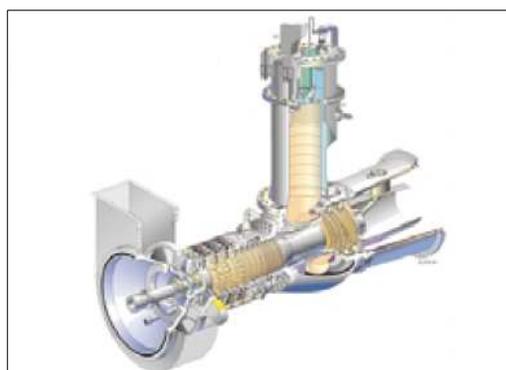


Figura 7.1: Rappresentazione schematica del turbogas GE10 (fonte GE-NP)

Il combustore è stato analizzato operando alcune semplificazioni della geometria completa, in modo da poter impiegare una schematizzazione bidimensionale. Il modello impiegato, tuttavia, analizza tutti i principali sottosistemi del combustore, valutando il processo di preparazione della miscela reagente e tenendo conto dell’iniezione di aria per il raffreddamento delle pareti e per la diluizione dei prodotti di reazione.

Il calcolo è stato effettuato con i modelli di combustione EDC-DC e KPP descritti in precedenza: l’impiego del modello *Level Set Flamelet* non è ancora possibile per l’incapacità di gestire fiamme parzialmente premiscelate.

7.2 Descrizione del combustore

Il combustore è costituito da un tubo di fiamma cilindrico, sagomato all’estremità superiore da una superficie conica. La miscela principale è iniettata

nella zona di reazione mediante una sezione anulare che costituisce la connessione tra il cosiddetto “cappello” del combustore e il tubo di fiamma (vedi figura 7.2). La fiamma pilota diffusiva è realizzata con l’iniezione di una frazione di combustibile tramite 32 ugelli disposti alla periferia esterna della sezione di ingresso della miscela reagente nel liner.

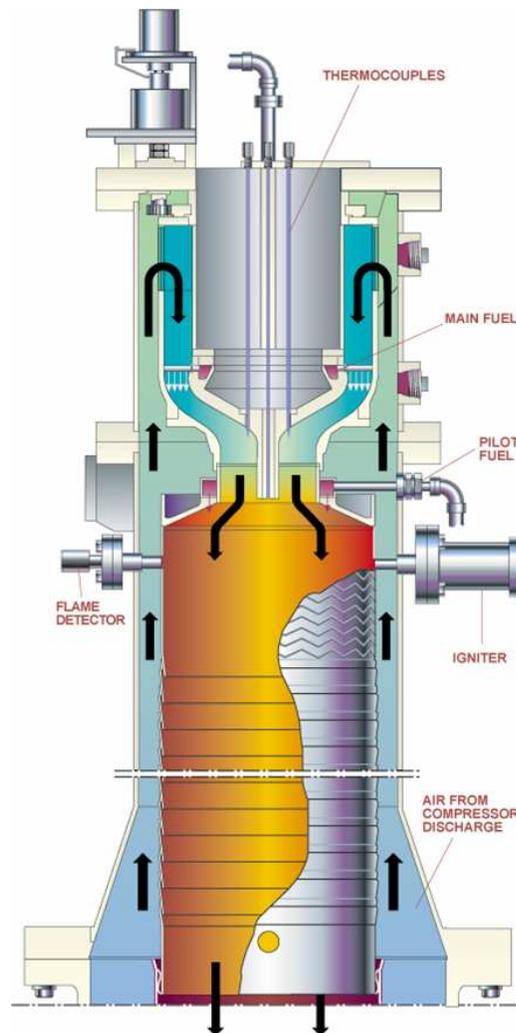


Figura 7.2: Rappresentazione schematica del combustore GE10 (proprietà GE-NP)

Il cappello è analogo a quello mostrato per il combustore **k160a**, ed è costituito da un meato di premiscelazione a sviluppo anulare con moto centripeto della corrente di aria. Nella parte iniziale del canale si trovano i dispositivi di iniezione del combustibile: si tratta di 24 piccoli tubi a sviluppo radiale disposti in maniera equidistribuita attorno all’asse del combustore. Ciascun

tubo è interessato da un certo numero di fori di iniezione del combustibile. Nello stesso meato sono disposte alcune palette, ad angolo di calettamento variabile, capaci di imprimere una componente di *swirl* alla miscela reagente. In condizioni di carico nominale, FSFL¹, in cui abbiamo simulato il combustore, le palette sono regolate in modo da eliminare la componente di velocità tangenziale residua, indotta dalla non uniforme adduzione dell'aria nel cappello: la miscela reagente entra nella zona di reazione diretta in maniera pressoché assiale.

Il liner cilindrico è raffreddato principalmente mediante film-cooling, anche se sono previsti sistemi di promozione della turbolenza dal lato freddo per incrementare il coefficiente di scambio termico. La diluizione dell'aria in eccesso avviene mediante 4 fori di adduzione nella parte terminale del combustore.

In tabella 7.1² riportiamo le principali condizioni operative della macchina in regime FSFL.

	TCD [K]	PCD [bar]	\dot{m}_{air} [kg/s]	\dot{m}_{fuel} [kg/s]
FSFL	686.0	15.7	37.0	0.728

Tabella 7.1: Condizioni al contorno del combustore in condizioni di carico nominale

7.3 Simulazione numerica

La mesh utilizzata per il calcolo è stata messa a disposizione da GE-NP, in quanto già impiegata in un precedente studio del combustore. Il modello è costituito da un unico strato di celle esadrice che rappresenta una porzione angolare di 5° (1/72 di angolo giro), per un totale di circa 80000 elementi. Per poter rappresentare la geometria completa del combustore su una mesh 2D tutti i fori di iniezione dell'aria di raffreddamento e di diluizione e i 32 ugelli per l'iniezione del combustibile pilota, sono stati schematizzati come slot (fessure) di sezione efficace equivalente .

¹Full Speed Full Load

²TCD e PCD indicano, rispettivamente, la *Temperature* e *Pressure Compressor Discharge*

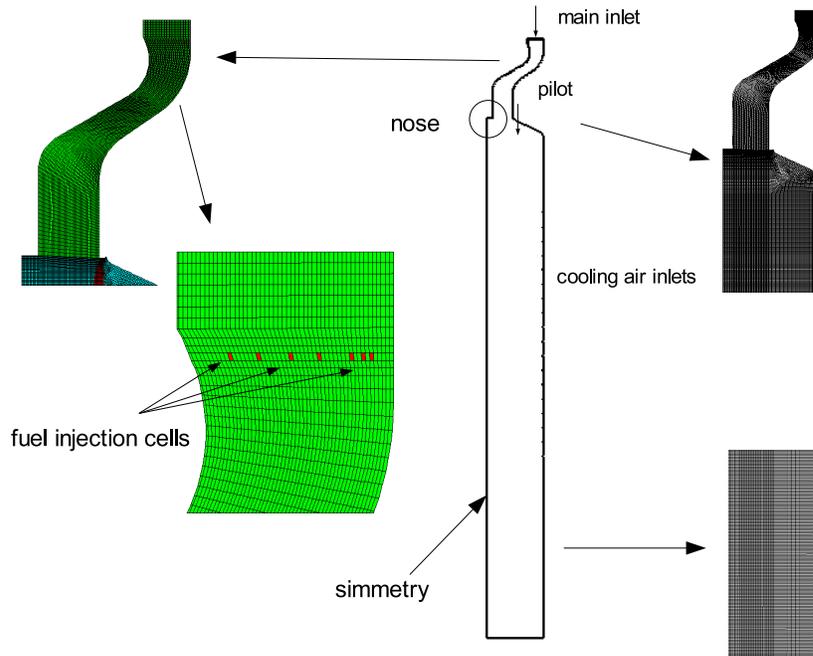


Figura 7.3: Mesh di calcolo usata per la simulazione del combustore GE10 (proprietà GE-NP)

Per quanto riguarda l'iniezione del combustibile, si è provveduto a schematizzare i fori disposti sui 24 tubi, come punti di iniezione uniformemente distribuiti in direzione circonferenziale, rispettando unicamente la loro effettiva ripartizione radiale: l'iniezione è stata simulata mediante sorgenti di massa localizzate su singole celle. In figura 7.3 riportiamo alcuni dettagli della mesh di calcolo.

In tabella 7.2 riportiamo la classificazione delle varie inlet numeriche adottate nel modello.

Il combustore elabora una portata di circa 37 kg/s di aria ripartita per il 70% nella inlet primaria (aria di combustione), per il 20% ai fori di raffreddamento e per il 10% circa ai fori di diluizione. La portata di combustibile complessiva è pari a 0.728 kg/s ripartita per il 5% al pilota e per il 95% alla fiamma primaria. La temperatura del combustibile è stata assunta pari a 293 K.

Per tutte le simulazioni è stato impiegato un modello $k - \varepsilon$ standard (con Wall Functions a parete): per la inlet primaria (*Comb. Air*) è stato considerato un livello di turbolenza pari al 15% mentre per tutte le altre si è considerato un valore del 10%, adottando per tutte le inlet una lunghezza di

inlet n°	Nome
1	Comb. Air
2	Cap area
3	Cap. Border
4	Liner AP
5	Liner NAP
6,7,8	Cooling slots 2, 3, 4
9-12	Cooling slots 5-8
13	Cooling slot 9
14	Cooling slot 10
15-18	Cooling slots 11-14
19-22	Cooling slots 15-18
23	Dilution Area

Tabella 7.2: Classificazione delle varie inlet per il combustore GE10.

dissipazione pari al 7% della dimensione caratteristica della sezione (raggio idraulico).

In figura 7.4 è riportata una rappresentazione schematica della fiamma nel combustore GE10. Data l'assenza di *swirl* nella miscela reagente, essa assume una forma essenzialmente conica, estendendosi in direzione assiale per buona parte della lunghezza del combustore. La fiamma si àncora in corrispondenza della fiamma pilota diffusiva: come vedremo sembra esserci uno scarso contributo della zona di ricircolo laterale alla stabilizzazione della fiamma.

Da un punto di vista fluidodinamico abbiamo verificato la possibilità di ancoraggio della fiamma anche in corrispondenza del *nose*³ centrale, dove il ricircolo determinato dal brusco allargamento potrebbe favorire la stabilizzazione della fiamma.

E' possibile inquadrare il regime di combustione che interessa il dispositivo, valutando i parametri adimensionali caratteristici facendo riferimento alle condizioni rilevate nella sezione di ingresso al tubo di fiamma, al termine del canale di premiscelazione. Rileviamo $u' \approx 10 \text{ m/s}$ e $L_T \approx 1 \text{ mm}$, mentre le proprietà della fiamma laminare, facendo riferimento alla composizione

³si tratta dello scalino prodotto dalla superficie interna del meato di premiscelazione sulla sezione di ingresso al liner, vedi figura 7.3

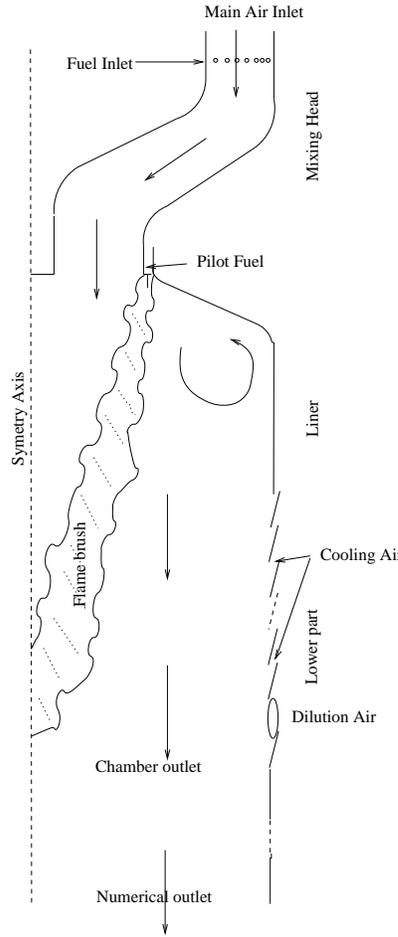


Figura 7.4: Rappresentazione schematica del modello usato per il combustore GE10 con raffigurazione della struttura della fiamma (proprietà GE-NP)

intermedia $\lambda = 2$, sono $S_L^0 = 0.15 \text{ m/s}$ e $\delta_L = 0.02 \text{ mm}$, che comportano:

$$Da \approx 1.5 \quad Ka \approx 90$$

Essendo $u'/S_L^0 = 60$ e $L_T/\delta_L = 50$, possiamo collocare il combustore GE10 sul diagramma di Borghi (figura 3.13) proprio nella regione che avevamo stabilito essere caratteristica dei combustori LPC per turbogas. La fiamma, quindi, opera, almeno nella sua parte iniziale, nel regime *thin reaction zone*, con valori molto alti del numero di *Karlovitz*, che la pongono proprio in prossimità del regime *distributed reaction*.

I modelli EDC-DC e KPP (come tutti i modelli BML in genere) assumono alti numeri di *Damköhler* essendo formalmente validi solo nel regime *corrugated flamelet*. Dobbiamo quindi aspettarci una sottostima della reattività

complessiva, dal momento che i modelli non contemplano il potenziamento del processo di diffusione nella *preheat zone* delle flamelet tipico della *thin reaction zone* (*thickened flamelet*).

7.3.1 Impostazioni del modello EDC-DC

La simulazione tramite il modello EDC-DC è stata condotta utilizzando le condizioni al contorno descritte in precedenza ed assumendo per aria e combustibile le composizioni riportate in tabella 7.3. Così come per le simulazioni dei testcase **vdb** e **k160a**, è stato impiegato un meccanismo chimico dettagliato, costituito da 16 specie chimiche 25 reazioni elementari [70].

Fuel		Air	
CH_4	1.0	O_2	0.2320
		N_2	0.7674
		CO_2	0.0006

Tabella 7.3: Composizione in massa del combustibile e dell'aria per la simulazione del combustore GE10

7.3.1.1 Impostazione del modello KPP

Per la simulazione con il modello KPP abbiamo generato, tramite il codice ausiliario **Eflame**, le librerie termochimica che esprime la dipendenza dalla *mixture fraction* ξ per le seguenti grandezze:

$$T_u \quad T_b \quad \rho_u \quad \rho_b \quad S_L^0 \quad \delta_L$$

In figura 7.5 riportiamo gli andamenti calcolati per T_b , ρ_u , ρ_b e S_L^0 .

La dipendenza dalla *mixture fraction* della velocità di fiamma laminare, S_L^0 , è stata valutata mediante la correlazione di Bui Pham [8], già descritta in precedenza. E' interessante notare che sono stati presi in considerazione i valori di S_L^0 anche per miscele ricche ($\xi > 0.055$). Ciò consente di risolvere in maniera formalmente corretta anche la fiamma di diffusione determinata dal getto pilota di combustibile che, come vedremo, interagisce con la fiamma

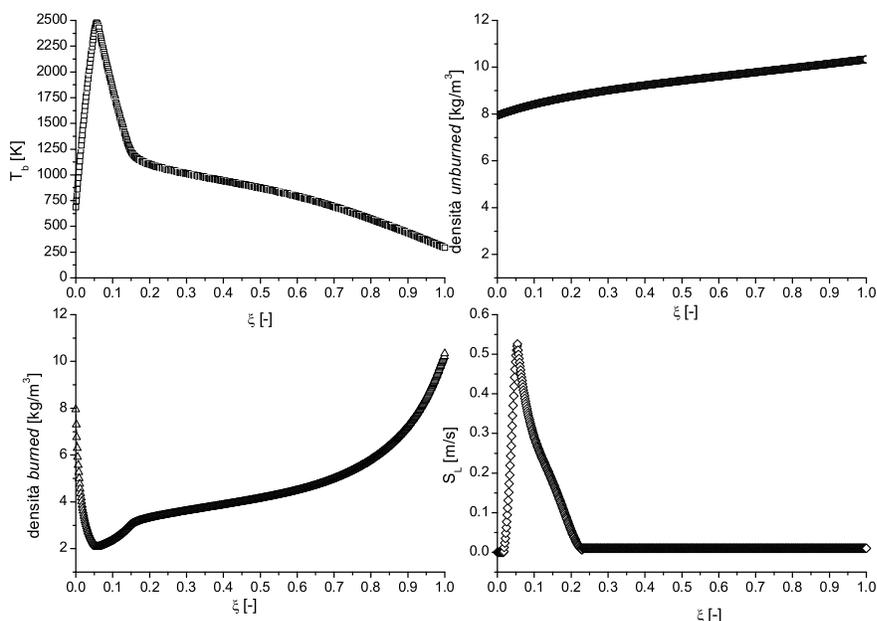


Figura 7.5: Flamelet per il modello KPP usate nella simulazione del combustore GE10

premiscelata principale costituendo un sistema triplo analogo a quello studiato nel testcase **vcb**. L'uso di modelli BML per l'analisi di fiamme triple è già stato descritto in [62] per lo studio di un bruciatore premiscelato per turbogas, stabilizzato mediante *swirler* e mediante un getto pilota diffusivo.

Le condizioni al contorno specifiche del modello KPP prevedono l'assegnazione del valore $c = 0$ a tutte le inlet (sia di aria che di combustibile), e $\xi = 0$ per le inlet di aria e $\xi = 1$ per quelle di combustibile.

7.4 Risultati delle simulazioni

Prima di passare all'analisi comparativa dei campi di temperatura predetti dai due modelli, analizziamo i risultati relativi al processo di premiscelazione, per il quale le due simulazioni hanno fornito indicazioni del tutto coincidenti. In figura 7.6 è riportata la distribuzione del rapporto aria combustibile λ predetto nel condotto di premiscelazione.

Si osserva una forte disuniformità della miscela in corrispondenza della sezione di ingresso al combustore, con valori di λ in corrispondenza del *nose*

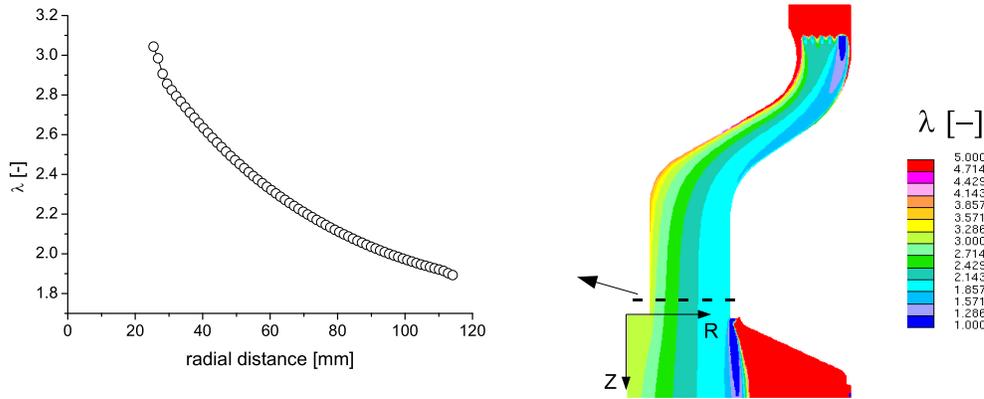


Figura 7.6: Distribuzione di λ nel condotto di premiscelazione.

superiori a 3.0 e inferiori a 2.0 in prossimità della zona di attacco della fiamma. Questa disuniformità non sembra confermata sperimentalmente dai dati a disposizione di GE-NP ed è quindi sintomo di una erronea ricostruzione della distribuzione radiale dei punti di iniezione del combustibile, o di una inadeguata assunzione di uniformità del profilo di velocità per l'aria primaria in ingresso.

La forte diluizione della miscela in prossimità del *nose* giustifica l'assenza della fiamma in corrispondenza della zona di ricircolo a valle del *nose* stesso: in presenza di miscela infiammabile, infatti, è verosimile aspettarsi un ancoraggio della fiamma a valle dello *shear layer* (vedi figura 7.7).

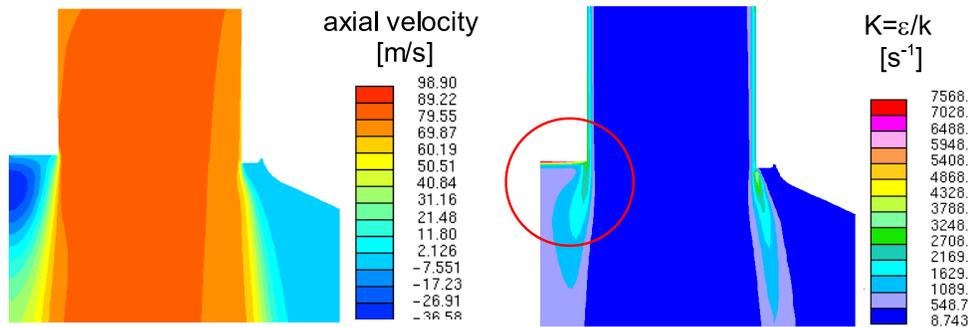


Figura 7.7: Visualizzazione dei due *shear layer* nelle zone in ingresso al combustore tramite la distribuzione del fattore di *stretching* (ϵ/k)

Queste considerazioni sono confermate da GE-NP che dichiara la necessità di iniettare una piccola portata di aria (*purge air*) proprio in corrispondenza

za della zona di ricircolo prodotta dal *nose*, per evitare l'accensione della fiamma.

7.4.1 Analisi della fiamma

Dall'analisi dei campi di temperatura predetti dai due modelli emerge un sostanziale accordo sulla struttura complessiva della fiamma. In tabella 7.4 riportiamo i risultati principali delle due simulazioni.

	KPP	EDC-DC
Temperatura uscita (mass averaged) [K]	1463.15	1460.75
Lunghezza fiamma [mm]	950.0	935.0
Temperatura massima [K]	2476.00	2464.00

Tabella 7.4: Comparazione delle caratteristiche principali della fiamma per le due simulazioni

I valori più bassi delle temperature predette dal modello EDC-DC sono consistenti con l'impossibilità del modello KPP di tenere conto dei fenomeni di dissociazione delle specie e delle limitazioni imposte dalla cinetica chimica all'ossidazione del monossido di carbonio. La sostanziale coincidenza della lunghezza di fiamma (misurata a partire dal *nose* e considerando la prima *contour line* con $T > 686K$) conferma la corretta sensibilità dei due modelli alla disuniformità della miscela reagente.

Si deve tener conto, per entrambi i modelli, che le temperature massime rilevate sono sicuramente maggiori delle temperature effettive, dal momento che in nessuna delle due simulazioni è stato tenuto conto dello scambio termico fra il gas e le pareti del combustore, avendo assunto in entrambi i casi condizioni di adiabaticità a parete ed avendo trascurato i fenomeni di irraggiamento. Peraltro il modello KPP assume a priori la adiabaticità della fiamma, sostituendo l'equazione dell'energia con l'equazione della variabile di progresso. La simulazione con il modello EDC è stata pertanto condotta in analoghe condizioni di adiabaticità sia per rendere possibile un confronto omogeneo, sia per non incidere ulteriormente sui tempi di calcolo.

In figura 7.8 riportiamo una sezione completa del combustore ottenuta combinando le mappe di temperatura ottenute con i due modelli.

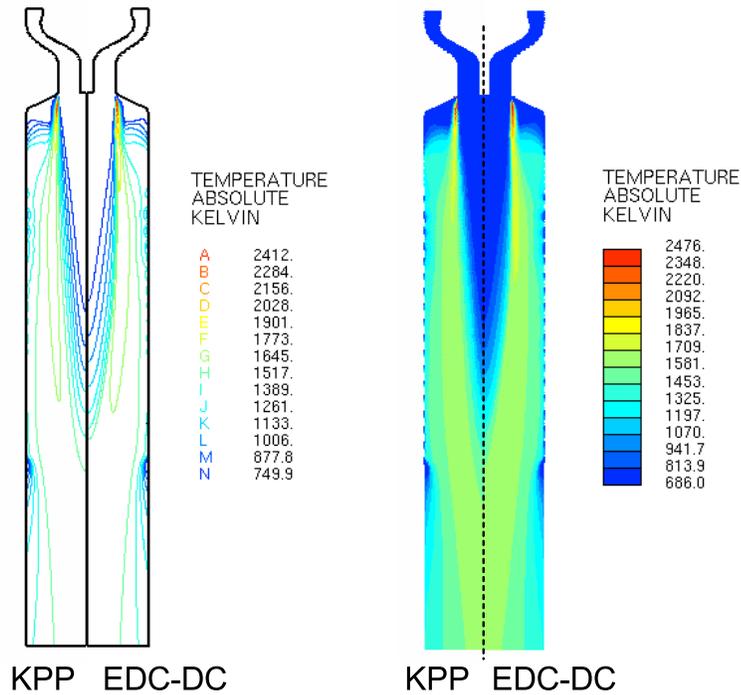


Figura 7.8: Visione d'insieme dei campi di temperatura predetti dai modelli KPP e EDC-DC

Si conferma il buon accordo tra i due modelli, anche nella zone prossime a parete, dove si rileva un'efficace azione protettiva dell'aria di film-cooling.

7.4.2 Meccanismo di stabilizzazione

Il brusco allargamento della sezione d'efflusso all'ingresso del tubo di fiamma determina la formazione di una zona di ricircolo toroidale nell'angolo sagomato del combustore. La possibilità che questa struttura di moto partecipi alla stabilizzazione della fiamma, è tuttavia preclusa dalla portata d'aria di raffreddamento iniettata dalle pareti in corrispondenza del cappello (vedi figura 7.9). Come rilevato da entrambi i modelli, infatti, la portata di aria di raffreddamento crea una seconda zona di ricircolo che isola la zona di ancoraggio della fiamma dal ricircolo di gas caldi.

La stabilizzazione della reazione complessiva viene quindi realizzata unicamente dall'interazione tra la fiamma diffusiva pilota la miscela reagente. In figura 7.10 riportiamo un dettaglio del campo di temperatura nella zona di

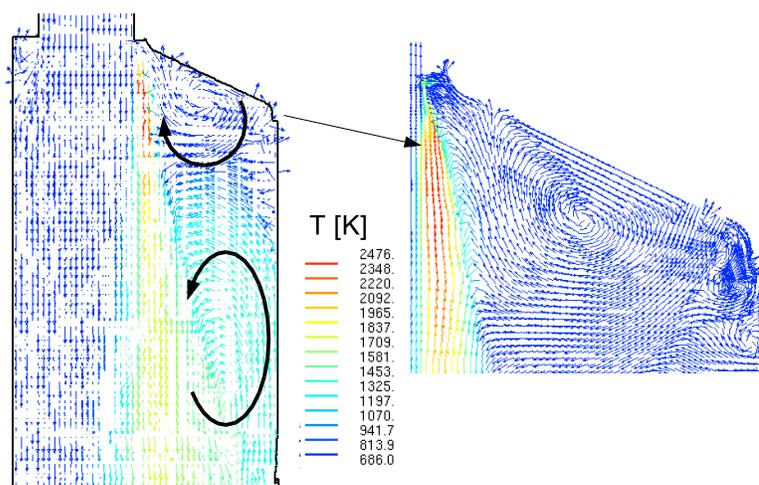


Figura 7.9: Descrizione della doppia zona di ricircolo che si forma in corrispondenza dell'angolo morto del combustore. La zona di ricircolo più interna (senso orario) è interessata unicamente da aria fredda, impedendo alla bolla di ricircolo più a valle (senso antiorario) di apportare gas caldi nella regione di ancoraggio. La lunghezza dei vettori rappresentati NON è proporzionale al loro modulo (modello KPP)

ancoraggio della fiamma. Si osserva chiaramente la formazione di una *lifted flame*, determinata dalla fiamma tripla frutto dell'interazione tra il getto diffusivo, il ricircolo di aria e gas combusti proveniente dal raffreddamento del cappello e la miscela aria-combustibile primaria. Come accennato in precedenza, anche il modello KPP è in grado di cogliere questo effetto, stimando un'estensione del *lift* leggermente inferiore a quella predetta dal modello EDC-DC.

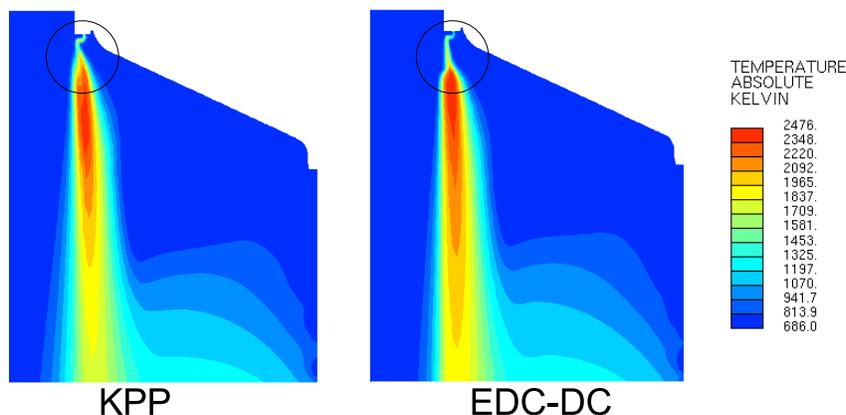


Figura 7.10: *Lift* della fiamma diffusiva di stabilizzazione

La presenza di strutture triple nelle zone di stabilizzazione dei combustori

LPC dotati di getti pilota diffusivi, viene confermata da numerosi autori (vedi ad esempio [62], [73] e [11]).

Alla luce di queste considerazioni, si potrebbe pensare, in prima analisi, di rivedere il sistema di ancoraggio della fiamma, eliminando o riducendo significativamente il getto diffusivo e la portata d'aria di raffreddamento del cappello. In questo modo si garantirebbe una consistente ricircolazione di gas caldi sulla miscela fresca, che produrrebbe l'accensione della fiamma. Eliminando la fiamma diffusiva pilota si ridurrebbe al contempo la principale fonte di NO_x dell'intero combustore. Questo intervento richiederebbe, inoltre, una modifica al sistema di raffreddamento del cappello, per il quale dovrebbe essere previsto un potenziamento dello scambio termico convettivo dal lato freddo (tipicamente tramite impingement).

Con questa soluzione, tuttavia, si affiderebbe interamente alla struttura di ricircolo la stabilizzazione del combustore, sottoponendo così il rilascio termico complessivo alle inevitabili fluttuazioni di velocità e pressione che contraddistinguono le zone di ricircolazione. A causa della estrema diluizione della miscela reagente, ciò potrebbe causare la nascita di fenomeni di risonanza termo-acustica con conseguente sviluppo di ulteriori pulsazioni di pressione, vero limite operativo dei combustori LPC.

Come osservato da Chen e collaboratori ([11]) e da Peters ([56]) le fiamme triple risultano intrinsecamente più stabili delle normali fiamme diffusive, dimostrandosi capaci di rimanere attive anche in presenza di forti fluttuazioni di velocità e pressione.

7.4.3 Composizione allo scarico. Completamento della reazione

Concludiamo l'analisi del combustore GE10 commentando la composizione dei gas di scarico. E' interessante osservare come entrambe i modelli non siano in grado di completare la reazione di ossidazione nel volume effettivo del combustore (ricordiamo che la mesh di calcolo si estende per circa due diametri oltre l'uscita fisica dal tubo di fiamma). Visivamente si osserva come le due fiamme si estendano fino quasi alla quota interessata dall'aria di diluizione (figura 7.8), risultando così influenzata la composizione allo scarico dall'effetto di *quenching* prodotto dai getti di diluizione.

Il modello KPP riporta un valore medio pesato della variabile di progres-

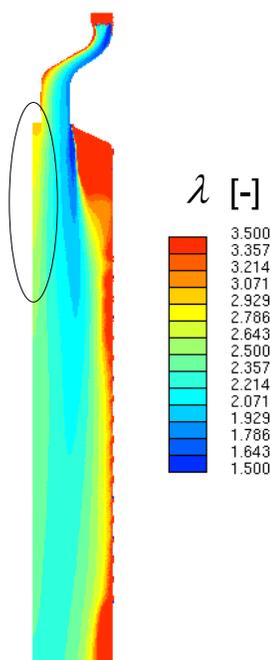


Figura 7.11: Distribuzione del rapporto di equivalenza λ nel combustore GE10

so pari a $\tilde{c} = 99.85\%$, mentre il modello EDC-DC stima una concentrazione di combustibile (metano e idrocarburi intermedi) pari a circa 1 *ppm*, mentre riporta una concentrazione di circa 35 *ppm* di *CO*. Si tratta di valori abbastanza alti, superiori a quelli rilevati allo scarico: si deve tuttavia tenere conto del tempo di residenza ancora disponibile prima dell'espansione in turbina, determinato dal volume del condotto e della voluta di distribuzione (*transition piece* - ricordiamo che il combustore è disposto con asse ortogonale all'asse della macchina). Benchè le temperature siano basse, i verosimilmente alti tempi di residenza nel *transition piece* rendono probabile un proseguimento del processo di ossidazione.

Le cause dell'incompleta combustione allo scarico del combustore possono essere ricercate, a nostro avviso, nella forte disuniformità della miscela reagente in corrispondenza dell'ingresso al volume di reazione, che determina valori di λ superiori a 2.5 per una vasta zona in prossimità dell'asse del combustore (vedi figura 7.11).

I due modelli sono stati utilizzati senza nessuna modifica alle costanti costitutive rispetto ai valori utilizzati per le simulazioni dei testcase **vdb** e **k160a**. Non possiamo escludere che il particolare regime di combustione in cui opera la fiamma, possa richiedere modifiche ad alcune costanti, specialmente per il modello EDC-DC. Per quanto riguarda il modello KPP abbiamo

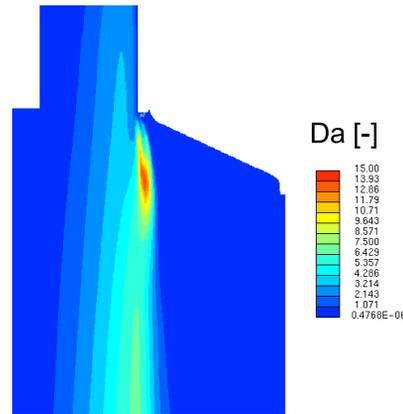


Figura 7.12: Distribuzione del del numero di *Damköhler* nella zona di stabilizzazione della fiamma, modello KPP, combustore GE10

rilevato una tendenza della correlazione usata per la stima di S_L^0 a sottostimare la velocità di fiamma per miscele molto magre, rispetto ai valori predetti dal codice Chem1D abbinato ad un meccanismo di reazione dettagliato. La mancanza di misure sperimentali dettagliate non ci permette purtroppo di validare fino in fondo le affermazioni fatte.

Riteniamo tuttavia che nella zona di stabilizzazione della fiamma, interessata come visto dalla presenza di una fiamma tripla, i modelli di combustione utilizzati, pur con le loro approssimazioni, lavorino correttamente, visti gli alti numeri di *Damköhler* che contraddistinguono la regione (vedi figura 7.12). Peraltro lo studio del testcase **vcb** ha mostrato le buone capacità del modello EDC-DC nell'analizzare le *lifted flames*.

7.5 Considerazioni finali

Nell'analisi di un combustore LPC per TAG industriale, i modelli EDC-DC e KPP hanno confermato le buone doti di accuratezza e affidabilità dimostrate nei test di validazione. I due strumenti sono stati in grado di cogliere alcuni dettagli estremamente complessi del meccanismo di accensione e stabilizzazione della fiamma principale che, ricordiamo, è realizzato mediante un getto pilota diffusivo che determina la formazione di una fiamma tripla. Entrambi i modelli sono in grado di cogliere il *lift* della fiamma diffusiva.

Per quanto riguarda i campi di temperatura i due modelli hanno prodotto risultati sostanzialmente coincidenti. Il modello EDC è, per sua natura, in

grado di valutare la concentrazione di specie intermedie, potendo così stimare le emissioni di CO allo scarico: abbiamo notato una tendenza del modello a sovrastimare le emissioni (circa 35 *ppm* per il CO), confermando una certa sottostima della reattività complessiva predetta dai due modelli, che si manifesta in una eccessiva lunghezza della fiamma. La forte disuniformità della composizione in ingresso, peraltro non confermata sperimentalmente, determina una eccessiva diluizione della miscela in corrispondenza dell'asse del combustore che può in qualche misura giustificare il risultato della simulazione.

Entrambi i modelli sono stati in grado di fornire interessanti indicazioni progettuali, mostrando l'interazione di due zone di ricircolo controrotanti in corrispondenza dell'angolo morto del dispositivo.

Per quanto riguarda i tempi di calcolo, la simulazione del combustore K-ONE DLN ha confermato il rapporto di circa 30:1 fra le ore macchina richieste dai modelli EDC-DC e KPP: questo test conferma ancora una volta l'estrema onerosità del modello EDC-DC e l'utilità di una preliminare analisi con il modello KPP, capace di fornire in tempi estremamente contenuti un'accurata rappresentazione della struttura della fiamma.

Capitolo 8

Conclusioni

Nel concludere questo lavoro di tesi vogliamo brevemente riepilogare l'attività svolta.

- L'obiettivo di tutta l'attività di ricerca è la messa a punto di una serie di modelli numerici per l'analisi CFD RANS della fiamme premiscelate turbolente che interessano i combustori a basse emissioni inquinanti (DLN) per turbina a gas . L'intera attività è stata oggetto di una collaborazione tra il Dipartimento di Energetica “*Sergio Stecco*” e la società GE- Nuovo Pignone, fra i maggiori costruttori mondiali di turbogas per applicazioni industriali. Nel corso della collaborazione è stato possibile testare gran parte dei modelli sviluppati: alcuni di essi sono costantemente impiegati per il supporto numerico alla progettazione di nuove geometrie di combustori. Per la natura estremamente innovativa delle geometrie analizzate, non ci è stato possibile mostrare in questo lavoro gran parte dell'attività di calcolo svolta.
- I modelli sviluppati sono stati tutti implementati, tramite routine esterne, nel codice CFD industriale STAR-CDTM : le esigenze di semplicità di utilizzo e di rapidità di generazione di mesh di calcolo su geometrie complesse tipiche delle camere di combustione, rende di fatto obbligato l'utilizzo di software commerciali. Le avanzate capacità di “*user programming*” messe a disposizione dai moderni codici CFD permettono di implementare complessi modelli ausiliari, come appunto i modelli di combustione.

Per rispondere alle diverse esigenze che si presentano durante le fasi di progettazione di un combustore, abbiamo preso in considerazione tre diversi approcci alla modellazione della combustione turbolenta, sia con l'intento di rivedere strumenti già testati e validati dalla comunità scientifica, ma anche modelli assolutamente innovativi per i quali, speriamo, la formulazione da noi proposta possa in qualche modo contribuire alla loro diffusione.

Le tipologie di modelli considerate sono, nell'ordine con cui sono state presentate:

1. Modelli basati sullo schema *Eddy Dissipation Concept*, EDC. Abbiamo messo a punto una completa standardizzazione dei più accurati modelli EDC sviluppati negli ultimi anni, in modo da mettere a disposizione della società un vasto set di modelli ampiamente testati in letteratura. Accanto a questi approcci, che prevedono solo una parziale e limitata valutazione degli effetti della cinetica chimica, abbiamo sviluppato un modello che consente di abbinare allo schema EDC, meccanismi chimici estremamente dettagliati. Il modello, denominato EDC-DC, prevede la soluzione della zona di reazione nel campo turbolento mediante reattori chimici PSR.
2. Un modello per la chiusura dell'equazione di conservazione della variabile di progresso nell'ambito dell'approccio Bray-Moss-Libby, BML. Lo schema proposto si basa sul teorema di Kolmogorov-Petrovski-Piskunov, KPP e sulla derivazione di una correlazione per la velocità di fiamma turbolenta. Il modello è stato implementato tramite una formulazione che permette lo studio di fiamme parzialmente premiscelate, in abbinamento ad una libreria termo-chimica esterna.
3. Una codifica completa dello schema *laminar flamelet* basato sull'approccio *Level Set*. Il modello prevede l'individuazione diretta della posizione del fronte di fiamma medio, dove localmente verrà applicata la soluzione di fiamme laminari quasi-1D (flamelet), tramite opportune medie pesate con PDF. Il cuore dello schema è la soluzione della cosiddetta *G-equation* che consente di individuare la forma e la posizione della fiamma media, tramite il trasporto di uno scalare condizionato non reattivo, che non pone quindi i

problemi della variabile di progresso nella chiusura dei termini di trasporto turbolento (effetti di *counter gradient diffusion*).

- Per tutti i modelli sviluppati sono stati condotti approfonditi test di validazione, facendo riferimento a testcase pubblicati in letteratura, per i quali l'obiettivo principale è sempre stato il confronto con dati sperimentali dettagliati. Per i modelli EDC abbiamo testato sia fiamme di diffusione sia fiamme premiscelate e parzialmente premiscelate, mentre per i modelli KPP e *Level Set* abbiamo, coerentemente con le loro formulazioni, analizzato solamente fiamme premiscelate o parzialmente premiscelate. Tutti i testcase sono in ogni caso stati selezionati per valutare il comportamento dei modelli nei tipici regimi di combustione che interessano le turbine a gas. In particolare vogliamo qui ricordare il *Vitiated Coflow Burner* che descrive una cosiddetta fiamma tripla, ottenuta dalla interazione di un getto diffusivo con una fiamma magra premiscelata, ed il *Vanderbilt Combustor*, che realizza una fiamma magra premiscelata stabilizzata mediante *bluff-body*, capace di lavorare nel regime *thin reaction zone* tipico dei combustori LPC.
- I tre modelli sviluppati si sono dimostrati capaci di ricostruire le principali caratteristiche delle singole fiamme studiate, riuscendo nella maggior parte dei casi a riprodurre con buona accuratezza i dati sperimentali. Vogliamo, in particolare, ricordare le buone capacità del modello EDC-DC nella stima dei valori medi per le concentrazioni delle specie intermedie fondamentali (essenzialmente *CO*) e le ottime doti del modello KPP nella individuazione del campo di temperatura. Il modello *Level Set* riesce senza dubbio a condensare i due aspetti dimostrando una notevole accuratezza nella ricostruzione della struttura della fiamma in termini di profili di temperatura, lunghezza ed evoluzione dello spessore (*brush*); abbiamo inoltre mostrato che un attento studio degli effetti di *stretching* prodotti dal campo di turbolenza sulle flamelet laminari, accanto alla scelta di adeguate configurazioni di fiamme laminari, consente di ottenere una notevole accuratezza anche nella valutazione degli effetti della cinetica chimica (concentrazione di *CO*).
- Nell'analisi dei risultati dei vari test di validazione abbiamo di volta in volta messo in luce i principali inconvenienti e difetti dei vari modelli sviluppati.

Il limite principale del modello EDC-DC è senza dubbio l'estrema onerosità computazionale che lo contraddistingue. La formulazione proposta richiede la soluzione, per ogni cella di calcolo e per ogni iterazione, dello stato stazionario di un reattore PSR, descritto da un sistema di ODE interessato da una estrema *rigidezza* numerica. La complessità della soluzione del reattore PSR è certamente legata al dettaglio del meccanismo di reazione utilizzato, ma esprime la propria criticità quando il reattore si trova in prossimità delle condizioni di estinzione/accensione della reazione. In questa situazione le equazioni descrittive del reattore PSR possono dar luogo a fenomeni di isteresi, che si manifesta in relazione alla dipendenza dello stato stazionario predetto, dal particolare set di condizioni iniziali adottate per l'integrazione del sistema di ODE.

Il modello KPP si basa, come detto, sull'approccio BML ed assume quindi una descrizione della flamelet laminare mediante una singola reazione chimica infinitamente veloce. Esso si pone quindi su un diverso piano rispetto al modello EDC. L'aspetto senza dubbio più complesso ed incerto del modello KPP è invece legato all'assunzione di *gradient diffusion*, GD, utilizzata per la chiusura del termine che descrive l'effetto della turbolenza sul trasporto della variabile di progresso c . Benché, come abbiamo avuto modo di vedere, nel regime di combustione che tipicamente interessa i combustori DLN si possa ritenere sostanzialmente valida l'ipotesi di *eddy diffusivity*, il peso locale degli effetti di *counter gradient diffusion*, CGD, possono giustificare sensibili sovrastime dello spessore della fiamma da parte del modello KPP. A seconda del regime di combustione esaminato, quindi, l'uso del modello KPP deve essere accompagnato da una valutazione del possibile impatto degli effetti del CGD.

La formulazione proposta per il modello *Level Set* non consente, al momento, l'analisi di fiamme parzialmente premiscelate, assumendo una perfetta omogeneità della miscela reagente. Rimane inoltre da testare su fiamme completamente tridimensionali, lo schema numerico proposto per la soluzione della *G-equation* che, ricordiamo, si basa su un approccio idro-geometrico. Uno degli aspetti da tenere in considerazione nell'analisi tramite il modello *Level Set*, è la significativa quantità di memoria allocata necessaria all'immagazzinamento delle *look-up-table*

con cui vengono organizzate le *flamelet libraries*. Il problema potrà diventare veramente limitante quando sarà ultimata la formulazione per fiamme non omogenee, per la quale le librerie dovranno contemplare l'ulteriore dipendenza dalla *mixture fraction*. Riteniamo, tuttavia, che questo aspetto sia ampiamente ripagato dalla significativa riduzione dei tempi di calcolo rispetto all'approccio *local source* con chimica dettagliata visto con lo schema EDC, tenendo anche conto dei bassi costi per Mbyte della memoria. Il limite principale del modello *Level Set* è, a nostro avviso, legato alla individuazione delle flamelet più idonee all'analisi dei vari casi; l'aspetto più complesso è la necessità teorica di impiegare configurazioni di flamelet diverse (essenzialmente *twin flames* e *opposed flames*), per zone distinte di una stessa fiamma. A questo si aggiungono alcune incertezze legate ai modelli per quantificare gli effetti dello *stretching* e del *wrinkling* sulla flamelet, estremamente sensibili all'accuratezza del modello di turbolenza impiegato. Benché, come abbiamo visto, il peso di questi sottomodelli abbia ridotti effetti sulla stima del campo di temperatura, rimane una certa complessità nella stima delle concentrazioni delle specie intermedie, in primo luogo il *CO*.

- Per i modelli EDC-DC e KPP abbiamo riportato un esempio di calcolo di un combustore completo, nella fattispecie il modello K-ONE DLN del turbogas industriale GE10, di costruzione GE-Nuovo Pignone. Il calcolo ha confermato sostanzialmente tutte le considerazioni emerse dai test di validazione, mostrando come i due strumenti possano essere impiegati per fornire preziose indicazioni in fase di progettazione.

Le due principali attività di ulteriore sviluppo riguardano essenzialmente i modelli KPP e *Level Set*. Nel caso del modello KPP è pianificata l'adozione di un approccio PDF per la stima del campo di *mixture fraction* e per la valutazione degli effetti del *mixing* turbolento. E' inoltre prevista la riformulazione dello schema in modo da poter eliminare l'ipotesi di adiabaticità potendo così tenere conto degli effetti dello scambio termico. Per il modello *Level Set*, come accennato, è attualmente in corso lo sviluppo di una formulazione valida anche nel caso di fiamme parzialmente premiscelate, estendendo così il campo di applicabilità dello strumento. Questa nuova formulazione del modello deve essere accompagnata dall'abbinamento con una

diversa tipologia di flamelet, ancora di tipo *Counter Flow* ma di tipo diffusivo o parzialmente premiscelato.

Appendici

Appendice A

Proprietà termo-fluidodinamiche dei flussi reattivi

A.1 Equazioni di conservazione

A.1.1 Conservazione della massa

Indicando con u_i il vettore delle tre componenti della velocità e con ρ la densità del fluido, è possibile esprimere la conservazione globale della massa tramite la seguente equazione di continuità:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (\text{A.1})$$

In una miscela composta da K specie chimiche, la composizione media è nota tramite la risoluzione di K equazioni di trasporto per ciascuna specie. A differenza della continuità globale, nelle equazioni di conservazione delle specie compare un termine di produzione–distruzione (sorgente–pozzo) che quantifica la reattività chimica della specie:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} (-\rho Y_k V_k^i) + \rho \dot{\omega}_k \quad k = 1 \dots K \quad (\text{A.2})$$

Essendo $\dot{\omega}_k$ il termine che descrive la reattività chimica della specie k . Il termine:

$$J_k^i = -\rho Y_k V_k^i$$

è detto flusso di diffusione di massa. Esso quantifica il flusso di massa per opera della diffusione molecolare nelle tre direzioni dello spazio introducendo una velocità

specifiche di diffusione V_k^i . Il trasporto diffusionale di massa viene generalmente modellato seguendo la teoria di Chapman–Enskog ([22] e [77]). Essa prevede che alla diffusione molecolare di massa contribuiscano tre distinti effetti:

1. Diffusione di massa per opera dei gradienti di concentrazione (*Legge di Fick*):
 ${}^D J_k^i$
2. Diffusione di massa per opera dei gradienti di pressione: ${}^P J_k^i$
3. Diffusione di massa per opera dei gradienti termici (*effetto Soret*): ${}^T J_k^i$

Il flusso di massa complessivo è pertanto pari a:

$$J_k^i = {}^D J_k^i + {}^P J_k^i + {}^T J_k^i$$

La valutazione rigorosa del primo, preponderante effetto, richiede la conoscenza dei coefficienti di diffusione binaria delle varie specie:

$$D_{kl} = f\left(T^{3/2}, p^{-1}\right)$$

Il coefficiente, del quale si riportano le principali dipendenze da temperatura e pressione, esprime la diffusività della specie k all'interno della specie l in una miscela costituita dalle sole specie k e l . In una miscela multicomponente la valutazione rigorosa del coefficiente di diffusione diviene assai complessa ([77]), e generalmente si preferisce utilizzare la cosiddetta trattazione *mixture averaged* che adotta il seguente coefficiente di diffusione medio:

$$D_k^M = \frac{1 - Y_k}{\sum_{i=1}^K \left(X_k / D_{ki} \right)} \quad (\text{A.3})$$

dove si è indicato con X_k la frazione molare della specie k . Utilizzando il coefficiente medio di diffusione, la legge di *Fick* si riduce alla semplice espressione:

$${}^D J_k^i = -\rho D_k^M \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad (\text{A.4})$$

dove abbiamo introdotto il coefficiente di diffusione termica della specie D_T .

La diffusione termica è importante solo per specie chimiche con piccola massa atomica (H , H_2 , He) e a basse temperature: nei problemi di combustione convenzionali viene generalmente trascurato. Anche la diffusione per mezzo dei gradienti di pressione ha rilevanza limitata nei processi di combustione, è viene generalmente trascurata [77]. L'equazione di conservazione della massa per la generica specie k può così essere espressa da:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k^M \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \rho \dot{\omega}_k \quad k = 1 \dots K \quad (\text{A.5})$$

A.1.2 Conservazione della quantità di moto

Applicando la seconda legge della dinamica al moto dei fluidi avremo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_j u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\sigma_{ij}) \quad j = 1, 2, 3 \quad (\text{A.6})$$

nella quale abbiamo trascurato le forze di massa e dove abbiamo indicato con σ_{ji} il generico tensore cartesiano degli sforzi. Introducendo le ipotesi di Stokes sul legame fra gli sforzi e i gradienti di velocità, e assumendo, in particolare, un legame lineare tra gli sforzi di taglio e i gradienti di velocità (deformazioni) (ipotesi di fluido Newtoniano), possiamo esprimere il tensore come:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ji} + \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ji} \quad (\text{A.7})$$

dove abbiamo fatto l'ulteriore ipotesi (dovuta a Stokes) di considerare nulla la *bulk viscosity* del fluido, ossia la sua resistenza viscosa alle variazioni di volume ([22]). Il coefficiente μ definisce la viscosità molecolare della specie e quantifica la diffusione a livello molecolare della quantità di moto. Nei comuni calcoli CFD il valore di μ viene assunto costante anche se esso presenta una sensibile dipendenza dalla temperatura (varia approssimativamente con $T^{1/2}$).

A.1.3 Conservazione dell'energia

Nell'ambito dei processi di combustione, che coinvolgono tipicamente flussi a basso numero di Mach, la conservazione dell'energia viene espressa in termini di entalpia statica intesa nella sua forma più generale (entalpia sensibile ed entalpia di formazione della specie):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho h u_i) = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(p u_i) + \frac{\partial J_q^i}{\partial x_i} + \dot{Q} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (\text{A.8})$$

dove con \dot{Q} abbiamo indicato le sorgenti di energia dovute, ad esempio, ad azioni a lungo raggio quali l'irraggiamento. I termini J_q^i esprimono invece il flusso di energia dovuto alla diffusione di calore, nelle tre direzioni dello spazio. La teoria di Chapman–Enskog prevede il contributo di tre termini per il flusso J_q^i :

1. Flusso di calore dovuto ai gradienti di temperatura.
Conduzione - (*legge di Fourier*): $^C J_q^i$;
2. Flusso di calore dovuto alla diffusione di massa: $^D J_q^i$;
3. Flusso di calore per opera dei gradienti di concentrazione (*effetto Dufour*):
 $^{Du} J_q^i$.

Il terzo termine (*effetto Dufour*) è il reciproco dell'*effetto Soret* e viene generalmente trascurato. La legge di Fourier per la conduzione di calore in un continuo recita:

$${}^C J_q^i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (\text{A.9})$$

dove λ è la conducibilità termica del fluido; essa dipende in larga misura dalla composizione della miscela e dalla sua temperatura (con una dipendenza del tipo $T^{1/2}$). Il termine ${}^D J_q^i$ descrive la variazione di entalpia connessa alla diffusione molecolare delle varie specie per opera dei gradienti di concentrazione. Esso è semplicemente:

$${}^D J_q^i = \sum_{k=1}^K h_k J_k^i$$

A.1.4 Proprietà termodinamiche e di trasporto

A.1.4.1 Trasporto

Sulla base delle considerazioni e delle semplificazioni fatte, possiamo concludere che tutti i flussi diffusionali (massa, quantità di moto ed energia) possono essere quantificati tramite la conoscenza delle seguenti grandezze:

- D_k^M – coefficiente di diffusione medio della specie k $\left[\frac{m^2}{s}\right]$
- μ – viscosità molecolare della miscela $\left[\frac{kg}{m \cdot s}\right]$
- λ – conducibilità termica della miscela $\left[\frac{J}{m \cdot K \cdot s}\right]$

Generalmente di preferisce introdurre opportuni gruppi adimensionali ottenuti dalla combinazione delle tre grandezze:

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k^M} \quad \text{Numero di Schmidt}$$

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} \quad \text{Numero di Prandtl}$$

$$Le = \frac{Sc}{Pr} \quad \text{Numero di Lewis}$$

Come vedremo meglio nei prossimi capitoli la dipendenza dei tre gruppi adimensionali dalle principali grandezze operative (composizione, pressione e temperatura) assume un'importanza fondamentale nel caso delle fiamme laminari, caratterizzandone profondamente la struttura interna. In regime turbolento le ampie fluttuazioni spaziali e temporali delle varie grandezze, determinano un notevole incremento dei meccanismi di trasporto risultando così generalmente trascurabili

i contributi molecolari. Tuttavia, come vedremo, vi sono regimi di combustione turbolenta in cui le fluttuazioni turbolente si propagano con dimensioni caratteristiche molto maggiori dello spessore della fiamma che quindi conserva localmente le caratteristiche laminare, rimanendo così estremamente dipendente dai meccanismi di trasporto molecolare.

A.1.4.2 Equazione di stato e proprietà termodinamiche

Nei campi di temperatura e pressione tipici dei processi di combustione nelle turbomacchine, il gas può essere considerato una miscela di gas perfetti. Per ciascun componente della miscela possiamo quindi ritenere valida la seguente equazione di stato:

$$p_k = \frac{\rho_k RT}{W_k} \quad \left| \begin{array}{l} k = 1 \dots K \\ R = 8.31445 \left[\frac{kJ}{kg \cdot K} \right] \end{array} \right.$$

dove abbiamo indicato con W_k la massa molecolare della specie chimica e con ρ_k la sua densità parziale. Ricordando la legge di Dalton per le miscele di gas ideali, la definizione di frazione in massa e la definizione di massa molecolare media della miscela:

$$p = \sum_{k=1}^K p_k \quad y_k = \frac{\rho_k}{\rho} \quad \bar{W} = \frac{1}{\sum_{k=1}^K y_k / W_k}$$

avremo:

$$p = \frac{\rho RT}{\bar{W}} \tag{A.10}$$

che esprime l'equazione di stato per la miscela.

Per definizione di gas perfetto, l'energia interna risulta funzione della sola temperatura. Ricordando la definizione di entalpia avremo:

$$h = u + \frac{p}{\rho} = u(T) + RT = h(T)$$

Le proprietà termodinamiche del gas risultano pertanto univocamente determinate una volta note le funzioni $u = u(T)$ e $h = h(T)$. Il primo principio della termodinamica applicato a due trasformazioni a pressione e volume costante permette di definire:

$$c_p = \left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_p \quad c_v = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_v \tag{A.11}$$

Integrando le A.11, avremo le espressioni cercate:

$$h(T) = \int_0^T c_p dt \quad u(T) = \int_0^T c_v dt$$

Le proprietà termodinamiche del gas sono a questo punto note a meno dei valori dei calori specifici c_p e c_v . Nei gas reali essi sono funzione della pressione e della temperatura: l'ipotesi di gas perfetto introdotta, fa decadere la dipendenza dalla pressione. In alcune applicazioni (laddove i processi avvengono senza grosse variazioni di temperatura) c_p e c_v possono essere assunti costanti: si parla in questo caso di gas ideale. Nel caso di reattività chimica, e in particolare nei processi di combustione, tale approssimazione non è lecita a causa degli elevati gradienti di temperatura in gioco. Dovremo pertanto tenere conto della dipendenza dalla temperatura nel calcolo dei calori specifici per ogni gas della miscela in esame. Le capacità termiche molari delle sostanze gassose si possono valutare dalle proprietà molecolari, ma la dipendenza dalla temperatura è spesso descrivibile con funzioni piuttosto complesse. Risulta allora opportuno fare uso di più semplici espressioni polinomiali che rendono più agevole il calcolo degli integrali indicati nelle equazioni A.11. Il formalismo qui usato per le espressioni polinomiali è quello adottato nelle librerie ChemkinTM II (che descriveremo diffusamente in seguito) ([33]), a sua volta derivato dalle tabelle Janaf. L'entalpia della generica specie viene pertanto calcolata tramite:

$$h_k = \frac{R}{W_k} \left(\sum_{n=1}^N \frac{a_{nk} T^n}{n} + a_{N+1k} \right) \quad (\text{A.12})$$

essendo N l'ordine del polinomio interpolante. Come si può notare l'entalpia è composta di due termini: l'entalpia sensibile (dipendente unicamente dalla temperatura) e l'entalpia di formazione (indipendente dalla temperatura e riferita a condizioni di riferimento standard pari a $T = 298.15K$ e $p = 101325Pa$ nelle librerie ChemkinTM II). L'entalpia della miscela viene valutata come media pesata con le frazioni in massa delle entalpie delle singole specie.

A.2 Descrizione statistica dei flussi turbolenti

Supponendo di avere a disposizione la soluzione di un campo di moto ottenuta tramite un calcolo DNS, dovremmo, in ogni caso, operare un'analisi statistica dell'enorme mole di dati a disposizione (nel tempo e nello spazio) che, diversamente, risulterebbe di scarso interesse. Normalmente, infatti, interessano i valori medi nel tempo delle varie grandezze (velocità, pressione, temperatura, composizione etc. etc.). Dal momento che le varie grandezze che descrivono il moto del fluido sono variabili *random*, la loro analisi statistica (e quindi anche la loro valutazione matematica), può essere svolta correttamente solo se è nota la loro funzione di

densità di probabilità PDF:

$$P_u(U) = \frac{dF_u(U)}{dU} \quad (\text{A.13})$$

dove la funzione $F_u(U)$ è detta funzione di distribuzione di probabilità, ovvero la probabilità p di avere valori $u < U$, con u variabile stocastica *random* e U valore definito della variabile. Segue così che $P_u(U)dU$ è la probabilità di trovare u nell'intorno $U < u \leq U + dU$. Se vengono considerati tutti i possibili di valori della variabile stocastica u ($-\infty + \infty$) avremo che:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_u(U)dU = 1 \quad (\text{A.14})$$

Nei flussi turbolenti la PDF di una qualsiasi variabile stocastica dipende, in generale, sia dal tempo t che dalla posizione x_i . Questa dipendenza viene espressa come:

$$P_u(U; x_i, t) \quad (\text{A.15})$$

Il punto e virgola indica che la PDF è una densità di probabilità nello spazio di U ed è funzione di x_i e t . Da qui in poi non distingueremo tra la variabile stocastica *random* u ed un suo valore definito U . Scriveremo così:

$$P(u; x_i, t) \quad (\text{A.16})$$

Una volta che la PDF di una variabile è conosciuta, si può definire il suo momento n -esimo tramite:

$$\overline{u(x_i, t)^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} u^n P(u; x_i, t) du \quad (\text{A.17})$$

Dove l'operazione $\overline{u(x_i, t)^n}$ denota il valore medio detto anche valore atteso di u^n . Il momento primo ($n = 1$) è chiamata semplicemente *media* di u :

$$\overline{u(x_i, t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} u P(u; x_i, t) du \quad (\text{A.18})$$

I momenti centrati sono definiti come :

$$\overline{[u(x_i, t) - \overline{u(x_i, t)}]^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} (u - \bar{u})^n P(u; x_i, t) du \quad (\text{A.19})$$

dove il momento centrato del secondo ordine ($n = 2$) è chiamato comunemente *varianza*:

$$\overline{[u(x_i, t) - \overline{u(x_i, t)}]^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (u - \bar{u})^2 P(u; x_i, t) du \quad (\text{A.20})$$

Data la sua natura *random*, è possibile scindere la variabile u attraverso la media e la sua fluttuazione u' :

$$u(x_i, t) = \bar{u}(x_i, t) + u'(x_i, t) \quad (\text{A.21})$$

dove $\overline{u'} = 0$ per definizione. La varianza può essere così correlata ai momenti primi e secondi come:

$$\overline{u'^2} = \overline{(u^2 - \bar{u})^2} = \overline{u^2 - 2u\bar{u} + \bar{u}^2} = \overline{u^2} - \bar{u}^2 \quad (\text{A.22})$$

Generalmente i modelli per flussi turbolenti si basano sulle equazioni di NS per derivare quelle di trasporto per i momenti primi e secondi usando la (A.21).

Supponendo un flusso bidimensionale stazionario, le velocità u v e la pressione dipendono in generale le une dalle altre attraverso le NS . Per considerare queste dipendenze è utile introdurre la funzione *joint* PDF delle variabili *random*. Per quanto detto la *joint* PDF delle velocità u v viene scritta come:

$$P(u, v; x_i) \quad (\text{A.23})$$

La *joint pdf* $P(u, v; x_i)$ di due variabili indipendenti *random* u e v , può essere sempre scritta come:

$$P(u, v; x_i) = P(u|v; x_i)P(v; x_i) \quad (\text{A.24})$$

Questa uguaglianza è stata dimostrata da Bayes da cui deriva l'omonimo teorema. In questo esempio $P(u|v; x_i)$ è una PDF condizionale, ovvero descrive la densità di probabilità di u condizionata ad un valore fissato della variabile v . Se u e v non sono correlate o meglio definite 'statisticamente indipendenti', la *joint* PDF risulta uguale al prodotto delle due singole PDF:

$$P(u, v; x_i) = P(u; x_i)P(v; x_i) \quad (\text{A.25})$$

in cui le due PDF dipendono indipendentemente da u o da v . L'approccio PDF o in generale un qualsiasi metodo stocastico è un sistema matematicamente corretto e risolve il problema in forma chiusa. L'evoluzione spaziale e temporale della PDF è sufficiente a descrivere la soluzione completa del flusso. La valutazione della PDF può essere effettuata tramite un'apposita equazione di trasporto. Tuttavia la sua risoluzione richiede un approccio di tipo lagrangiano nel quale la PDF è approssimata da un gran numero di particelle stocastiche che definiscono le possibili configurazioni del flusso. L'equazione può essere così soltanto risolta con metodi Monte-Carlo i quali richiedono un numero particolarmente elevato di particelle, aumentando in modo difficilmente controllabile i tempi di calcolo.

Più spesso quindi la struttura della PDF viene assunta a priori attraverso osservazioni sperimentali. Generalmente viene assunta come funzione del momento

primo (media) e del momento secondo centrato (varianza) in quanto si basa su funzioni statistiche note. Le equazioni che descrivono media e varianza, questa volta, possono essere risolte per mezzo di equazioni e metodi deterministici.

A.3 I modelli eddy viscosity/diffusivity EVM

I modelli EVM sono basati sull'ipotesi di Boussinesq (1877) secondo la quale il tensore degli sforzi turbolenti può essere valutato in maniera del tutto analoga al tensore degli sforzi viscosi. Si suppone cioè che gli sforzi siano proporzionali ai gradienti di velocità media. Il coefficiente di proporzionalità viene detto viscosità turbolenta o “*eddy viscosity*”. Ad esempio, nell'ipotesi di flusso bidimensionale di solo taglio (lastra piana) a densità costante, il solo termine del tensore, $\overline{u''v''}$, viene espresso da:

$$\overline{u''v''} = \frac{\mu_T}{\rho} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y}$$

In maniera del tutto analoga vengono modellati i restanti flussi turbolenti incogniti: il flusso turbolento di massa e il flusso turbolento di energia (vedi eq. 2.15). Avremo dunque:

$$\bar{\rho} \widetilde{Y_k'' u_i''} = -\bar{\rho} D_k^T \frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_i} \quad (\text{A.26})$$

$$\bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_i''} = \mu_T \left(\frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} + \frac{2}{3} \mu_T \frac{\partial \widetilde{u_l}}{\partial x_l} \right) \delta_{ji} \quad (\text{A.27})$$

$$\bar{\rho} \widetilde{h'' u_i''} = -\frac{\lambda^T}{c_p} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \quad (\text{A.28})$$

dove μ_T è la già introdotta viscosità turbolenta, mentre D_k^T e λ^T sono, rispettivamente, il coefficiente di diffusione turbolenta della specie k e la conducibilità termica turbolenta. I coefficienti turbolenti di diffusione si assumono generalmente uguali per tutte le specie e, proseguendo nell'analogia con il trasporto molecolare, D_k^T e λ^T vengono valutati in termini di viscosità turbolenta introducendo i corrispondenti turbolenti dei numeri di Schmidt, Prandtl e Lewis:

$$\text{Sc}_T = \frac{\mu_T}{\bar{\rho} D^T} \quad \text{Pr}_T = \frac{\mu_T c_p}{\lambda^T} \quad \text{Le}_T = \frac{\text{Sc}_T}{\text{Pr}_T}$$

Grazie alla totale analogia fra il trasporto molecolare e quello turbolento (si parla infatti di modello ai *gradienti di diffusione*), è possibile valutare il trasporto complessivo di massa quantità di moto ed energia tramite la somma dei corrispondenti

contributi molecolari e turbolenti, ricordando che mentre i primi sono proprietà del fluido, i secondi sono proprietà del flusso ([29]). Dal momento che le equazioni complessive risultanti da questo procedimento di chiusura sono di fatto identiche alle corrispondenti laminari, è possibile utilizzare gli stessi procedimenti numerici, a tutto vantaggio della semplicità di implementazione.

La distinzione fra i vari modelli di turbolenza fondati sul concetto di *eddy viscosity* si basa sostanzialmente sulla modalità con cui viene calcolato μ_T . Così come la viscosità molecolare di un fluido è proporzionale al prodotto fra il libero cammino medio della molecola e la sua velocità media, così, per analogia (Prandtl), la viscosità turbolenta viene espressa dal prodotto fra una lunghezza caratteristica della turbolenza L e una velocità caratteristica U (rispettivamente la dimensione e la velocità dei vortici (eddies) che determinano il trasporto turbolento di massa, quantità di moto, ed energia):

$$\mu_T \propto \bar{\rho} \cdot L \cdot U \quad (\text{A.29})$$

Nei primi modelli EVM, L ed U venivano definiti in relazione alle caratteristiche geometriche del flusso, e in base ad alcune proprietà medie (modelli *mixing length* e algebrici cfr. Baldwin-Lomax). Non ci soffermeremo ulteriormente su questa tipologia di modelli scarsamente impiegati nell'ambito dei flussi reattivi ed in generale ormai in disuso.

Dal momento che μ_T rappresenta il trasporto turbolento di quantità di moto, la scelta più ovvia per valutare U consiste nel considerare l'energia cinetica turbolenta k che è legata ad U da $U = \sqrt{k}$.

E' possibile ricavare facilmente un'equazione di trasporto per l'energia cinetica turbolenta k dalle equazioni di NS, che è possibile chiudere utilizzando la stessa ipotesi di Boussinesq e che risulta relativamente semplice da risolvere e implementare ([64], [29]).

Non altrettanto semplice è invece la scelta di una adeguata lunghezza di scala L . Se, infatti, la totalità dei modelli di turbolenza utilizza k come velocità di scala, è possibile operare una loro classificazione proprio in base alla scelta di L .

Tralasciando i modelli che risolvono la sola equazione di trasporto per k , imponendo il campo di L o valutandola tramite espressioni empiriche in termini di parametri geometrici (modelli ad una equazione), che rivestono una certa importanza solo nell'ambito dei problemi di tipo aeronautico e per la soluzione di profili alari in genere, introdurremo i cosiddetti modelli a due equazioni che affiancano a quella di k un'equazione di trasporto aggiuntiva che fornisce la lunghezza di scala turbolenta L .

Sebbene i primi modelli a due equazioni prevedevano la soluzione diretta di L , nel corso degli anni si è notato che risulta preferibile considerare la conservazione

di una grandezza scalare, ottenuta combinando opportunamente k e L [29]:

$$\frac{D(k^p L^q)}{Dt} = \text{produzione}(k^p L^q) - \text{distruzione}(k^p L^q) + \text{diffusione}(k^p L^q) \quad (\text{A.30})$$

In base alla scelta degli esponenti p e q la grandezza scalare assume un diverso significato fisico che caratterizza univocamente il modello. In questo lavoro non ci spingeremo nella descrizione di tutte le varie tipologie di modello ma ci limiteremo a descriverne con un certo dettaglio soltanto uno, ricordando, tuttavia, che le considerazioni che faremo circa le limitazioni dei modelli a due equazioni hanno validità pressoché generale.

La scelta più comune per lo scalare cercato è il tasso specifico di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta ε (vedi eq. 2.11). La scelta è dettata dal fatto che ε rappresenta, esattamente, il termine pozzo nell'equazione di conservazione di k . I modelli che adottano k ed ε sono detti, appunto, modelli $k - \varepsilon$.

A.3.1 Il modello $k - \varepsilon$

Ricordando la definizione di lunghezza integrale di turbolenza (eq. 2.9) e riprendendo la definizione introdotta di viscosità turbolenta (eq. A.29), avremo:

$$\mu_T = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\text{A.31})$$

La costante di proporzionalità C_μ può essere valutata calcolando la viscosità turbolenta in alcuni casi semplici. Universalmente è accettato il valore 0.09 che viene ottenuto nel caso di flusso bidimensionale in cui gli sforzi siano di taglio puro e nel quale sussista un sostanziale equilibrio fra la produzione e la distruzione di k ([64]).

Al contrario di quanto visto per k , l'equazione di trasporto per ε non ha un riscontro fisico immediato e preciso. Benché, infatti, sia possibile derivare dalle NS un'equazione di trasporto per ε , questa risulta non chiusa nella maggior parte dei suoi termini. La variabile ε usata nei modelli di turbolenza, inoltre, non ha lo stesso esatto significato fisico della grandezza che si deduce dalle NS: la prima è infatti associata alle scale spaziali integrali mentre la seconda quantifica la conversione in energia interna della turbolenza ed è quindi associata prevalentemente alle scale spaziali più piccole. Per queste ragioni si preferisce generalmente costruire empiricamente l'equazione di trasporto per ε in totale analogia con l'equazione di trasporto di k .

Riporteremo adesso, per ragioni di brevità, le equazioni costitutive del modello di turbolenza $k - \varepsilon$ nel caso particolare di flusso incomprimibile. Come discusso in

precedenza, l'equazione di k può essere ricavata operando la traccia delle equazioni di trasporto del tensore degli sforzi di Reynolds:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_i \cdot \frac{\partial k}{\partial x_i} = \underbrace{-\overline{u'_i \cdot u'_j} \cdot \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}}_P - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{u'_i \cdot \left(\frac{u'_j \cdot u'_j}{2} + \frac{p'}{\rho} \right)} - \frac{\mu}{\rho} \cdot \frac{\partial k}{\partial x_i} \right)}_D - \underbrace{\frac{\mu}{\rho} \cdot \frac{\partial \bar{u}'_i}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \bar{u}'_i}{\partial x_j}}_\varepsilon \quad (\text{A.32})$$

P - è il termine che rappresenta la sorgente di energia cinetica turbolenta (e quindi di tutta la turbolenza nell'ambito dei modelli EVM)

D - è il termine che descrive il trasporto diffusivo di k per opera della viscosità, delle fluttuazioni di velocità e di pressione. Il termine presenta grandezze fluttuanti e deve pertanto essere opportunamente modellato. Per chiuderlo si utilizza la stessa ipotesi di eddy viscosity e si adotta:

$$\overline{u'_i \cdot \left(\frac{u'_j \cdot u'_j}{2} + \frac{p'}{\rho} \right)} = \frac{1}{\rho} \frac{\mu_T}{\sigma_k} \cdot \frac{\partial k}{\partial x_i}$$

dove il numero adimensionale σ_k ha un significato analogo a quello di Pr e Sc turbolenti e rappresenta una delle costanti empiriche del modello.

ε - rappresenta il termine pozzo di energia cinetica e quantifica la sua dissipazione in energia interna. Il termine, come detto, viene valutato tramite una equazione di trasporto.

L'equazione di trasporto per ε recita:

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \left(C_{\varepsilon 1} \cdot P + C_{\varepsilon 4} \cdot k \cdot \frac{\delta \bar{u}_i}{\delta x_i} - C_{\varepsilon 2} \cdot \varepsilon \right) \cdot \frac{\varepsilon}{k} + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\delta \varepsilon}{\delta x_i} \quad (\text{A.33})$$

dove il termine di produzione P coincide con quello visto per l'equazione di k . L'equazione deve essere chiusa attraverso l'introduzione di alcune costanti empiriche i cui valori standard sono riportati nella tabella A.1.

Nelle equazioni A.32 e A.33 abbiamo tralasciato i termini (anch'essi modellati)

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 4}$	σ_k	σ_ε
0.09	1.44	1.92	0.33	1.0	1.3

Tabella A.1: Coefficienti del modello $k - \varepsilon$ standard

legati agli effetti delle forze di massa, così come i relativi coefficienti ($C_{\varepsilon 3}$ e σ_ρ) nella tabella A.1.

A.3.2 Altri modelli EVM

Fra tutti i modelli a due equazioni che è possibile ideare in base alla metodologia di calcolo della lunghezza di scala L (vedi eq. A.29), riteniamo opportuno citare il modello $k - \omega$ [79]. Il modello affianca all'equazione di conservazione di k (eq. A.32) il calcolo della conservazione della grandezza scalare ω , così definita:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{k} \tag{A.34}$$

Lo scalare ω può essere interpretato come una frequenza caratteristica della turbolenza e la sua equazione di conservazione può essere ricavata dalla combinazione di quelle per ε e k . Il modello $k - \omega$, a detta di molti autori, presenta un comportamento assai più robusto del modello $k - \varepsilon$ standard. Esso è infatti superiore nella gestione dei flussi con forte gradiente avverso di pressione, e dei flussi in prossimità dei pareti. La migliore risposta ai gradienti avversi di pressione, permette una migliore predizione delle zone di separazione [64]. I vantaggi del modello $k - \omega$ sembrano dovuti all'effetto di stabilizzazione introdotto dalla normalizzazione di ε . Il principale inconveniente del modello $k - \omega$ è da ricercarsi nella assegnazione delle condizioni al contorno: è infatti necessario assegnare valori di diversi da zero (e quindi non fisici), anche se in assenza di turbolenza ($k = 0$ e $\varepsilon = 0$). A causa di questo inconveniente è possibile osservare una sensibile dipendenza dei risultati dalle condizioni al contorno [64], [29].

Appendice B

Strumenti software

B.1 Il codice STAR-CDTM

Il codice STAR-CDTM, sviluppato e distribuito dalla società *Computational Dynamics Limited*, è costituito, nel suo package di base, da due moduli:

1. L'ambiente grafico di preprocessing e postprocessing, PRO-STAR
2. Il solutore vero e proprio costituito da un eseguibile FORTRAN e chiamato generalmente STAR¹

Il programma PRO-STAR viene utilizzato, nella fase di preprocessing per la generazione della griglia di calcolo o per la sua importazione dal file esterni (in numerosi formati di scambio), e per il setup della simulazione (caratterizzazione dei fluidi in esame, assegnazione delle condizioni al contorno e impostazioni dei parametri di controllo del solutore), e nella fase di postprocessing, per la visualizzazione e la manipolazione dei risultati.

STAR è un solutore non strutturato ai volumi finiti, che risolve il set di equazioni algebriche discretizzate mediante algoritmi di tipo implicito. Attualmente STAR-CD contempla i seguenti tre algoritmi:

- Una variante del metodo SIMPLE (“*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*”, Patankar e Spalding, 1980), modificato per poter essere utilizzato su mesh non strutturate
- Il recente metodo PISO (anche questo adattato a griglie non strutturate)
- L'algoritmo SIMPISO, che, come il nome stesso fa capire, combina caratteristiche di entrambi i metodi appena elencati

¹acronimo di *Simulation of Turbulence in Arbitrary Regions*

Gli algoritmi SIMPLE e SIMPISO sono generalmente utilizzati per giungere (in maniera iterativa) a soluzioni stazionarie: in questo caso i termini evolutivi non sono presenti nelle equazioni (ai volumi finiti) risolte. L'algoritmo PISO, invece, è adatto sia per calcoli stazionari che instazionari, anche se il suo impiego è tipicamente limitato a quest'ultima tipologia di flussi.

Per quanto riguarda la modellistica della turbolenza, il codice offre pieno supporto alla modalità RANS, con una vasta scelta di modelli EVM a due equazioni (a partire dai modelli $k - \varepsilon$ standard e $k - \omega$, fino ai modelli $k - \varepsilon$ non lineari). E' invece in fase di sviluppo il modello di chiusura al secondo ordine RSM. La soluzione delle NS in modalità LES è per il momento limitata ai soli flussi isotermi e incomprimibili. Le funzioni di programmazione a parte dell'utente permettono di inserire nel codice un qualsiasi modello di turbolenza aggiuntivo.

STAR-CD è un codice *multi-purpose* che consente la trattazione di un gran numero di fenomeni connessi al moto dei fluidi. La caratteristica che più ci interessa, in tal senso, è la possibilità di risolvere, oltre alle consuete equazioni di NS, la conservazione di un massimo di 50 scalari aggiuntivi definiti dall'utente. Relativamente alla conservazione globale della massa gli scalari aggiuntivi possono essere *attivi*, ossia effettive specie chimiche che contribuiscono al valore della densità media della miscela, oppure *passivi*, comportandosi quindi come traccianti. Per quanto riguarda le proprietà termodinamiche e di trasporto delle varie specie chimiche, STAR-CD presenta la seguente organizzazione:

Materials. Per le specie chimiche, e le sostanze in genere, contenute nel database **materials** nativo di STAR-CDTM, non è richiesta nessuna informazione aggiuntiva all'utente. Il codice assegna allo scalare corrispondente, le proprietà di trasporto e termodinamiche di riferimento contenute nel database interno (fisicamente si tratta del file *props.dbs*). In particolare il database **materials** definisce, per ogni sostanza, le seguenti grandezze:

- Massa molecolare [$\frac{kg}{kmol}$]
- Temperatura di riferimento [K]
- Densità di riferimento [$\frac{kg}{m^3}$]
- Calore specifico nelle condizioni di riferimento [$\frac{J}{kg \cdot K}$]
- Viscosità molecolare nelle condizioni di riferimento [$\frac{kg}{m \cdot s}$]
- Conduttività termica nelle condizioni di riferimento [$\frac{W}{m \cdot K}$]
- Entalpia di formazione [$\frac{J}{kg}$]
- Temperatura di formazione [K]

Le sostanze, non necessariamente specie chimiche pure e non necessariamente in fase gassosa, sono totalmente insufficienti per poter gestire un modello di combustione con chimica dettagliata. Fortunatamente è possibile modificare il database **materials** aggiungendo un qualsivoglia numero di specie chimiche.

Coefficienti calorimetrici. STAR-CDTM permette di tenere conto della dipendenza dalla temperatura delle proprietà di trasporto delle varie specie, tramite, tra le altre, comode espressioni polinomiali. In particolare è possibile esprimere la dipendenza dalla temperatura della viscosità molecolare, della conduttività termica e, naturalmente, del calore specifico. Nel codice, tuttavia, è presente in maniera nativa il solo database dei coefficienti calorimetrici che definiscono i polinomi per rappresentare la dipendenza di c_p dalla temperatura: il database fornito è il database usato dalle librerie ChemkinTM, a sua volta derivato dalle

tabelle Janaf. Esso contiene i coefficienti calorimetrici di 746 specie chimiche in fase liquida e gassosa. Questa caratteristica del codice semplifica la sua integrazione con il modello EDC che, come accennato, si serve delle stesse librerie termochimiche.

Coefficienti di diffusione. Nelle impostazioni predefinite, il codice assegna un coefficiente di diffusione molecolare costante ed uguale per ogni specie chimica (si tratta di un coefficiente di diffusione medio, con lo stesso significato di quello espresso nell'eq. A.3). E' comunque possibile, tramite una opportuna subroutine dell'utente, valutare la diffusività molecolare in maniera più opportuna.

Abbiamo più volte accennato alle funzionalità di programmazione da parte dell'utente messe a disposizione dal codice STAR-CDTM. Si tratta, probabilmente, di una delle sue caratteristiche più interessanti.

Il codice mette a disposizione dell'utente un certo numero di subroutine preimpostate, nelle quali è possibile implementare un gran numero di modelli aggiuntivi oppure specificare in maniera più dettagliata le condizioni al contorno o le condizioni iniziali. Di seguito riportiamo le principali categorie di "user subroutine":

- Termini sorgenti nelle equazioni di conservazione della quantità di moto, dell'energia e dell'energia cinetica turbolenta.
- Termini sorgenti nelle equazioni di conservazione della generica grandezza scalare conservata.

- Espressione dell'equazione di stato.
- Viscosità molecolare, diffusività molecolare e conducibilità termica.
- Condizioni al contorno e condizioni iniziali.
- Coefficienti costitutivi dei modelli di turbolenza.
- Gestione dei flussi multifase.

B.2 Le librerie Chemkin™ II

Nello sviluppo di un qualsiasi codice per l'analisi dei flussi reattivi (dai semplici reattori chimici ai codici CFD), si deve considerare con attenzione l'organizzazione dei numerosi dati necessari alla descrizione delle proprietà chimiche e termodinamiche delle specie in gioco e dei parametri cinetici e stechiometrici delle reazioni considerate. Con riferimento alla tabella B.1, possiamo stilare una classificazione

	<i>caratteri</i>	<i>numeri reali</i>	<i>numeri interi</i>
elemento atomico	simbolo dell'elemento	peso atomico	-
specie chimica	simbolo chimico della specie e simboli chimici degli elementi componenti	peso molecolare, coefficienti calorimetrici e rispettivi intervalli di temperatura	numero di atomi dei vari elementi che compongono la specie chimica
reazione chimica	simboli delle specie chimiche coinvolte	parametri cinetici di Arrhenius (A , β , E_a)	coefficienti stechiometrici della reazione

Figura B.1: Tipologia di dati necessari alla gestione delle specie chimiche e delle reazioni

dei dati necessari suddividendoli, ad esempio, in base alla loro natura (stringhe, numeri reali e numeri interi) e in base alle richieste delle singole famiglie (elementi, specie e reazioni).

Un'organizzazione efficiente dei vari database si riflette in una più facile gestione delle grandezze all'interno del codice con vantaggi sia in termini di semplicità di implementazione, sia in termini di velocità di calcolo. Accanto a questo sarebbe auspicabile anche un'unificazione nella rappresentazione delle proprietà termodinamiche delle specie e delle reazioni chimiche. Ricordiamo, infatti, che i meccanismi di reazione sono dedotti con analisi sperimentali dalle quali i dati cinetici vengono determinati con le più svariate unità di misura.

Una situazione analoga si verifica nella determinazione dei coefficienti calorimetrici delle varie specie, ottenuti, stavolta, per interpolazione polinomiale delle

curve sperimentali; una diversa formulazione del problema matematico nel *fitting* dei dati sperimentali può rendere problematica la gestione di alcune specie chimiche nei codici di calcolo.

Il progetto ChemkinTM, concepito presso i *Sandia National Laboratories*, costituisce un'ottima soluzione alle necessità finora espresse. Le librerie ChemkinTM, non solo forniscono una serie di utili strumenti per la gestione dei dati termodinamici e chimici in un qualsiasi codice di calcolo, ma sono ormai divenute uno standard per quel che riguarda la formulazione delle tabelle termodinamiche e dei meccanismi di reazione ([33]). Lo sviluppo di un codice per flussi reattivi non può prescindere dallo standard ChemkinTM soprattutto per la necessità di gestire i meccanismi chimici e le tabelle termodinamiche che vengono ormai formulati quasi esclusivamente nel suddetto formato. Le librerie sono costituite da due distinti componenti: un programma interprete, ed una collezione di routine per la gestione delle proprietà termodinamiche e chimiche delle miscele gassose; entrambi i programmi sono scritti in linguaggio FORTRAN.

Analizziamo nel dettaglio i due componenti:

Interpreter. E' un programma FORTRAN autonomo che non deve essere inserito nel codice di calcolo ma che è necessario per interpretare il meccanismo chimico e le tabelle termodinamiche. Il programma riceve l'input da due file di testo, CHEM.INP e THERM.DAT, che contengono, rispettivamente, il meccanismo chimico e i coefficienti calorimetrici (B.2). Il file CHEM.INP de-

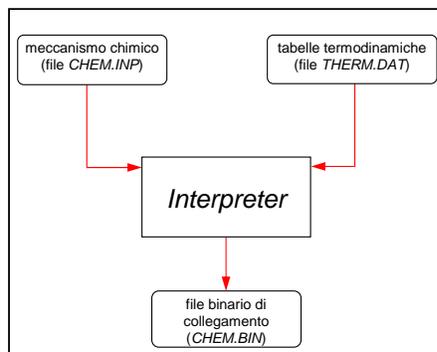


Figura B.2: Struttura del programma interprete

ve elencare tutti gli elementi atomici e tutte le specie chimiche contemplate e fornire, per ogni reazione, i rispettivi parametri cinetici secondo una precisa sintassi ampiamente descritta dagli autori ([33]). Il file THERM.DAT contiene i coefficienti calorimetrici di tutte le specie elencate nel meccanismo chimico. Come abbiamo accennato nei capitoli precedenti, le librerie

ChemkinTM adottano il formalismo già introdotto dalle tabelle Janaf: per ogni specie chimica vengono forniti 7 coefficienti calorimetrici in due diversi intervalli di temperatura per un totale, quindi, di 14 coefficienti. Come accennato in precedenza, il database termodinamico ChemkinTM è utilizzato in maniera nativa dallo stesso codice STAR-CDTM.

Il programma interprete elabora i due file descritti controllando, fra le altre cose, il bilanciamento delle equazioni chimiche e fornisce in uscita un file (CHEM.BIN), che contiene tutti i dati necessari al calcolo delle reazioni chimiche relative al meccanismo considerato. I dati vengono organizzati in tre diversi vettori: un vettore di numeri reali, un vettore di numeri interi ed un vettore di caratteri di testo secondo una disposizione analoga a quella descritta nella tabella B.1. A questo punto, conoscendo la struttura dei tre array, è possibile leggere dal file i dati richiesti.

Gas-Phase Subroutine Library Si tratta di alcune decine di semplici subroutine che, all'occorrenza, possono essere richiamate dal codice sviluppato. Da un punto di vista strettamente informatico le librerie non costituiscono un programma autonomo (non è presente un *main*) ma devono essere inserite come sottoprogrammi del codice principale. Da un punto di vista matematico le subroutine non risolvono nessuna equazione ma si limitano a valutare il risultato di numerose espressioni anche piuttosto semplici (conversione da frazione molare a frazione in massa, calcolo dell'entalpia a partire dal valore di temperatura, e così via). Il vantaggio consiste nella estrema modularità delle routine che possono essere richiamate in ogni punto del codice. Le due subroutine sicuramente più utili sono quelle che forniscono il valore della costante cinetica delle varie reazioni (estraendo i parametri di Arrhenius dai vettori prima descritti) e i coefficienti calorimetrici delle specie chimiche.

Le subroutine contenute nelle librerie ChemkinTM presentano tutte nomi che iniziano con le lettere *ck* in modo da distinguerle chiaramente dalle altre subroutine del codice principale.

Il principale difetto delle librerie ChemkinTM è, a nostro avviso, l'adozione di unità di misura del sistema *cgs*. Si tratta di una impostazione che trova le sue origini nelle tradizioni del mondo chimico ma che risulta oltremodo scomoda in quanto obbliga a continue conversioni delle grandezze nell'input-output con le subroutine chiamate: ricordiamo, infatti, che il codice STAR-CDTM opera, in ogni caso, con le unità del sistema internazionale.

B.2.1 Il codice EQUIL

Una delle necessità più frequenti nello studio dei problemi che coinvolgono i processi di combustione è l'individuazione dello stato di equilibrio chimico di un sistema reagente. Il metodo più usato consiste nella minimizzazione dell'energia libera di Gibbs [40]. Indicando con k la generica specie avente frazione molare x_k e pressione parziale p_k , l'energia libera molare della miscela vale:

$$\bar{G} = \sum_{k=1}^K x_k G_k^0 + RT \sum_{k=1}^K x_k \ln \left(\frac{p_k}{p_{atm}} \right)$$

Indicando con n_k il numero di atomi della specie k nella miscela, avremo:

$$\bar{\bar{G}} = \sum_{k=1}^K n_k G_k^0 + RT \sum_{k=1}^K n_k \ln \left(\frac{p_k}{p_{atm}} \right) \quad (\text{B.1})$$

dove:

$$\bar{\bar{G}} = \bar{G} \cdot \sum_{k=1}^K n_k$$

è l'energia libera complessiva della miscela espressa in $[kJ]$. La B.1 può essere riscritta, ricordando la legge di Dalton, [40]:

$$\bar{\bar{G}} = \sum_{k=1}^K n_k G_k^0 + RT \ln \left(\frac{p}{p_{atm}} \right) \sum_{k=1}^K n_k + RT \sum_{k=1}^K n_k \ln(n_k) + RT \sum_{k=1}^K n_k \ln \left(\sum_{k=1}^K n_k \right) \quad (\text{B.2})$$

La composizione all'equilibrio è determinata dai valori di n_k che minimizzano il valore di $\bar{\bar{G}}$, generalmente tenendo fissate T e p e tenendo conto del vincolo imposto dal bilancio di massa. Quest'ultimo può essere espresso tramite la conservazione delle specie atomiche (in una reazione chimica il numero complessivo di atomi del generico elemento rimane costante). Indichiamo con M il numero totale di elementi atomici in gioco e con b_{km} il numero di atomi del generico elemento atomico m presenti nella specie k , il bilancio atomico è esprimibile tramite la:

$$\sum_{k=1}^K b_{km} = B_m \quad (\text{B.3})$$

Dove B_m è il numero totale di atomi dell'elemento m nella miscela ed è il valore che deve conservarsi. Il problema è quindi risolto una volta determinato il minimo della B.2 che risulta vincolato dalle B.3. La ricerca del minimo vincolato di una funzione viene di solito effettuata tramite il metodo dei *moltiplicatori di Lagrange*

in base al quale il problema è ricondotto alla ricerca del minimo della seguente funzione, [10]:

$$\Phi(n_k, T, p) = \overline{\overline{G}}(n_k, T, p) + \sum_{m=1}^M \eta_m \left[\sum_{k=1}^K n_k b_{km} - B_{km} \right] \quad (\text{B.4})$$

nella quale η_m indica una serie di parametri incogniti detti moltiplicatori. Uguagliando a zero le derivate parziali della B.4 si ottiene un sistema di $K + M$ equazioni avente un corrispondente numero di incognite costituito dalle n_k e dai moltiplicatori. Trattandosi di equazioni non lineari il sistema deve essere risolto necessariamente per via numerica.

Esistono numerosi algoritmi pubblicati in letteratura per la soluzione del problema descritto (vedi ad esempio [10]), ma, nel contesto delle librerie termochimiche ChemkinTM è sicuramente conveniente utilizzare il codice EQUILTM, sviluppato dalla stessa equipe di ricerca che ha messo a punto le librerie ChemkinTM, [40]. Il codice si basa sulle librerie Stanjan che implementano il metodo dei moltiplicatori di Lagrange descritto in precedenza.

Appendice C

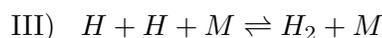
Analisi asintotica approssimata

La procedura consiste nell'assumere che la struttura interna della fiamma laminare possa essere scomposta in zone nelle quali la reattività della miscela sia governata da una specifica reazione. L'analisi viene svolta riferendosi a meccanismi ridotti (tipicamente 4-6 passi) valutando nelle varie zone della fiamma il rapporto reciproco fra i vari *reaction rate*, stabilendo così una scala di influenze delle varie reazioni [80]. L'analisi completa della fiamma usando meccanismi dettagliati produrrebbe una distribuzione continua dei vari *reaction rate* nelle zone in esame, ma ciononostante, lo studio tramite la RRA permette una più spendibile comprensione della struttura interna della fiamma (la struttura illustrata in figura 3.5 è stata dedotta da Peters e Williams con una RRA mediante un meccanismo ridotto a 4 passi).

L'esempio più semplice è la descrizione RRA di una fiamma laminare mediante un meccanismo globale a passo singolo [56]. E' facile dimostrare che sotto queste ipotesi (assenza di specie intermedie) la fiamma debba essere descritta ponendo uguale a zero lo spessore (e quindi l'influenza) dell'*inner layer*, determinando un'andamento delle principali grandezze come descritto in figura C.1 [56].

Una delle conseguenze della RRA è la possibilità di risolvere analiticamente (una volta fissata la struttura interna della fiamma) il sistema di equazioni costitutive, permettendo di estrarre espressioni analitiche per la velocità di reazione S_L , che esprimono la dipendenza della velocità di propagazione dai principali parametri operativi, risultando di immediato impiego nell'ambito dei modelli per la combustione premiscelata turbolenta [75].

Partendo dal seguente meccanismo ridotto a 4 passi ([57]):



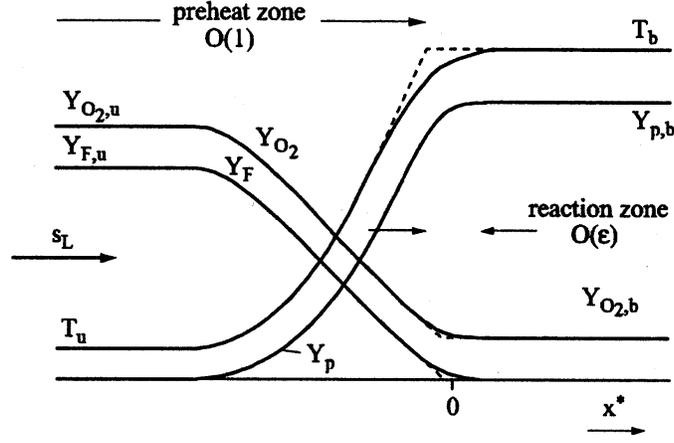
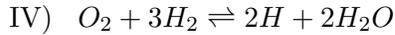


Figura C.1: Struttura di una fiamma laminare premiscelata secondo un'analisi RRA con meccanismo globale a passo singolo.



Fuel	B[bar]	E[K]	F[cm/s]	G[K]	m	n
CH_4	$3.1557 \cdot 10^8$	23873.0	$2.21760 \cdot 10^1$	-6444.27	0.565175	2.5158
C_2H_2	$5.6834 \cdot 10^8$	11344.4	$3.77466 \cdot 10^4$	1032.36	0.907619	2.5874
C_2H_4	$3.7036 \cdot 10^8$	14368.7	$9.97890 \cdot 10^3$	263.23	0.771333	2.3998
C_2H_6	$4.3203 \cdot 10^8$	18859.0	$1.90041 \cdot 10^3$	-506.97	0.431345	2.1804
C_3H_6	$2.2501 \cdot 10^8$	17223.5	$1.27489 \cdot 10^3$	-1324.78	0.582214	2.3970

Tabella C.1: Coefficienti per l'equazione C.1

Muller e collaboratori ([50]) hanno ricavato un'espressione di validità generale per la velocità di propagazione S_L , applicabile ad un gran numero di idrocarburi: il meccanismo può essere infatti facilmente esteso al generico idrocarburo di formula C_nH_{2n+2} semplicemente intervenendo sulla reazione (I) [80]. L'espressione proposta per S_L , valida solo per fiamme magre, è la seguente:

$$S_L = A(T^0) \cdot Y_{F,u}^m \cdot \frac{T_u}{T^0} \left(\frac{T_b - T^0}{T_b - T_u} \right)^n \quad (C.1)$$

essendo T^0 la temperatura dell'*inner layer*, assunta unica e indipendente dal rapporto di equivalenza complessivo ma funzione solo della pressione:

$$p = B \cdot \exp\left(-\frac{E}{T^0}\right)$$

La funzione $A(T^0)$ è valutata tramite:

$$A(T^0) = F \cdot \exp\left(-\frac{G}{T^0}\right)$$

La temperatura T_b viene assunta pari alla temperatura di equilibrio della miscela reagente alla pressione p e a con temperatura iniziale T_u . In tabella C.1 sono riportati i valori dei coefficienti B, E, F, G, m e n per alcuni degli idrocarburi considerati ([50]).

Nel corso di questo lavoro è stata utilizzata una correlazione per la velocità di fiamma laminare, valida nell'intervallo di rapporti di equivalenza $0.5 < \phi < 1.4$, proposta da Bui-Pham e collaboratori ([8]) ricavata con un procedimento del tutto analogo a quello appena descritto

Appendice D

Basi teoriche del modello EDC

In figura D.1 è illustrata una rappresentazione schematica del trasferimento di energia meccanica ad energia interna tramite l'energia cinetica turbolenta (*Energy Cascade*). Il primo livello è costituito dalle cosiddette strutture integrali: le gran-

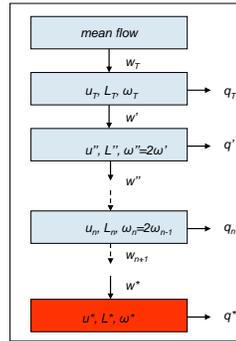


Figura D.1: Rappresentazione schematica del processo di *Energy Cascade*

dezze caratteristiche sono u_T (pari a $(\frac{2}{3}k^{1/2})$ con k energia cinetica turbolenta, vedi eq. 2.7) e L_T , lunghezza di scala integrale (eq. 2.9). Ad esse è possibile associare una frequenza caratteristica, definita come:

$$\omega_T = \frac{u_T}{L_T}$$

Questo livello contiene gli effetti di tutto lo spettro di turbolenza, in quanto contiene l'effetto delle scale spazio temporali più piccole.

Possiamo idealizzare il secondo livello come caratterizzato dalla frequenza $\omega'' = 2\omega_T$. In maniera analoga a quanto visto in precedenza, il secondo livello conterrà gli effetti di tutti i successivi livelli. Allo stesso modo, l'n-esimo livello sarà caratterizzato da $\omega_n = 2\omega_{n-1}$ e da L_n . L'ultimo livello è rappresentato dalle FS

(Kolmogorov) che saranno caratterizzate dalle seguenti grandezze di scala: u^* , L^* e ω^* .

Ad ogni livello è associata una frazione di energia dissipata in calore, Q ; la somma dei contributi di ogni livello è pari al tasso di distruzione dell'energia cinetica turbolenta ε :

$$\varepsilon = Q_T + Q'' + \dots + Q^*$$

Inoltre, detto W_T l'energia trasferita dal primo al secondo livello, essa sarà pari all'energia dissipata da tutti i restanti livelli. Varrà pertanto:

$$\varepsilon = Q_T + W_T$$

E' possibile dimostrare ([19]) che, per l' n -esimo livello, valgono:

$$W_n = \frac{3}{2} C_{D1} \omega_n u_n^2 \tag{D.1}$$

$$Q_n = C_{D2} \nu \omega_n^2 \tag{D.2}$$

dove C_{D1} e C_{D2} sono costanti del modello. Per flussi ad alto e moderato Reynolds,

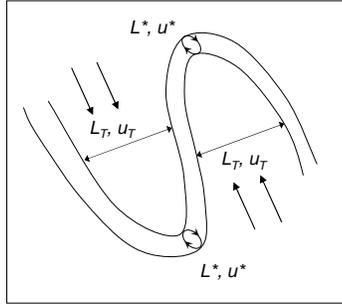


Figura D.2: Rappresentazione schematica delle FS all'interno di un vortice

la dissipazione di energia in calore è modesta nei livelli iniziali ([42]), pertanto, per n piccoli, Q_n è trascurabile rispetto a W_n , e, approssimativamente, risulterà $W_n \simeq W_{n+1}$. Avremo, quindi, che per $n = 2$ è possibile assumere $u''^2 \simeq \frac{1}{2} u'^2$ e quindi risulta:

$$W'' = C_{D1} \omega' \frac{3}{2} u'^2$$

Ricordando che l'energia cinetica turbolenta è pari a $k = \frac{3}{2} u'^2$, avremo:

$$W'' = C_{D1} \omega' k \tag{D.3}$$

Sempre nell'ipotesi che alle scale integrali (livello 1) la dissipazione diretta in energia interna sia trascurabile rispetto al trasferimento al livello inferiore, possiamo affermare che $\varepsilon \simeq W''$. E' inoltre è possibile dimostrare che nelle stesse ipotesi, circa 3/4 dell'energia meccanica è dissipata in calore nelle FS, e vale così $\varepsilon = \frac{4}{3}Q^*$. Per quanto detto vale:

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \frac{3}{2}C_{D1} \frac{u'^3}{L'} \\ \varepsilon &= \frac{4}{3}C_{D2}\nu \frac{u^{*2}}{L^{*2}}\end{aligned}\tag{D.4}$$

Tenendo conto che in condizioni di turbolenza stazionaria e isotropa deve valere la seguente condizione di equilibrio:

$$Q^* = W^*$$

avremo:

$$\varepsilon = 2C_{D1} \frac{u^{*3}}{L^*}\tag{D.5}$$

Risolvendo il sistema costituito dalle eqq. D.4 e D.5, si ottengono le grandezze caratteristiche per le FS:

$$L^* = \frac{2}{3} \left(\frac{3C_{D2}^3}{C_{D1}^2} \right)^{1/4} \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)\tag{D.6}$$

$$u^* = \left(\frac{C_{D2}}{3C_{D1}^2} \right)^{1/4} (\nu\varepsilon)^{1/4}\tag{D.7}$$

Il rapporto fra il volume occupato dalle FS e il fluido circostante, è stato quantificato da Magnussen ([42],[43] e [19]) come:

$$\gamma^* = \left(\frac{u^*}{u'} \right)^3 = \left(\frac{3C_{D2}}{4C_{D1}^2} \right)^{3/4} \left(\frac{\nu\varepsilon}{k^2} \right)^{3/4}\tag{D.8}$$

E' inoltre possibile stimare la portata scambiata tra FS e fluido circostante, nell'unità di massa contenuta nelle FS, tramite:

$$\dot{m}^* = \left(\frac{3}{C_{D2}} \right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2}\tag{D.9}$$

Le grandezze γ^* e m^* costituiscono la base del modello EDC.

Appendice E

Level Set Flamelet Method

E.1 Derivazione della *G-equation* nei regimi *corrugated flamelet* e *thin reaction zone*

Nel regime *Corrugated*, il carattere flamelet può essere esteso all'intera fiamma, che può quindi essere descritta tramite un'interazione puramente cinematica tra una flamelet laminare *quasi steady* ed il campo turbolento esterno, senza nessun tipo di effetto delle fluttuazioni turbolente (di dimensione eccessiva) sul processo di combustione. Trascurando gli effetti dello *stretching*, l'equazione di trasporto del fronte di fiamma laminare vale:

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} G) = S_L^0 |\nabla G| \quad (\text{E.1})$$

Nel regime *Thin Reaction*, i microvortici con dimensioni caratteristiche pari a alla lunghezza di scala di Kolmogorov possono entrare all'interno della *preheat-zone* e alterare i processi di diffusione che regolano la reazione chimica. Essi, tuttavia, hanno ancora dimensioni troppo grandi per interagire con il *reaction layer* della flamelet, che, abbiamo visto, sostiene l'intera reazione della fiamma laminare. In ogni caso, per via dell'azione dei microvortici sul processo di diffusione nella *preheat zone*, non è più possibile definire in maniera univoca la velocità di fiamma laminare, non potendo così individuare una superficie di livello ben definita. Il problema può essere risolto osservando che il *reaction layer* della fiamma (vedi figura 3.5) mantiene inalterate le sue caratteristiche laminari, conservando una struttura coerente. E' così possibile utilizzare una grandezza caratteristica del *reaction layer* come scalare per individuare superfici di livello ben definite. La grandezza adottata è la temperatura T^0 nell'*inner layer* che determina così la superficie iso-temperatura $T(\mathbf{x}, t) = T^0$.

Consideriamo la seguente equazione di conservazione per la temperatura:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\rho D \nabla T) + \omega_T \quad (\text{E.2})$$

dove D è la diffusività termica e ω_T il termine sorgente derivante dalle reazioni chimiche. Un'equazione cinematica per il trasporto della temperatura T^0 dell'*inner layer* può essere formulata, in analogia con lo scalare G , come:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \cdot \nabla T \frac{d\mathbf{x}}{dt} \Big|_{T=T^0} = 0 \quad (\text{E.3})$$

In riferimento alle eq.6.2, avremo che:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} \Big|_{T=T^0} = \mathbf{v}^0 + \mathbf{n} s_d \quad (\text{E.4})$$

dove s_d^1 è definita con l'ausilio dell'eq. E.2

$$s_d = \frac{\nabla \cdot (\rho D \nabla T) + \omega_T}{\rho |\nabla T|} \Big|_{T=T^0} \quad (\text{E.5})$$

\mathbf{v}^0 è la velocità del flusso condizionato a $T = T^0$, e \mathbf{n} è il vettore normale alla superficie di livello:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla T}{|\nabla T|} \Big|_{T=T^0} \quad (\text{E.6})$$

Se la superficie di livello $G = G^0$ viene assunta uguale alla iso-superficie $T = T^0$ può essere ricavata come:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v}^0 \cdot \nabla G = \frac{\nabla \cdot (\rho D \nabla T) + \omega_T}{\rho |\nabla T|} \Big|_{T=T^0} |\nabla G| \quad (\text{E.7})$$

In seguito l'apice 0 verrà ommesso ma tutte le quantità rimangono condizionate al valore di $G = G^0$.

Assumendo il prodotto ρD costante, il termine diffusivo può essere scomposto in una componente normale e una tangenziale:

$$\nabla \cdot (\rho D \nabla T) = \mathbf{n} \cdot \nabla (\rho D \mathbf{n} \cdot \nabla T) - \rho D |\nabla T| \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (\text{E.8})$$

Inserendo la E.8 nella E.7 e usando la continuità, segue che:

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} G) = s_{L,s} \sigma - D \kappa \sigma \quad (\text{E.9})$$

dove la velocità della superficie di livello $s_{L,s}$ è definita come somma della velocità dovuta alla diffusione normale s_n e quella dovuta alle reazioni chimiche s_r :

$$s_{L,s} = s_n + s_r \quad (\text{E.10})$$

¹displacement speed

cdove:

$$s_n = \frac{\mathbf{n} \cdot \nabla(\rho D \mathbf{n} \cdot \nabla T)}{\rho |\nabla T|} \quad (\text{E.11})$$

$$s_n = \frac{\omega_T}{\rho |\nabla T|} \quad (\text{E.12})$$

Tramite un'analisi dimensionale dei vari termini sorgente che compaiono nelle equazioni valide singolarmente nei due regimi, *Corrugated* e *Thin Reaction*, è possibile individuare un'equazione comune per i due casi [56]:

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} G) = (\rho S_L^0) \sigma - (\rho D) \kappa \sigma \quad (\text{E.13})$$

E.2 Derivazione delle equazioni RANS valide nei due regimi flamelet

Deriveremo il set di equazioni RANS supponendo che G sia uno scalare non condizionato, recuperando poi in una fase successiva i valori condizionati al fronte di fiamma.

Dal momento che G rappresenta la distanza dal fronte di fiamma istantaneo, il suo valore medio $\tilde{G} = \frac{\rho G}{\bar{\rho}}$, rappresenta il valore medio della distanza o, in altre parole, la posizione del fronte di fiamma medio. E' interessante osservare che in entrambe i regimi di combustione, la media Favre e la media Reynolds di G coincidono, in quanto possiamo considerare costante la densità sul fronte di fiamma $G(\mathbf{x}, t) = G_0$ [56].

Introducendo le definizioni 6.28 nell'equazione laminare di G (6.15) si ottiene l'equazione per il valor medio \tilde{G} :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{G}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{G}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}'' \tilde{G}'') = (\rho S_L^0) \tilde{\sigma} - (\rho D) \bar{\kappa} \tilde{\sigma} \quad (\text{E.14})$$

L'ultimo termine dell'equazione è proporzionale alla diffusività molecolare. Per alti numeri di Reynolds il suo valore è tipicamente di un ordine di grandezza inferiore rispetto agli altri termini [56].

Un'equazione per la varianza $\widetilde{G''^2}$ dello scalare G si deriva sottraendo l'equazione E.14 dalla 6.15, moltiplicando quindi per G'' e mediando il tutto [56]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{G''^2}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \widetilde{G''^2}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}'' \widetilde{G''^2}) = -2 \bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}'' \widetilde{G''} \cdot \nabla \tilde{G} - \bar{\rho} \tilde{\omega} - \bar{\rho} \tilde{\chi} - (\rho D) \overline{\mathfrak{F}} \tilde{\sigma} \quad (\text{E.15})$$

Per quanto riguarda i termini sorgenti dell'equazione E.15, osserviamo che il primo, $\tilde{\omega}$, detto *kinematic restoration*, ha effetto nel solo regime *Corrugated*, ed è definito come:

$$\tilde{\omega} = -2(\rho S_L^0) \overline{G'' \sigma} / \rho \quad (\text{E.16})$$

Il secondo è un termine di pozzo (*scalar dissipation rate*) ed è definito come:

$$\tilde{\chi} = 2(\rho D) (\overline{\nabla G''})^2 / \bar{\rho} \quad (\text{E.17})$$

L'ultimo termine, $(\rho D) \overline{\mathfrak{S} \sigma}$, rappresenta l'influenza della curvatura e poiché è proporzionale alla diffusività molecolare, nel caso di elevati numeri di Reynolds, è generalmente di un ordine di grandezza inferiore agli altri.

Per rendere utilizzabile l'equazione E.15 in entrambi i regimi di combustione occorre svolgere un'analisi dimensionale per unificare i due termini sorgente. Peters assume che la somma dei due termini pozzo $\tilde{\omega}$ e $\tilde{\chi}$, valida per entrambi i regimi, sia [56]:

$$\tilde{\omega} + \tilde{\chi} = c_s \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \overline{G''^2} \quad (\text{E.18})$$

con c_s costante del modello e \tilde{k} e $\tilde{\varepsilon}$ l'energia cinetica turbolenta e la sua dissipazione. Il valore 2.0 suggerito da Peters è stato usato anche in questo lavoro.

Rimane adesso da chiudere il termine $\mathbf{v}'' \overline{G''}$ che compare nelle due equazioni E.15 (trasporto turbolento) e E.14 (produzione e trasporto turbolento).

Per quanto riguarda l'equazione di trasporto per \tilde{G} , una chiusura classica secondo gradiente non può essere usata. Infatti, una tale chiusura comporterebbe un'equazione di tipo ellittico per lo scalare \tilde{G} , che è inconsistente con la caratteristica iperbolica della *G-equation* data dalla definizione matematica. Per dare alla E.14 una forma analoga alla 6.15, il termine di trasporto turbolento deve essere modellato come un termine di curvatura. È noto come un operatore di secondo grado ellittico, risultante da un'approssimazione secondo gradiente, si divida in un termine diffusivo normale ed uno tangenziale di curvatura:

$$-\nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v}'' \overline{G''}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla \tilde{G}) = \tilde{\mathbf{n}} \cdot \nabla (\bar{\rho} D_t \tilde{\mathbf{n}} \cdot \nabla \tilde{G}) - \bar{\rho} D_t \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}| \quad (\text{E.19})$$

dove D_t è la diffusività turbolenta e $\tilde{\mathbf{n}}$ e $\tilde{\kappa}$ sono, rispettivamente, la curvatura e il versore normale, definiti entrambi attraverso la stessa \tilde{G} . Poiché il termine diffusivo normale alle isolinee di \tilde{G} è già incluso nella velocità della fiamma, per non considerarlo due volte lo eliminiamo dalla E.19:

$$-\nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v}'' \overline{G''}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla \tilde{G}) = -\bar{\rho} D_t \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}| \quad (\text{E.20})$$

L'effetto principale del termine di curvatura è l'annullamento delle eventuali cuspidi del fronte di fiamma medio, determinando una forma correttamente rilassata, specialmente in presenza di fiamme coniche tipo bruciatore *bunsen*.

Per la chiusura del termine di produzione turbolenta nell'equazione di $\widetilde{G''^2}$ E.15, è appropriata una chiusura secondo gradiente in quanto non sono coinvolte derivate del secondo ordine:

$$-\mathbf{v}''\widetilde{G}'' \cdot \nabla\widetilde{G} = D_t(\nabla\widetilde{G})^2 \quad (\text{E.21})$$

Per come abbiamo definito lo scalare G , il trasporto turbolento della varianza nell'eq.(E.15) deve essere opportunamente modellato per eliminare il contributo diffusivo in direzione normale al fronte. Abbiamo infatti visto nelle sezioni precedenti che la varianza condizionale è indipendente dalla coordinata normale al fronte di fiamma e poiché il trasporto in direzione tangenziale è permesso, sostituiamo il termine di trasporto turbolento con una chiusura secondo gradiente nella sola direzione tangenziale (operatore $\nabla_{||}$).

$$-\nabla \cdot (\bar{\rho}\mathbf{v}''\widetilde{G}'') = \nabla_{||} \cdot (\bar{\rho}D_t\nabla_{||}\widetilde{G}''^2) \quad (\text{E.22})$$

Occorre, a questo punto, determinare un'espressione per il termine sorgente dell'equazione di \widetilde{G} . L'equazione E.14, descrive la propagazione del fronte di fiamma medio. Nel caso monodimensionale, come per la combustione laminare, la portata di miscela reagente attraverso il fronte di fiamma stazionario determina la velocità di fiamma S_L^0 ; in regime turbolento possiamo riferirci ancora ad una fiamma stazionaria monodimensionale per introdurre e definire la velocità di fiamma turbolenta S_T^0 (vedi anche figura 3.1). Potendo assumere che questa grandezza dipenda unicamente dai valori medi locali delle varie grandezze, è corretto assumere costante la portata attraverso il fronte di fiamma, pari a $\bar{\rho}s_T^0$, come descritto dall'equazione di \widetilde{G} ridotta al caso monodimensionale stazionario:

$$(\bar{\rho}S_T^0)\frac{\partial\widetilde{G}}{\partial x} = (\rho S_L^0)\widetilde{\sigma} \quad (\text{E.23})$$

Come per il caso laminare, x è la coordinata normale alla superficie del fronte di fiamma medio con direzione verso i gas bruciati. Per il fronte di fiamma turbolento si ha, ricordando la definizione di G :

$$dx = \frac{d\widetilde{G}}{|\nabla\widetilde{G}|} \quad (\text{E.24})$$

Il gradiente $d\widetilde{G}/dx$ dell'equazione E.23 può perciò essere sostituito da $|\nabla\widetilde{G}|$, risultando:

$$(\bar{\rho}S_T^0)|\nabla\widetilde{G}| = (\rho S_L^0)\widetilde{\sigma} \quad (\text{E.25})$$

L'equazione descrive la relazione tra la velocità di fiamma turbolenta S_T^0 e il gradiente medio di G , $\tilde{\sigma}$ che, ricordiamo, sono grandezze condizionali e vanno calcolate sul fronte di fiamma medio. Sfruttando questa nuova definizione e usando le varie chiusure derivate sopra, si riscrivono le equazioni E.14 e E.15 per \tilde{G} e $\widetilde{G''^2}$ che diventano:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{G}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{G}) = (\bar{\rho} S_T^0) |\nabla \tilde{G}| - \bar{\rho} D_t \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}| \quad (\text{E.26})$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{G''^2}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \widetilde{G''^2}) = \nabla_{||} \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla_{||} \widetilde{G''^2}) + 2\bar{\rho} D_t (\nabla \tilde{G})^2 - c_s \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{G''^2} \quad (\text{E.27})$$

Bibliografia

- [1] G.M. Abu-Orf and Cant R.S. A Turbulent Reaction Rate Model for Premixed Turbulent Combustion in Spark-Ignition Engines. *Combustion and Flame*, 122:233–252, 2000.
- [2] A. Andreini and B. Facchini. Sviluppo di un modello di combustione turbolenta. In *ATI Congresso Nazionale*, San Martino di Castrozza, Italia, Settembre 2003. S1-34.
- [3] P. Bailly, D. Garrèton, O. Simonin, P. Bruel, M. Champion, B. Deshases, S. Diplantier, and S. Sanquer. Experimental and numerical study of a premixed flame stabilized by a rectangular section cylinder. In *26th International Symposium on Combustion*, pages 923–929. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996.
- [4] R.J. Blint. The relationship of the laminar flame width to flame speed. *Combust. Sci. and Tech.*, 49:79–92, 1986.
- [5] R. Borghi. Gas turbine combustion. Lecture Notes, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1990.
- [6] B. S. Brewster, S. M. Cannon, J. R. Farmer, and F. Meng. Modeling of lean premixed combustion in stationary gas turbines. *Progress in energy and combustion science*, 25:353–385, 1999.
- [7] P. N. Brown, G. D. Byrne, and A. C. Hindmarsh. VODE: A Variable Coefficient ODE Solver. *SIAM J. Sci Stat. Comput.*, 10:1038–1051, 1989.
- [8] M. Bui-Pham, K. Seshadri, and F.A. Williams. The Asymptotic Structure of Premixed Methane-Air Flames with Slow CO Oxidation. *Combustion and Flame*, 89:343–362, 1992.
- [9] R. Cabra, T. Myhrvold, J. Y. Chen, R. W. Dibble, A. N. Karpetis, and R. S. Barlow. Simultaneous Laser Raman-Rayleigh-LIF measurements and numerical modeling results of a lifted turbulent H_2/N_2 jet flame in a vitiated

- coflow. In *29th International Symposium on Combustion*. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2002.
- [10] S. Carrà. Combustione omogenea. Scuola sulla combustione stazionaria. Firenze, 1992.
- [11] M. Chen, M. Herrmann, and N. Peters. Flamelet modeling of lifted turbulent methane/air and propane/air jet diffusion flames. In *28th International Symposium on Combustion*, pages 167–174. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000.
- [12] B. B. Dally, A. R. Masri, R. S. Barlow, and G. J. Fiechtner. Instantaneous and Mean Compositional Structure of Bluff-Body Stabilised Nonpremixed Flames. *Combustion and Flame*, 114:119–148, 1998.
- [13] L. P. H. de GOEY. Chem1d code. Technical report, TU Eindhoven, 2000.
- [14] L. P. H. de Goey and J. H. M. Boonkamp. A mass-based definition of flame stretch for flame with finite thickness. *Combust. Sci. and Techn.*, 122:399–405, 1997.
- [15] L. P. H. de Goey and J. H. M. Boonkamp. A flamelet description of premixed laminar flames and the relation with the flame stretch. *Combust. and Flame*, 119:253–271, 1999.
- [16] A. P. Dowling. Thermoacoustic Instability. In *6th KInt. Congress on Sound and Vibration*, pages 3277–3292, Copenhagen, Denmark, 1999.
- [17] A. Dreizler. Jet H3 Flame. Personal correspondence, 2002.
- [18] J.M. Duclos, D. Veynante, and T. Poinso. A Comparison of Flamelet Models for Premixed Turbulent Combustion. *Combustion and Flame*, 95:101–117, 1993.
- [19] I. S. Estervag and B. F. Magnussen. The eddy dissipation turbulence energy cascade model. *Combust. Sci. and Tech.*, 2000.
- [20] M. Sussman E. Fatemi. An efficient interface preserving level set re-distancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. Unpublished manuscript, 1997.
- [21] J. H. Ferziger. The physics and simulation of turbulence. Lecture Notes, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2002.

- [22] I. R. Gran. *Mathematical modeling and numerical simulation of chemical kinetic in turbulent combustion*. PhD thesis, University of Trondheim, The Norwegian Institute of Technology, Division of Thermodynamics, 1994.
- [23] I. R. Gran and B. F. Magnussen. A numerical study of a bluff body stabilized diffusion flame. Part I: Influence of turbulence modeling and boundary conditions. *Combust. Sci. and Tech.*, 119:171–190, 1996.
- [24] I. R. Gran and B. F. Magnussen. A numerical study of a bluff body stabilized diffusion flame. Part II: Influence of combustion modeling and finite rate chemistry. *Combust. Sci. and Tech.*, 119:191–217, 1996.
- [25] I. R. Gran, M. C. Melaaen, and B. F. Magnussen. Numerical simulations of local extinction effects in turbulent combustor flows of methane and air. In *25th International Symposium on Combustion*, pages 1283–1291. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1994.
- [26] J. F. Grear. The Twopnt Program for Boundary Value Problems. Technical Report SAND91-8230, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, USA, April 1992.
- [27] G.R.A. Groot. *Modelling of Propagating Spherical and Cylindrical Premixed Flames*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2003.
- [28] CD Adapco Group. *Methodology STAR-CD VERSION 3.15*. Computational Dynamics Limited, 2001.
- [29] K. Hanjalic. Turbulent closure models. Lecture Notes, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2002.
- [30] T. J. Held and H. C. Mongia. Application of a partially premixed laminar flamelet model to a low emissions gas turbine combustor. In *IGTI Congress and Exhibition*, Stockholm, Sweden, 1998. ASME Paper 98-GT-217.
- [31] M. G. Herrmann. *Numerical Simulation of Premixed Turbulent Combustion Based on a Level Set Flamelet Model*. PhD thesis, RWTH Aachen, 2001.
- [32] H. S. Hura, N. D. Joshi, and H. C. Mongia. Dry low emissions premixer CCD modeling and validation. In *IGTI Congress and Exhibition*, Stockholm, Sweden, 1998. ASME Paper 98-GT-444.
- [33] R. J. Kee, F. M. Rupley, and J. A. Miller. Chemkin-ii: A FORTRAN chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Technical Report SAND89-8009, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, USA, 1989.

- [34] H. Kobayashi, Y. Kawabata, and K. Maruta. Experimental study on general correlation of turbulent burning velocity at high pressure. In *27th International Symposium on Combustion*, pages 941–948. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998.
- [35] U. Krüger, S. Hoffmann, W. Krebs, H. Judith, D. Bohn, and G. Matouschek. Influence of turbulence on the dynamic behaviour of premixed flames. In *IGTI Congress and Exhibition*, Stockholm, Sweden, 1998. ASME Paper 98-GT-323.
- [36] D. Laurence. Applications of Reynolds Avergaed Navier Stokes equations to industrial flows. Lecture Notes, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2002.
- [37] S.C. Li, F.A. Williams, and K. Gebert. A Simplified Fundamentally Based Method for Calculating NO_x Emissions in Lean Premixed Combustors. *Combustion and Flame*, 119:367–373, 1999.
- [38] A. N. Lipatnikov and J. Chomiak. Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulation. *Progress in energy and combustion science*, 28:1–74, 2002.
- [39] O. Lucca-Negro and T. O’Doherty. Vortex breakdown: a review. *Progress in energy and combustion science*, 27:431–481, 2001.
- [40] A. E. Lutz, F. M. Rupley, and R. J. Kee. EQUIL: A CHEMKIN implementation of STANJAN, for computing chemical equilibria. Technical Report SAND96-XXXXX, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, USA, 1996.
- [41] H. C. Magel, U. Schnell, and K. R. Hein. Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow. In *26th International Symposium on Combustion*, pages 67–74. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996.
- [42] B. F. Magnussen. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. In *19th AIAA science meetings*, St Louis. USA, 1981.
- [43] B. F. Magnussen. Modeling of pollutant formation in gas turbine combustors based on the eddy dissipation concept. In *CIMAC Conference*, Tianjin. CHINA, 1989.
- [44] B. F. Magnussen and B.H. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In *16th International Symposium on Combustion*, pages 719–729. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1976.

- [45] B. F. Magnussen, B.H. Hjertager, J.G. Olsen, and D. Bhaduri. Effects of turbulence structure and local concentrations on soot formation and combustion in C_2H_2 diffusion flames. In *17th International Symposium on Combustion*, pages 1383–1393. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1978.
- [46] H. P. Mallampalli, T. H. Fletcher, and J. Y. Chen. Evaluation of CH_4/NO_x Reduced Mechanism Used for Modeling Lean Premixed Turbulent Combustion of Natural Gas. *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 120:703–711, July 1998.
- [47] A. Maltsev, A. Sadiki, and J. Janicka. Numerical prediction of partially premixed flames based on extended BML model coupled with mixing transport and ILDM chemical model. In *IGTI Congress and Exhibition*, Atlanta, Georgia, 2003. GT2003-38265.
- [48] W. Meier, S. Prucker, M. H. Cao, and W. Stricker. Characterization of Turbulent $H_2/N_2/Air$ Jet Diffusion Flames by Single-Pulse Spontaneous Raman Scattering. *Combust. Sci. and Tech.*, 118:293–315, 1996.
- [49] C. Meneveau and T. Poinso. Stretching and Quenching of Flamelets in Premixed Turbulent Combustion. *Combustion and Flame*, 86:311–332, 1991.
- [50] U. C. Muller, M. Bollig, and N. Peters. Approximations for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames. *Combustion and Flame*, 108:349–356, 1997.
- [51] U. C. Muller, H. Breitbach, and N. Peters. Partially premixed turbulent flame propagation in jet flames. In *25th International Symposium on Combustion*, pages 1099–1106. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1994.
- [52] S. P. Nandula. *Lean Premixed Flame Structure In Intense Turbulence: Rayleigh/Raman/Lif Measurements And Modeling*. PhD thesis, Graduate School Vanderbilt University, 2003.
- [53] D. G. Nicol, P. M. Malte, A. J. Hamer, R. J. Roby, and R. C. Steele. Development of a five-step global Methane oxidation-NO formation mechanism for lean premixed gas turbine combustion. In *IGTI Congress and Exhibition*, Stockholm, Sweden, 1998. ASME Paper 98-GT-85.
- [54] P. Nilsson. *A level-set flamelet library model for premixed turbulent combustion*. PhD thesis, Lund Institute of Technology, Department of Heat and Power Generation, 2001.

- [55] P. Nilsson and X.S. Bai. Simulation of CO formation in premixed turbulent combustion. In *4th Asian CFD Conference, Mianyang, China*, pages 112–120. H. Zhang Ed., 2000.
- [56] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [57] N. Peters and F. A. Williams. The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames. *Combustion and Flame*, 68:185–207, 1987.
- [58] M. Phillip, S. Hoffmann, P. Habisreuther, B. Lenze, and H. Eickhoff. Experimental and numerical study concerning stabilization of strongly swirling of premixed and nonpremixed flames. In *24th International Symposium on Combustion*, pages 361–368. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1992.
- [59] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, Philadelphia, USA, 2001.
- [60] W. Polifke, M. Bettelini, W. Geng, U.C. Müller, W. Weisenstein, and P. Jansohn. Comparison of Combustion Models for Industrial Applications. In *ECCOMAS*. John Wiley and Sons, Ltd, 1998.
- [61] W. Polifke, K. Döbbeling, T. Sattelmayer, D.G. Nicol, and P. C. Malte. A NO_x prediction scheme for lean-premixed gas turbine combustion based on detailed chemical kinetics. *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118:765–772, October 1996.
- [62] W. Polifke, P. Flohr, and M. Brandt. Modeling of inhomogeneously premixed combustion with an extended TFC model. In *ASME TURBO-EXPO*, Munich, Germany, 2000. ASME Paper 2000-GT-0135.
- [63] W. Polifke, W. Geng, and K. Döbbeling. Optimization of Rate Constants for Simplified Reaction Mechanisms with Genetic Algorithms. *Combustion and Flame*, 113:367–373, 1998.
- [64] S. B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [65] R. O. S. Prasad and J.P. Gore. An Evaluation of Flame Surface Density Models for Turbulent Premixed Jet Flames. *Combustion and Flame*, 122:1–14, 1999.
- [66] S. Repp, E. Khiviousk, A. Sadiki, and J. Janicka. Modeling and simulation of a turbulent premixed methane/air flame based on the G-Equation. In *IGTI Congress and Exhibition*, Amsterdam, The Netherlands, 2002. GT2002-30095.

- [67] T. Sattelmayer, W. Polifke, K. Döbbeling, and D. Winkler. NO_x abatement potential of lean-premixed GT combustors. *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 120:48–59, January 1998.
- [68] P. Schmid, H. P. and Habisreuther and W. Leuckel. A μ Model for Calculating Heat Release in Premixed Turbulent Flames. *Combustion and Flame*, 113:79–91, 1998.
- [69] D. Adalsteinsson J. A. Sethian. The Fast Construction of Extension Velocities in Level Set Method. *Computational Physics*, 155:38–410, 1999.
- [70] M.D. Smooke and V. Giovangigli. Formulation of the premixed and non-premixed test problems. *Lecture Notes in Physics*, volume 384, pages 1.28, 1991.
- [71] M .Sussman, A.S. Almgren, J.B. Bell, P.Colella, L. H. Howell, and M. L. Welcome. An adaptative level set approach for incompressible two-phase flows. Technical report, Department of Mathematics, University of California Davis , 1996.
- [72] M .Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, and S. Osher. An improved level set method for incompressible two-phase flows. Technical report, Lawrence Livermore National Laboratory, 1997.
- [73] V. Tangirala, Haynes J., S. M. Correa, and R. Seiser. Numerical Simulation of Late-Lean Ignition Processes. Technical Report 2001CRD210, GE Research and Development Center, USA, 2002.
- [74] V. Tangirala, A. Topaldi, A. Danis, and H. Mongia. Parametric Modeling Approach to Gas Turbine Combustor Design. In *ASME TURBO-EXPO*, Munich, Germany, 2000. ASME Paper 2000-GT-0129.
- [75] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in energy and combustion science*, 28:193–266, 2002.
- [76] S. M. Walas. Reaction Kinetics. In R. H. Perry and D. W. Green, editors, *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. McGraw-Hill, 1999.
- [77] J. Warnatz, U. Maas, and R. W. Dibble. *Combustion*. Springer, first edition, 1995.
- [78] T. Weydal, I. Ertesvag, I. R. Gran, B. F. Magnussen, and P. Kilpinen. Prediction of nitrogen oxide formation in ammonia-doped turbulent syngas jet flames. In *29th International Symposium on Combustion*. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2002.

- [79] D. C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD (Second Edition)*. DCW Industries, California, USA, 2002.
- [80] F. A. Williams. Progress in knowledge of flamelet structure and extinction. *Progress in energy and combustion science*, 26:657–682, 2000.
- [81] F. A. Williams. *The Mathematics of Combustion*. Buckmaster, SIAM, 1985.
- [82] V. Zimont, W. Polifke, M. Bettelini, and W. Weisenstein. An efficient computational model for premixed turbulent combustion at high reynolds numbers based on a turbulent flame speed closure. *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 120:526–532, July 1998.