

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI *"FEDERICO II"*



FACOLTÀ DI INGEGNERIA
DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA MECCANICA PER L'ENERGETICA

Dottorato di Ricerca in *"INGEGNERIA DEI SISTEMI MECCANICI"*

XX CICLO

TESI DI DOTTORATO

**SISTEMI DI COMBUSTIONE A BASSE EMISSIONI IN MACCHINE
A COMBUSTIONE INTERNA DI PICCOLA POTENZA**

COORDINATORE DEL DOTTORATO

Ch.mo Prof. Ing. Raffaele Tuccillo

CANDIDATO

Ing. Renzo Piazzesi

TUTOR:

Ch.mo Prof. Ing. Raffaele Tuccillo

Ch.mo Prof. Ing. Fabio Bozza

ANNO ACCADEMICO 2006/2007

INDICE

Introduzione	1
Capitolo 1: Combustione MILD e Motori HCCI	4
1.1 Combustione Diluita.....	4
1.2 Combustione MILD.....	7
1.3 Motori HCCI	10
2.1 Introduzione.....	13
2.2 La Turbolenza	15
2.2.1 <i>Approcci nella Simulazione della Turbolenza</i>	22
2.2.1.1 Modelli RANS.....	25
2.2.2 <i>Simulazione Large Eddy</i>	35
2.3 La Combustione Turbolenta.....	39
2.3.1 <i>Modello Eddy Dissipation.....</i>	41
2.3.2 <i>Combustione Non Premiscelata</i>	44
2.3.2.1 Turbolenza e Combustione non Premiscelata	53
2.3.2.2 La Generazione delle <i>Flamelet</i>	57
2.3.3 <i>Combustione Premiscelata</i>	59

Capitolo 3: Generazione di Griglie Computazionali	62
3.1 Introduzione.....	62
3.1 Classificazione delle griglie	63
3.1.1 <i>Griglie Strutturate</i>	63
3.1.2 <i>Griglie Non Strutturate</i>	66
3.2 La Scelta della Griglia.....	68
3.2.1 <i>Combustore Lean Premixed 3D.....</i>	71
3.2.2 <i>Filtri di Aspirazione e Scarico di un Motore Benzina.....</i>	74
3.2.3 <i>Filtro di Aspirazione di un Motore Diesel Agricolo.....</i>	78
3.2.4 <i>Motore Due Tempi Morini</i>	80
3.2.5 <i>Motore Diesel BMW-Bosch.....</i>	83
Capitolo 4: Esperimenti Numerici	87
4.1 Introduzione.....	87
4.2 Combustore Non Premiscelato	89
4.2.1 <i>La Geometria e le condizioni al Contorno</i>	89
4.2.2 <i>Confronto tra Diversi Domini Computazionali</i>	91
4.2.3 <i>Analisi di Sensibilità alla Griglia</i>	101
4.2.4 <i>Confronto tra Diversi Modelli di Turbolenza.....</i>	110
4.2.5 <i>Confronto tra Diversi Modelli di Combustione.....</i>	119

4.3	Combustore Premiscelato.....	123
4.3.1	<i>La Geometria e le Condizioni al Contorno.....</i>	123
4.3.2	<i>Risultati.....</i>	125
4.4	Generazione delle Flamelet	131
Capitolo 5: Studio del Combustore di una MGT		134
5.1	Introduzione.....	134
5.2	La Camera	135
5.3	Metodologia di Analisi.....	141
5.3.1	<i>Analisi Termodinamica e di Accoppiamento.....</i>	143
5.3.2	<i>Le Simulazioni CFD</i>	149
5.3.2.1	<i>Risultati Modello FRED</i>	160
5.3.2.2	<i>Risultati Flamelet.....</i>	165
Capitolo 6: Studio di un Motore Diesel		174
6.1	Introduzione.....	174
6.2	La Camera di Combustione del Motore BMW	175
6.3	Metodologia di Analisi.....	177
6.3.1	<i>Analisi Monodimensionale.....</i>	177
6.3.2	<i>Le Simulazioni CFD</i>	184
6.3.2.1	<i>Configurazione Base</i>	188
6.3.2.2	<i>Comportamento in EGR.....</i>	195
6.3.2.3	<i>Influenza della Geometria dei Condotti</i>	203
6.3.2.4	<i>Influenza dell'Apertura delle Valvole</i>	215

Conclusioni	228
Bibliografia	230

INTRODUZIONE

Il crescente interesse da parte dell'opinione pubblica sulle tematiche ambientali e le sempre più stringenti norme nazionali ed internazionali sulla immissione in atmosfera di specie inquinanti impongono alla comunità scientifica e alle industrie l'individuazione e lo sviluppo di nuove tecnologie di combustione sia per i sistemi di conversione dell'energia che per i motori per autotrazione.

Se da un lato l'aumento della concentrazione di biossido di carbonio, gas considerato ormai universalmente il maggiore responsabile del riscaldamento globale del pianeta e dei conseguenti stravolgimenti climatici, potrà essere fermata soltanto con la sostituzione delle fonti fossili con quelle rinnovabili (quali geotermia, fotovoltaico, eolico, bio-carburanti), la riduzione delle emissioni legate alla combustione di un qualsiasi combustibile, quali *particolato* e *ossidi di azoto*, potrà essere ottenuta mediante l'adozione di tecnologie di combustione innovative come la *MILD Combustion* negli impianti di produzione di energia (elettrica o termica) e i motori a carica omogenea ad accensione per compressione (*HCCI: Homogeneous Charge Compression Ignition Engines*) per l'autotrazione.

Il presente lavoro di ricerca si inserisce in questo contesto con lo scopo di valutare la possibilità di impiegare tali tecnologie in impianti di piccola taglia sia per la produzione di energia elettrica e termica distribuita, sia per

l'autotrazione. In particolare l'attenzione è stata focalizzata sul sistema di combustione di una micro-turbina a gas dalla potenza elettrica nominale di 100 kW sviluppata dall'*Ansaldo Ricerche* di Genova e sulla camera di combustione di un motore BMW 3 litri, oggetto di studio da parte della Bosch, al banco prova del centro ricerche *CVIT* di Modugno (Bari). Sebbene i meccanismi di combustione che caratterizzano tali sistemi sembrano a prima vista profondamente diversi (nel caso del combustore della MGT siamo di fronte ad un sistema di combustione sostanzialmente stazionario mentre il motore alternativo per sua stessa natura rappresenta un sistema non stazionario periodico), le condizioni di funzionamento che sono state studiate prevedono, per entrambi i sistemi, l'adozione del ricircolo de gas combusti (*EGR*) unito al preriscaldamento dei reagenti. Ciò avvicina il processo di combustione di entrambi i sistemi alle caratteristiche della combustione *MILD*. Infatti si assiste nelle due camere di combustione ad un abbassamento delle temperature massime e a distribuzioni di temperatura spaziali molto più uniformi che determinano, di conseguenza, una drastica riduzione delle emissioni di ossidi di azoto e un contemporaneo incremento delle emissioni di monossido di carbonio e di idrocarburi incombusti.

L'analisi dei due sistemi è stata condotta mediante l'utilizzo della fluidodinamica computazionale, in particolare con l'ausilio di due solutori di ampia diffusione, quali il FLUENT® e il KIVA-3V. Dato che le condizioni allo studio sono caratterizzate da elevate concentrazioni di inerti, si impone la necessità di sperimentare nuovi modelli di combustione nelle simulazioni termofluidodinamiche. In questo lavoro, oltre al classico modello *finite*

rate/eddy dissipation, si è adottato il modello parzialmente premiscelato basato sulle *flamelet*, con il tentativo di considerare all'interno delle fiamme turbolente la chimica dettagliata che governa il processo. Per l'individuazione delle condizioni al contorno dei calcoli *CFD*, inoltre, si sono adoperati due codici sviluppati all'interno del dipartimento, ed opportunamente modificati per lo scopo: un codice di accoppiamento fra i componenti per gli impianti a turbina a gas ed uno monodimensionale per la simulazione dei motori a combustione interna.

Parte dell'attività è stata indirizzata alla sperimentazione di differenti approcci alla rappresentazione della turbolenza e della combustione mediante le tecniche *CFD*. In particolare si sono studiati sistemi di combustione estremamente semplici (sostanzialmente di forma cilindrica) sia di tipo diffusivo che premiscelato. Tali "esperimenti" numerici hanno permesso di mettere in luce i differenti comportamenti dei modelli di turbolenza e combustione a disposizione e la loro interazione.

Parte dell'attività di ricerca svolta, inoltre, ha visto l'approfondimento delle tematiche legate alla generazione delle griglie computazionali per gli studi *CFD*. Il lavoro ha visto l'impiego del software commerciale ICEM-*CFD*. Nel corso dei tre anni di dottorato si sono realizzate varie griglie computazionali per diversi solutori fluidodinamici e strutturali.

CAPITOLO 1: COMBUSTIONE MILD E MOTORI HCCI

1.1 COMBUSTIONE DILUITA

Durante gli ultimi anni uno dei maggiori obiettivi nello sviluppo dei sistemi di produzione di energia è stato il raggiungimento di un processo di combustione che sia in grado di ridurre le emissioni inquinanti, quali NO_x e particolato, e di incrementare l'efficienza energetica dei sistemi in modo da ridurre i consumi di combustibile e le emissioni di CO_2 . A tale scopo, alcuni ricercatori hanno proposto di utilizzare temperature di ingresso in camera di combustione dei reagenti più elevate di quelle che vengono attualmente utilizzate nei sistemi di combustione tradizionali. Ciò consente di ottenere una migliore conversione del combustibile in CO_2 e H_2O e di utilizzare la maggiore temperatura dei gas combusti per il pre-riscaldamento della miscela reagente.

Da un punto di vista storico, l'attenzione è stata focalizzata su sistemi di combustione rigenerativi a matrice ceramica che sfruttano elevate temperature di ingresso in camera combustione (CC) mediante il preriscaldamento dell'aria (*High Temperature Air Combustion, HiTAC*) o dei reagenti (*High temperature Combustion Technology, HiCOT*). L'innovazione introdotta da questo tipo di sistemi di combustione consiste nel fatto che le temperature di preriscaldamento dei reagenti possono essere superiori alla temperatura di autoaccensione del combustibile.

Tuttavia, l'incremento della temperatura di preriscaldamento dell'aria deve essere accompagnato necessariamente da una riduzione del tenore di ossigeno dell'aria comburente attraverso diluizione con gas inerti per il controllo

delle emissioni di ossidi di azoto. La diluizione, infatti, consente di contenere l'innalzamento della temperatura di fiamma e, conseguentemente di tenere sotto controllo la produzione di NO_x , in quanto in presenza di una distribuzione omogenea di temperature priva di picchi la formazione degli ossidi di azoto è inibita.

In presenza della diluizione la combustione evolve secondo meccanismi di reazione che differiscono in funzione del livello stesso di diluizione. Si assiste alla determinazione in camera di combustione di ampie zone caratterizzate da profili di temperatura pressoché uniformi, ad una notevole riduzione delle emissioni acustiche e allo spostamento delle emissioni luminose dal campo del visibile all'infrarosso, con conseguente scomparsa della fiamma. Altro effetto della diluizione è la tendenza dei limiti di infiammabilità (superiore ed inferiore) a convergere all'aumentare della concentrazione del diluente [5]. In Figura 1.1-1 si riporta il grafico dei limiti di infiammabilità nel caso di miscele metano-aria-diluente alla temperatura di 25° C e alla pressione atmosferica.

In presenza di una elevata concentrazione del diluente, per consentire l'ossidazione del combustibile risulta necessario introdurre i reagenti in CC ad una temperatura superiore alla temperatura di autoaccensione.

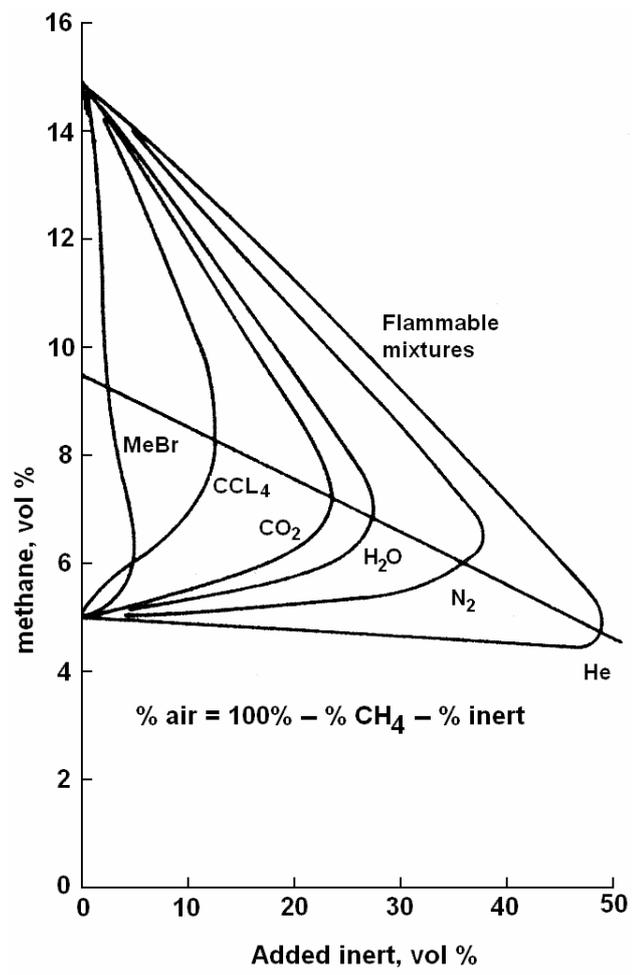


Figura 1.1-1

1.2 COMBUSTIONE MILD

Con Combustione *MILD* si indica un “nuovo” processo di combustione che negli ultimi anni sta conoscendo una chiara formalizzazione e sperimentazione.

Tale tipologia di combustione è caratterizzata da un lato da elevate temperature dei reagenti e dall’altro da un basso incremento di temperatura. Queste caratteristiche sono il risultato di diverse esigenze tecnologiche provenienti da differenti campi. Propriamente la *MILD Combustion* rappresenta un sottogruppo delle tecnologie note come *HiTAC* o *HiCOT*.

Una definizione rigorosa del processo è stata data da *Cavaliere e de Joannon* [1]; secondo gli autori un processo di combustione si può definire *MILD* quando:

“la temperatura di autoaccensione del combustibile (in Kelvin), in condizioni stechiometriche, è inferiore alla temperatura di ingresso dei reagenti e contemporaneamente superiore al massimo incremento di temperatura raggiunto all’interno della camera di combustione”.

In base alla definizione data, è possibile individuare in un piano bidimensionale (Figura 1.2-1), in cui si riporta sulle ascisse il valore della temperatura di ingresso dei reagenti e sulle ordinate l’incremento massimo di temperatura in camera di combustione, la regione occupata dalla combustione *MILD*. In tale piano è possibile rappresentare anche le regioni in cui si vengono a

determinare le condizioni per altri due regimi di combustione stabile: *feedback combustion*; *high temperature combustion*.

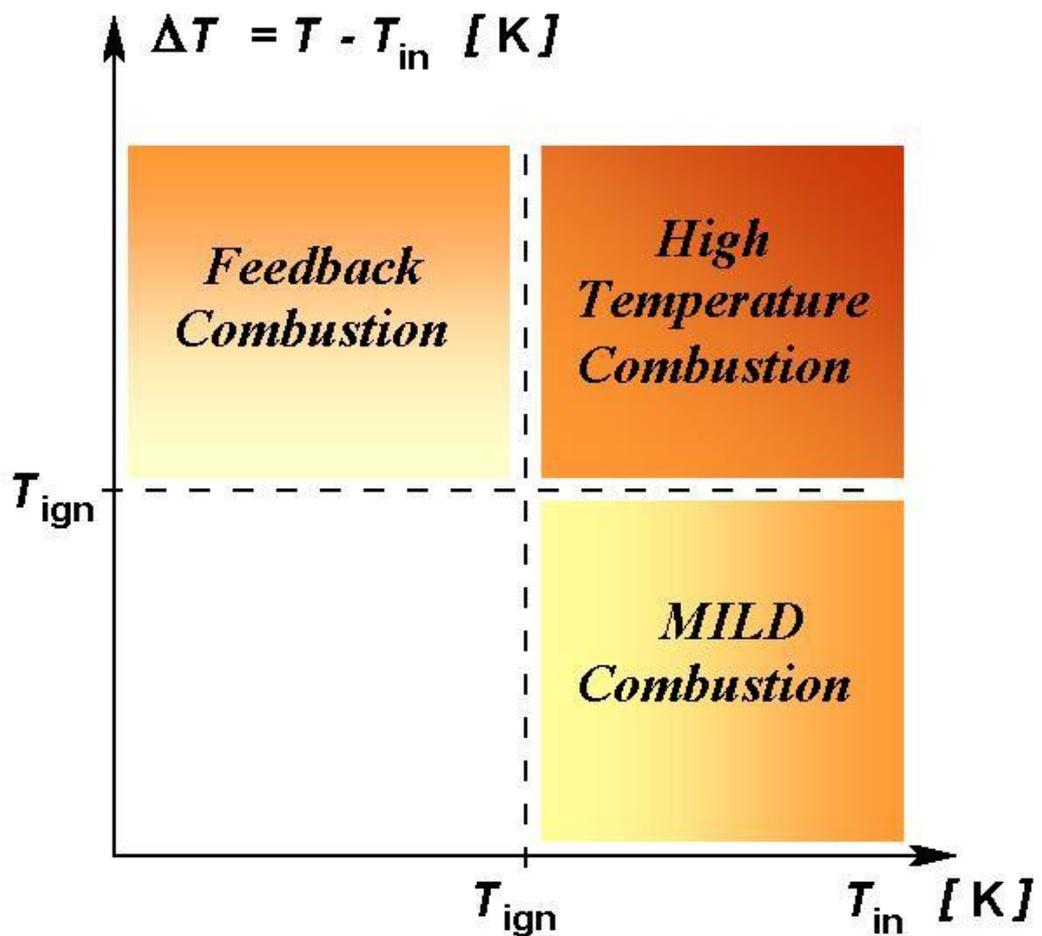


Figura 1.2-1

Ciò che distingue la combustione *MILD* dagli altri due regimi è la necessità del preriscaldamento dei reagenti, altrimenti la reazione non sarebbe in grado

di auto sostenersi. Gli altri due regimi, al contrario, determinano un rilascio di calore sufficiente ad innalzare la temperatura ai livelli di autosostenimento della fiamma.

Nel regime *MILD* è possibile includere, oltre a processi di combustione veri e propri (quali la combustione flameless), i processi di reforming e quelli di pirolisi (da qui si capisce anche l'acronimo che è stato attribuito al termine *MILD*, *Moderate and Intensive Low oxygen Diluted combustion*, oltre al significato di combustione dolce).

Nel regime *MILD*, subito a valle delle zone di ingresso dei flussi reagenti, si ottiene un elevato livello di omogeneità con la zona di reazione che si estende alla quasi totalità del dominio, con ridotti gradienti di temperatura e di concentrazione delle specie chimiche [6]. Si favorisce così una combustione caratterizzata dall'assenza di una fiamma visibile, da un abbattimento delle emissioni inquinanti e da un ridotto rilascio di energia acustica [7].

1.3 MOTORI HCCI

I motori a carica omogenea ad accensione per compressione (*Homogeneous Charge Compression Ignition* o brevemente *HCCI*) sono un tipo di motori a combustione interna in cui combustibile e comburente ben miscelati vengono compressi fino al punto di auto ignizione della carica.

Il meccanismo di combustione che caratterizza i motori a carica omogenea rappresenta, nel mondo dei motori alternativi, un esempio di combustione *MILD* [1]. Scopo di tale tecnologia è avere in camera di combustione una carica omogenea che, una volta che l'incremento di pressione ha superato un determinato rapporto, si autoaccenda in tutti i punti della camera contemporaneamente. In questo tipo di motore, si raggiungono, in virtù della compressione, temperature superiori alla temperatura di autoaccensione della miscela, pertanto una delle caratteristiche dei processi *MILD* viene soddisfatta. Allo stesso tempo la massima temperatura della carica è tenuta sufficientemente bassa mediante l'utilizzo di miscele molto povere (*super-lean*) e/o la diluizione della carica con inerti (tipicamente con i prodotti della combustione stessa, mediante ricircolo dei gas combusti, *EGR*), conferendo a tali dispositivi anche la seconda caratteristica della combustione *MILD*. In queste condizioni, si riesce a mantenere livelli estremamente bassi delle emissioni di NO_x e a progettare cicli con rendimenti elevati.

Gli *HCCI* presentano alcune caratteristiche comuni ai motori a combustione interna a più larga diffusione attualmente presenti sul mercato: i motori a carica omogenea ad accensione comandata (motori a benzina) e i motori ad accensione per compressione (motori Diesel).

Come accade nei motori a benzina, negli *HCCI* combustibile e comburente sono premiscelati; tuttavia invece di utilizzare una scarica elettrica per dare avvio alla combustione in una porzione della miscela con conseguente propagazione di un fronte di fiamma, nei motori *HCCI* è la compressione della miscela che determina un incremento della temperatura tale da far reagire l'intera miscela contemporaneamente. Anche nei motori Diesel l'innalzamento della pressione determina l'innescò della combustione, tuttavia questa si innesca nella periferia delle singole gocce iniettate a cavallo del punto morto superiore (*PMS* o *Top Dead Center, TDC*). Ciò che contraddistingue i motori *HCCI* dai motori tradizionali (diesel o benzina) è il fatto che la combustione, in tali dispositivi, ha inizio in diverse zone della carica omogenea simultaneamente. Non essendo presente alcun tipo di innesco il controllo del processo risulta estremamente difficile. Tuttavia, con il progredire delle capacità di calcolo dei processori e delle conoscenze sul processo di ignizione, i motori *HCCI* potranno essere controllati per raggiungere emissioni pari ai motori benzina ed efficienze paragonabili agli attuali motori Diesel. Infatti i motori *HCCI* hanno mostrato la possibilità di raggiungere livelli estremamente bassi di NO_x senza l'utilizzo di sistemi di post-trattamento. Tuttavia a causa delle basse temperature che si determinano in camera di combustione, i livelli di monossido di carbonio e di idrocarburi incombusti rimangono comunque elevati il che impone la presenza di un sistema di post-trattamento per il rispetto delle attuali e future norme anti inquinamento.

Il maggiore ostacolo alla commercializzazione dei motori *HCCI* è rappresentato dalla difficoltà di controllo del processo di combustione. Infatti,

controllare il meccanismo di combustione di questi motori risulta molto più complesso rispetto ai meccanismi dei più popolari motori moderni in cui i tempi del processo sono controllati in un caso dalla scintilla elettrica e nell'altro dall'iniezione di combustibile. Negli *HCCI* la miscela viene compressa fino a che si raggiungono le condizioni ideali per la combustione, il che significa che non esiste un evento specifico che dà inizio alla combustione, al quale poter affidare il controllo del fenomeno. È sicuramente possibile progettare un motore che sia in grado di determinare nel cilindro le condizioni opportune per l'autoaccensione della miscela con la desiderata tempistica; tuttavia ciò è possibile per un solo punto operativo, il che non consente di adeguare la potenza del motore alle richieste per un ampio intervallo. Per garantire l'autoaccensione della miscela in tutte le condizioni operative (compreso quelle dinamiche), e dunque dotare i motori *HCCI* di un più elevato grado di flessibilità, è necessario sviluppare sistemi di controllo efficaci. A tal scopo si rende necessaria la possibilità di controllare il rapporto di compressione del motore, la temperatura e la pressione della carica omogenea, il rapporto aria/combustibile, la quantità di gas combusti intrappolati o ricircolati nel sistema di combustione (*EGR*).

CAPITOLO 2: TURBOLENZA E COMBUSTIONE

2.1 INTRODUZIONE

I combustibili fossili rappresentano ancora oggi la fonte principale di energia per il riscaldamento domestico, la generazione elettrica ed i trasporti. Altre fonti alternative come il fotovoltaico e l'eolico o l'energia nucleare coprono insieme meno del 20% del fabbisogno energetico mondiale. Pertanto la combustione, benché sia un processo fisico noto sin dall'antichità, è e sarà per il prossimo futuro una tecnologia chiave. Tuttavia la combustione, oltre a liberare energia, genera anche inquinanti come ossidi di azoto, particolato e idrocarburi incombusti. Normative sempre più severe stanno obbligando, per il bene dell'ambiente, i costruttori di mezzi di trasporto e macchine termiche a ridurre le emissioni di tali inquinanti mediante il miglioramento dei sistemi di combustione. Per contenere i costi ed i tempi di progettazione di questi elementi attualmente si ricorre sempre più spesso alla fluidodinamica computazionale (*CFD*). Con l'ausilio della *CFD* è possibile studiare diverse configurazioni dei sistemi di combustione nonché verificarne il comportamento in diverse condizioni operative.

Nei processi industriali, la combustione ha luogo quasi sempre nell'ambito di flussi turbolenti. La ragione è duplice: da un lato la turbolenza migliora il processo di *mixing* tra combustibile e comburente necessario per sostenere la combustione; dall'altro, quest'ultima, rilasciando calore, genera delle instabilità fluidodinamiche (dovute all'espansione dei gas) che favoriscono la transizione dal moto laminare a quello turbolento.

Per effettuare una simulazione numerica mediante tecniche di fluidodinamica computazionale risulta, dunque, necessario descrivere la turbolenza e la combustione nonché la loro interazione.

2.2 LA TURBOLENZA

Nel 1937, *von Kármán*, citando *G.I. Taylor*, definì così la turbolenza:

“Turbulence is an irregular motion which in general makes its appearance in fluids, gaseous or liquid, when they flow past solid surfaces or even when neighboring stream of the same fluid flow past or over one another.”

Tale definizione coglie uno degli aspetti fondamentali del fenomeno turbolenza: *l'irregolarità* dell'evoluzione temporale del moto di un fluido. Tuttavia questa risulta imprecisa ed incompleta: infatti, sebbene un flusso turbolento sia intrinsecamente irregolare non è detto che un flusso irregolare sia turbolento. Con il progredire delle conoscenze sul fenomeno sono state individuate altre caratteristiche distintive di un moto turbolento. Alla irregolarità del campo di moto si sono associati un alto livello di diffusività delle grandezze estensive (quali massa, quantità di moto, entalpia), una forte tridimensionalità, un carattere spiccatamente dissipativo (nel senso che parte dell'energia cinetica associata al moto disordinato viene trasformata in energia interna) nonché la presenza di più scale dimensionali e temporali caratteristiche (rappresentate dalle frequenze e dalle lunghezze d'onda rivelate da una analisi di *Fourier* dell'andamento nel tempo del moto di un fluido). È da tenere in considerazione che persino le scale turbolente più piccole risultano essere di qualche ordine di grandezza maggiori di qualunque scala molecolare caratteristica, il che permette di considerare la turbolenza come un fenomeno *continuo* e dunque di

descrivere mediante le equazioni della fluidodinamica. Altra proprietà comune a tutti i flussi turbolenti è che se si ripete lo stesso esperimento e si misura l'evoluzione temporale di una stessa grandezza nello stesso punto per lo stesso intervallo di tempo si ottengono dei segnali caratterizzati da valori istante per istante diversi ma con caratteristiche statistiche identiche (valore medio, deviazione standard, etc.).

Tale proprietà sembrerebbe essere in contrasto con il carattere deterministico delle equazioni di *Navier-Stokes*: definite le condizioni iniziali e quelle al contorno la soluzione delle equazioni della fluidodinamica dovrebbe essere univoca (in realtà per sistemi non forzati la soluzione di regime dovrebbe essere indipendente dalle condizioni iniziali). Tale dilemma è stato risolto da *Lorenz E.*, un meteorologo con la passione per la matematica, che nel 1963 mostrò (aprendo la strada alle teorie matematiche del *caos*) che alcuni sistemi *non lineari* possono avere una tale sensibilità alle condizioni iniziali che perturbazioni inapprezzabili nei parametri di partenza determinano rapidamente soluzioni completamente differenti.

L'intrinseca non linearità delle equazioni di *Navier-Stokes*, unita alla pratica impossibilità di realizzare due volte lo stesso esperimento a partire da condizioni iniziali ed al contorno replicate con una precisione "infinita", porta inevitabilmente a soluzioni tra loro divergenti nel tempo. I termini non lineari sono anche gli artefici della produzione di fluttuazioni locali di velocità che comportano la generazione di strutture fluidodinamiche note in letteratura come *eddies*. Un *eddy* turbolento è un moto rotatorio la cui dimensione caratteristica coincide con la scala di turbolenza locale ed è sede di una intensa

vorticità. È stato osservato che queste strutture si sovrappongono nello spazio e che quelle più piccole sono trasportate da quelle più grandi. La turbolenza può essere vista, in questa ottica, come un processo a cascata in cui l'energia cinetica viene trasferita dagli *eddies* più grandi a quelli più piccoli. Sono questi ultimi, poi, a dissipare l'energia in calore mediante l'azione della viscosità molecolare. Tuttavia è stato dimostrato che sono le strutture turbolente più grandi (*large eddies*), che migrando attraverso il flusso ed interagendo più energicamente con il flusso stesso, i principali responsabili dell'aumento della diffusività e delle tensioni che si verificano in un flusso turbolento. Inoltre, sebbene l'energia sia dissipata al livello degli *eddies* più piccoli, la velocità con cui avviene tale dissipazione è controllata dalla velocità con cui questi ricevono energia dai *large eddies*. Questa osservazione deve essere ben tenuta presente nella formulazione di qualsiasi modello che tenti di descrivere il fenomeno turbolenza.

Riassumendo le caratteristiche principali di un flusso turbolento sono:

- l'irregolarità della loro evoluzione temporale;
- la forte tridimensionalità;
- l'alto livello di diffusività delle grandezze estensive;
- la presenza di più scale caratteristiche;
- l'essere un fenomeno continuo;
- l'elevato grado di instabilità e non linearità;
- la forte dipendenza dalle condizioni iniziali ed al contorno;
- il carattere spiccatamente dissipativo;
- l'esistenza degli *eddies* e del meccanismo a cascata di trasferimento dell'energia;

Tutte le proprietà della turbolenza sono aspetti diversi dell'incoerenza del moto e dunque è difficile separare le une dalle altre.

Un modo più operativo di definire un campo di moto turbolento può essere sviluppato a partire dalla misura di velocità in un mezzo continuo. Questa deve essere compiuta contemporaneamente sulle tre componenti, ma per semplicità consideriamo una sola componente (u) e supponiamo che le proprietà che andremo a definire per questa siano valide anche per le altre due. Una misura di velocità è sempre riferita ad una integrazione su un volume $\Delta \underline{r}^3$ ed

un intervallo di tempo Δt finiti e centrati in un punto dello spazio \underline{r} e del tempo t . Si suppone che $\Delta \underline{r}$ sia più grande del cammino libero medio molecolare $\bar{\lambda}$ (ovvero che il numero di *Knudsen*, $Kn = \bar{\lambda} / |\Delta \underline{r}|$, sia minore di 10^{-2} in modo da poter ritenere valida l'ipotesi del continuo) e Δt del tempo medio di collisione tra le molecole; inoltre si presume che la misura non dipenda dalla distribuzione di velocità delle molecole. Fissata una posizione dello spazio \underline{r}^* la $u(\underline{r}, t)$ sarà funzione solo del tempo. Nel caso in cui questa funzione oscilli intorno ad un valore medio, è possibile definire una velocità media \bar{u} come:

$$\bar{u} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} u(t) dt$$

dove T è l'intervallo di tempo di osservazione e t_0 è l'istante iniziale. In questo modo è possibile decomporre la velocità istantanea in due parti (decomposizione di Reynolds): il valor medio \bar{u} , per l'appunto, e il valore fluttuante $u'(t)$:

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

Analogamente si possono definire l'energia cinetica media e turbolenta associata alla componente di velocità u :

$$\bar{e}_x = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} (\bar{u} + u')^2 dt = \bar{u}^2 + \overline{u'^2} = K_x + k_x$$

Per stabilire in modo rigoroso quando un campo di moto è turbolento introduciamo i coefficienti di *correlazione*. Questi sono definiti come il rapporto tra la *covarianza* e il prodotto delle *deviazioni standard* di due componenti fluttuanti in un punto del campo fluidodinamico. Per covarianza si intende la media del prodotto delle componenti fluttuanti in considerazione mentre per deviazione standard si intende la radice quadrata della media del quadrato delle componenti fluttuanti. Pertanto un coefficiente di correlazione può essere espresso come:

$$C^{u'v'} = \frac{\overline{u'v'}}{\sqrt{\overline{u'^2}} \sqrt{\overline{v'^2}}}$$

Per una stessa componente fluttuante è possibile definire due coefficienti di *autocorrelazione* uno spaziale $C_{\Delta r}^{u'v'}$ ed uno temporale $C_{\Delta t}^{u'v'}$ (se ci si riferisce a due punti diversi dello spazio o del tempo):

$$C_{\Delta r}^{u'v'} = \frac{\overline{u'(r,t)u'(r+\Delta r,t)}}{\sqrt{\overline{u'^2(r,t)}}\sqrt{\overline{u'^2(r+\Delta r,t)}}}$$

$$C_{\Delta t}^{u'v'} = \frac{\overline{u'(r,t)u'(r,t+\Delta t)}}{\sqrt{\overline{u'^2(r,t)}}\sqrt{\overline{u'^2(r,t+\Delta t)}}}$$

il limite dei quali per Δr e Δt tendenti a zero è uno. Questi coefficienti possono assumere valore unitario, o prossimo ad uno, anche nel caso in cui le componenti fluttuanti della velocità, le $u'(r,t)$, siano funzioni periodiche del tempo o dello spazio; i valori di Δr e Δt per cui ciò accade sono legati ai periodi P_t e P_r dalle relazioni $\Delta t = nP_t$ e $\Delta r = nP_r$, dove n è un intero qualsiasi.

Un campo di moto può, allora, essere considerato turbolento se i coefficienti di correlazione ed autocorrelazione spaziale e temporale di tutte le componenti di velocità decrescono con continuità e tendono a zero per Δr e Δt tendenti all'infinito. La presenza di massimi relativi è, dunque, l'espressione di coerenza spaziale e temporale.

2.2.1 APPROCCI NELLA SIMULAZIONE DELLA TURBOLENZA

Nella simulazione di flussi turbolenti è possibile utilizzare diversi approcci; la scelta di un metodo piuttosto di un altro è dettata da un lato dal problema che si sta affrontando e dall'altro dalle risorse computazionali di cui si dispone. Essendo la turbolenza un fenomeno fisico continuo governato dalle equazioni di Navier-Stokes nonché caratterizzato da fluttuazioni temporali delle proprietà, una sua simulazione accurata (che tenga anche conto di tutte le scale associate al processo) richiederebbe la soluzione diretta delle N-S nella loro formulazione tridimensionale ed instazionaria: tale tipo di metodica è nota come *Direct Numerical Simulation (DNS)*. Il valore di tali simulazioni è evidente: queste sono, in linea di principio, soluzioni numericamente accurate (a meno degli errori di discretizzazione e di *round off*) delle esatte equazioni del moto dei fluidi e, dunque, la soluzione appropriata del problema turbolenza. Tuttavia per effettuare una tale simulazione occorre disporre di computer molto potenti in virtù della elevata risoluzione spaziale e temporale del dominio di calcolo richiesta. Infatti da un lato il dominio deve essere sufficientemente esteso per descrivere le scale di turbolenza più grandi (ad esempio per flussi in canali, gli *eddies* sono elongati in direzione parallela alle pareti, e la loro lunghezza è noto essere circa il doppio delle dimensioni trasversali del condotto, H), dall'altro la griglia deve essere abbastanza fine da catturare gli *eddies* più piccoli (che sono dell'ordine della scala di *Kolmogorov*). Se si utilizzasse una griglia uniformemente spaziata, considerando che per descrivere un *eddy* sono necessari minimo 4 punti in tutte le direzioni, si stima (per un flusso in condotto) che il numero totale di punti della griglia sia all'incirca:

$$N_{uniforme} \approx (110 \text{Re}_t)^{9/4}$$

dove Re_t è il numero di Reynolds turbolento $\frac{v_t H}{\nu}$. In pratica, risulta molto dispendioso adoperare griglie equi-spaziate; utilizzando griglie a passo variabile, in modo da addensare i punti nelle zone dove gli *eddies* più piccoli risiedono, l'esperienza ha mostrato la possibilità di ridurre il numero di punti totali. Attualmente il numero di punti di griglia usati in simulazioni *DNS* in canali è circa $(3 \text{Re}_t)^{9/4}$. Analogamente il passo temporale deve essere dello stesso ordine di grandezza della scala di Kolmogorov; sull'esperienza delle simulazioni condotte da Kim, Moin e Moser (1987) su moti in condotti, il passo temporale può essere stimato circa:

$$\Delta t = \frac{0.003 H}{\sqrt{\text{Re}_t} v_t}$$

dove H è la dimensione trasversale del condotto.

Per valori del numero di *Reynolds* turbolento pari a 800 (che corrisponde per flussi in condotti a un $\text{Re}_H=30.000$) si ha bisogno di griglie dell'ordine delle decine di milioni di punti e di decine di migliaia di passi temporali per raggiungere una soluzione statisticamente stazionaria. Sebbene la velocità dei moderni calcolatori sia in continuo aumento e l'utilizzo di cluster (per il calcolo

parallelo) si vada sempre più diffondendo, l'immagazzinamento di una tale impressionante mole di dati resta ancora un grosso problema.

Per far fronte alle difficoltà pratiche della simulazione diretta della turbolenza si ricorre a due metodologie di manipolazione delle equazioni di *Navier-Stokes*, note rispettivamente come *Reynolds averaging* e *Filtering*. Entrambi i metodi consentono di non risolvere direttamente le piccole scale turbolente (e le relative fluttuazioni) introducendo, tuttavia, dei termini aggiuntivi nelle equazioni del moto che devono essere modellati per garantire la chiusura del.

Le *Reynolds-averaged Navier-Stokes* (sinteticamente note come *RANS*) rappresentano equazioni di trasporto per le sole quantità medie del flusso, per cui tutte le scale della turbolenza devono essere modellate. Questo approccio riduce notevolmente il costo computazionale sia per flussi stazionari (in quanto le equazioni non contengono le derivate temporali) che instazionari (essendo in questo caso il passo temporale legato alla non stazionarietà macroscopica del flusso e non alle scale temporali più piccole che caratterizzano la turbolenza).

La *large eddy simulation (LES)* offre un approccio alternativo in cui i *large eddies* sono computati in una simulazione 3D e time-dependent mediante l'utilizzo di un set di equazioni "filtrate". Il filtraggio consiste essenzialmente in una manipolazione delle *Navier-Stokes* esatte tesa a rimuovere solo le scale più piccole della dimensione del filtro, di solito assunta pari alla dimensione della *mesh*. Sebbene anche tale metodologia crei incognite aggiuntive, che devono essere modellate per chiudere il problema, l'errore da questa introdotto è di molto inferiore all'approccio *RANS*.

2.2.1.1 MODELLI RANS

Nell'approccio *RANS* le grandezze fisiche presenti nelle *Navier-Stokes* istantanee (esatte) vengono decomposte nella media e nella componente fluttuante. Per le componenti della velocità:

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (i=1,2,3)$$

Analogamente per la generica quantità scalare (quale la pressione, l'energia o la concentrazione di una specie) possiamo scrivere:

$$\phi_i = \bar{\phi}_i + \phi_i'$$

Come media è possibile considerare la media temporale, quella spaziale o quella campionaria (*ensemble*).

La media nel tempo delle *Navier-Stokes* (scelta appropriata nello studio di flussi turbolenti "stazionari" ovvero di flussi le cui proprietà mediamente non variano nel tempo) di una generica grandezza $f(\underline{r}, t)$ si definisce come:

$$\bar{f}_t = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(\underline{r}, t) dt$$

mentre la media spaziale (utilizzabile nel caso di turbolenza *omogenea*, ovvero per flussi turbolenti che, mediamente, risultano uniformi in tutte le direzioni) si può esprimere come:

$$\bar{f}_V = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \iiint_V f(\underline{r}, t) dV$$

La media campionaria, nota anche come media empirica, è il tipo più generale di media di Reynolds. Questa viene realizzata come se stessimo effettivamente misurando la proprietà in questione per N esperimenti identici (con condizioni iniziali ed al contorno che differiscono per casuali e infinitesime perturbazioni). Indicando con $f_n(\underline{r}, t)$ la misura nel n -esimo esperimento, si ha in definitiva:

$$\bar{f}_E = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_1^N f_n(\underline{r}, t)$$

In presenza di flussi turbolenti contemporaneamente stazionari ed omogenei, le tre medie si possono considerare praticamente coincidenti (*ipotesi ergodica*).

Se consideriamo, per semplicità, le *Navier-Stokes* nella loro formulazione incomprimibile; e decomponiamo le grandezze istantanee, come proposto da

Reynolds, nella media e nella componente fluttuante e successivamente mediamo le equazioni nel tempo, si ottengono le famose *RANS*:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_i u'_j})$$

dove δ_{ij} è il simbolo di *Kronecker*.

La quantità $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ è nota come *tensore degli sforzi di Reynolds* ed è di solito indicata con il simbolo $\rho \tau_{ij}$. Tale tensore risulta simmetrico e dunque è costituito da sei componenti indipendenti. L'operazione di media ha, dunque, prodotto sei quantità incognite rappresentative degli effetti della turbolenza. Se moltiplicassimo le N-S per una delle proprietà fluttuanti e ne mediassimo il prodotto riusciremmo a ricavare una equazione di trasporto anche per il tensore degli sforzi di Reynolds, che simbolicamente si scrive:

$$\frac{D}{Dt}(\rho \tau_{ij}) = D_{T,ij} + D_{L,ij} + P_{ij} + \phi_{ij} + \varepsilon_{ij}$$

Dove con $\frac{D}{Dt}(\rho \tau_{ij})$ si è indicata la derivata sostanziale, con $D_{T,ij}$ la diffusione turbolenta, $D_{L,ij}$ la diffusione molecolare, con P_{ij} il termine di produzione, con ϕ_{ij} gli sforzi di pressione e con ε_{ij} la *dissipation rate*.

Tuttavia tale equazione, a causa della forte non-linearità delle N-S, contiene inevitabilmente altre incognite. Se considerassimo momenti delle N-S di grado sempre più elevato genereremmo incognite ad ogni livello senza mai riuscire ad ottenere tante equazioni da bilanciare il numero delle incognite. L'unica strada che rimane è quella di modellare le quantità incognite in termini delle proprietà note del flusso effettuando inevitabilmente delle approssimazioni (causa della perdita di molte informazioni contenute nelle equazioni della fluidodinamica).

2.2.1.1.1 **MODELLI A DUE EQUAZIONI**

Alla base dei modelli di turbolenza a due equazioni vi è la cosiddetta *approssimazione di Boussinesq* che lega il tensore degli stress di Reynolds al gradiente della velocità media del flusso attraverso la seguente relazione:

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \rho \tau_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij}$$

Il vantaggio di questo approccio è il minore costo computazionale associato al calcolo della *viscosità turbolenta* μ_t . Quest'ultima è valutata in funzione di altre due proprietà per le quali si risolvono due equazioni differenziali di trasporto: una per l'energia cinetica turbolenta k , l'altra (diversa a seconda del modello) per una quantità che rappresenta, direttamente o indirettamente, la velocità di dissipazione dell'energia cinetica stessa.

L'equazione per l'energia cinetica turbolenta è ricavata manipolando l'equazione di trasporto degli stress di Reynolds mentre la seconda può essere dedotta sia da considerazioni fenomenologiche che da riarrangiamenti delle esatte Navier-Stokes.

L'equazione di trasporto dell'energia cinetica turbolenta assume la forma generale [8]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k \bar{u}_j) = \rho \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \overline{\rho u'_i u'_i u'_j} - \overline{p' u'_j} \right]$$

I vari termini che compaiono nell'equazione rappresentano i processi fisici che intervengono quando la turbolenza si propaga in un dato campo di moto. I termini a sinistra (quello instazionario e il contributo convettivo) nient'altro sono che la familiare derivata sostanziale di k , la quale fornisce la velocità con cui varia l'energia cinetica turbolenta associata ad una particella fluida in moto. Il primo termine a destra, noto come *produzione turbolenta*, rappresenta la rapidità con cui l'energia cinetica è trasferita dal flusso medio alla turbolenza. La

turbulent dissipation rate $\varepsilon = \nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}}$ è la velocità con cui l'energia cinetica

viene convertita in energia interna. Il termine $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} \right)$ è detto *diffusione*

molecolare e rappresenta la diffusione dell'energia turbolenta determinato dal

naturale processo di trasporto molecolare dei fluidi. La quantità $\overline{\rho u'_i u'_j u'_k}$ è nota come *trasporto turbolento* e si considera essere la velocità con cui k è trasportata attraverso il campo di moto dalle fluttuazioni turbolente. L'ultimo termine a destra è chiamato *diffusione di pressione* e rappresenta un'altra forma di trasporto turbolento imputato alla interazione tra le fluttuazioni di pressione e velocità.

I modelli a due equazioni che si sono affermati in campo ingegneristico sono il $k-\varepsilon$ (basato principalmente sul lavoro di *Jones e Launder*) e il $k-\omega$ (una prima formulazione di tale modello risale a *Kolmogorov*). Oltre le versioni standard del $k-\varepsilon$ e del $k-\omega$, ne esistono diverse varianti: *RNG* e *realizable* per il $k-\varepsilon$ e lo *shear-stress transport* per il $k-\omega$.

Nei modelli $k-\varepsilon$ l'equazione di trasporto dell'energia cinetica turbolenta è affiancata da una equazione di trasporto della dissipation rate. La viscosità turbolenta (nota anche come *eddy viscosity*) viene calcolata

combinando k ed ε : $\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$.

Nel modello $k-\varepsilon$ *RNG* (che è il risultato della manipolazione delle N-S istantanee mediante un tecnica matematica nota come *renormalization theory* [9]) la μ_t è calcolata mediante la seguente equazione differenziale (risultato proprio della rimormalizzazione delle *Navier-Stokes*):

$$d\left(\frac{\rho^2 k}{\sqrt{\varepsilon \mu}}\right) = 1.72 \frac{\hat{v}}{\sqrt{\hat{v}^3 - 1 + C_v}} d\hat{v}$$

dove $\hat{\nu} = \frac{\mu_{eff}}{\mu} = \frac{\mu + \mu_t}{\mu}$. Per valori elevati del numero di Reynolds questa espressione restituisce la forma standard per la *eddy viscosity* (con la differenza che il valore delle costante C_μ è pari a 0.845 invece di 0.9, ricavato sperimentalmente per il $k-\varepsilon$ standard).

Il *realizable* adopera ancora l'espressione standard per la viscosità turbolenta, con la differenza che la C_μ non è più ritenuta costante. Il termine *realizable* indica che questo modello soddisfa delle condizioni matematiche restrittive sugli stress normali, consistenti con la fisica di un flusso turbolento. Se combiniamo la relazione di Boussinesq con l'espressione della viscosità turbolenta otteniamo per gli sforzi normali di Reynolds in un flusso turbolento la seguente forma:

$$\overline{u^2} = \frac{2}{3}k - 2\nu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x}$$

Usando ancora l'espressione standard della viscosità turbolenta, otteniamo il risultato che lo stress normale, $\overline{u^2}$, che per definizione è una quantità positiva, diviene negativo se:

$$\frac{k}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \geq \frac{1}{3C_\mu} \approx 3.7$$

Il modo migliore per garantire la positività degli stress normali è di considerare la C_μ variabile, rendendola sensibile rispetto al flusso medio ed alla turbolenza (k, ε). L'idea che tale quantità non fosse costante è stata suggerita da diversi ricercatori (tra cui lo stesso *Reynolds*) ed è ben sostenuta dalla evidenza sperimentale. Oltre la variabilità della suddetta costante, la variante *realizable* del $k-\varepsilon$ propone una formulazione dell'equazione di trasporto della dissipazione basata sull'equazione dinamica della media quadratica delle fluttuazioni di vorticità.

I modelli $k-\omega$, a differenza dei $k-\varepsilon$, utilizzano come seconda equazione quella del trasporto per la ω , nota come *specific dissipation rate* (ricavata in principio da *Kolmogorov* mediante considerazioni di carattere fisico sul moto dei fluidi e l'analisi dimensionale). Questa rappresenta la velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta per unità di volume e di tempo e può essere pensata anche come il rapporto tra ε e k . La viscosità turbolenta viene valutata mediante la seguente relazione:

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho k}{\omega}$$

Il coefficiente α^* viene introdotto per tenere in considerazione gli effetti di un basso numero di Reynolds sulla viscosità turbolenta.

Il modello *Shear Stress Transport (SST) $k-\omega$* è stato sviluppato da *Menter* per incorporare la formulazione robusta e accurata del $k-\omega$ nelle regioni prossime alle pareti con l'indipendenza del modello $k-\varepsilon$ nelle zone di flusso lontano dalle pareti. A tale scopo il modello $k-\varepsilon$ viene convertito nella formulazione $k-\omega$ e due modelli vengono sommati usando una funzione che in prossimità delle pareti attiva il $k-\omega$ standard (assumendo valore unitario) e lontano da queste attiva il $k-\varepsilon$ modificato. Altre differenze che contraddistinguono lo *SST $k-\omega$* sono una diversa formulazione della viscosità turbolenta (che tiene conto del trasporto degli *shear stress* turbolenti) e i valori diversi per le costanti del modello.

2.2.1.1.2 MODELLO REYNOLDS STRESS

L'approssimazione di *Boussinesq* assume che gli assi principali del tensore degli stress di Reynolds coincidono con quelli del tensore di deformazione medio della velocità in ogni punto del campo turbolento. Tale posizione è analoga a quella di *Stokes* per flussi laminari. La viscosità turbolenta è il coefficiente di proporzionalità tra $\overline{\tau}$ e \overline{S} ed è considerato una quantità scalare isotropa (il che non è propriamente vero). Diversamente dalla viscosità molecolare, la μ_t non è una proprietà del fluido e dipende dalle caratteristiche del flusso in esame nel senso che è influenzata dalla effettiva storia del moto nel tempo. L'ipotesi di *Boussinesq* è risultata inefficiente in diverse applicazioni:

- flussi su superfici curve;
- flussi con improvvisi cambiamenti nella velocità di deformazione media;
- flussi con separazione dello strato limite;
- flussi tridimensionali.

Per superare le carenze dei modelli basati sulla viscosità turbolenta è possibile adottare modelli di turbolenza che si basano sulla risoluzione diretta dell'equazione di trasporto degli stress di *Reynolds*. Questi modelli sono noti in letteratura come *modelli del secondo ordine* o "*Reynolds Stress model*" (*RSM*). Un *RSM* include già nella sua formulazione gli effetti della curvatura delle linee di flusso, gli improvvisi cambiamenti nella velocità di deformazione, ecc. Dal

momento che l'equazione degli stress di *Reynolds* presenta la convezione e la diffusione degli sforzi, tali modelli tengono in conto la storia del flusso. I termini di dissipazione e di trasporto turbolento, infatti, indicano la presenza di scale temporali non correlate con quelle del flusso medio, così che tale dipendenza dalla storia temporale del moto risulta più realistica che nei modelli a due equazioni. Tuttavia tali modelli comportano un grado di complessità maggiore ed un costo computazionale anch'esso più elevato (le equazioni differenziali da risolvere passano da due a cinque in 2D e a sette in 3D).

2.2.2 SIMULAZIONE LARGE EDDY

Nella Large Eddy Simulation (*LES*) l'attenzione è rivolta alla risoluzione dei cosiddetti *large eddies*, i quali vengono direttamente computati; invece gli *eddies* più piccoli, indicati con il termine *subgrid-scale (SGS) eddies*, vengono modellati. Infatti le scale turbolente più piccole risultano le più deboli e contribuiscono in minor parte agli stress di *Reynolds*; se si aggiunge il fatto che queste scale sono meno dipendenti dalla geometria del problema e che tendono verso l'isotropia, è facile comprendere che la loro modellazione non risulta particolarmente critica.

Dal momento che la *Large Eddy Simulation* non coinvolge il calcolo diretto degli *eddies* più piccoli, è possibile impiegare mesh con dimensioni di cella molto più grandi della scala di *Kolmogorov* e passi temporali più grandi rispetto ad una simulazione *DNS*. La maggiore difficoltà che si incontra in una "*Large Eddy Simulation*" è il fatto che in prossimità di superfici solide tutti gli *eddies* sono piccoli.

Il set di equazioni adoperato nella *LES* è ottenuto attraverso il “filtraggio” delle equazioni di *Navier-Stokes* nella loro formulazione non stazionaria. Tale manipolazione delle equazioni della fluidodinamica elimina da queste gli *eddies* le cui scale caratteristiche sono più piccole delle dimensioni del filtro (che in genere coincidono con le dimensioni della griglia). In maniera del tutto generale è possibile definire una variabile filtrata come:

$$\bar{\phi}(\vec{r}) = \int_D \phi(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') d\vec{r}'$$

dove D è il dominio fluido e G è la funzione filtro che determina la scala degli *eddies* che saranno risolti. Il filtro più semplice è rappresentato da:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \begin{cases} 1/V, & \vec{r}' \in V \\ 0, & \vec{r}' \text{ altrove} \end{cases}$$

dove V rappresenta il volume della cella computazionale.

Con tale scelta del filtro, introdotta per la prima volta da *Deardoff* nel 1970, la proprietà ϕ' SGS e la dimensione del filtro Δ risultano rispettivamente:

$$\phi' = \phi - \bar{\phi} \quad \Delta = V^{1/3}$$

Altri tipi di filtri sono stati proposti e in tutti i casi questi introducono una dimensione caratteristica che rappresenta la scala di turbolenza più piccola che può essere direttamente calcolata.

Filtrando le N-S per flussi incomprimibili si ottengono le seguenti equazioni:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}$$

dove τ_{ij} è il tensore degli sforzi SGS definito:

$$\tau_{ij} \equiv \rho \overline{u_i u_j} - \rho \bar{u}_i \bar{u}_j$$

Gli stress subgrid, risultato dell'operazione di filtraggio, sono quantità incognite che devono dunque essere modellate. La maggior parte dei modelli SGS usati attualmente introducono una viscosità turbolenta μ_t SGS, esprimendo il tensore degli sforzi come:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = -2\mu_t \bar{S}_{ij}$$

dove \bar{S}_{ij} è il tensore di velocità di deformazione per le scale risolte definito:

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

2.3 LA COMBUSTIONE TURBOLENTA

I processi chimici e fisici che sono alla base della combustione turbolenta sono molto complessi e tra loro interconnessi. Come noto l'ossidazione degli idrocarburi avviene mediante reazioni chimiche elementari a catena (in cui sono coinvolte anche specie radicaliche) la cui velocità è controllata essenzialmente dalla temperatura e dalla concentrazione di reagenti e prodotti (legge di *Arrhenius*). Tuttavia quando il campo di moto in cui avviene il processo di combustione è turbolento la velocità con cui tali reazioni hanno luogo viene fortemente influenzata dalle fluttuazioni locali delle proprietà del campo di moto (tipiche della turbolenza). Una accurata modellazione della combustione turbolenta deve, pertanto, tener conto della forte interazione tra il flusso turbolento e le velocità di combustione.

Alla base di un qualunque modello di combustione è la formulazione delle equazioni di bilancio per l'energia e per le specie chimiche [10]. Se consideriamo una miscela di n specie chimiche l'equazione di trasporto della frazione massica Y_i della specie i -esima si esprime:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{j}_i + \omega_i$$

dove \vec{j}_i rappresenta il flusso diffusivo (ovvero il processo di trasporto molecolare) e ω_i il termine di produzione dovuto alle reazioni chimiche. L'equazione di bilancio dell'energia per un flusso reattivo, nell'ipotesi di

trascurabilità dello scambio termico radiativo e a pressione costante, assume la seguente forma in termini di temperatura (per semplicità si è riportata l'equazione non mediata):

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \vec{V} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{i=1}^n c_{p_i} \vec{j}_i \cdot \nabla T - \sum_{i=1}^n h_i \omega_i$$

L'entalpia specifica della specie i -esima h_i è composta da due parti: l'*entalpia di formazione*, rappresentativa dell'energia di legame, e l'*entalpia sensibile*, che per un gas ideale dipende solo dalla temperatura:

$$h_i = h_{i,f}^{(0)} + \int_{T_0}^T c_{p_i}(T) dT$$

Nella modellazione di flussi reagenti in regime turbolento assume, dunque, un ruolo di primaria importanza il modo in cui la velocità (media) di produzione o scomparsa della specie i -esima viene valutata.

2.3.1 MODELLO EDDY DISSIPATION

Il modello *Eddy Dissipation (ED)* si basa sul lavoro di *Magnussen e Hjertager* [11]. Sia nelle fiamme turbolente premiscelate che in quelle non premiscelate, le scale temporali con cui la turbolenza riesce a miscelare i reagenti (tra loro o con i gas combustibili caldi) sono, in genere, molto più grandi dei tempi caratteristici con cui hanno luogo le reazioni di ossidazione: si parla, in questo caso, di combustione limitata dal mescolamento (*mixing-limited*) e la complessa, a volte sconosciuta, cinetica chimica può essere trascurata. La velocità di reazione può allora essere valutata in base alla velocità di mescolamento sulle scale molecolari degli *eddies* che trasportano il combustibile e l'ossidante (in genere l'ossigeno contenuto nell'aria) rispettivamente (in altre parole dalla velocità di dissipazione degli *eddies*). Dal momento che le concentrazioni di ossigeno e combustibile, come tutte le proprietà di un campo di moto turbolento, sono quantità fluttuanti, ci sarà una correlazione tra il loro valore medio e tali fluttuazioni. Dunque è possibile esprimere la velocità di dissipazione degli *eddies* in funzione della concentrazione media delle specie reagenti. La velocità netta di produzione della specie *i*-esima dovuta alla reazione *r*-esima, $\omega_{i,r}$, è data, allora, da:

$$\omega_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right)$$

dove

- $\nu'_{i,r}$ è il coefficiente stechiometrico per la specie reagente i-esima nella reazione r-esima;
- $M_{w,i}$ è il peso molecolare della specie i-esima;
- A è una costante empirica che dipende dalla struttura della fiamma;
- k è l'energia cinetica turbolenta e ε la dissipation rate.

Nelle fiamme turbolente premiscelate, combustibile e comburente coesistono negli stessi *eddies*. Questi ultimi sono separati dagli *eddies* che contengono i gas combusti caldi (che trasferiscono alla carica fresca il calore necessario all'inizio della combustione). Per tener conto della possibilità che la concentrazione dei gas combusti sia bassa si introduce un'altra velocità di reazione (che rappresenta la velocità di dissipazione degli *eddies* caldi) con cui confrontare la precedente:

$$\omega_{i,r} = \nu'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N \nu''_{j,r} M_{w,j}}$$

dove

- $\nu_{j,r}''$ è il coefficiente stechiometrico per il prodotto i-esimo nella reazione r-esima;
- B è una costante.

L'equazione che restituisce la velocità di reazione più bassa è quella che determina la velocità locale della combustione. Per tener conto del fatto che nelle fiamme premiscelate l'accensione della miscela avviene quando questa giunge nei pressi della fiamma, una variante a tale modello (*Finite Rate – Eddy Dissipation*) prevede di confrontare la velocità di reazione prima determinata con quella che si otterrebbe considerando il meccanismo controllato esclusivamente dalla cinetica chimica (in poche parole la velocità di reazione che discende dalla legge di *Arrhenius*) e scegliere la più bassa. In buona sostanza le velocità di *Arrhenius* agiscono come un "interruttore" cinetico che previene l'accensione della carica prima della fiamma. Quando tale modello viene adoperato in simulazioni fluidodinamiche le costanti A e B devono essere "tarate" sul particolare problema e non si possono adoperare meccanismi troppo dettagliati se si desidera ottenere risultati attendibili.

Quando si utilizza la *LES* per modellare la turbolenza la velocità di mescolamento turbolento ε/k è sostituita dalla subgrid-scale mixing rate t_{SGS}^{-1} data da:

$$t_{SGS}^{-1} = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$$

dove S_{ij} è il tensore della velocità di deformazione pari a $\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ (s^{-1}).

Questo tipo di modello può essere adottato sia per fiamme premiscelate che per fiamme diffusive.

2.3.2 COMBUSTIONE NON PREMISCELATA

Nelle combustione non premiscelata turbolenta, nota anche come combustione diffusiva, combustibile ed ossidante entrano nella zona di reazione separatamente. Pertanto, il processo di mescolamento (dominato dalla diffusione turbolenta dei reagenti) regola la velocità con cui avvengono le reazioni di ossidazione. Questo è strettamente vero quando le scale temporali della turbolenza, responsabile del mixing, sono più grandi di quelle associate ai processi chimici; in tal caso appare dunque appropriata l'ipotesi di chimica veloce (ovvero di equilibrio chimico locale). Questa ipotesi consente di effettuare una importante semplificazione nella modellazione della combustione non premiscelata in quanto permette di ricondurre la complessa

chimica della combustione ad un solo parametro: la *frazione di miscelamento* (in inglese *mixture fraction*) f . Tutti i parametri di interesse, quali temperatura, concentrazioni e densità, possono poi essere correlati alla frazione di miscelamento. La mixture fraction può essere definita come:

$$f = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2}$$

dove β è una qualsiasi variabile conservativa ed i pedici 1 e 2 si riferiscono rispettivamente al valore di β nel getto che trasporta prevalentemente il combustibile e l'ossidante. In base a tale definizione, f risulta una quantità adimensionale compresa tra zero ed uno. Di seguito si considererà come variabili conservative β le frazioni di massa delle specie atomiche del combustibile, $Y_{(C,H)}$, e dell'ossidante $Y_{(O)}$ così definite:

$$Y_{(C,H)} = \sum a_{C,i} \frac{m_C}{m_i} Y_i + \sum a_{H,i} \frac{m_H}{m_i} Y_i$$

$$Y_{(O)} = \sum a_{O,i} \frac{m_O}{m_i} Y_i$$

I pedici C , H e O messi tra parentesi stanno ad indicare il carbonio, l'idrogeno e l'ossigeno atomico, legati o non, in tutte le specie chimiche presenti

in una prefissata massa di controllo; i coefficienti a rappresentano il numero di atomi di C, H ed O presente nella specie molecolare i -esima ed, infine, i termini Y_i e $m_{C,H,O,i}$ sono le frazioni massiche e i pesi atomici (o molecolari) rispettivamente di carbonio, idrogeno, ossigeno e della specie i -esima. In pratica l' $Y_{(C,H)}$ è la frazione di massa del combustibile reagito e non. In base alla definizione data le frazioni di miscelamento per $Y_{(C,H)}$ e $Y_{(O)}$ divengono:

$$f_f = \frac{Y_{(C,H)} - Y_{(C,H)2}}{Y_{(C,H)1} - Y_{(C,H)2}}$$

$$f_o = \frac{Y_{(O)} - Y_{(O)2}}{Y_{(O)1} - Y_{(O)2}}$$

Se nel getto ossidante non c'è combustibile e viceversa le espressioni precedenti divengono:

$$f_f = \frac{Y_{(C,H)}}{Y_{(C,H)1}}$$

$$f_o = 1 - \frac{Y_{(O)}}{Y_{(O)2}}$$

È possibile dimostrare che sotto l'ipotesi di equidiffusione delle specie (condizione che in regime laminare è difficile ritenere vera, ma che in regime turbolento rappresenta una buona approssimazione) le due frazioni di miscelamento così definite coincidono. Per miscele stechiometriche la mixture fraction assume la seguente espressione:

$$f_{st} = \left[1 - v_{st} \frac{Y_{(C,H)_1}}{Y_{(O)_2}} \right]$$

dove $v_{st} = \frac{Y_{(O)_st}}{Y_{(C,H)_st}}$ rappresenta il rapporto di miscela stechiometrico.

Il comune rapporto di equivalenza di un combustibile ϕ (definito come il rapporto combustibile su aria della miscela non bruciata normalizzato rispetto al rapporto stechiometrico) può essere espresso in funzione della frazione di miscelamento come segue:

$$\phi = \frac{f}{1-f} \frac{(1-f_{st})}{f_{st}}$$

Essendo la mixture fraction definita mediante una grandezza conservativa, per questa è possibile scrivere una equazione di conservazione che, nell'ipotesi di equidiffusione, si presenta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f) + \rho \vec{V} \cdot \nabla f = \nabla \cdot (\rho D \nabla f)$$

Il coefficiente di diffusione D è arbitrario, ma dal momento che è la temperatura massima a determinare la posizione della zona di reazione, la diffusione dell'entalpia risulta il processo di trasporto più importante nello spazio della frazione di miscelamento. Di conseguenza è prassi considerare come coefficiente di diffusione nella quello termico. Quando si ha a che fare con campi di moto turbolenti anche l'equazione di conservazione della mixture fraction, nell'approccio *RANS*, va mediata nel tempo (per generalità considereremo la media di Favre e le indicheremo con caratteri soprasssegnati; i caratteri non soprasssegnati si intendono come classiche quantità mediate nel tempo):

$$\rho \frac{\partial \bar{f}}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \nabla \bar{f} = -\nabla \cdot (\rho \overline{V'' f''})$$

Dal momento che f è uno scalare non reattivo possiamo considerare:

$$\overline{V'' f''} = -D_i \nabla \overline{f}$$

Per la chiusura del modello di interazione tra combustione e turbolenza è necessario risolvere anche una equazione di trasporto per la varianza $\overline{f''^2}$:

$$\rho \frac{\partial \overline{f''^2}}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \nabla \overline{f''^2} = -\nabla \cdot (\rho \overline{V'' f''^2}) + 2\rho D_i (\nabla \overline{f})^2 - \rho \overline{\chi}$$

Ancora possiamo porre:

$$\overline{V'' f''^2} = -D_i \nabla \overline{f''^2}$$

Il termine $\overline{\chi}$ è noto come *mean scalar dissipation rate* e viene modellato come:

$$\overline{\chi} = C_x \frac{\varepsilon}{k} \overline{f''^2}$$

dove la costante C_x è assunta pari a 2. Nell'approccio *LES* non viene risolta l'equazione per la varianza che viene direttamente modellata.

La potenza dell'approccio della frazione di miscelamento consiste nel ridurre, come detto, la chimica ad una sola quantità conservativa (la mixture fraction per l'appunto). Tutte le quantità termo-chimiche (frazioni di massa delle varie specie, densità, temperatura), fissata una descrizione della chimica del sistema reattivo, possono essere calcolate come funzione della f . Il dettaglio della relazione funzionale tra la generica proprietà ϕ_i e la f dipende dal tipo di descrizione della chimica del sistema.

Una possibilità è rappresentata dal modello di *Burke-Shumann* in cui la chimica è considerata infinitamente veloce ed irreversibile ipotizzando che combustibile e ossidante non possano coesistere nello spazio e che la conversione possa riferirsi ad una reazione *one step* da reagenti a prodotti che avvenga praticamente in condizioni stechiometriche (modello che potremmo definire *Mixed-is-Burned*). Tale tipo di descrizione consente di determinare le frazioni massiche delle specie direttamente da una data reazione stechiometrica senza richiedere informazioni sull'effettivo meccanismo cinetico o sull'equilibrio chimico.

Il limite principale di questo approccio è l'impossibilità di predire la formazione di specie intermedie e di considerare gli effetti di dissociazione. Ciò porta ad una sovrastima dei picchi di temperatura, specialmente in sistemi caratterizzati da temperature massime molto elevate.

Un altro modello si basa sull'ipotesi che le reazioni chimiche siano sufficientemente rapide da raggiungere l'equilibrio chimico a livello molecolare. Una miscela reagente di gas ideali è caratterizzata da un unico stato di equilibrio chimico, in cui tutte le reazioni elementari sono a loro volta in equilibrio. La composizione dei prodotti finali di equilibrio, in funzione di f , può essere calcolata mediante procedure basate sulla minimizzazione dell'energia libera di Gibbs o su formulazioni basate sulle costanti di equilibrio. Con tale approccio è possibile prevedere le specie intermedie senza richiedere la conoscenza dettagliata dei meccanismi cinetici.

Fino a quando la velocità di reazione può essere considerata più elevata di quella di diffusione delle specie attraverso la fiamma, l'ipotesi di equilibrio chimico locale può essere ritenuta valida. Tuttavia quando la turbolenza deforma e stira la fiamma, i gradienti di temperatura e di specie aumentano consentendo alle specie chimiche, in maggioranza radicali, di "uscire" più rapidamente dalla zona di reazione. In questo modo, avendo le specie meno tempo a disposizione per raggiungere l'equilibrio, il sistema si allontana più rapidamente da questo.

Quando si ha a che fare con sistemi lontani dall'equilibrio, l'ipotesi di equilibrio chimico locale può condurre a risultati non realistici. Per tener conto degli effetti di un moderato non equilibrio *Peters N.* ha proposto il modello delle *flamelet*. In sostanza questo approccio vede le fiamme turbolente come un insieme di sottili, laminari, localmente monodimensionali piccole fiamme (le *flamelet*) immerse nel campo turbolento. La *flamelet* elementare comunemente utilizzata è rappresentata da una fiamma laminare a controdiffusione (Figura

2.3-1), costituita da due getti contrapposti, rispettivamente di combustibile ed ossidante, assialsimmetrici. Se si riduce la distanza tra i getti o si aumenta la velocità degli stessi, la fiamma viene deformata, e si allontana sempre più dall'equilibrio fino, eventualmente, a spegnersi. Le frazioni massiche delle specie chimiche coinvolte possono essere misurate mediante esperimenti o, più comunemente, calcolate. In quest'ultimo caso le equazioni che governano il fenomeno (trasporto delle frazioni massiche ed equazione dell'energia) vengono riformulate nello spazio della frazione di miscelamento. In questo modo tutte le proprietà del sistema possono essere descritte da due soli parametri: la mixture fraction e la *dissipazione scalare* χ . La complessa cinetica chimica può, pertanto, essere preprocessata consentendo una drammatica riduzione dei tempi di calcolo.

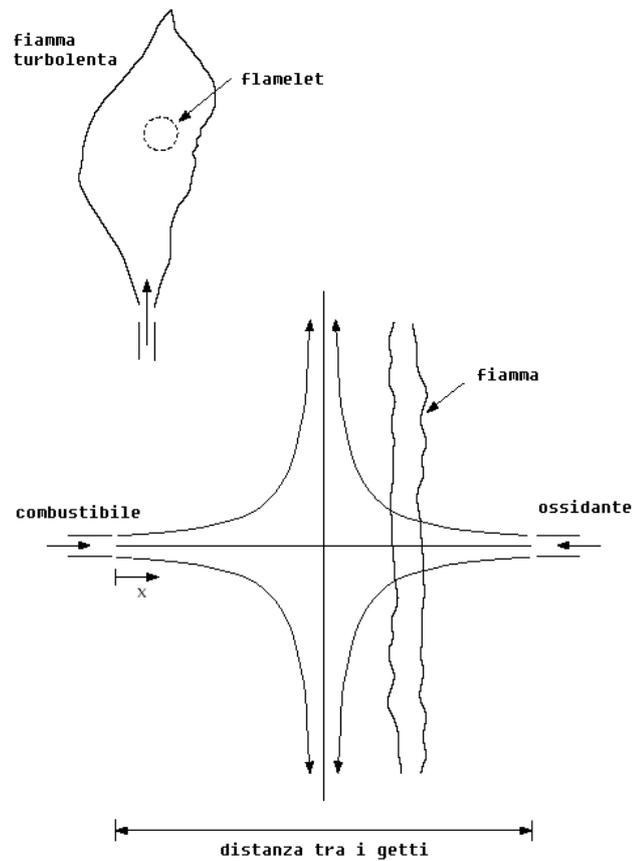


Figura 2.3-1

2.3.2.1 TURBOLENZA E COMBUSTIONE NON PREMISCELATA

Nell'approccio alla combustione diffusiva basato sulla frazione di miscelamento si tiene conto dell'interazione con la turbolenza mediante la cosiddetta *Probability Density Function*, *PDF*. Questa, che di seguito indicheremo con $p(f)$, può essere interpretata come la frazione di tempo che una particella fluida trascorre nelle condizioni individuate da un certo valore della mixture fraction f_0 , come mostrato in Figura 2.3-2.

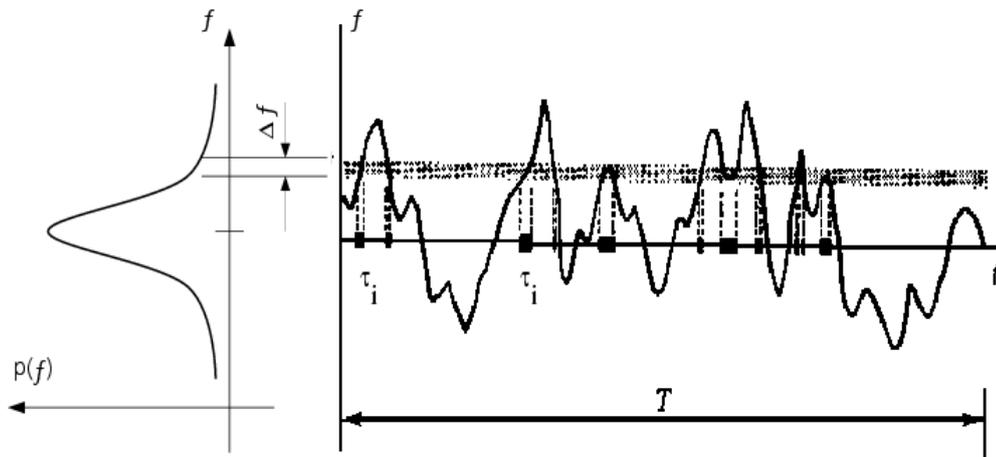


Figura 2.3-2

La componente fluttuante della f (di cui a destra nel diagramma di Figura 2.3-2 si riporta l'evoluzione nel tempo) per una certa frazione di tempo assume valori compresi nell'intervallo Δf . Sulla sinistra dello stesso grafico è riportata la $p(f)$; questa assume valori tali che l'area sottesa alla sua curva, nella banda Δf considerata, risulta uguale alla frazione di tempo in cui la mixture fraction assume valori in tale intervallo. In termini matematici si può scrivere:

$$p(f) \Delta z = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_i \tau_i$$

dove T è la scala temporale e τ_i è il tempo complessivo per il quale f assume valori compresi nell'intervallo Δf . La forma reale della funzione densità di probabilità dipende intrinsecamente dalla natura delle fluttuazioni turbolente di

f . La $p(f)$, dunque, non è altro che una funzione matematica con la quale si tenta di approssimare l'andamento della PDF osservata sperimentalmente.

Il valor medio di una generica proprietà ϕ , che dipende dalla frazione di miscelamento (come, ad esempio, le concentrazioni delle specie e la temperatura) può essere calcolato (se il modello chimico considerato è quello dell'equilibrio) come:

$$\bar{\phi} = \int_0^1 p(f) \phi(f) df$$

Se invece si adotta il modello delle flamelet per la descrizione della chimica i valori medi vengono computati come:

$$\bar{\phi} = \iint p(f, \chi_{st}) \phi(f, \chi_{st}) df d\chi_{st}$$

dove con χ_{st} si è indicato il valore che la dissipazione scalare assume nelle condizioni stechiometriche ($f=f_{st}$) che per le fiamme a controdiffusione si esprime:

$$\chi_{st} = \frac{a_s \exp\left(-2\left[\text{erf}^{-1}(2f_{st})\right]^2\right)}{\pi}$$

dove α_s è uguale al rapporto tra la velocità relativa V dei getti e il doppio della distanza tra questi, mentre erf^{-1} è l'inverso della funzione dell'errore. È prassi considerare f e χ_{st} statisticamente indipendenti in modo tale da poter considerare $p(f, \chi_{st})$ uguale al prodotto delle due funzioni densità di probabilità $p_f(f)$ e $p_\chi(\chi_{st})$.

La scelta della forma matematica della $p(f)$ si fonda su misure sperimentali delle fluttuazioni di concentrazione delle specie chimiche. Quella che meglio approssima i dati empirici è la cosiddetta funzione β data da:

$$p(f) = \frac{f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1}}{\int f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1} df}$$

dove:

$$\alpha = \bar{f} \left[\frac{\bar{f}(1-\bar{f})}{\bar{f}'^2} - 1 \right]$$

e

$$\beta = (1-\bar{f}) \left[\frac{\bar{f}(1-\bar{f})}{\bar{f}'^2} - 1 \right]$$

Fluttuazioni in χ_{st} sono ignorate, in modo tale che la PDF di χ risulti una funzione a doppia delta: $p_\chi = \delta(\chi - \bar{\chi})$

Il modello di combustione non premiscelato consente, pertanto, di preprocessare tutte le grandezze coinvolte nelle reazioni chimiche costruendo una *tabella (look up table)* funzione del valor medio e della varianza della frazione di miscelamento. Il solutore fluidodinamico si vede così ridurre drasticamente gli oneri computazionali legati alla chimica dettagliata. Infatti questo dovrà risolvere soltanto due equazioni aggiuntive, per la \bar{f} ed la $\overline{f'^2}$, desumendo dalla tabella i valori di tutte le proprietà coinvolte (concentrazioni delle specie, densità, temperatura, ecc.).

2.3.2.2 LA GENERAZIONE DELLE *FLAMELET*

La costruzione delle librerie di *flamelet* può essere effettuata sia mediante misure sperimentali sia, più comunemente, risolvendo un set di equazioni monodimensionali per le fiamme laminari diffusive a getti contrapposti. Le equazioni che governano l'evoluzione di questo tipo di fiamme possono essere trasformate dallo spazio fisico nello spazio della frazione di miscelamento f [12]. Le equazioni di trasporto per la frazione massica della specie Y_i assumono la forma:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial f^2} + S_i$$

mentre l'equazione per la temperatura si presenta:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial f^2} - \frac{1}{c_p} \sum_i H_i S_i + \frac{1}{2c_p} \rho \chi \left[\frac{\partial c_p}{\partial f} + \sum_i c_{p,i} \frac{\partial Y_i}{\partial f} \right] \frac{\partial T}{\partial f}$$

dove Y_i sono le frazioni massiche della specie i -esima, T è la temperatura, ρ è la densità e f la frazione di miscelamento, c_p è il calore specifico medio della miscela, $c_{p,i}$ il calore specifico della specie i -esima. Infine S_i e H_i rappresentano rispettivamente la velocità di produzione e l'entalpia specifica della specie i -esima. La dissipazione scalare χ deve essere modellata attraverso la *flamelet*.

A titolo di esempio si riporta in Figura 2.3-3 l'andamento della temperatura di una *flamelet* in funzione della frazione di miscelamento.

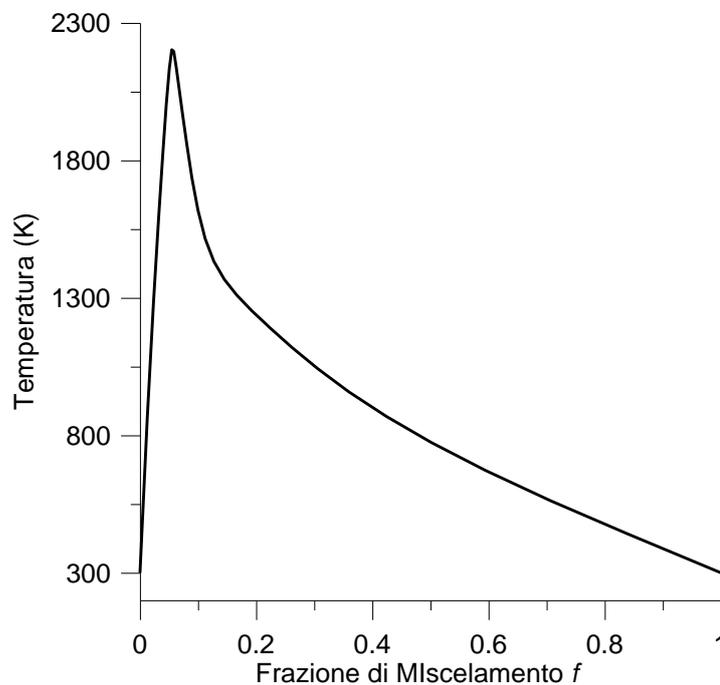


Figura 2.3-3

2.3.3 COMBUSTIONE PREMISCELATA

Nella combustione premiscelata ossidante e combustibile risultano perfettamente mescolati (o almeno lo dovrebbero essere) a livello molecolare prima di raggiungere la zona di reazione vera e propria rappresentata da una sottile superficie nota come fronte di fiamma. Di particolare interesse è la combustione premiscelata così come si sviluppa all'interno dei motori a combustione interna ad accensione comandata. In questo tipo di macchina il fronte di fiamma si propaga dagli elettrodi della candela fino a raggiungere tutti i punti della camera. In assenza di moti vorticosi della miscela incombusta, il fronte di reazione è assimilabile ad una superficie sferica, di area A_L , che avanza con una velocità A_L , detta *velocità laminare di fiamma*, funzione solo delle caratteristiche termochimiche della miscela. In tal caso, detta ρ la densità della miscela incombusta, la velocità di combustione (cioè la velocità con cui la si "consuma" la miscela) in regime laminare è data da:

$$\left(\frac{dm_b}{dt} \right)_L = \rho A_L S_L$$

Tuttavia nella pratica i processi reali che avvengono in un M.C.I. si svolgono in campi di moto fortemente turbolenti. Diverse indagini sperimentali hanno dimostrato che il fronte di separazione tra i gas combusti e quelli incombusti presenta a fronte di uno spessore trascurabile intense deformazioni su un vasto campo di scale di lunghezza. L'effettiva superficie di reazione, A_T , risulta, a causa di tali deformazioni, notevolmente più estesa della

corrispondente in regime laminare determinando un forte incremento della velocità di combustione turbolenta:

$$\left(\frac{dm_b}{dt} \right)_T = \rho A_T S_L$$

I reali meccanismi che deformano il fronte di fiamma non sono tuttavia ancora del tutto chiari il che rende complessa la valutazione della sua superficie. Effettuando alcune semplificazioni si può affermare che l'area del fronte di fiamma dipende essenzialmente dal corrugamento imposto dall'azione dei moti turbolenti che si sviluppano nel cilindro. Sfruttando le teorie della geometria *frattale* [18], considerando le deformazioni del fronte di fiamma autosimili, il rapporto tra A_T e A_L , può essere espresso in funzione delle scale integrale (l_t) ed interna (l_i) tipiche del fenomeno mediante la relazione:

$$\frac{A_T}{A_L} = \left(\frac{l_t}{l_i} \right)^{D_3-2}$$

dove D_3 è la dimensione frattale (incognita) del fronte. Da misurazioni sperimentali la dimensione frattale risulta assumere valori compresi tra 2,11 e 2,37. Una correlazione in grado di stimare il valore della dimensione frattale è stata proposta da North et altri. Questa tiene in considerazione il fatto che la

dimensione frattale cresce al crescere della intensità di turbolenza e diminuisce all'aumentare della velocità laminare di fiamma:

$$D_3 = 2.05 \frac{S_L}{u' + S_L} + 2.35 \frac{u'}{u' + S_L}$$

dove con u' si è indicata la componente fluttuante della velocità.

CAPITOLO 3: GENERAZIONE DI GRIGLIE COMPUTAZIONALI

3.1 INTRODUZIONE

La soluzione numerica delle equazioni differenziali alle derivate parziali (*PDE*) che governano la fluidodinamica necessita della discretizzazione dello spazio fisico occupato dal fluido in esame, in un insieme di volumi elementari detti *celle*. Tale suddivisione del dominio fisico dà origine ad una struttura matematica detta griglia computazionale o, in inglese, *mesh*. Le *PDE* vengono approssimate da un set di equazioni algebriche definite, a seconda delle formulazioni, sui vertici di tali volumi (detti *nodi*), sui centri o su entrambi. Tale sistema di equazioni algebriche dà come soluzione un set di valori discreti che approssima la soluzione esatta delle *PDE* nel dominio in esame. La *mesh*, dunque, stabilisce una corrispondenza biunivoca fra il dominio fisico da discretizzare ed il dominio computazionale da utilizzare per la soluzione delle equazioni.

La discretizzazione del dominio fluido deve essere fatta in modo tale da garantire che le diverse zone che costituiscono il dominio fisico siano ben identificabili, e soprattutto che le superfici di contorno siano il più possibile conformi al dominio fisico in modo tale le condizioni al contorno possano essere facilmente ed accuratamente rappresentate. La scelta della griglia computazionale risulta decisiva per il successo delle simulazioni *CFD*, in quanto cattiva qualità e risoluzioni troppo elevate della stessa possono condurre a calcoli lenti e poco accurati fino alla divergenza della soluzione.

Grazie alla notevole evoluzione ed al sempre più diffuso impiego dei calcolatori elettronici, la *grid generation* sta diventando una vera e propria disciplina. Gli attuali computer, finanche le usuali workstation, possono portare a compimento simulazioni in tempi relativamente brevi, anche su griglie di decine o centinaia di migliaia di punti. Si è, quindi, registrata, negli ultimi anni, una diffusione dell'analisi computazionale e di conseguenza della *grid generation*, sia in campo scientifico che industriale con applicazioni nei più svariati problemi.

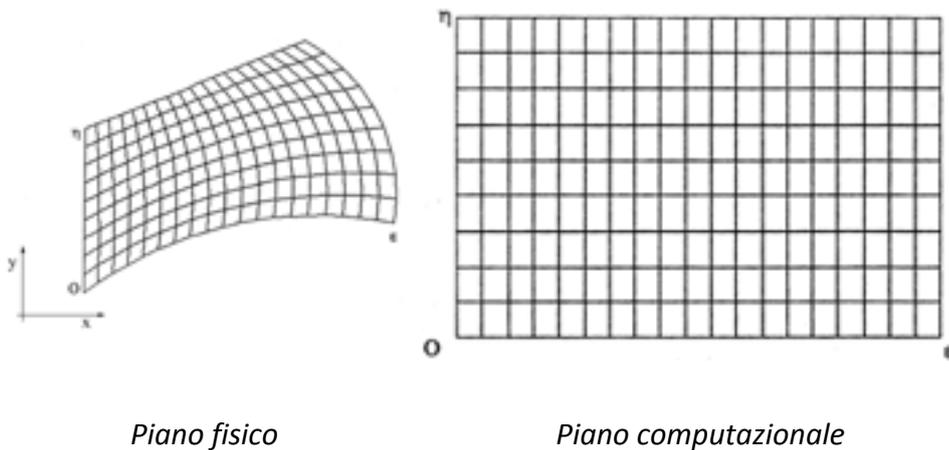
3.1 CLASSIFICAZIONE DELLE GRIGLIE

Nel corso degli anni sono stati studiati diversi tipi di griglie e di conseguenza, diverse tecniche di generazione. Una prima distinzione può essere fatta tra griglie *Strutturate* e *Non Strutturate* (anche se il vero elemento che andrebbe considerato è il solutore che si è scelto di utilizzare e la sua formulazione nonché il modo con cui tratta le griglie).

3.1.1 GRIGLIE STRUTTURATE

In generale una *mesh* si considera strutturata quando ciascuno dei suoi nodi interni risulta connesso con un numero fisso di nodi limitrofi (in genere 4 in domini bidimensionali e 6 in domini tridimensionali), dando luogo ad una struttura regolare. Domini fisici discretizzati con griglie strutturate generano domini computazionali di tipo *rettangolare* o, nel caso di griglie multi blocco, *plurirettangolari*. Per generare una griglia strutturata occorre riferirsi ad un sistema di coordinate curvilinee, eventualmente normalizzate, tale che una di queste coordinate sia costante su una frontiera mentre l'altra vari

monotonamente lungo tale frontiera. La trasformazione del dominio fisico in un dominio computazionale rettangolare viene perseguita mantenendo identici campo di variazione e verso della coordinata variabile su ciascuna di due frontiere opposte. Così facendo ogni linea riferita ad una coordinata intersecherà tutte le altre linee riferite all'altra coordinata ciascuna in uno ed un solo punto cosicché ciascun nodo nella regione fisica avrà per immagine uno ed un solo punto nella regione computazionale e viceversa, assicurando la biunivocità fra le due classi di domini.



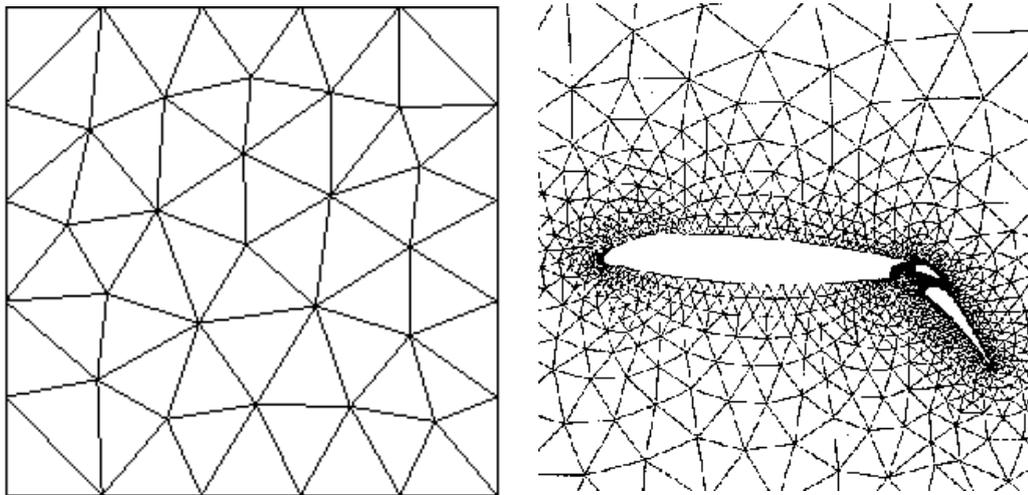
In pratica una griglia strutturata è un set organizzato di punti formati dall'intersezione delle linee di un sistema di coordinate curvilinee conformi alle frontiere. La caratteristica principale di un tale sistema è che ogni linea coordinata (superficie in 3D) è coincidente con ogni frontiera della regione fisica. L'uso delle intersezioni della linea coordinata per definire i punti della griglia fornisce una struttura organizzata che permette di risolvere le PDE non

più in un sistema di coordinate curvilinee, ma in un sistema cartesiano trasformato che è stato generato dal primo; ovvero una griglia generata numericamente permette lo svolgimento dei calcoli in un campo computazionale rettangolare per costituzione. Una griglia così generata svincola la simulazione numerica dalle restrizioni della forma del dominio e permette una scrittura dei codici di calcolo del tutto generale, nei quali le frontiere dei domini possono essere imposte semplicemente, come input, in un secondo momento. Un tale campo computazionale rettangolare può avere una suddivisione in sottoregioni anch'esse rettangolari, dando così origine ad una ampia varietà di configurazioni possibili (*griglie strutturate multiblocco conformi*); per configurazioni complesse, inoltre, si può anche pensare a sistemi di coordinate generati separatamente per ciascuna sottoregione del sistema fisico e successivamente giunte insieme nel piano computazionale (*griglie strutturate non conformi*).

Lo svantaggio maggiore delle griglie strutturate (soprattutto le multi blocco conformi) risiede nel fatto che non è possibile, se non limitatamente, assegnare risoluzioni diverse alle varie regioni che costituiscono il dominio. Ciò può condurre alla generazione di griglie caratterizzate da un elevato numero di nodi anche nelle zone dove il flusso non presenta forti gradienti, determinando tempi di calcolo molto superiori. Inoltre, quando si ha a che fare con geometrie molto complesse è facile che una griglia strutturata presenti delle deformazioni, valutabili in termini di ortogonalità delle linee in prossimità dei nodi, che possono abbassare la qualità della *mesh* e rendere difficoltosa la soluzione delle *PDE* proprio in questi punti singolari.

3.1.2 GRIGLIE NON STRUTTURATE

In una griglia non strutturata, invece, ogni nodo può essere connesso con un arbitrario numero di nodi della griglia. Sebbene sia possibile avere elementi di forme diverse, gli elementi maggiormente utilizzati sono i triangoli in 2D (domini bidimensionali) e i tetraedri in 3D (domini tridimensionali). L'utilizzo di griglie non strutturate presenta alcuni vantaggi, tra cui la grande flessibilità geometrica, che permette di trattare configurazioni molto complesse, e un efficiente controllo della risoluzione della griglia che consente raffinamenti localizzati (Figura 3.1-1).



*Griglia non strutturata uniformemente
infittita*

*Griglia non strutturata diversamente
infittita*

Figura 3.1-1

Per la generazione di griglie non strutturate bidimensionali sono stati elaborati diversi algoritmi che possono essere raggruppati in tre grandi gruppi:

- algoritmi basati sul criterio di *Delaunay*;
- algoritmi basati sul criterio di *Delaunay constrained*;
- algoritmi non basati sui criteri di *Delaunay*.

Ancora in funzione del metodo di costruzione utilizzato gli algoritmi si distinguono in:

- algoritmi che, dato un insieme fissato di punti, costruiscono una triangolazione della quale i punti dati costituiscono i nodi (per esempio l'algoritmo di *Lawson* per generare una triangolazione di *Delaunay* con n punti dati);
- algoritmi che costruiscono una griglia generando i nodi secondo un certo criterio (per esempio l'*Advancing Front Technique*, ovvero la tecnica di avanzamento del fronte).

Non ci addentreremo nella descrizione degli algoritmi proposti per la generazione delle griglie, ma focalizzeremo l'attenzione su come procedere nella scelta del tipo di griglia, strutturata o non strutturata, in relazione del problema da affrontare, della geometria e del solutore a disposizione,

presentando degli esempi di griglie che sono state costruite durante il dottorato.

3.2 LA SCELTA DELLA GRIGLIA

Nella scelta della griglia di calcolo per le simulazioni *CFD* intervengono numerose variabili quali la geometria, la fisica da modellare, il tipo di solutore, le risorse hardware a disposizione. L'adozione di una griglia strutturata piuttosto che di una non strutturata è legata, in pratica, esclusivamente al tipo di solutore adottato. Per i risultati presentati in questa tesi di dottorato sono stati utilizzati due solutori: il KIVA-3V e il FLUENT® 6.3. Il primo è un esempio di solutore "strutturato multiblocco" nel senso che è in grado di operare solo su griglie strutturate multi blocco conformi; il secondo è un solutore "non strutturato" nel senso che tratta una qualsiasi griglia come non strutturata e dunque può utilizzare qualsiasi tipo di griglia strutturata, non strutturata ed *ibrida* su un ampio set di elementi (triangoli, tetraedri, pentagoni, cunei, piramidi, quadrati, esaedri, ecc).

In generale l'utilizzo di una griglia strutturata risulta di più facile trattazione da parte del solutore. Tuttavia, pur avvalendosi delle tecniche multiblocco, attraverso le quali è possibile scomporre la regione fisica in più sottodomini, queste *mesh*, in presenza di geometrie molto complesse, non hanno la stessa potenza di rappresentazione propria delle griglie non strutturate. Principale pregio delle non strutturate è, infatti, la possibilità di rappresentare geometrie complesse con infittimenti locali e di superare i limiti

della strutturata nella gestione di punti singolari Figura 3.2-1 **Errore. L'origine riferimento non è stata trovata..**

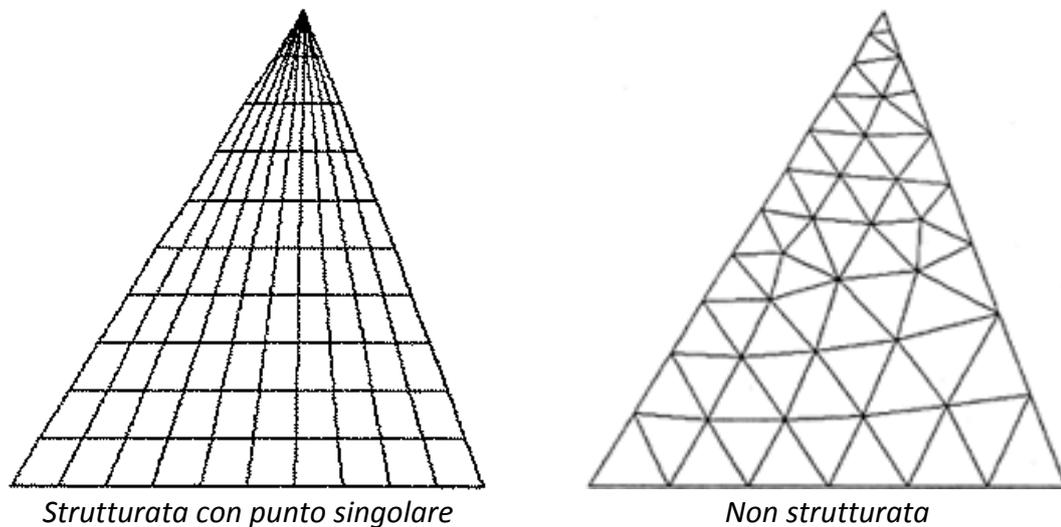


Figura 3.2-1

Limite dell'approccio non strutturato è quello di fornire al solutore un blocco di dati più vasto da trattare, dovendo fornire necessariamente anche uno schema di connettività di tutti i punti della griglia (non essendo più possibile individuare un sistema di coordinate curvilinee). I limiti dei due tipi possono essere superati adottando le cosiddette griglie *ibride* conformi e non conformi. Se una regione dello spazio da computare si presta ad una suddivisione di tipo strutturato mentre, sempre nello stesso spazio, un'altra regione necessita di una *mesh* non strutturata, si possono soddisfare entrambe le esigenze creando due griglie una strutturata e l'altra no nelle rispettive regioni (in Figura 3.2-2 è riportato un esempio per motori a combustione interna). L'unione delle due

griglie potrà essere effettuata sia mediante l'utilizzo di elementi di transizione tra un tipo e l'altro (quali celle triangolari in 2D e piramidali e a cuneo in 3D) sia mediante l'utilizzo di superfici di interfaccia non conformi (l'uso di quest'ultima tipologia è legata, ancora una volta, alle potenzialità del solutore).

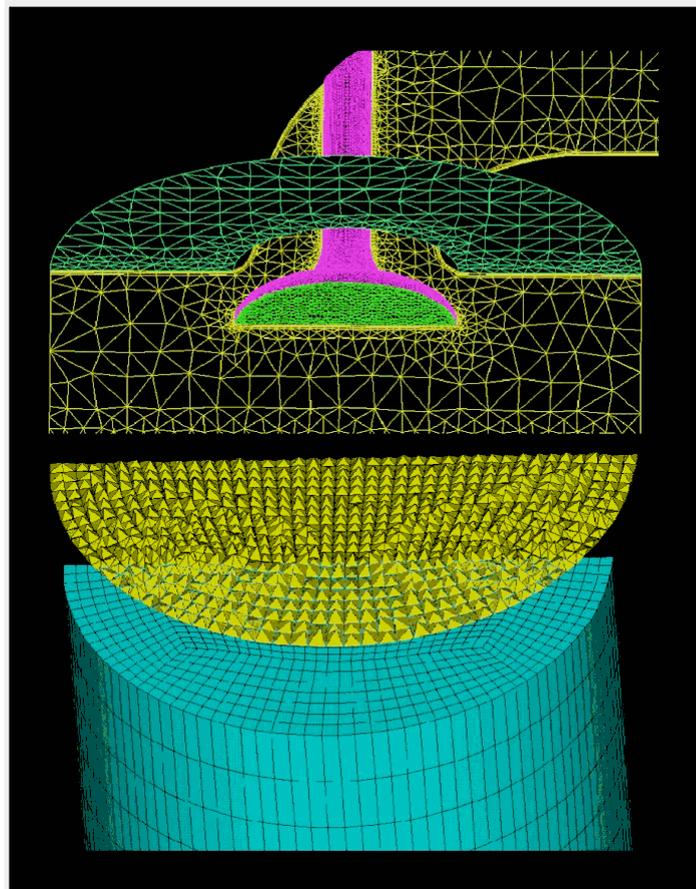


Figura 3.2-2

3.2.1 COMBUSTORE LEAN PREMIXED 3D

In Figura 3.2-3 è presentata la griglia computazionale tridimensionale periodica di un settore di 60° di un combustore *Lean Premixed*. Si tratta di un combustore alimentato prevalentemente con gas naturale che verrà descritto nel dettaglio nel capitolo 5. Per consentire la rappresentazione dei particolari degli iniettori del combustibile (Figura 3.2-5 Dettaglio degli Iniettori Combustibile del Main), delle palette di raffreddamento del *liner* e dello *swirler* (Figura 3.2-7), si è scelto di generare una *mesh* non strutturata ad elementi tetraedrici e triangolari.

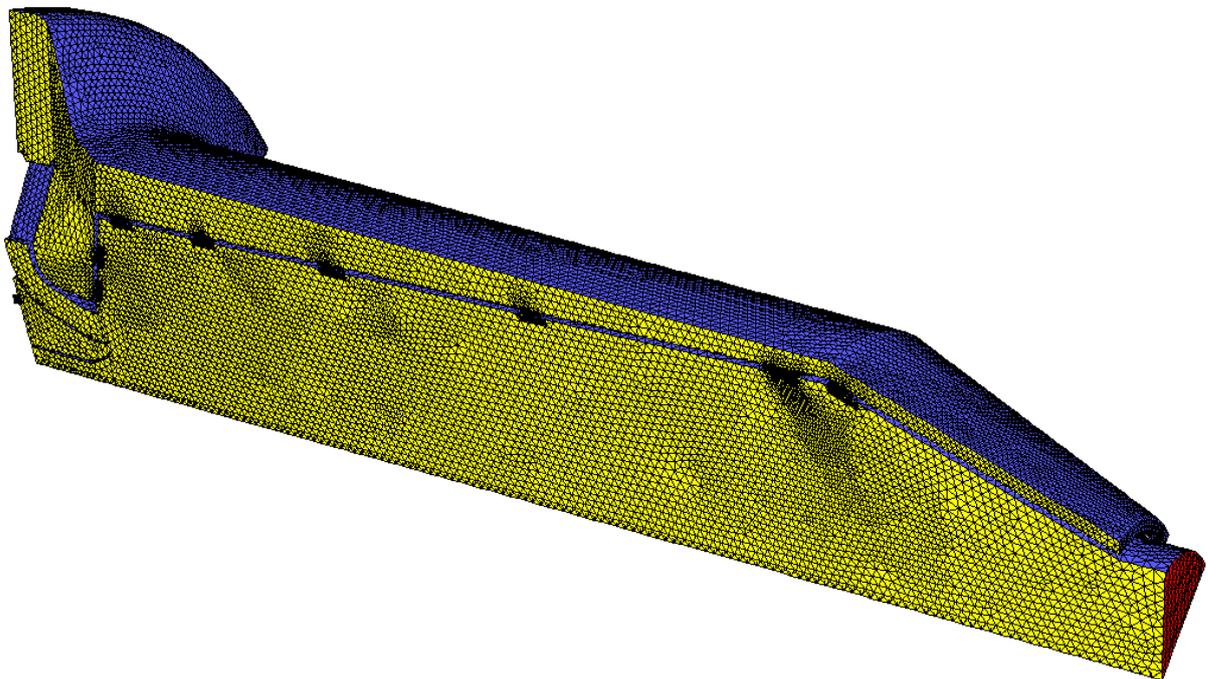


Figura 3.2-3 Griglia Ansaldo 3D da 120.000 nodi

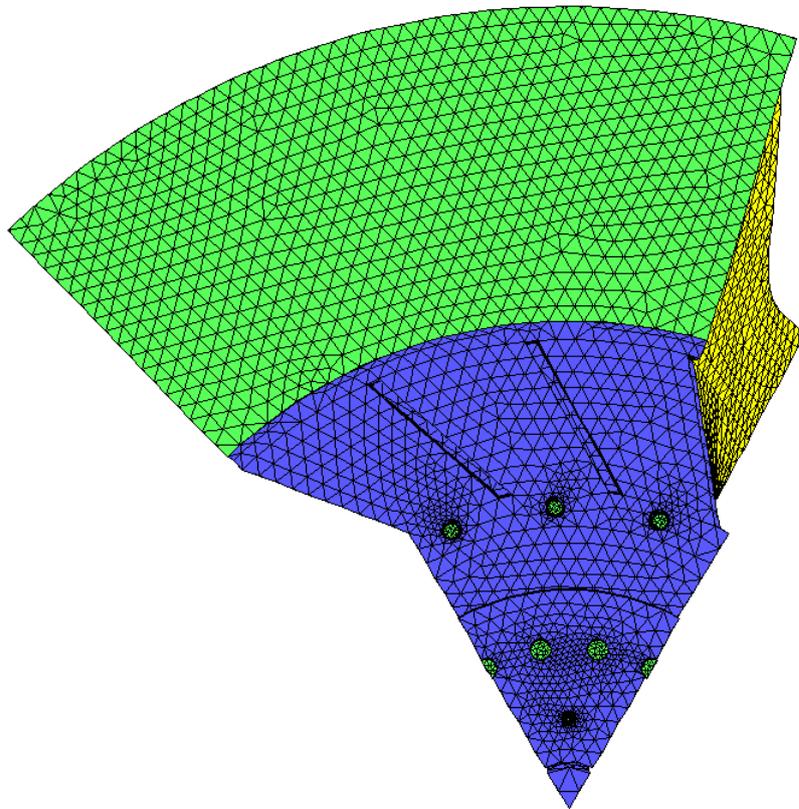


Figura 3.2-4 Vista Posteriore

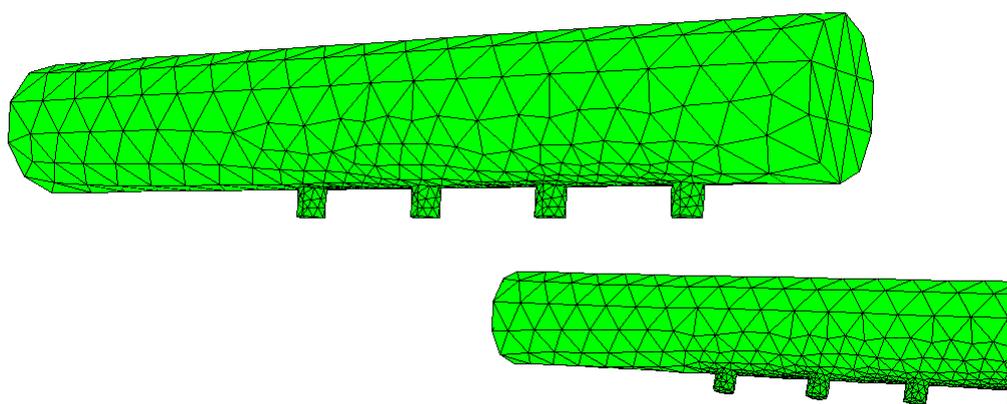


Figura 3.2-5 Dettaglio degli Iniettori Combustibile del Main

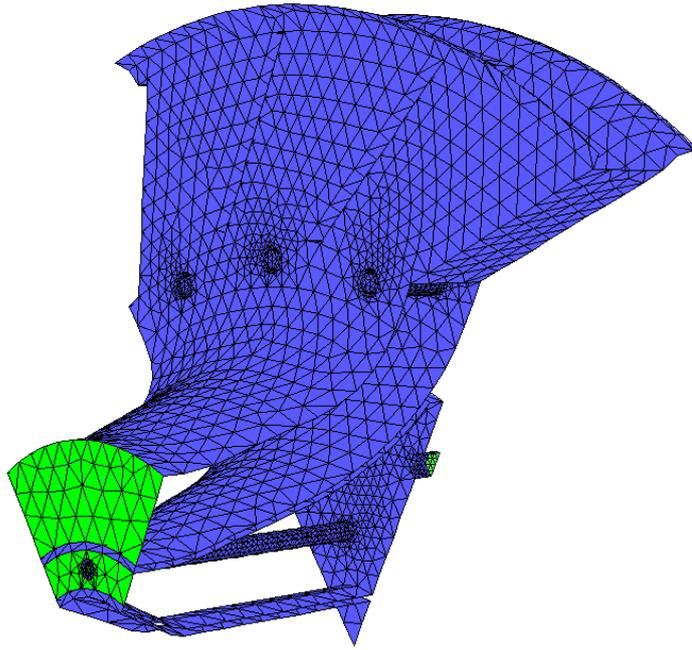


Figura 3.2-6 Dettaglio dei Condotti Main e Pilot

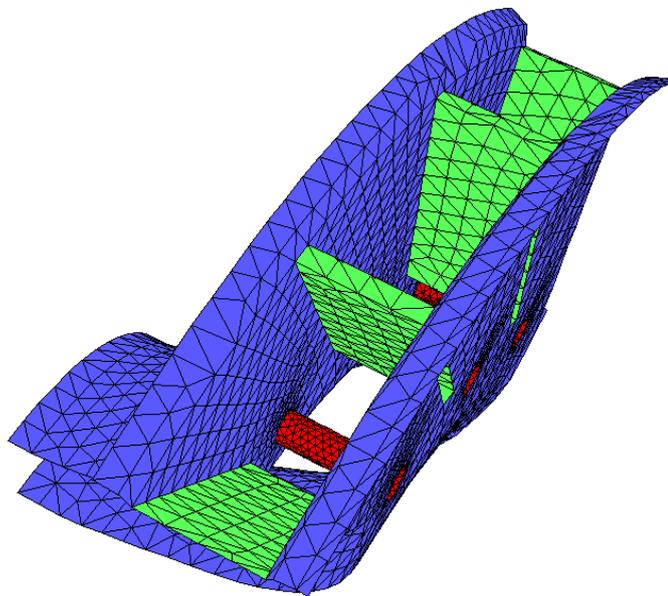


Figura 3.2-7 Dettaglio del Vano dello Swirler Radiale

3.2.2 FILTRI DI ASPIRAZIONE E SCARICO DI UN MOTORE BENZINA

In Figura 3.2-8 possiamo osservare una griglia strutturata multiblocco conforme di un filtro di aspirazione di un motore a benzina generata per essere adoperata con un codice misto 1D-3D, il cui solutore 3D è rappresentato dal codice KIVA-3V. Sono stati realizzati due domini a diverso grado di infittimento con lo scopo di determinare il rumore gasdinamico prodotto dal componente. Nonostante sia molto difficoltoso riprodurre, mediante griglie di questo genere, fedelmente la geometria, si è stati in grado di rappresentare alcuni dettagli quali i setti (Figura 3.2-9) e i risuonatori (Figura 3.2-10).

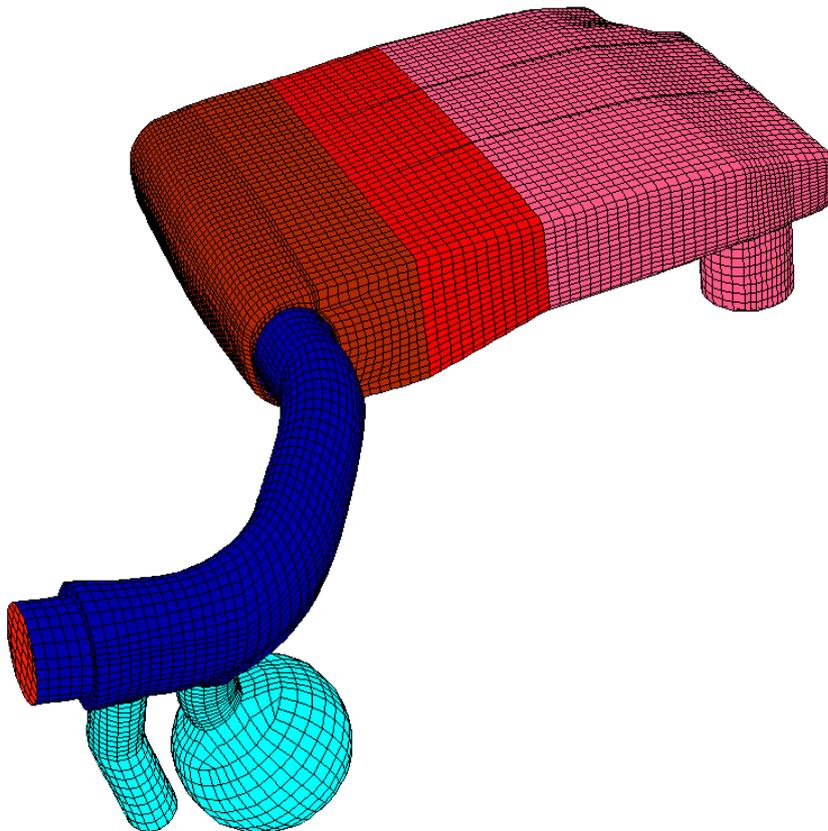


Figura 3.2-8 Mesh di un Filtro di Aspirazione da 65.000 nodi

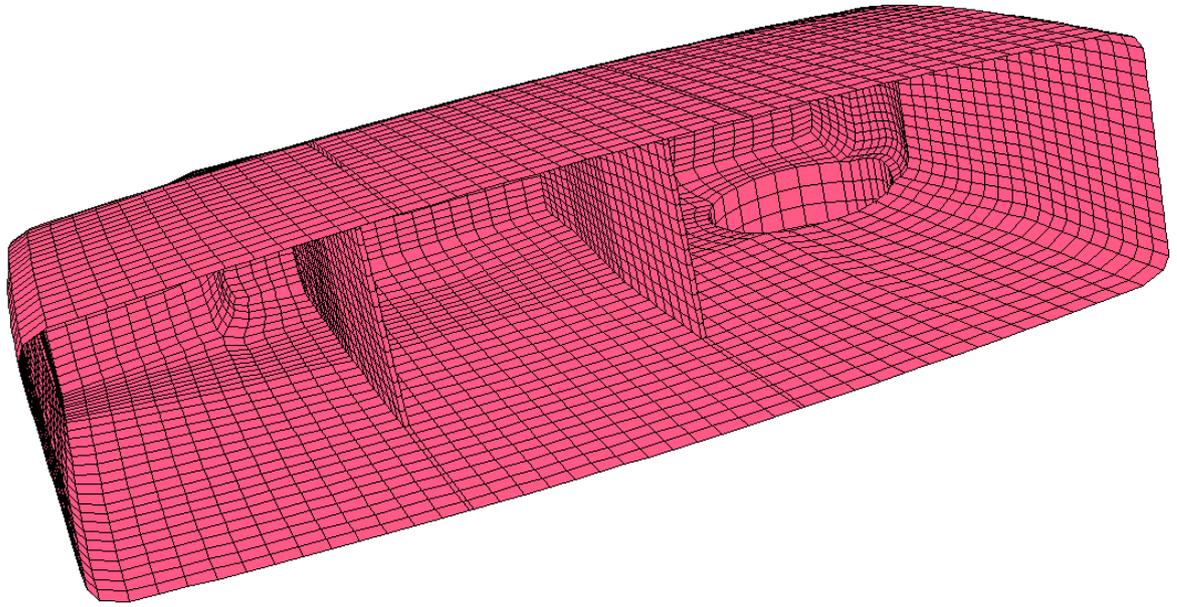


Figura 3.2-9

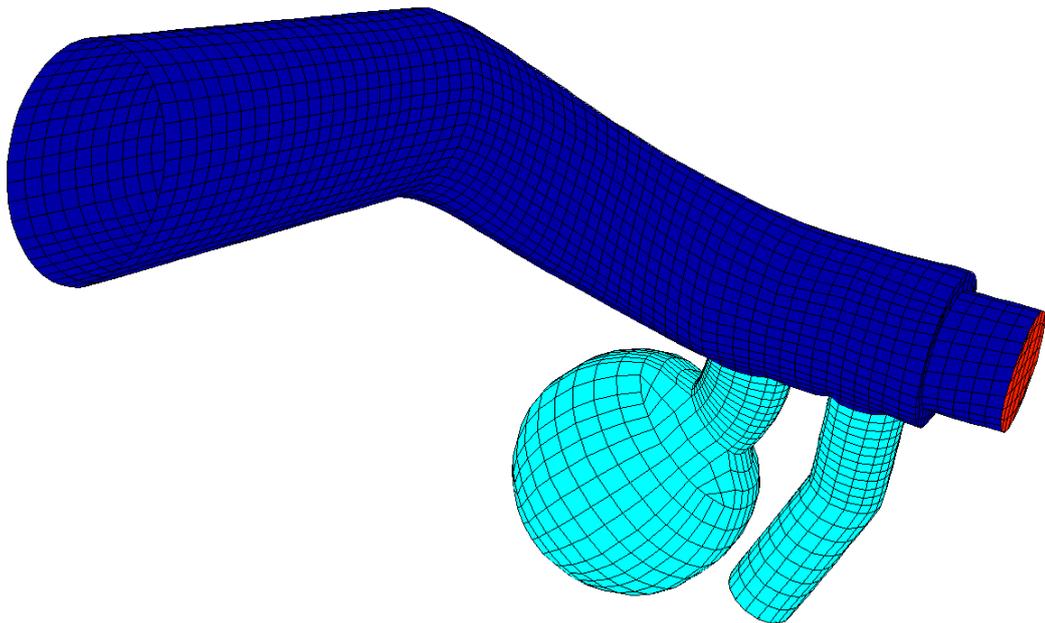


Figura 3.2-10

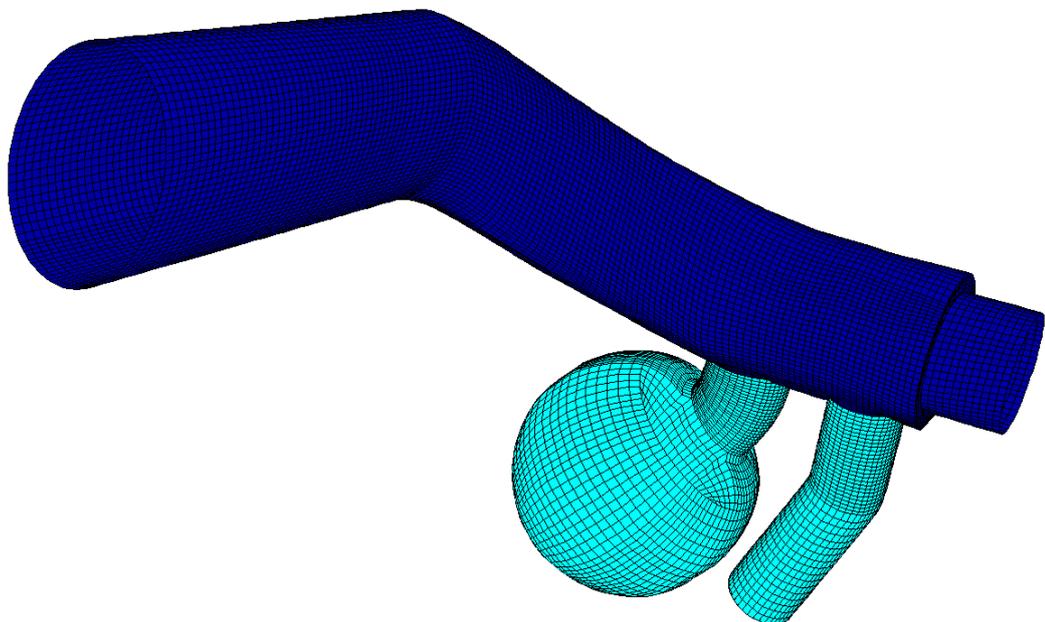


Figura 3.2-11 Dettaglio della bocca di Aspirazione Mesh da 680.000 nodi

In Figura 3.2-12 è mostrata la griglia del filtro di scarico dello stesso motore benzina realizzata per scopi analoghi a quelli del filtro di aspirazione. Si tratta ancora di una griglia strutturata multiblocco conforme da circa 22.000 nodi.

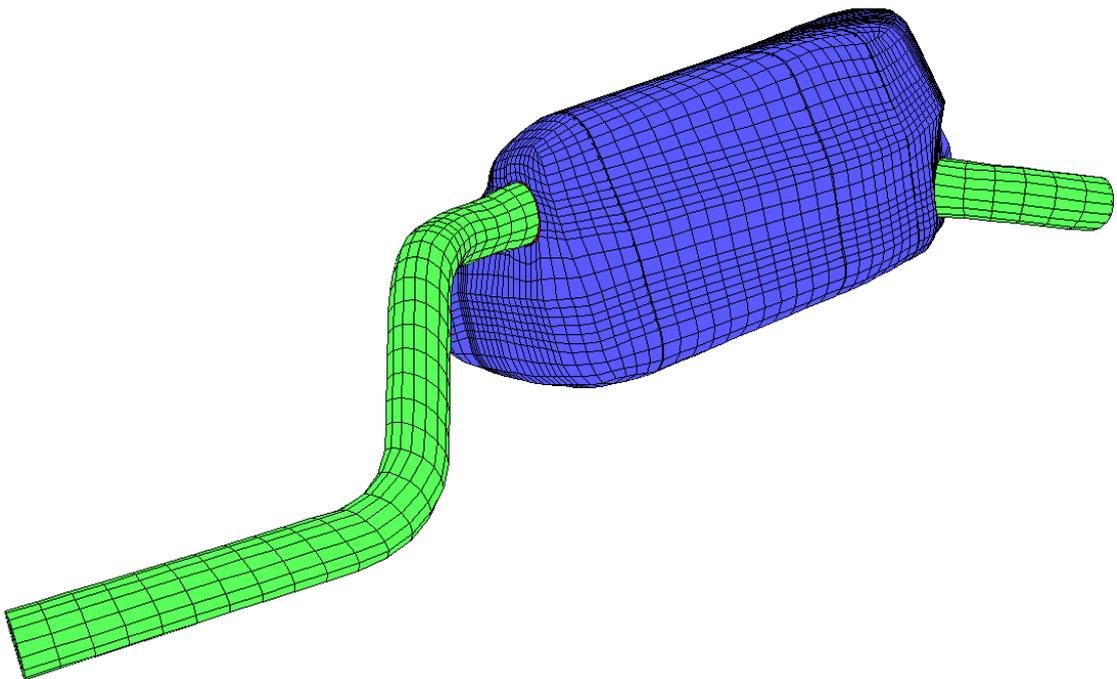


Figura 3.2-12

Si è riusciti a descrivere alcuni dettagli geometrici come i setti di separazione all'interno del filtro e i condotti di collegamento interno tra i vari volumi (Figura 3.2-13).

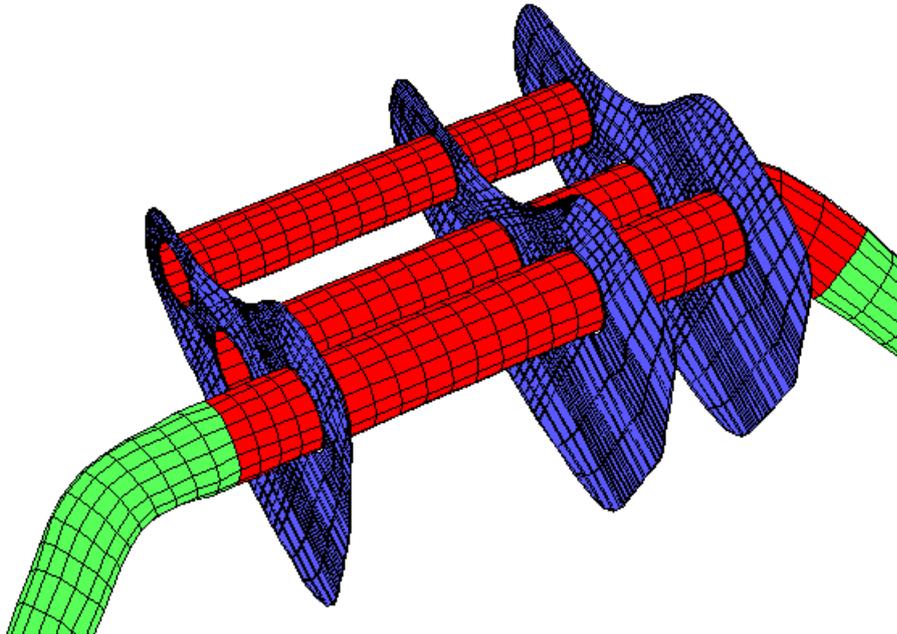


Figura 3.2-13

3.2.3 FILTRO DI ASPIRAZIONE DI UN MOTORE DIESEL AGRICOLO

In Figura 3.2-14 è rappresentata la *mesh* del filtro di aspirazione di un motore diesel agricolo da circa 25.000 nodi. Ancora una volta si tratta di una griglia strutturata multiblocco conforme.

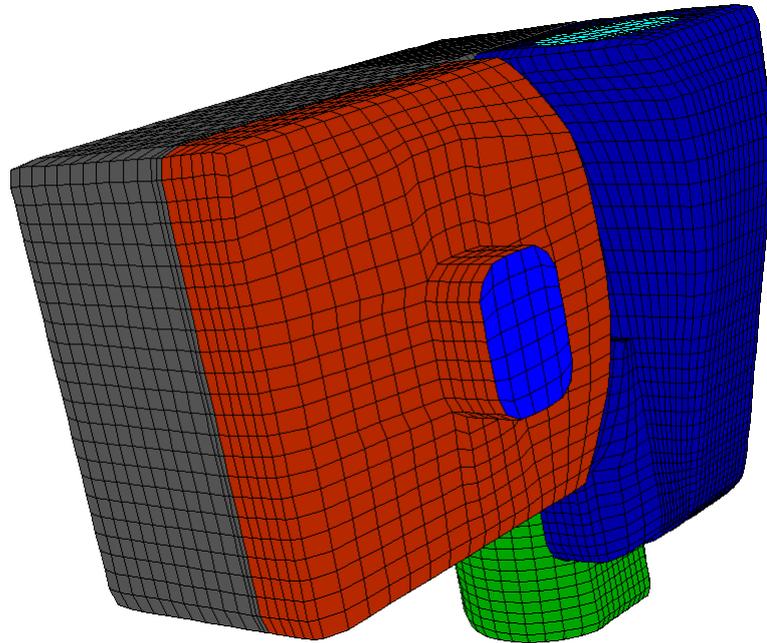


Figura 3.2-14

In Figura 3.2-15 Dettaglio del Separatore a Ciclone si può osservare il dettaglio del separatore a ciclone che si è stati in grado di riprodurre fedelmente.

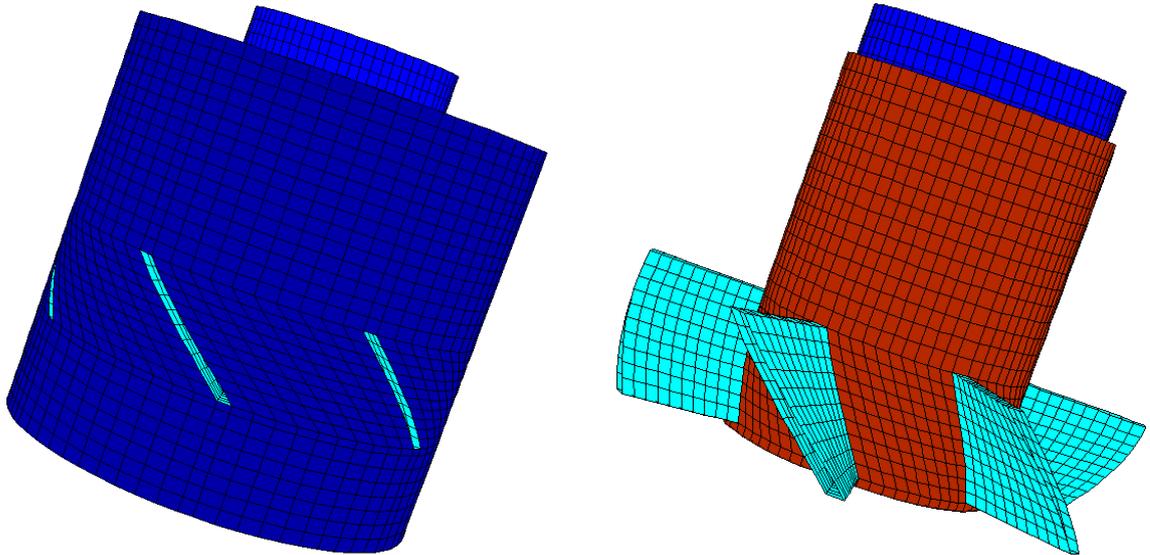


Figura 3.2-15 Dettaglio del Separatore a Ciclone

3.2.4 MOTORE DUE TEMPI MORINI

In Figura 3.2-16 è riportata la griglia del motore due tempi Morini da circa 15.000 nodi. Si tratta di una griglia strutturata multiblocco conforme simmetrica, pensata ancora per il KIVA-3V. Particolarità di tale griglia è la deformazione del dominio e la presenza delle luci di aspirazione e scarico.

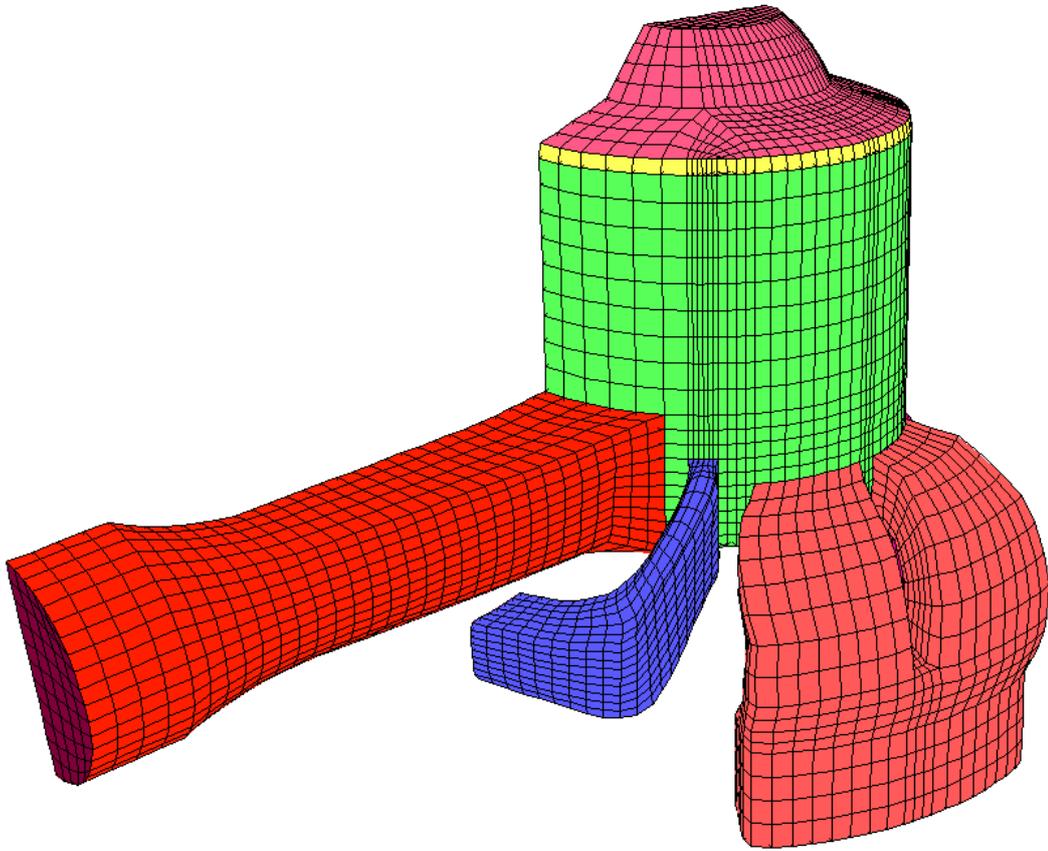


Figura 3.2-16

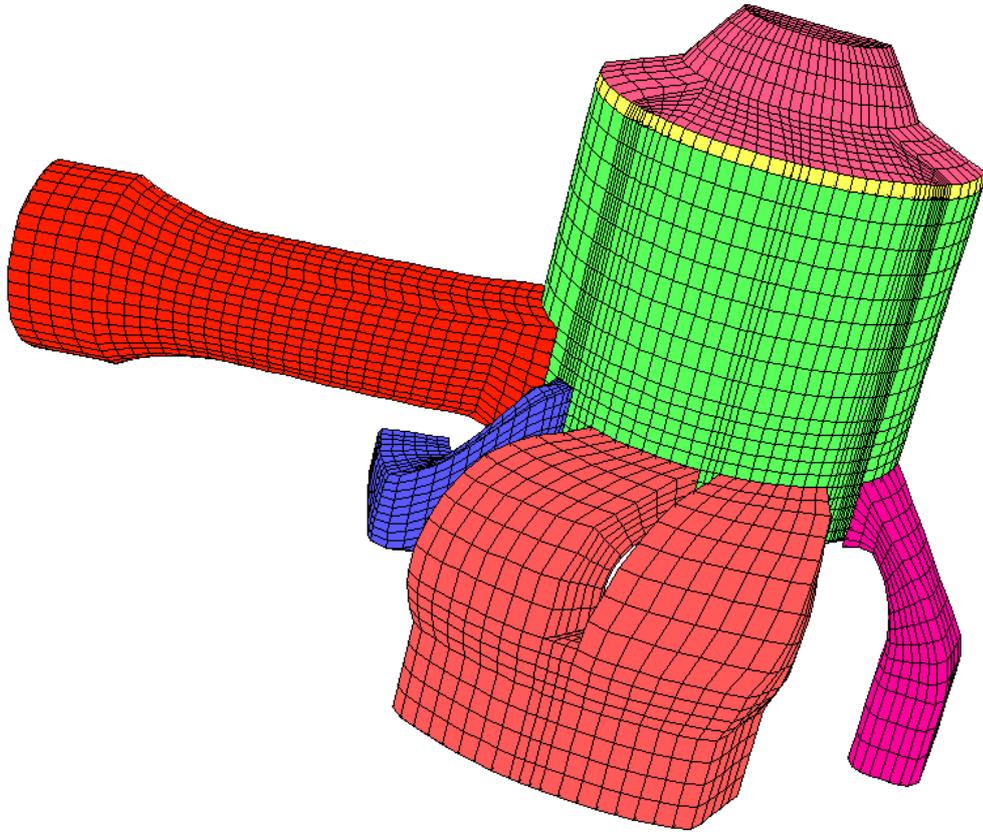


Figura 3.2-17

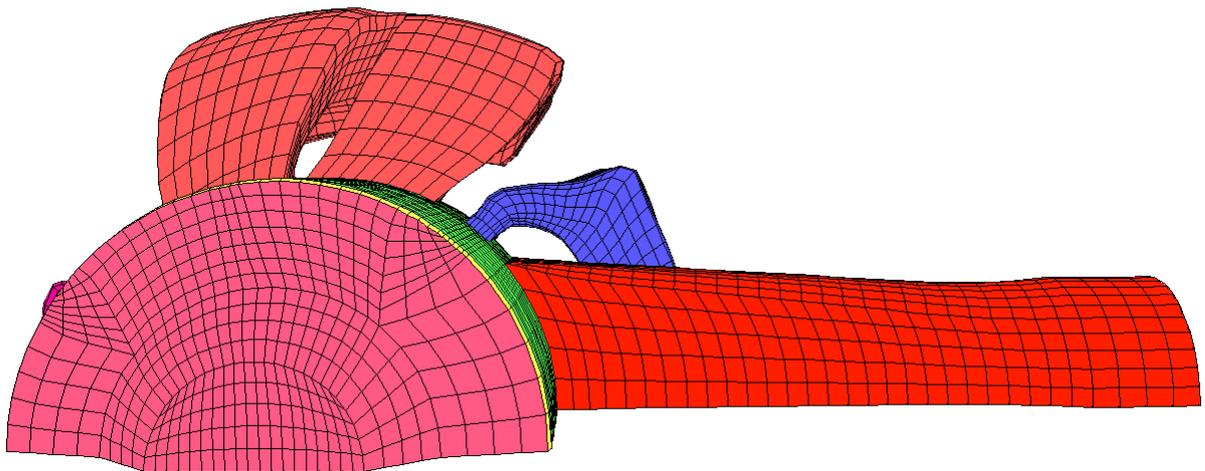


Figura 3.2-18 Mesh Morini Vista dall'Alto

3.2.5 MOTORE DIESEL BMW-BOSCH

Infine si presenta la griglia ibrida del motore diesel BMW-Bosch (Figura 3.2-19 Mesh BMW-Bosch al PMS) generata per FLUENT®. La complessità di realizzazione di un tale tipo di *moving mesh*, dotata sia di moto del pistone che delle valvole, si deve ricercare nel modo in cui il solutore scelto gestisce il problema nonché nella geometria stessa del motore. In particolare bisogna tener presente che il solutore realizza l'avanzamento delle valvole all'interno del cilindro distruggendo e progressivamente ricostruendo la griglia interessata. Per questo motivo è necessario realizzare una *mesh* non strutturata ad elementi tetraedrici nella zona del cilindro che viene interessata dal moto delle valvole. La restante parte del cilindro, eccetto la *bowl*, è stata realizzata con elementi prismatici a base triangolare, così come la zona fluida al di sopra delle valvole. Infine, *bowl* e condotti di aspirazione e scarico sono stati discretizzati con elementi tetraedrici.

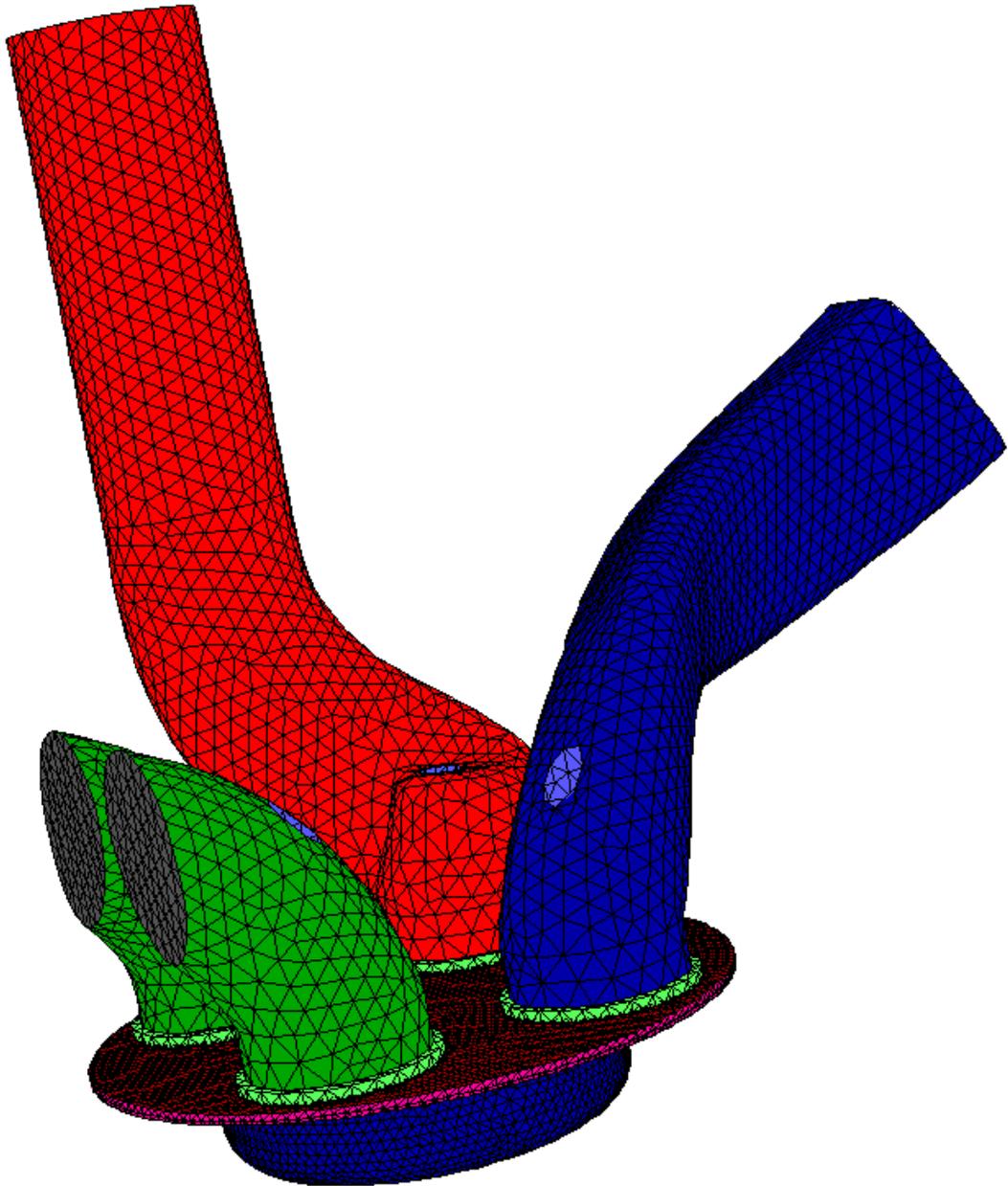


Figura 3.2-19 Mesh BMW-Bosch al PMS 33.000 nodi

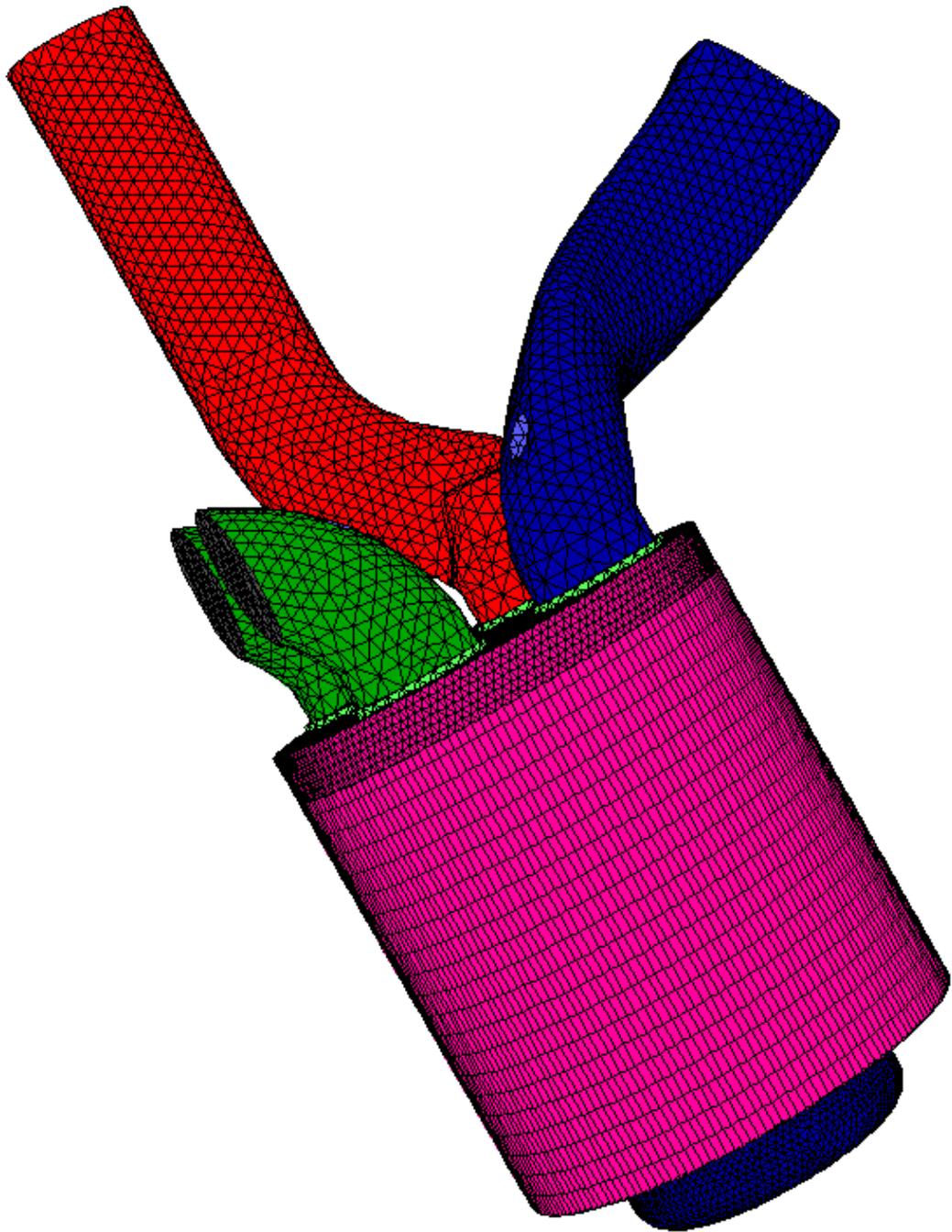


Figura 3.2-20 Mesh BMW-Bosch al PMI 110.000 nodi

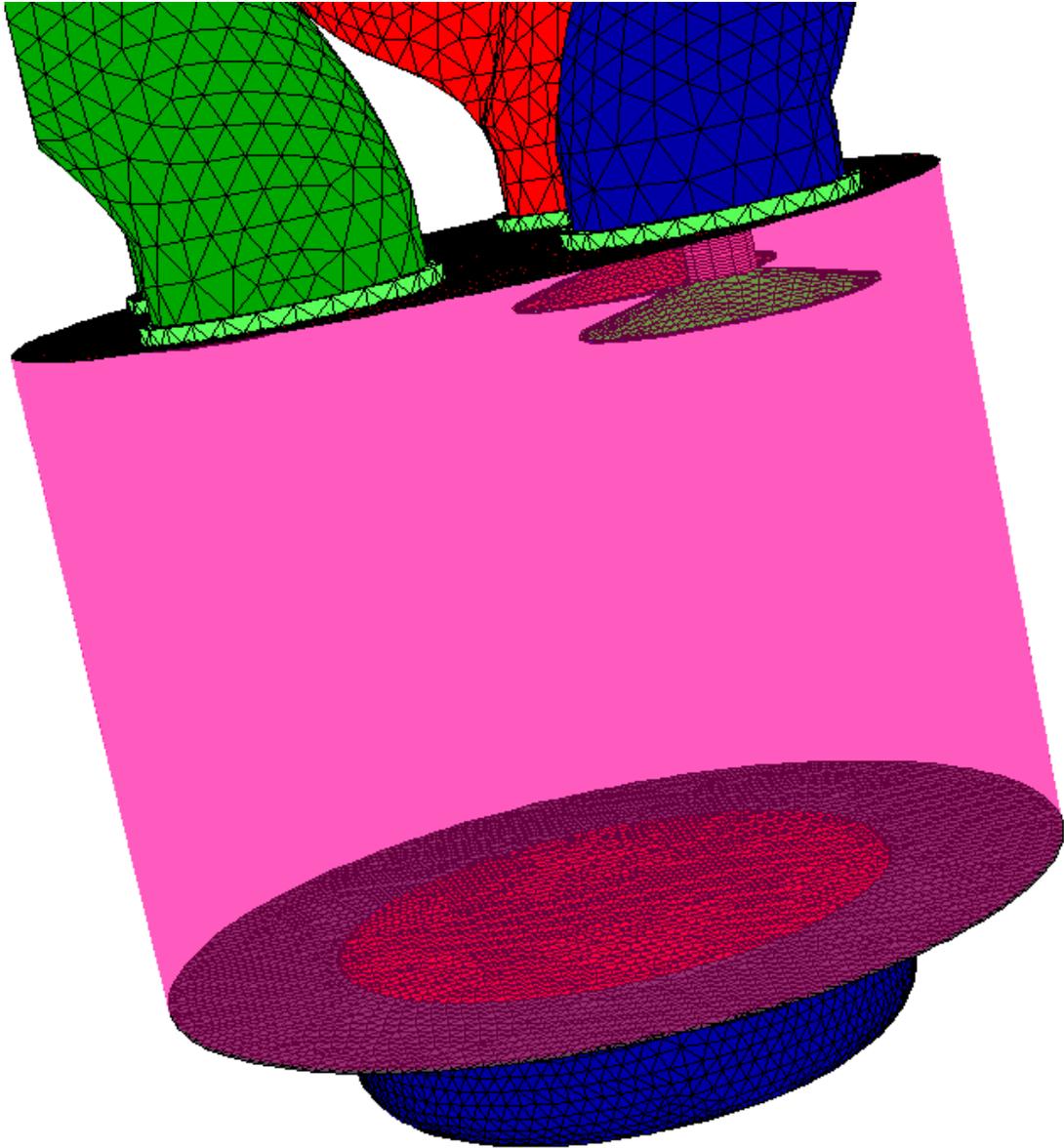


Figura 2-21 Fase di Aspirazione 99.000 nodi

CAPITOLO 4: ESPERIMENTI NUMERICI

4.1 INTRODUZIONE

L'utilizzo della fluidodinamica computazionale (*CFD*) per la simulazione di flussi reagenti richiede l'adozione di opportuni modelli che descrivano turbolenza e combustione nonché la loro interazione. In letteratura sono riportati numerosi modelli, molti dei quali disponibili nel solutore adottato (*FLUENT*[®]); per poter effettuare una scelta tra i diversi modelli, per la simulazione del combustore *Ansaldo*, è stata effettuata una analisi, su geometrie estremamente semplificate, per verificare gli effetti che i diversi modelli a disposizione determinano sull'andamento del campo termofluidodinamico. L'analisi è stata condotta sia su fiamme di tipo non premiscelato che premiscelato, in quanto entrambi i meccanismi intervengono nella tipologia di camere di combustione presa in considerazione in questo lavoro. Operare con geometrie estremamente semplici ha consentito di effettuare valutazioni rapide sui vari modelli a disposizione, consentendo una scelta mirata dei modelli per le simulazione del combustore *Ansaldo* (riportata nel capitolo 5).

Infine è stata condotta una sorta di analisi di "sensibilità" sulla generazione delle *flamelet*, per valutare l'influenza del numero dei punti griglia, del valore iniziale della *scalar dissipation rate* e dello *scalar dissipation step*. Il modello *flamelet*, come già riportato, consente di incorporare nella combustione schemi cinetici alquanto complessi riducendo di per sé il costo computazionale; effettuare tale tipo di analisi di sensibilità ha consentito l'ulteriore riduzione dei

tempi di calcolo, individuando i parametri più opportuni per la generazione delle *flamelet* mantenendo invariata l'accuratezza della soluzione.

4.2 COMBUSTORE NON PREMISCELATO

L'analisi numerica è stata condotta su una geometria cilindrica, di seguito descritta. Sono state effettuati diversi calcoli, considerando sia domini bidimensionali che tridimensionali, il diverso grado di infittimento della griglia computazionale, diversi modelli di turbolenza e combustione.

4.2.1 LA GEOMETRIA E LE CONDIZIONI AL CONTORNO

La geometria presa in considerazione è costituita da un combustore cilindrico di cui in Figura 4.2-1 è riportata una vista bidimensionale assialsimmetrica. Il combustore ha una lunghezza di 1.800 mm ed un diametro di 450 mm.

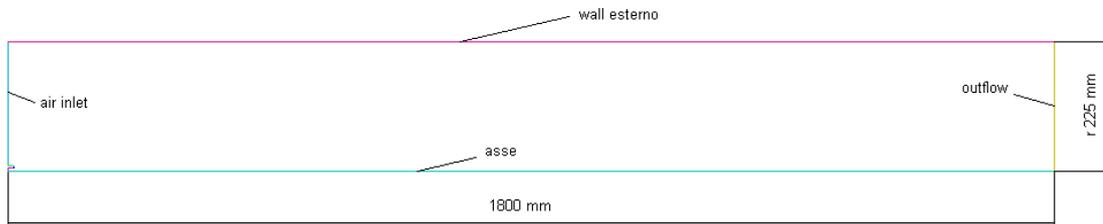


Figura 4.2-1

In Figura 4.2-2 è riportato, sempre in vista bidimensionale assialsimmetrica, il particolare quotato del bruciatore in cui si nota che il combustibile viene introdotto al centro della camera.

In Tabella 4.2-1 sono riassunti i modelli e gli input base comuni a tutte le simulazioni presentate in questo capitolo.

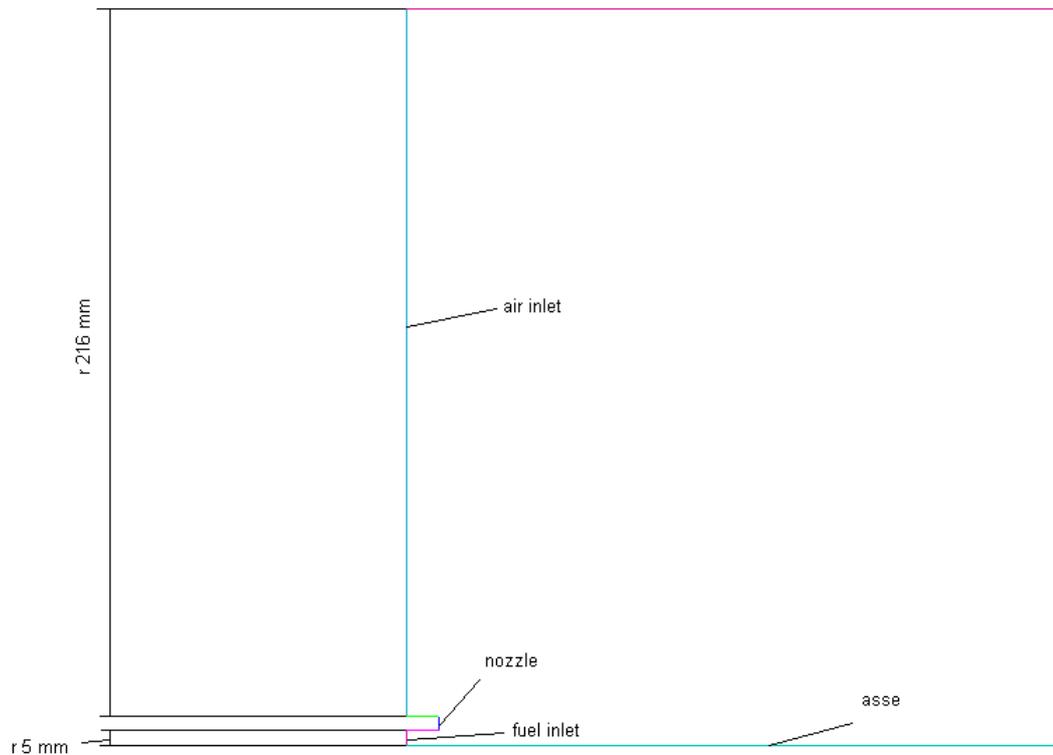


Figura 4.2-2

Formulazione solutore	Stazionario
Modello di turbolenza	Standard k-epsilon
Modello di combustione	Eddy Dissipation
Densità	Gas ideale incompressibile
Pressione operativa	101.325 Pascal
Parametri di ingresso combustibile	$V = 80 \text{ m/s}$ $T = 300 \text{ K}$ $\text{CH}_4 \text{ 100\%}$
Parametri di ingresso aria	$V = 0.5 \text{ m/s}$ $T = 300 \text{ K}$ $\text{O}_2 \text{ 23\%, N}_2 \text{ 77\% in massa}$
Temperatura parete esterna	300 K

Tabella 4.2-1

Le caratteristiche delle griglie utilizzate, tutte di tipo strutturato, sono riportate in Tabella 4.2-2.

	Nome	Nodi	Celle	Volume (3D mm ³ / 2D mm ²)	
				min	Max
2D	1.7 k	1.705	1.615	3.333	914
	16 k	16.120	15.821	0.0876	914
	29 k	28.948	28.573	0.145	296
	50 k	50.160	49.643	0.145	129
	90 k	91.560	90.743	0.145	54
	117 k	117.116	116.149	0.034	76
3D full	60k	60.908	58.662	0.5	54.770
3D periodic	10 k	9.935	8.075	0.058	11.007

Tabella 4.2-2

4.2.2 CONFRONTO TRA DIVERSI DOMINI COMPUTAZIONALI

Inizialmente è stato effettuato il confronto tra le formulazioni 2D assialsimmetrica, 3D e 3D periodica del solutore, considerando griglie computazionali strutturate dotate di un grado di infittimento confrontabile. Per la formulazione periodica è stato considerato un settore di 10°. Nelle figure seguenti sono riportate le immagini delle griglie utilizzate.

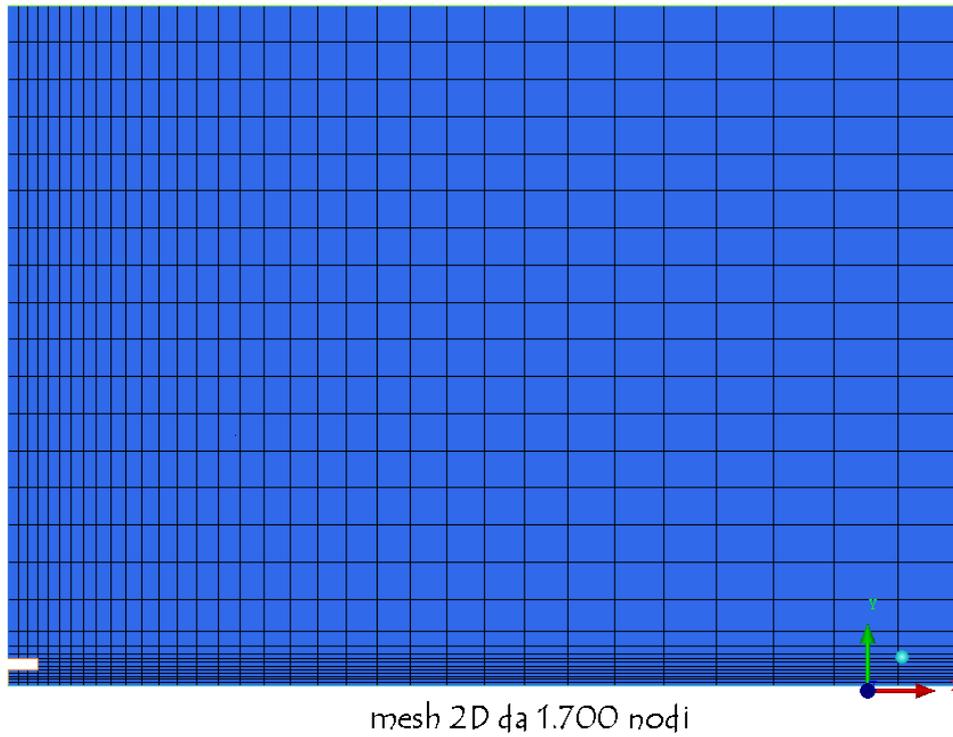
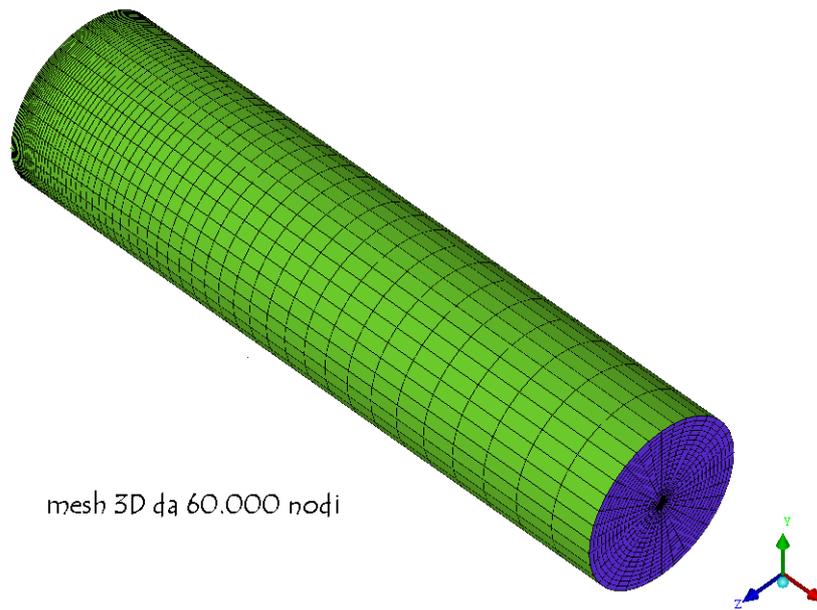
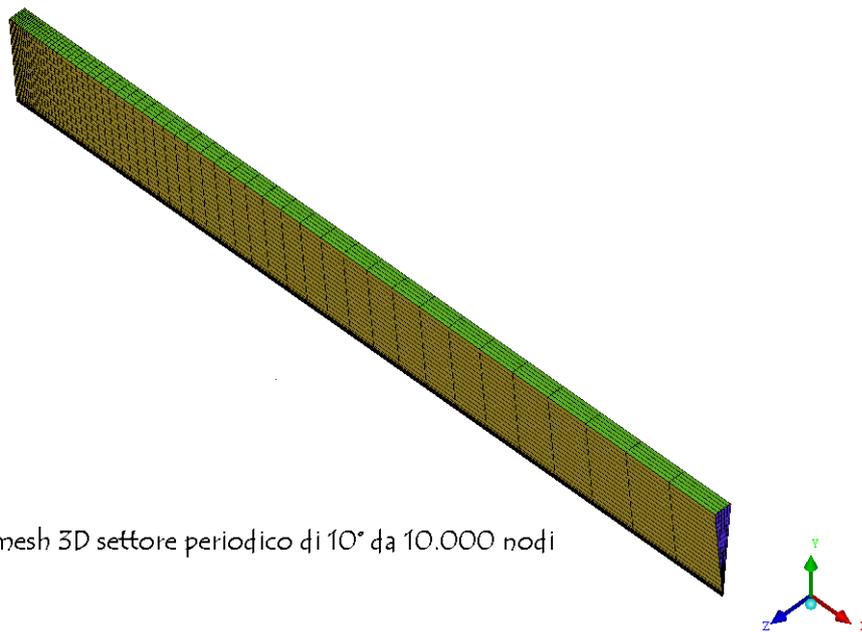


Figura 4.2-3 Dettaglio bruciatore mesh bidimensionale (1.7 k)



mesh 3D da 60.000 nodi

Figura 4.2-4 Mesh 3D (60 k)



mesh 3D settore periodico di 10° da 10.000 nodi

Figura 4.2-5 Mesh 3D settore periodico di 10° (10 k)

Le simulazioni sono state condotte considerando sia la versione singola precisione che doppia precisione del solutore. Nella Tabella 4.2-3 Valori minimi e massimi di alcune proprietà e Tabella 4.2-4 sono riportati i risultati ottenuti messi a confronto: rispettivamente sono riportati valori di picco nel dominio e valori medi in uscita di alcune grandezze di interesse.

I risultati mettono in evidenza una sostanziale convergenza a valori prossimi per quanto riguarda le proprietà sulla sezione di uscita della camera e i valori di picco nel dominio per le diverse formulazioni considerate. Per gli studi successivi si è scelto, in virtù di tali risultati, di utilizzare l'approssimazione bidimensionale assialsimmetrica del dominio fisico, la formulazione stazionaria doppia precisione del solutore.

Nelle figure che seguono le tabelle sono riportati i profili di alcune proprietà per i diversi domini (2D, 3D e 3D periodico) considerando la formulazione doppia precisione del solutore e il meccanismo di reazione a due step per l'ossidazione del metano.

Analisi sul tipo di solutore 2d, 2ddp, 3d, 3ddp e 3d/3ddp periodico

Griglia 2d: 1.700 nodi strutturata

Griglia 3d full: 60.000 nodi strutturata

Griglia 3d periodica 10°: 10.000 nodi strutturata

Formulazione Stazionaria Modello di combustione Eddy Dissipation		Singola precisione				Doppia precisione					
		Meccanismo ad 1 reazione			Meccanismo ad 1 reazione			Meccanismo a 2 reazioni			
		2d	3d full	3d periodic	2d	3d full	3d periodic	2d	3d full	3d periodic	
		2d	3d full	3d periodic	2d	3d full	3d periodic	2d	3d full	3d periodic	
Temperatura (statica)	K	max	2302	2300	2315	2302	2301	2309	2302	2301	2300
		min	-23	-24	-52	-23	-24	-52	-21	-22	-47
Pressione (statica)	Pa	max	149	153	220	148	154	221	132	143	185
		min	0.146	0.146	0.145	0.146	0.146	0,146	0.146	0.146	0.146
Densità	kg/m ³	max	1.172	1.172	1.172	1.172	1.172	1,172	1.172	1.172	1.172
		min	82.47	82.56	83.77	82.47	82.56	83,78	82.14	82.35	83.14
Velocità	m/s	max	0.00195	0.00194	0.00195	0.00195	0.00194	0,00195	0.00194	0.00194	0.00194
		min	207.47	207.61	218.77	207.47	207.61	218,77	198.56	201	206
Energia Cinetica Turbolenta (k)	m ² /s ²	max	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3,6	3.6	3.6	3.6
		min	1176	1176	1208	1176	1176	1208	1151	1157	1171
Turbulent reaction rate 1	kgmol/m ³ -s	max	2.243	2.383	2.117	2.243	2.383	2,117	2.0287	2.035	2.064
Turbulent reaction rate 2		max	-	-	-	-	-	-	1.5173	1.527	1.555

Tabella 4.2-3 Valori minimi e massimi di alcune proprietà

Analisi sul tipo di solutore 2d, 2ddp, 3d, 3ddp e 3d/3ddp periodico

Griglia 2d: 1.700 nodi strutturata
 Griglia 3d full: 60.000 nodi strutturata
 Griglia 3d periodica 10°: 10.000 nodi strutturata

Formulazione Stazionaria Modello di combustione Eddy Dissipation	Singola precisione				Doppia precisione					
	Meccanismo ad 1 reazione				Meccanismo ad 1 reazione			Meccanismo a 2 reazioni		
	2d	3d full	3d periodica		2d	3d full	3d periodica	2d	3d full	3d periodica
Portata kg/s	0.0971	0.0966	0.0971		0.0971	0.0966	0.0971	0.0971	0.0966	0.0971
Temperatura (statica) K	1769	1769	1775		1769	1769	1770	1765	1766	1766
Densità kg/m ³	0.194	0.194	0.194		0.194	0.194	0.194	0.194	0.194	0.194
Velocità m/s	3.195	3.193	3.201		3.195	3.193	3.193	3.189	3.187	3.189
CH ₄ ppm dry	756	718	970		756	715	844	644	603	601
CO ppm dry	--	--	--		--	--	--	993	956	953

Tabella 4.2-4 Valori medi di alcune proprietà in uscita

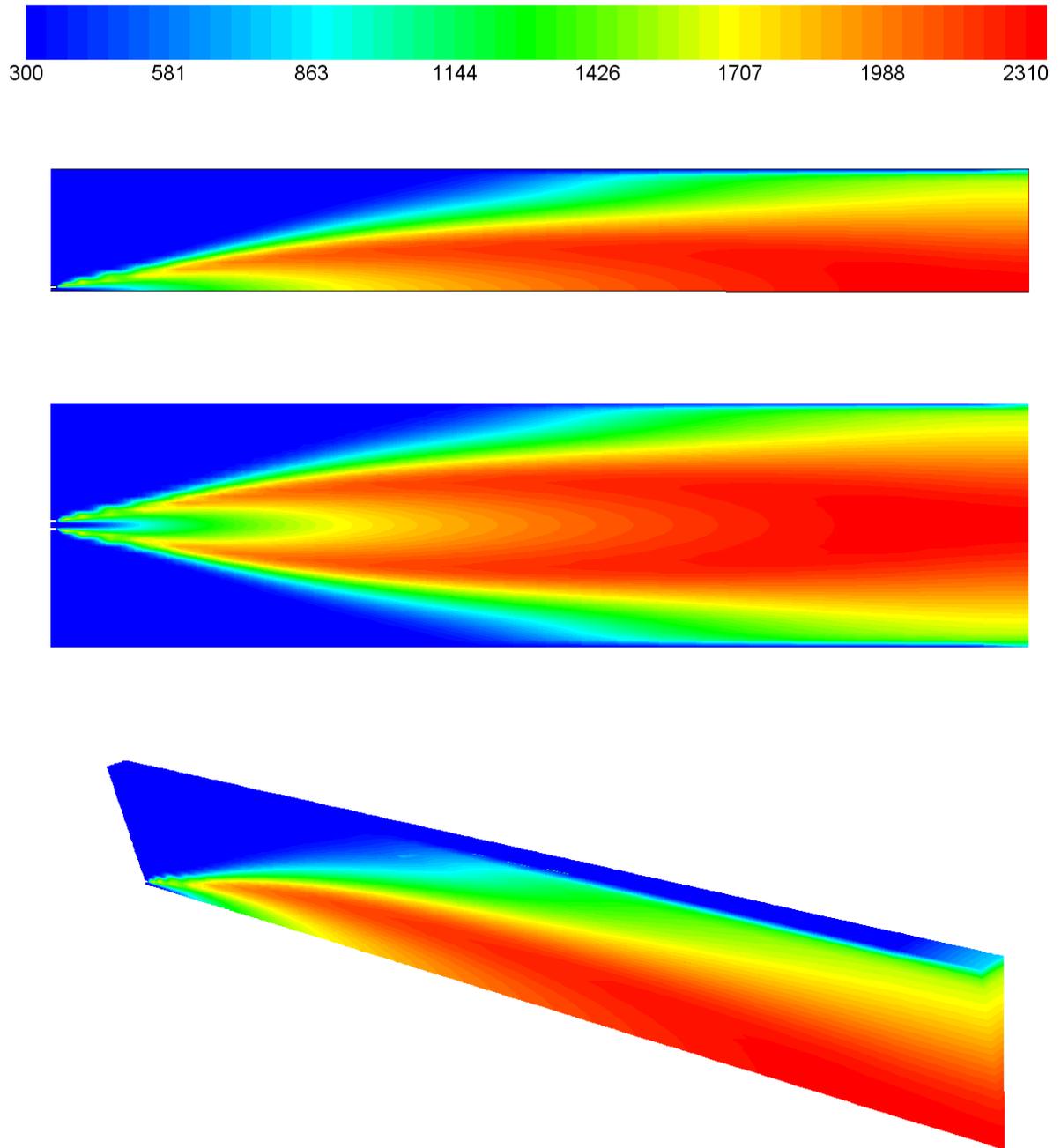


Figura 4.2-6 Profili di Temperatura (K) su Mesh 2D, 3D e 3D Periodica

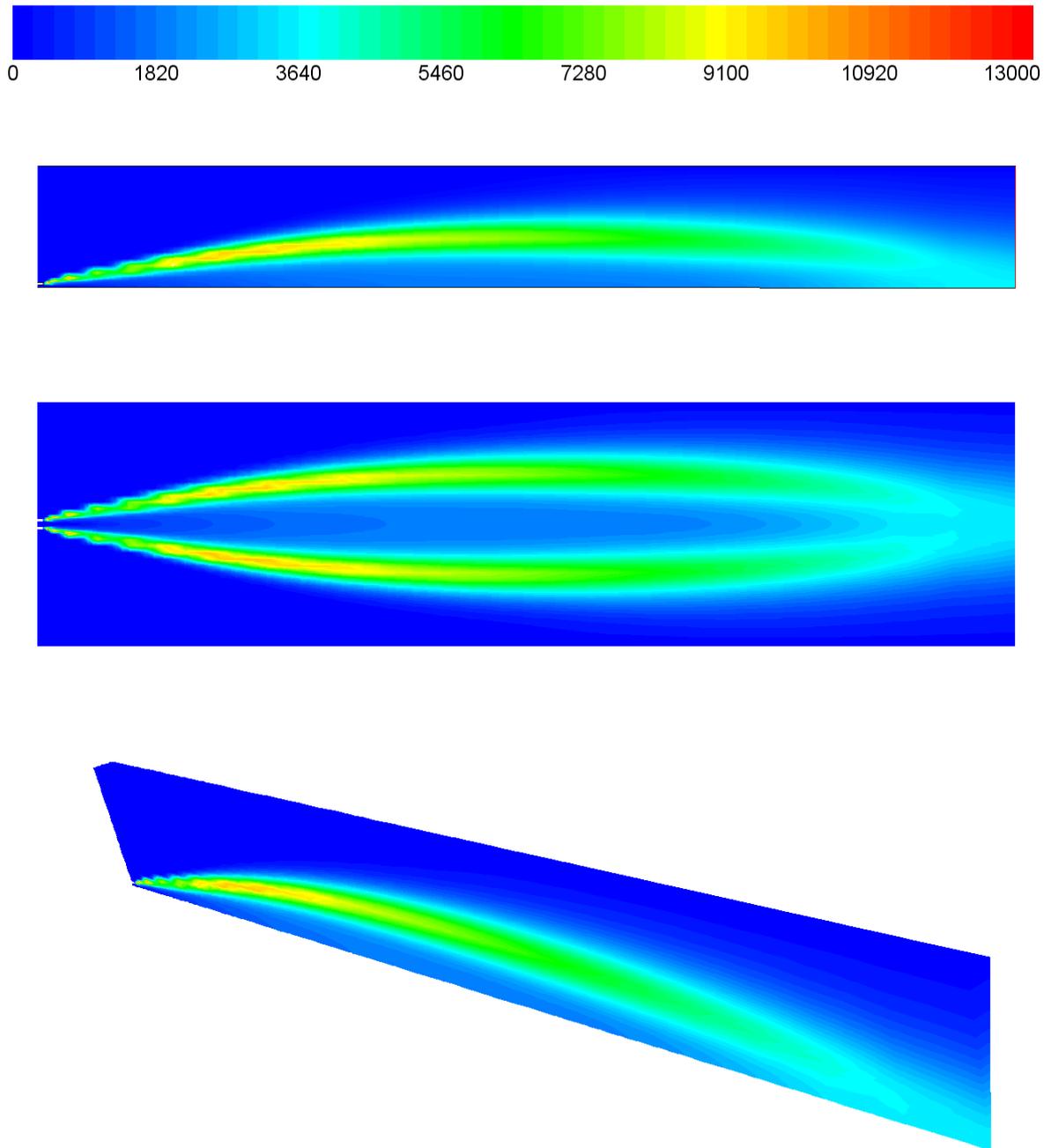


Figura 4.2-7 Profili di CO (ppm dry) su Mesh 2D, 3D e 3D Periodica

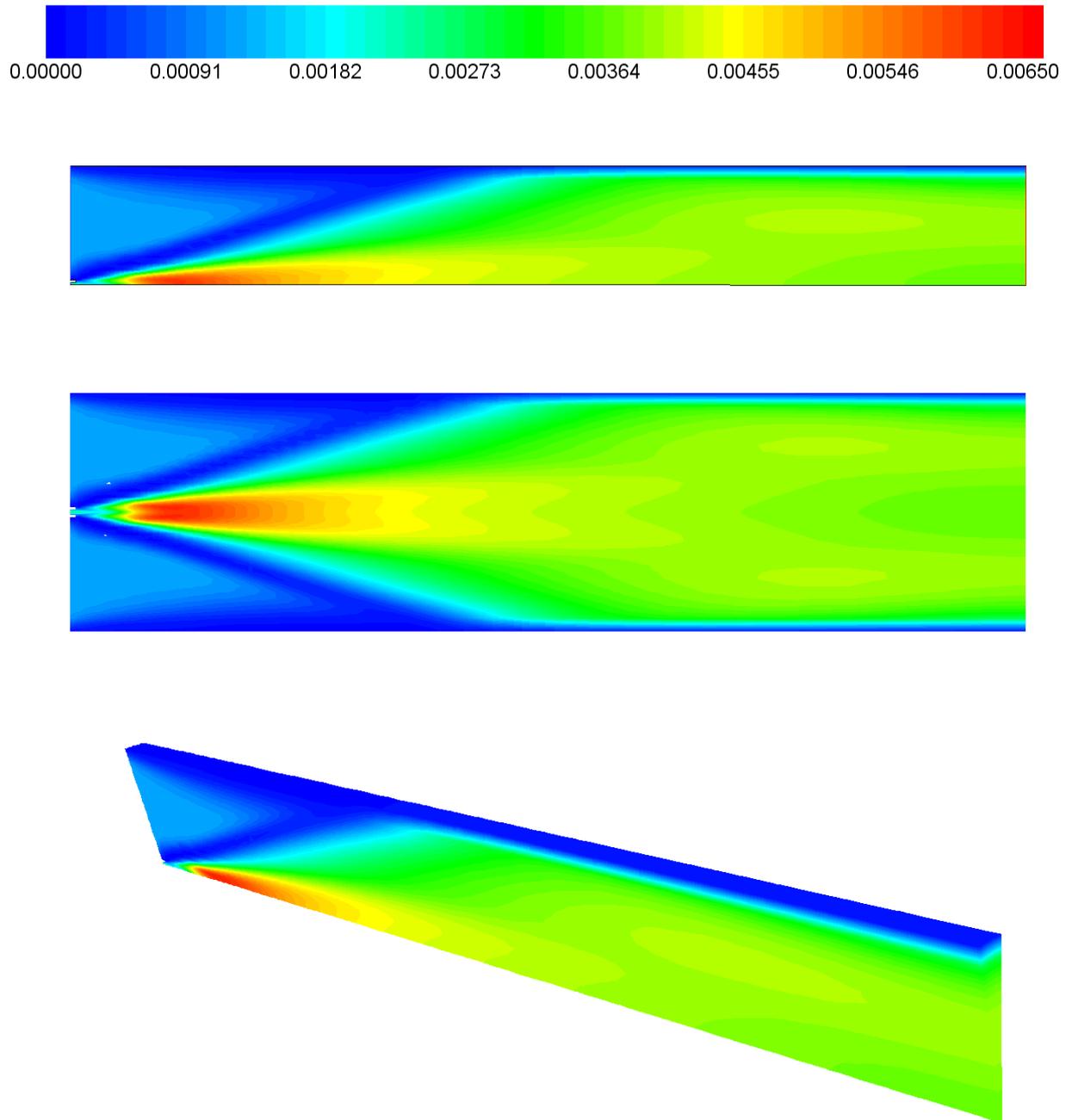


Figura 4.2-8 Profili di "Turbulent Viscosity" (kg/m-s) su Mesh 2D, 3D e 3D Periodica

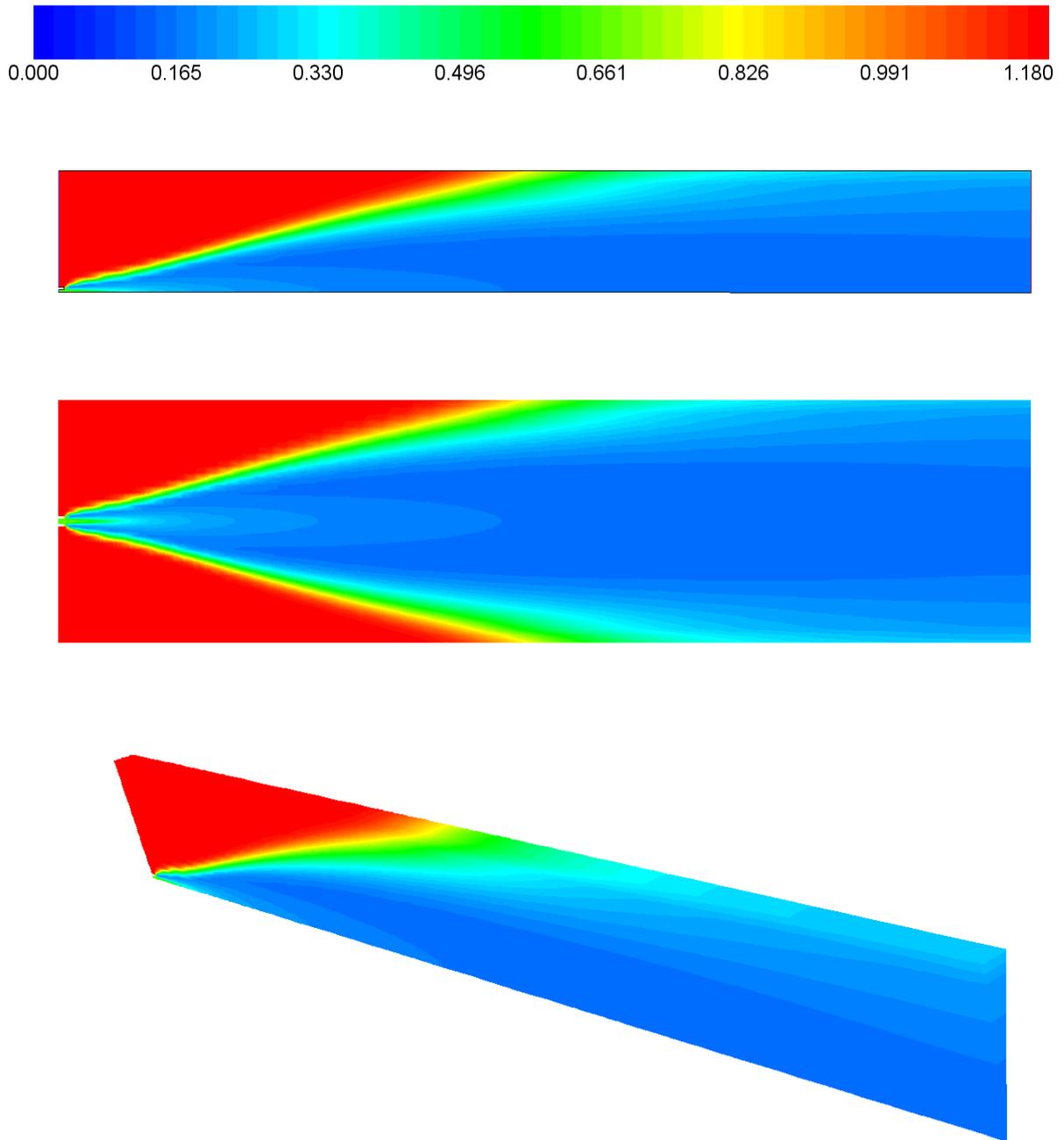


Figura 4.2-9 Profili di Densità (kg/m^3) su Mesh 2D, 3D e 3D Periodica

4.2.3 ANALISI DI SENSIBILITÀ ALLA GRIGLIA

L'analisi di sensibilità alla griglia è stata condotta sul dominio bidimensionale assiaialsimmetrico, considerando sia risoluzioni maggiori che distribuzioni differenziate. Nelle figure che seguono sono rappresentate le griglie utilizzate (nel dettaglio del bruciatore), mentre in Tabella 4.2-5 Valori minimi e massimi di alcune proprietà e in Tabella 4.2-6 Valori medi di alcune proprietà in uscita sono riportati i valori rispettivamente di picco e medi sulla superficie di uscita di alcune proprietà di interesse. Da una prima analisi, si può affermare che la risoluzione della griglia computazionale influisce significativamente sia sui valori di picco di temperatura e di velocità delle reazioni sia sui valori medi di temperatura e di specie incombuste all'uscita del combustore. In particolare i picchi di temperatura e di velocità di reazione e il valore medio della temperatura di uscita aumentano all'aumentare della risoluzione spaziale, mentre la quantità di incombusti diminuisce. Oltre all'aumento del numero di nodi della griglia, si osserva che anche la diversa distribuzione dell'infittimento influisce sui risultati. Infatti, *mesh* con distribuzioni simili (quali la 16k e la 117k o le 29k, 50 e 90k) presentano risultati confrontabili.

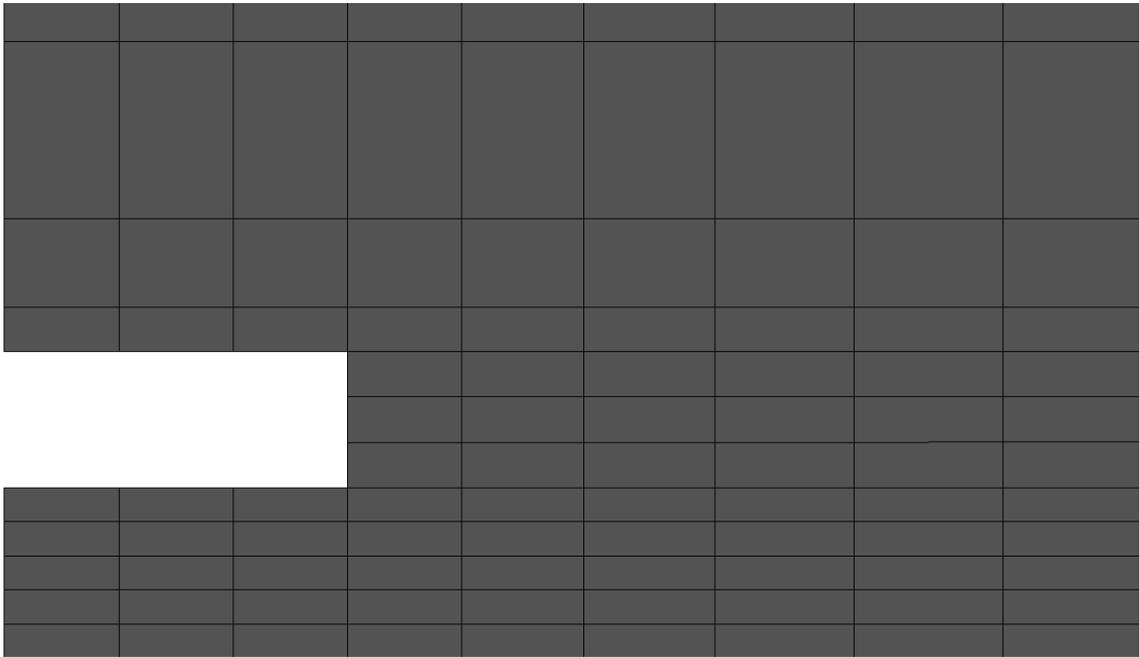


Figura 4.2-10 Mesh 1.7k

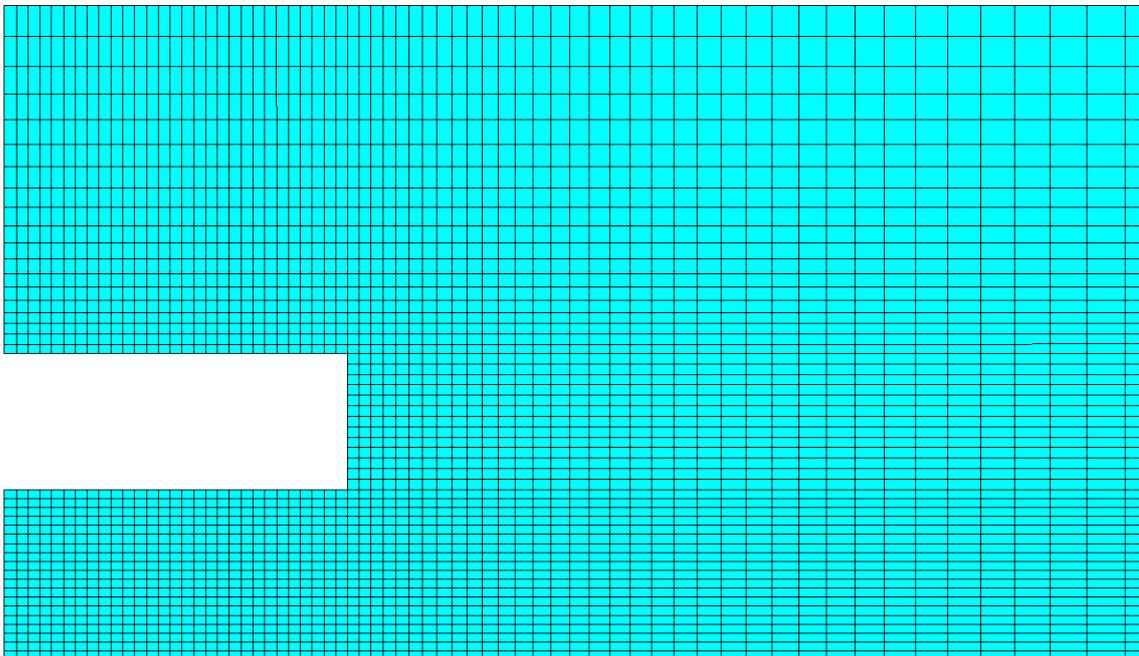


Figura 4.2-11 Mesh 16k

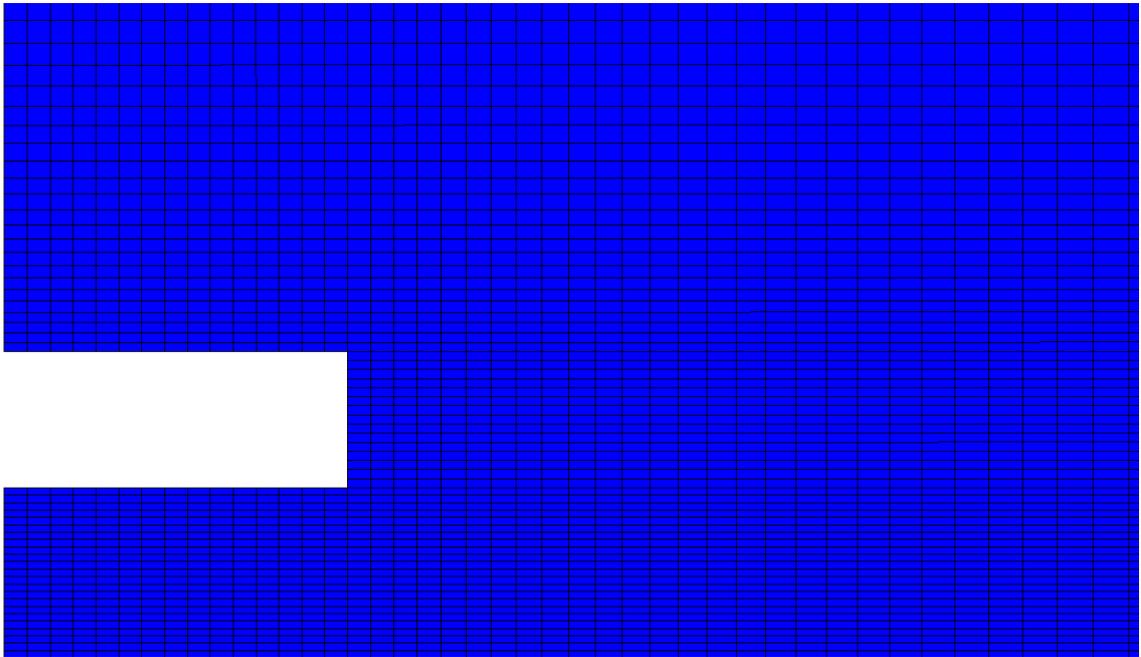


Figura 4.2-12 Mesh 29k

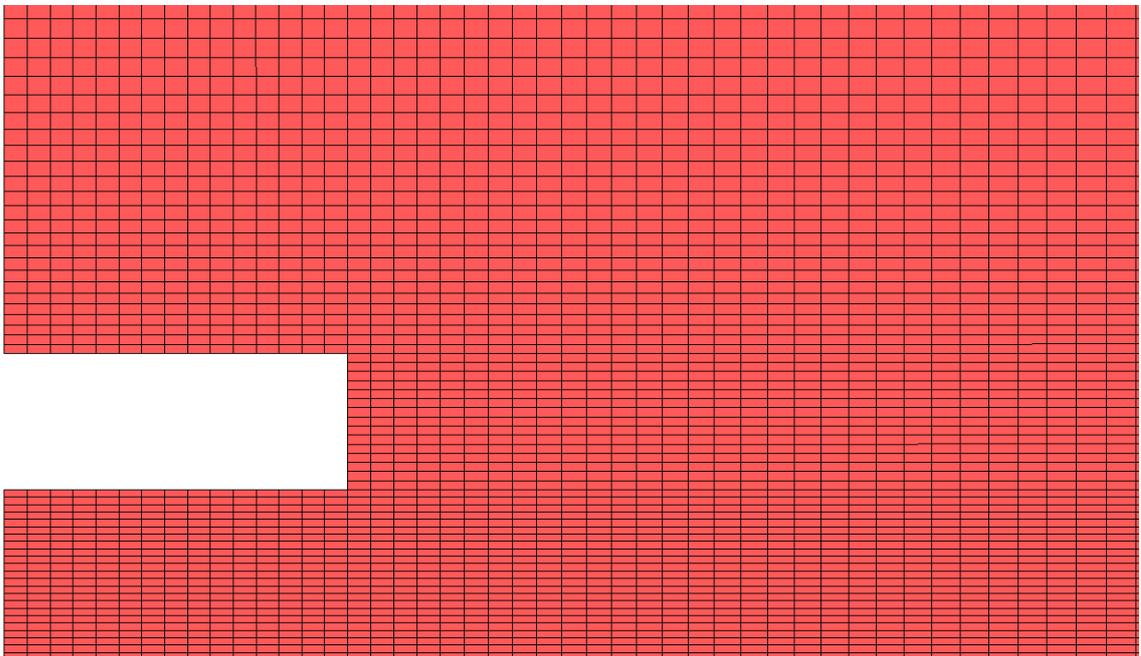


Figura 4.2-13 Mesh 50k

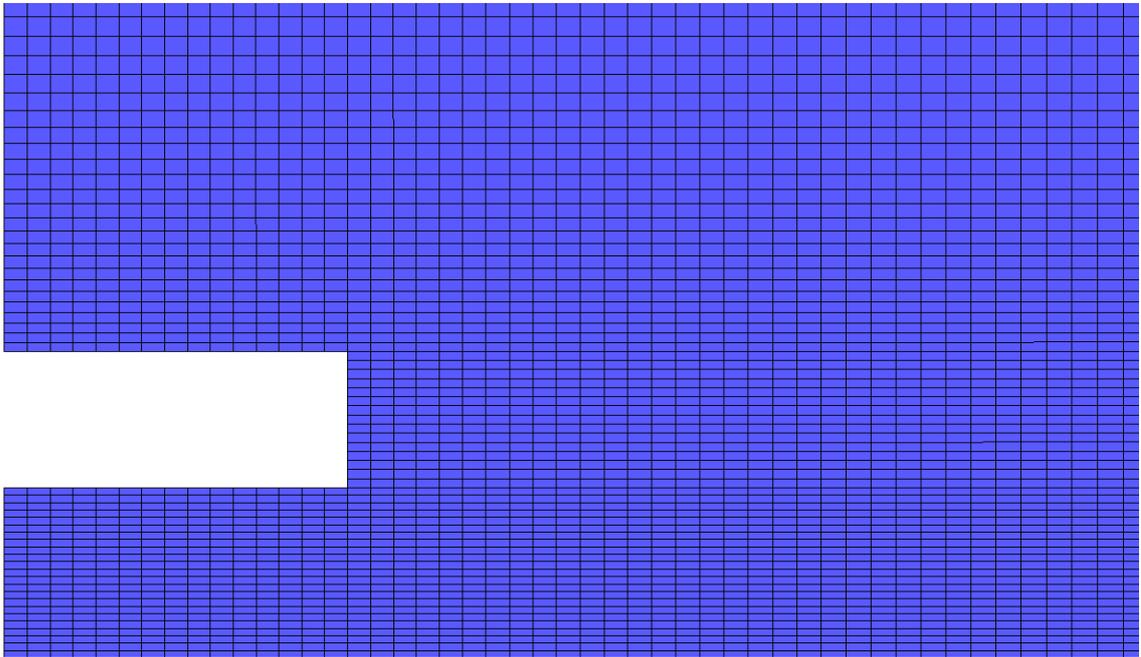


Figura 4.2-14 Mesh 90k

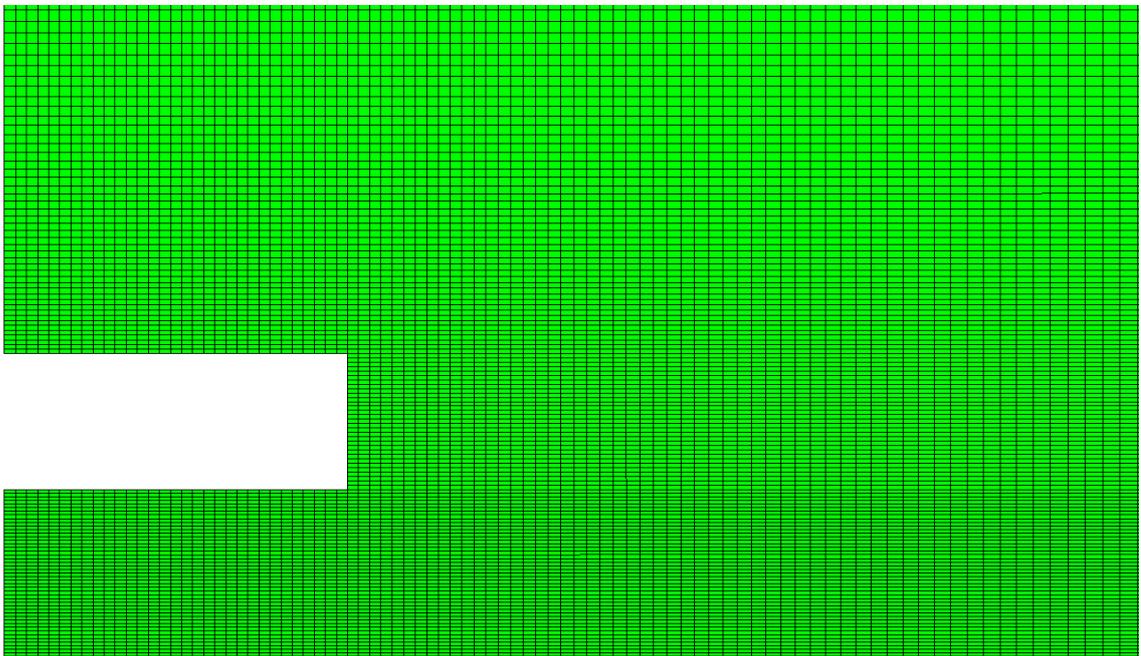


Figura 4.2-15 Mesh 117k

Analisi di sensibilità alla griglia sul dominio bidimensionale assialsimmetrico

Formulazione Stazionaria 2ddp Modello di combustione Eddy Dissipation Meccanismo a 2 reazioni			Griglia					
			1.7 k	16 k	29 k	50 k	90 k	117 k
Temperatura (statica)	K	max	2302	2309	2311	2313	2313	2313
		min	-21	-30	-27	-27	-27	-28
Pressione (statica)	Pa	max	132	162	166	166	166	193
		min	0.146	0.145	0.145	0.145	0.145	0.145
Densità	kg/m ³	max	1.172	1.172	1.172	1.172	1.172	1.172
		min	82.14	82.12	82.29	82.29	82.29	82.36
Velocità	m/s	max	0.00194	0.00205	0.00177	0.0182	0.00181	0.00211
		min	198.56	225.38	226.84	227.19	227.43	236.06
Energia Cinetica Turbolenta (k)	m ² /s ²	max	3.6	3.7	3.4	3.5	3.5	3.75
		min	1151	1226	1230	1231	1231	1254
Intensità di Turbolenza	%	max	2.0287	10.92	8.63	8.66	8.67	14.73
Turbulent reaction rate 1	kgmol/m ³ -s	max	1.5173	8.40	6.48	6.50	6.51	11.13
Turbulent reaction rate 2		max						

Tabella 4.2-5 Valori minimi e massimi di alcune proprietà

Analisi di sensibilità alla griglia sul dominio bidimensionale assialsimmetrico

Formulazione Stazionaria 2ddp Modello di combustione Eddy Dissipation Meccanismo a 2 reazioni		Griglia					
		1.7 k	16 k	29 k	50 k	90 k	117 k
Portata	kg/s	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971
Temperatura (statica)	K	1765	1772	1784	1785	1787	1775
Densità	kg/m ³	0.194	0.192	0.191	0.191	0.190	0.194
Velocità	m/s	3.189	3.17	3.20	3.21	3.20	3.20
CH ₄	ppm dry	644	315	195	153	132	143
CO	ppm dry	993	702	532	458	419	435

Tabella 4.2-6 Valori medi di alcune proprietà in uscita

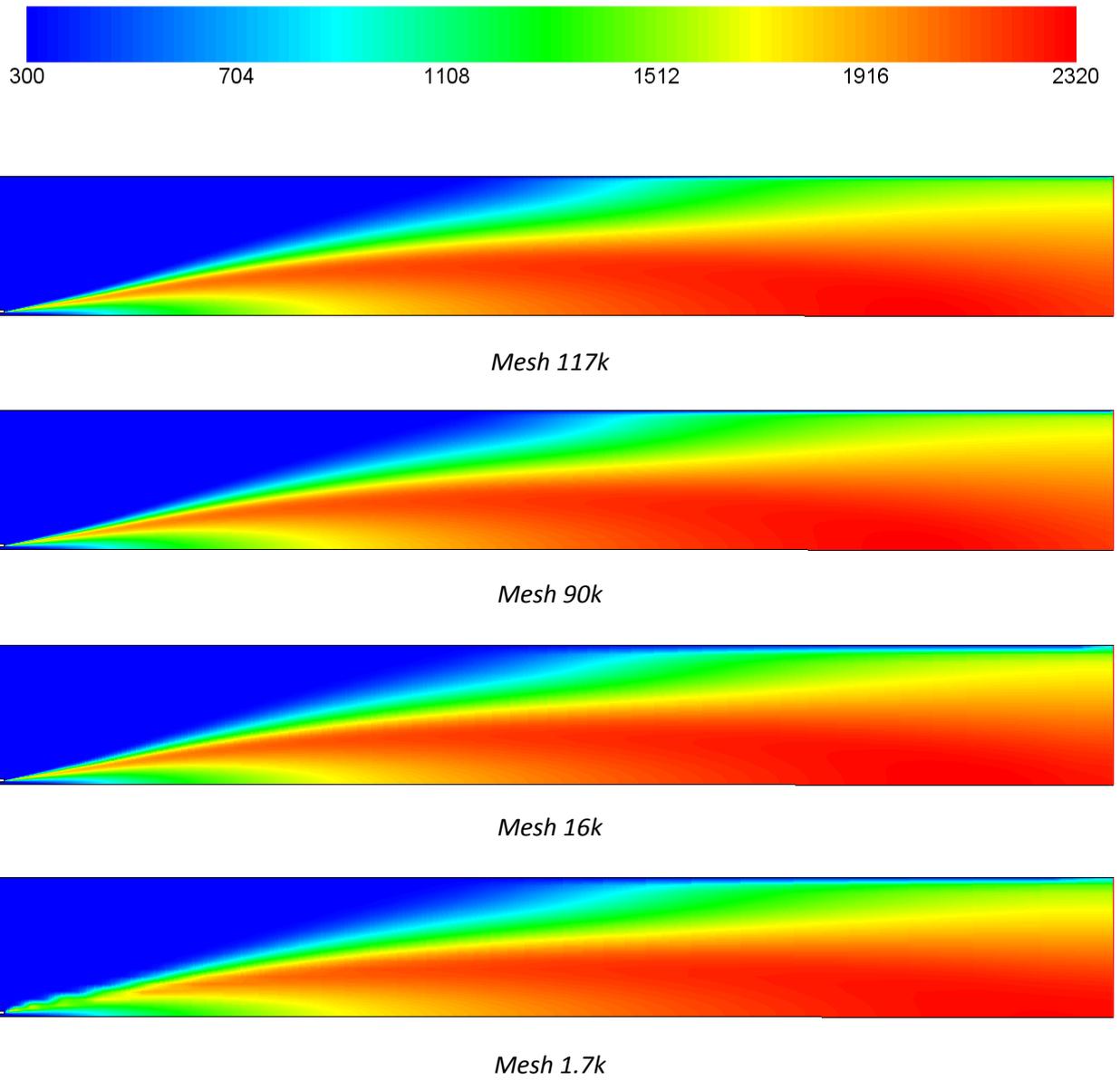


Figura 4.2-16 Profili di Temperatura (K)

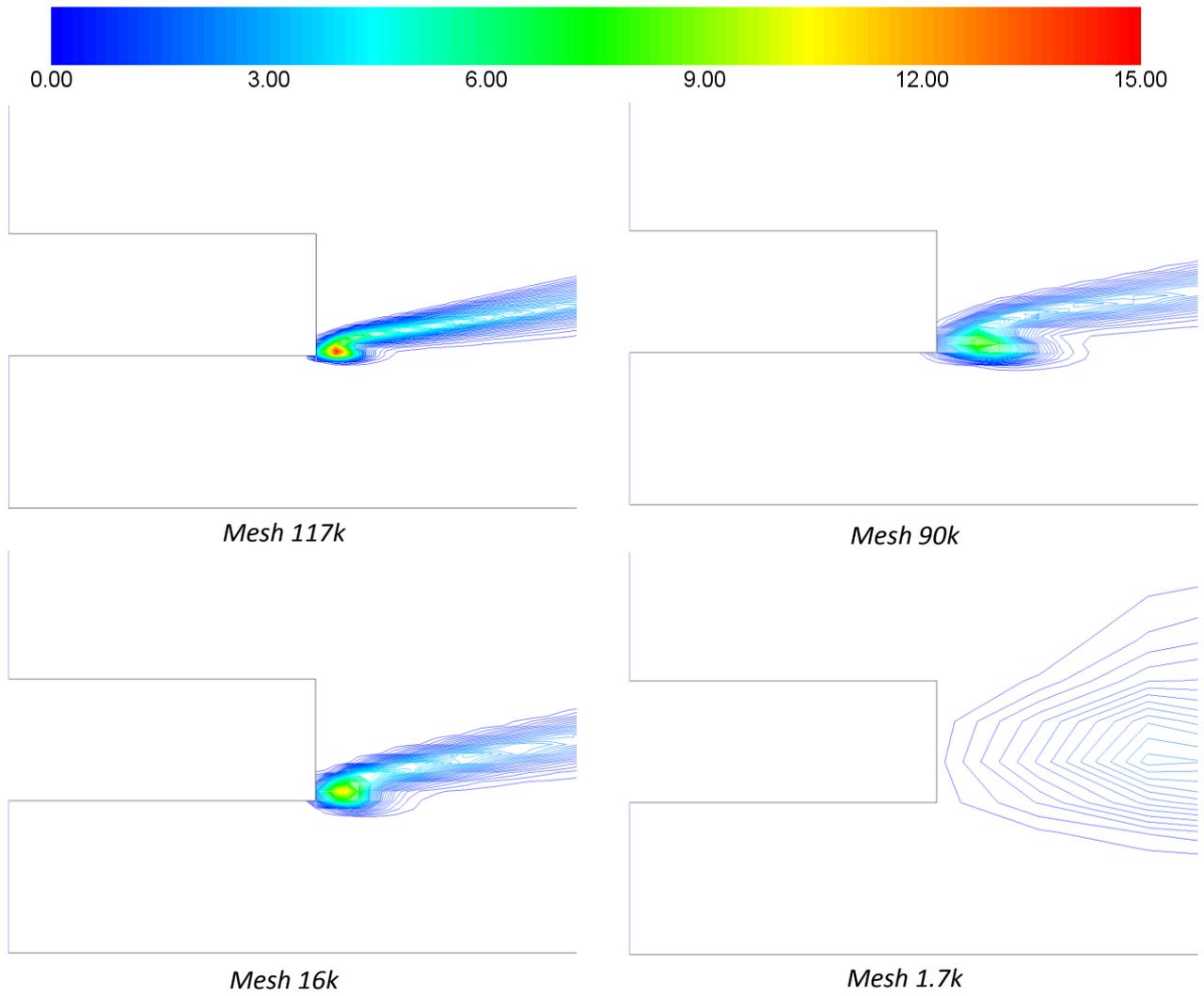


Figura 4.2-17 Andamento della velocità di reazione 1 ($\text{kgmole}/\text{m}^3\text{-s}$)

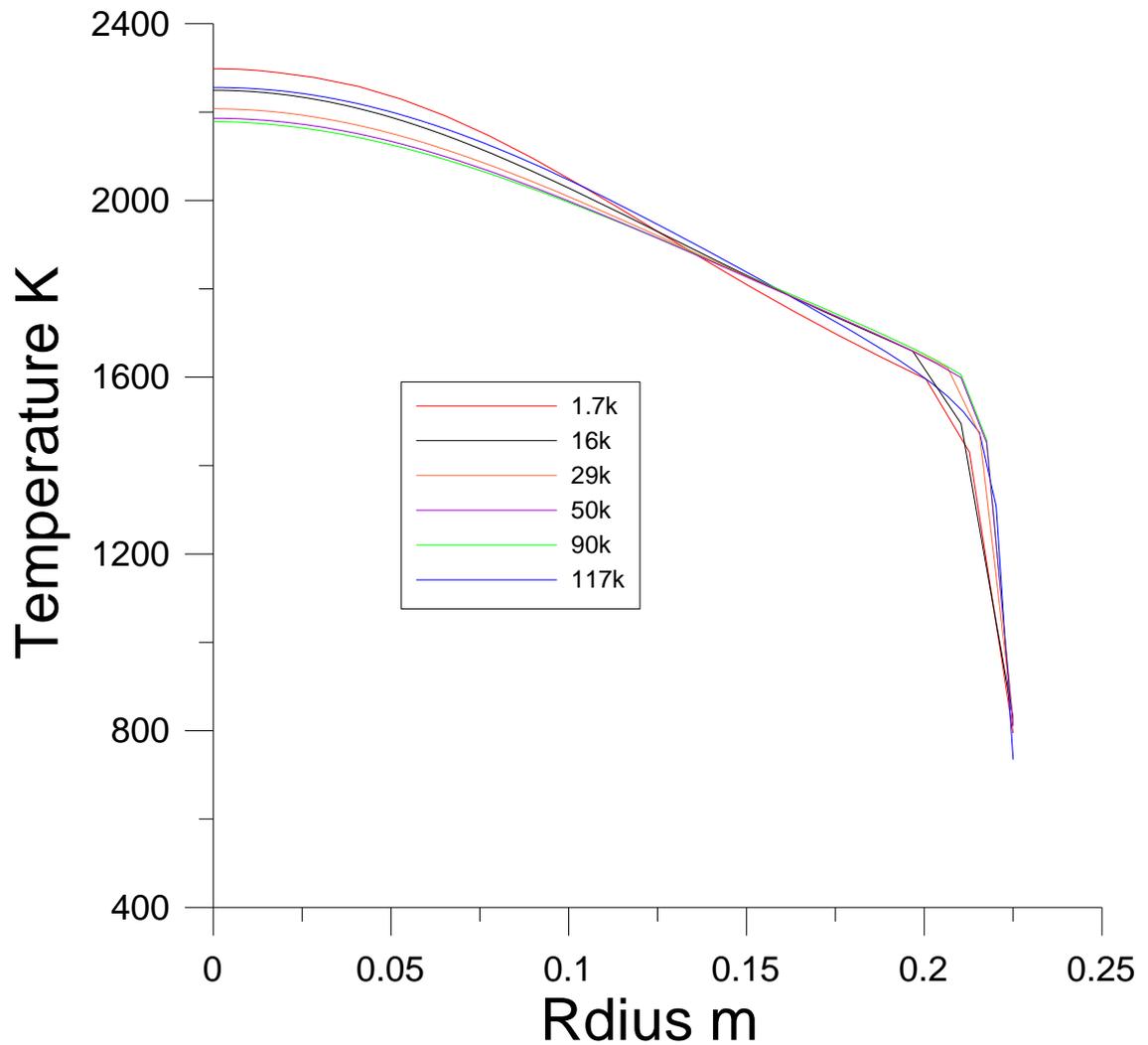


Figura 4.2-18 Andamento della temperatura uscita combustore

Per i calcoli sul confronto tra modelli di turbolenza e combustione si è scelto di adoperare la griglia 16k, rappresentando questa un buon compromesso tra accuratezza e costi computazionali.

4.2.4 CONFRONTO TRA DIVERSI MODELLI DI TURBOLENZA

Nelle tabelle che seguono sono riportati i risultati del confronto tra i diversi modelli di turbolenza utilizzati. Avendo scelto l'approssimazione bidimensionale assialsimmetrica, si sono potuti adoperare esclusivamente modelli di tipo *RANS*. In particolare sono stati messi a confronto i modelli *k-epsilon* nelle sue varianti, *k-omega* e variante *SST* e il *Reynolds Stress Model*.

I risultati ottenuti mostrano una sostanziale congruenza ad eccezione del modello *k-epsilon RNG*, il quale presenta il valore di picco della temperatura più basso, emissioni di incombusti più basse e una temperatura media del dominio più elevata rispetto agli altri modelli. La più bassa temperatura di picco potrebbe discendere dalla maggiore potenza termica dispersa attraverso le pareti (come si può osservare in Tabella 4.2-9), mentre il valore più basso delle emissioni di incombusti e la temperatura media nel dominio più elevata, uniti ai picchi più elevati delle velocità di reazione, stanno ad indicare che il modello *RNG*, accoppiato all'*Eddy Dissipation*, tende a sovrastimare la conversione del combustibile.

In Figura 4.2-19 si riportano gli andamenti della temperatura per i diversi modelli adoperati, mentre in Figura 4.2-20 sono riportati gli andamenti di alcune grandezze per il *Reynolds Stress Model*.

Confronto tra i modelli di turbolenza disponibili nel solutore FLUENT

Formulazione Stazionaria 2ddp second order Modello di combustione Eddy Dissipation Meccanismo a 2 reazioni Griglia 16 k			k – ε			k – ω		RSM
			Standard	RNG	Realizable	Standard	SST	
Temperatura (statica)	K	max	2319	2217	2313	2319	2310	2322
		min	-13	-11	-7.63	-14	-6.44	-31
Pressione (statica)	Pa	max	162	158	143	177	163	130
		min	0.145	0.151	0.145	0.144	0.145	0.145
Densità	kg/m ³	max	1.172	1.172	1.172	1.172	1.172	1.172
		min	82.16	82.11	81.79	82.39	82.05	81.83
Energia Cinetica Turbolenta (k)	m ² /s ²	max	0.00207	0.00197	0.00089	9.976e ⁻⁶	8.777 e ⁻⁶	0.00195
		min	259	232	233	199	232	223
Intensità di Turbolenza	%	max	3.7	3.6	2.4	0.258	0.24	3.69
		min	1313	1244	1246	1135	1244	1216
Turbulent reaction rate 1	kgmol/m ³ -s	max	11.23	12.08	9.96	10.1	10.3	8.87
Turbulent reaction rate 2		max	8.39	9.46	8.28	7.89	7.86	7.03

Tabella 4.2-7 Valori minimi e massimi di alcune proprietà

Confronto tra modelli di turbolenza disponibili nel solutore FLUENT

Formulazione Stazionaria 2ddp second order Modello di combustione Eddy Dissipation Meccanismo a 2 reazioni Griglia 16 k		k – ε			k – ω		RSM
		Standard	RNG	Realizable	Standard	SST	
Portata	kg/s	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971
Temperatura (statica)	K	1778	1737	1751	1728	1785	1819
Densità	kg/m ³	0.191	0.193	0.197	0.203	0.190	0.187
Velocità	m/s	3.18	3.06	3.2	3.22	3.18	3.15
CH ₄	ppm dry	179	23	1352	1567	114	345
CO	ppm dry	516	118	1366	1062	390	810

Tabella 4.2-8 Valori medi di alcune proprietà in uscita

Confronto tra modelli di turbolenza disponibili nel solutore FLUENT

Formulazione Stazionaria 2ddp second order Modello di combustione Eddy Dissipation Meccanismo a 2 reazioni Griglia 16 k		k – ε			k – ω		RSM
		Standard	RNG	Realizable	Standard	SST	
Potenza Termica Dispersa	kw	13.159	22.802	7.831	7.134	13.254	11.139
Rapporto Potenza Termica Dispersa su Flusso Energia Primaria in Ingresso	%	8.95	15.51	5.33	4.85	9.02	7.58
Temperatura Media nel Volume	K	1172	1291	1038	1086	1172	1178
Velocità di Reazione 1 Media nel Volume	kgmole/(m ³ -s)	0.0008896	0.0008913	0.0008756	0.0008692	0.0008903	0.0008904

Tabella 4.2-9

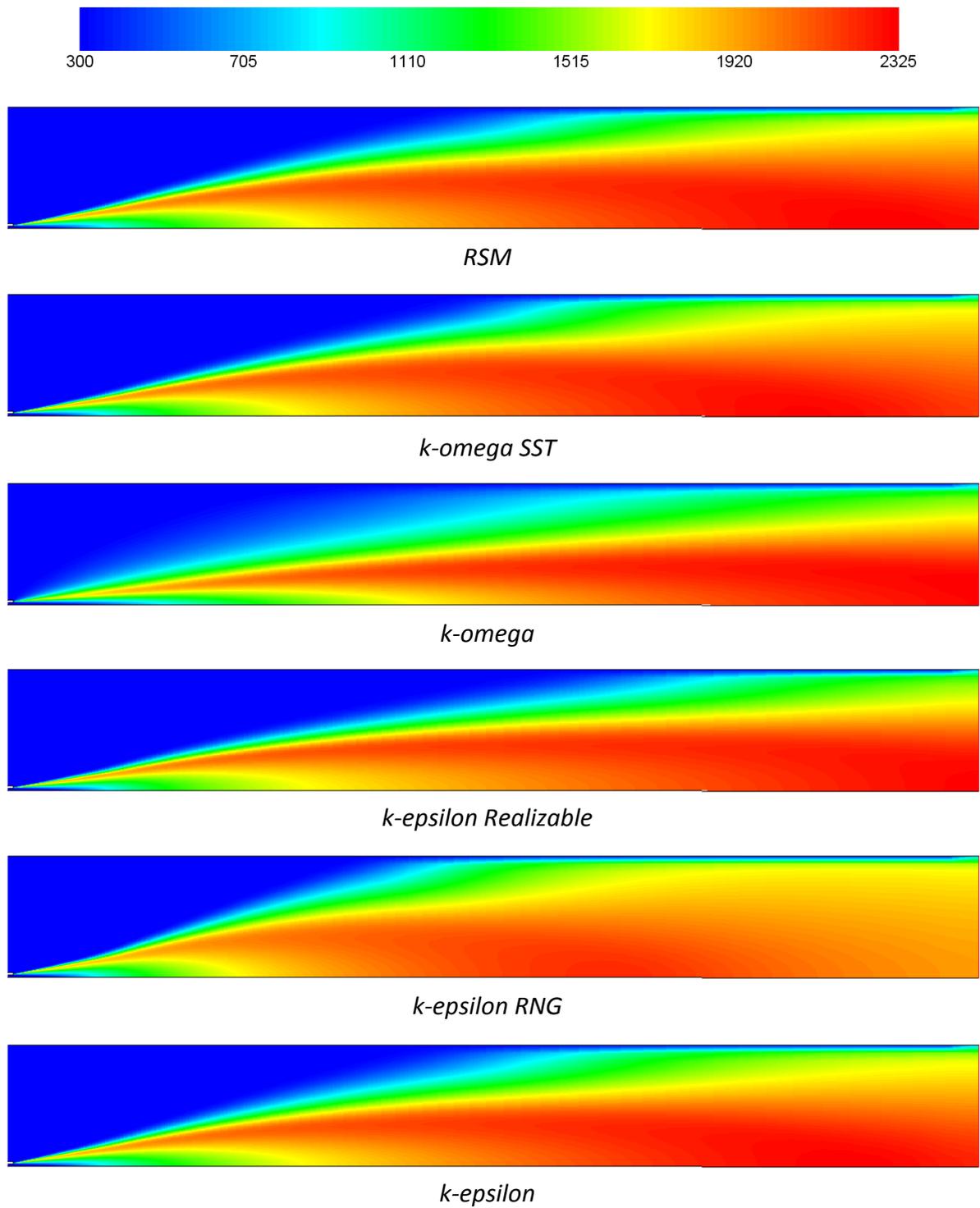


Figura 4.2-19 Andamenti di Temperatura (K)

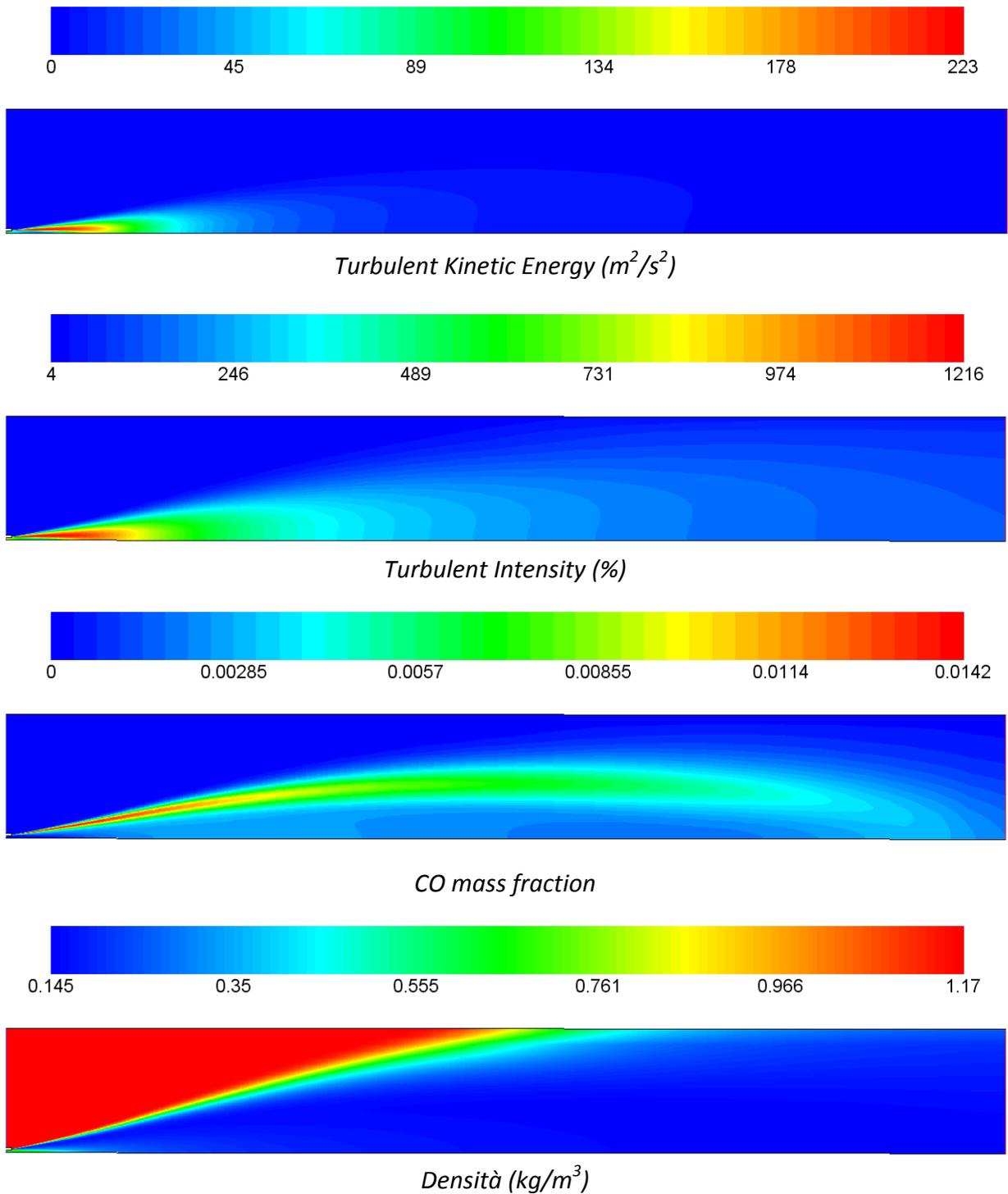


Figura 4.2-20

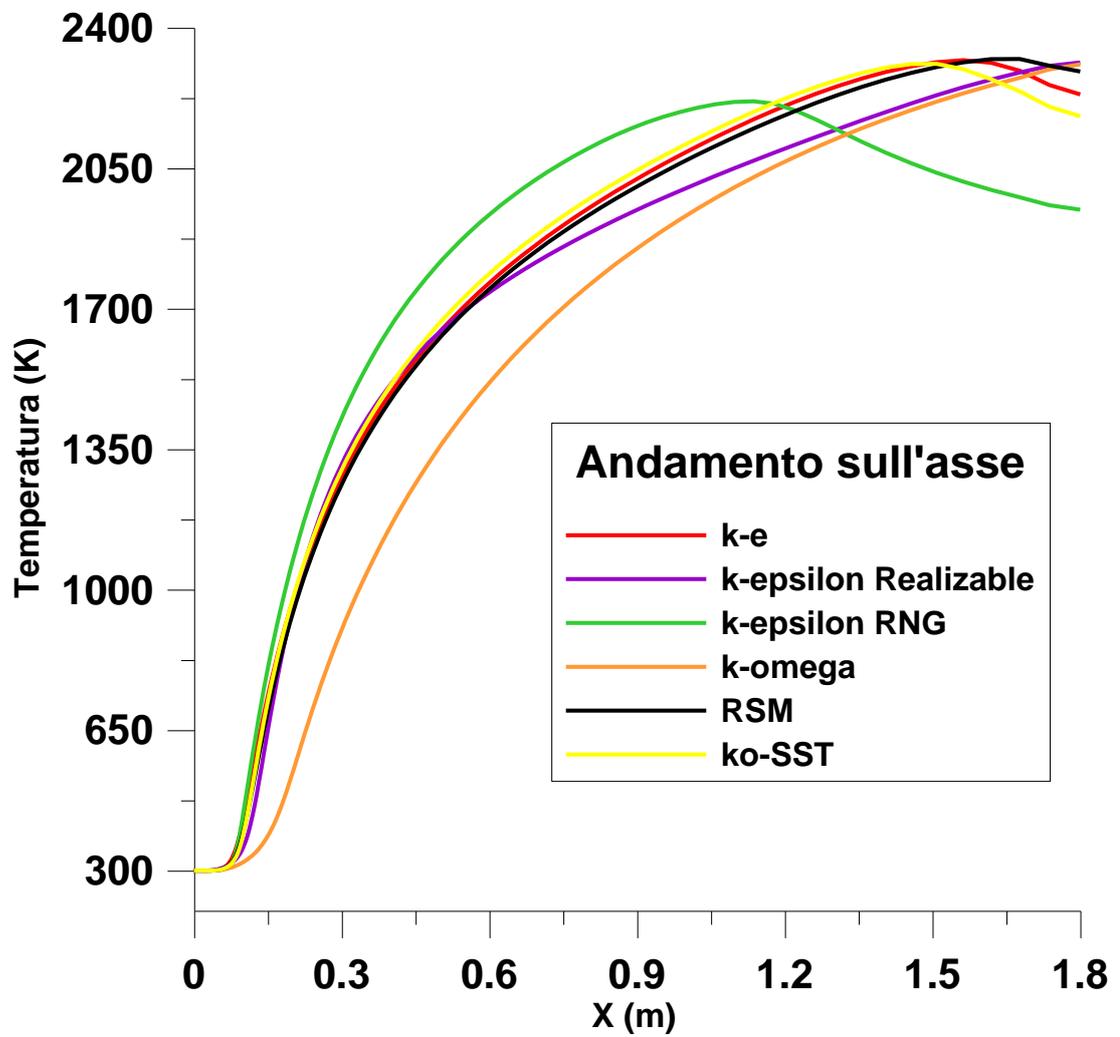


Figura 4.2-21

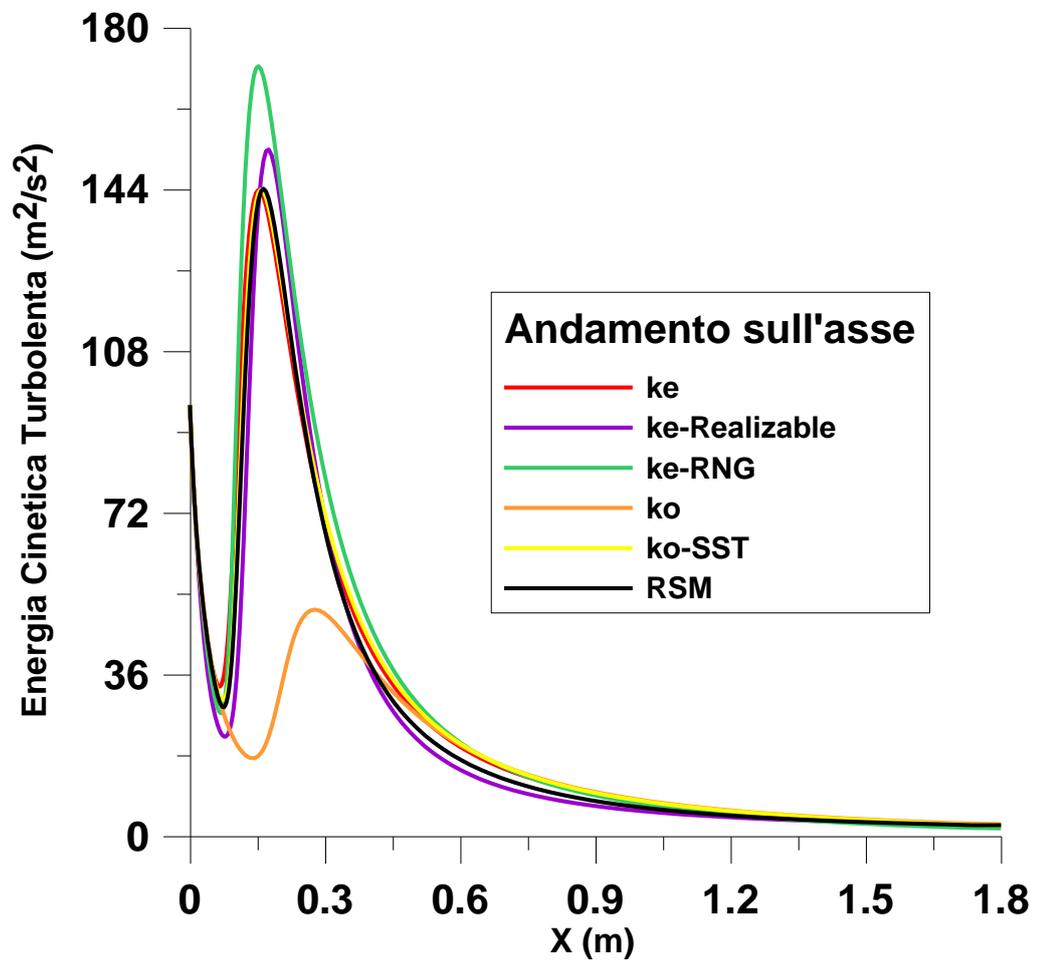


Figura 4.2-22

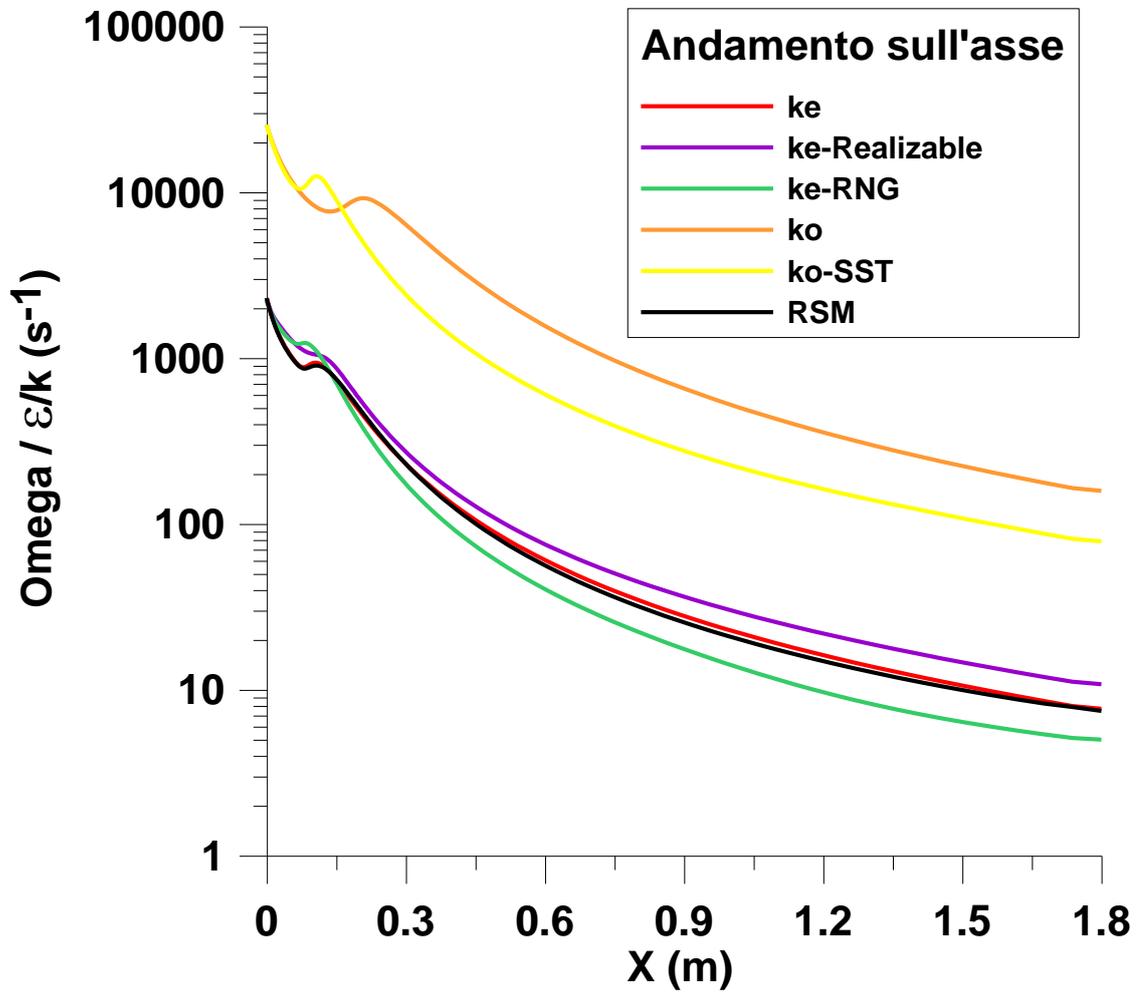


Figura 4.2-23

4.2.5 CONFRONTO TRA DIVERSI MODELLI DI COMBUSTIONE

Per il confronto tra i diversi modelli di combustione a disposizione si è scelto di adoperare la griglia 16k e come modello di turbolenza l'*RSM*. Per la generazione delle *flamelet*, adiabatiche e non adiabatiche, è stato considerato lo schema cinetico GRI-mech 3.0 [14].

I modelli basati sulla frazione di miscelamento conducono a valori di temperatura di picco notevolmente inferiori rispetto al modello *Eddy Dissipation* e contestualmente a valori sensibilmente differenti di incombusti. Nel caso delle *flamelet*, in particolare, le ppm di CH₄ risultano sottostimate mentre quelle di CO sovrastimate rispetto ai casi *ED*.

Confronto tra modelli di combustione disponibili nel solutore FLUENT

Formulazione Instazionaria 2ddp Modello di Turbolenza RSM Griglia 16 k			Eddy Dissipation		Non premix Equilibrium		Steady Flamelet	
			One Step	Two Step	Adiabatic	Non Ad.	Adiabatic	Non Ad.
Temperatura (statica)	K	max	2317	2322	2125	2122	2098	2096
		min	-31	-31	-31	-32	-34	-34
Pressione (statica)	Pa	max	135	130	130	144	133	148
		min	0.145	0.145	0.156	0.157	0.158	0.158
Densità	kg/m ³	max	1.172	1.172	1.172	1.178	1.172	1.178
		min	81.91	81.83	81.83	82.09	81.88	82.14
Velocità	m/s	max	0.00195	0.00195	0.00196	0.00196	0.00195	0.00195
		min	223	223	220	221	220	221
Energia Cinetica Turbolenta (k)	m ² /s ²	max	3.7	3.69	3.7	3.7	3.7	3.7
		min	1218	1216	1209	1211	1208	1211
Intensità di Turbolenza	%	max	10.90	8.87	--	--	--	--
		min	--	7.03	--	--	--	--
Turbulent reaction rate 1	kgmol/m ³ -s	max	--	--	--	--	--	--
Turbulent reaction rate 2		max	--	--	--	--	--	--

Tabella 4.2-10 Valori minimi e massimi di alcune proprietà

Confronto tra modelli di combustione disponibili nel solutore FLUENT

Formulazione Instazionaria 2ddp Modello di Turbolenza RSM Griglia 16 k		Eddy Dissipation		Non premix Equilibrium		Steady Flamelet	
		One Step	Two Step	Adiabatic	Non Ad.	Adiabatic	Non Ad.
Portata	kg/s	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971	0.0971
Temperatura (statica)	K	1818	1819	1840	1741	1830	1732
Densità	kg/m ³	0.187	0.187	0.185	0.194	0.186	0.195
Velocità	m/s	3.15	3.15	3.16	3.03	3.14	3.02
CH₄	ppm dry	408	345	1373	1326	18	16
CO	ppm dry	--	810	5594	5287	7512	7230

Tabella 4.2-11 Valori medi di alcune proprietà in uscita

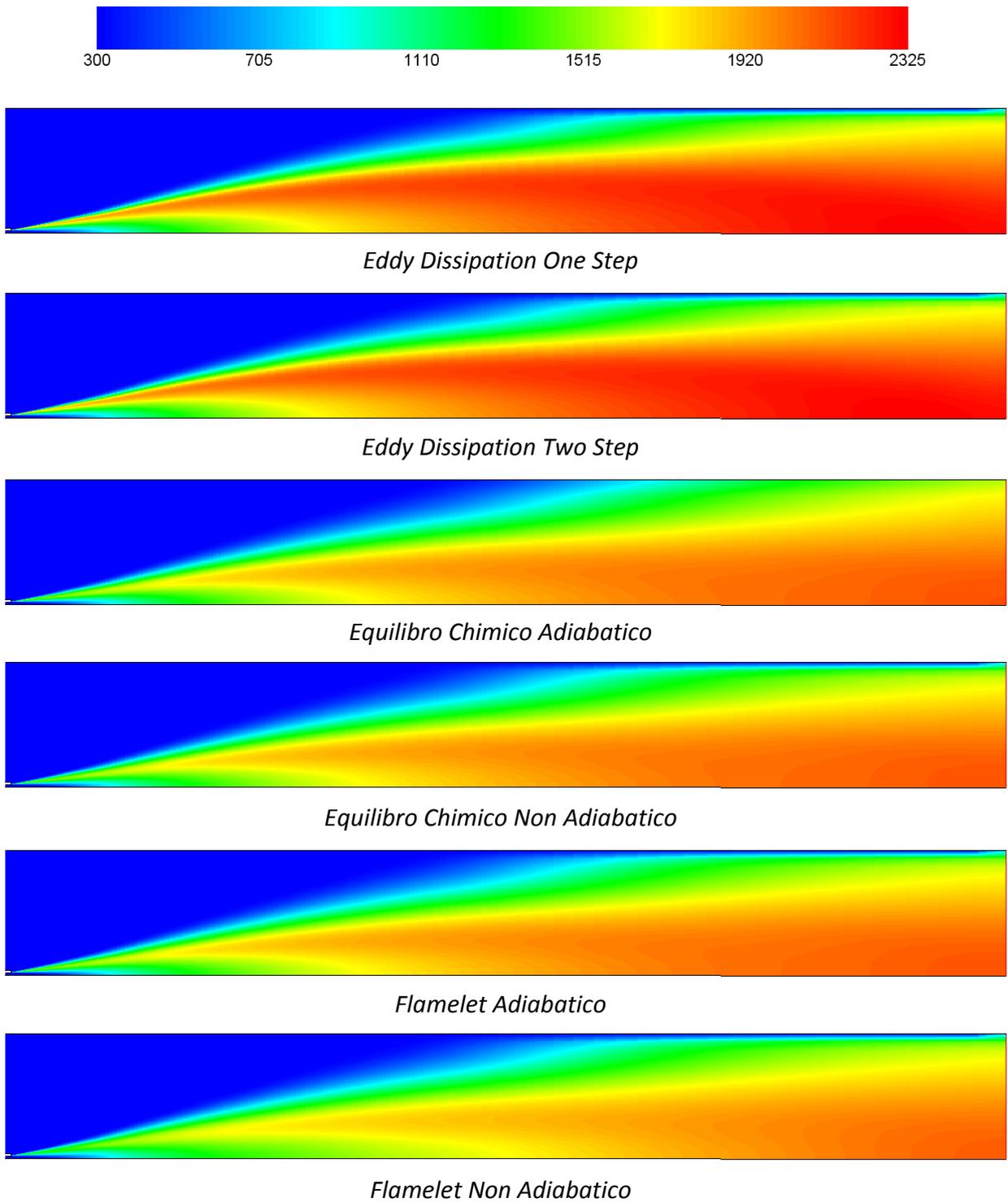


Figura 4.2-24 Andamenti di Temperatura (K)

4.3 COMBUSTORE PREMISCELATO

L'analisi numerica è stata condotta su una geometria quasi cilindrica, di seguito descritta. Sono state effettuati diversi calcoli, considerando sia domini bidimensionali che tridimensionali, diversi gradi di infittimento.

4.3.1 LA GEOMETRIA E LE CONDIZIONI AL CONTORNO

La geometria presa in considerazione è costituita da un combustore cilindrico di cui in Figura 4.3-1 è riportata una vista bidimensionale assialsimmetrica. Il combustore ha una lunghezza di 1.400 mm ed un diametro massimo di 400 mm. Notiamo che esiste un unico ingresso nella camera dal quale entrano combustibile e comburente già premiscelati.

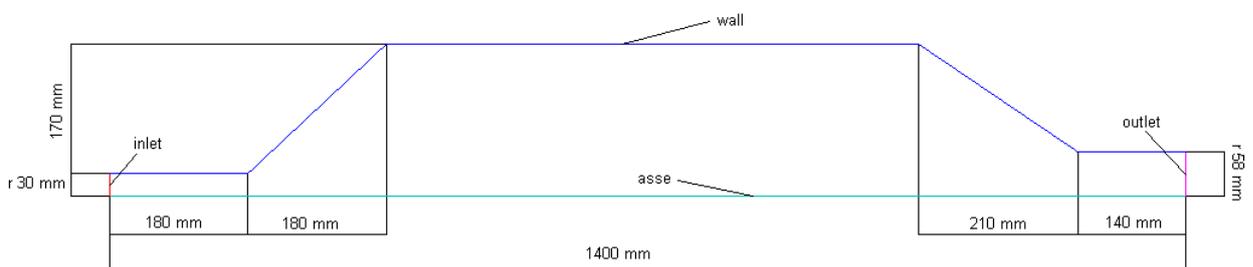


Figura 4.3-1

In Tabella 4.3-1 sono riassunti i modelli e gli input base comuni a tutte le simulazioni presentate in questo capitolo.

Formulazione solutore	Stazionario
Modello di turbolenza	Standard k-epsilon
Modello di combustione	Finite Rate / Eddy Dissipation
Densità	Gas ideale incomprimibile
Pressione operativa	101.325 Pascal
Parametri di ingresso	V = 60 m/s T = 650 K CH ₄ 3,4% O ₂ 22,5% N ₂ 74,1% (in massa)
Temperatura parete esterna	300 K

Tabella 4.3-1

Le caratteristiche delle griglie utilizzate, tutte di tipo strutturato, sono riportate in Tabella 4.3-2.

	Nome	Nodi	Celle	Volume (3D mm ³ / 2D mm ²)	
				min	Max
2D	1.9 k	1.936	1.794	32	199
	26 k	26.328	25.934	4,8	15
3D	160 k	162.355	168.128	11	2167
	1.8 M	1.799.648	1.780.471	4,4	108

Tabella 4.3-2

4.3.2 RISULTATI

Come nel caso della combustore non premiscelato, è stato condotto un confronto tra la formulazione 2d e 3d utilizzando griglie con diverso infittimento. I risultati di tale confronto sono riportati in Tabella 4.3-3 e in Tabella 4.3-4.

Analisi sul tipo di solutore 2ddp, 3ddp						
Formulazione Stazionaria Doppia Precisione Modello di combustione Finite Rate / Eddy Dissipation Meccanismo a due Reazioni Modello di Turbolenza k-epsilon Standard			Griglia			
			2d 1.9 k	2d 26 k	3d 160 k	3d 1.8 M
Temperatura (statica)	K	max	1996	2003	2002	1993
		min	-89,81	-122	-82,88	-116,25
Pressione (statica)	Pa	max	358	338	349	341
		min	0,171	0,171	0,171	0,172
Densità	kg/m ³	max	0,527	0,527	0,527	0,527
		min	63,02	62,97	63,58	62,82
Velocità	m/s	max	0,1818	0,03179	0,06675	0,0336
		min	256,78	332,80	275,65	313,57
Energia Cinetica Turbolenta (k)	m ² /s ²	max	34,81	14,56	21,09	14,96
		min	1331,12	1466,94	1355,54	1445,84
Intensità di Turbolenza	%	max	0,198	0,4636	0,2945	0,50152
		min	0,101	0,3647	0,1397	0,3945
Reaction rate 1	kgmol/m ³ -s	max				
Reaction rate 2		max				

Tabella 4.3-3 Valori minimi e massimi di alcune proprietà

Si nota una sostanziale uniformità di risultati soprattutto per quanto riguarda i valori di temperatura massima e di uscita con una escursione massima di 10 K. I valori dei parametri di turbolenza risultano in sostanziale accordo sulle

griglie che presentano una discretizzazione confrontabile (2d 1,9k e 3d 160k, 2d 26k e 3d 1,8M).

Analisi sul tipo di solutore 2ddp, 3ddp

Formulazione Stazionaria Doppia Precisione Modello di combustione Finite Rate / Eddy Dissipation			Griglia			
			2d 1.9 k	2d 26 k	3d 160 k	3d 1.8 M
Portata	kg/s		0,0893	0,0893	0,0891	0,0892
Temperatura (statica)	K		1952	1952	1952	1945
Densità	kg/m³		0,175	0,175	0,175	0,176
Velocità	m/s		44,57	46,68	46,08	45,85
CH₄	ppm dry		3	2	11	2
CO	ppm dry		19	15	57	14

Tabella 4.3-4 Valori medi di alcune proprietà in uscita

Nelle figure seguenti sono riportati gli andamenti di alcune proprietà di interesse e del campo di moto sulla griglia 3d 1,8M.

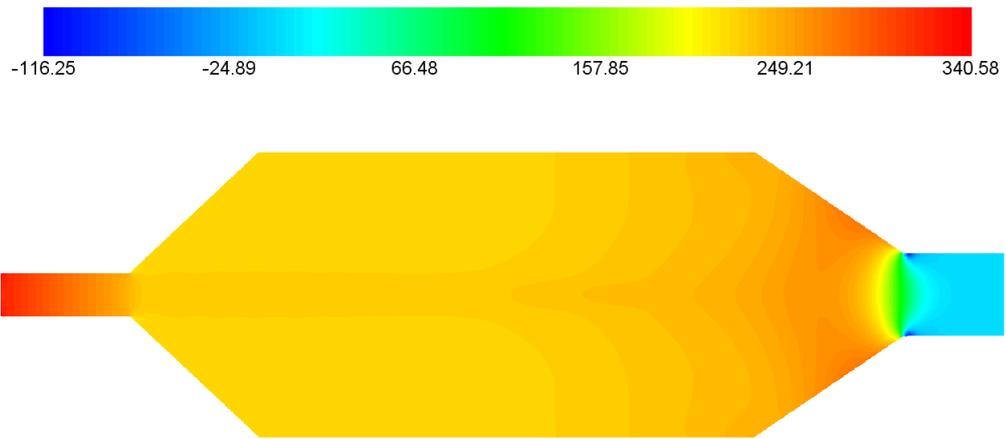


Figura 4.3-2 Press statica (Pa)

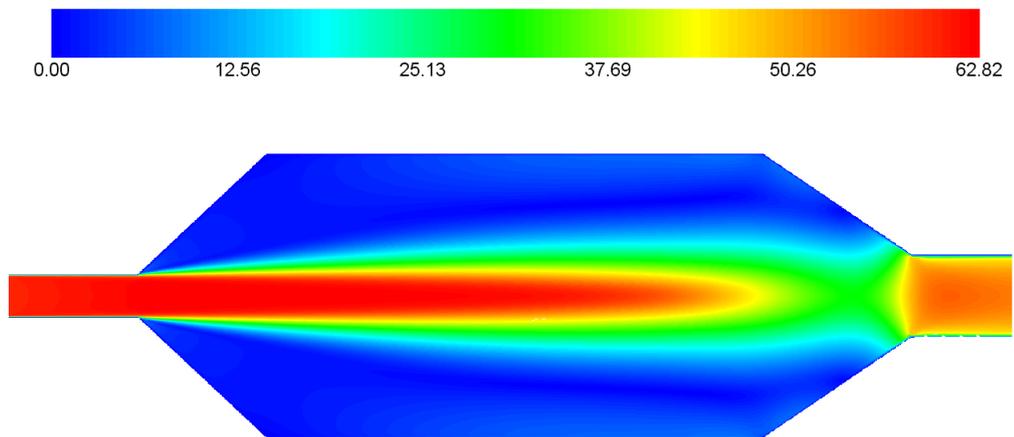


Figura 4.3-3 Velocità (m/s)

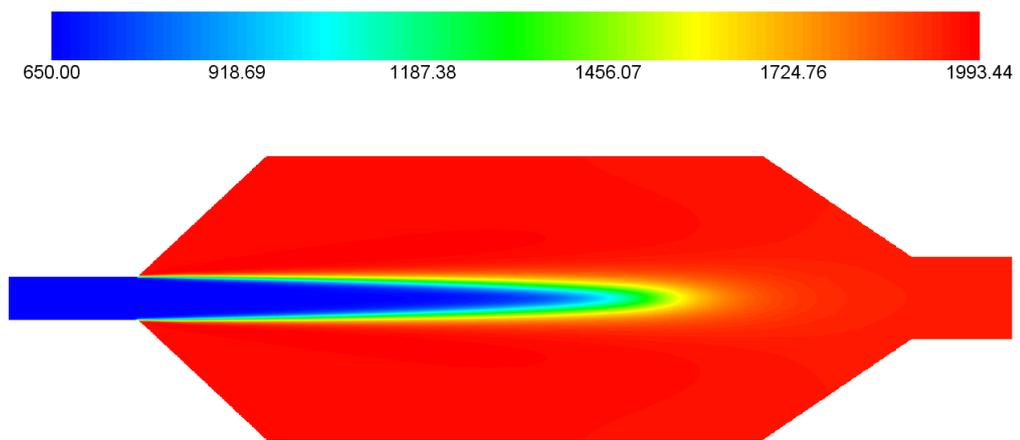


Figura 4.3-4 Temperatura (K)

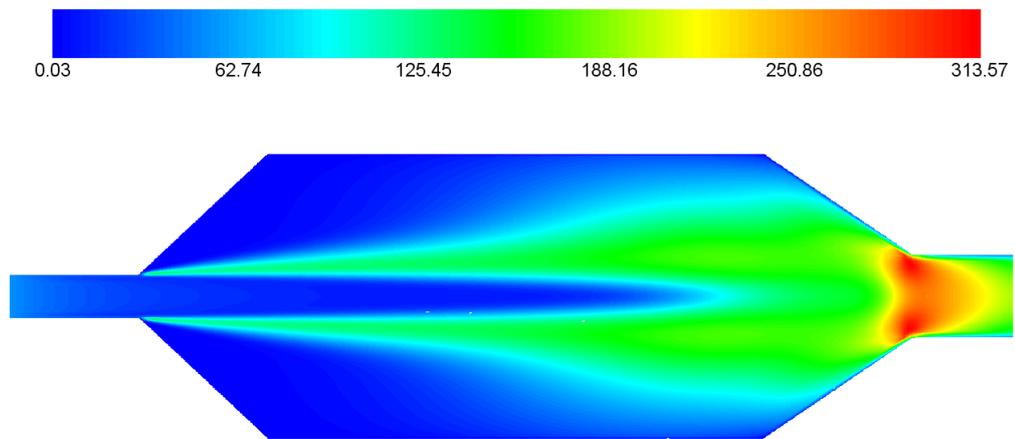


Figura 3-5 Energia turbolenta (m^2/s^2)

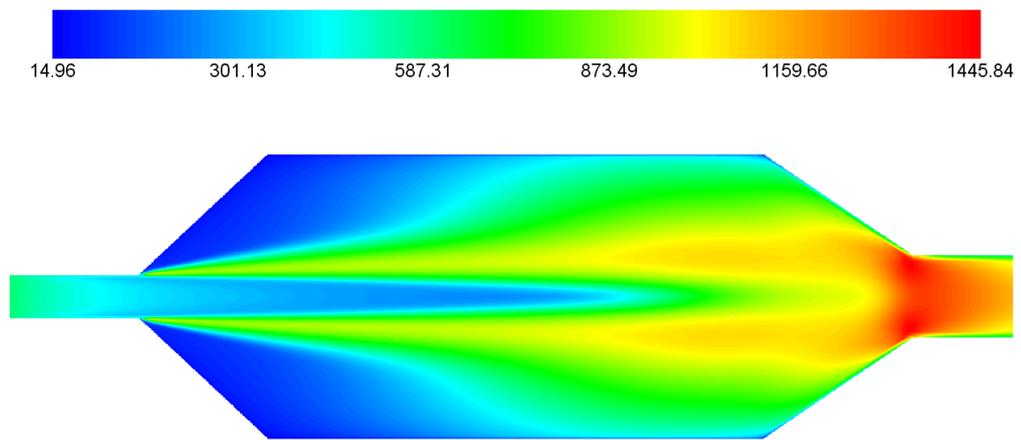


Figura 4.3-6 Intensità di turbolenza (%)

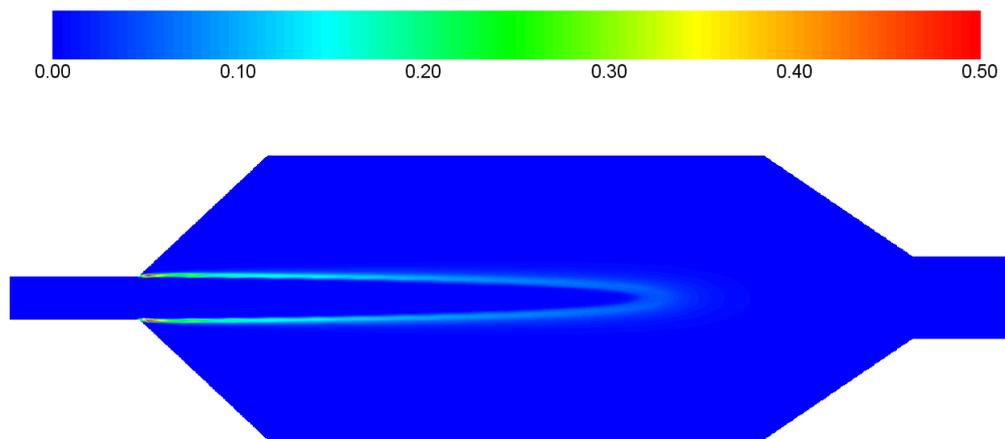


Figura 4.3-7 Velocità di reazione 1 ($kgmol/m^3-s$)

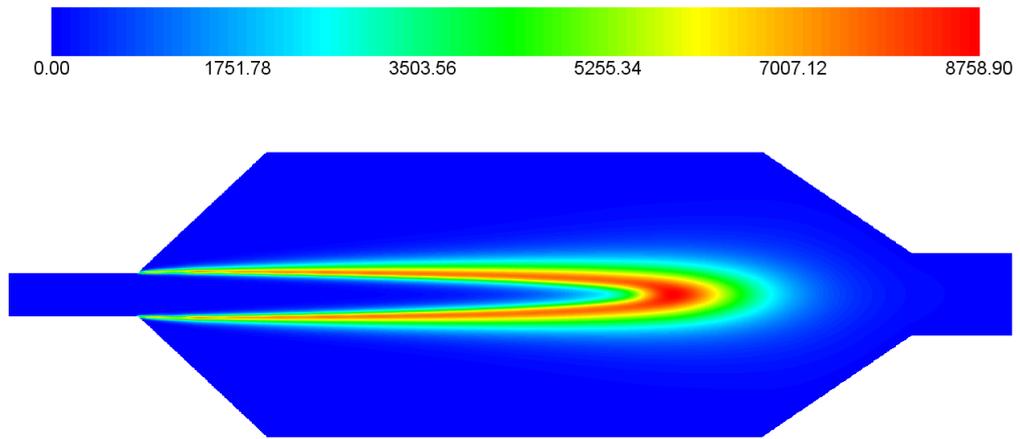


Figura 4.3-8 CO (ppm-dry)

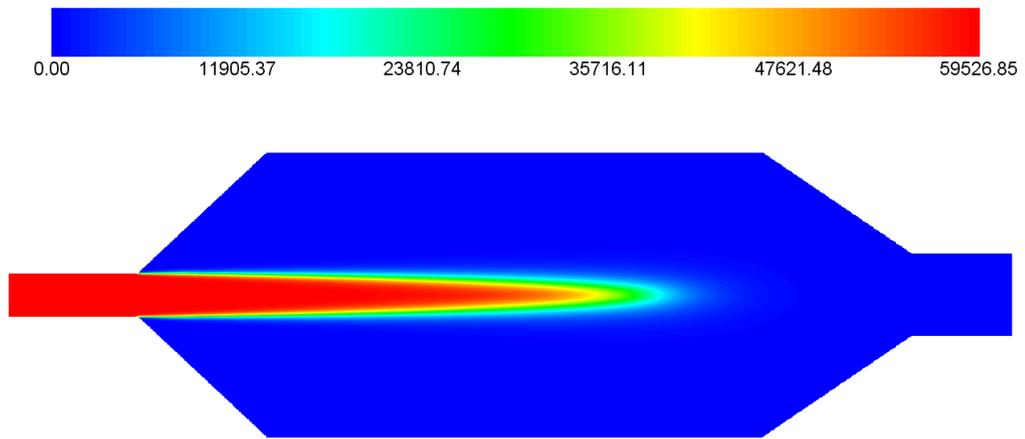


Figura 4.3-9 CH₄ (ppm-dry)

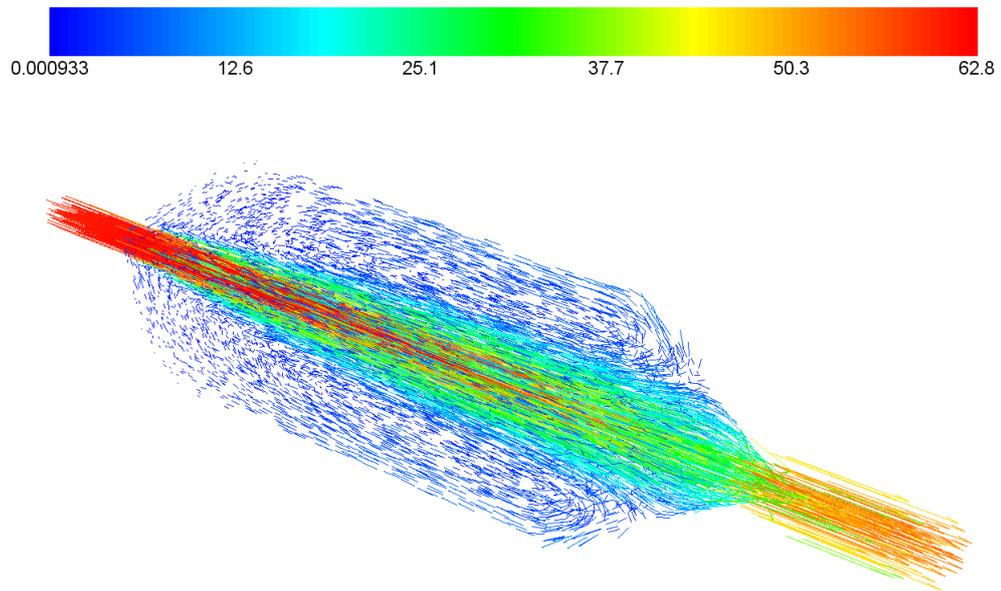


Figura 4.3-10 Campo di Moto su Mesh 1,8M (Velocità m/s)

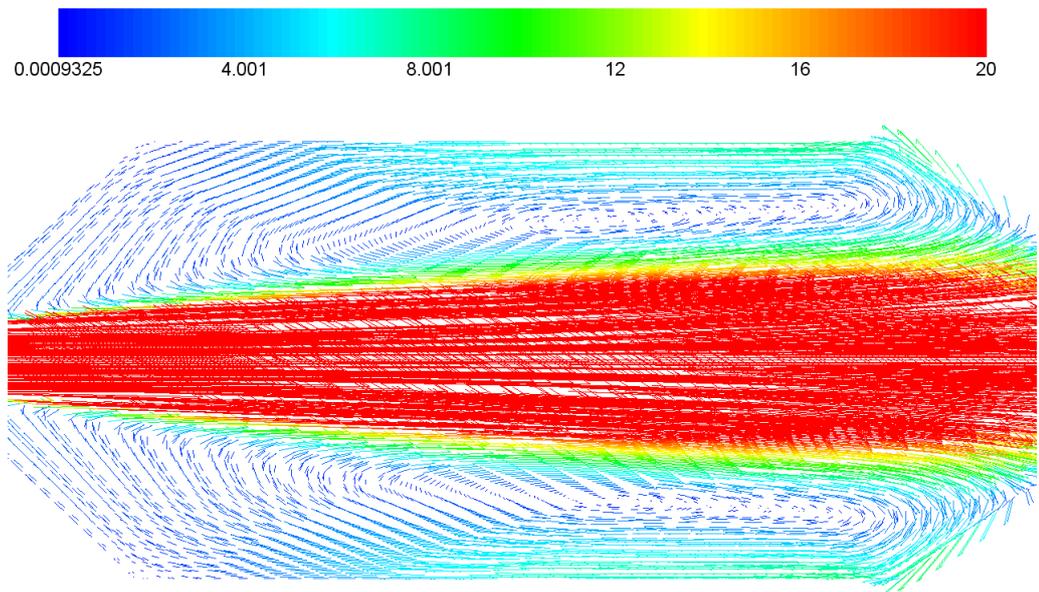


Figura 4.3-11 Dettaglio Campo di Moto su Mesh 1,8M (Velocità m/s)

4.4 GENERAZIONE DELLE FLAMELET

Come già accennato, la generazione delle *flamelet* è stata affrontata eseguendo una sorta di analisi di sensibilità facendo variare il numero di punti griglia, il valore iniziale della *Scalar Dissipation* nonché il passo. Tutte le *flamelet* sono state generate utilizzando il meccanismo GRI-mech 3.0 e le impostazioni di Tabella 4.4-1.

Pressione Operativa	100.000 Pa
Temperatura Combustibile	300 K
Temperatura Aria	300 K
Composizione Combustibile	100% CH ₄
Composizione Aria _{f,gf}	O ₂ 23% N ₂ 77% in massa

Tabella 4.4-1

Complessivamente sono state generate 48 librerie di *flamelet* facendo variare i punti griglia tra {10, 20, 30}, il valore iniziale della *Scalar Dissipation* χ tra { $1e^{-4}$, $1e^{-3}$, $1e^{-2}$, $1e^{-1}$ } e il passo tra {0.5, 1, 2, 5} (Tabella 4.4-2). Si nota che il numero delle *flamelet* della libreria aumenta sensibilmente con il diminuire dello *SD Step*, il valore di $\chi_{quenching}$ diminuisce all'aumentare dei punti griglia, mentre il valore max della temperatura cresce al decrescere del valore iniziale della *Scalar Dissipation* e al crescere dei punti griglia.

Flamelet Non Adiabatiche Stazionarie							
nome file flamelet	Punti Griglia	Scalar Dissipation Iniziale	Passo SD	N° Flamelet	f (Tmax)	T max	SD q
flame_ch4-1	10	0,1	5	14	0,0546875	2127	66
flame_ch4-2	10	0,1	2	33	0,0546875	2127	65
flame_ch4-3	10	0,1	1	64	0,0546875	2127	64
flame_ch4-4	10	0,1	0,5	127	0,0546875	2127	64
flame_ch4-5	10	0,01	5	15	0,0546875	2150	66
flame_ch4-6	10	0,01	2	34	0,0546875	2150	65
flame_ch4-7	10	0,01	1	65	0,0546875	2150	64
flame_ch4-8	10	0,01	0,5	128	0,0546875	2150	64
flame_ch4-9	10	0,001	5	16	0,0546875	2150	66
flame_ch4-10	10	0,001	2	35	0,0546875	2150	65
flame_ch4-11	10	0,001	1	66	0,0546875	2150	64
flame_ch4-12	10	0,001	0,5	129	0,0546875	2150	64
flame_ch4-13	10	0,0001	5	17	0,0546875	2150	66
flame_ch4-14	10	0,0001	2	36	0,0546875	2150	65
flame_ch4-15	10	0,0001	1	67	0,0546875	2150	64
flame_ch4-16	10	0,0001	0,5	130	0,0546875	2150	64
flame_ch4-17	20	0,1	5	7	0,0546875	2117	31
flame_ch4-18	20	0,1	2	14	0,0546875	2117	27
flame_ch4-19	20	0,1	1	27	0,0546875	2117	27
flame_ch4-20	20	0,1	0,5	53	0,0546875	2117	27
flame_ch4-21	20	0,01	5	9	0,0546875	2182	31
flame_ch4-22	20	0,01	2	15	0,0546875	2182	27
flame_ch4-23	20	0,01	1	28	0,0546875	2182	27
flame_ch4-24	20	0,01	0,5	54	0,0546875	2182	27
flame_ch4-25	20	0,001	5	9	0,0546875	2200	31
flame_ch4-26	20	0,001	2	16	0,0546875	2200	27
flame_ch4-27	20	0,001	1	29	0,0546875	2200	27
flame_ch4-28	20	0,001	0,5	55	0,0546875	2200	27
flame_ch4-29	20	0,0001	5	10	0,0546875	2202	31
flame_ch4-30	20	0,0001	2	17	0,0546875	2202	27
flame_ch4-31	20	0,0001	1	30	0,0546875	2202	27
flame_ch4-32	20	0,0001	0,5	56	0,0546875	2202	27
flame_ch4-33	30	0,1	5	7	0,05817534	2120	31
flame_ch4-34	30	0,1	2	14	0,05817534	2120	27
flame_ch4-35	30	0,1	1	27	0,05817534	2120	27
flame_ch4-36	30	0,1	0,5	52	0,05817534	2120	26,5
flame_ch4-37	30	0,01	5	7	0,0546875	2177	31
flame_ch4-38	30	0,01	2	15	0,0546875	2177	27
flame_ch4-39	30	0,01	1	28	0,0546875	2177	27
flame_ch4-40	30	0,01	0,5	53	0,0546875	2177	26,5
flame_ch4-41	30	0,001	5	9	0,0546875	2200	31
flame_ch4-42	30	0,001	2	16	0,0546875	2200	27
flame_ch4-43	30	0,001	1	29	0,0546875	2200	27
flame_ch4-44	30	0,001	0,5	54	0,0546875	2200	26,5
flame_ch4-45	30	0,0001	5	10	0,0546875	2203	31
flame_ch4-46	30	0,0001	2	17	0,0546875	2203	27
flame_ch4-47	30	0,0001	1	30	0,0546875	2203	27
flame_ch4-48	30	0,0001	0,5	55	0,0546875	2203	26,5

Tabella 4.4-2

In Figura 4.4-1 si riportano i risultati ottenuti, in forma di diagramma bidimensionale (in cui sono rappresentate le isolinee di temperatura massima), per i calcoli eseguiti fissando i punti griglia a 30. Si nota chiaramente che la temperatura massima raggiunta dalla *flamelet* aumenta al diminuire del valore iniziale della *Scalar Dissipation*, mentre risulta invariante con il valore del passo.

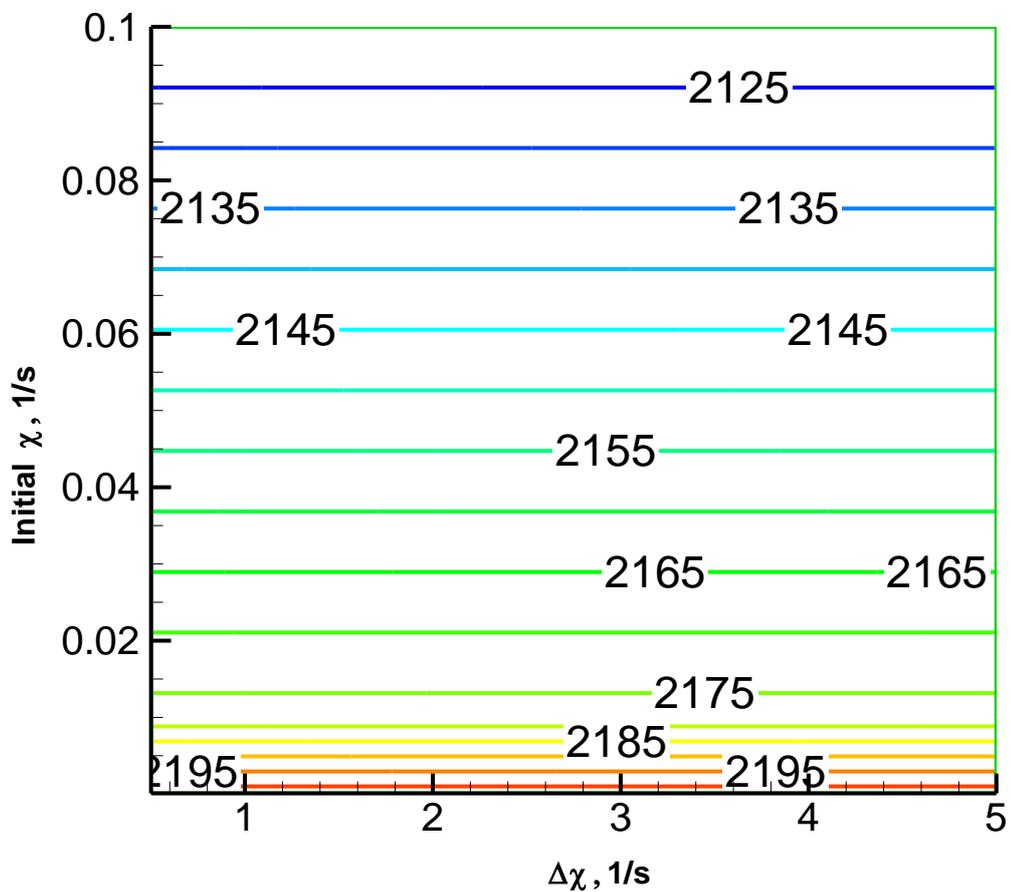


Figura 4.4-1 Isolinee di Temperatura (K)

CAPITOLO 5: STUDIO DEL COMBUSTORE DI UNA MGT

5.1 INTRODUZIONE

La scelta della camera di combustione di una turbina a gas è dettata da esigenze sia impiantistiche sia di carattere ambientale (con particolare riguardo alle emissioni di NO_x). Al momento le maggiori case costruttrici di MGT adottano combustori appartenenti alla classe dei *lean premixed* (sia tubolari che anulari). Questa tipologia di camere garantisce una maggiore semplicità all'impianto e una sua più facile manutenzione, provvedendo al controllo degli ossidi di azoto senza l'impiego dell'iniezione di vapore. L'oggetto del presente capitolo è la simulazione termofluidodinamica della camera di combustione della Microturbina a gas da 100 kW elettrici progettata dall'*Ansaldo Ricerche* di Genova. Lo studio è stato condotto con l'intento di verificare le potenzialità del componente nell'adattamento a nuove condizioni operative, in particolare in presenza di ricircolo dei gas combusti (*EGR*). Per determinare le condizioni al contorno da inserire nel codice CFD scelto (il FLUENT® 6.3), è stata condotta un'analisi di accoppiamento tra i componenti dell'impianto. Tale analisi ha permesso di determinare il campo operativo dell'impianto sia in assenza sia in presenza di *EGR*. Successivamente è stato simulato il comportamento del combustore in 4 condizioni operative caratterizzate da diverse gradi di *EGR* a carico nominale e a carico ridotto. Per modellare la combustione si sono usati due approcci: il classico modello *finite rate/eddy dissipation* e il modello parzialmente premiscelato con l'ausilio delle *flamelet*. Le configurazioni con *EGR* hanno mostrato andamenti della temperatura più uniformi con picchi più bassi e conseguente riduzione delle emissioni di ossidi di azoto. Tuttavia si osserva

che l'adozione del ricircolo, se da un lato avvicina le caratteristiche della combustione alla combustione *MILD*, dall'altro determina l'incremento delle emissioni di specie incombuste.

5.2 LA CAMERA

L'Ansaldo Ricerche ha optato, per la Microturbina in oggetto, per una camera di combustione *lean premixed* tubolare Figura 5.2-1. Il bruciatore (Figura 5.2-2 e Figura 5.2-3) è costituito da due linee di immissione del combustibile separate, il *pilot* (linea diffusiva) e il *main* (linea premiscelata), servite rispettivamente da sei e da diciotto iniettori. Questa configurazione è stata scelta nel tentativo di ottenere una fiamma stabile ed affidabile ai diversi regimi di funzionamento previsti per la *MGT*.

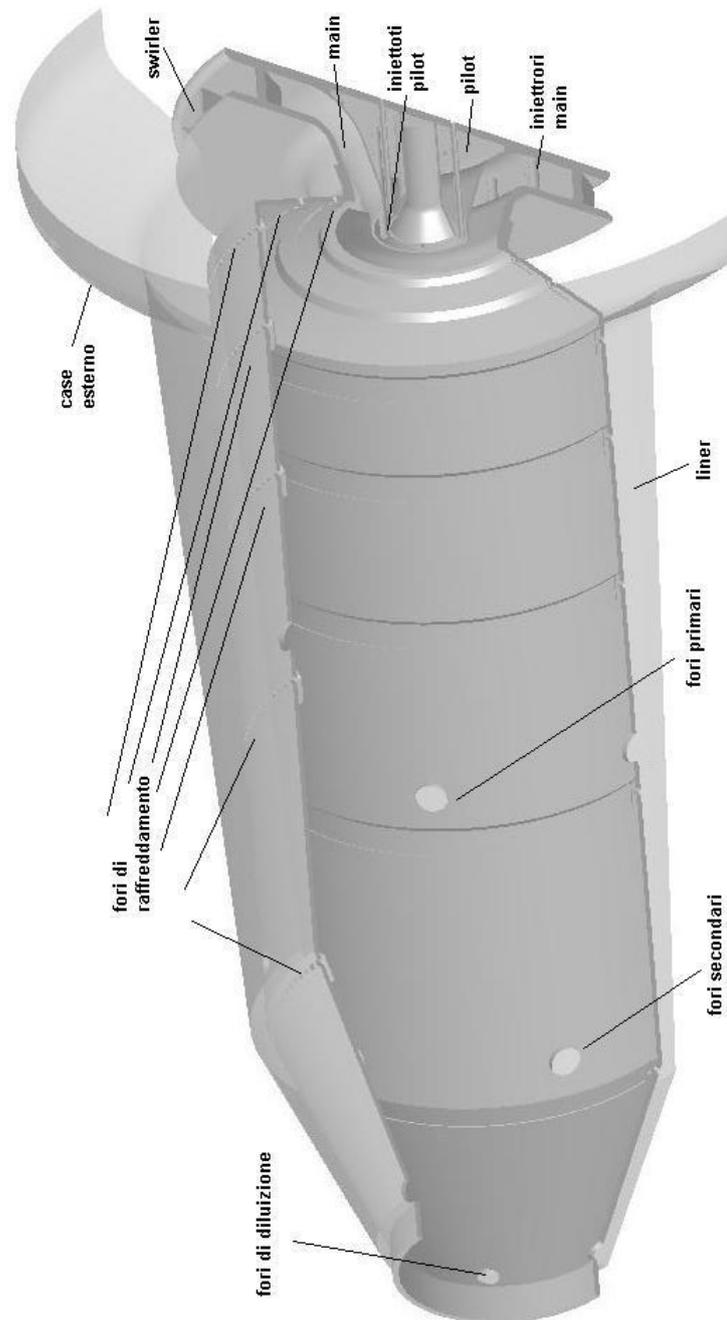


Figura 5.2-1

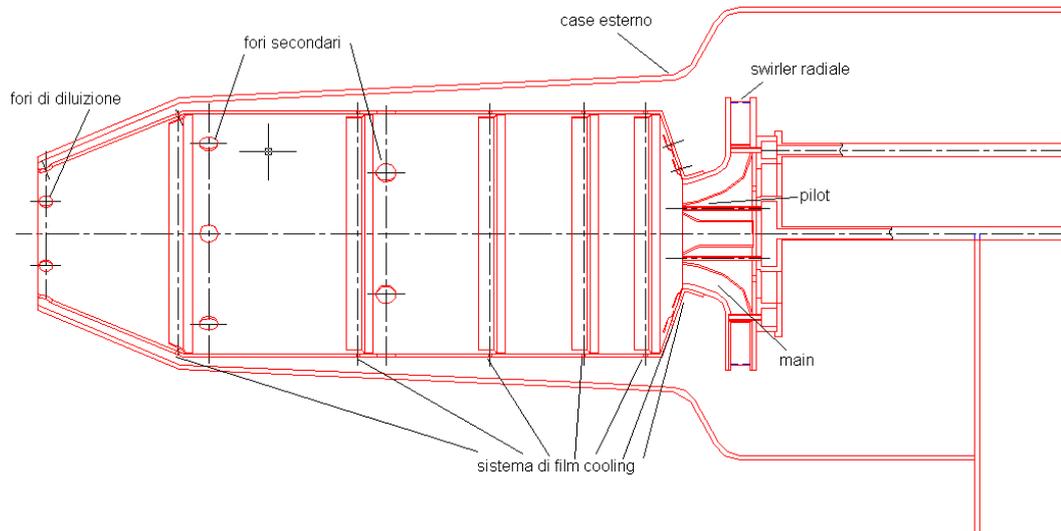


Figura 5.2-2

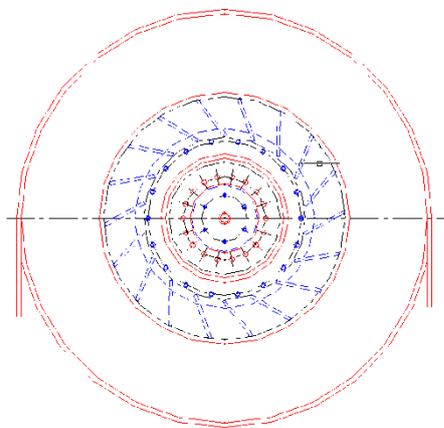


Figura 5.2-3

In Figura 5.2-4 è possibile osservare due particolari del bruciatore. Si notano le pale dello *swirler* (in totale sono diciotto), gli iniettori del *pilot* e del *main*. Questi ultimi (ciascuno costituito da 4 piccoli fori) sono posizionati subito a valle dei condotti formati dalle pale dello *swirler*; tale configurazione risulta meno sensibile al fenomeno del ritorno di fiamma (tipico problema delle *LP*). La portata d'aria proveniente dal diffusore viene divisa in tre parti: una viene convogliata nel *liner* per il raffreddamento delle pareti e la diluizione; una seconda parte attraversa lo *swirler* per premiscelarsi con il combustibile; l'ultima entra nella zona di reazione attraverso il *pilot* per alimentare la fiamma pilota. Nelle condizioni di progetto le tre portate d'aria rappresentano rispettivamente il 70,9%, il 27,6% e l'1,5% della portata totale. Il rapporto di equivalenza complessivo al bruciatore nelle condizioni nominali di funzionamento (con alimentazione a gas naturale) è pari a 0,521. In Figura 5.2-5 è rappresentato l'andamento delle leggi di immissione del combustibile ai carichi parziali. In ascissa il valore 1 della portata di combustibile individua le condizioni di progetto, mentre sulle ordinate è riportata la frazione (sul carico totale) del combustibile inviato al *main* o al *pilot*. La camera, inoltre è dotata di un sistema di regolazione della portata d'aria in ingresso al *pilot* (sostanzialmente costituita da due piastre forate mobili) in modo tale da ottenere una dosatura pressoché stechiometrica della linea diffusiva in tutte le condizioni di funzionamento.

La presenza di più iniettori, sia nella linea *pilot* che in quella *main*, garantisce una distribuzione del combustibile nella zona primaria più uniforme ed un migliore miscelamento dei getti di aria e combustibile. Altro elemento

caratteristico della camera è rappresentato dallo *swirler radiale*, che ha il compito di creare la turbolenza necessaria al mescolamento di combustibile ed aria nel condotto *main* (o *premixer*) e di generare un moto di ricircolo nella zona primaria in grado di sostenere la fiamma.

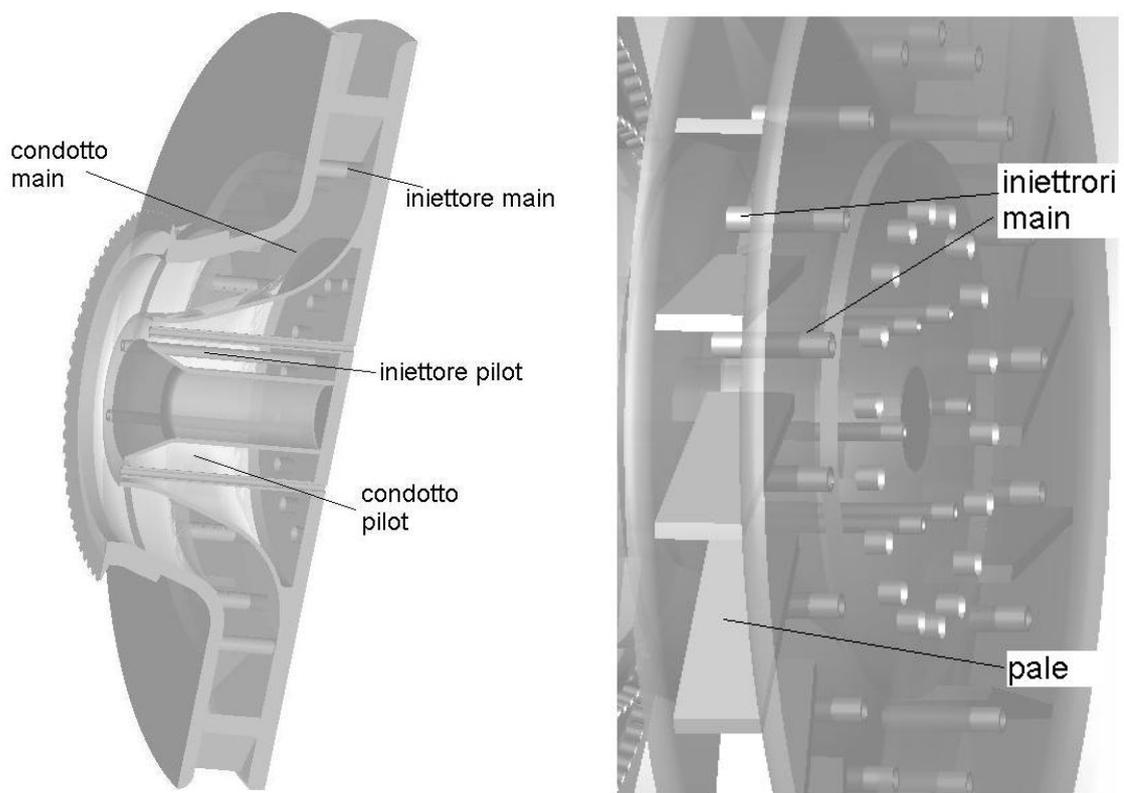
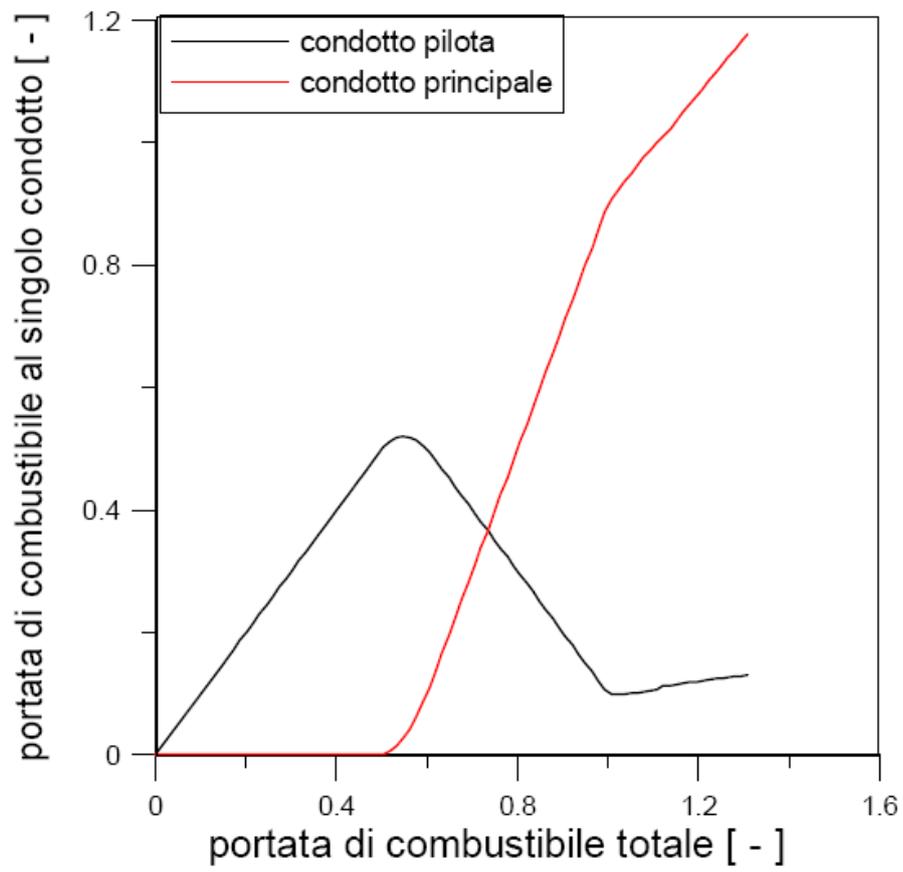


Figura 5.2-4

*Figura 5.2-5*

5.3 METODOLOGIA DI ANALISI

Per studiare il comportamento del combustore sono state prese in considerazione due configurazioni impiantistiche differenti: la configurazione base con rigenerazione Figura 5.3-1 ed una modificata con ricircolo dei gas combusti (*EGR*) Figura 5.3-2. In Tabella 5.3-1 sono riportate le caratteristiche di targa del sistema di *micro-cogenerazione* in configurazione base, mentre in Tabella 5.3-2 sono indicate le prestazioni al punto nominale (100% di rigenerazione).

MGT DATA

Configurazione	Mono-albero
Velocità di rotazione [rpm]	64.000
Temperatura massima d'ingresso in turbina [K]	1223
Rendimento adiabatico compressore radiale	0,75
Rendimento adiabatico turbina radiale	0,85
Rendimento scambiatore rigenerativo	0,9
Rendimento combustione	0,98
Perdite di carico combustore [%]	5

Tabella 5.3-1

PERFORMANCE

Potenza Meccanica all'albero	110 kW
Rendimento Termico	0.340
Temperatura al Camino	403 K
Potenza Termica disponibile all'utilizzatore	108 kW

Tabella 5.3-2

Per condurre simulazioni fluidodinamiche della camera di combustione, oltre alla scelta del dominio computazionale della sua discretizzazione e dei modelli da applicare, è necessario definire le condizioni al contorno da immettere nel solutore. A tale scopo, si è provveduto ad analizzare, mediante un codice di accoppiamento fluidodinamico tra i componenti sviluppato all'interno del Dipartimento di Ingegneria Meccanica per l'Energetica, l'intero impianto sia nella configurazione base sia in quella modificata.

5.3.1 ANALISI TERMODINAMICA E DI ACCOPPIAMENTO

In primo luogo è stata effettuata una analisi puramente termodinamica del sistema micro-cogenerativo valutando l'andamento delle prestazioni (in termini di potenza ed emissioni) al variare del grado di ricircolo dei gas combusti. In Figura 5.3-3 e in Figura 5.3-4 si riportano rispettivamente gli andamenti delle emissioni di ossidi di azoto e di biossido di carbonio, del rendimento energetico e dell'indice di risparmio energetico, al variare del grado di *EGR* (Equazione 5.3-1).

$$X_{egr} = \frac{\dot{m}_{egr}}{\dot{m}_{g,R}} \quad \text{Equazione 5.3-1}$$

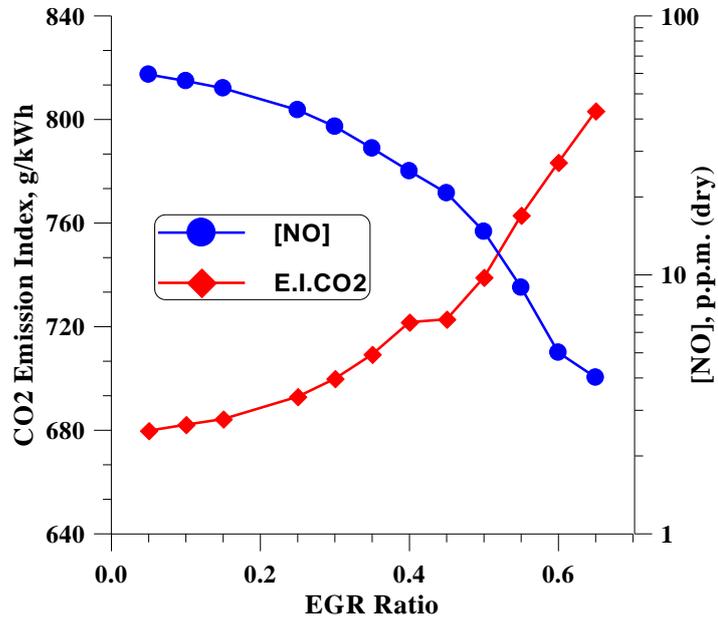


Figura 5.3-3

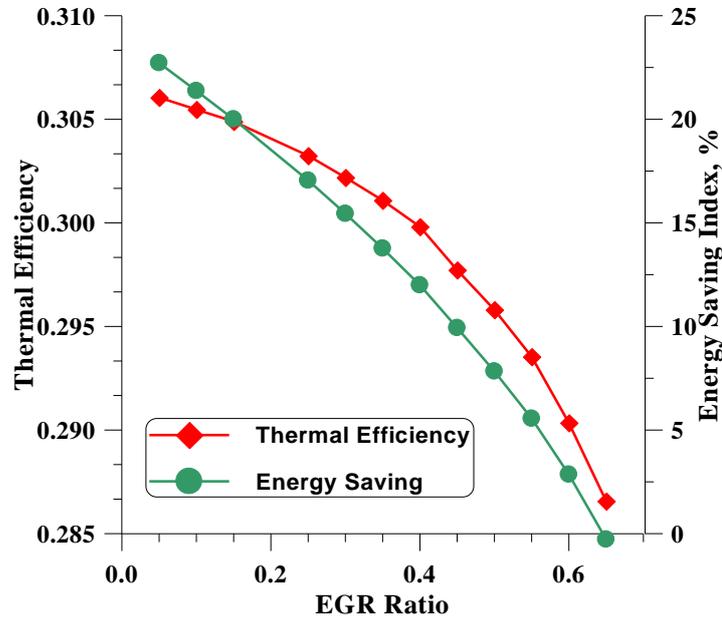


Figura 5.3-4

Per tenere conto delle effettive caratteristiche dei componenti che costituiscono l'impianto è stata condotta l'analisi di accoppiamento mediante l'utilizzo del codice TCDOM sviluppato presso il DIME. In Figura 5.3-5 e in Figura 5.3-6 si riportano le curve caratteristiche rispettivamente di compressore e turbina utilizzate nell'analisi di accoppiamento.

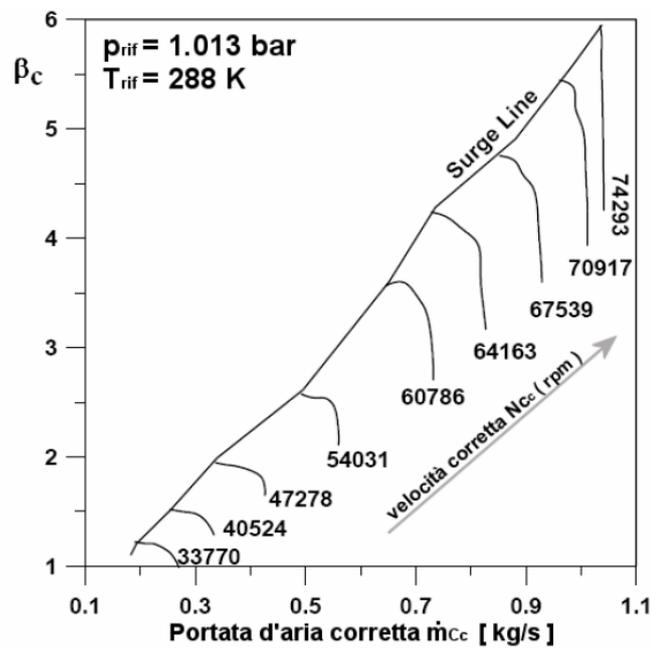


Figura 5.3-5

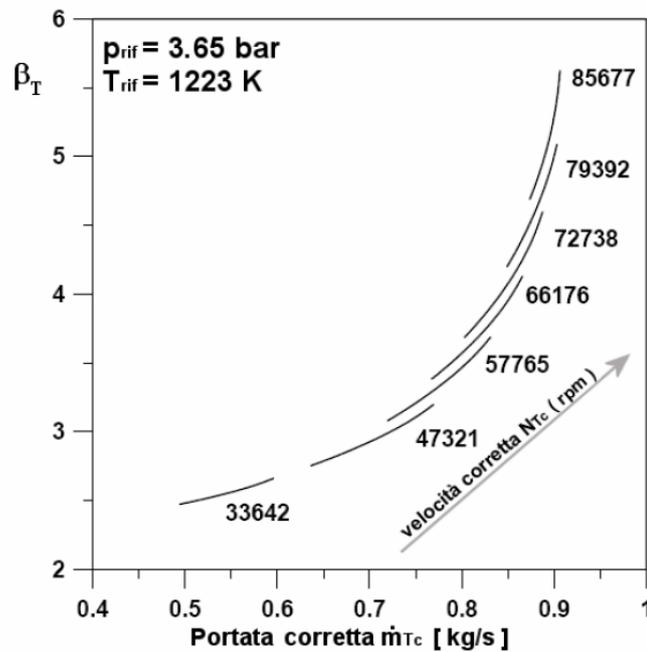


Figura 5.3-6

Sono stati così costruiti *domini di funzionamento* per la piccola turbina dell'Ansaldo, variando il combustibile, le condizioni di rigenerazione del ciclo (ovvero la richiesta di potenza termica da parte dell'utenza) e il grado di *EGR*. Senza scendere nel dettaglio del modello utilizzato dal codice (che peraltro è in grado di valutare anche la produzione di NO_x con un modello semplificato che va tarato sul problema in esame) si riportano di seguito alcuni risultati ottenuti alimentando al *MGT* con gas naturale e con un *EGR* pari al 65% in ciclo completamente rigenerato. Infatti, pur essendo possibile da un punto di vista puramente termodinamico raggiungere il 90% di ricircolo dei gas combusti, l'analisi di accoppiamento ha dimostrato che non esistono per il sistema considerato punti operativi per valori superiori al 65% di *EGR*. In Figura 5.3-7 è riportato il dominio di funzionamento per le condizioni dette: sugli assi sono

rappresentate la velocità di rotazione e la potenza meccanica in uscita, mentre le isolinee rappresentano, nella prima, le emissioni di NO_x in ppm e il rendimento e, nella seconda, le emissioni di CO_2 in g/kWh e l'Indice di Risparmio Energetico (IRE). L'introduzione del ricircolo determina una riduzione del rendimento di circa 4 punti percentuale rispetto alla configurazione base a fronte di una riduzione a circa 5 ppm degli ossidi di azoto. In termini di emissioni di biossido di carbonio le prestazioni dell'impianto peggiorano da un lato in virtù della riduzione del rendimento e dall'altro per la presenza già nell'ossidante della CO_2 .

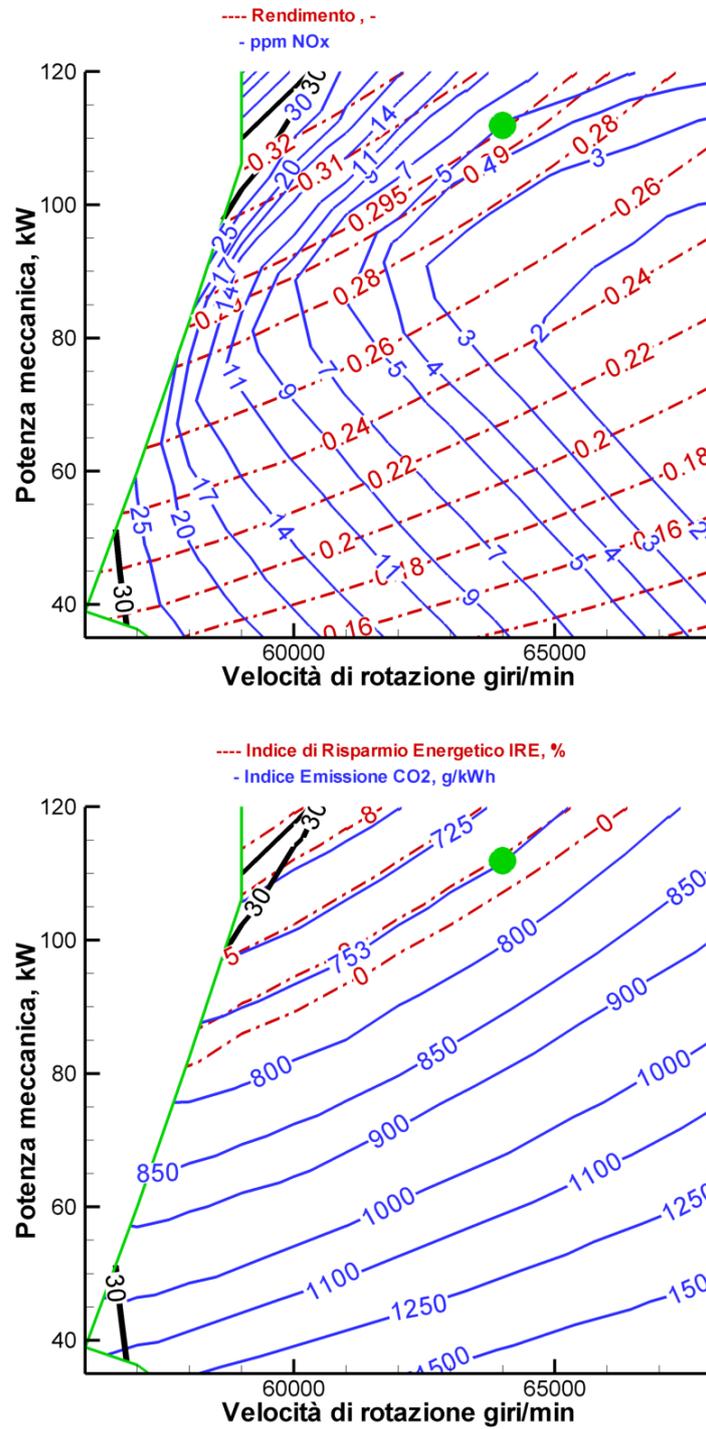


Figura 5.3-7

5.3.2 LE SIMULAZIONI *CFD*

La complessa geometria del combustore (dovuta essenzialmente alla presenza dello *swirler* radiale) ne imporrebbe uno studio completamente tridimensionale. È accettabile, tuttavia, focalizzare l'attenzione su di un settore di 60° (Figura 5.3-8) assumendo l'ipotesi periodica.



Figura 5.3-8

In Figura 5.3-9 è riportato un particolare del settore tridimensionale in cui si possono notare gli iniettori del *main* (ciascuno costituito da 4 piccoli fori), posti a valle dei condotti dello *swirler*, e quello del *pilot*.

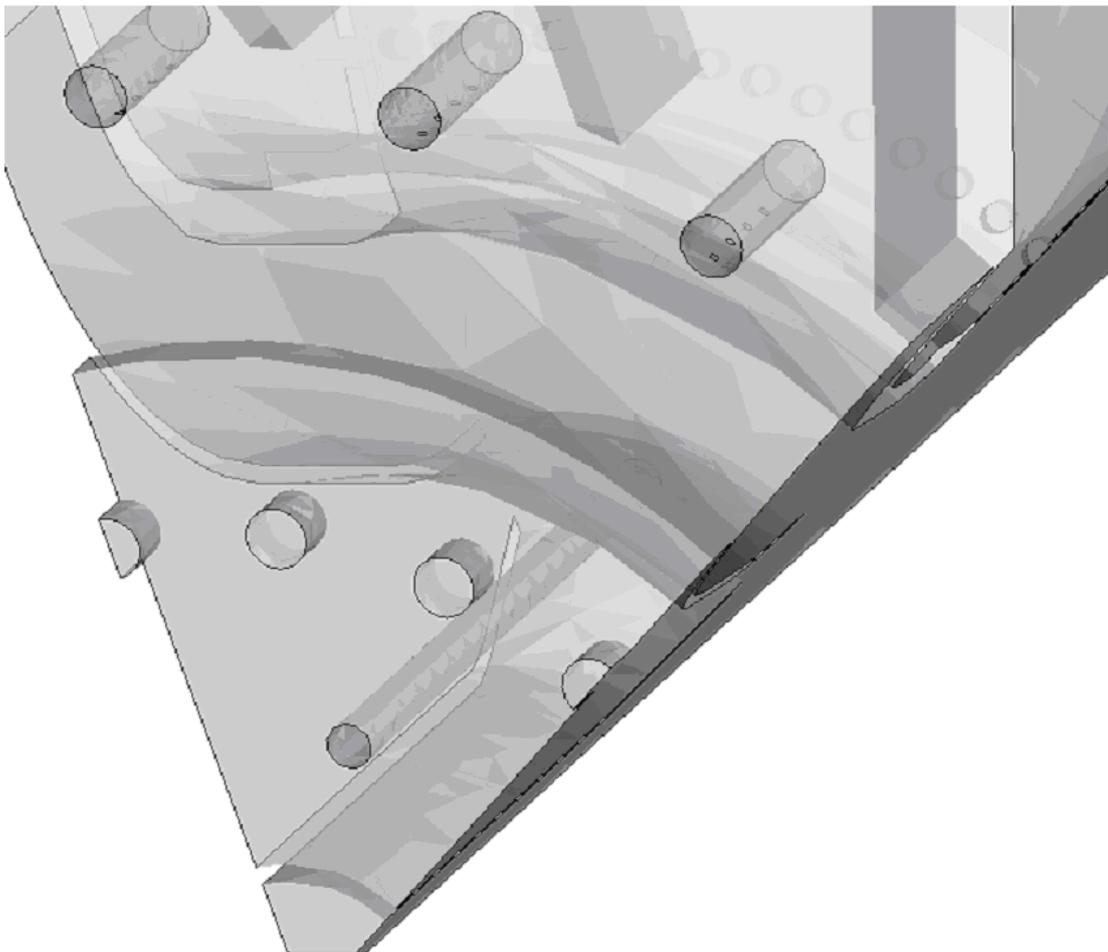


Figura 5.3-9

Su tale tipo di dominio è stata effettuata una simulazione di moto d'aria per avere informazioni sulle caratteristiche del flusso che si sviluppa all'interno

della camera. Nelle figure seguenti si riporta l'andamento della pressione, della velocità e dell'angolo di *swirl* in un piano che taglia, ortogonalmente all'asse della camera, i condotti formati dalle pale dello *swirler*.

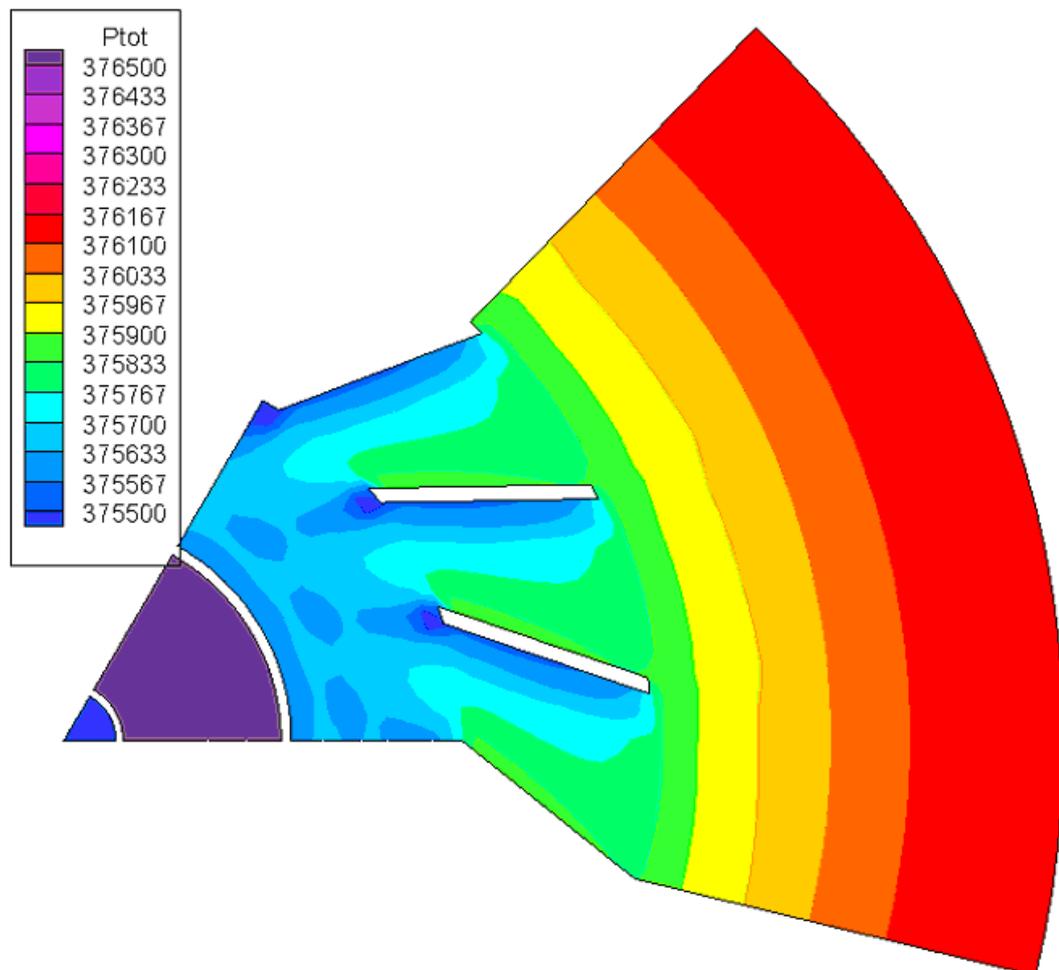


Figura 5.3-10 Pressione Totale (Pascal) in un Piano che Taglia lo Swirler

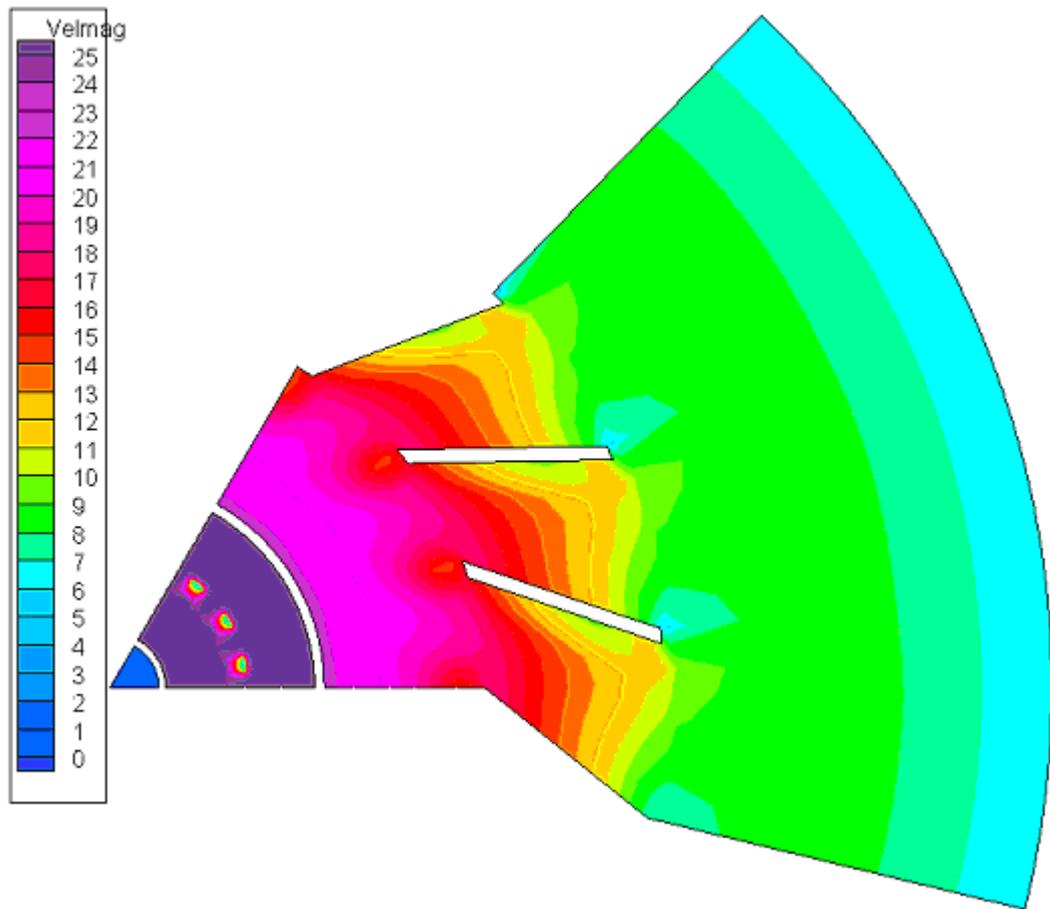


Figura 5.3-11 Velocità (m/s) in un Piano che Taglia lo Swirler

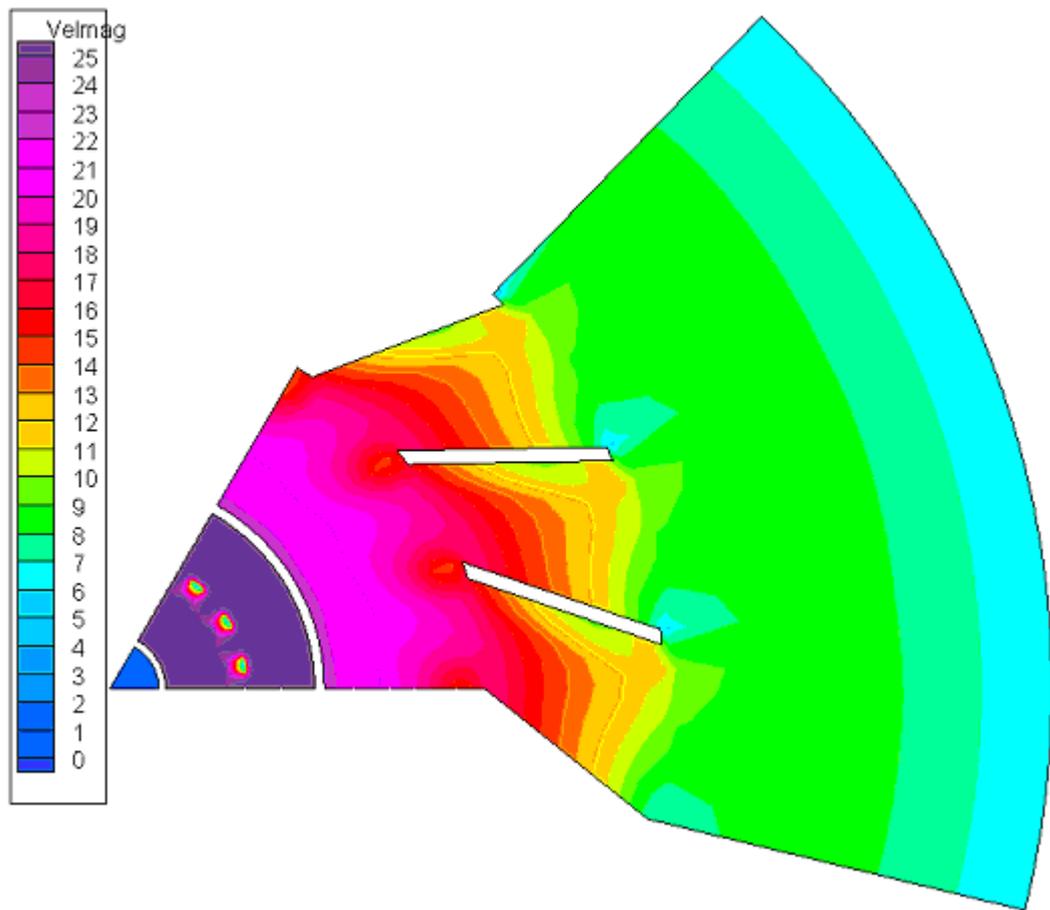


Figura 5.3-12 Angolo di Swirl (gradi) in un Piano che Taglia lo Swirler

Gli andamenti riportati, in particolare quello dell'angolo di *swirl* che all'uscita della palettatura presenta una distribuzione sufficientemente uniforme con valor medio di circa 45° , consentono di effettuare una ulteriore semplificazione del problema adottando l'approssimazione bidimensionale assialsimmetrica. In questo modo è possibile concentrare il lavoro di modellazione della camera confrontando sia diverse formulazioni di alcuni modelli fisici che diverse condizioni operative a cui può essere sottoposto il sistema utilizzando griglie con una buona risoluzione spaziale. In Figura 5.3-13 sono rappresentati, rispettivamente, l'intero dominio bidimensionale (adottato per le simulazioni successive), il dettaglio del *pilot* e del *main*.

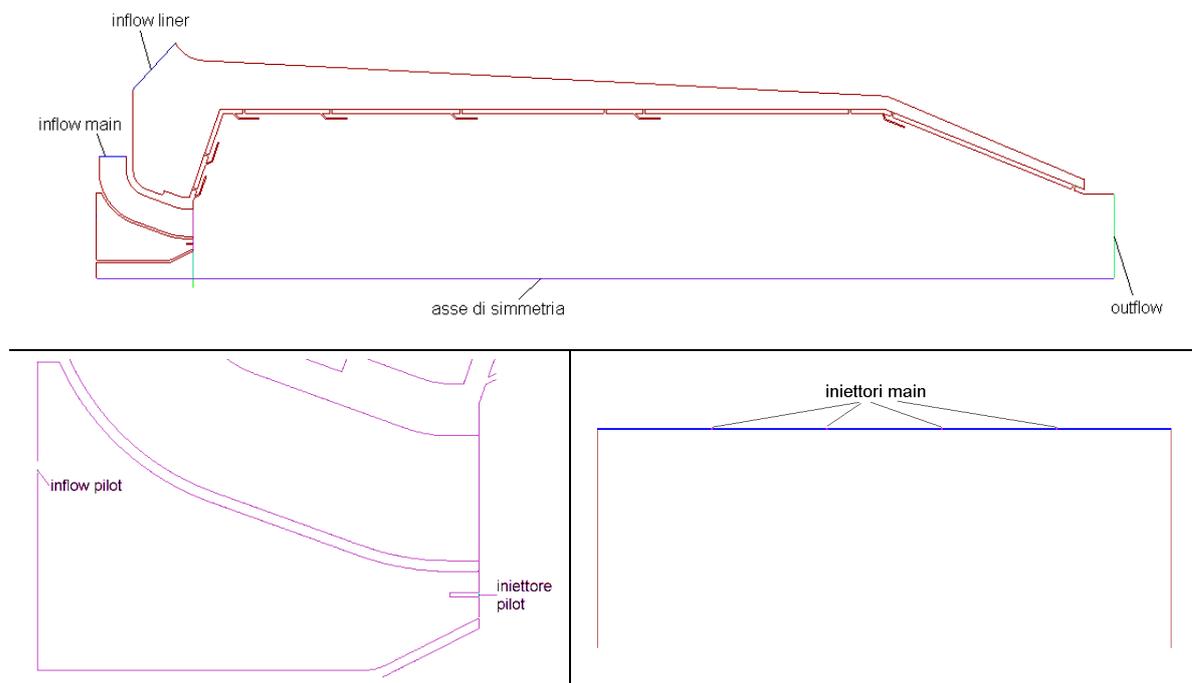


Figura 5.3-13

Le pale dello *swirler*, dunque, non sono state incluse, tagliando il dominio all'altezza degli iniettori del *main*. Di conseguenza, per tener conto dell'effetto *swirl* sulla superficie di ingresso del condotto *premix* (indicata con *inflow main*) è stata assegnata, oltre alla componente normale, anche una componente tangenziale al flusso in ingresso in modo da ottenere un angolo di *swirl* proprio pari a 45° .

La griglia computazionale scelta per eseguire le simulazioni 2D è di tipo strutturato multiblocco da circa 38.000 nodi. Dettagli della *mesh* del condotto premiscelato e della zona primaria del combustore sono riportati in Figura 5.3-14.

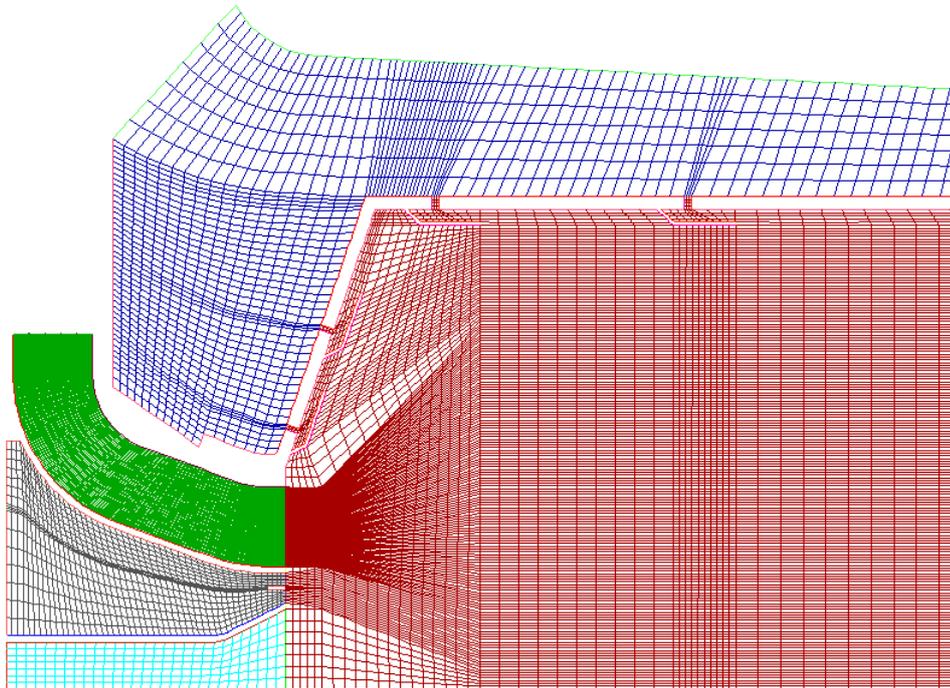


Figura 5.3-14

L'adozione di tale tipo di *mesh*, nonostante la difficoltà di generazione, ha consentito, tuttavia, di conservare dettagli geometrici non trascurabili quali le palette del sistema di raffreddamento e gli iniettori del combustibile (sia del *main* che del *pilot*). Avendo scelto l'approssimazione assialsimmetrica tutti i fori (compresi quelli del sistema di iniezione) sono stati sostituiti da tagli continui che conservano l'area complessiva della superficie di attraversamento del flusso. Inoltre si è scelto di adoperare la versione stazionaria del solutore numerico, in quanto si è interessati alle condizioni di regime. La convergenza dei calcoli è stata valutata sia fissando l'errore per i residui delle diverse equazioni da risolvere che monitorando numerose proprietà sia medie in uscita che di picco.

L'attenzione è stata rivolta a due condizioni operative in cui l'impianto viene alimentato con gas naturale in ciclo completamente rigenerato: 100% della potenza nominale alla velocità di 64.000 giri/min e al 60% del carico alla stessa velocità sia in assenza di *EGR* sia in presenza di un *EGR* pari al 65%. Le simulazioni sono state condotte utilizzando come modello di turbolenza il modello *Reynolds Stress*, in modo da rimuovere l'ipotesi di isotropia della turbolenza. Per quanto riguarda i modelli di combustione ci si è riferiti sia al classico modello *finite rate/eddy dissipation (FRED)* sia al modello parzialmente premiscelato con l'implementazione della teoria delle *flamelet (FLAM)*. Per tener conto della effettiva composizione del combustibile, nel modello *FRED*, sono state considerate nel codice fluidodinamico le reazioni di ossidazione mostrate nell'Equazione 5.3-2. Nella generazione delle tabelle *PDF (probability density function)*, invece, ci si è riferiti al meccanismo GRI-Mech 3.0.

- 1) $CH_4 + \frac{3}{2} O_2 \rightarrow CO + 2 H_2O$

$$\{R_f = 5,012 \cdot 10^{+11} \exp\left(-\frac{2 \cdot 10^{+8}}{RT}\right) [CH_4]^{0,7} [O_2]^{0,8}$$
- 2) $CO + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO_2$

$$\{R_f = 2,239 \cdot 10^{+12} \exp\left(-\frac{2 \cdot 10^{+8}}{RT}\right) [CO]^1 [O_2]^{0,25}$$
- 3) $C_2H_6 + \frac{7}{2} O_2 \rightarrow 2 CO_2 + 3 H_2O$

$$\{R_f = 6,186 \cdot 10^{+09} \exp\left(-\frac{1,256 \cdot 10^{+8}}{RT}\right) [C_2H_6]^{0,1} [O_2]^{1,65}$$
- 4) $C_3H_8 + \frac{7}{2} O_2 \rightarrow 3 CO + 4 H_2O$

$$\{R_f = 5,62 \cdot 10^{+09} \exp\left(-\frac{1,256 \cdot 10^{+8}}{RT}\right) [C_3H_8]^{0,1} [O_2]^{1,65}$$
- 5) $C_4H_{10} + \frac{13}{2} O_2 \rightarrow 4 CO_2 + 5 H_2O$

$$\{R_f = 4,161 \cdot 10^{+09} \exp\left(-\frac{1,256 \cdot 10^{+8}}{RT}\right) [C_4H_{10}]^{0,15} [O_2]^{1,6}$$
- 6) $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$

$$\{R_f = 1 \cdot 10^{+15} \exp\left(-\frac{100}{RT}\right) [H_2]^1 [O_2]^1$$

Equazione 5.3-2

In Tabella 5.3-3 sono riportate le composizioni di combustibile (uguale per tutti i casi esaminati) e di comburente al variare delle condizioni operative prese in considerazione.

Composizione di combustibile e comburente utilizzati (frazioni massiche %)

Specie	Gas Naturale	Comburente		
		EGR0	P110 EGR65	P66 EGR65
CH ₄	85,13396	--	--	--
O ₂	--	23,2798	16,13089	17,50518
CO ₂	0,3808	0,01678	4,724513	3,821006
H ₂ O	--	--	3,735104	3,019062
C ₂ H ₆	6,4175	--	--	--
C ₃ H ₈	2,5436	--	--	--
C ₄ H ₁₀	0,8382	--	--	--
N ₂	4,68594	76,70342	75,409493	75,654752

Tabella 5.3-3

La suddivisione delle portate di comburente e combustibile tra le tre diverse linee (di cui dall'analisi di accoppiamento si sono desunti i valori totali) è stata fatta supponendo che la portata d'aria si divida, in tutte le condizioni studiate, tra il *liner* e il bruciatore (*main + pilot*) mantenendo costante il rapporto (29% al bruciatore e 71% al *liner*). Nei casi senza *EGR* la suddivisione del combustibile tra *main* e *pilot* segue la legge di distribuzione riportata in Figura 5.2-5, mentre quella dell'aria è stata dedotta supponendo che la linea *pilot* sia stechiometrica. Nei casi con *EGR* sono state adottate le suddivisioni, sia

di aria che di combustibile, determinate per i casi omologhi a potenza costante senza *EGR*. In Tabella 5.3-4 si riportano nel dettaglio le condizioni al contorno adoperate per ciascun caso.

Condizioni al contorno per i diversi casi esaminati

		P110 EGR0	P110 EGR65	P66 EGR0	P66 EGR65
Pressione aria in ingresso	bar	3,844	3,685	3,691	3,724
Temperatura aria in ingresso	K	907	903,7	800,5	808,8
Portata d'aria totale	kg/s	0,808	0,813678	0,8152567	0,8084008
Portata di combustibile totale		0,00696	0,00800	0,005674	0,00645
Rapporto di equivalenza tot.		0,140	0,231	0,114	0,173
Portata d'aria Liner	kg/s	0,57368	0,573254	0,576165	0,573964
Portata d'aria Main		0,223085	0,2292	0,20264	0,20187
Portata comb. Main		0,006264	0,0072	0,003604	0,004096
Portata d'aria Pilot		0,011235	0,011224	0,0326917	0,0325668
Portata comb. Pilot		0,000696	0,0008	0,00207	0,002354
Pressione uscita		bar	3,652	3,672	3,505

Tabella 5.3-4

5.3.2.1 RISULTATI MODELLO FRED

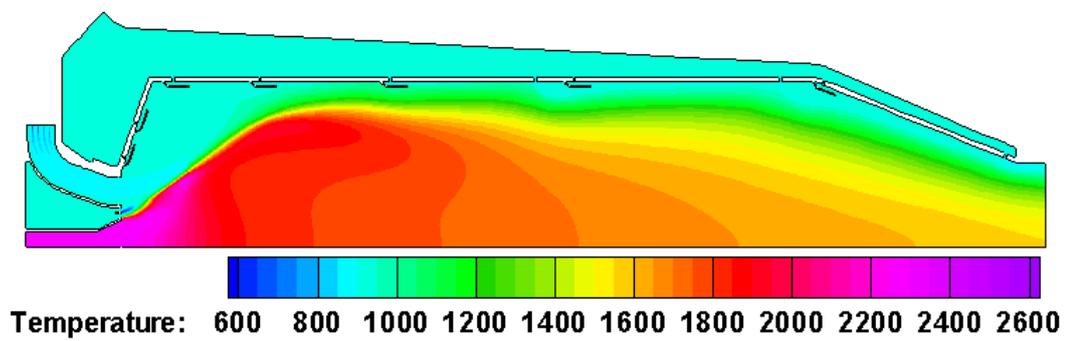
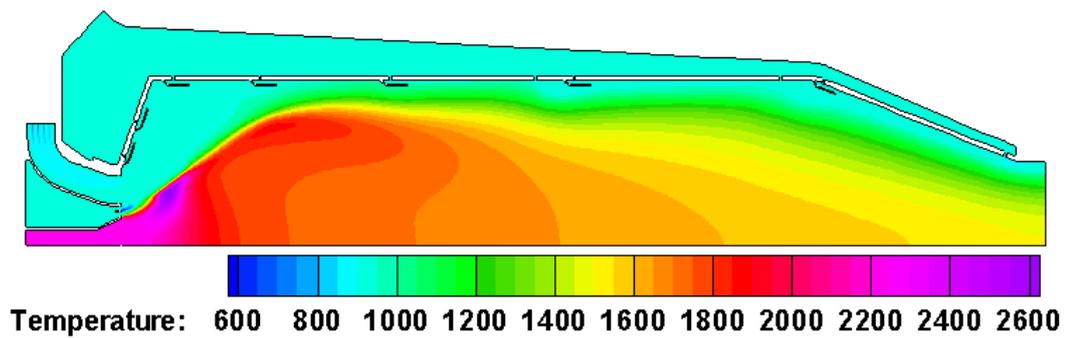
In Tabella 5.3-5 è riportato il confronto tra le diverse condizioni operative in termini di proprietà medie in uscita al combustore. Nelle condizioni di carico nominale, il 10% della portata di combustibile viene inviata alla linea *pilot*, mentre al 60% del carico nominale ne viene inviata circa il 36,5%. In condizioni di *EGR* si registra un rilevante incremento del rapporto di equivalenza globale; ciò è dovuto alla diluizione dell'aria comburente con specie inerti e al contemporaneo aumento della portata di combustibile necessario per ottenere la medesima potenza meccanica in uscita.

Proprietà medie sulla superficie di uscita del combustore					
		Temperatura statica	concentrazione di NO	concentrazione di CO	concentrazione di CH ₄
		K	Molare su base secca [ppm]		
P110	EGR0	1181	69,5	121	417
	EGR65	1203	3,99	182	646
P66	EGR0	997	52,9	208	1632
	EGR65	1032	7,9	264	1822

Tabella 5.3-5

Entrambe le condizioni operative prese in considerazione sembrano trarre vantaggio dal ricircolo degli incombusti, come confermato dalla riduzione delle emissioni di ossido di azoto. Tuttavia si registra un incremento apprezzabile dell'emissioni di incombusti dovuto sia al minor tenore di ossigeno che alle temperature massime più basse.

Le distribuzioni di temperatura mostrate nelle Figura 5.3-15 e Figura 5.3-16 confermano che l'adozione del ricircolo degli esausti determina un andamento più dolce.



P110 EGR65

Figura 5.3-15

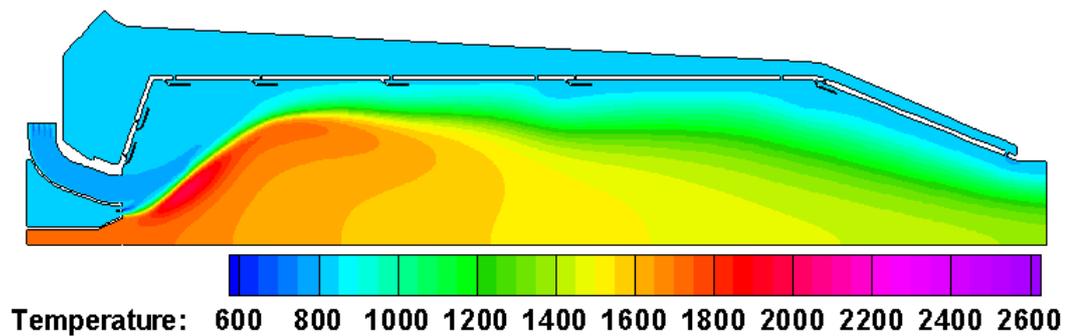
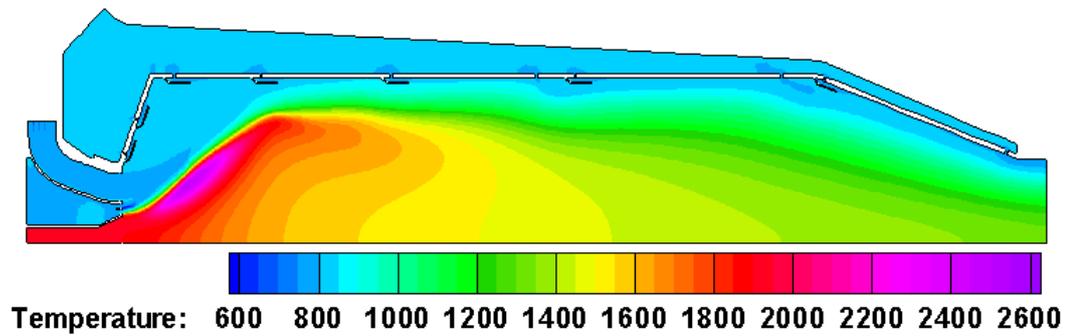
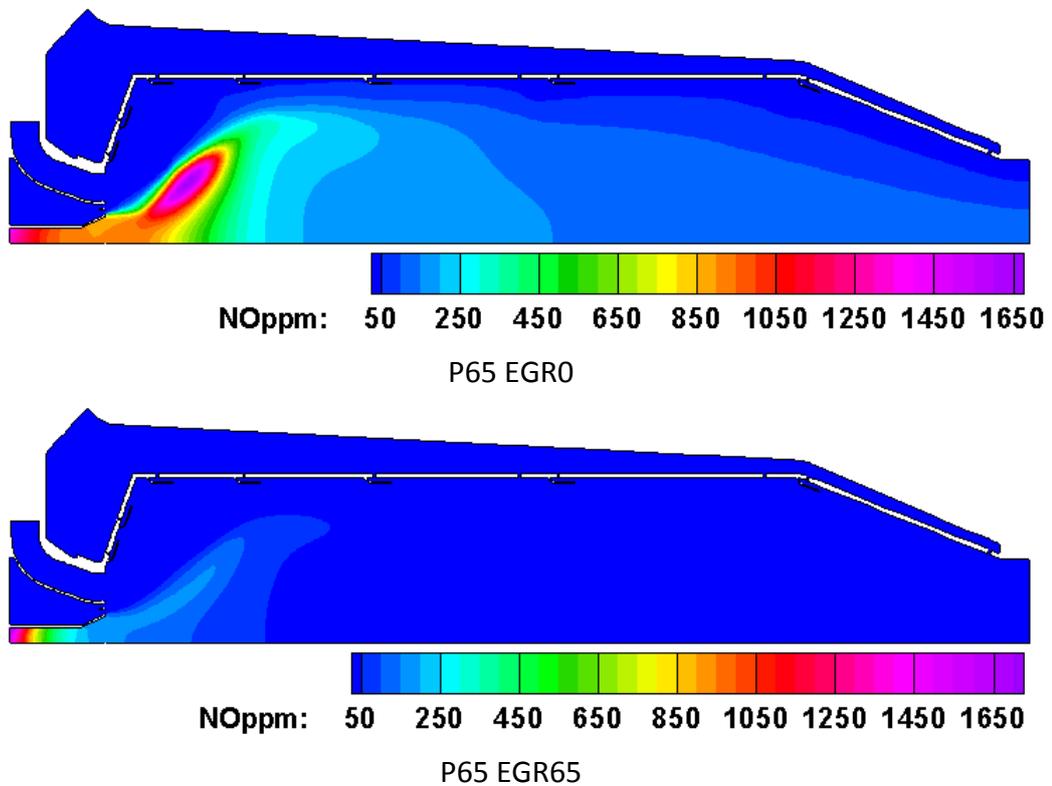


Figura 5.3-16

In Figura 5.3-17 si riportano, invece, le distribuzioni di NO_x nel dominio computazionale per il 60% del carico in assenza di *EGR* e con *EGR* pari al 65%.

*Figura 5.3-17*

Come ulteriore prova della capacità dell'*EGR* di ridurre drasticamente le emissioni di NO_x , si riportano in Tabella 5.3-6 i valori medi e di picco della velocità di formazione degli ossidi di azoto per i casi a carico nominale. La presenza di ricircolo determina un abbassamento dei valori medi e, soprattutto, dei valori massimi delle velocità di formazione delle specie coinvolte nei diversi meccanismi considerati.

Valori medi e massimi nel volume della velocità di formazione degli NO_x P110

	Valore	NO Termici kmole/(m ³ s)	NO di Fiamma kmole/(m ³ s)	N ₂ O kmole/(m ³ s)
EGRO	Medio	3.25×10^{-4}	2.93×10^{-6}	3.43×10^{-5}
	Massimo	1.60×10^{-1}	2.52×10^{-3}	1.60×10^{-3}
EGR 65	Medio	1.62×10^{-5}	1.02×10^{-6}	8.82×10^{-7}
	Massimo	3.64×10^{-3}	4.67×10^{-4}	3.25×10^{-4}

Tabella 5.3-6

5.3.2.2 RISULTATI FLAMELET

In questo paragrafo viene presentato il confronto tra il caso in assenza di ricircolo dei gas combusti e quello con EGR pari al 65% considerando come modello di combustione il modello *flamelet*. Inizialmente è stato effettuato un confronto tra il modello FRED e quello FLAM. Nelle figure che seguono possiamo osservare il confronto tra i due modelli in termini di profili assiali dell'intensità di turbolenza, delle velocità di reazione e delle temperature. Tali andamenti assiali sono stati ricavati tagliando il dominio computazionale lungo linee in corrispondenza del condotto *main* e di quello *pilot*.

È interessante osservare che in entrambi i modelli la distribuzione dei parametri della turbolenza (Figura 5.3-18) presentano un picco iniziale, vicino alla zona di reazione primaria, seguito da una diminuzione legata alla zona di diluizione della miscela con il flusso di aria principale. Questo tipo di distribuzione, che non presenta sostanziali differenze tra i due modelli adottati, influenza lo sviluppo del processo di combustione.

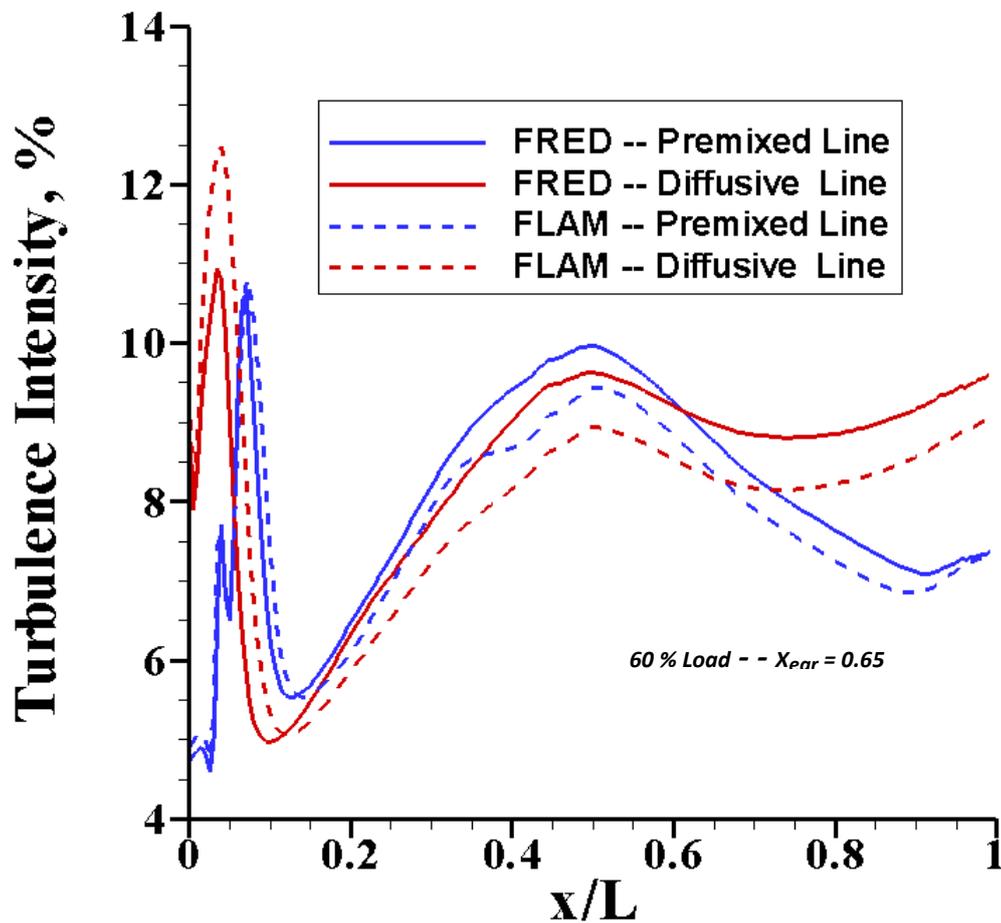


Figura 5.3-18

Dall'esame della Figura 5.3-19 possiamo osservare che le velocità di reazione calcolate con il modello *FRED* e le velocità di formazione dei prodotti predette dal modello *FLAM* risultano in perfetto accordo con l'andamento dei livelli di turbolenza.

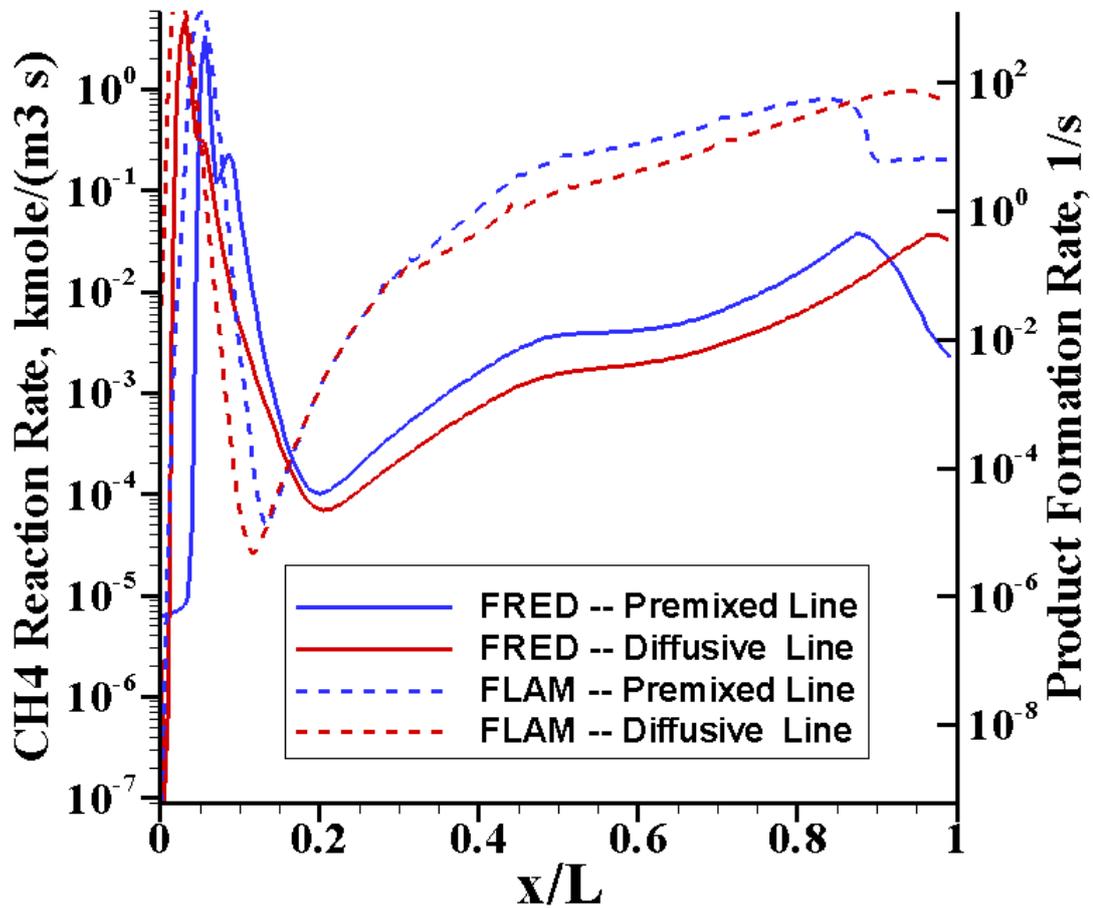


Figura 5.3-19

Inoltre si nota che le due quantità risultano qualitativamente in accordo. Ciò rappresenta un incoraggiante conferma circa la possibilità che la combustione possa svilupparsi in modo corretto anche in presenza di una rilevante carenza di ossigeno. Segni di tale accordo qualitativo si possono leggere anche nell'andamento dei profili di temperatura mostrati in Figura

5.3-20, sebbene si verifichi un abbassamento sistematico dei picchi di temperatura nel modello *flamelet*.

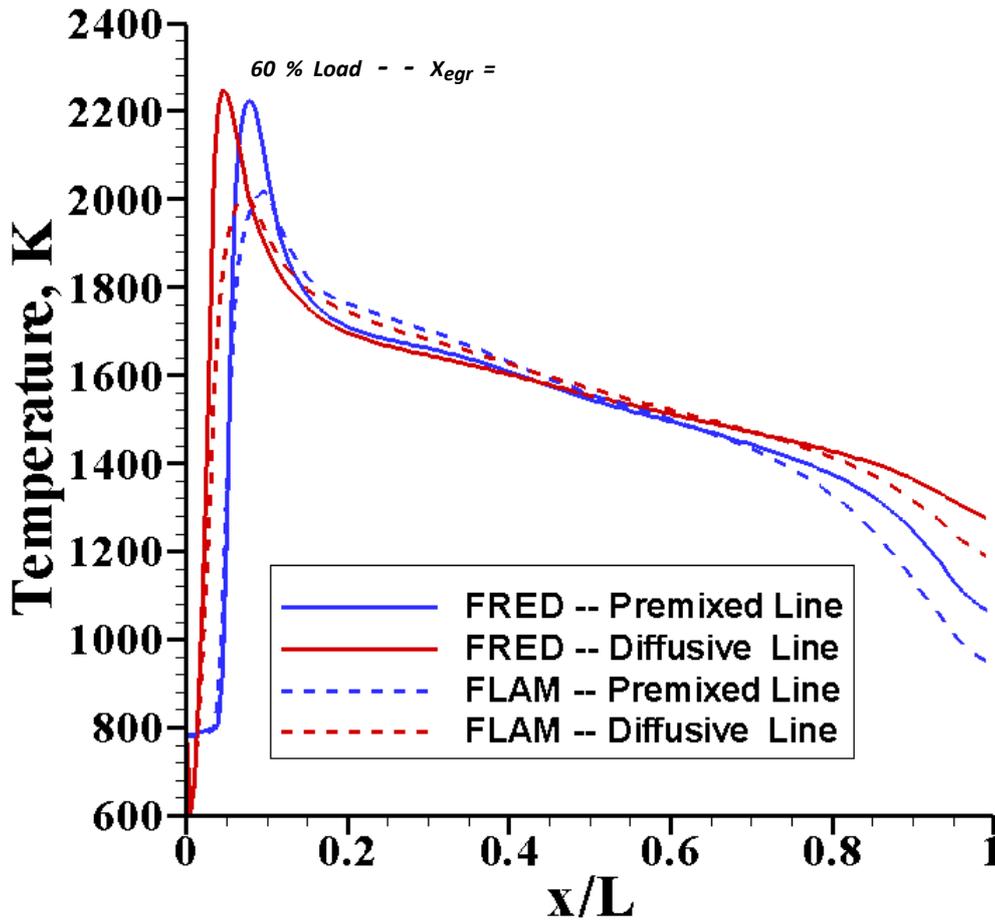


Figura 5.3-20

Sulla base delle indicazioni così ottenute, di seguito si presentano i risultati delle simulazioni *CFD* con il modello *flamelet* dei casi a carico parziale focalizzando l'attenzione sugli effetti del ricircolo dei gas combusti.

Le distribuzioni di temperatura nel dominio computazionale (Figura 5.3-21) confermano l'andamento ottenuto mediante il modello FRED. Inoltre, è possibile apprezzare sia la riduzione dei picchi di temperatura sia una più dolce variazione della stessa fino all'uscita del combustore. Ciò dimostra che l'impiego dell'*EGR* conduce a regimi di combustione molto prossimi alla combustione *MILD*.

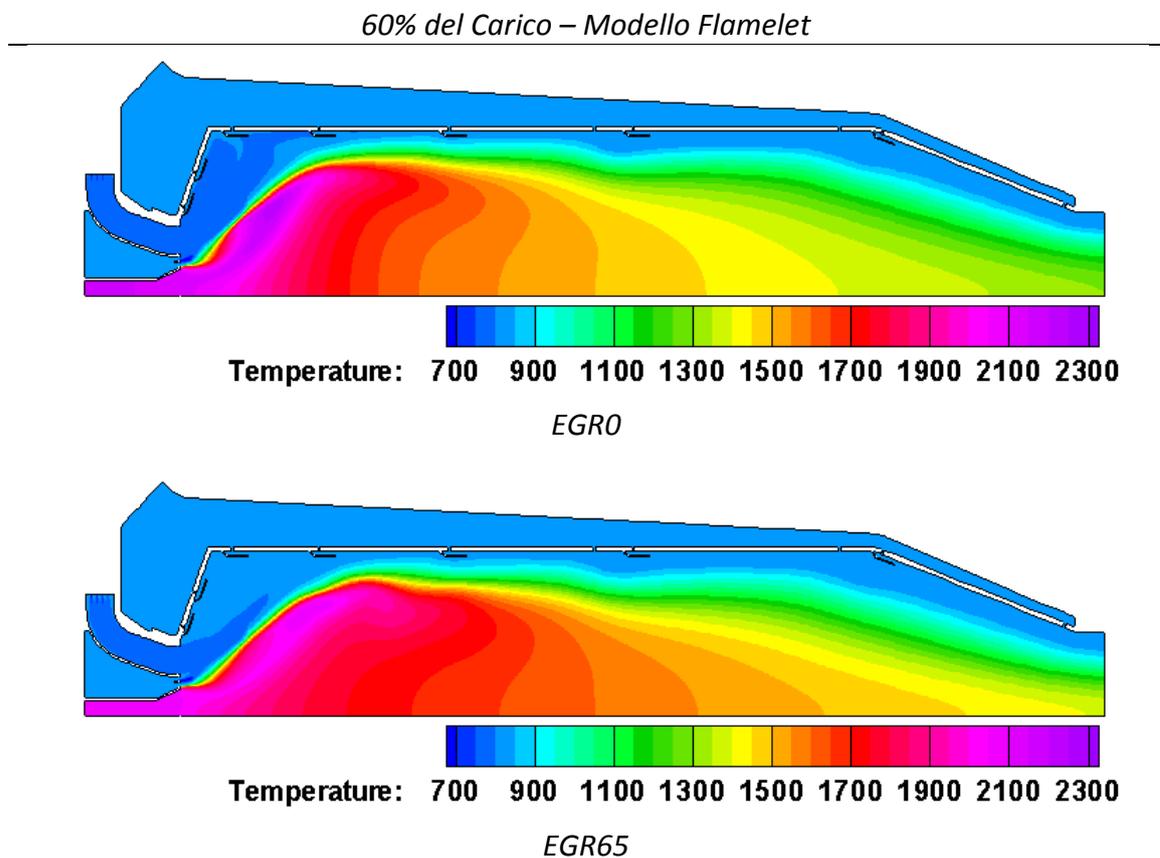


Figura 5.3-21

In Figura 5.3-22 sono riportati i profili della velocità laminare di fiamma, il cui andamento dipende dalla frazione di miscelamento e dalla composizione dell'ossidante. La presenza di ricircolo dei gas combusti determina, in virtù della riduzione della concentrazione di ossigeno, una drastica riduzione della velocità laminare di fiamma a partire dalla zona primaria del combustore.

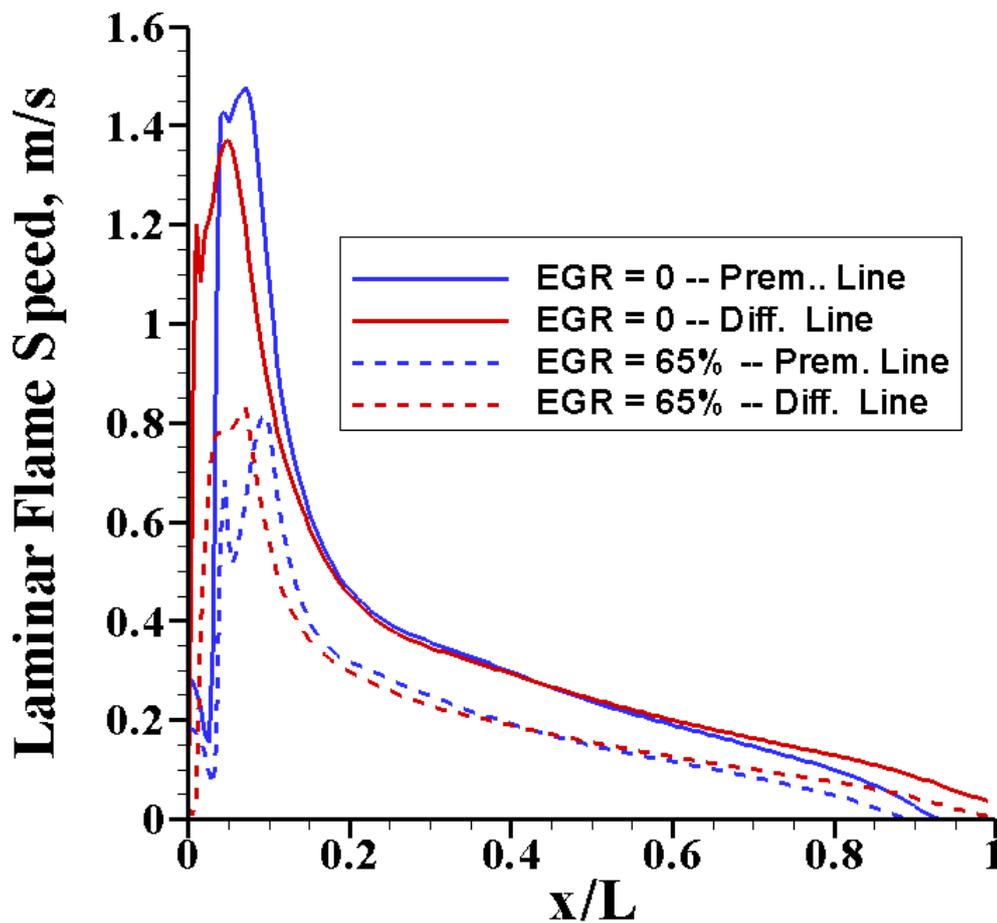


Figura 5.3-22

I valori effettivi della velocità di fiamma, tuttavia, risultano corretti dagli effetti della turbolenza (Figura 5.3-23). Infatti l'andamento della velocità turbolenta di fiamma risulta influenzata sia dal profilo della velocità laminare che dai livelli di turbolenza locali. Ciò spiega il persistere di livelli significativi della velocità di fiamma lungo la maggior parte dello sviluppo del flusso.

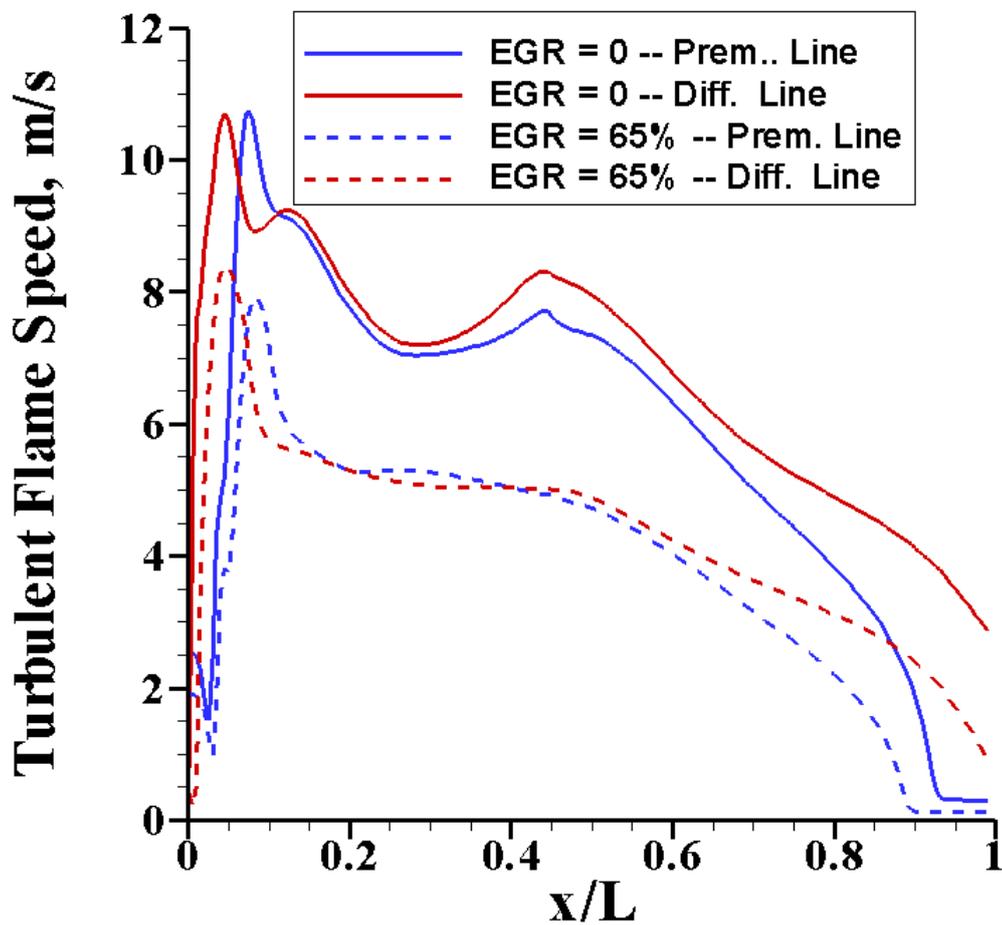


Figura 5.3-23

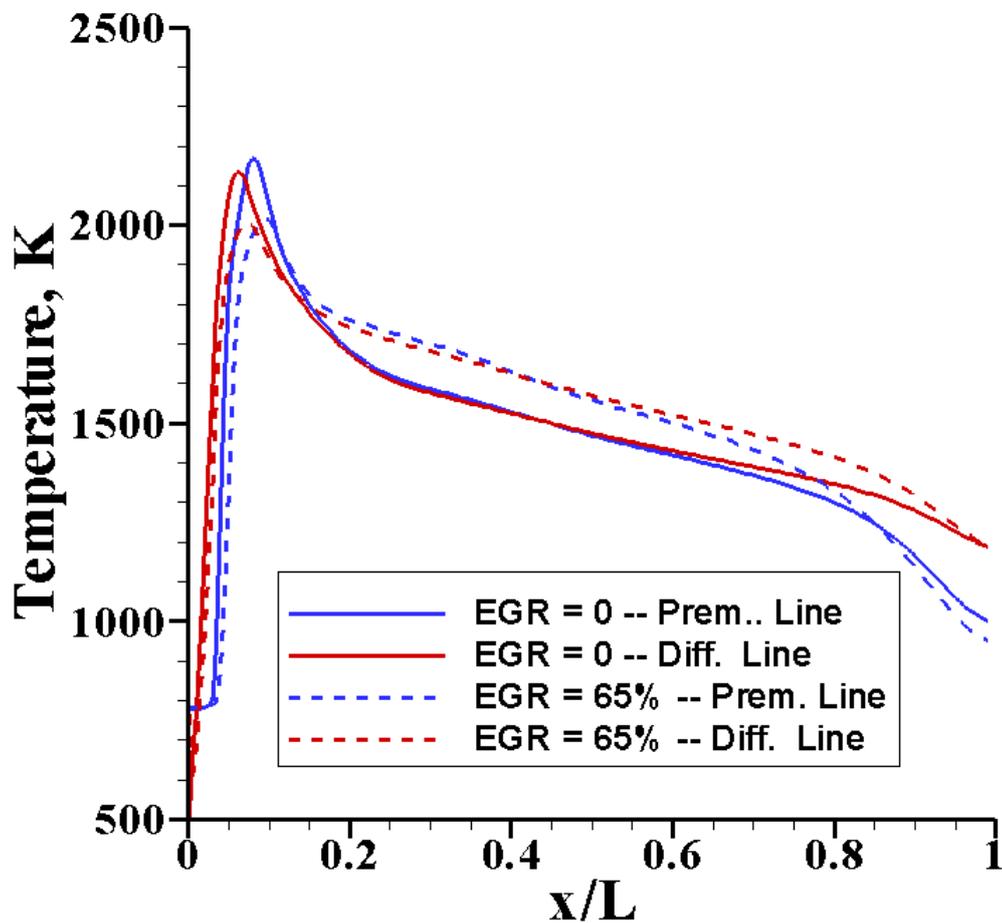


Figura 5.3-24

Il confronto diretto delle distribuzioni assiali della temperatura (Figura 5.3-24) senza *EGR* e con *EGR* 65% sottolinea che la soluzione proposta è in grado di produrre profili più piatti, prossimi a quelli della combustione *MILD*. Diretta conseguenza è la riduzione della formazione degli ossidi di azoto termici (FIGURA) nel caso di *EGR* 65% nella zona di maggiore interesse, la zona primaria del combustore, mentre i valori più elevati nella zona secondaria e in quella di diluizione in pratica producono degli effetti trascurabili.

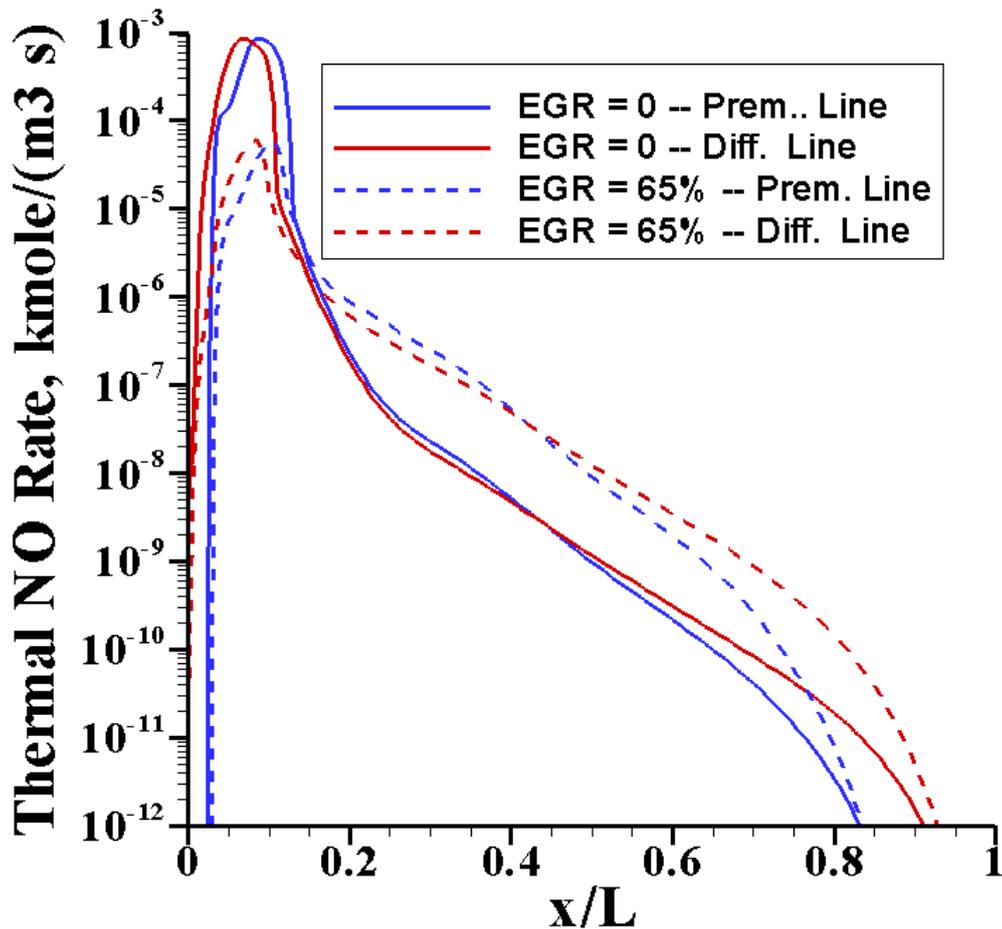


Figura 5.3-25

Possiamo concludere, dunque, che l'utilizzo del modello *flamelet* risulta in buon accordo con i risultati suggeriti da altri modelli, in termini del raggiungimento di una combustione più dolce mediante l'utilizzo del ricircolo degli esausti. E inoltre tale modello conferma che la combustione procede in maniera efficiente anche in presenza di *EGR*.

CAPITOLO 6: STUDIO DI UN MOTORE DIESEL

6.1 INTRODUZIONE

L'interesse verso la tecnologia *HCCI*, ha spinto molte case costruttrici e istituti universitari ad intraprendere campagne sperimentali e numeriche per studiare il comportamento di motori già esistenti al variare delle condizioni operative, in particolare del tasso di ricircolo dei gas combusti (*EGR*), e della geometria dei condotti di aspirazione. L'attività è stata condotta sul motore Diesel BMW al banco presso il centro ricerche CVIT-Bosch di Modugno (in Figura 6.1-1 è riportata la fotografia del motore monocilindrico), mediante tecniche di CFD. Il solutore utilizzato in questo caso è il solutore "strutturato" KIVA-3V.



Figura 6.1-1

6.2 LA CAMERA DI COMBUSTIONE DEL MOTORE BMW

In Figura 6.2-1 è rappresentata la camera di combustione del motore BMW-Bosch comprensiva di parte dei sistemi di aspirazione e di scarico e delle valvole, mentre in Tabella 6.2-1 se ne riportano i dati caratteristici e in Figura 6.2-2 le leggi di alzata delle valvole.

Valvole	2 aspirazione 2 scarico
Alesaggio	84 mm
Corsa	90 mm
Biella	136 mm
Cilindrata	499 cm ³
Rapporto di compressione geometrico	16

Tabella 6.2-1

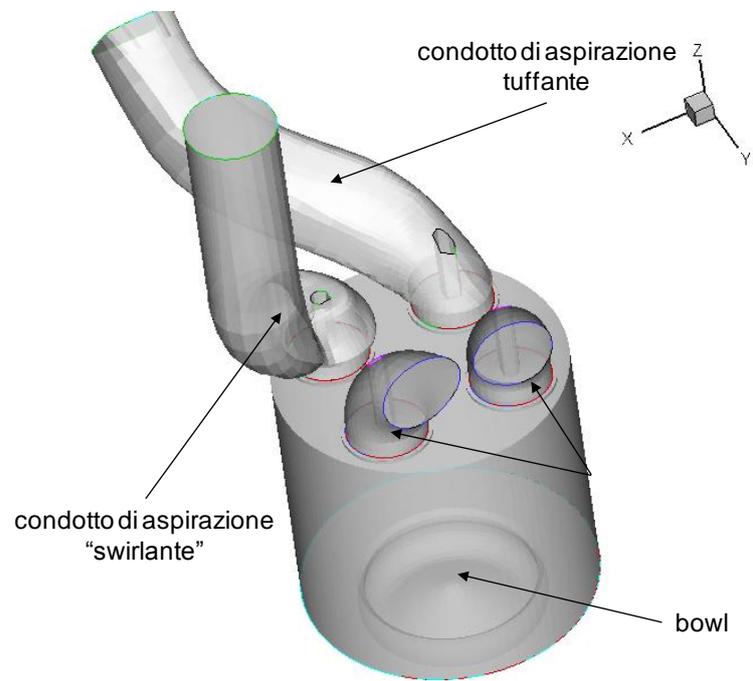


Figura 6.2-1

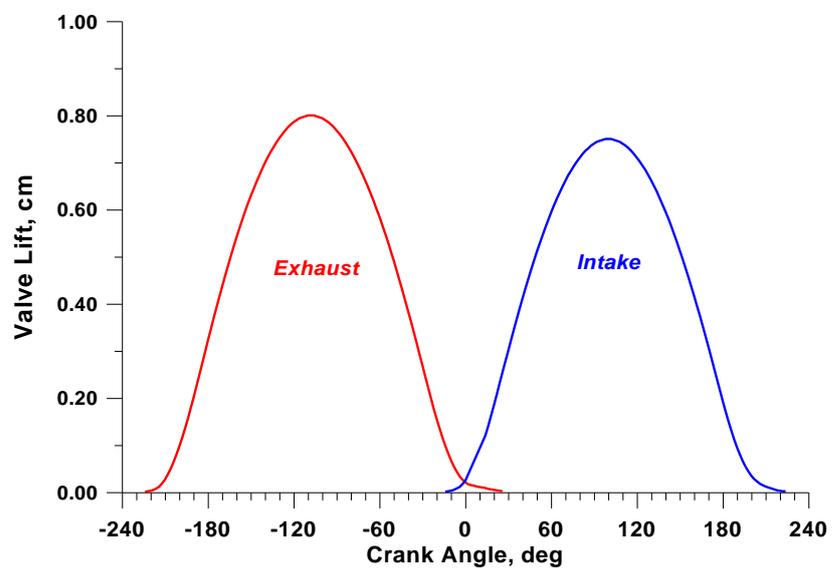


Figura 6.2-2

6.3 METODOLOGIA DI ANALISI

Come nel caso del combustore Ansaldo, per determinare le condizioni al contorno da immettere nel solutore è stato utilizzato un codice di calcolo, sviluppato presso il DIME, per la simulazione monodimensionale del motore. Il codice è in grado di simulare sia il monocilindro che l'intero motore, un sei cilindri BMW, in cui è inserita la camera di combustione in oggetto.

6.3.1 ANALISI MONODIMENSIONALE

Per effettuare l'analisi monodimensionale di un motore alternativo è necessario in primo luogo schematizzare tutto il sistema. Come già accennato il motore in oggetto è un 6 cilindri BMW diesel common rail sovralimentato a gas di scarico. Il sistema è provvisto di una valvola *EGR* e di una valvola a farfalla per variare con continuità la massa di gas combusti all'interno del cilindro. In Figura 6.3-1 si riporta lo schema del motore installato in una sala prova del centro CVIT. Di questo motore è stata effettuata una schematizzazione monodimensionale riportata in Figura 6.3-2 impiegata in 1dime per la simulazione termofluidodinamica. Lo schema parte dal compressore che è visto come condizione al contorno per il condotto di aspirazione A0 che rappresenta il collegamento fra il compressore e l'intercooler. Le condizioni termofluidodinamiche dell'aria in ingresso al condotto A0 sono ricavate dalle mappe del compressore che istantaneamente è in equilibrio dinamico con la turbina che costituisce la condizione al contorno del condotto S0.

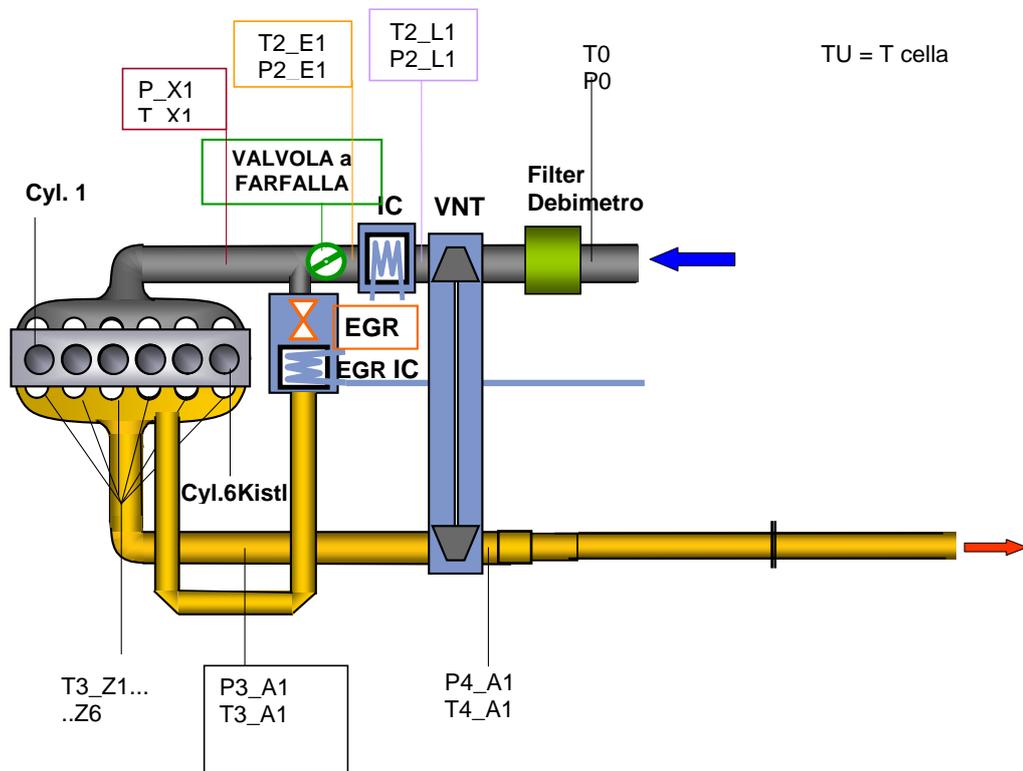


Figura 6.3-1

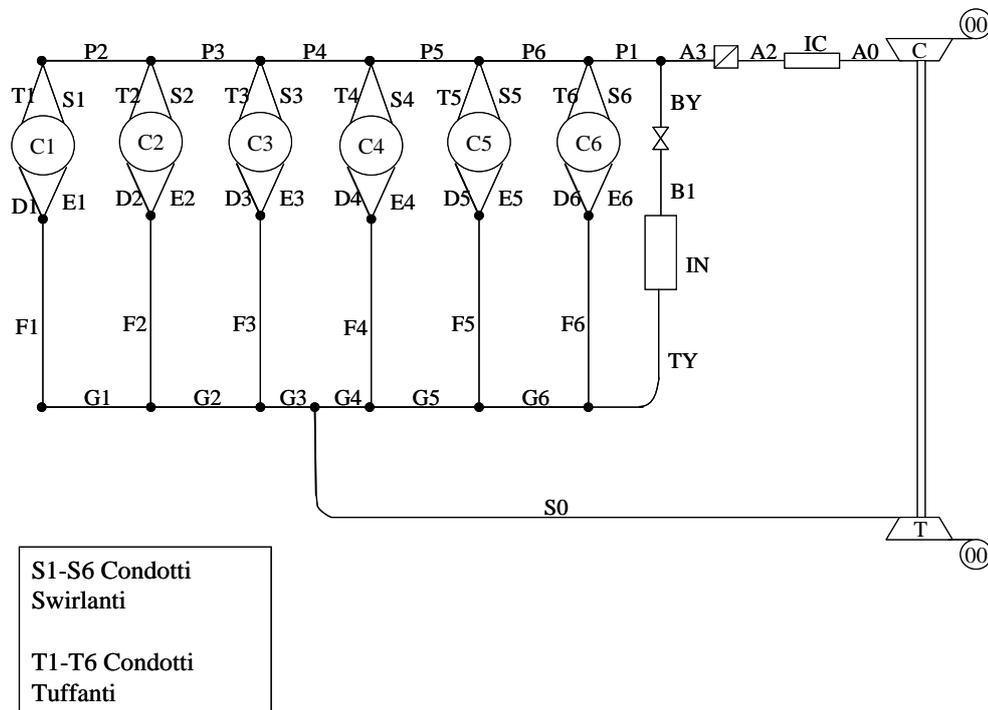


Figura 6.3-2 Schema 1D del Motore

Nel motore è presente una valvola a farfalla che nello schema 1D è simulata come una restrizione tra i condotti A3-A2. Classicamente in letteratura[14, 15] la valvola a farfalla causa una perdita di carico adiabatica calcolata con un coefficiente introdotto esternamente. Questo approccio non tiene conto della reale geometria del corpo farfallato e crea delle instabilità numeriche. Il modello utilizzato in 1dime e proposto di recente al congresso SAE del 2001 di Detroit [16], utilizza una schematizzazione geometrica della valvola riportata in Figura 6.3-3

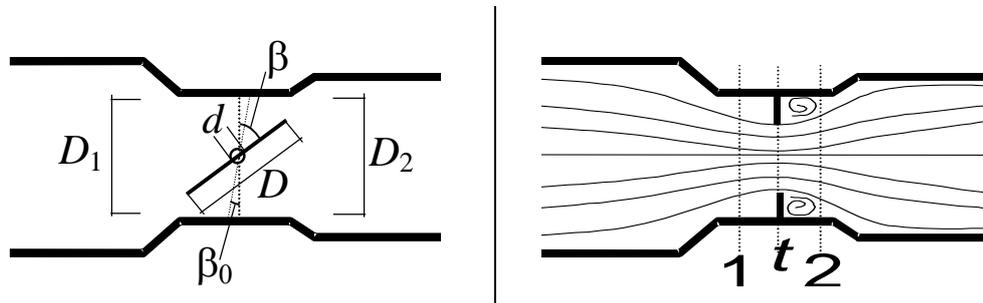


Figura 6.3-3 – Schematizzazione geometrica della valvola a farfalla

L'angolo di apertura della valvola a farfalla, β , è utilizzato per stimare l'effettiva area di passaggio, A_t , come una funzione delle caratteristiche geometriche del corpo [17]:

$$A_t = c_d \frac{\pi D^2}{4} \left[(1-b) + \frac{2}{\pi} \left(\frac{a}{b} \sqrt{b^2 - a^2} - b \cdot \arcsin \frac{a}{b} - c \right) \right]$$

$$a = \frac{d}{D} \quad b = \frac{\cos \beta}{\cos \beta_0} \quad c = a \sqrt{1 - a^2} + \arcsin a$$

Una volta stabilita la geometria della valvola a farfalla le perdite di carico vengono calcolate considerando il flusso isoentropico fino alla sezione di gola e a pressione costante nella successiva espansione o con un parziale recupero di pressione.

L'intero collettore del Plenum è invece schematizzato attraverso i condotti P1, P2, P3, P4, P5 e P6. Subito a valle del Plenum si è poi modellato l'interno testa attraverso i condotti Ti, Si, rispettivamente tuffanti e swirlanti per i quali

l'indice i assume il valore del cilindro caratteristico. I condotti di scarico invece, presenti per ogni cilindro C_i , saranno D_i ed E_i , ove per l'indice i vale quanto precedentemente affermato. I gas combusti, convogliati attraverso i condotti F_i nel collettore di scarico modellato attraverso i condotti G_1, G_2, G_3, G_4, G_5 e G_6 , in parte andranno al condotto di scarico S_0 per il quale la turbina rappresenta la condizione al contorno con l'ambiente esterno e in parte andranno verso la valvola EGR attraverso il condotto TY . I gas che verranno fatti ricircolare passeranno attraverso l'Intercooler IN e la valvola EGR che sono rispettivamente condizioni al contorno per i condotti $TY-B_1$ (Intercooler IN) e B_1-B_Y (valvola EGR).

Inoltre è stato schematizzato anche il motore monocilindrico (Figura 6.3-4 Schema 1D Monocilindro) di cui si riportano i risultati per una velocità di 2000 giri/min confrontati con le misure sperimentali (Figura 6.3-5). In Figura 6.3-6 e Figura 6.3-7 si riportano rispettivamente i dettagli della fase di alta e bassa pressione.

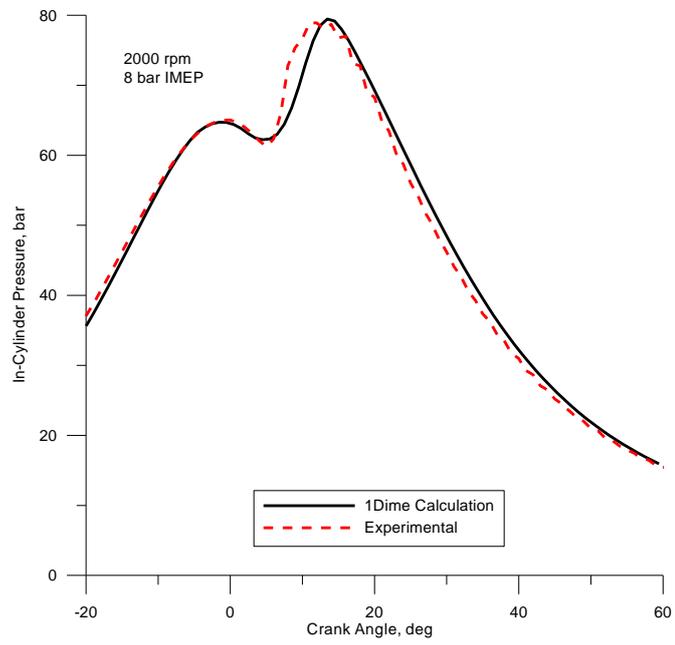


Figura 6.3-6

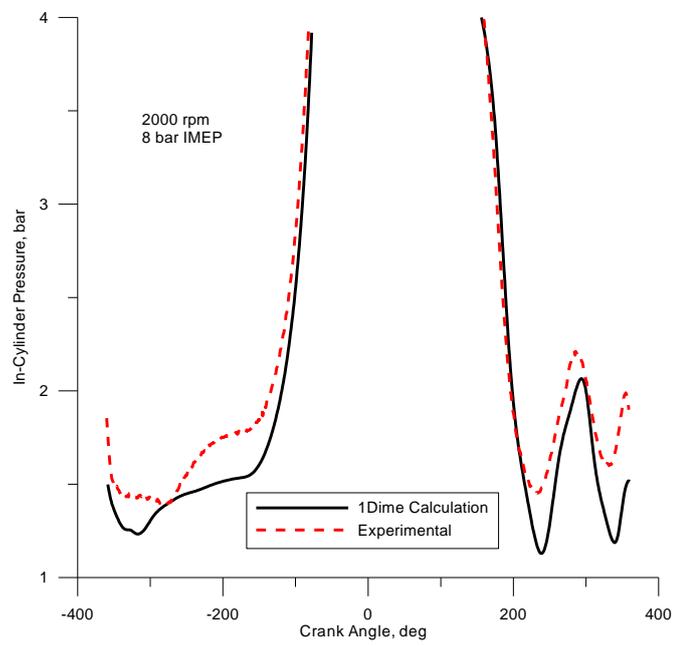


Figura 6.3-7

6.3.2 LE SIMULAZIONI *CFD*

Come già detto, le simulazioni *CFD* sono state condotte utilizzando il codice di calcolo termofluidodinamico KIVA-3V, sviluppato dai laboratori di *Los Alamos* proprio per i motori alternativi a combustione interna, opportunamente modificato ed implementato.

I processi fisici che intervengono all'interno di un motore alternativo ad accensione per compressione hanno carattere non stazionario periodico, eterogeneo, data la presenza contemporanea di numerose specie chimiche in più fasi (liquida e gas) e reagenti tra loro, e completamente tridimensionale. Inoltre, ci si trova a dover gestire un dominio computazionale mobile, che deve essere in grado di descrivere il moto del pistone.

Allo scopo di descrivere e la deformazione del dominio computazionale e la presenza contemporanea di più fasi, il codice KIVA-3V è stato progettato in modo che le equazioni della fluidodinamica, opportunamente arrangiate per tener conto dei diversi modelli fisici, vengano risolte secondo un approccio *euleriano-lagrangiano*. Da un lato tale approccio consente una gestione agile della griglia di calcolo potendo utilizzare passi temporali sufficientemente grandi. Dall'altro consente di seguire l'evoluzione delle particelle introdotte nel dominio.

In generale, i metodi *euleriani* si basano sul concetto di bilancio di grandezze estensive su volumi di controllo fissi nello spazio, determinando le proprietà del fluido che in un dato istante occupa quei volumi. Secondo l'approccio *lagrangiano*, invece, la soluzione è calcolata in funzione del tempo in punti non fissi dello spazio ma che si muovono assieme al fluido. In pratica tale

metodo mira a seguire la traiettoria di un punto o per meglio dire di una particella nel tempo e nello spazio.

Negli approcci misti *euleriano-lagrangiani* il dominio computazionale, che è in movimento, è ricoperto da una griglia euleriana, tenuta sotto controllo durante tutto il calcolo; nel contempo, la soluzione approssimata è calcolata su ogni nodo con metodo *lagrangiano* che permette di manipolare il numero di *Courant* e quindi il passo temporale e quello spaziale in modo da limitare gli errori numerici. In particolare, nel codice KIVA-3V le equazioni sono integrate numericamente secondo lo schema ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) o, per meglio dire, ICE-ALE (*Implicit Continuous-Fluid Eulerian*), che prevede una formulazione implicita operando con passi temporali notevolmente maggiori rispetto ad uno schema esplicito, con un'approssimazione alle differenze finite.

Inoltre, tale metodo permette di operare anche su confini arbitrariamente mobili. La formulazione implicita permette, inoltre, di trattare situazioni caratterizzate da velocità anche molto diverse tra loro, passando dal campo dell'incomprimibile a quello del comprimibile. Con tale metodo, la discretizzazione temporale è del primo ordine in avanti; quella spaziale si basa sul metodo dei volumi di controllo (celle di calcolo). Le grandezze termodinamiche sono calcolate al centro della cella e considerate uniformi in tutto il suo volume; quelle cinematiche (velocità) sono invece calcolate nei vertici della cella.

Per questo lavoro sono state generate due griglie, strutturate multi blocco conformi, a diverso infittimento: una da 70.000 nodi ed una da 170.000 nodi, di cui nelle figure seguenti sono riportate delle immagini. La convergenza dei

calcoli è stata valutata facendo eseguire al solutore un numero sufficiente di cicli motore.

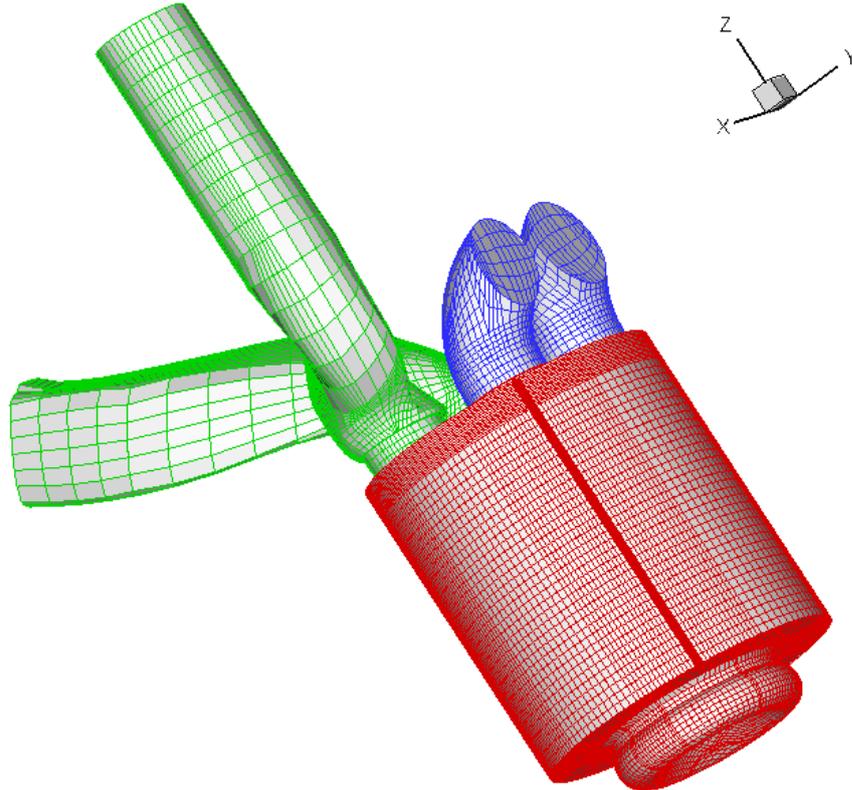


Figura 6.3-8 Mesh 170k al PMI

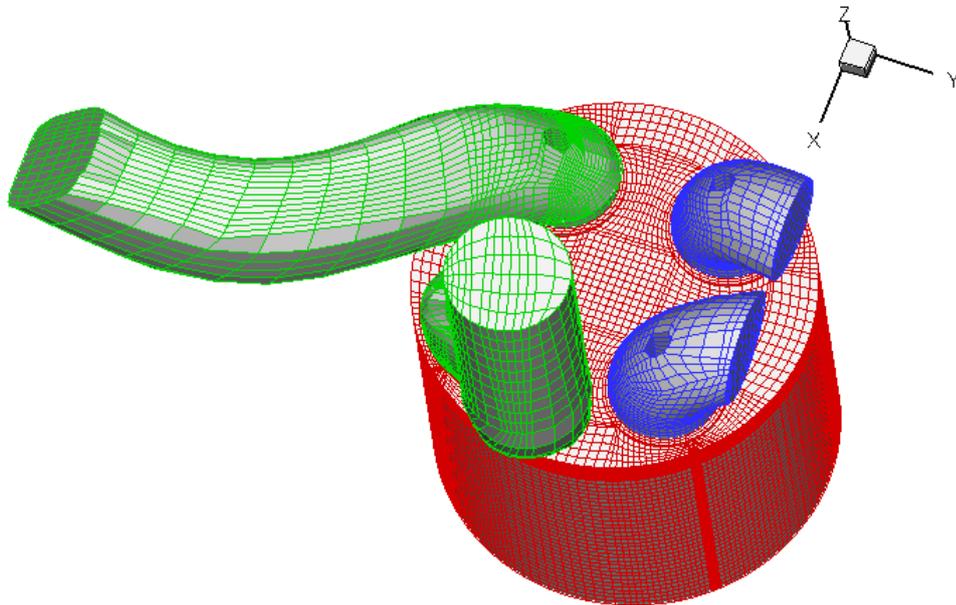


Figura 6.3-9 Mesh 170k vista dell'interno testa

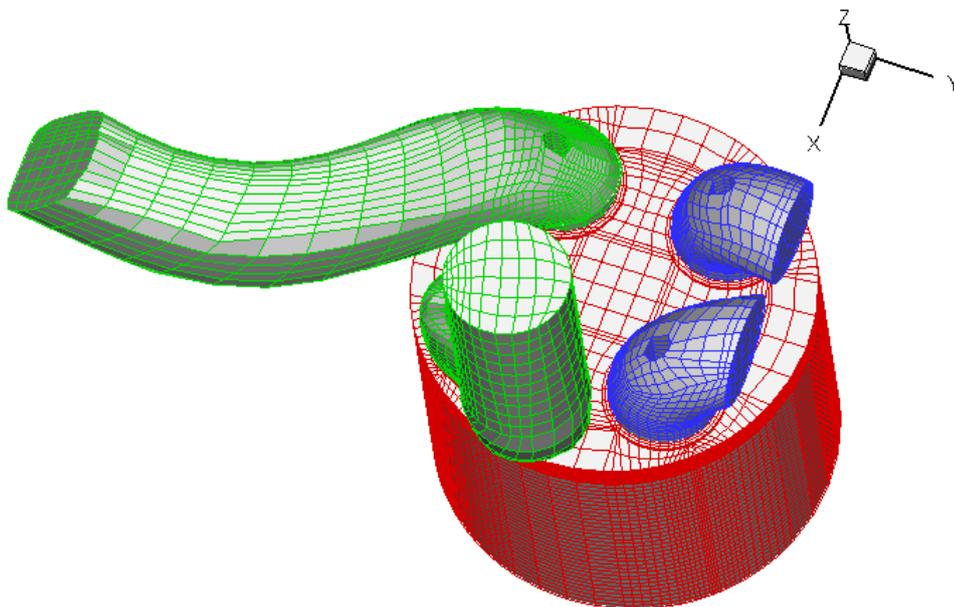


Figura 6.3-10 Mesh 70k vista dell'interno testa

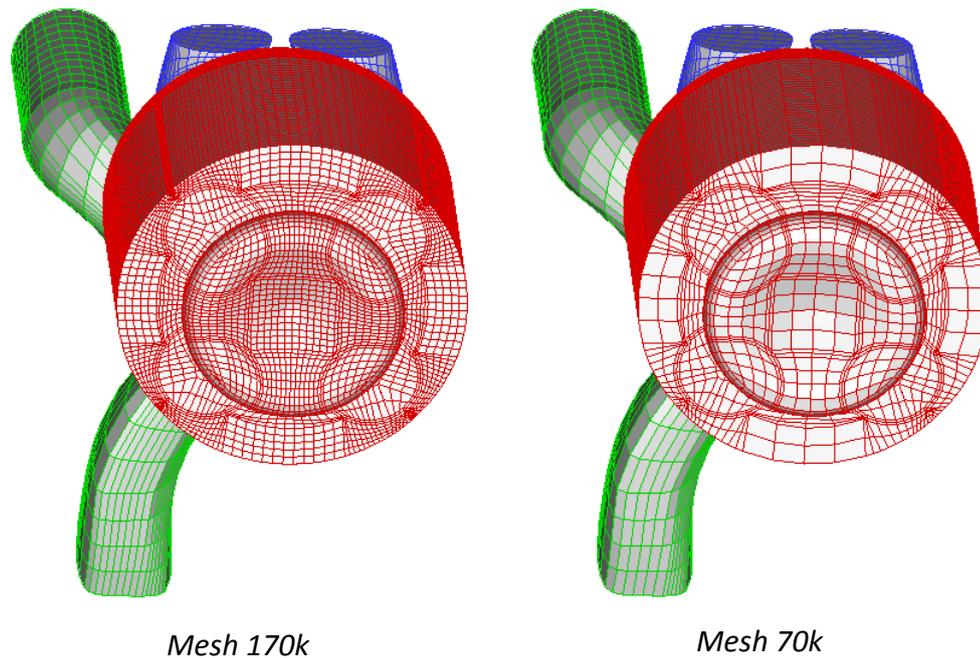


Figura 6.3-11 Cielo del Pistone

6.3.2.1 CONFIGURAZIONE BASE

Inizialmente sono stati eseguiti calcoli nella configurazione base, descritta precedentemente. In Figura 6.3-12 Pressione Indicata nei primi 4 cicli motore calcolati è riportata la storia di convergenza, in termini di ciclo indicato, per i due casi presi in considerazione (i quali differiscono esclusivamente per la pressione iniziale del cilindro): CASO A \rightarrow (d2w)– presi =1.32 bar; CASO B \rightarrow (p2w)– presi =1.42 bar. Invece, in Figura 6.3-13 è riportato il confronto tra i dati sperimentali e i due calcoli effettuati. Come modello di atomizzazione è stato utilizzato il Wave.

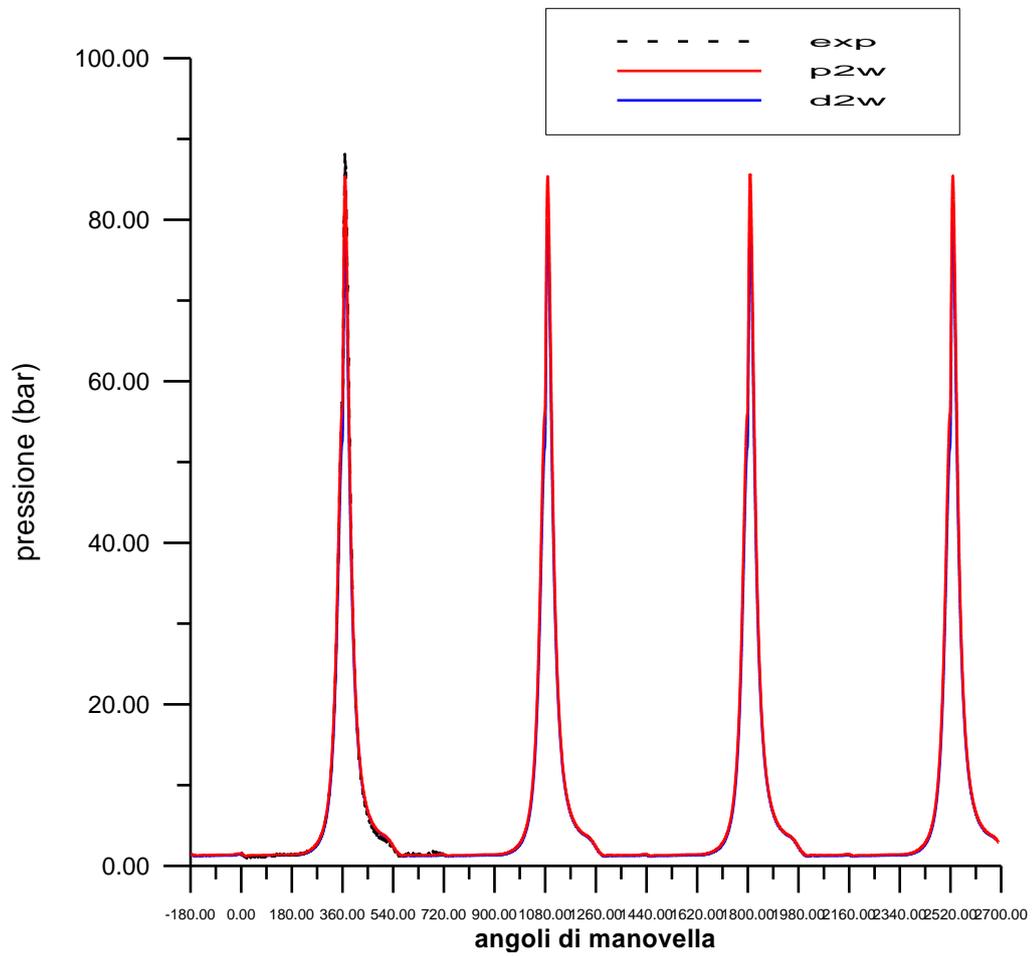


Figura 6.3-12 Pressione Indicata nei primi 4 cicli motore calcolati

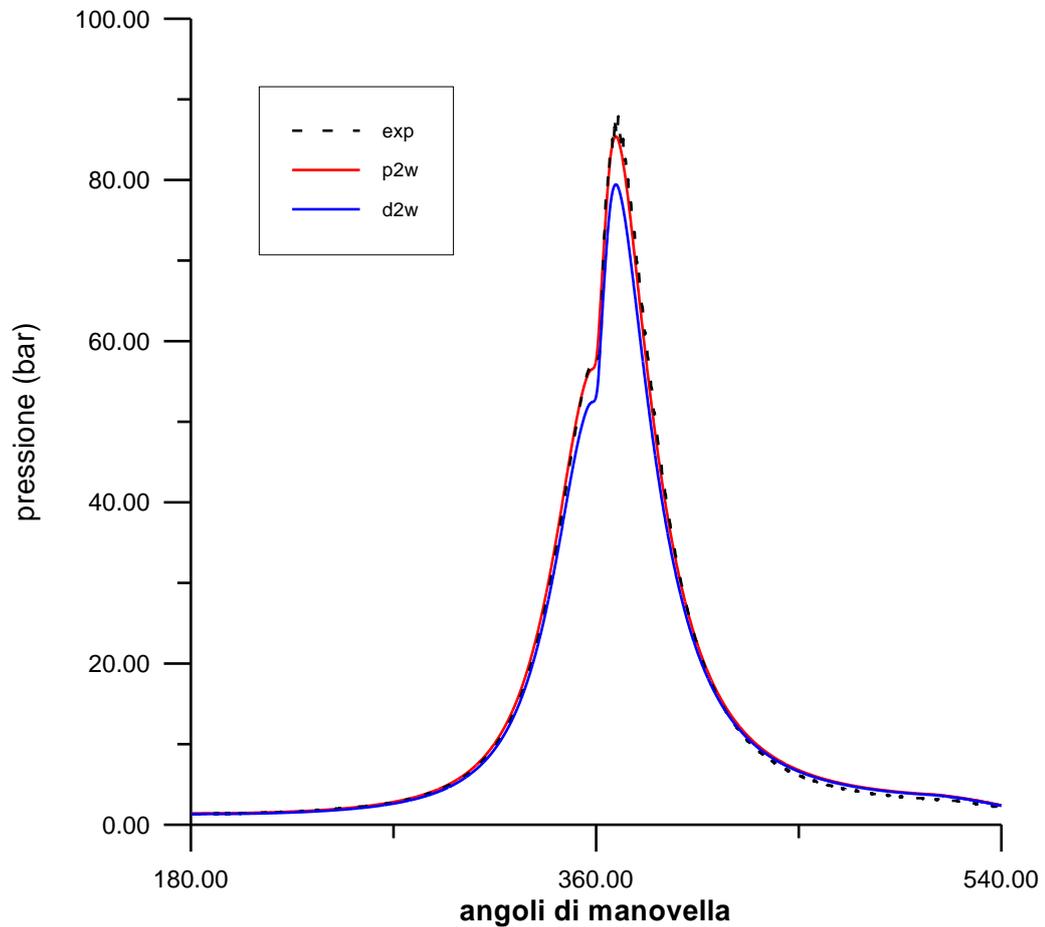


Figura 6.3-13

In Figura 6.3-14 sono riportate le distribuzioni di temperatura al PMS del quarto ciclo motore nei due casi considerati (*d2w* e *p2w*). Si nota che nel caso denominato *p2w*, essendo partiti da una pressione nel cilindro più elevata, si raggiunge un picco di temperatura maggiore (1700 °C contro i 1640 °C nel caso *d2w*).

In Figura 6.3-15 sono riportate le distribuzioni di CO nel piano centrale della camera di combustione per i due casi considerati. È possibile notare come i valori di CO siano nettamente inferiori nel caso *p2w*.

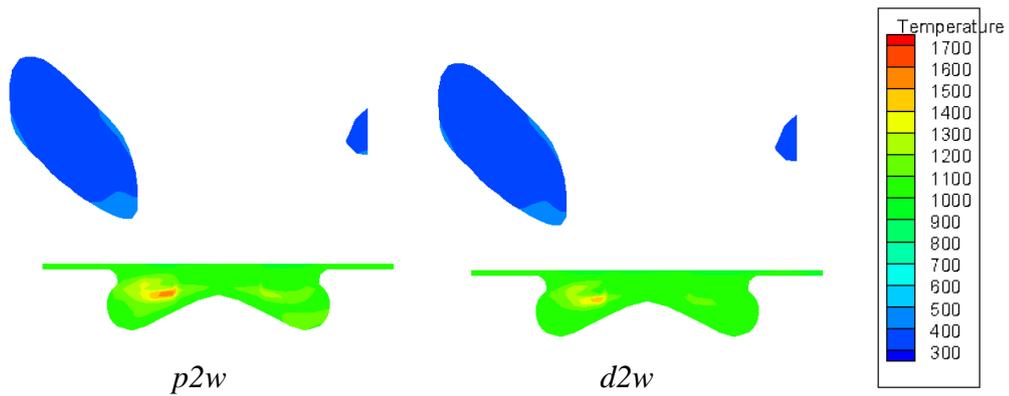


Figura 6.3-14

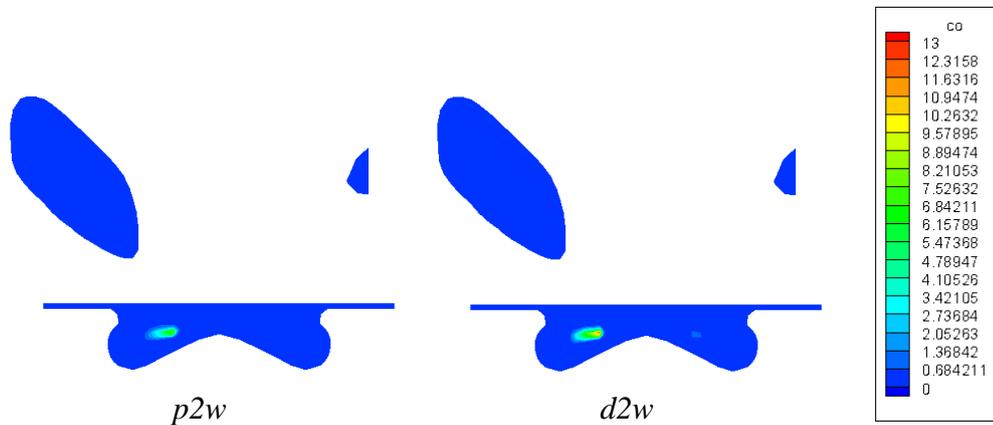


Figura 6.3-15

In Figura 6.3-16 è descritto lo sviluppo delle spray di combustibile al PMS ossia dopo 6 gradi dallo start di iniezione.

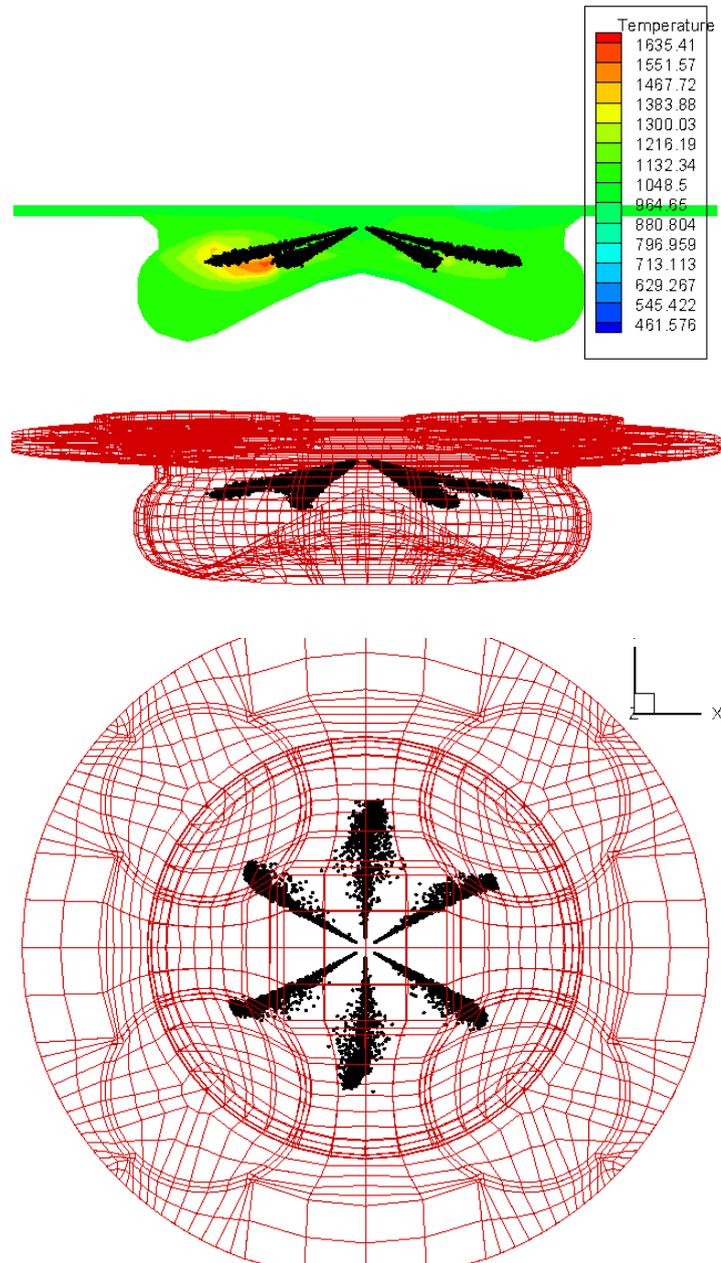


Figura 6.3-16

Per completezza si riporta nelle Figura 6.3-17 e Figura 6.3-18 il confronto tra due diverse velocità di rotazione nel caso $p2w$.

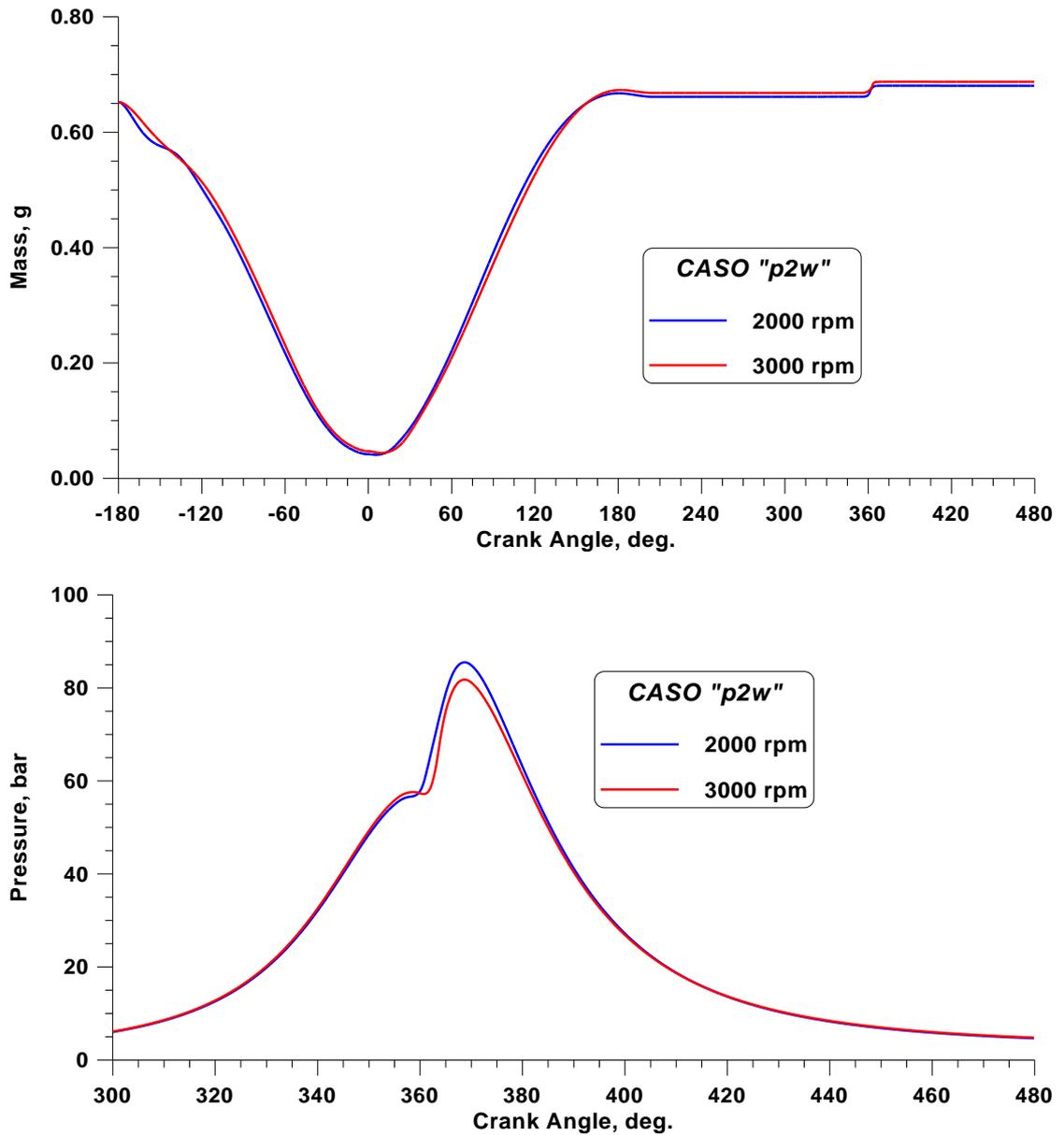


Figura 6.3-17

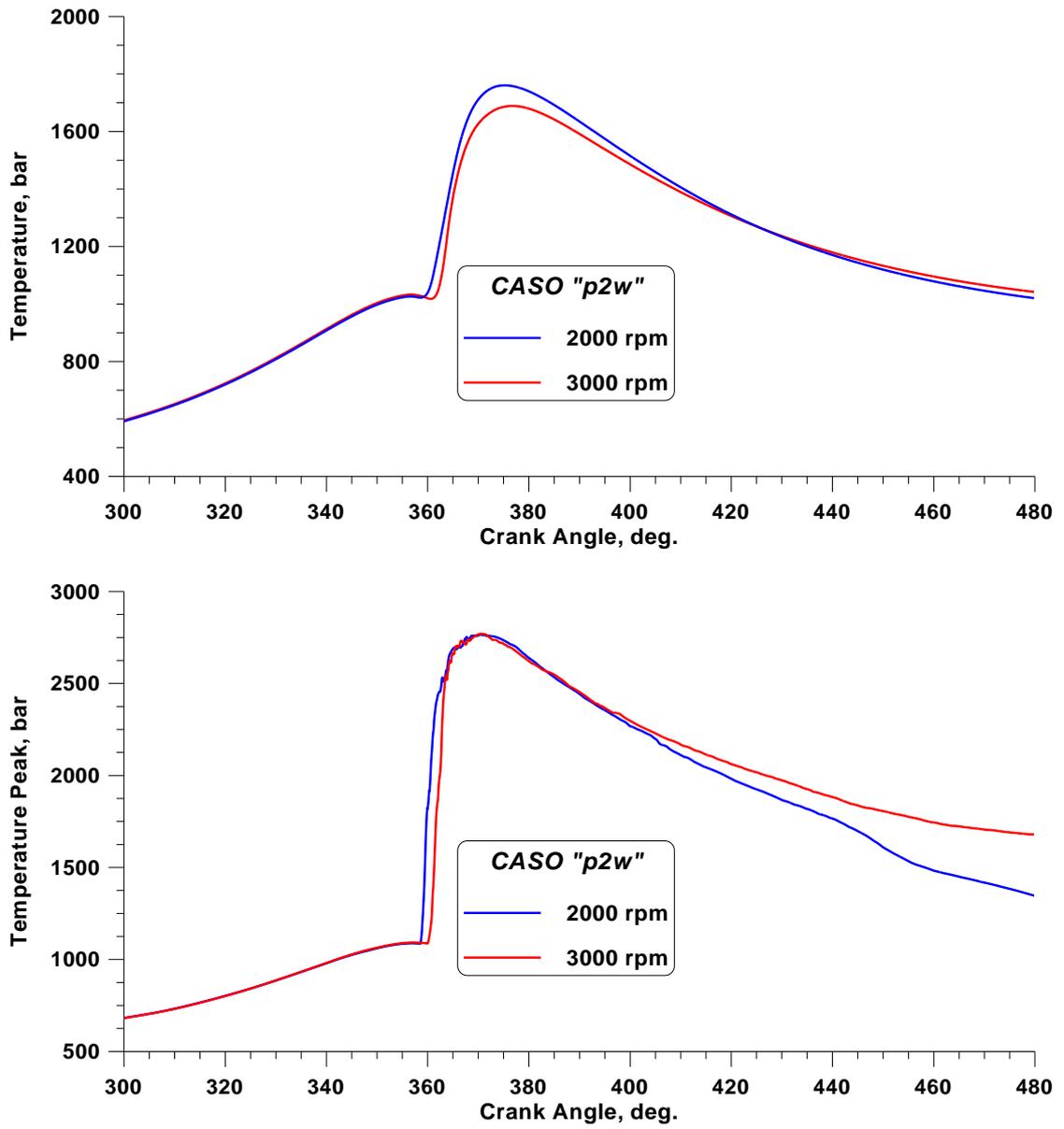


Figura 6.3-18

6.3.2.2 COMPORTAMENTO IN *EGR*

Una seconda fase di studio ha previsto la determinazione del comportamento del motore al variare del ricircolo dei gas combusti (*EGR*), quale studio preliminare per l'introduzione della tecnologia *HCCI*. Le condizioni operative prese in considerazione sono riportate in Tabella 6.3-1.

Condizioni Operative delle Prove Sperimentali	
Velocità del Motore	2000 giri/min
Massa di Combustibile Iniettata per Ciclo	2,2e ⁻² g
Pressione di Iniezione	da 1450 a 1650 bar
Tasso di EGR	0%
	27%
	57%

Tabella 6.3-1

La presenza di forti tassi di *EGR* modifica radicalmente la forma della curva di pressione, ritardando l'inizio della combustione. E' stato allora necessario mettere a punto il modello di atomizzazione (responsabile del ritardo fisico) in modo che fosse in grado di simulare situazioni di combustione piuttosto anomali. Sono state tarate opportunamente le costanti del modello di onda superficiale (modello *WAVE*), responsabili del tempo di *break-up*, per riprodurre delle curve di pressione indicata quanto più prossime a quelle sperimentali. Si è introdotto, inoltre, un modello ibrido di atomizzazione (*KHRT*) sicuramente più adatto a riprodurre iniezioni ad alta pressione, tipiche dei moderni motori *Diesel*

Common Rail. Tale modello, inoltre, ha dimostrato di essere meno sensibile alla griglia di calcolo utilizzata.

In Figura 6.3-19 si riportano gli andamenti della pressione calcolati per il 1° ciclo del motore, al variare della costante di tempo di *break-up* B_1 nel caso di assenza di *EGR*. Il valore di B_1 pari a 5 sembra riprodurre una curva calcolata molto prossima a quella sperimentale.

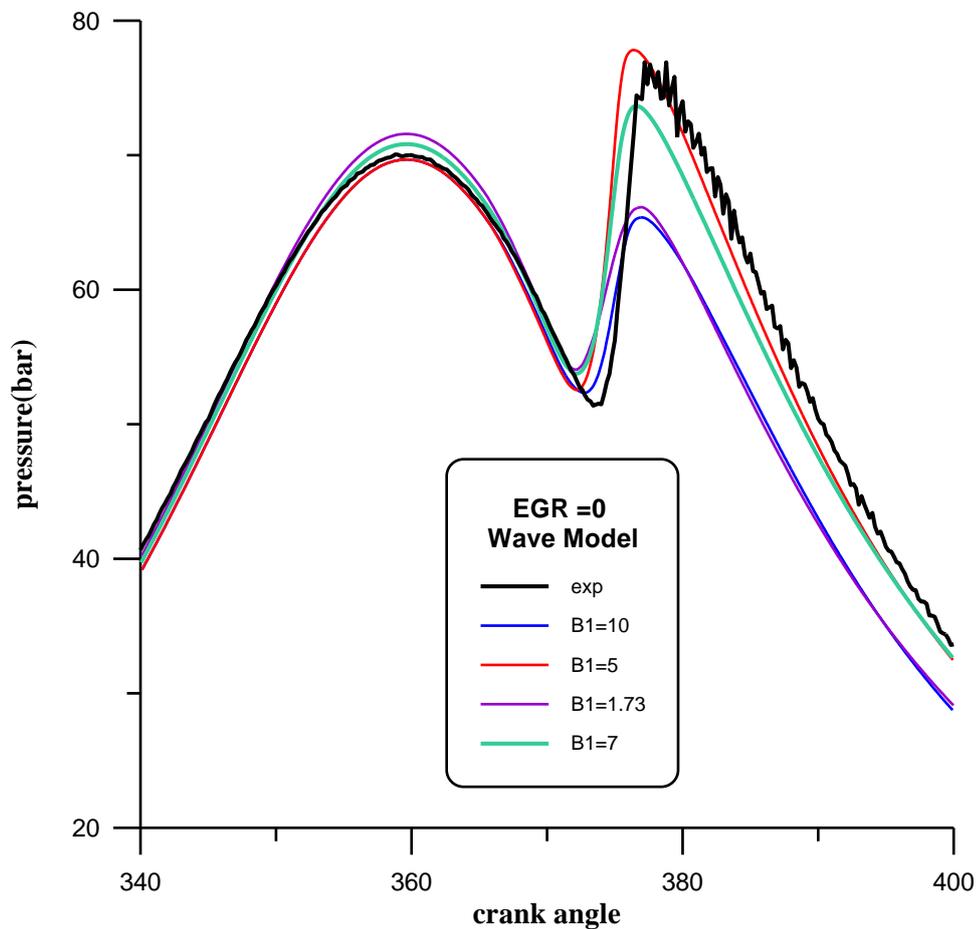


Figura 6.3-19 Ciclo Motore: 1

Tuttavia la situazione ai cicli motore successivi si presenta differente: la curva di pressione assume valori e andamenti diversi con ritardi all'accensione variati a parità di condizioni di calcolo (Figura 6.3-20).

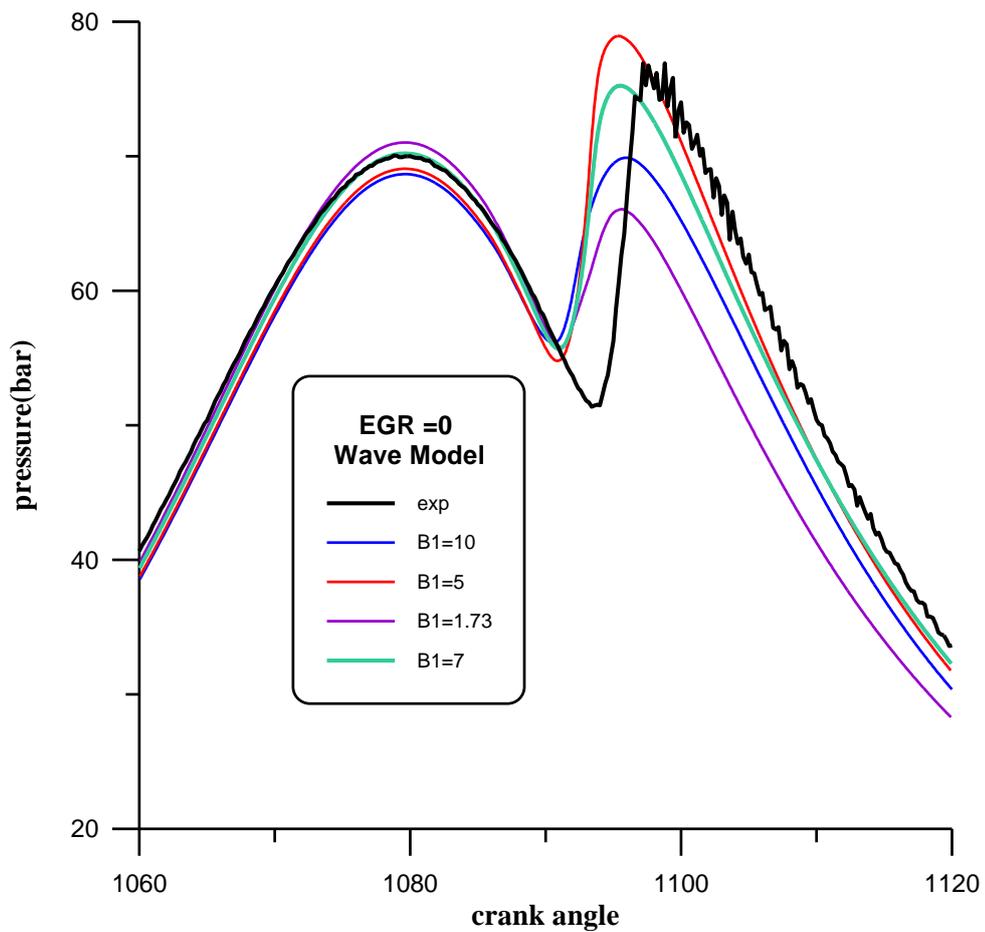


Figura 6.3-20 Ciclo Motore: 3

In Figura 6.3-21 è riportato l'andamento della pressione, a cavallo del PMS, in cui si possono vedere i primi effetti dell'EGR: l'accensione viene ritardata, come è possibile notare dalla posizione del punto di risalita della pressione

(questo è maggiormente vero nel caso *EGR* 57%, in quanto in questo caso l'iniezione è anticipata di 10 gradi), ed il picco di pressione assume valori più bassi.

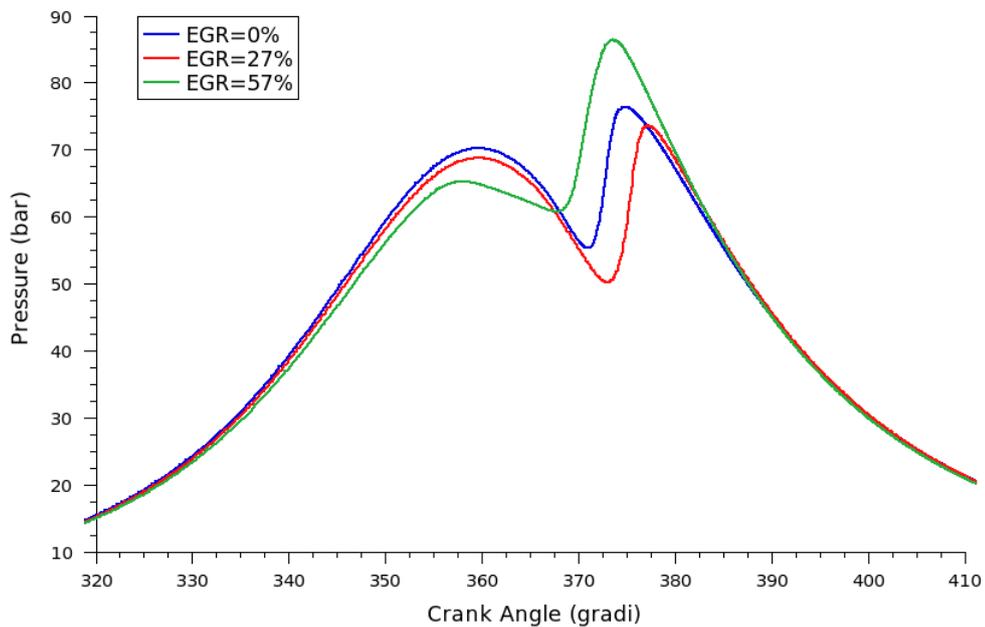


Figura 6.3-21

L'analisi delle curve di rilascio del calore, riportate in Figura 6.3-22, offre ulteriori informazioni: è possibile notare, oltre al già discusso incremento del tempo di ritardo all'accensione, come la combustione presenti un andamento decisamente più "morbido" al variare del tasso di *EGR*. Con *EGR* pari al 27%, questo è evidente soprattutto nella prima parte (quella crescente) della curva di velocità di consumo del combustibile. Questo tratto si mostra infatti meno pendente rispetto all'analogo tratto nel caso con *EGR* pari a 0%. Nel caso con

EGR pari al 57% la differenza è ancora più marcata: qui la fase iniziale della combustione (quella caratterizzata dal tratto crescente della curva) inizia in prossimità del PMS e termina 10 gradi dopo. Anche i valori massimi della velocità di consumo del combustibile sono minori, l'area sottesa alla curva risulta essere distribuita in un intervallo più ampio di angoli di manovella.

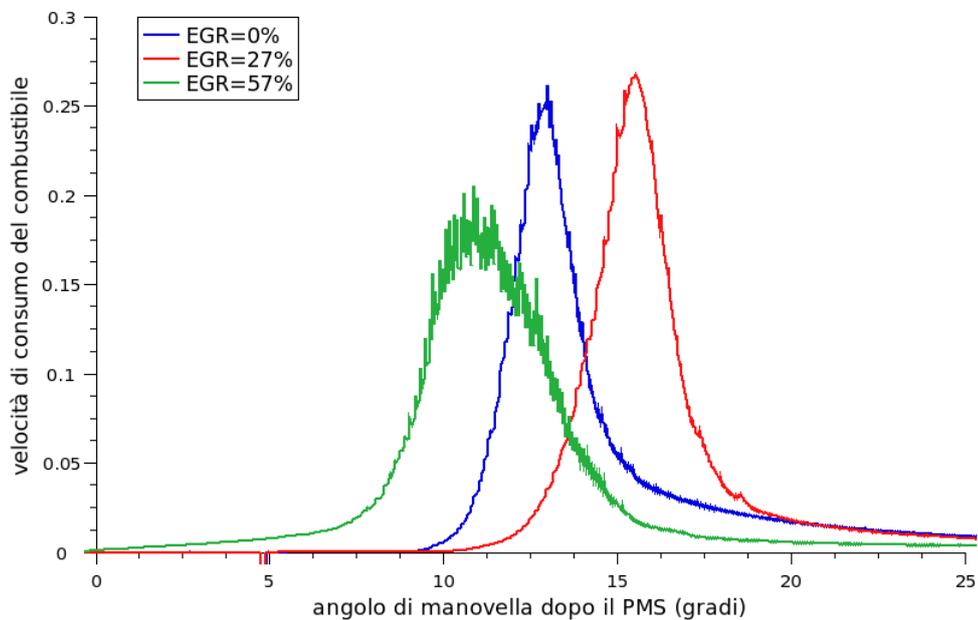


Figura 6.3-22

Dai calcoli eseguiti si evince come l'*EGR* possa ridurre drasticamente le emissioni di ossidi di azoto, in particolare nel caso con *EGR* = 57% si è registrata una riduzione superiore all'80% degli *NO* rispetto al caso con *EGR* = 0 % (Figura 6.3-23). Tuttavia i risultati ottenuti per *EGR* = 57% hanno evidenziato un significativo aumento nella produzione di monossido di carbonio *CO* (Figura

6.3-24). Ai fini dell'impiego della tecnologia *HCCI*, è importante anche il risultato osservato in termini di rilascio del calore: in corrispondenza di valori più elevati del tasso di *EGR* risulta essere più graduale e, dunque, vantaggioso allo scopo di ridurre i forti gradienti di pressione caratteristici della combustione in tale tipologia di motore (Figura 6.3-25).

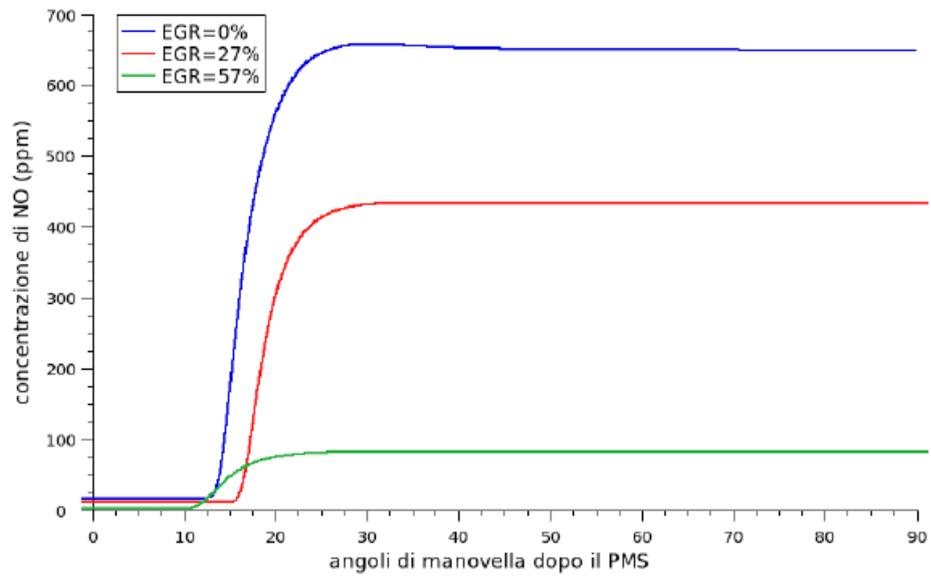


Figura 6.3-23

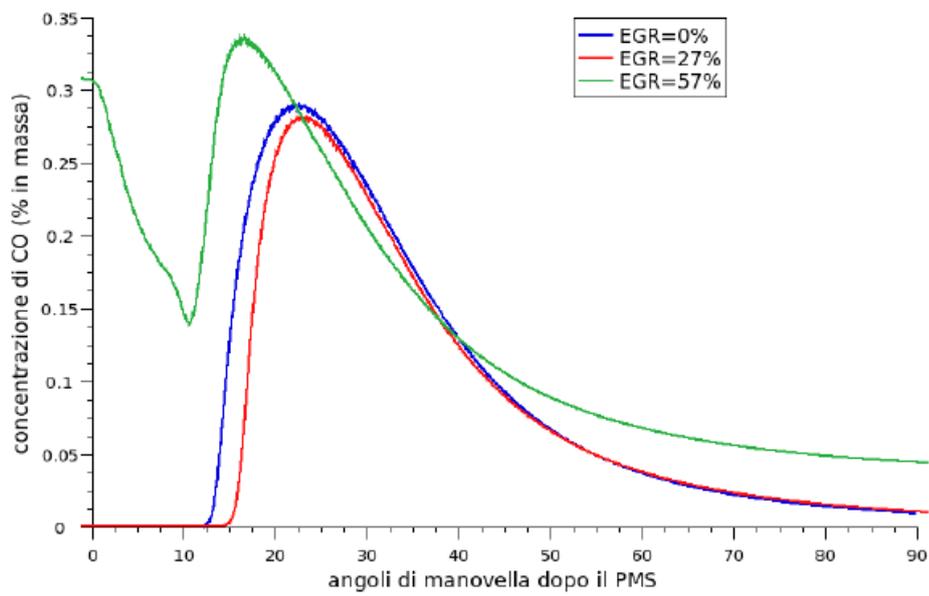
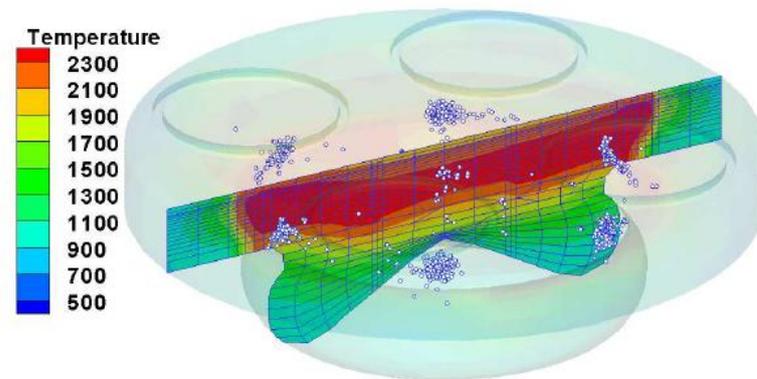
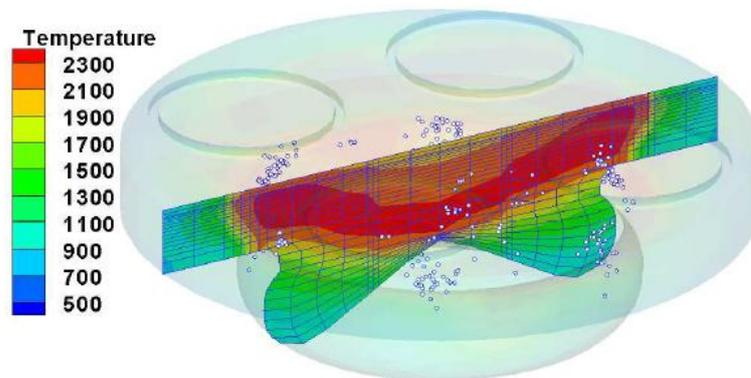


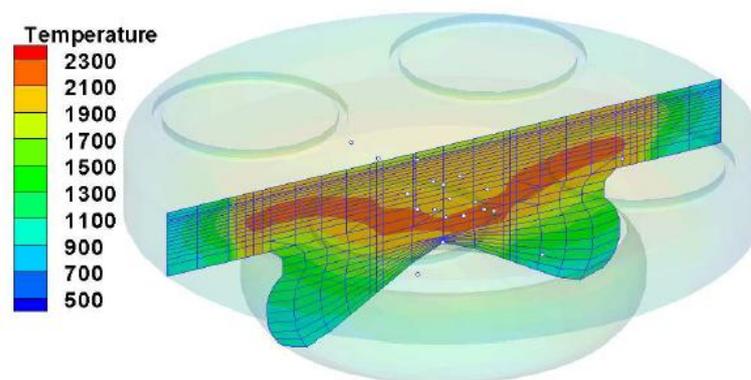
Figura 6.3-24



EGR 0%



EGR 27%



EGR 57%

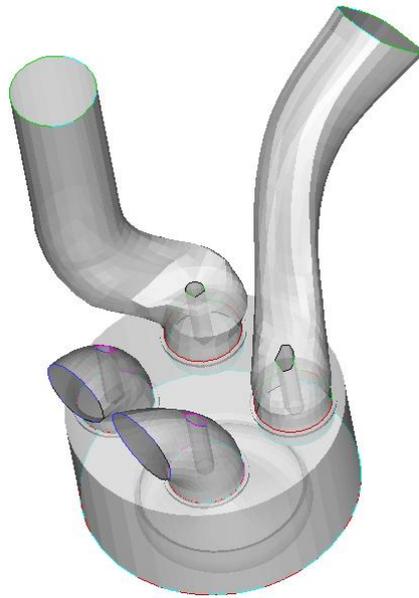
Figura 6.3-25 Distribuzione di Temperatura 30° dopo PMS

6.3.2.3 INFLUENZA DELLA GEOMETRIA DEI CONDOTTI

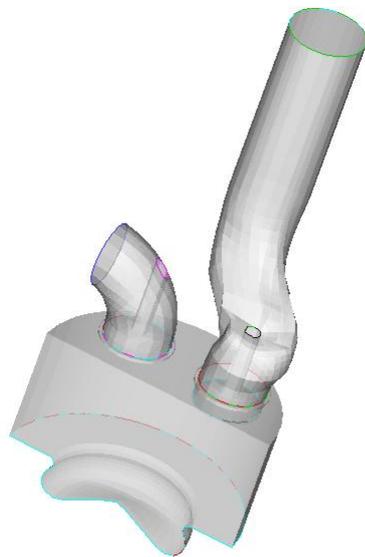
La geometria dei condotti di aspirazione ha una grande influenza sul campo di moto che si viene a determinare all'interno del cilindro e, dunque, su caratteristiche fondamentali per un motore alternativo ad accensione per compressione quali la frammentazione del getto di combustibile, la progressione della combustione, lo scambio termico con le pareti e le emissioni di specie inquinanti. Si è dunque provveduto a studiare diverse configurazioni del sistema di scarico. In particolare l'attenzione è stata rivolta a tre configurazioni:

- 1) base
- 2) due condotti di "swirl"
- 3) due condotti "tuffanti"

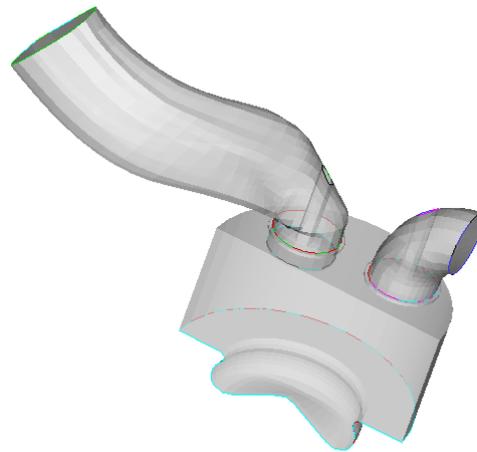
E' da precisare che le configurazioni (2) e (3) sono state ottenute, come si vede dalla rappresentazione dei domini computazionali (Figura 6.3-26), ipotizzando l'esistenza di un piano di simmetria longitudinale. Queste due ultime geometrie presentano, quindi, un particolare orientamento dei condotti di ingresso i cui getti – stante l'esistenza del piano di simmetria – risulteranno contrapposti. I campi di moto derivanti da questa situazione risentono dell'interferenza tra i due getti di ingresso durante la fase di aspirazione. Campi di moto notevolmente differenti potrebbero risultare dall'esistenza di due condotti di ingresso uguali ma orientati diversamente da quanto ipotizzato nelle configurazioni (2) e (3).



Configurazione Base (1)



Configurazione (2)



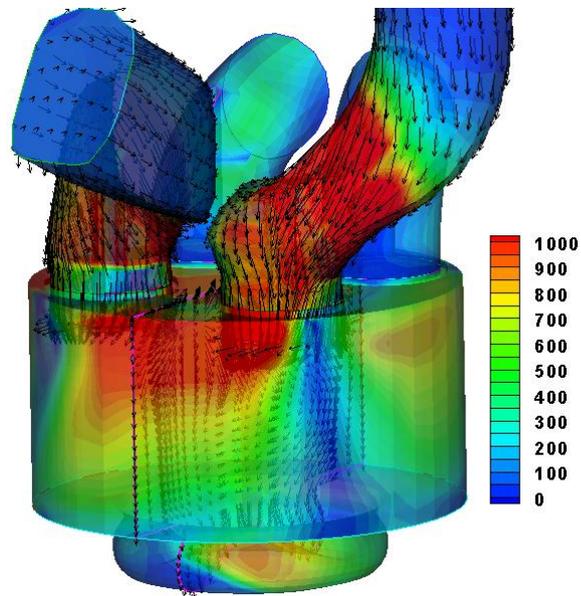
Configurazione (3)

Figura 6.3-26 Domini Computazionali

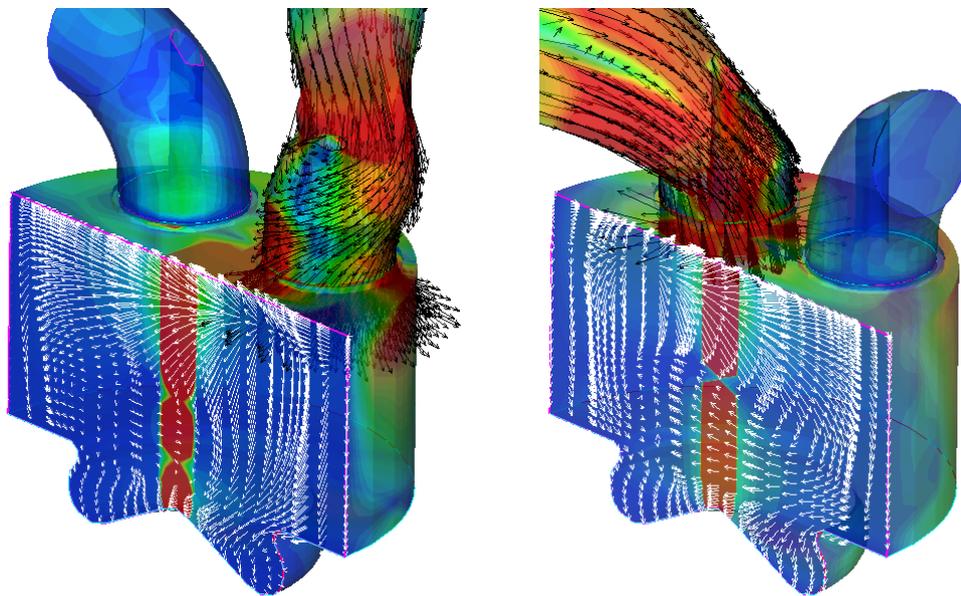
La situazione analizzata appare comunque alquanto significativa in quanto dà luogo a campi di moto durante le fasi a valvole aperte e – soprattutto - a valvole chiuse del tutto diversi da quelli ottenuti nella configurazione base (1).

Il caso analizzato si riferisce al 27% di *EGR*. Nelle Figura 6.3-27 Fase di aspirazione: Campi di Moto e Livelli di Vorticità Assiale (rad/s), Figura 3-28 Fase di aspirazione: Campi di Moto e Intensità di Velocità (m/s) e Figura 6.3-29 Fase di aspirazione: Campi di Moto e Livelli di Vorticità Assiale (rad/s) è rappresentato il confronto tra i campi di moto generati durante la fase di aspirazione nelle tre configurazioni; si evidenzia come, a fronte di intensità di velocità e campi di moto vorticosi pressoché uguali nei piani longitudinali, siano alquanto differenti i livelli di vorticità assiale. La Figura 6.3-29 Fase di aspirazione: Campi di Moto e Livelli di Vorticità Assiale (rad/s) permette di esaminare la situazione in un piano trasversale: come atteso, nella configurazione (1) il campo di moto e i livelli di vorticità presentano distribuzioni asimmetriche e i livelli appaiono alquanto più alti, sebbene esistano anche in questo caso vortici contrapposti generati dai flussi dalle due valvole. Le configurazioni (2) e (3) presentano distribuzioni di vorticità assiale alquanto differenti con picchi più elevati e più estesi nel caso (3).

La Figura 6.3-30 PMS: Campi di moto e Livelli di vorticità assiale (rad/s), mostra come al termine della fase di compressione (e quindi immediatamente prima dell'iniezione di combustibile), il campo di moto della configurazione base (1) sia caratterizzato da un evidente regime di *swirl*. Le altre due configurazioni, invece presentano livelli del fattore di *swirl* notevolmente più bassi, a causa della già citata interferenza tra i getti di ingresso.



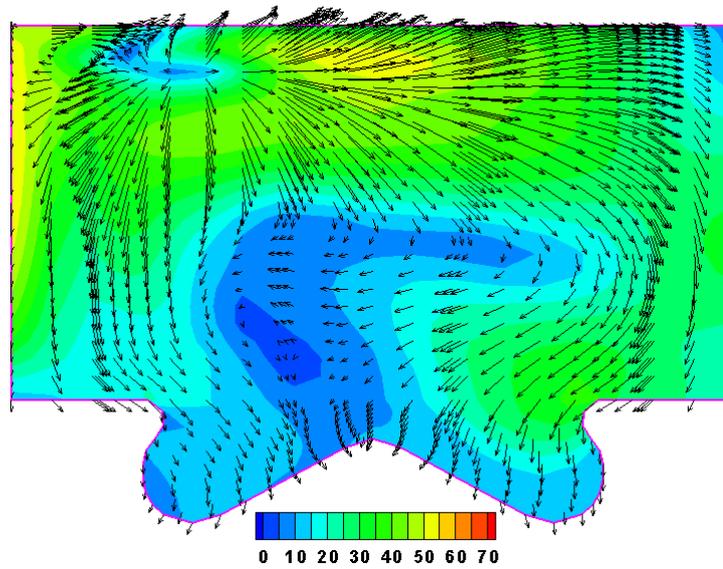
Configurazione Base (1)



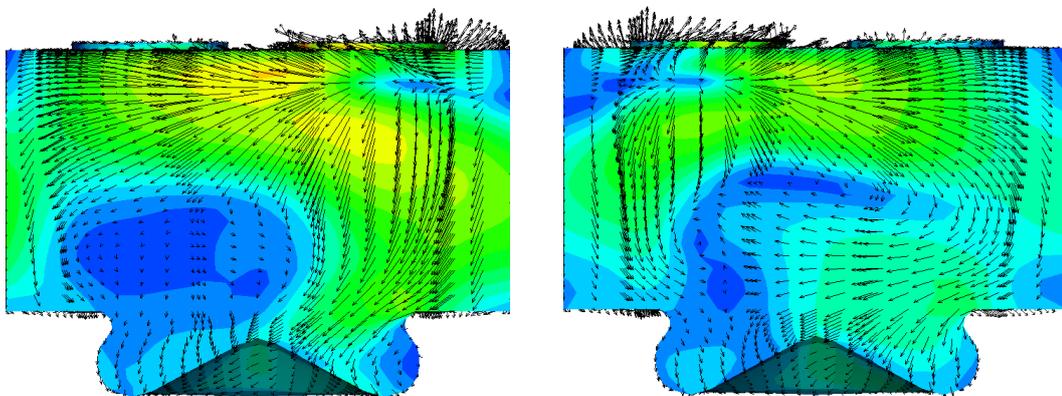
Configurazione (2)

Configurazione (3)

Figura 6.3-27 Fase di aspirazione: Campi di Moto e Livelli di Vorticità Assiale (rad/s)



Configurazione Base (1)



Configurazione (2)

Configurazione (3)

Figura 3-28 Fase di aspirazione: Campi di Moto e Intensità di Velocità (m/s)

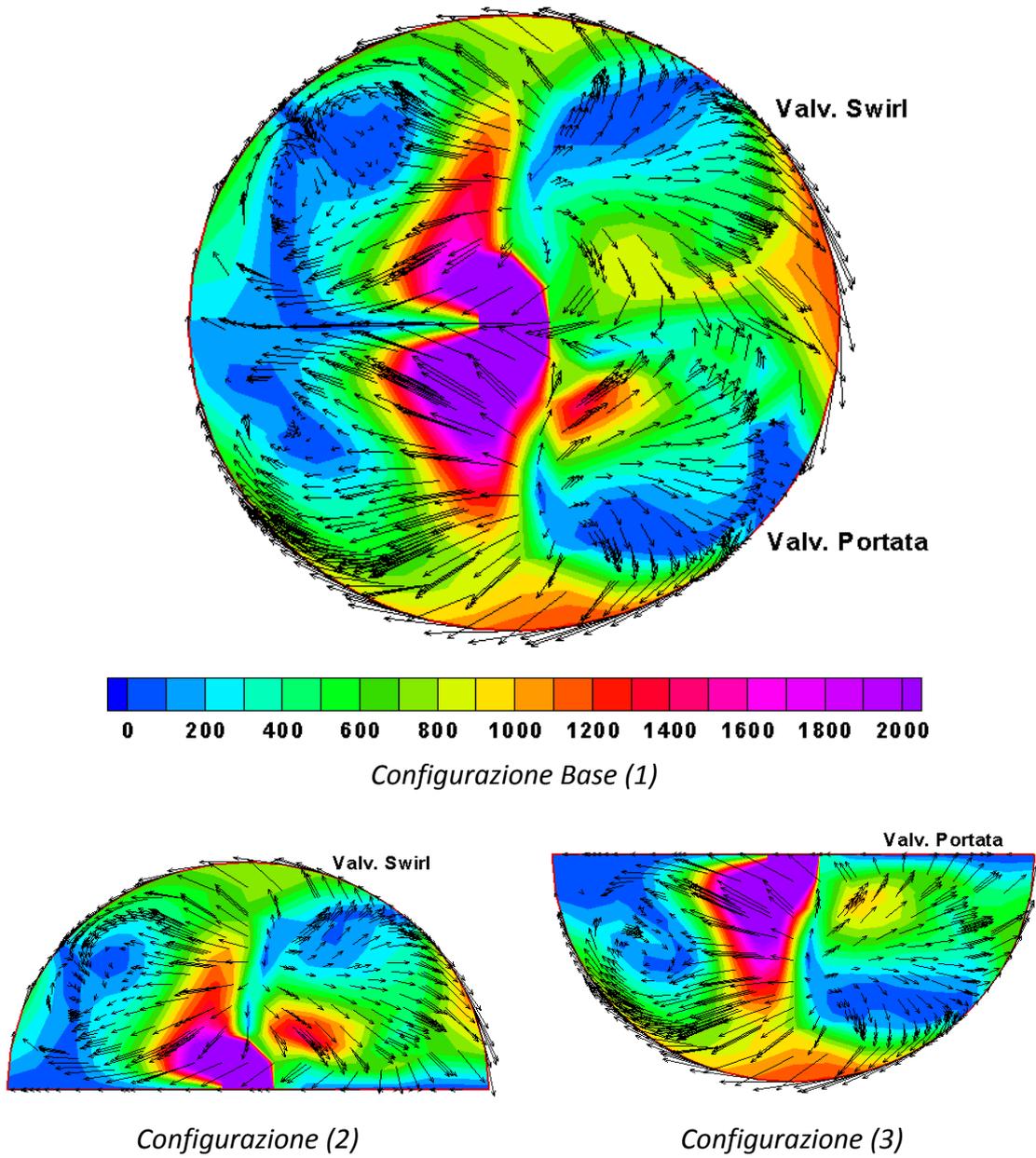


Figura 6.3-29 Fase di aspirazione: Campi di Moto e Livelli di Vorticità Assiale (rad/s)

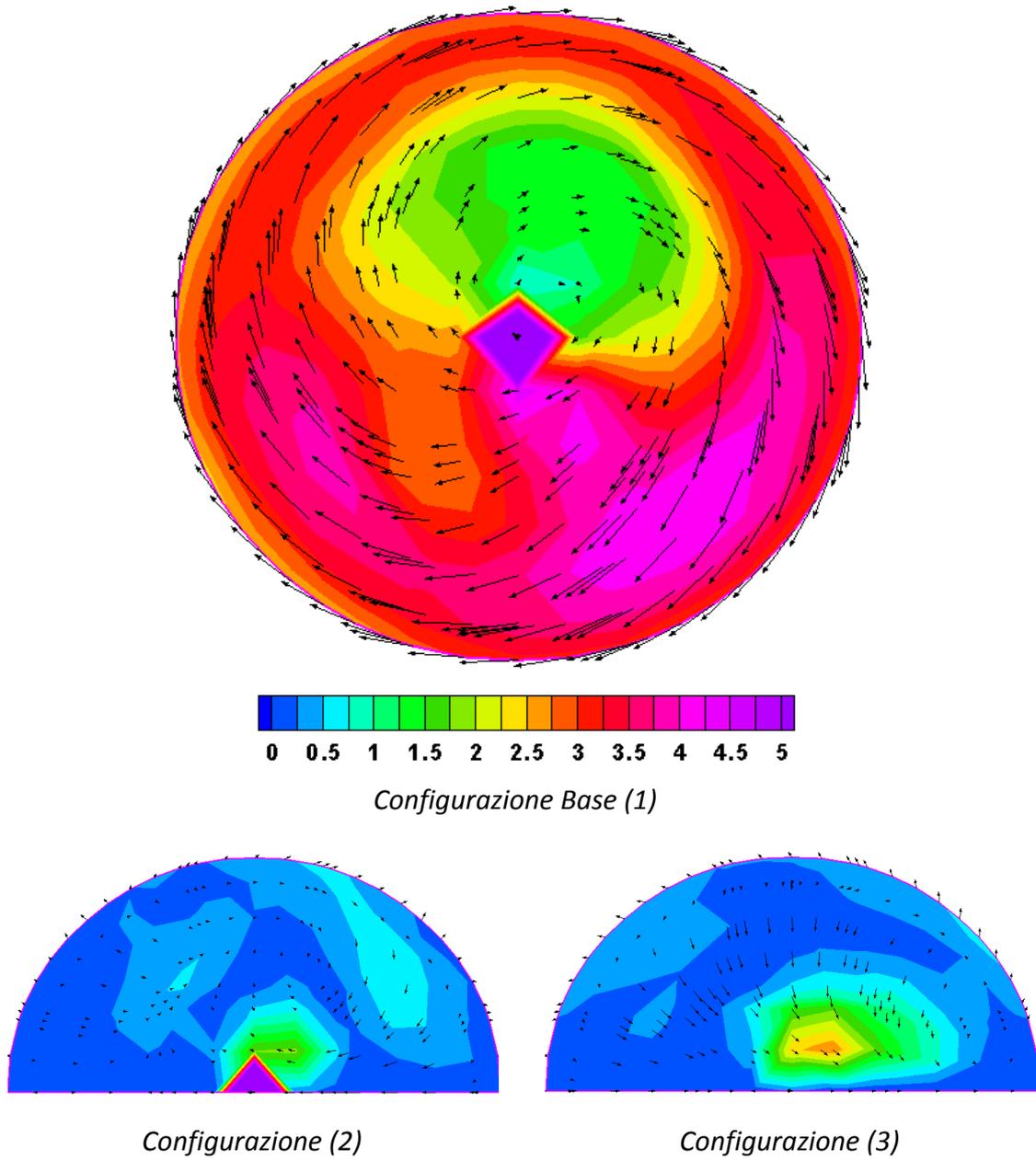


Figura 6.3-30 PMS: Campi di moto e Livelli di vorticità assiale (rad/s)

Sebbene il confronto non sia esaustivo in quanto limitato a un unico caso, non sembrano esserci differenze rilevanti negli andamenti di pressioni, masse introdotte, temperature medie (Figura 6.3-31). Qualche segnale più evidente si coglie esaminando l'andamento dell'evaporazione (Figura 6.3-32): la configurazione base (1) sembra portare a una più rapida evaporazione e probabilmente anche a una distribuzione più uniforme: ne è prova l'andamento più dolce della legge di rilascio, rispetto alle configurazioni (2) e (3). Ciò non corrisponde necessariamente a una riduzione degli ossidi di azoto termici, il cui minimo valore si riscontra nella configurazione (3) (Figura 6.3-33), che peraltro provoca la maggiore presenza di monossido di carbonio. L'andamento della CO_2 dimostra come tutte e tre le configurazioni partano dallo stesso livello iniziale, associato al processo di ricircolo dei gas di scarico e a quello di ricambio della carica: tutte le configurazioni danno luogo a un miscelamento tra gas residui ed aria del tutto comparabile. La configurazione (1) produce il massimo livello di CO_2 , che va però interpretato come migliore efficienza della combustione, come dimostrato anche dal rilascio integrale in Figura 6.3-32.

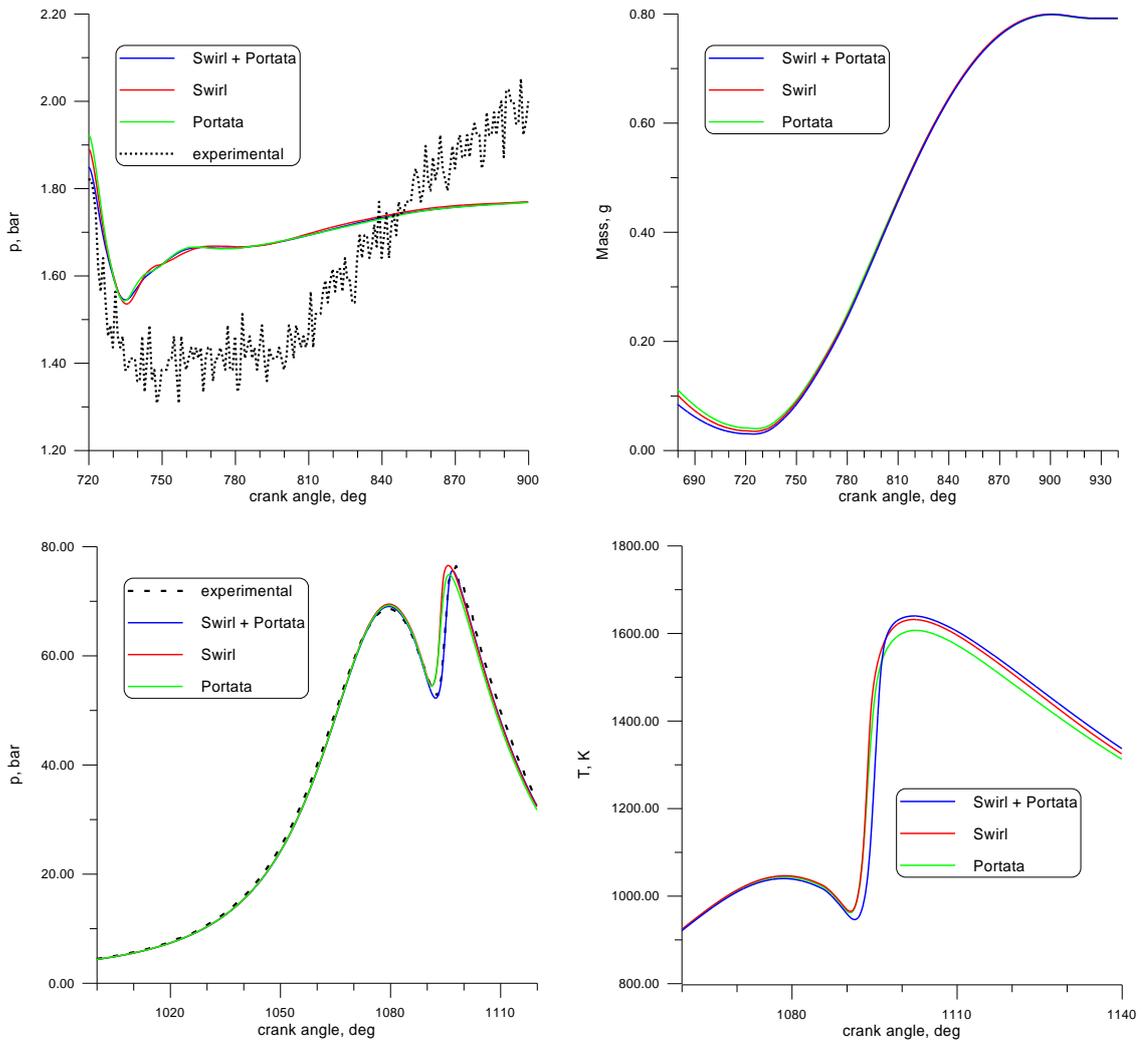


Figura 6.3-31

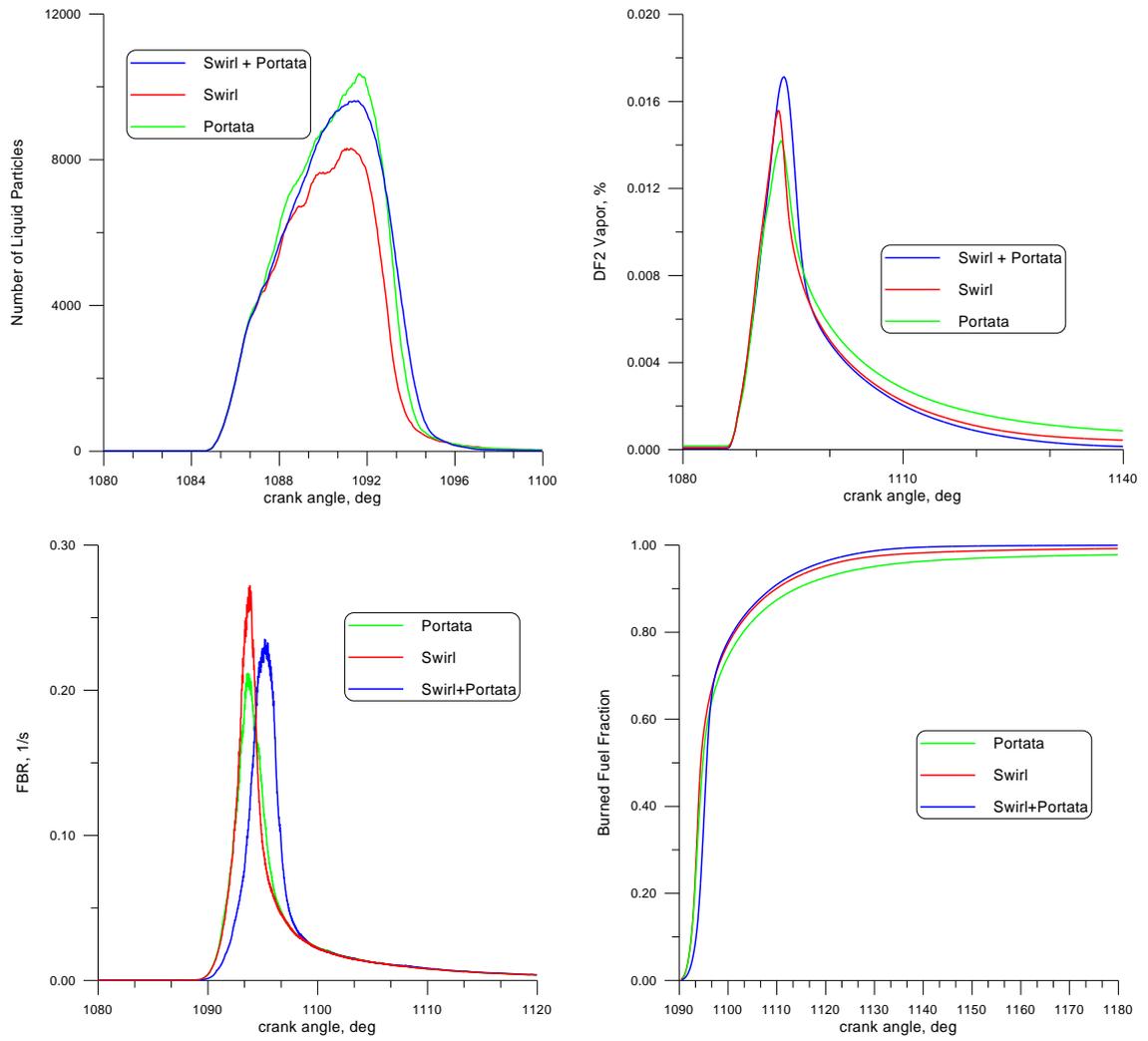


Figura 6.3-32

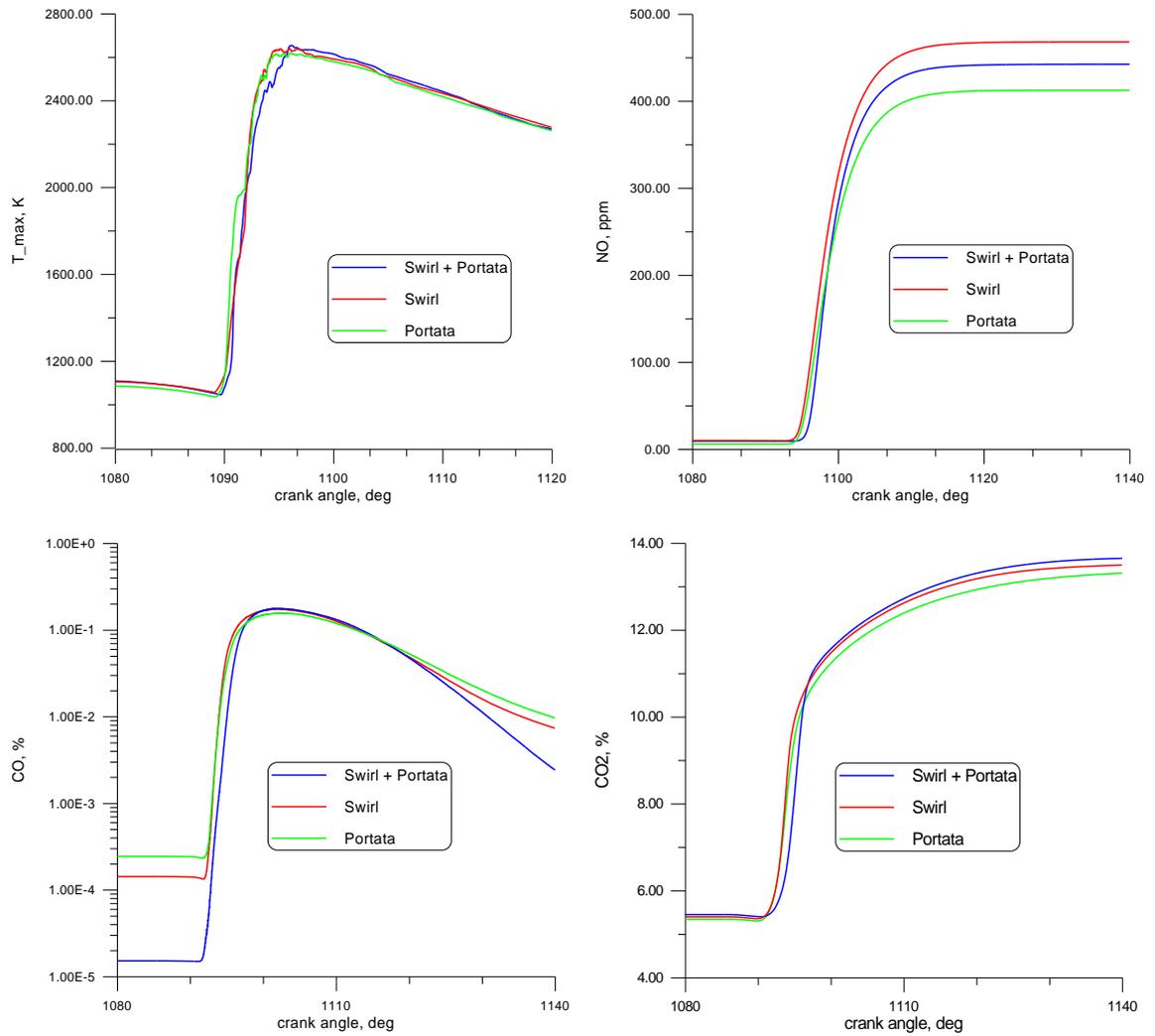


Figura 6.3-33

6.3.2.4 INFLUENZA DELL'APERTURA DELLE VALVOLE

Oltre alla geometria dei condotti sono state valutate, rispetto alla configurazione base, due configurazioni in cui si è imposto la chiusura della valvola del condotto di "swirl" (configurazione 2) o del condotto tuffante (configurazione 3). Ci si è riferiti al caso con *EGR* 57%. Si tratta quindi di una situazione con avvio di combustione alquanto lento e picco di combustione ritardato. Lo sviluppo della combustione è comunque alquanto "morbido". I tre casi sono stati esaminati con le stesse condizioni ai limiti di pressione e temperatura alle estremità dei condotti di ingresso e di pressione all'estremità dei condotti di scarico. Il modello di atomizzazione adottato è il *WAVE*.

In Figura 6.3-34 è riportato il confronto tra il caso con entrambe le valvole aperte e quello con la sola valvola di *swirl* aperta. Il secondo caso denota una maggiore intensità della velocità attraverso l'unica valvola aperta, come prevedibile. Ne consegue una maggiore intensità dei moti di "tumble" anche a causa della evidente asimmetria del flusso in ingresso rispetto al caso con due valvole aperte. Analogamente, il livello di energia cinetica turbolenta appare più elevato nel secondo caso.

In Figura 6.3-35 si riporta l'indice di *swirl* (definito come il rapporto tra l'intensità della componente assiale della vorticità e la velocità angolare del motore) pochi istanti prima dell'iniezione: notiamo che si raggiungono valori più elevati in zone più estese nel caso di apertura della sola valvola di portata. Questi risultati al termine della fase di compressione rappresentano l'effetto residuo dei campi di moto durante l'aspirazione. Evidentemente, le citate

asimmetrie nel moto di ingresso generano un effetto di maggiore intensità che si conserva anche durante la corsa di compressione.

Entrambe le Valvole Aperte (1)

Valvola Tuffante Chiusa (3)

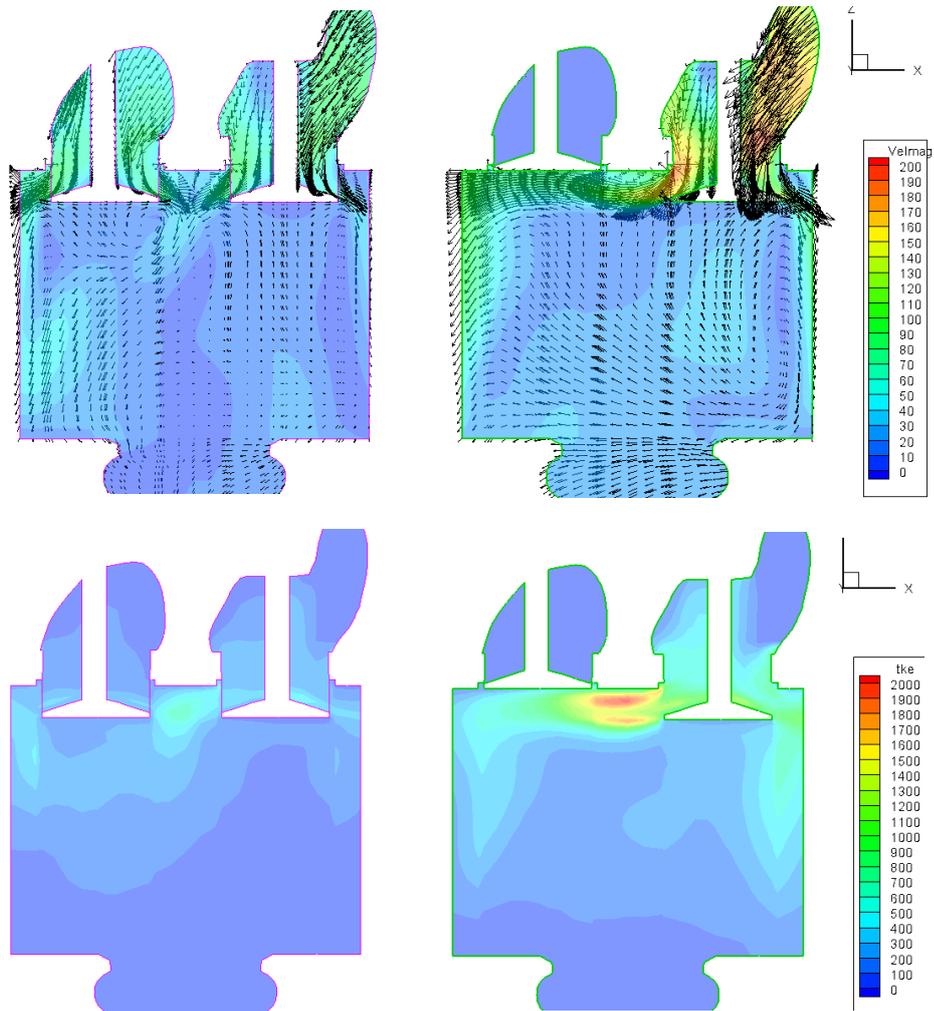


Figura 6.3-34

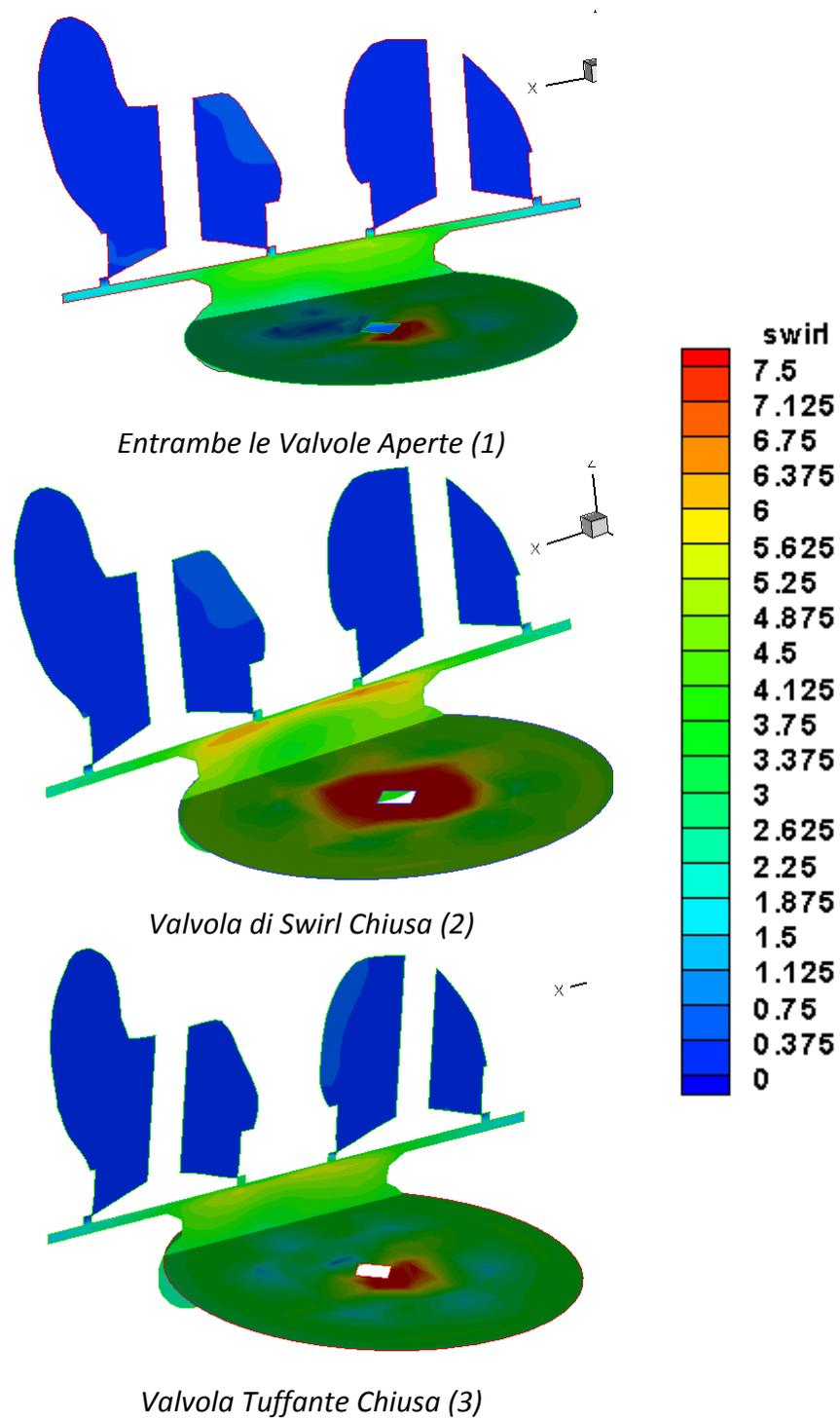


Figura 6.3-35 PMS

In Figura 6.3-36 è rappresentata l'evoluzione del getto e dei vapori di combustibile al PMS. La deviazione dei getti appare più evidente nei casi con una sola valvola aperta. Negli stessi casi, si nota un lieve aumento della presenza di vapore di combustibile. Sembra di poter concludere che questi casi tendono ad accelerare i processi di atomizzazione e di evaporazione, probabilmente a causa di una maggiore interazione tra i campi di moto del liquido e dei gas.

Le diverse situazioni di campo di moto generano differenti sviluppi del processo di combustione; di conseguenza, le zone con picchi di temperatura, Figura 6.3-37, hanno differenti localizzazioni ed estensioni. A parità di angolo di manovella, il caso base – caratterizzato da un più lento avvio della combustione – presenta una minore estensione delle zone con temperatura di picco. Ciò si riflette in una ridotta presenza di NO termici, Figura 6.3-38, e anche di monossido di carbonio, Figura 6.3-39. Va ricordato che per il caso con EGR 57% si è adottato un meccanismo di combustione a due passi, con ossidazione parziale del combustibile a CO e H₂O e successiva ossidazione completa a CO₂. La ridotta presenza di CO a questo angolo di manovella è quindi indice di una limitata attività delle reazioni chimiche. Le distribuzioni di temperatura, di NO e CO in queste figure lasciano però chiaramente prevedere che la chiusura di una delle due valvole favorisce un più rapido avvio della combustione ma fa venir meno l'obiettivo di una combustione più morbida e con ridotte emissioni inquinanti. Tali considerazioni saranno confermate dai successivi diagrammi di proprietà medie nel cilindro.

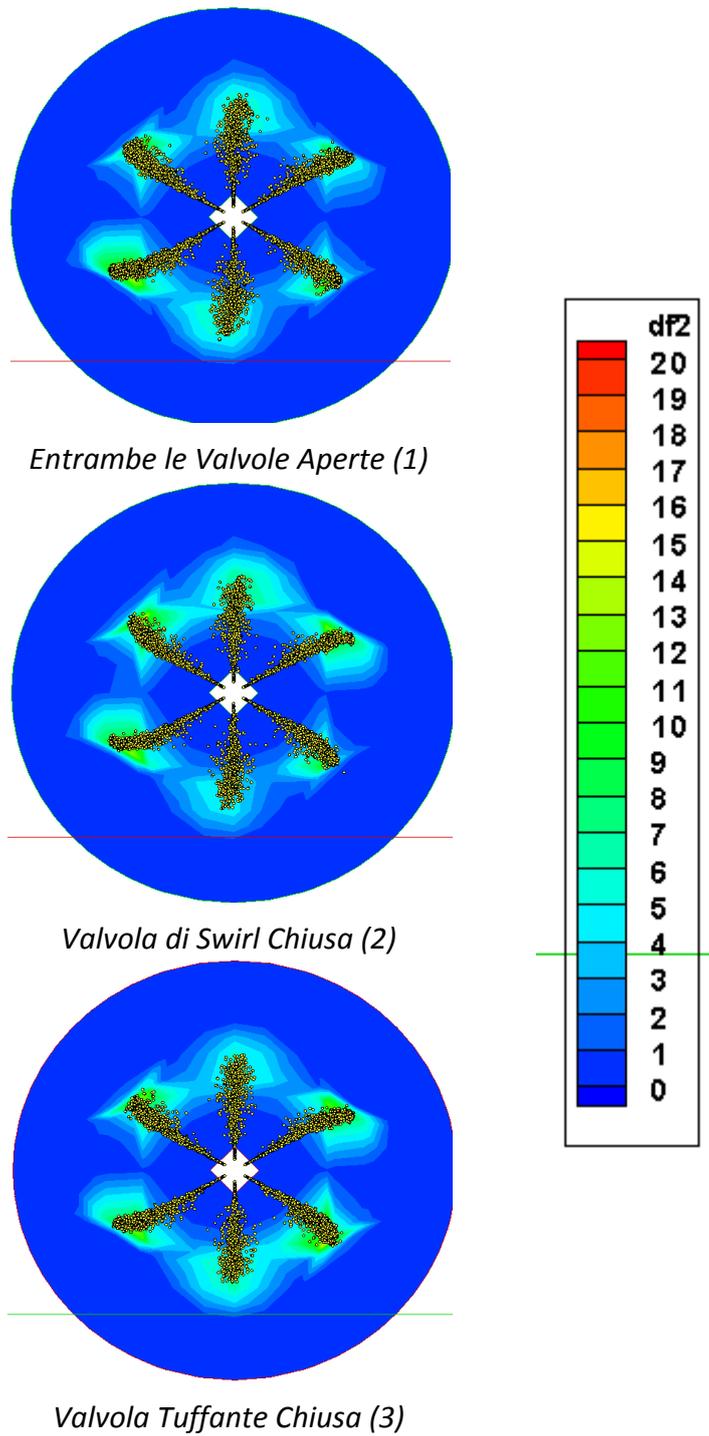


Figura 6.3-36 PMS

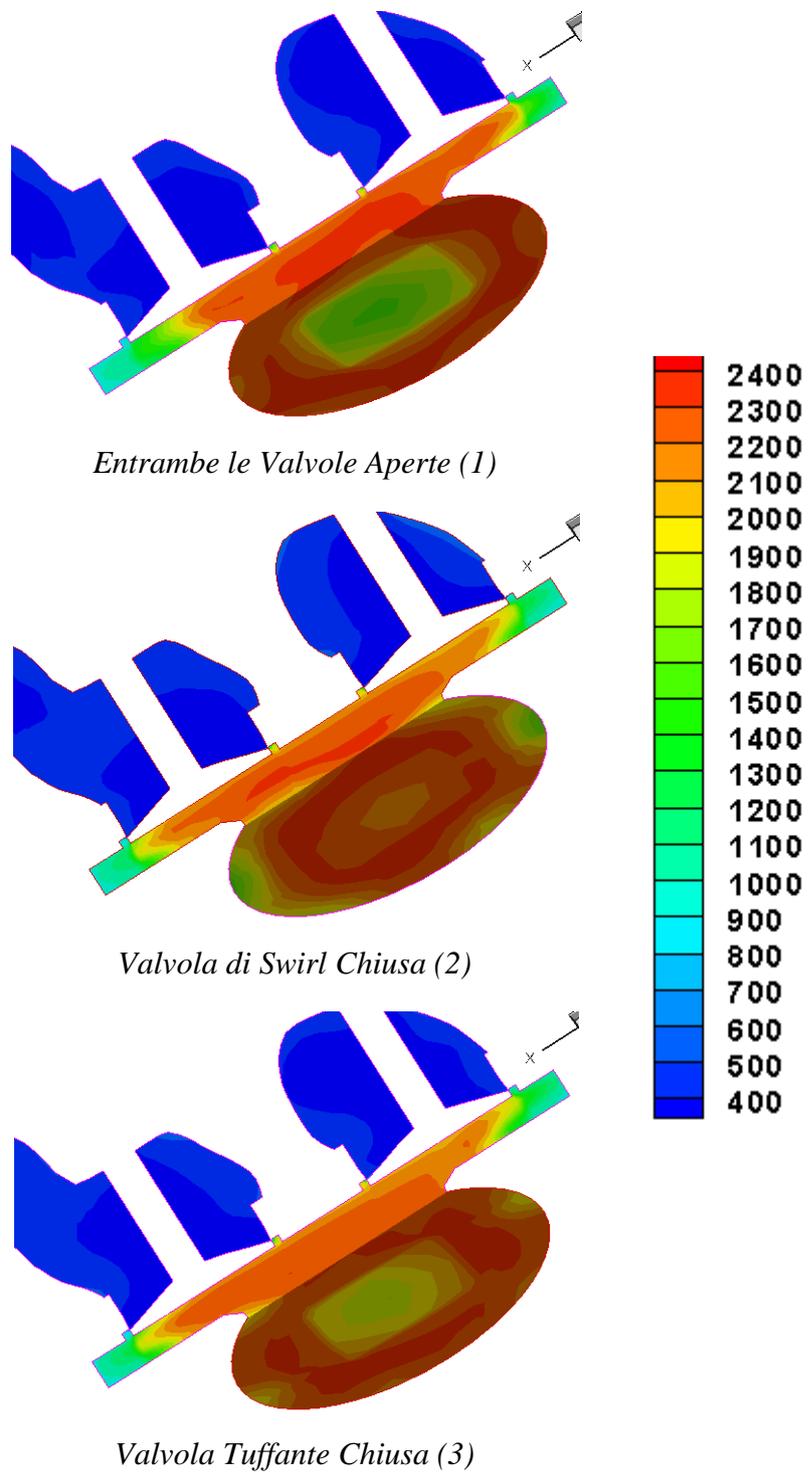


Figura 6.3-37 PMS: 20° dopo

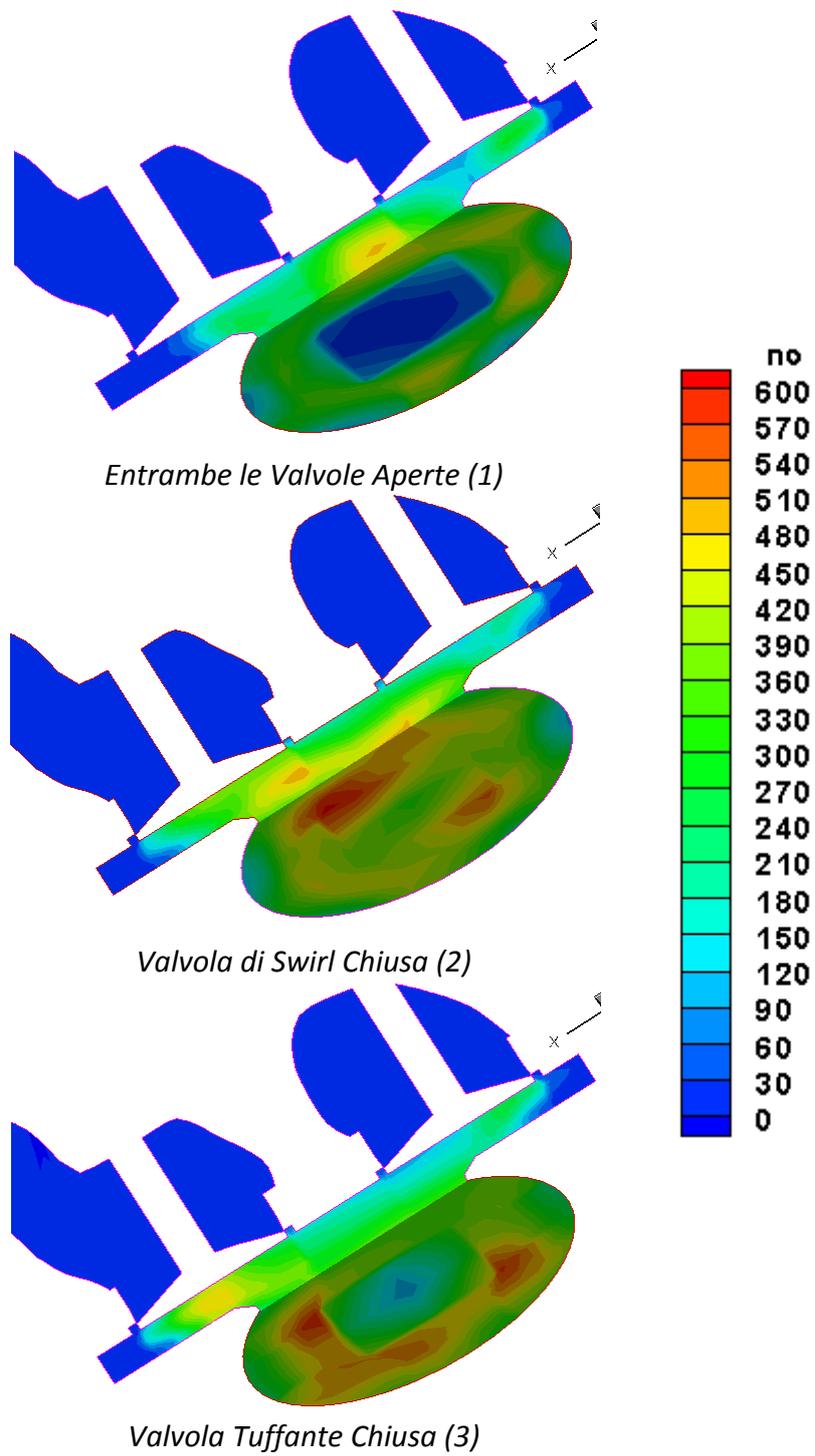


Figura 6.3-38 PMS: 20° dopo

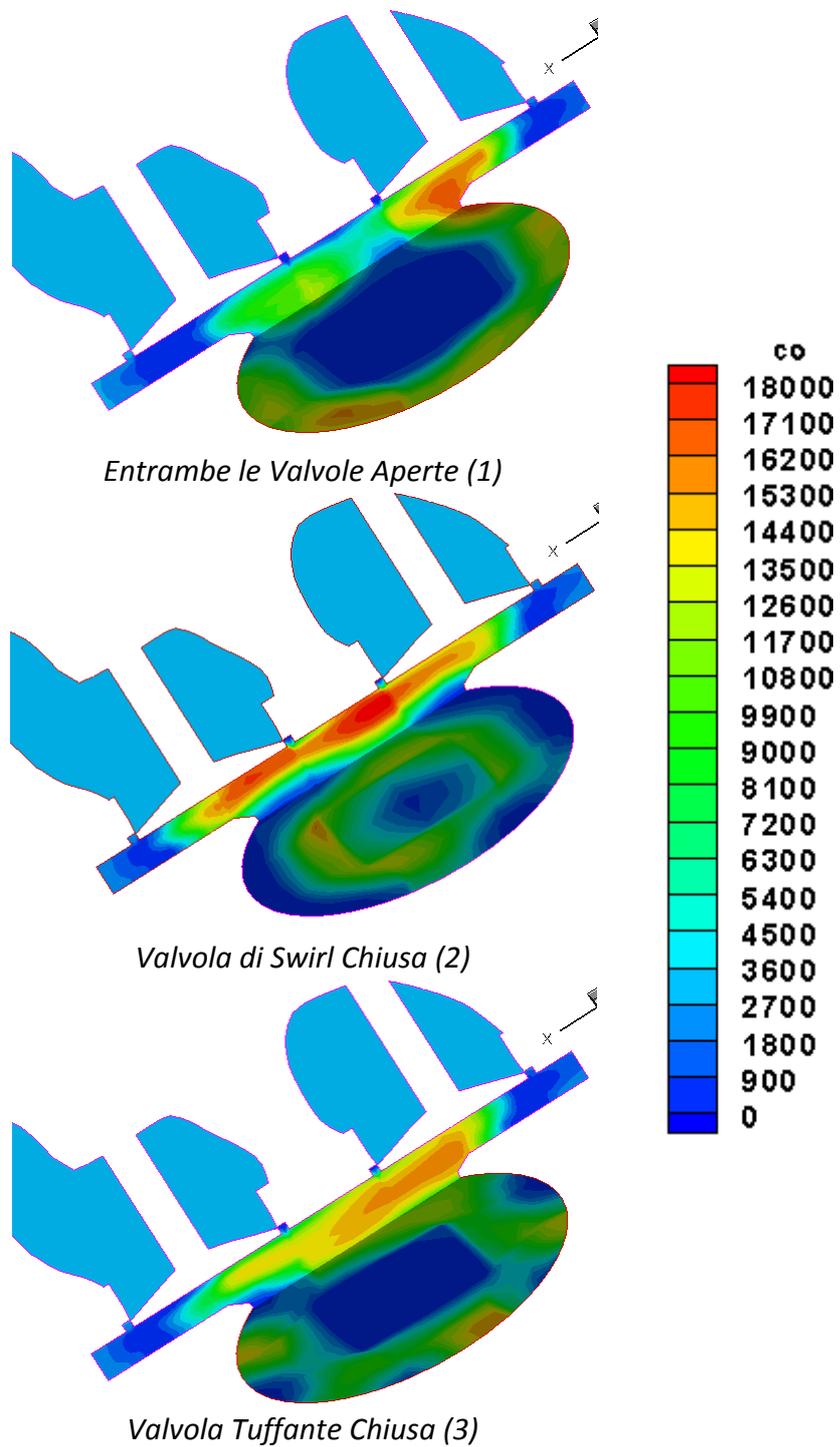


Figura 6.3-39 PMS: 20° dopo

La disponibilità di una sola valvola aperta provoca una maggiore caduta di pressione durante questa fase, Figura 6.3-40. Il riempimento complessivo, appare, in pratica, allo stesso livello del caso con due valvole aperte, Figura 6.3-41. Il rapporto aria/combustibile globale è quindi praticamente immutato e le differenze tra i vari casi vanno imputate ai diversi campi di moto già evidenziati.

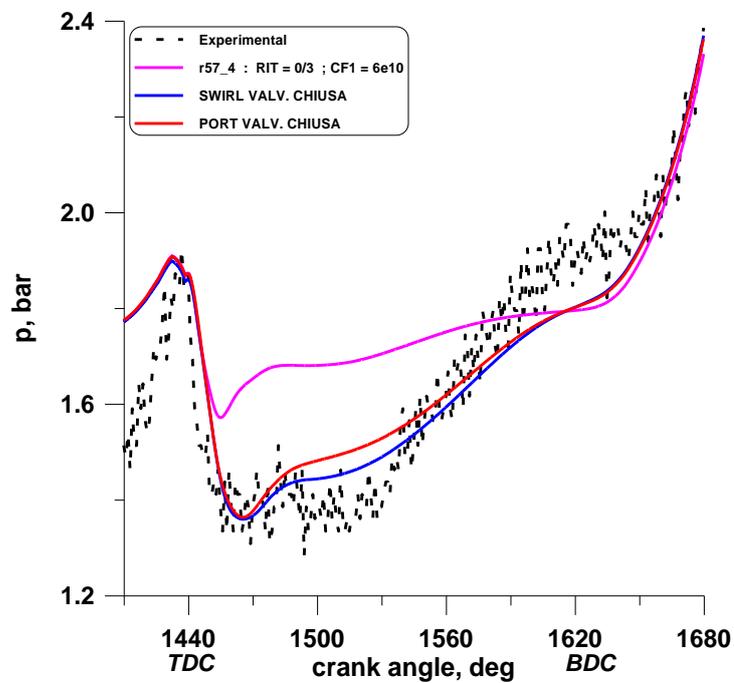


Figura 6.3-40

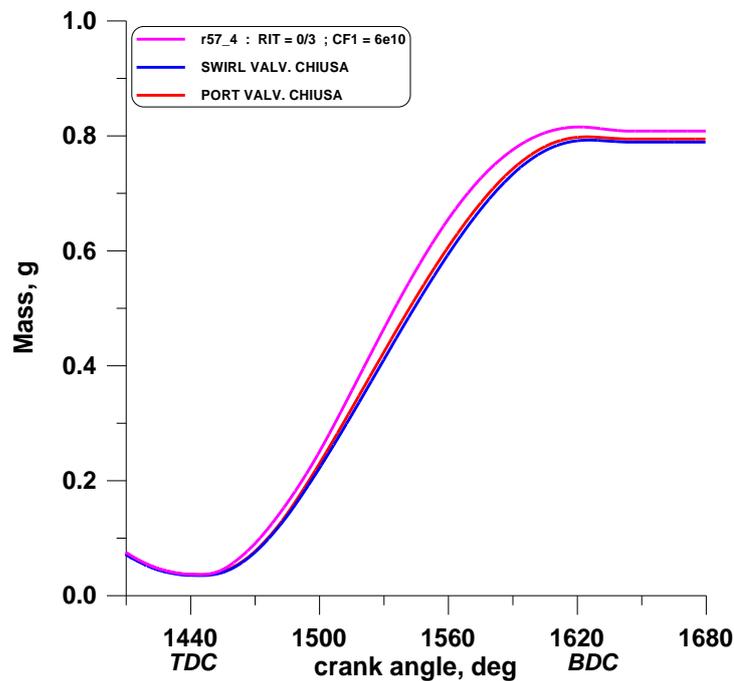


Figura 6.3-41

Come anticipato, la chiusura di una delle due valvole e il campo di moto generato favoriscono un'accensione anticipata, con picchi di pressione più rilevanti (Figura 6.3-42), allontanando quindi il profilo di pressione dal desiderato andamento "morbido". Analogamente, il picco di temperatura media (Figura 6.3-43) si presenta in una posizione angolare decisamente anticipata e la temperatura nel cilindro permane mediamente più elevata rispetto al caso base. Si trova così conferma e spiegazione di quanto riscontrato nelle distribuzioni di temperatura mostrate in precedenza.

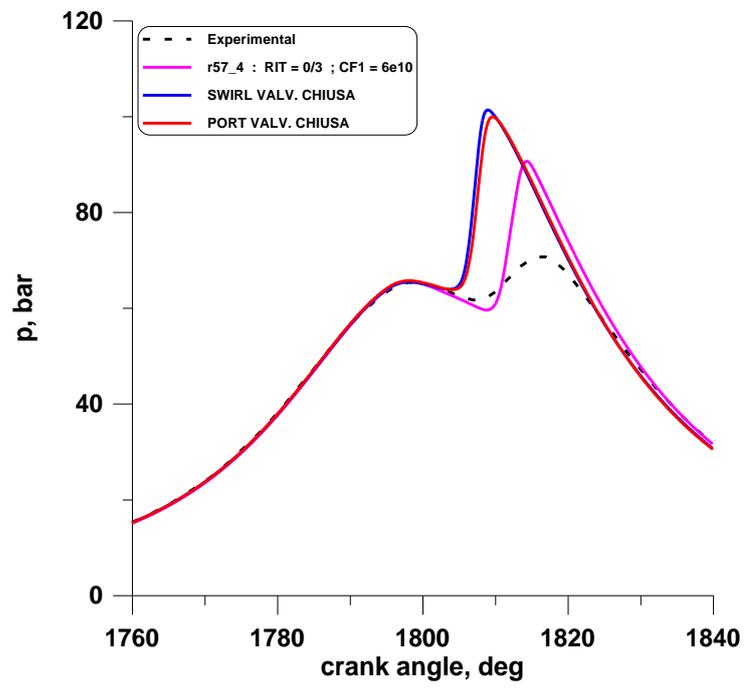


Figura 6.3-42

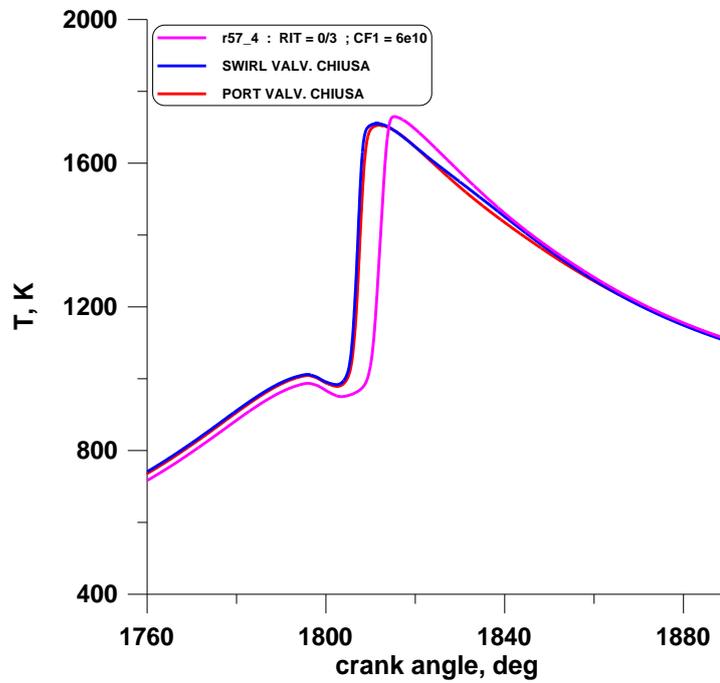


Figura 6.3-43

Si ottiene un'ulteriore conferma che la contemporanea apertura delle due valvole produce un profilo di legge di combustione decisamente più dolce, oltre che ritardato, osservando l'andamento della velocità istantanea di rilascio del calore (Figura 6.3-44 Velocità Istantanea di Rilascio del Calore): si vede chiaramente che la chiusura di una delle valvole determina un profilo più ripido.

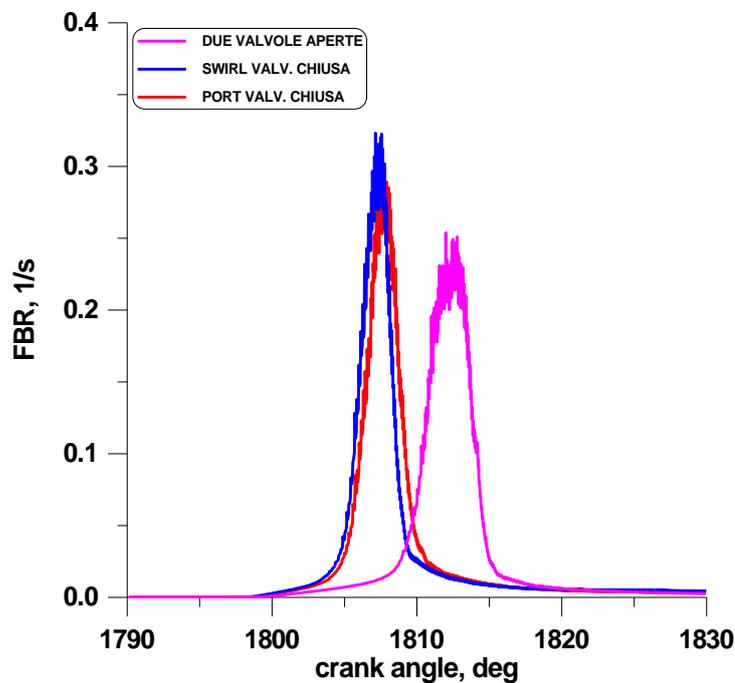


Figura 6.3-44 Velocità Istantanea di Rilascio del Calore

L'analisi dell'andamento degli ossidi di azoto e della CO (Figura 6.3-45) rappresenta la definitiva conferma di quanto più volte osservato: l'apertura di una sola valvola sembra consentire comunque un buon livello di prestazioni del motore (almeno nel caso a carico parziale esaminato) ma risulta decisamente penalizzante in termini di emissioni. Il profilo più morbido di combustione

fornisce come risultato più evidente una rilevante riduzione delle specie nocive e, probabilmente, delle emissioni acustiche.

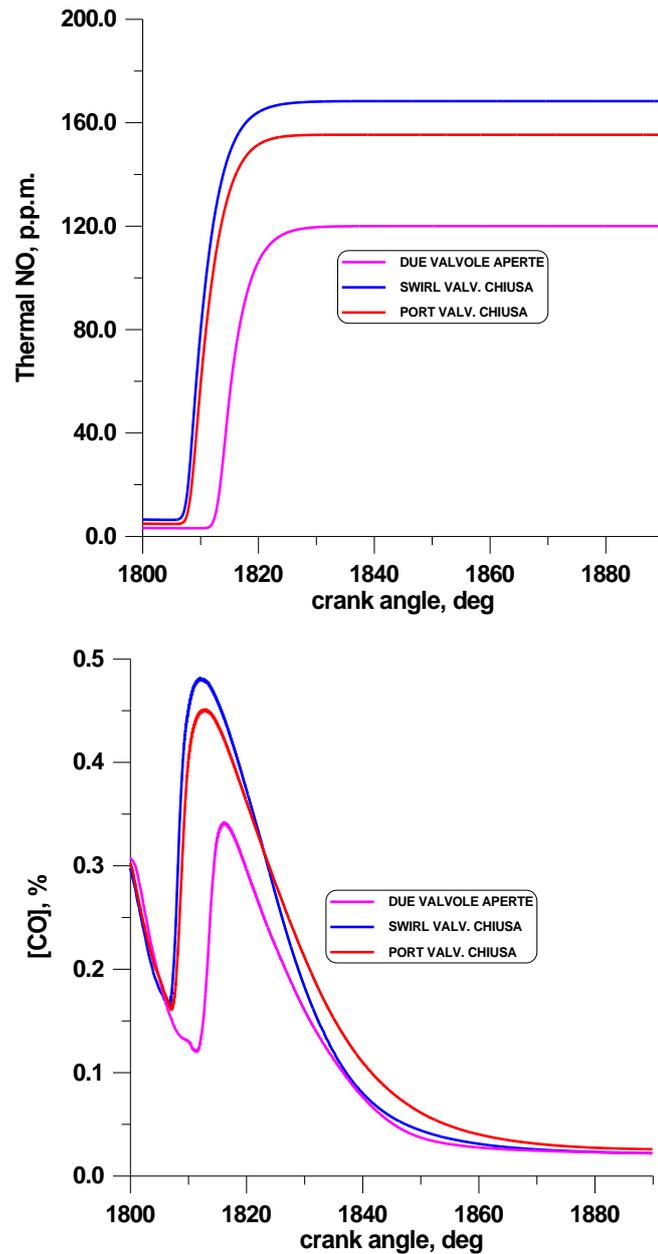


Figura 6.3-45

CONCLUSIONI

L'obiettivo primario della presente tesi di dottorato è stata l'analisi, mediante tecniche di fluidodinamica computazionale, dell'adattamento a nuovi regimi operativi (caratterizzati da elevati tenori di specie inerti e da basse concentrazioni di ossigeno) di dispositivi di combustione già esistenti in microturbine a gas (*MGT*) e motori alternativi ad accensione per compressione.

Per realizzare tale diluizione si è scelto di intervenire sugli impianti realizzando il ricircolo dei gas combusti (*EGR*). Sono state effettuate, dunque, delle analisi numeriche, mediante codici di calcolo di accoppiamento tra i componenti e monodimensionali realizzati presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica per l'Energetica, per studiare la risposta globale dell'impianto con *MGT* o del motore sovralimentato all'adozione dell'*EGR*. Successivamente, utilizzando come dati di ingresso i risultati ottenuti da tali analisi globali, si è provveduto a simulare il comportamento delle camere di combustione in questione mediante codici di fluidodinamica computazionale.

I risultati dei calcoli, che sono stati condotti utilizzando differenti modelli di combustione e turbolenza, indicano che i sistemi allo studio, il combustore Ansaldo per una *MGT* dalla potenza elettrica di 100 kW e il motore BMW-Bosch, hanno grandi potenzialità di adattamento alle nuove condizioni. Infatti, i due sistemi sembrano essere in grado di garantire l'accensione della miscela

reagente anche in condizioni di forte diluizione, presentando evoluzioni della combustione prossimi a regimi tipici della combustione *MILD*.

Tuttavia, l'adozione dell'*EGR* "esterno", se da un lato determina l'abbassamento delle emissioni inquinanti in termini di ossidi di azoto, dall'altro ha condotto ad un abbassamento del rendimento termodinamico di tali sistemi e ad un incremento dei livelli di incombusti. Per ovviare a questi ultimi inconvenienti in futuro potranno essere prese in considerazione nuove geometrie delle camere di combustione e, nel caso del motore, diversi sistemi di aspirazione e differenti leggi di alzata delle valvole in modo da accrescere la presenza di gas combustibili direttamente sistemi nelle zone di reazione (si può parlare in questo caso di "*EGR* interno") riducendo così le perdite legate al ricircolo esterno dei gas esausti.

Infine, tenendo presente che la riduzione delle emissioni di gas serra è anche associata allo sfruttamento di risorse rinnovabili tra cui vanno annoverati i bio-combustibili, uno sviluppo particolarmente interessante di questa ricerca sarà studiare l'adattamento degli attuali sistemi di combustione e di quelli di concezione innovativa all'impiego di tali nuovi combustibili, in presenza di ossidanti fortemente diluiti con specie inerti.

BIBLIOGRAFIA

- [1]. Cavaliere A., de Joannon M. (2004) *"Mild Combustion"* Progress in Energy and Combustion Science, Elsevier
- [2]. Kelly-Zion PL, Dec JE (2000) *"A computational study of the effect of fuel type on ignition time in HCCI engines"* Proc Combust Inst 2000, 28: 1187-94
- [3]. Nicol, D.G. (1995) *"A Chemical and Numerical Study of NOx and Pollutant Formation in Low-Emissions Combustion"*, PhD Dissertation, University of Washington
- [4]. Cavaliere A., de Joannon M. (2005) *"Mild Combustion. Una lezione nell'atelier di un 'nuovo' processo di combustione"* Proceedings of the European Combustion Meeting 2005
- [5]. Glassman I., *"Combustion"*, Academic Press, 1977, ISBN 0-12-285850-6
- [6]. Amoresano A., de Joannon M. (2004), *"Oxydation regimes in MILD combustion of low and high molecular weight paraffins"*, 59° Congresso Annuale ATI, Genova 2004
- [7]. Dally B.B., Riesmeier E., Peters N. (2004), *"Effect of fuel mixture on moderate and intense low oxygen dilution combustion"*, Combustion and Flame, Vol. 137, pp 418–431
- [8]. Wilcox D.C. (1998) *"Turbulence Modeling for CFD"*, DWC Industries
- [9]. Yakhot V., e Orszag S.A. (1986) *"Renormalization Group Analysis of Turbulence: 1. Basic Theory"*, Journal of Scientific Computing. Vol.1, pp.3-51
- [10]. Peters N. (2000) *"Turbulent Combustion"*, Cambridge University Press
- [11]. Magnussen B.F., Hjertager B.H. (1977) *"On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion With Special Emphasis on Soot Formation and Combustion"*, 16th Symposium on Combustion, the Combustion Institute, Pittsburgh
- [12]. H. Pitsch and N. Peters (1998) *"A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects"* Combustion and Flame, 114:26-40
- [13]. Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin http://www.me.berkeley.edu/qri_mech/

- [14]. Benson R.S. (1982) *"The thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines"*, Vol. 1, Horlock J.H. and Winterbone D.E., Clarendon Press, Oxford
- [15]. Winterbone D.E. and Pearson R.J. (1999) *"Design Techniques foe Engine Manifolds"*, Professional Engineering Publishing, ISBN 1 86058 179 X
- [16]. Bozza F., Gimelli A., A. Senatore, A. Caraceni 2001 *"A Theoretical Comparison of Various VVA Systems for Performance and Emission Improvements of SI-Engines"*, SAE paper 2001-01-0670, Book Number: SP-1599, atti del congresso SAE 2001 World Congress, March 2001, Detroit, MI, USA, Session: Variable Valve Actuation (Part C)
- [17]. Heywood J.B. (1988) *"Internal Combustion Engine Fundamentals"*, McGraw Hill
- [18]. Bozza F., Gambino M., Iannaccone S., Rizzo G. (1991) *"I Concetti della Geometria Frattale Applicati alla Modellistica di Combustione – Fondamenti Teorici e Sperimentazione Numerica"*, atti del 46° Congresso ATI
- [19]. Cameretti M.C., Reale F, Tuccillo R., (2006), *"Cycle Optimization and Combustion Analysis in A Low-NOx Micro-Gas Turbine"*, ASME Paper GT2006-90240, also in *ASME Jrnl. of Gas Turbines and Power*, vol. 129, pp. 994 – 1003
- [20]. Cameretti M.C., Reale F, Tuccillo R., (2007), *"NOx suppression from a Micro-gas turbine approaching the mild-combustion regime"*, ASME Paper no. GT2007-27091
- [21]. Camporeale, S. M., Fortunato, B., (2007), *"Thermodynamic Analysis of Semi-Closed Gas Turbine Combined Cycles With High Temperature Diluted Air Combustion"*, ASME paper GT2007-28330
- [22]. Levy, Y., Sherbaum, V., Erenburg, V., (2007), *"The Role of the Recirculating Gases at the Mild Combustion Regime Formation"*, ASME paper GT2007-27369
- [23]. Duwig, C., Szasz, R.Z., and Fuchs, L., (2006), *"Modelling of Flameless Combustion Using Large Eddy Simulation"*, ASME paper GT2006-90063
- [24]. Levy, Y., Sherbaum, V., Rao, G.A., 2007, *"Preliminary Analysis of a New Methodology for Flameless Combustion in Gas Turbine Combustors"*, ASME paper GT2007-27766
- [25]. Li, G., Gutmark, E.J., Overman, N., and Michael Cornwell, (2006), *"Experimental Study of a Flameless gas Turbine Combustor"*, ASME paper GT2006-91051
- [26]. Dagaut, P., Cong,T.L.,(2007), *"Kinetics of Natural Gas, Natural Gas/Syngas Mixtures Oxidation and Effect of Burnt Gas Recirculation: Experimental and Detailed Modeling"*, ASME paper GT2007-27146

- [27]. Schütz , H., Lückerath, R., Kretschmer, T., Noll,B., and Aigner, M., (2006), *"Analysis of the Pollutant formation in the FLOX® Combustion"*, ASME paper GT2006-91041
- [28]. Brueckner-Kalb, J.R., Napravnik, C., Hirsch,C., Sattelmayer, T., (2007), *"Development of a Fuel-Air Premixer for a Sub-ppm NOx Burner"*, ASME paper GT2007-27779
- [29]. Bozza, F., Cameretti, M.C., and Tuccillo, R, (2005), *"Adapting the Micro-Gas Turbine Operation to Variable Thermal and Electrical Requirements"*, ASME *Jrnl. of Gas Turbines and Power*, vol. 127, pp. 514-524
- [30]. Russo, C., Parente, J., Mori, G., Anissimov, V. V., (2007), *"Micro Gas Turbine Combustor Emissions Evaluation Using the Chemical Reactor Modelling Approach"*, ASME paper GT2007-27687
- [31]. Jiang, L., Campbell, I., (2007), *"Reynolds Analog in Combustor Modeling"*, ASME paper GT2007-27017
- [32]. Harder, S., Joos, F., (2007), *"Modeling a Non-Premixed Industrial Gas Turbine Combustor by a Transported PDF Approach With ILDM Chemistry"*, ASME paper GT2007-27370
- [33]. Tuncer, O., Acharya, S., Uhm, J., (2007), *"Dynamics, NOx and Flashback Characteristics of Confined Pre-Mixed Hydrogen Enriched Methane Flames"*, ASME paper GT2007-28158
- [34]. Ibrahim, O., Zimmermann, P., Hirsch, C., Sattelmayer, T., Gerhard, B., Steinbach, C., (2004), *"A microturbine operating with variable heat output"*, ASME paper GT-2004-53011
- [35]. Cameretti M.C., Tuccillo R., (2005),. *"A CFD Based Off-Design Study Of Micro-Gas Turbines Combustors"*, ASME paper GT-2005-68924
- [36]. Tuccillo R., Cameretti, M.C., (2005), *"Combustion And Combustors for MGT Applications"*, VKI/LS on "Micro Gas Turbines", RTO-MP-AVT-131
- [37]. Parente,J. Mori,G., Anisimov,V. and Croce, G., (20045) *"Micro Gas Turbine Combustion Chamber Design and CFD Analysis"*, ASME paper GT2004-54247
- [38]. Mc Bride, B.J., and Gordon, S., (1994), *"Computer Program for Calculation of Complex Equilibrium Composition and Applications"*, NASA RP 1311, parts I and II
- [39]. Gunnar Lagerström, M.Sc, Max Xie, (2002), *"High Performance & Cost Effective Recuperator for Micro-Gas Turbines"*, ASME paper no.GT-2002-30402
- [40]. Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H., (1977), *"On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation," 16th. Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh*
- [41]. Nicol, G.D., Malte, P.C., Hamer, A.J, Roby, R.J., and Steele, R.C., (1998),*"A Five-Step Global Methane Oxidation – NO Formation Mechanism for Lean Premixed Gas Turbine Combustion," ASME paper 98-GT-185*

- [42]. Novosselov ,I. V., Malte, P. C., 2007, "*Development and Application of an Eight-Step Global Mechanism for CFD and CRN Simulations of Lean-Premixed Combustors*", ASME paper GT2007-27990
- [43]. Zel'dovich, Y.B., Sadovnikov, P.Y., Frank-Kamenetskik, D.A., 1947, "Oxidation of Nitrogen in Combustion," *Academy of Science of SR, Institute of Chemical Physics*, Moscow-Leningrad.
- [44]. Miller, J.A., and Bowman C.T., 1989, in *Prog. in Energy and Combustion Science* 15:287.