

Università degli Studi di Napoli “Federico II”



**SCUOLA POLITECNICA E DELLE SCIENZE DI BASE
DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA INDUSTRIALE**

**CORSO DI LAUREA IN INGEGNERIA AEROSPAZIALE
CLASSE DELLE LAUREE IN INGEGNERIA INDUSTRIALE (L-9)**

Elaborato di laurea in Propulsione Aerospaziale

**MODELLAZIONE CFD DELLA
COMBUSTIONE IN UN MOTORE A RAZZO
OSSIGENO-METANO**

**Relatore:
Prof. Raffaele Savino**

**Correlatore:
Ing. Giuseppina Persico**

**Candidato:
Enrico di Capua
Matr. N35001566**

ANNO ACCADEMICO 2024 – 2025

Sommario

Negli ultimi decenni, lo sviluppo di software di simulazione CFD (Computational Fluid Dynamics) sempre più avanzati ha permesso di ottenere risultati sempre più affidabili riguardo al comportamento dei fenomeni fisici e chimici di flussi ad alta temperatura, riducendo la dipendenza da test sperimentali estremamente costosi e complessi. È chiaro però che la validità delle simulazioni dipende fortemente dalla tipologia degli approcci adottati in fase di simulazione. Questa tesi si propone di mettere in evidenza tali differenze nello specifico caso dello studio della combustione in un motore a razzo a disposizione del laboratorio di Propulsione Spaziale dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II", analizzando e confrontando l'approccio Chemical Equilibrium e Steady Diffusion Flamelet attraverso il software di simulazione CFD Ansys Fluent. Nel primo capitolo verrà fatto cenno sulla storia e lo sviluppo degli endoreattori, sulle principali differenze tra endoreattori convenzionali e non convenzionali e una ricapitolazione sui principali parametri delle prestazioni degli stessi. Nel secondo capitolo verrà affrontata la metodologia utilizzata per lo studio del caso in esame, analizzando modelli di combustione (Chemical Equilibrium e Steady Diffusion Flamelet), di turbolenza (RANS), di radiazione termica (P1), e discutendo della funzione densità di probabilità (PDF) e del rapporto di miscelamento (mixture fraction). Si proseguirà con una guida per la valutazione della qualità della discretizzazione numerica. Il terzo capitolo mostrerà i risultati ottenuti attraverso il software, confrontando quattro diverse configurazioni di simulazione: Chemical Equilibrium, Chemical Equilibrium con radiazione, Steady Diffusion Flamelet e Steady Diffusion Flamelet con radiazione. Il quarto e ultimo capitolo discuterà le conclusioni di questo lavoro di tesi con un breve accenno sui possibili sviluppi migliorativi dei modelli implementati.

Indice

1	Introduzione	1
1.1	Cenni storici sulla propulsione spaziale	1
1.2	Classificazione degli endoreattori	2
1.3	Principali parametri di funzionamento	4
1.4	Camere di combustione	6
2	Metodologia	8
2.1	Ansys Fluent e l'ambiente CFD	8
2.2	Modelli di combustione	9
2.2.1	Equazione di trasporto delle specie	9
2.3	Rapporto di miscelamento	10
2.4	Chemical Equilibrium.....	11
2.5	Steady Diffusion Flamelet	11
2.5.1	Funzione densità di probabilità PDF	13
2.6	Diffusione delle specie all' ingresso del dominio.....	13
2.7	Modelli di turbolenza.....	14
2.8	Modello di radiazione termica P1	17
2.9	Tipologia della mesh.....	17
2.9.1	Qualità della mesh	18
3	Risultati e confronto delle simulazioni.....	19
3.1	Geometria della camera di combustione.....	20
3.2	Costruzione della mesh.....	21
3.3	Simulazioni effettuate.....	22

3.4	Chemical Equilibrium.....	23
3.4.1	Distribuzione di temperatura	24
3.4.2	Frazione di massa dei reagenti	24
3.4.3	Frazione di massa del radicale idrossile OH	25
3.4.4	Plot di pressione.....	26
3.5	Steady Diffusion Flamelet	27
3.5.1	Distribuzione di temperatura	27
3.5.2	Frazione di massa dei reagenti	28
3.5.3	Frazione di massa del radicale idrossile OH	28
3.5.4	Plot di pressione.....	29
3.6	Effetto della radiazione termica sui modelli simulati.....	30
3.6.1	Chemical Equilibrium.....	30
3.6.2	Flamelet.....	31
4	Conclusioni - Confronto dei modelli.....	33
5	Bibliografia	34

Indice delle Figure

Figura 1.1 Il primo lancio di un Saturn V - 9 nov. 1967 [2].....	2
Figura 1.2 Konstantin Tsiolkovsky [4].....	2
Figura 1.3 Schema di un motore a propellenti liquidi con sistema di alimentazione a gas pressurizzati [4]	3
Figura 1.4 Schema semplificato di un propulsore Arcjet [4]	4
Figura 2.1 Fiamma di diffusione laminare a flusso opposto [14].....	12
Figura 2.2 Classificazione del flusso in base al valore del numero di Reynolds	14
Figura 2.3 Esempio di radiazione termica [24]	17
Figura 2.4 Esempio di griglia strutturata (a sinistra) e non strutturata (a destra) attorno ad un profilo alare [26]	18
Figura 3.1 Geometria della camera di combustione [27]	20
Figura 3.2 Mesh strutturata [28]	21
Figura 3.3 Particolare della mesh all' outlet [28]	21
Figura 3.4 Contour di Temperatura modello Chemical Equilibrium [29].....	24
Figura 3.5 Contour della frazione di massa di CH ₄ nel modello Chemical Equilibrium [29] ..	25
Figura 3.6 Contour della frazione di massa di O ₂ nel modello Chemical Equilibrium [29]	25
Figura 3.7 Contour della frazione di massa di OH nel modello Chemical Equilibrium [29] ..	26
Figura 3.8 Plot di pressione su una linea che precede il restringimento all' outlet [29]	26
Figura 3.9 Contour di Temperatura modello Steady diffusion flamelet [29]	27
Figura 3.10 Contour della frazione di massa di CH ₄ nel modello Steady diffusion flamelet [29]	28
Figura 3.11 Contour della frazione di massa di O ₂ nel modello Steady diffusion flamelet [29]	28
Figura 3.12 Contour della frazione di massa di OH nel modello Steady Diffusion Flamelet [29]	29
Figura 3.13 Plot di pressione su una linea che precede il restringimento all' outlet [29]	29
Figura 3.14 Contour di Temperatura nel modello Chemical Equilibrium con radiazione termica [29]	30
Figura 3.15 Contour di Temperatura nel modello Steady diffusion flamelet con radiazione termica [29]	31

Figura 3.16 Contour della frazione di massa di CO ₂ nel modello Steady Diffusion Flamelet [29]	
.....	31
Figura 3.17 Contour della frazione di massa di H ₂ O nel modello Steady Diffusion Flamelet [29]	
.....	32

Indice delle Tabelle

Tabella 2.1 Valori di riferimento per la valutazione della qualità della mesh	19
Tabella 3.1 Dimensioni della camera di combustione	20
Tabella 3.2 Valori per la valutazione della qualità della mesh ottenuti nelle simulazioni	22

1 Introduzione

L'esplorazione dello spazio rappresenta una delle sfide tecnologiche più ambiziose mai affrontate dall'umanità. La necessità di trasportare carichi utili, strumenti scientifici o anche esseri umani al di fuori dell'atmosfera terrestre ha permesso lo sviluppo di sistemi tecnologicamente avanzati. Questa spinta all'innovazione ha avuto ricadute non solo sul settore aerospaziale, ma anche su quello elettronico, sulla ricerca di materiali avanzati e sulla modellazione numerica dei fenomeni fisici correlati. Oggi, software avanzati di simulazione CFD (Computational Fluid Dynamics) permettono di analizzare con alta precisione fenomeni termofluidodinamici all'interno dei motori a razzo, fornendo un importante supporto alla progettazione e alla validazione sperimentale. In questo contesto, risulta fondamentale continuare a investire nella loro ottimizzazione, considerando sia lo sviluppo tecnologico ad esso associato che le future missioni lunari, marziane o interplanetarie da affrontare nel prossimo futuro [1]. Questa tesi, basandosi sui risultati ottenuti dalle simulazioni, si pone l'obiettivo di valutare l'influenza dei modelli fisici adottati sui principali parametri caratterizzanti i fenomeni di combustione, quali distribuzioni di temperatura, frazioni di specie, valori di pressione in zone critiche, e coefficienti che valutano la qualità della mesh e della simulazione stessa. In particolare, verrà preso in considerazione un motore a razzo bipropellente di classe 200 N, alimentato utilizzando metano (CH_4) come combustibile e ossigeno (O_2) come ossidante. Quest'ultimo è stato progettato per essere testato presso il Laboratorio di Propulsione Aerospaziale dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II", situato presso l'aeroporto "F. Baracca" di Grazzanise (CE). Il suddetto laboratorio è progettato principalmente per testare motori di endoreattori, con l'obiettivo di valutarne i parametri operativi caratteristici.

1.1 Cenni storici sulla propulsione spaziale

I motori a razzo, noti anche come endoreattori (Figura 1.1), sono sistemi propulsivi che operano secondo il principio della terza legge della dinamica di Newton. A differenza degli esoreattori, che tipicamente prelevano dall'ambiente esterno l'ossidante, ovvero l'aria, gli endoreattori trasportano con sé sia il combustibile che l'ossidante. Questo li rende particolarmente adatti anche alle condizioni di volo nel vuoto o di atmosfera rarefatta [1].



Figura 1.1 Il primo lancio di un Saturn V - 9 nov. 1967 [2]

Le prime versioni rudimentali dei razzi risalgono a Feng Jishen, vissuto intorno al 970 a.C. in Cina, che sperimentò l'uso della polvere da sparo inserita in canne di bambù. Nel corso dei secoli, i razzi furono progressivamente sviluppati e impiegati come armi da guerra: nel 1300 dai Mongoli e dagli Arabi, nel 1700 dall'esercito britannico durante le campagne in India e, successivamente, nelle guerre di indipendenza americana. L'impiego dei razzi a scopo scientifico iniziò invece solo nel XX secolo, grazie agli esperimenti condotti da Konstantin Tsiolkovsky negli anni Venti [3].

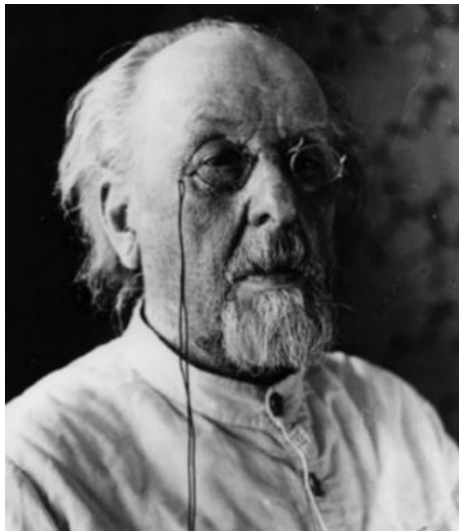


Figura 1.2 Konstantin Tsiolkovsky [4]

1.2 Classificazione degli endoreattori

Gli endoreattori possono essere classificati in convenzionali e non convenzionali. I primi a loro volta si suddividono in endoreattori a propellenti solidi, liquidi o ibridi.

Gli endoreattori convenzionali sono caratterizzati dal fatto che la spinta necessaria al volo è generata sfruttando l'energia liberata dalle reazioni chimiche che avvengono nella camera di combustione, convertendola in energia cinetica mediante l'espansione dei gas attraverso un ugello.

Nei razzi a propellente solido, il combustibile e il comburente sono mescolati all'interno della camera di combustione, formando il grano propellente. Una volta acceso, il grano brucia in modo continuo fino al suo esaurimento. Questi endoreattori sono semplici e robusti ma allo stesso tempo offrono scarsa controllabilità della spinta una volta avviata la combustione. I razzi a propellente liquido utilizzano combustibile e comburente in forma liquida, stoccati in serbatoi separati e iniettati nella camera di combustione tramite pompe e valvole (Figura 1.3). Questo consente di avere un controllo sulla spinta, poiché l'erogazione dei liquidi può essere regolata o interrotta a seconda della necessità; tuttavia, la complessità dei sistemi di alimentazione rende questi razzi più delicati in termini di sicurezza e costosi da progettare e gestire.

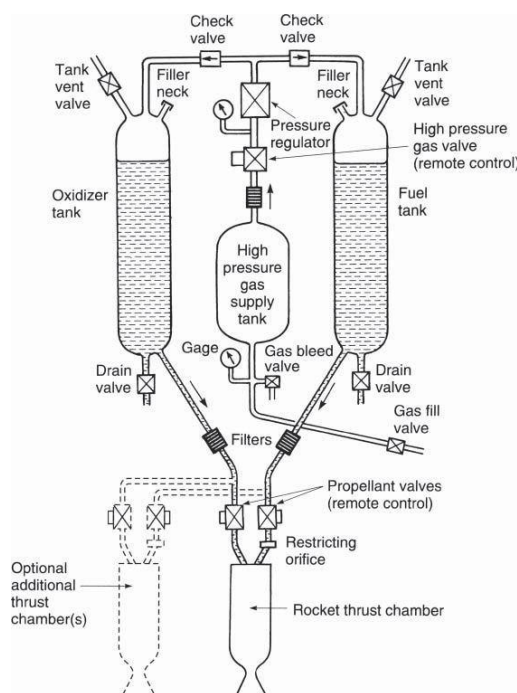


Figura 1.3 Schema di un motore a propellenti liquidi con sistema di alimentazione a gas pressurizzati

[4]

Infine, i razzi ibridi rappresentano un compromesso tra semplicità e controllo: combinano un propellente solido (generalmente il combustibile) con uno liquido (generalmente il comburente). Questi razzi sono più sicuri e meno delicati dei razzi liquidi, offrendo al contempo un maggiore controllo della spinta rispetto ai razzi solidi. Gli endoreattori non convenzionali, a

differenza dei motori chimici, non si affidano alla combustione di propellenti per generare spinta, ma impiegano altre fonti energetiche, come l'elettricità o l'energia nucleare per accelerare il propellente e ottenere la propulsione. Tra questi vi sono, ad esempio, i motori elettrici (Figura 1.4), che utilizzano campi elettrici e magnetici per accelerare particelle cariche, oppure i motori nucleari termici, in cui un reattore nucleare riscalda un fluido propellente che viene poi espulso attraverso un ugello. Questi sistemi, pur offrendo generalmente spinte inferiori rispetto a quelli chimici, possono garantire un'elevata efficienza, rendendoli particolarmente adatti per missioni spaziali a lungo termine. [4]

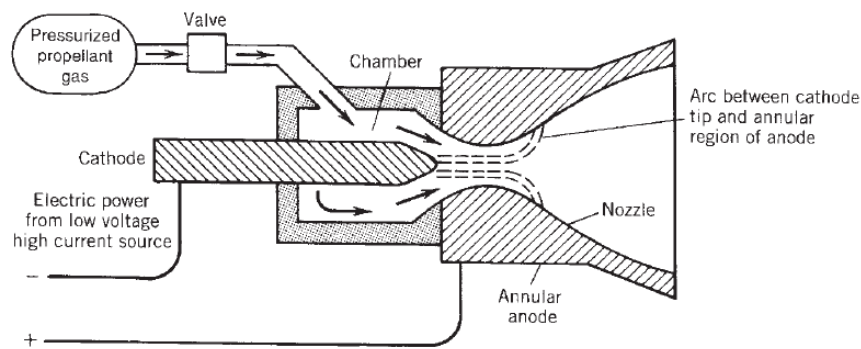


Figura 1.4 Schema semplificato di un propulsore Arcjet [4]

1.3 Principali parametri di funzionamento

La spinta F è la forza generata dal sistema propulsivo del razzo e agisce sul baricentro del veicolo [4]. Nei razzi, una piccola massa di propellente viene espulsa a velocità elevata, producendo una variazione di quantità di moto e quindi una spinta. Nel caso ideale in cui il flusso dei gas in uscita sia costante, uniforme e orientato assialmente, la spinta risultante può essere calcolata come:

$$F = \dot{m} \cdot v_2 + (p_2 - p_3)A_2 \quad (1)$$

Dove:

- \dot{m} è la portata massica del propellente
- v_2 è la velocità di uscita dei gas
- p_2 è la pressione all'uscita dell'ugello
- p_3 è la pressione ambiente
- A_2 è l'area di uscita dell'ugello

Il termine $(p_2 - p_3)A_2$ è detto spinta di pressione ed è dovuto alla differenza tra la pressione d'uscita dell'ugello e la pressione ambiente. Nel vuoto (dove $p_3 = 0$), questa componente di spinta raggiunge il valore massimo. Al contrario, se $p_2 < p_3$, la spinta da pressione diventa negativa, riducendo la spinta totale. Per questo motivo, gli ugelli a geometria fissa sono progettati per avere un'espansione ottimale a una data quota, dove $p_2 \approx p_3$. Un aspetto peculiare dei razzi è che la spinta non dipende dalla velocità del velivolo, ma varia con la quota: man mano che la pressione atmosferica diminuisce con l'altitudine, la spinta aumenta. Questo incremento può essere del 10–30% rispetto alla spinta al livello del mare [4]. L'impulso totale I_t rappresenta la quantità complessiva di spinta generata da un sistema di propulsione nel tempo, ed è calcolato come l'integrale della spinta F rispetto al tempo stesso:

$$I_t = \int_0^t F dt \quad (2)$$

In condizioni di spinta costante e trascurando i transitori di accensione e spegnimento, questa si riduce a $I_t = F \cdot t$. L'impulso totale è proporzionale all'energia totale rilasciata dal propellente durante la combustione.

L'impulso specifico I_s , invece, rappresenta la spinta fornita per unità di peso di propellente consumato nell'unità di tempo, ed è solitamente espresso in secondi:

$$I_s = \frac{I_t}{m_p \cdot g_0} \quad (3)$$

In alternativa, può essere valutato come:

$$I_s = \frac{\int_0^t F dt}{g_0 \int_0^t \dot{m} dt} \quad (4)$$

ottenendo così un valore calcolabile anche in condizioni transitorie. La velocità di efflusso equivalente, c , è un altro parametro che è direttamente collegato all'impulso specifico secondo la relazione:

$$c = I_s \cdot g_0 = \frac{F}{\dot{m}} \quad (5)$$

e rappresenta la velocità media con cui i gas esausti abbandonano il razzo dopo l'ugello.

La velocità caratteristica c^* è una grandezza che misura l'efficienza del processo di combustione nella camera di combustione e dipende solo dalle condizioni termodinamiche e dalla composizione del propellente, risultando indipendente dalla geometria dell'ugello. È definita come:

$$c^* = \frac{p_1 \cdot A_t}{\dot{m}} \quad (6)$$

È utilizzata per confrontare le prestazioni di diversi propellenti o le varie configurazioni della camera di combustione.

La velocità di efflusso equivalente c può essere vista come il prodotto di due termini:

$$c = c^* \cdot c_f \quad (7)$$

dove c_f è il coefficiente di spinta:

$$c_f = \frac{F}{p_0 \cdot A_{cr}} \quad (8)$$

c_f dipende fortemente dalla geometria dell'ugello, in particolare dal rapporto tra l'area d'uscita e di gola. Questi parametri, combinati, costituiscono la base per l'analisi e l'ottimizzazione dei sistemi di propulsione a razzo [4].

1.4 Camere di combustione

La camera di combustione è la parte del razzo in cui avviene la combustione dei propellenti. Le superfici interne della camera esposte ai gas caldi sono soggette a intensi fenomeni di scambio termico, prevalentemente per convezione e, in minore parte, per irraggiamento. Durante questa fase tipicamente si sviluppano temperature molto elevate (oltre 3000K), che si avvicinano o possono anche superare il punto di fusione dei materiali impiegati per la costruzione delle pareti della camera. Per evitare il cedimento strutturale, è quindi indispensabile utilizzare sistemi di raffreddamento e adoperare accorgimenti per aumentare la durata operativa del motore. Tra le tecniche di raffreddamento comunemente adottate si distinguono il raffreddamento rigenerativo, in cui il propellente liquido (solitamente il combustibile) scorre attorno alla camera prima di essere iniettato, e il raffreddamento radiativo, basato sull'uso di materiali ad alta temperatura in grado di irradiare il calore verso l'esterno. In alternativa, soprattutto per propellenti solidi, è diffuso l'impiego di rivestimenti ablativi, capaci di erodersi

progressivamente assorbendo calore latente [4]. La camera di combustione deve assicurare un'efficiente miscelazione tra i reagenti e una combustione quanto più completa possibile, per massimizzare la temperatura e la pressione all'uscita. La sua progettazione implica dunque un bilanciamento tra efficienza termochimica, stabilità della fiamma, durata strutturale e semplicità costruttiva. L'analisi CFD consente di esplorare questi aspetti attraverso simulazioni numeriche dettagliate, fornendo uno strumento potente per il progetto e l'ottimizzazione [5].

La reazione di combustione all'interno di una camera può essere classificata in base alla modalità con cui avviene la miscelazione tra combustibile e ossidante. Nei motori a combustione premiscelata (premixed), i due reagenti vengono miscelati prima dell'iniezione nella camera. Questo porta a una combustione più uniforme e completa, permettendo di ottenere elevate efficienze termiche. Tuttavia, questa configurazione rende il sistema più sensibile a fenomeni di instabilità, ovvero oscillazioni di pressione all'interno della camera che possono causare vibrazioni, diminuzioni di prestazioni o danni strutturali. Queste instabilità sono dovute al fatto che la fiamma premiscelata può propagarsi rapidamente nel dominio e reagire in modo amplificato anche a piccole perturbazioni. Nei motori a combustione non-premiscelata (non-premixed), come quello considerato in questa tesi, il combustibile e l'ossidante vengono invece iniettati separatamente all'interno della camera. Questo approccio è più stabile dal punto di vista della combustione e offre un maggiore controllo, perché consente di gestire separatamente la portata dei flussi di ossidante e combustibile. La configurazione non-premixed è particolarmente vantaggiosa in applicazioni come i razzi, tuttavia, il comportamento della fiamma risulta più difficile da modellare numericamente, in quanto la combustione avviene in un campo fortemente influenzato dalla turbolenza [6].

2 Metodologia

Il presente capitolo illustra i principali modelli fisici adottati per lo studio della combustione trattata. Verranno approfonditi gli aspetti relativi alla costruzione della mesh, ai parametri fondamentali per il controllo del processo combustivo, alla gestione delle condizioni al contorno e all'impiego dei diversi modelli fisici selezionati. In particolare, si analizzeranno i due modelli di combustione principali utilizzati nello studio: il modello Chemical Equilibrium, basato sull'assunzione di equilibrio chimico istantaneo e il modello Steady Diffusion Flamelet, in grado di descrivere in modo più realistico i fenomeni chimici e turbolenti. I risultati delle simulazioni ottenuti mediante la metodologia qui descritta saranno presentati nel capitolo successivo, mettendo in evidenza vantaggi, limiti e motivazioni che hanno portato alla scelta di un determinato approccio modellistico rispetto ad altri.

2.1 Ansys Fluent e l'ambiente CFD

La simulazione fluidodinamica (CFD) rappresenta un potente strumento nell'ambito delle applicazioni industriali e ingegneristiche, consentendo di analizzare e predire il comportamento di molti tipi di fluidi in condizioni operative realistiche. Tra i software più diffusi nel campo della fluidodinamica computazionale vi è ANSYS Fluent che, basato sul metodo ai volumi finiti, consente di studiare le equazioni di Navier-Stokes e fenomeni relativi al trasporto di energia, reazioni chimiche, turbolenza, scambio termico, flussi laminari, turbolenti, multifase e molti altri. [7] Nel presente lavoro, Ansys Fluent è stato utilizzato per simulare il processo di combustione all'interno di una camera di combustione di un razzo bipropellente che utilizza metano (CH_4) come combustibile e ossigeno (O_2) come ossidante. In tutte le simulazioni si sono effettuate le seguenti ipotesi semplificative:

- Flusso stazionario (steady-state)
- Flusso compressibile
- Flusso turbolento
- Combustione non-premixed
- Trascurabilità degli effetti gravitazionali

Il processo di simulazione è svolto attraverso i seguenti passaggi:

1. Creazione di un progetto nel Workbench di Ansys
2. Definizione della geometria della camera di combustione in Ansys DesignModeler
3. Definizione e generazione della mesh in Ansys Meshing

4. Definizione delle proprietà fisiche del sistema, dei modelli fisici adottati e impostazione dei modelli numerici adeguati attraverso Ansys Fluent

2.2 Modelli di combustione

I principali modelli di combustione in Ansys Fluent possono essere di tipo premiscelati o non-premiscelati. Mentre nei primi i reagenti vengono miscelati prima della combustione, nei secondi il combustibile e l'ossidante entrano nel dominio separatamente e si mescolano solo dopo l'iniezione. Esempi tipici sono i bruciatori a diffusione industriali, i motori Diesel o – come nel presente caso di studio – una camera di combustione bipropellente CH_4/O_2 . Ansys Fluent è in grado di modellare la miscelazione e il trasporto di specie chimiche risolvendo equazioni di conservazione che descrivono fenomeni di convezione, diffusione e reazione per ciascuna specie. [8]

2.2.1 Equazione di trasporto delle specie

Per la risoluzione delle equazioni di conservazione delle specie chimiche, Ansys Fluent calcola la frazione di massa locale Y_i di ciascuna specie attraverso la soluzione di un'equazione di convezione-diffusione per la specie i -esima. L'equazione di conservazione assume la seguente forma generale:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v Y_i) = -\nabla \cdot J_i + R_i + S_i \quad (9)$$

Dove R_i è il tasso di produzione della specie i tramite reazione chimica, S_i è un'eventuale ulteriore produzione definita dall'utente tramite una certa sorgente. Questa equazione viene risolta per $N-1$ specie dove N è il numero totale di specie chimiche in fase fluida presenti nel sistema. Poiché la frazione di massa delle specie deve avere somma unitaria, la N -esima frazione di massa è determinata come 1 meno la somma delle $N-1$ frazioni di massa risolte. Per minimizzare l'errore numerico l' N -esima specie deve essere scelta come quella con la frazione di massa complessiva maggiore, ad esempio N_2 quando l'ossidante è l'aria. [9]

I termini di reazione che compaiono come termini sorgente nell'equazione (9) vengono calcolati tramite uno dei tre approcci riportati di seguito:

- Equazioni dirette della cinetica: l'effetto delle fluttuazioni turbolenti sulle velocità cinetiche viene trascurato e le velocità di reazione sono determinate direttamente dalla chimica generale.

- Modello Eddy dissipation: le velocità di reazione sono determinate partendo dal presupposto che la cinetica chimica sia rapida rispetto alla velocità con cui i reagenti vengono mescolati dalle fluttuazioni turbolenti, ossia i vortici (eddies). Questo modello ignora l'Arrhenius Rate durante le reazioni chimiche, risultando computazionalmente poco costoso ma, per risultati realistici, si dovrebbe avere la certezza che nel fenomeno studiato le scale temporali chimiche siano rapide rispetto alle scale temporali di turbolenza in tutto il dominio.
- Modello Eddy-Dissipation-Concept (EDC): la cinetica chimica non viene trascurata ma si considerano i fenomeni sia sulle scale temporali della turbolenza che della cinetica. Si noti che i calcoli cinetici chimici dettagliati possono essere computazionalmente molto costosi.

Tutti gli approcci descritti permettono di risolvere un'ampia gamma di applicazioni, inclusi sistemi di reazione laminari o turbolenti e sistemi di combustione con fiamme premiscelate, non premiscelate o parzialmente premiscelate. È tuttavia importante fare particolare attenzione al costo computazionale associato ad ogni modello, soprattutto in casi di forte turbolenza, di molte specie chimiche coinvolte o di meccanismi di reazione complessi. Per ridurre il costo computazionale, piuttosto che risolvere direttamente l'equazione (9) per ogni specie, è possibile utilizzare uno dei seguenti modelli:

- Chemical Equilibrium
- Steady Diffusion Flamelet

2.3 Rapporto di miscelamento

Un parametro fondamentale per la descrizione dei modelli di combustione è il rapporto di miscelamento. Il rapporto di miscelamento f (mixture fraction) è uno scalare conservativo che rappresenta la frazione di massa degli elementi provenienti dal getto di combustibile (C, H, ...) presenti in tutte le specie locali (CH_4 , O_2 , CO_2 , H_2O ...) [10].

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,\text{ox}}}{Z_{i,\text{fuel}} - Z_{i,\text{ox}}} \quad (10)$$

Dove:

Z_i	=	frazione di massa dell'elemento i nel punto considerato
$Z_{i,\text{ox}}$	=	frazione di massa dell'elemento i nell'ossidante puro
$Z_{i,\text{fuel}}$	=	frazione di massa dell'elemento i nel combustibile puro

- $f = 1 \Rightarrow$ gas interamente originato dal combustibile puro
- $f = 0 \Rightarrow$ gas interamente originato dall'ossidante puro

Nel caso di miscela composta dal solo flusso di combustibile e dal solo flusso di ossidante, si utilizza una Single Mixture Fraction. Quando si hanno più flussi distinti di combustibile o quando risulta necessario considerare il contributo nelle reazioni di specie inerti (CO_2 , N_2 , H_2O , ...) si usa una Two Mixture Fraction. In questo modo è possibile modellare due sorgenti di combustibile che possono avere composizione diversa o provenire da stream differenti e modificare le proprietà termodinamiche della miscela [11].

2.4 Chemical Equilibrium

Il modello Chemical Equilibrium assume che la combustione avvenga in condizioni di equilibrio istantaneo, trascurando la cinetica chimica dettagliata e considerando le reazioni chimiche complete e istantanee. Il termine di reazione nell'equazione (9) del trasporto delle specie è dato dall'equazione:

$$R_i = \rho \frac{Y_i^{\text{eq}} - Y_i}{\tau_{\text{char}}} \quad (11)$$

Dove:

- ρ = densità
- Y_i^{eq} = frazione media di massa della specie. L'apice 'eq' indica equilibrio chimico.
- τ_{char} = coefficiente di tempo caratteristico

L'Equazione (11) implica che le specie evolvono verso il loro stato di equilibrio chimico nel tempo caratteristico τ_{char} [12]. Poiché l'equilibrio chimico non dipende dalle reazioni o dalle velocità di reazione, per un dato tempo, il termine sorgente di reazione nell'Equazione (11) è indipendente dal meccanismo di reazione. Il calcolo delle frazioni di massa di ogni specie avviene tramite tabelle generate da Ansys tramite CHEMKIN [13]. In definitiva, il modello Chemical Equilibrium è un metodo di risoluzione con un basso costo computazionale adatto a modellare sistemi con reazioni molto veloci.

2.5 Steady Diffusion Flamelet

Il modello steady diffusion flamelet assume che la combustione turbolenta possa essere descritta come una serie di fiamme laminari di piccole dimensioni (flamelet - Figura 2.1) [14].

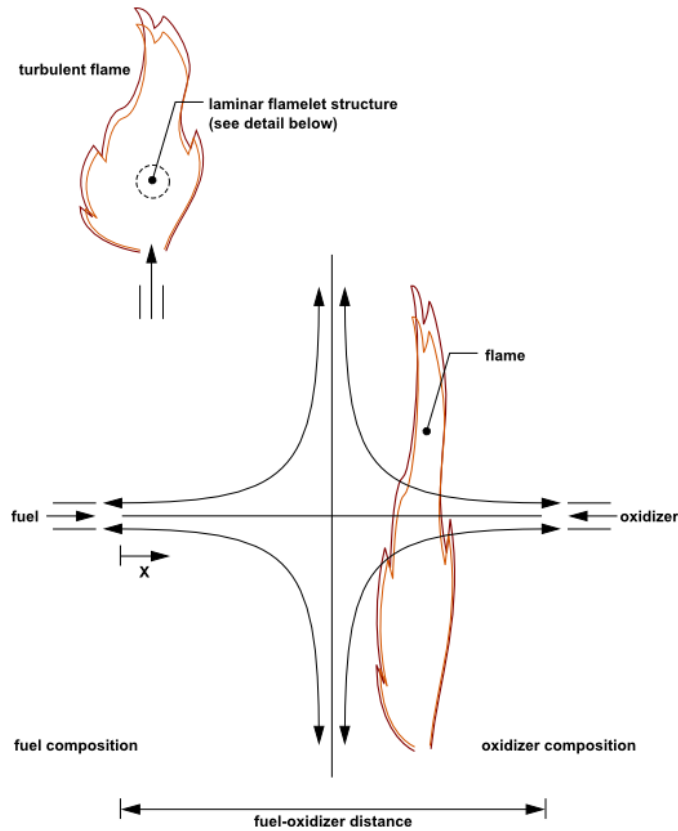


Figura 2.1 Fiamma di diffusione laminare a flusso opposto [14]

Piuttosto che risolvere l'equazione (9) per la singola specie, viene risolta un'equazione per la mixture fraction:

$$\partial_t(\rho f) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} f) = \nabla \cdot (D_t \nabla f) \quad (12)$$

Dove D_t è la diffusività turbolenta. Alla base di questo modello c'è il fatto che, sotto opportune ipotesi semplificative, lo stato termochimico del fluido è caratterizzato da un solo scalare conservativo, il rapporto di miscelamento f . Ciò trasforma il problema “chimico” in un puro problema di miscelamento. La termochimica viene:

1. Pre-calcolata off-line (flamelet library)
2. Tabulata come funzione di f
3. Interpolata tramite PDF per tenere conto delle fluttuazioni turbolenti.

Fluent risolve quindi uno (Single Mixture Fraction) o due (Two Mixture Fraction) scalari conservativi da cui ricava temperatura, densità e frazioni di massa di tutte le specie. Con questo modello l'intero stato termo-chimico della miscela viene determinato unicamente

attraverso la soluzione della sola equazione di f , riducendo il costo computazionale rispetto alla risoluzione diretta di tutte le equazioni di specie e consentendo un'ottima descrizione della fiamma in condizioni di turbolenza elevata [15].

2.5.1 Funzione densità di probabilità PDF

In questo specifico contesto, la funzione densità di probabilità PDF (Probability Density Function) è una funzione che descrive la distribuzione statistica di una variabile aleatoria in un sistema turbolento, valutando la probabilità di trovare un certo valore di una variabile termodinamica (temperatura, densità, composizione chimica) in un determinato intervallo di valori. Per problemi di combustione turbolenta, la PDF è utilizzata per modellare la variazione delle grandezze termodinamiche causata dalla turbolenza e dal mescolamento dei reagenti della combustione. Questo approccio semplifica notevolmente il calcolo perché, piuttosto che risolvere direttamente le equazioni di reazione chimica, Ansys Fluent valuta la distribuzione statistica della mixture fraction attraverso la PDF per calcolare i valori medi delle variabili termofluidodinamiche richieste. Questo significa che le proprietà chimiche in ogni punto sono ottenute mediando sui valori della PDF, piuttosto che risolvendo equazioni di reazione complesse punto per punto. Durante la simulazione, i valori richiesti vengono estratti dalla tabella pre-compilata utilizzando la PDF della mixture fraction, per ottenere poi una media ponderata delle variabili di interesse [16].

Esistono diversi modi di rappresentare la PDF, ad esempio:

- PDF di tipo δ □ È una distribuzione ideale: un delta di Dirac. Assume che la mixture fraction f abbia una singola determinazione, trascurando la varianza. Risulta semplice e veloce computazionalmente ma non gestisce la varianza.
- PDF di tipo β □ È una distribuzione continua in un intervallo $[0,1]$. Può modellare una varianza attorno ad un valore medio di f con un costo computazionale non troppo elevato [17].

Per il problema di interesse una PDF tipo β permette di descrivere meglio il comportamento turbolento e i gradienti di f in modo più realistico.

2.6 Diffusione delle specie all'ingresso del dominio

Su Ansys Fluent è possibile considerare la diffusione delle specie anche all'ingresso, migliorando la precisione nella zona di mixing. Per il solutore basato sulla densità, il trasporto delle specie agli ingressi del dominio è

caratterizzato solo da fenomeni convettivi. Per il solutore basato sulla pressione invece, il trasporto è caratterizzato da fenomeni sia convettivi che diffusivi. La componente di convezione è fissata dalla frazione di massa della specie all'ingresso, specificata dall'utente. La componente di diffusione, invece, dipende dalle condizioni al contorno imposte. Pertanto, la componente di diffusione (e quindi il trasporto netto all'ingresso) non è specificata a priori ma va considerata in maniera adeguata [18].

2.7 Modelli di turbolenza

I flussi possono essere categorizzati in due classi:

- Flussi laminari: non si ha rimescolamento e dissipazione di energia e velocità
- Flussi turbolenti: si è in presenza di un'oscillazione del valore di una certa grandezza che può portare ad un rimescolamento ed a una dissipazione di energia e velocità.

La classificazione è governata dal valore di un parametro adimensionale molto importante, il numero di Reynolds [1]:

$$Re = \frac{\rho V L}{\mu} \quad (13)$$

Il numero di Reynolds Re mette in relazione densità ρ , velocità del fluido V , dimensione caratteristica L e viscosità dinamica μ . A seconda del suo valore il flusso sarà laminare o turbolento, come mostrato in Figura 2.2:

<i>TIPOLOGIA DI FLUSSO</i>	<i>NUMERO DI REYNOLDS</i>
Laminare	$Re < 2300$
Transitorio	$2300 < Re < 4000$
Turbolento	$Re > 4000$

Figura 2.2 Classificazione del flusso in base al valore del numero di Reynolds

Dal momento che la combustione nei razzi avviene in un regime altamente turbolento, è fondamentale adottare un adeguato modello fisico che descriva accuratamente fenomeni di turbolenza. A tal fine gli approcci più utilizzati sono:

- Direct Numerical Simulation (DNS): L'approccio DNS è relegato perlopiù al campo della ricerca in quanto, implementando le equazioni della turbolenza direttamente nelle equazioni di Navier-Stokes, risulta poco pratico per applicazioni industriali.
- Large Eddy Simulation (LES): L'approccio LES risolve i vortici più grandi mentre modella quelli di media e piccola intensità. È un modello più leggero del DNS ma ancora troppo costoso computazionalmente per applicazioni pratiche.
- Reynold Averaged Navier-Stokes (RANS): Simile al LES ma vengono modellati anche vortici di media intensità, risolvendo solo quelli più intensi [19]. I modelli RANS sono in grado di gestire adeguatamente i gradienti di velocità, i fenomeni di separazione del flusso e i comportamenti nei pressi delle pareti, basandosi sulla risoluzione di due equazioni del trasporto per quantificare le proprietà della turbolenza. I modelli di turbolenza più comunemente utilizzati sono:
 1. k-ε: le due equazioni del trasporto che vengono risolte sono scritte in termini di energia cinetica turbolenta k e di tasso di dissipazione turbolenta ε :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \quad (14)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (15)$$

Dove μ_t è la viscosità turbolenta, P_k è il termine di produzione di turbolenza, $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, σ_ε , σ_k sono costanti empiriche. Questo modello risulta robusto e adatto a flussi che si sviluppano abbastanza lontano dalle pareti, ma è meno accurato nei pressi di curvature e in presenza di fenomeni di separazione [20].

2. k-ω: le due equazioni del trasporto che vengono risolte sono scritte in termini di energia cinetica turbolenta k e di frequenza specifica di turbolenza ω :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} k) = \nabla \cdot [(\mu + \sigma_k \mu_t) \nabla k] + P_k - \beta \rho k \quad (16)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \omega) = \nabla \cdot [(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \nabla \omega] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 \quad (17)$$

Dove β è un parametro empirico che regola la rapidità con cui ω si dissipa nel fluido. Con un più alto costo computazionale rispetto al modello $k-\epsilon$, il modello $k-\omega$ riesce a descrivere più accuratamente la turbolenza dei flussi alle pareti [21].

3. $k-\omega$ SST (Shear Stress Transport): combina la migliore caratteristica del modello $k-\epsilon$ ovvero l'accuratezza nel descrivere la turbolenza nelle zone lontano dalle pareti, con quella del modello $k-\omega$, ovvero la capacità di descrivere correttamente il flusso nelle zone vicino alle pareti [22]. Nelle simulazioni condotte in questo elaborato di tesi è stato scelto questo approccio ibrido con risultati molto precisi in presenza sia di gradienti intensi che di fenomeni di turbolenza.

La corretta rappresentazione dello strato limite vicino alle pareti richiede la valutazione del parametro adimensionale y^+ , tramite il quale si può caratterizzare la distanza normalizzata del primo nodo dalla parete nel contesto dei flussi turbolenti. È definito come:

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau y}{\mu} \quad (18)$$

Dove ρ è la densità locale, u_τ è la velocità di attrito (friction velocity), y è la distanza del primo nodo dalla parete e μ è la viscosità cinematica del fluido. Fisicamente y^+ rappresenta una misura della posizione relativa del punto di calcolo all'interno dei diversi strati del boundary layer turbolento: lo strato viscoso ($0 < y^+ < 5$), lo strato di transizione ($5 < y^+ < 30$) e lo strato logaritmico ($y^+ > 30$). La corretta valutazione di y^+ è fondamentale per garantire l'accuratezza del modello turbolento utilizzato, soprattutto nei modelli RANS, dove la modellazione del flusso vicino alle pareti è di fondamentale importanza. Ad esempio, per modelli con wall function, y^+ dovrebbe essere >30 , mentre per risoluzioni dirette dello strato limite, è preferibile $y^+ < 1$. Questo vincolo ha un forte impatto sulla generazione della mesh: attraverso la valutazione di y^+ si può verificare che il mesh sizing vicino alle pareti sia adeguato: un valore troppo alto o troppo basso può compromettere la qualità della simulazione [23].

2.8 Modello di radiazione termica P1

In molte applicazioni ad alta energia, come la combustione nella camera di un endoreattore, la radiazione termica (Figura 2.3) rappresenta un meccanismo di scambio energetico non trascurabile. Essa consiste nel trasferimento di energia sotto forma di onde elettromagnetiche emesse dalle pareti della camera, in funzione della temperatura che questa raggiunge. Il contributo radiativo diventa significativo soprattutto in presenza di gas caldi come i prodotti tipici della combustione.

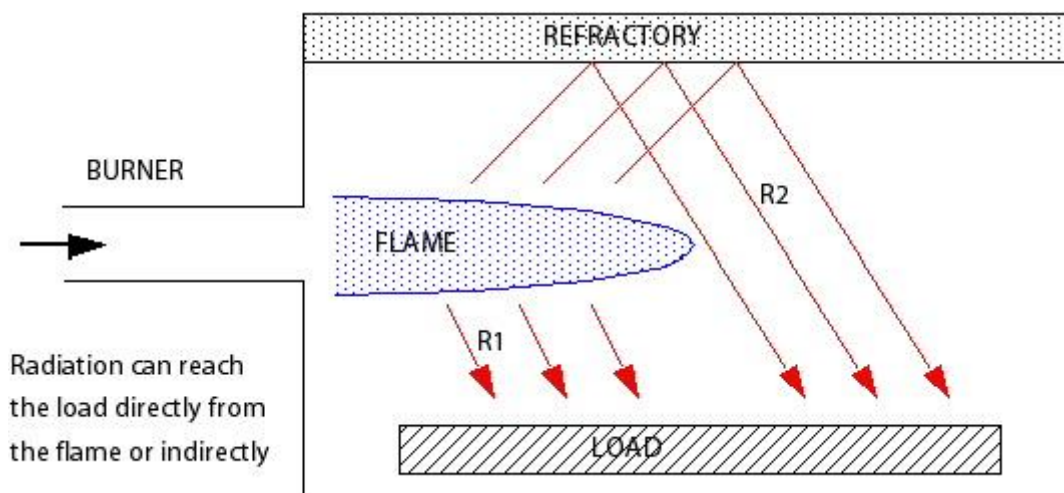


Figura 2.3 Esempio di radiazione termica [24]

In ANSYS Fluent viene spesso approssimata l'equazione del trasporto radiativo (RTE - Radiative Transfer Equation) che descrive il bilancio dell'energia radiante in ogni direzione, dal modello P1. Il modello P1 semplifica la RTE attraverso la formula:

$$\nabla \cdot (D \nabla G) - aG = -4\pi \alpha I_b \quad (19)$$

Dove: G è l'irradianza scalare (W/m^2), D è il coefficiente di diffusione, a è il coefficiente di assorbimento, I_b è l'intensità di corpo nero alla temperatura locale, α è il coefficiente di assorbimento della specie [25].

2.9 Tipologia della mesh

Nel contesto della simulazione fluidodinamica CFD, la scelta del tipo di griglia e la qualità della discretizzazione rappresentano due elementi di fondamentale importanza nell'ottica di garantire accuratezza, stabilità numerica e tempi di calcolo accettabili.

Le griglie costituiscono il supporto su cui vengono discretizzate le equazioni della fluidodinamica, stimando la soluzione numerica dei fenomeni fisici in questione. In generale si distinguono due tipologie di griglie: griglie strutturate e griglie non strutturate. Come si vede a sinistra in Figura 2.4, le griglie strutturate sono caratterizzate da una struttura regolare che permette di identificare ogni elemento tramite indici ordinati secondo un sistema cartesiano o curvilineo. Ogni cella segue una disposizione regolare nello spazio, spesso individuabile tramite una tripla (i, j, k) e questo consente un'elevata efficienza nei calcoli e nella memorizzazione dei dati, oltre a garantire una maggiore semplicità dell'applicazione di condizioni al contorno. Le celle di una mesh strutturata sono tipicamente rettangolari o quadrilaterali in 2D, oppure esaedriche in 3D, e sono particolarmente vantaggiose in domini geometricamente semplici e regolari, come per camere di combustione con geometria assialsimmetrica. Al contrario, come si vede a destra in Figura 2.4, le griglie non strutturate si caratterizzano per una connettività non ordinata tra le celle. Tipicamente queste ultime sono composte da elementi triangolari o tetraedrici. Anche se, grazie alla forma delle celle, le griglie non strutturate consentono una maggiore flessibilità nella modellazione di geometrie complesse e irregolari, tuttavia comportano un aumento importante del costo computazionale e una minore accuratezza di calcolo [26].

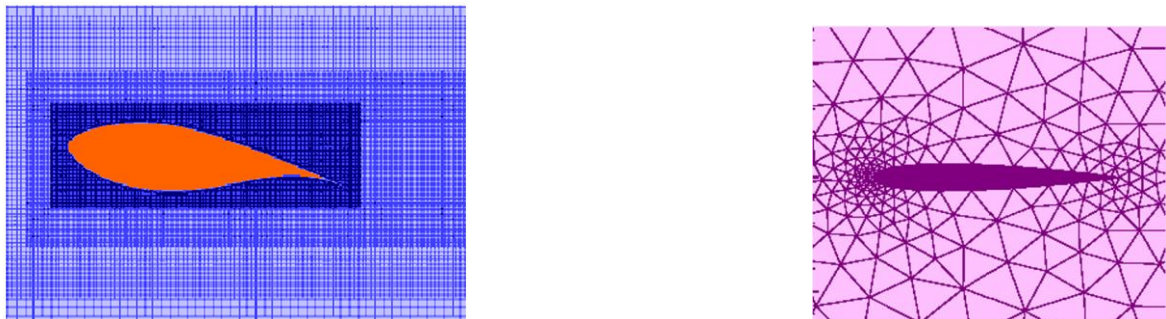


Figura 2.4 Esempio di griglia strutturata (a sinistra) e non strutturata (a destra) attorno ad un profilo alare [26]

2.9.1 Qualità della mesh

La mesh rappresenta il supporto numerico su cui vengono discretizzate le equazioni del moto e del trasporto per simulazioni CFD; perciò, errori o imprecisioni nella sua costruzione possono generare instabilità numeriche, scarsa convergenza e risultati fisicamente incoerenti. Per questo motivo, prima di procedere con l'analisi, è molto importante valutare la qualità della griglia attraverso specifici indicatori:

- **Aspect Ratio:** è il rapporto tra la lunghezza massima e minima di una cella. Celle con alto aspect ratio (celle molto allungate) possono introdurre errori nella valutazione dei gradienti.
- **Element Quality:** è un indicatore della forma di una cella, valutando quanto essa si avvicina a una geometria “ordinata” (per esempio quadrato in 2D, cubo in 3D). Celle con bassa element quality si presentano fortemente deformate e possono compromettere l’accuratezza del calcolo.
- **Skewness:** misura quanto un elemento è inclinato o distorto rispetto alla sua forma ideale. Celle con elevata skewness introducono instabilità nei metodi numerici, compromettendo la precisione delle interpolazioni specialmente nelle zone con alti gradienti.
- **Orthogonal Quality:** valuta quanto le celle contigue tendono ad essere ortogonali, cioè con facce che formano angoli retti tra di loro. Celle con bassa ortogonalità causano errori nella discretizzazione dei flussi, peggiorando la qualità della soluzione.

Questi parametri sono strumenti indispensabili per verificare che la mesh sia adatta al problema in esame e a garantirne la corretta risoluzione numerica. Si riportano in Tabella 2.1 alcuni valori di riferimento per la valutazione della qualità di una mesh.

Feature	Range	Significato
Aspect Ratio	Accettabile < 10	Valori alti indicano elementi allungati
Element Quality	0.8 - 1	Valore ideale 1
Skewness	0 - 0.25 ottimo, < 0.5 accettabile	Valori alti causano errori numerici
Orthogonal Quality	0.8 - 1	Misura l’ortogonalità degli elementi

Tabella 2.1 Valori di riferimento per la valutazione della qualità della mesh

3 Risultati e confronto delle simulazioni

In questo capitolo si presentano i risultati ottenuti dalle simulazioni con modelli descritti nel Capitolo 2. L’obiettivo è valutare l’efficacia e le differenze tra vari modelli di combustione, al fine di individuare quello più adatto a rappresentare il reale comportamento del sistema.

Nella camera di combustione simulata, di tipo cilindrico, i propellenti vengono iniettati separatamente attraverso quattro ingressi distinti (uno per il combustibile e tre per l'ossidante), secondo una configurazione non-premiscelata. Le condizioni operative sono state scelte in modo da riprodurre scenari realistici di funzionamento per motori bipropellenti.

3.1 Geometria della camera di combustione

Come si vede in Figura 3.1, è stata implementata la geometria della camera di combustione includendo i dettagli degli iniettori, della stessa camera, e dell'ugello fino alla gola. La parte divergente dell'ugello non è stata modellata, in quanto non rilevante ai fini dello studio delle prestazioni della camera di combustione.

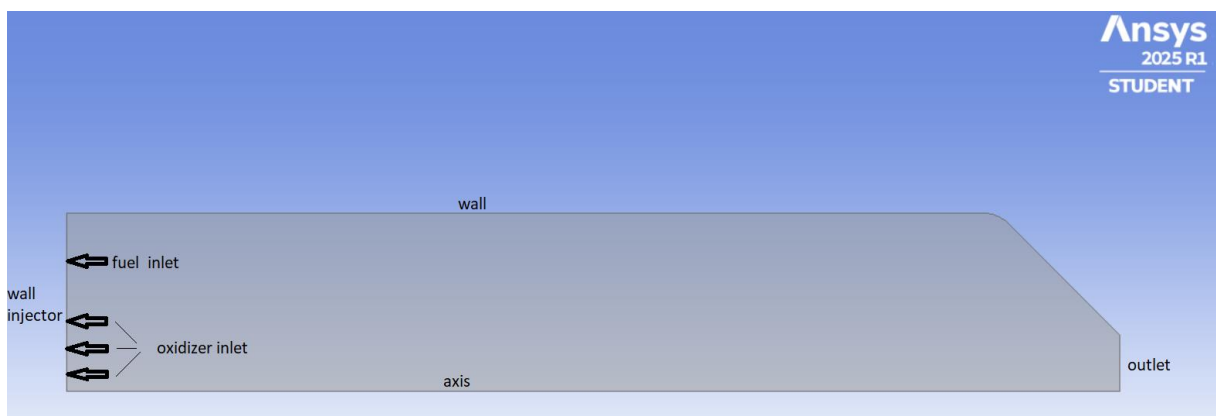


Figura 3.1 Geometria della camera di combustione [27]

Le dimensioni sono riportate in Tabella 3.1

Grandezze geometriche della camera di combustione	
Grandezza	Valore
Rapporto delle aree, A_c/A_t	10
Area della camera A_c [m^2]	$1.0 \cdot 10^{-3}$
Volume della camera V_c [m^3]	$1.02 \cdot 10^{-4}$
Diametro della camera D_c [m]	$3.61 \cdot 10^{-2}$
Lunghezza della camera L_c [m]	$9.42 \cdot 10^{-2}$
Diametro di gola dell'ugello D_t [m]	$1.14 \cdot 10^{-2}$
Area iniettore carburante A_{inj_fuel} [m^2]	$1.0698 \cdot 10^{-5}$
Area totale iniettori ossidante A_{inj_oxi} [m^2]	$2.01 \cdot 10^{-5}$

Tabella 3.1 Dimensioni della camera di combustione

3.2 Costruzione della mesh

La geometria della camera di combustione considerata, essendo relativamente regolare e simmetrica, si presta perfettamente a una discretizzazione di tipo strutturato. Questa scelta comporta una maggiore accuratezza numerica dei gradienti, un miglior controllo sul parametro y^+ essenziale per il modello di turbolenza SST, e in generale una maggior efficienza di calcolo. Nel caso in esame, si è costruita una mesh strutturata con 725424 elementi quadrilateri (Mapped Face Meshing - Figura 3.2 e Figura 3.3) e un infittimento locale in prossimità delle regioni di maggior interesse ovvero gli inlet e le pareti della camera, con dimensione caratteristica delle celle dell'ordine 10^{-5} m.

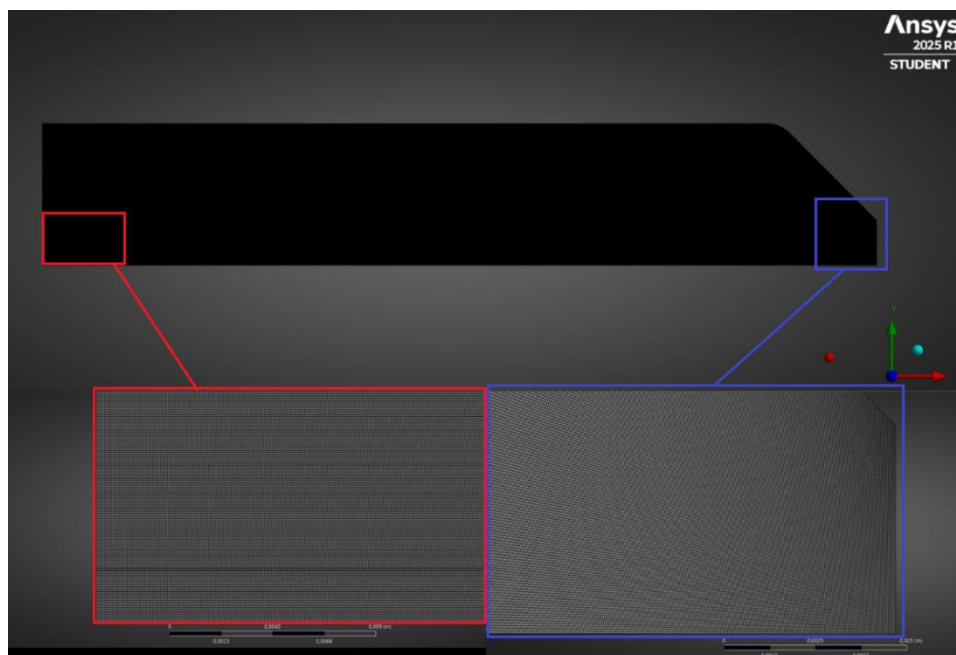


Figura 3.2 Mesh strutturata [28]

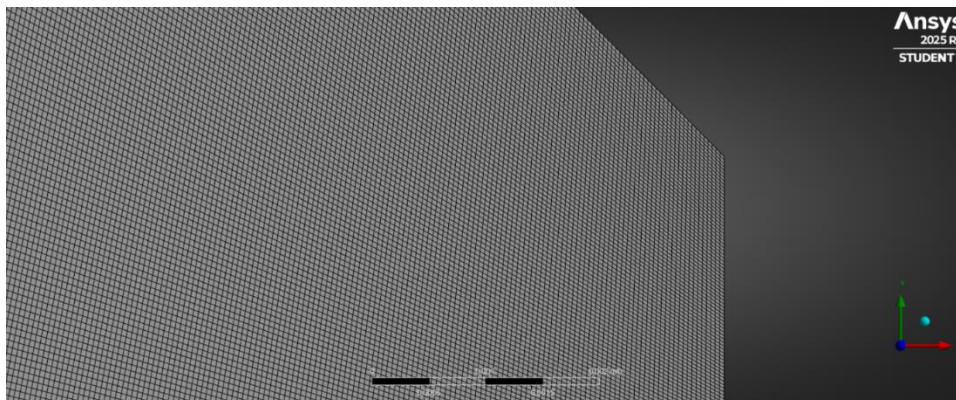


Figura 3.3 Particolare della mesh all'outlet [28]

Si riportano in *Tabella 3.2* i valori dei parametri caratteristici della mesh, utilizzati per valutarne la qualità.

Feature	Min	Max	Media	Deviazione Std.	Giudizio Qualitativo
Aspect Ratio	1	6.5411	2.3791	0.67545	Ottimo
Element Quality	0.61049	0.99999	0.72573	9.179E-002	Buono
Skewness	7.335E-005	0.50129	8.8826E-002	7.7948E-002	Ottimo
Orthogonal Quality	0.70189	1	0.98293	2.91E-002	Ottimo

Tabella 3.2 Valori per la valutazione della qualità della mesh ottenuti nelle simulazioni

Come si può notare, tutte le features rientrano nei range accettabili, con valori medi molto buoni e deviazioni standard contenute. In particolare:

- ✓ L'Aspect Ratio medio è basso, segno che gli elementi non sono eccessivamente allungati
- ✓ La Element Quality ha un valore medio superiore a 0.70
- ✓ La Skewness massima è pari a circa 0.50, al limite della soglia accettabile, ma la media è molto bassa
- ✓ La Orthogonal Quality presenta un valore medio molto vicino all'ideale, segno di una buona ortogonalità degli elementi

Questi risultati confermano che la mesh è di alta qualità e adatta alla simulazione CFD in esame.

3.3 Simulazioni effettuate

Le simulazioni sono state eseguite considerando le seguenti condizioni operative comuni per tutti i casi:

- Operating pressure: 0 Pa
- Initial inlet gauge pressure: 15 bar (1500000 Pa)
- Outlet gauge pressure: 101325 Pa
- Boundary Conditions temperature: 300 K
- Mean Mixture fraction e Mass Flow rate di CH₄ pari rispettivamente ad 1 e 0.0229 Kg/s
- Mean Mixture fraction e Mass Flow rate di O₂ pari rispettivamente a 0 e 0.0609 Kg/s

- Presenza di diffusione alle Boundary Conditions
- Combustione non adiabatica a 15 bar (1500000 Pa)
- Inizializzazione numerica Ibrida, 1000 Iterazioni totali e Time Scale Factor pari a 1
- Modello di turbolenza k- ω SST, con accuratezza garantita da valori di $y^+ < 1$

Si analizzano di seguito i risultati in dettaglio ottenuti per ciascun modello, mettendone in evidenza le differenze pratiche e confrontandoli con le corrispondenti versioni in cui è stato implementato anche il modello di radiazione termica P1.

3.4 Chemical Equilibrium

Il primo modello testato è il Chemical Equilibrium che, come spiegato nel Capitolo 2, è un modello che considera la combustione in condizioni di equilibrio chimico istantaneo, trascurando la cinetica dettagliata e ottenendo un'alta velocità computazionale. Per simulare la combustione non-premixed di metano (CH_4) e ossigeno (O_2), è necessario specificare un parametro chiamato Fuel Stream Rich Flammability Limit, che rappresenta la frazione massica del combustibile oltre la quale la miscela è considerata troppo ricca per essere infiammabile. ANSYS suggerisce di impostare questo valore a un valore doppio rispetto a quello stechiometrico [12].

Nel caso in questione:

$$Y_{\text{stechio}} = \frac{m_{\text{CH}_4}}{m_{\text{CH}_4} + m_{\text{O}_2}} = \frac{16.04}{16.04 + 2 \times 32.00} \approx 0.2003 \quad (20)$$

dove m_{CH_4} è la massa molare del metano e m_{O_2} è la massa molare dell'ossigeno molecolare. Dunque il valore raccomandato da impostare è $2 \times 0.2003 \approx 0.4$. Questa impostazione assicura che la combustione venga simulata solo nelle regioni in cui la miscela combustibile-ossidante è sufficientemente infiammabile. Non essendo prevista una modellazione più dettagliata del processo di miscelamento, nel modello Chemical Equilibrium si assume che ogni punto del dominio raggiunga l'equilibrio chimico istantaneamente.

3.4.1 Distribuzione di temperatura

Come si vede in Figura 3.4, la distribuzione di temperatura presenta una zona centrale ad alta temperatura nella regione di interazione tra combustibile e ossidante. La temperatura varia da un valore minimo di 271.9887 K a uno massimo di 3277.395 K, compatibilmente con il valore teorico di temperatura atteso.

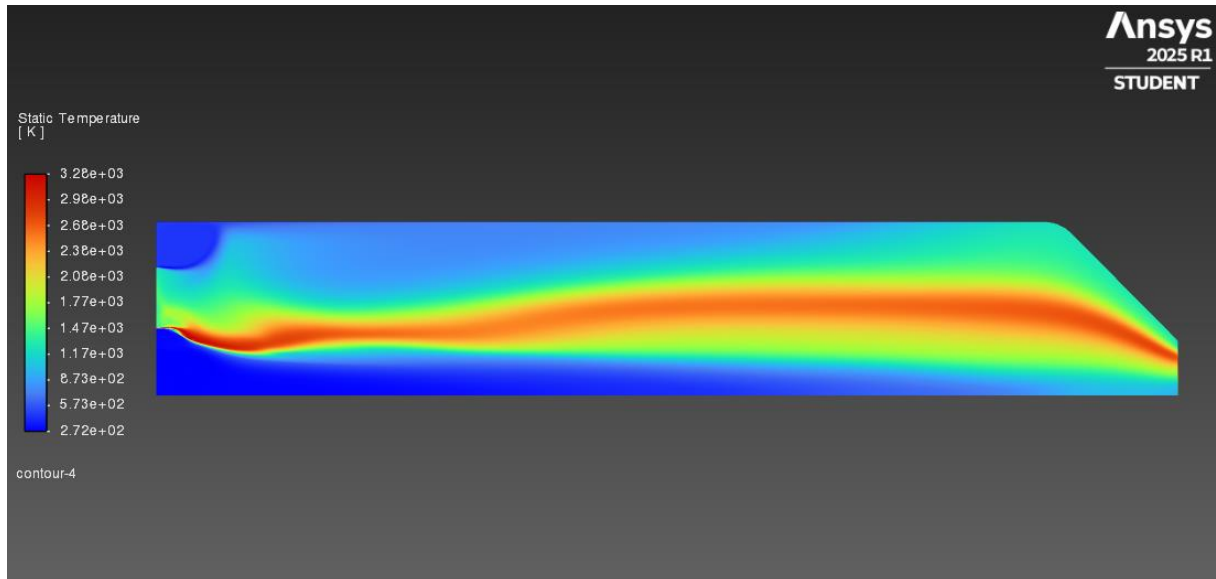


Figura 3.4 Contour di Temperatura modello Chemical Equilibrium [29]

3.4.2 Frazione di massa dei reagenti

Durante il processo di combustione non-premixed, attraverso i contour delle frazioni di massa di CH_4 e O_2 , si notano con chiarezza le zone di iniezione, miscelazione e reazione all'interno della camera di combustione. In particolare, in Figura 3.5 si nota che CH_4 è presente in quantità significativa lungo le linee di flusso provenienti dall'inlet del combustibile, mentre in Figura 3.6 l'ossigeno domina nei flussi provenienti dagli inlet degli ossidanti. All'avanzare dei flussi all'interno del dominio, questi si mescolano turbolentemente e avviene la reazione di combustione. La forma del contour di CH_4 appare più compatta rispetto a quella dell' O_2 , poiché il metano, iniettato da un singolo inlet, si diffonde in maniera più localizzata a differenza dell'ossigeno che mostra una diffusione più ampia, dovuta sia alla presenza di più ingressi distribuiti lungo la parete, sia a un valore di portata più alto in ingresso.

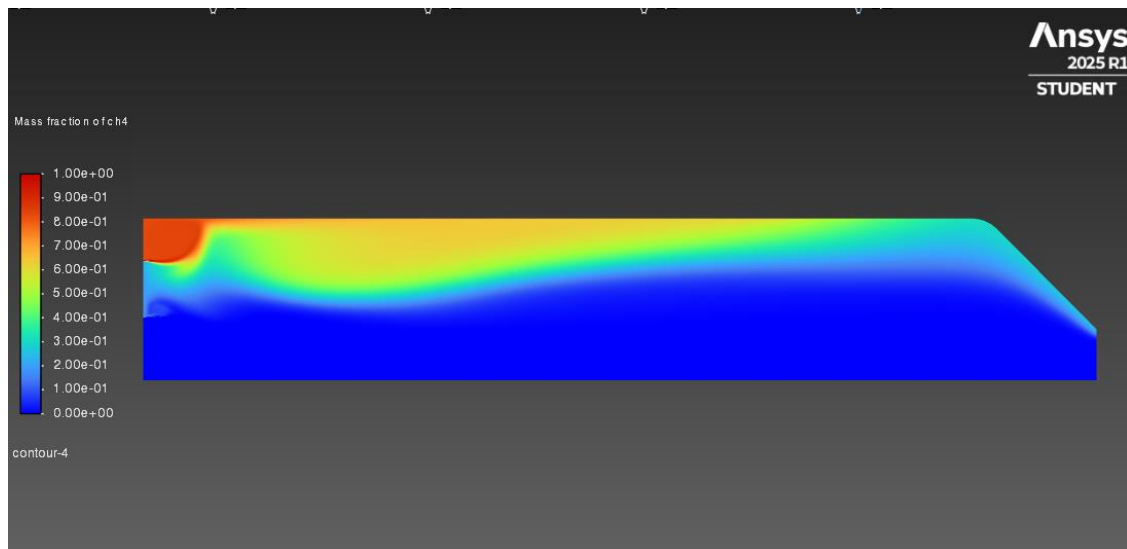


Figura 3.5 Contour della frazione di massa di CH_4 nel modello Chemical Equilibrium [29]

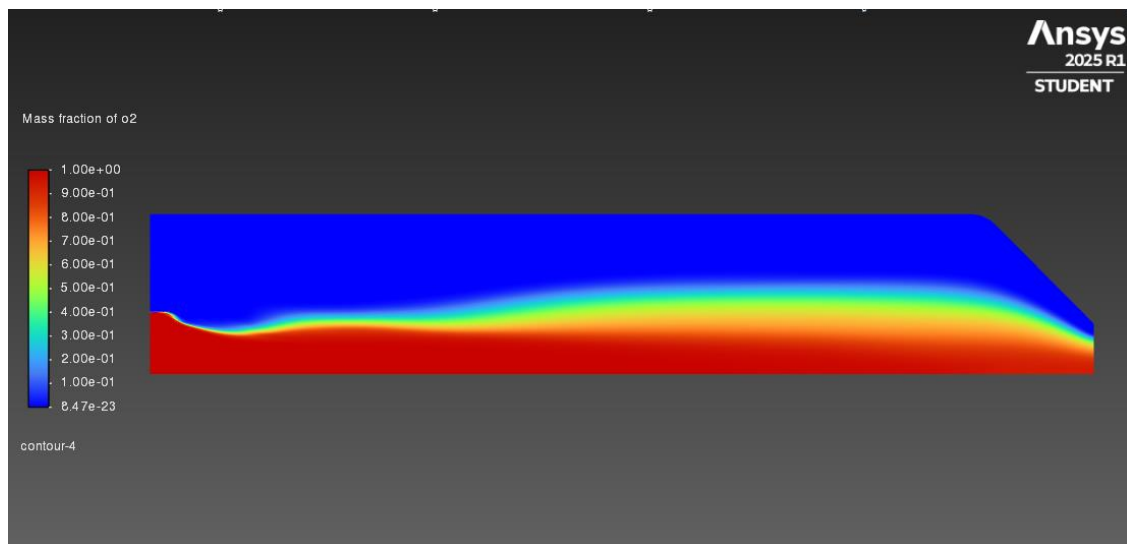


Figura 3.6 Contour della frazione di massa di O_2 nel modello Chemical Equilibrium [29]

3.4.3 Frazione di massa del radicale idrossile OH

Nella modellazione sperimentale dei processi di combustione, il radicale idrossile OH (presente nel caso studiato tra i prodotti della combustione), riveste un ruolo fondamentale come indicatore della struttura e della forma della fiamma. La distribuzione del radicale OH è stata infatti identificata come un indicatore affidabile delle zone di fiamma [30]. Ad esempio, studi hanno dimostrato che l'intensità della chemiluminescenza di OH è spesso utilizzata come indicatore della zona di combustione, grazie alla relativa facilità di rilevamento con tecniche ottiche [31]. Attraverso la visualizzazione del contour di OH, quindi, è possibile confrontare e validare i risultati numerici con le osservazioni sperimentali. Nel caso chemical equilibrium,

(Figura 3.7), la fiamma appare diffusa e meno definita, con una distribuzione del radicale OH ampia e uniforme, indice di una descrizione semplificata del processo combustivo.

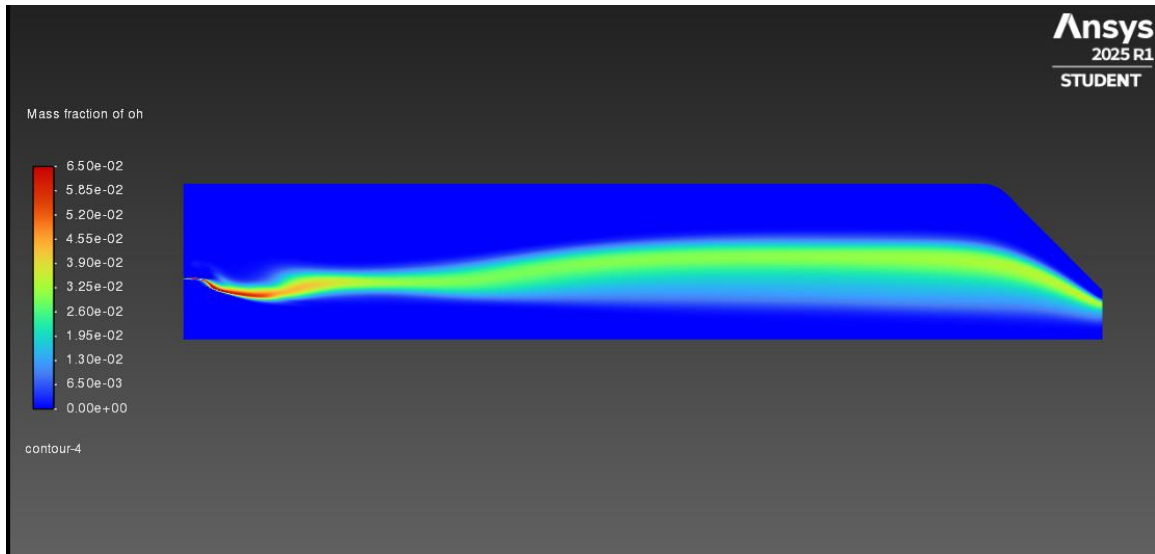


Figura 3.7 Contour della frazione di massa di OH nel modello Chemical Equilibrium [29]

3.4.4 Plot di pressione

In Figura 3.8 è riportato il plot della pressione su una linea immediatamente antecedente l'inizio del convergente dell'ugello, in prossimità dell'outlet. Il grafico mostra il valore della pressione al termine di un ciclo di calcolo di 1000 iterazioni. Questa zona è particolarmente significativa, poiché rappresenta una sezione critica del dominio dove il flusso subisce un'accelerazione importante a causa della variazione geometrica, e dove si concentrano forti gradienti di pressione. In questa zona la pressione del flusso si assesta verso un valore di 10.6 bar (1060000 Pa). Tale valore è sicuramente coerente con l'elevata pressione sviluppata all'interno della camera in seguito alla combustione.

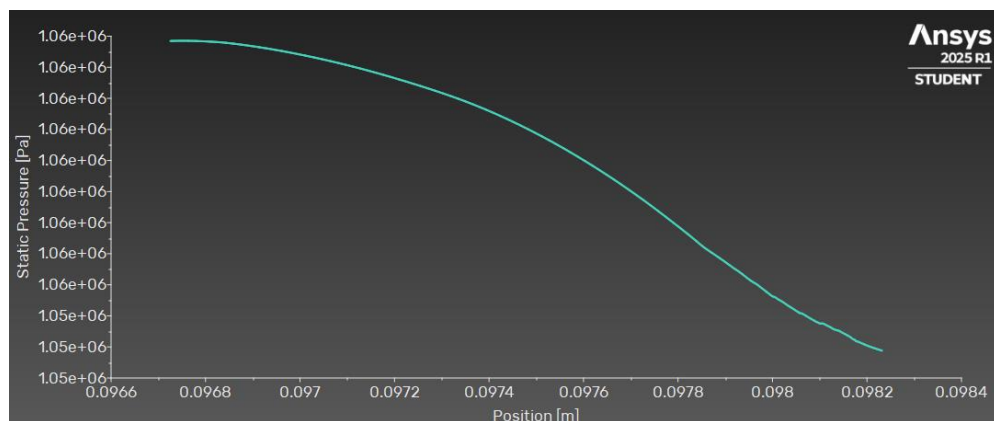


Figura 3.8 Plot di pressione su una linea che precede il restringimento all' outlet [29]

3.5 Steady Diffusion Flamelet

Il secondo approccio implementato è il modello Steady Diffusion Flamelet che, come spiegato nel Capitolo 2, si basa sul concetto che in regime turbolento, la combustione avviene attraverso piccoli “flamelet” presenti nel flusso. A differenza del Chemical Equilibrium, la composizione chimica non è calcolata direttamente, ma ricavata da librerie tabulate a partire da un file CHEMKIN (è stato importato il GRIMECH 3.0, che include 53 specie e 325 reazioni [32]). In questo modo vengono stimati parametri come temperatura, densità e composizione chimica in funzione della mixture fraction e della sua varianza, con calcolo mediato tramite una PDF di tipo β .

3.5.1 Distribuzione di temperatura

Il contour di temperatura calcolato tramite il modello flamelet (Figura 3.9) mostra una struttura della fiamma più dettagliata e localizzata rispetto al modello Chemical Equilibrium. La temperatura massima raggiunta è leggermente inferiore rispetto al modello chemical equilibrium, con un minimo di 267.616 K e un massimo di 3096.612 K.

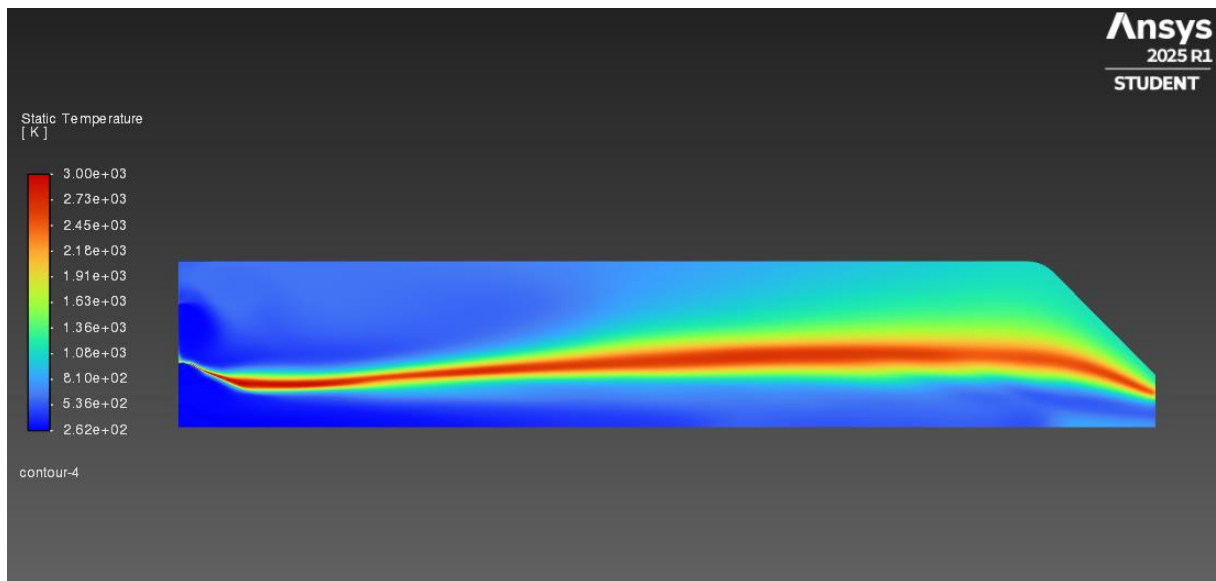


Figura 3.9 Contour di Temperatura modello Steady diffusion flamelet [29]

In Figura 3.9 si osservano gradienti termici più netti, indici di un miglior trattamento del trasporto termico. La presenza della PDF di tipo β consente una descrizione più realistica delle fluttuazioni turbolente nel dominio.

3.5.2 Frazione di massa dei reagenti

Rispetto al chemical equilibrium, questo modello riesce a cogliere i fenomeni di miscelamento in modo più fedele, sebbene al costo di una maggiore complessità computazionale. In Figura 3.10 e Figura 3.11 sono riportati i contour di mass fraction di CH_4 e di O_2 .

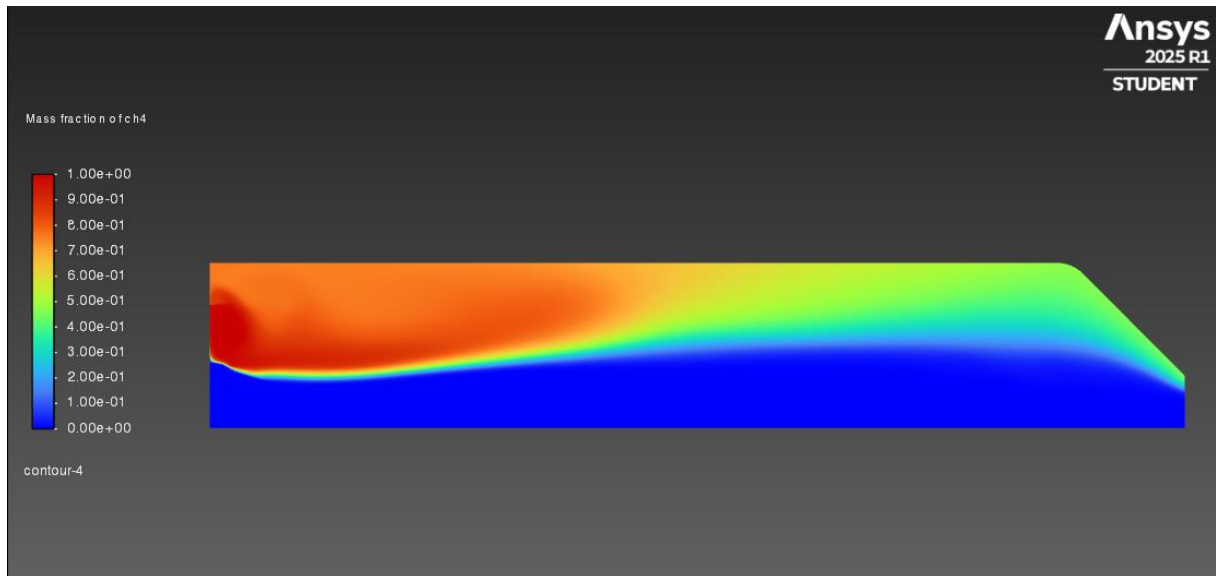


Figura 3.10 Contour della frazione di massa di CH_4 nel modello Steady diffusion flamelet [29]

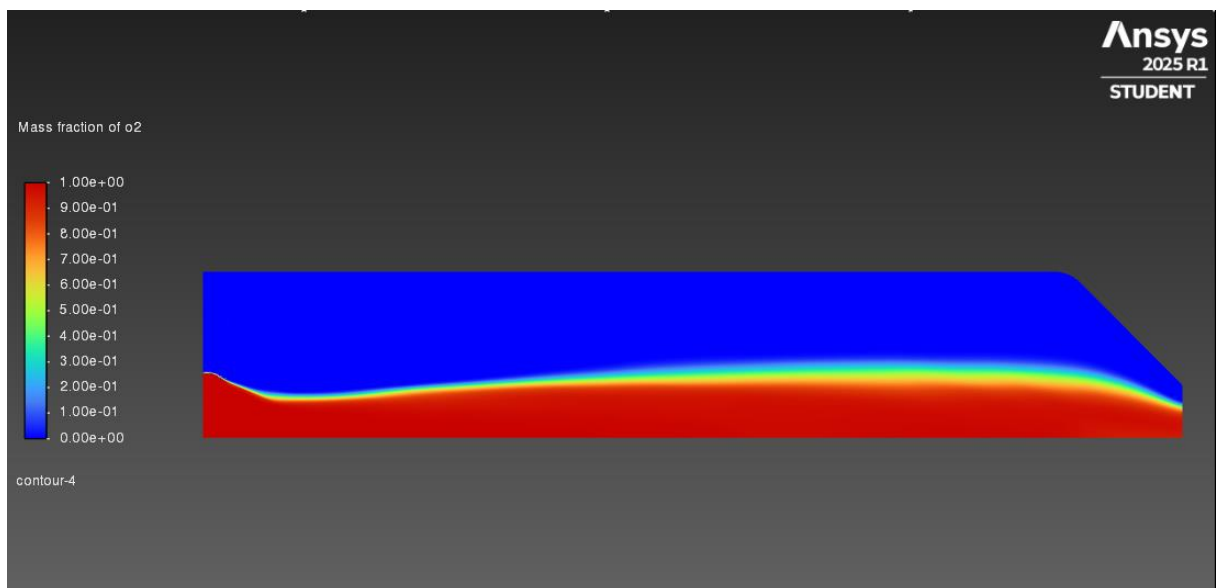


Figura 3.11 Contour della frazione di massa di O_2 nel modello Steady diffusion flamelet [29]

3.5.3 Frazione di massa del radicale idrossile OH

Nel modello flamelet, il contour di OH (Figura 3.12) mostra una fiamma più sottile, compatta e meglio localizzata rispetto al modello chemical equilibrium. Le zone di alta concentrazione di OH risultano ben definite lungo la regione di reazione, riflettendo la maggiore capacità del

modello di rappresentare accuratamente le dinamiche della combustione turbolenta non-premixed.

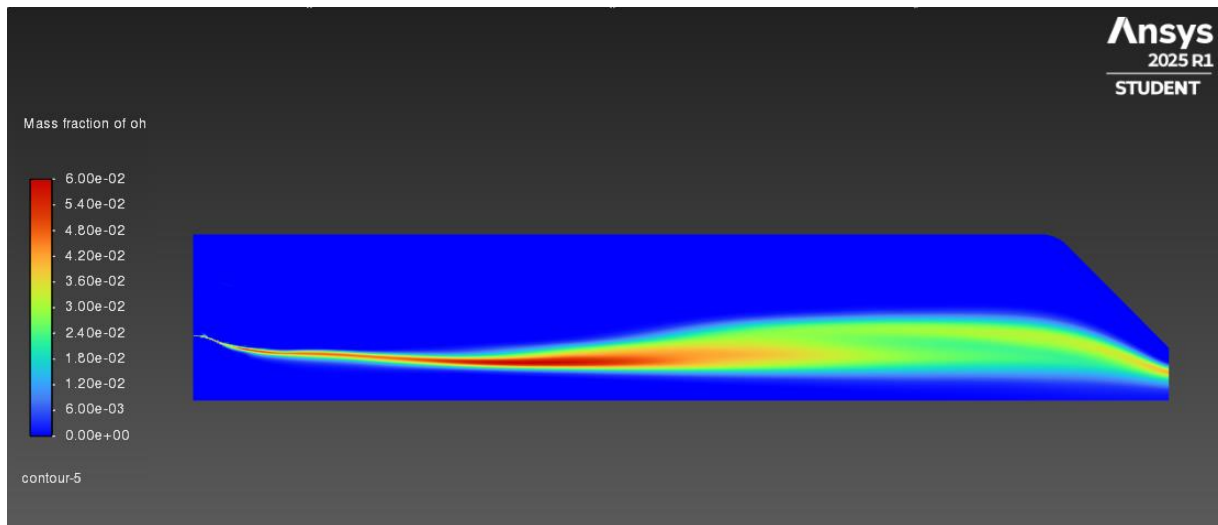


Figura 3.12 Contour della frazione di massa di OH nel modello Steady Diffusion Flamelet [29]

3.5.4 Plot di pressione

Così come per la temperatura, si osserva in Figura 3.13 che anche la pressione nei pressi dell'outlet risulta mediamente leggermente inferiore rispetto al modello Chemical Equilibrium, con un picco di circa 9.65 bar (965000 Pa).

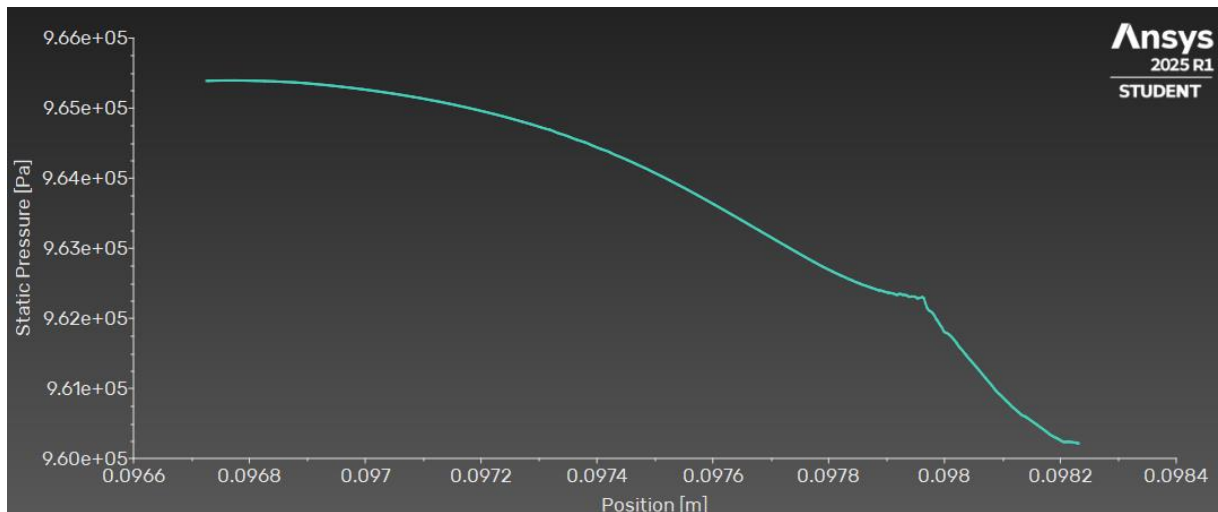


Figura 3.13 Plot di pressione su una linea che precede il restringimento all' outlet [29]

3.6 Effetto della radiazione termica sui modelli simulati

3.6.1 Chemical Equilibrium

L'introduzione del modello P1 ha permesso di includere gli effetti della radiazione termica emessa dai gas combusti e dalle pareti. Per entrambi i modelli è stato adottato un modello Non-Gray Multibanda. Attraverso il modello P1 multibanda quindi si può valutare più realisticamente l'influenza della radiazione nel processo di combustione, senza richiedere costi computazionali eccessivi [24].

Nel caso del Chemical Equilibrium (Figura 3.14), si osserva un leggero abbassamento della temperatura massima, stimabile a circa 3084.819 K, per effetto dell'energia irradiata. Le specie principali non subiscono variazioni significative, in quanto il modello rimane vincolato alle condizioni di equilibrio.

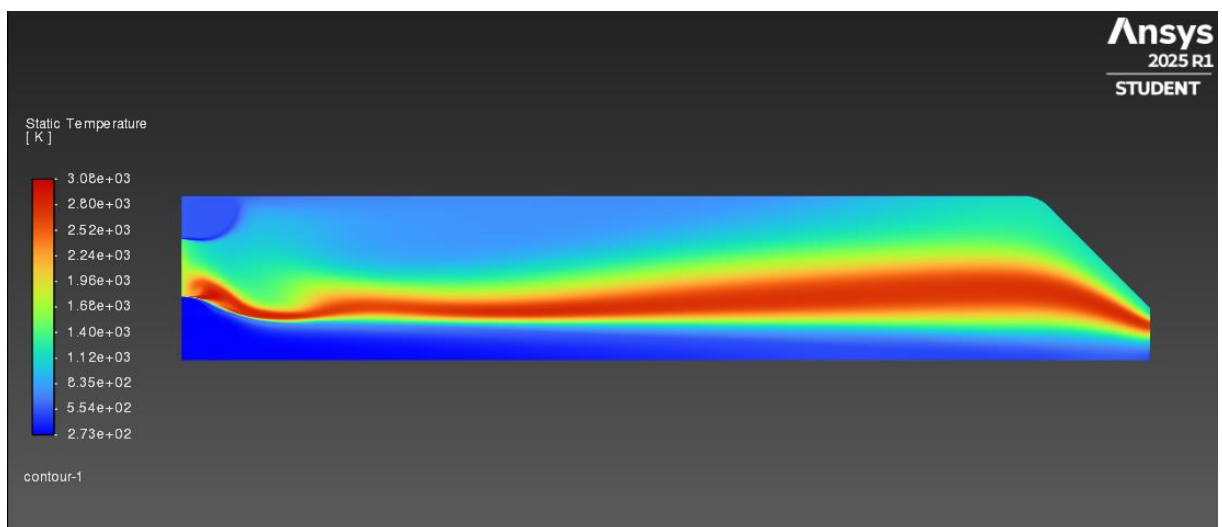


Figura 3.14 Contour di Temperatura nel modello Chemical Equilibrium con radiazione termica [29]

3.6.2 Flamelet

Nel caso Flamelet (Figura 3.15), l'effetto radiativo è ancora più evidente:

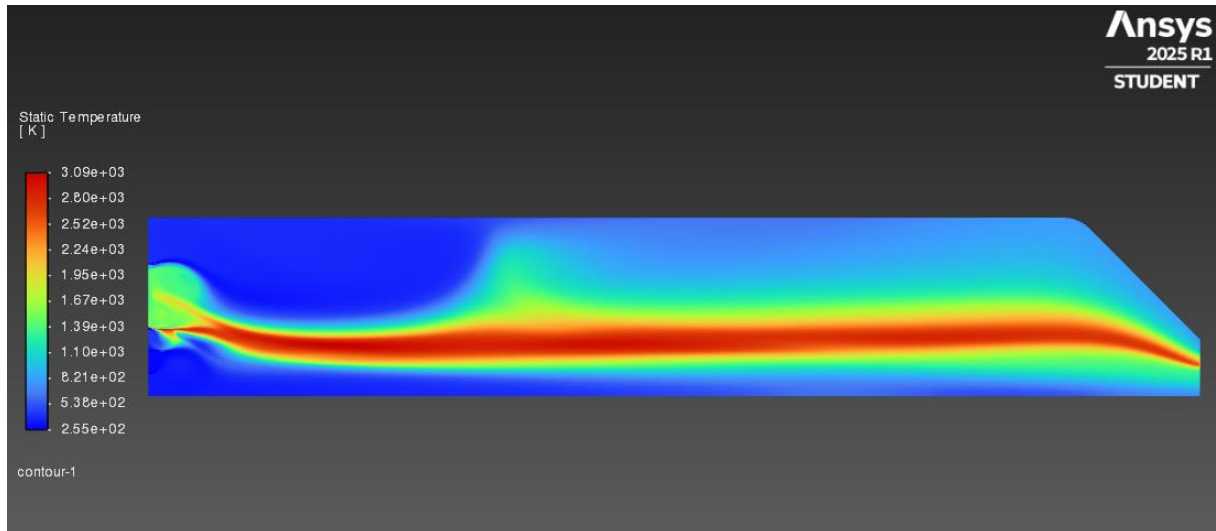


Figura 3.15 Contour di Temperatura nel modello Steady diffusion flamelet con radiazione termica [29]

Il risultato è una riduzione della temperatura massima all'interno della camera a un valore di 3085.599 K, dovuta alla perdita di energia per irraggiamento. Nel modello Flamelet accoppiato alla radiazione, risulta particolarmente significativo tenere conto della presenza di H_2O e CO_2 tra i prodotti della combustione (Figura 3.16 e Figura 3.17), in quanto entrambi i gas sono i principali responsabili dell'assorbimento e dell'emissione di radiazione termica. La loro concentrazione influenza direttamente il bilancio energetico all'interno della camera di combustione.

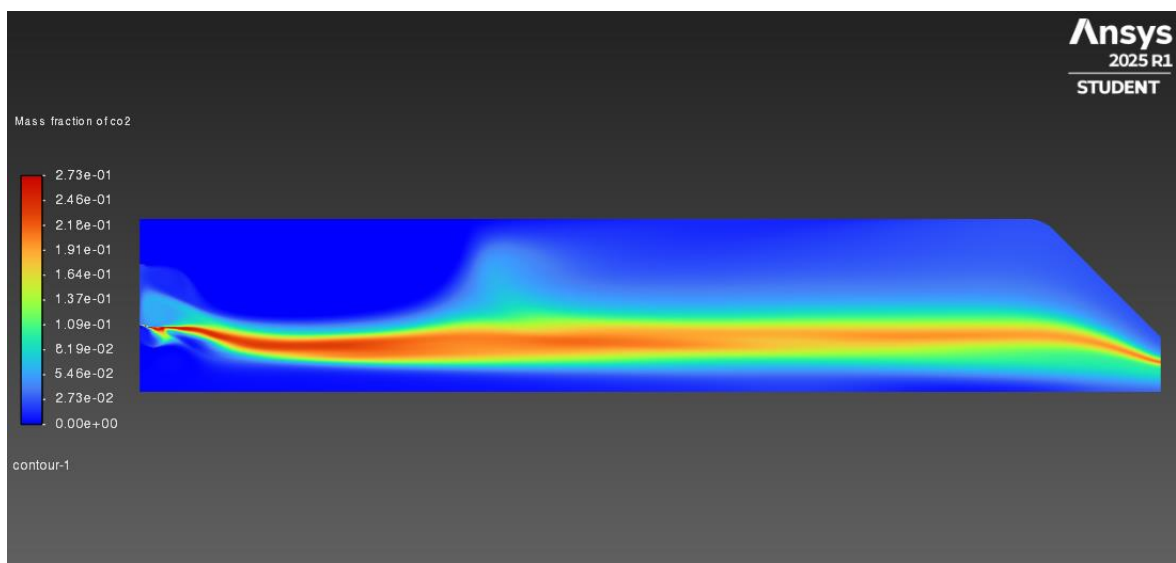


Figura 3.16 Contour della frazione di massa di CO_2 nel modello Steady Diffusion Flamelet [29]

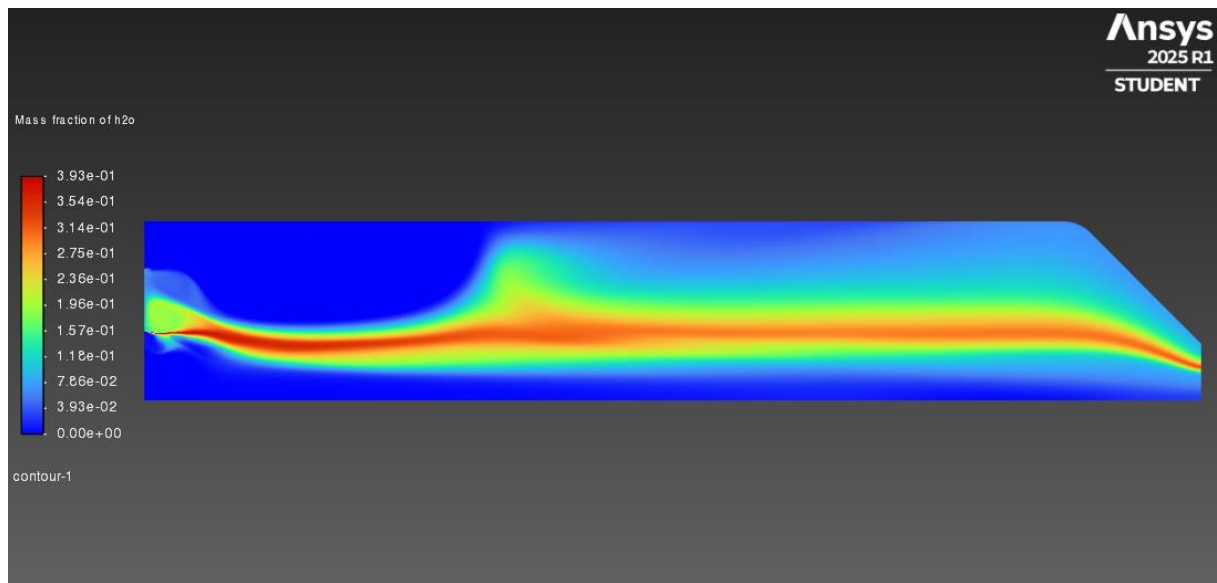


Figura 3.17 Contour della frazione di massa di H_2O nel modello Steady Diffusion Flamelet [29]

4 Conclusioni - Confronto dei modelli

Il lavoro svolto in questa tesi ha avuto l'obiettivo di analizzare numericamente tramite simulazioni CFD condotte in ANSYS Fluent, il comportamento termofluidodinamico di una camera di combustione bipropellente a metano (CH_4) e ossigeno (O_2). Mantenendo costanti le condizioni operative e geometriche, sono state implementate quattro configurazioni di simulazione: due basate sul modello Chemical Equilibrium, con e senza radiazione, e due basate sul modello Steady Diffusion Flamelet, anch'esse con e senza radiazione. Dall'analisi dei risultati è emerso che il modello Chemical Equilibrium è utile per una prima stima rapida, in quanto tende a semplificare il comportamento chimico reale, trascurando le specie intermedie e assumendo una combustione istantanea e completa. In questo modello la distribuzione di temperatura ottenuta è risultata con un valore massimo elevato, che potrebbe rivelarsi in alcuni casi piuttosto discordante dalle reali condizioni turbolenti. L'aggiunta del modello di radiazione P1 ha introdotto una riduzione della temperatura massima e una maggiore diffusione termica, migliorando la rappresentazione complessiva, senza alterare sostanzialmente la composizione chimica, ancora sotto le ipotesi di equilibrio chimico. Il modello Steady Diffusion Flamelet, invece, ha permesso di ottenere una descrizione molto più realistica della combustione. L'utilizzo del file Chemkin GRIMECH 3.0 e della PDF β ha consentito di rappresentare in modo dettagliato le fluttuazioni turbolenti, la presenza di specie intermedie come CO e H_2O , e una distribuzione termica più coerente con il comportamento atteso. L'accoppiamento con il modello P1 ha ulteriormente migliorato la qualità della simulazione, introducendo effetti radiativi significativi.

Nel complesso, il confronto tra i modelli ha evidenziato come la scelta del modello di combustione influisca notevolmente sui risultati ottenuti e sulla loro interpretazione. Il modello flamelet si è dimostrato il più adatto per simulazioni in cui è richiesta un'accurata descrizione sia della composizione chimica che del bilancio energetico. Il modello Chemical Equilibrium può invece risultare utile in fasi preliminari o in studi a bassa complessità.

In prospettiva futura, l'integrazione di modelli più avanzati come l'EDC (Eddy Dissipation Concept), potrebbe consentire di migliorare la precisione della descrizione dell'interazione turbolenta senza trascurare la chimica dettagliata, migliorando ulteriormente la capacità predittiva della simulazione.

5 Bibliografia

- [1] J. John D. Anderson, Modern Compressible Flow, McGraw Hill, 2003.
- [2] NASA.
- [3] M. J. K. Turner, Rocket and Spacecraft Propulsion Principles, Practice and New Developements (Second Edition), Springer, 2006.
- [4] G. P. Sutton e O. Biblarz, Rocket Propulsion Elements, Ninth Edition, New Jersey: Wiley, 2017.
- [5] Ansys, Ansys Fluent Theory Guide, U.S.A., July 2021 R2.
- [6] T. Poinso e D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion, R.T. Edwards, Inc, 20005.
- [7] Ansys, «Introduction to Ansys Fluent,» 11 16 2021. [Online]. Available: <https://www.ansys.com/resource-center/webinar/introduction-to-ansys-fluent>.
- [8] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 5: Heat Transfer,» 2024 R2. [Online].
- [9] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 5.2.1.3. The Energy Equation for the Non-Premixed Combustion Model,» [Online].
- [10] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 8.1.2. Non-Premixed Combustion and Mixture Fraction Theory,» 2024 R2. [Online].
- [11] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 1.3. User-Defined Scalar (UDS) Transport Equations,» 2024 R2. [Online].
- [12] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 7.1.1.2.7. The Relaxation to Chemical Equilibrium Model,» [Online].
- [13] Ansys, Ansys Chemkin Input Manual, 2025 R1.
- [14] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 8.1.4.2. The Flamelet Concept,» 2024 R2. [Online].
- [15] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 8.1.4. The Diffusion Flamelet Models Theory,» 2024 R2. [Online].
- [16] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 8.1.2.2.1. Description of the Probability Density Function,» 2024 R2. [Online].

- [17] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 8.1.2.2.3.2. The β -Function PDF,» 2024 R2. [Online].
- [18] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 5.2.1.13. Diffusion at Inlets,» 2024 R2. [Online].
- [19] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 7.1.1.2. The Generalized Finite-Rate Formulation for Reaction Modeling,» [Online].
- [20] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 4.3.1.2. Transport Equations for the Standard $k-\epsilon$ Model,» 2024 R2. [Online].
- [21] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 4.4.1.2. Transport Equations for the Standard $k-\omega$ Model,» 2024 R2. [Online].
- [22] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 4.4.3. Shear-Stress Transport (SST) $k-\omega$ Model,» 2024 R2. [Online].
- [23] F. Menter e R. L. -. A. Germany, «Best Practice: RANS Turbulence Modeling in Ansys CFD,» 2021. [Online].
- [24] Ansys, «When is a Non-Gray Spectral Model Appropriate?,» 2024 R2. [Online]. Available:
https://ansyshelp.ansys.com/public/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v242/en/cfx_mod/i1311256.html.
- [25] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 5.3.3. P-1 Radiation Model Theory,» 2024 R2. [Online].
- [26] M. Capozzi. [Online]. Available:
https://www.ingegneriadellenergia.net/documenti/articoli/adepron08_0002.pdf.
- [27] Ansys DesignModeler, Ansys Student, 2025 R1.
- [28] Ansys Meshing, Ansys Student, 2025 R1.
- [29] Ansys Fluent, Ansys Student, 2025 R1.
- [30] A. R.Choudhuria e S. Gollahalli, «Intermediate radical concentrations in hydrogen–natural gas blended fuel jet flames,» *International Journal of Hydrogen Energy*, n. 29, pp. 1293 - 1302, 2004.
- [31] S. Meng, S. Wu e M. Zhang, «Numerical and experimental study of flow structure and heat release distribution in a stratified swirl flame with highspeed PIV and OH measurements,» *AIP Advances*, 2021.

- [32] M. Frenklach, T. Bowman e G. Smith, University of California, Berkeley; Stanford University; SRI International, [Online]. Available: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>.
- [33] Ansys, «Fluent Theory Guide,» 2024 R2. [Online]. Available: https://ansyshelp.ansys.com/public/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v242/en/flu_th/flu_th.html.
- [34] Ansys, «Fluent Theory Guide, Chapter 7.2.2. Composition PDF Transport Theory,» 2024 R2. [Online].