



POLITECNICO DI BARI

Dipartimento di Meccanica, Matematica e Management

Corso di Laurea in Ingegneria Gestionale

TESI DI LAUREA in FLUIDODINAMICA e SISTEMI ENERGETICI

I Modulo - Fluidodinamica

**ANALISI DELLE PRESTAZIONI DI UN
BRUCIATORE PER TURBINA A GAS**

Relatore:

Prof. Francesco Bonelli

Correlatore:

Prof. Marco Torresi

Laureando:

Marco Macculi

Anno Accademico 2022/2023



Politecnico
di Bari

**LIBERATORIA ALLA CONSULTAZIONE DELLA TESI DI LAUREA
DI CUI ALL'ART.4 DEL REGOLAMENTO DI ATENEO PER LA
CONSULTAZIONE DELLE TESI DI LAUREA (D.R. n. 479 del
14/11/2016).**

Il sottoscritto Marco Macculi matricola 574577

Corso di Laurea Ingegneria Gestionale Triennale

autore della presente tesi di Laurea dal titolo ANALISI DELLE
PRESTAZIONI DI UN BRUCIATORE PER TURBINA A GAS

Parola chiave ANALISI BRUCIATORE TURBINA

Abstract In questa tesi verrà creato un modello bidimensionale di un
bruciatore per una turbina a gas con combustione premiscelata magra. I
risultati dello studio verranno quindi confrontati con dati sperimentali e
conoscenze presenti in letteratura scientifica, al fine di valutarne l'accuratezza
e l'efficacia del modello sviluppato.

☒ Autorizza

☐ Non autorizza

la consultazione della presente tesi, fatto divieto a chiunque di riprodurre in
tutto o in parte quanto in essa contenuto.

Bari, 15/10/2023

Firma Marco Macculi

Abstract

Il cambiamento climatico è sempre più un problema urgente e necessita di essere affrontato su più fronti. Eventi catastrofici, variazioni climatiche estreme e il progressivo scioglimento dei ghiacciai sono solo alcune delle conseguenze evidenti del riscaldamento globale. La crescente consapevolezza ambientale nella società moderna ha portato all'adozione di normative più rigorose per limitare le emissioni inquinanti e alla promozione di fonti di energia rinnovabile a basse emissioni. Nonostante i progressi nella transizione ecologica, la domanda mondiale di energia continua a crescere in modo incontrollato, superando di gran lunga la capacità delle risorse rinnovabili di soddisfarla.

Per affrontare questo problema, sono state adottate numerose soluzioni. Una di queste è stata quella di convertire impianti preesistenti (solitamente alimentati a carbone) per renderli impianti alimentati a gas-vapore. Questi impianti utilizzano solitamente il metano come combustibile, una fonte con un ridotto contenuto di carbonio, in modo da ridurre significativamente le emissioni di CO_2 , ma senza abatterle del tutto. Tra le tecniche più promettenti nel campo delle turbine a gas, vi è la *Lean Premixed Burn* o combustione magra.

Per questa tecnologia, è di fondamentale importanza lo studio fluidodinamico della camera di combustione e uno strumento fondamentale per la ricerca e lo sviluppo in tale ambito è la fluidodinamica computazionale (CFD).

In questa tesi, sulla base di una ricerca condotta dalla Vanderbilt University del Tennessee, verrà creato un modello bidimensionale di un bruciatore per una turbina a gas con combustione premiscelata magra. I risultati dello studio verranno quindi confrontati con dati sperimentali e conoscenze presenti in

letteratura scientifica, al fine di valutarne l'accuratezza e l'efficacia del modello sviluppato.

Indice

1. Introduzione.....	7
2. Concetti preliminari	9
2.1. La turbolenza	9
2.1.1 Numero di Reynolds	9
2.2. Le equazioni di Navier-Stokes.....	11
2.3. Computational Fluid Dynamics (CFD)	12
2.4. RANS	14
2.5. Modelli per la risoluzione dei flussi turbolenti.....	16
2.5.1 Modello <i>k-epsilon</i>	17
2.6. Strato limite	18
2.7. Lean Premixed Combustion.....	21
2.8. Modellazione della fiamma.....	23
2.8.1 Diagramma di Borghi.....	26
3. Syngas.....	29
4. Pre-Processing.....	32
4.1. Descrizione esperimento	32
4.2. Griglia di calcolo.....	33
4.3. Condizioni al contorno.....	35
5. Calcolo numerico	36
5.1. Impostazione numerica del calcolatore.....	36
5.1.1 Miscela metano-aria	36
5.2. Inizializzazione della variabile progresso	40

5.3. Algoritmo di calcolo	40
6. Post-Processing	41
6.1. Miscela metano-aria.....	41
6.2. Miscela idrogeno-monossido di carbonio-aria	49
7. Conclusioni.....	57
Bibliografia.....	59

1. Introduzione

Il riscaldamento globale è un problema sempre più urgente, che va affrontato al più presto possibile per evitare conseguenze catastrofiche e irreversibili. Questa urgenza è testimoniata dai numerosi report del Panel Intergovernativo sui Cambiamenti Climatici (IPCC), che affermano che il cambiamento climatico globale se non arrestato o quanto meno gestito correttamente nei prossimi anni, potrebbe portare a fenomeni meteorologici progressivamente più estremi, con impatti devastanti su interi ecosistemi e sulle comunità umane.

Il cambiamento climatico, secondo i report del IPCC, è innescato principalmente dalle emissioni di gas serra prodotte dalle attività umane, tra cui la combustione di combustibili fossili altamente inquinanti. La CO_2 , gli idrocarburi e gli ossidi di azoto, difatti, non sono altro che molecole che vengono prodotte durante il processo di combustione dei combustibili fossili come petrolio, carbone e metano. Per mitigare l'utilizzo di combustibili fossili ad alto contenuto di carbonio (petrolio e carbone), negli ultimi decenni si è cercato di costruire e convertire gli impianti preesistenti in impianti che usassero come combustibile miscele di gas-vapore (solitamente metano e aria), mitigando notevolmente le emissioni di sostanze inquinanti.

Oggi una delle tecniche più studiate e promettenti è la 'Lean Premixed Burn' o combustione premiscelata magra. Essa consiste in un processo di combustione in cui il rapporto tra aria e combustibile è molto superiore rispetto a quello che sarebbe richiesto dal rapporto stechiometrico della reazione chimica. L'impiego della tecnica LPB risulta più vantaggioso, poiché garantisce maggior efficienza nei consumi e una riduzione delle emissioni di sostanze inquinanti come idrocarburi, ossidi di azoto e CO_2 . Tuttavia, la combustione premiscelata magra può essere difficile da gestire, in quanto richiede un'accurata miscelazione e un

elevato grado di controllo delle sue proporzioni per evitare problemi di instabilità della fiamma o detonazione. Rivestono particolare importanza per questa tecnologia, la progettazione e lo studio della camera di combustione, che oggi è possibile grazie alla Computational Fluid Dynamics (CFD).

La CFD è uno strumento molto potente che permette di studiare in maniera rapida, economica e scientificamente accurata il comportamento del fluido all'interno della camera di miscelazione, consentendo di studiare al meglio la miscela e la geometria della camera al momento della progettazione.

Nel presente lavoro di tesi vi è l'obiettivo di analizzare, mediante un modello semplificato bidimensionale, la camera di combustione di un bruciatore per una turbina a gas, tipicamente usato per combustioni premiscelate magre. L'analisi è stata eseguita mediante l'utilizzo di ANSYS Fluent (un software per il calcolo numerico del flusso) per la validazione dei dati sperimentali ottenuti in questo elaborato, faremo riferimento ad uno studio presente in letteratura della Vanderbilt University. Verranno messi a confronto i risultati ottenuti mediante il software di calcolo con i risultati sperimentali riportati in letteratura scientifica e si valuterà se le previsioni attraverso il calcolatore siano efficaci o meno.

2. Concetti preliminari

2.1. La turbolenza

La turbolenza è un fenomeno fluidodinamico molto complesso, che ancora oggi rappresenta una sfida difficile per lo studio del moto di un fluido. Il flusso turbolento è per natura caotico, tridimensionale e non stazionario con vistose fluttuazioni delle variabili non deterministiche. In particolare, la condizione di flusso non stazionario e tridimensionale è data dalla presenza dei vortici, che cambiano completamente le caratteristiche di un flusso.

Le fluttuazioni della velocità dovute alla turbolenza sono in grado di trasportare quantità scalari e vettoriali molto rapidamente. Questo aumento della diffusività delle grandezze è dovuto alla presenza di termini non lineari all'interno dell'equazione di Navier-Stokes.

In regime turbolento, se si ripete uno stesso esperimento è possibile avere risultati completamente differenti, nonostante il fenomeno venga perfettamente descritto dall'equazione di Navier-Stokes. Perciò per i flussi turbolenti parliamo di caratteristiche del flusso apparentemente non deterministiche.

2.1.1 Numero di Reynolds

Il primo ad effettuare studi rigorosi sulla turbolenza e a capire che il fenomeno turbolento dipendeva da un numero adimensionale fu proprio Osborne Reynolds, da cui prende il nome il *numero di Reynolds*. Esso mette in relazione la turbolenza al rapporto tra le forze d'inerzia e le forze viscosi: se le forze d'inerzia prevalgono sulle forze viscosi, avremo fenomeni di turbolenza.

$$Re = \frac{\bar{u}L}{\nu} \quad (2.1)$$

- \bar{u} è la velocità di flusso locale (m/s);
- L è una lunghezza caratteristica del fenomeno considerato (m);
- ν è la diffusività cinematica (m^2/s).

Mediante l'utilizzo del numero di Reynolds, è possibile catalogare i moti turbolenti dei flussi in tre distinte categorie:

- Per $Re \leq 2100$ il flusso si dice **laminare**, e si mantiene stazionario in tutti i punti. Il moto avviene per scorrimento delle particelle senza alcun rimescolamento, interagendo fra loro attraverso sforzi tangenziali.
- Per $2100 \leq Re \leq 4000$ il flusso si dice **transizionale**. In questo caso il moto delle particelle fluide perde la sua stazionarietà, e si propaga un moto ondulatorio.
- Per $Re \geq 4000$ il flusso si dice **turbolento**, perde completamente la sua stazionarietà e le particelle fluide assumono moti caotici con la presenza di vortici.

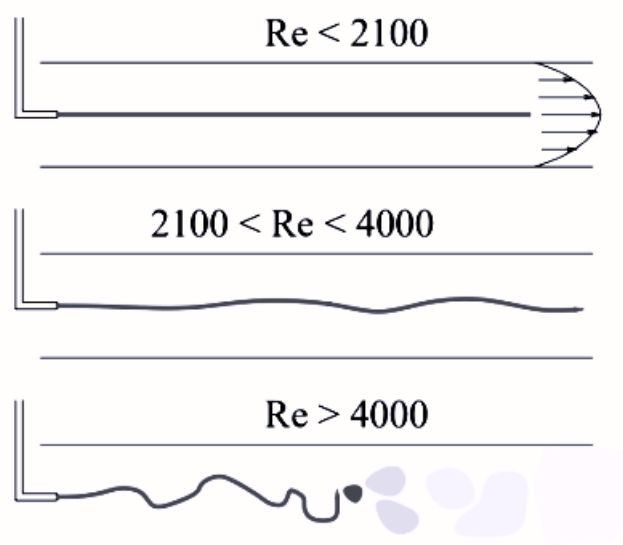


Figura 1: Schematizzazione dell'esperimento di Reynolds

Per i flussi turbolenti, come detto, ripetendo uno stesso esperimento avremo sempre valori differenti se misurati nello stesso punto e nel medesimo intervallo di tempo, però questi presenteranno tutte le stesse caratteristiche statistiche.

La dinamica di questo fenomeno complesso è descritta principalmente dai termini non lineari delle equazioni di Navier-Stokes [3].

2.2. Le equazioni di Navier-Stokes

Le equazioni di Navier-Stokes sono un insieme di equazioni (due scalari e una vettoriale) che descrivono il comportamento dei fluidi. Dato un fluido continuo, omogeneo e comprimibile si ha che:

- **Equazione di conservazione della massa:**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0 \quad (2.2)$$

- **Equazione di conservazione della quantità di moto:**

$$\rho \frac{D\bar{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \rho \bar{f} \quad (2.3)$$

- **Equazione di conservazione dell'energia:**

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = -\nabla \cdot (p\bar{u}) + \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}} \cdot \bar{u}) + \rho \bar{f} \cdot \bar{u} + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \rho \dot{q} \quad (2.4)$$

Il termine $\bar{\bar{\tau}}$, la parte deviatorica degli sforzi viscosi, è definito dalla relazione costitutiva:

$$\bar{\bar{\tau}} = -\frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \bar{u}) \bar{I} + 2\mu \bar{E}, \quad \bar{E} = \frac{1}{2} (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T) \quad (2.5)$$

Quindi sostituendo il tensore $\bar{\bar{\tau}}$ (1.4) nell'equazione di conservazione della quantità di moto (1.2) si ottiene l'equazione di Navier-Stokes:

$$\rho \frac{D\bar{u}}{Dt} = -\nabla p + \rho \bar{f} - \frac{2}{3} \nabla \cdot [(\mu \nabla \cdot \bar{u})] \bar{I} + 2 \nabla \cdot (\mu \bar{E}) \quad (2.6)$$

Le equazioni di Navier-Stokes ben rappresentano come varia un flusso indipendentemente dalle condizioni dello stesso, ma non sempre è possibile trovare una soluzione al sistema di equazioni. Spesso, infatti, data la non linearità delle equazioni, le condizioni al contorno complesse e il fenomeno della turbolenza, si utilizzano modelli matematici complessi per il calcolo dei fluidi.

2.3. Computational Fluid Dynamics (CFD)

Con il termine Computational Fluid Dynamics (CFD) ci si riferisce alla simulazione e l'analisi numerica di fenomeni fluidodinamici, eseguita con un calcolatore. Grazie alla Fluidodinamica Computazionale (CFD) è possibile studiare il comportamento dei fluidi in modo preciso e dettagliato, prevedendo le prestazioni di un dato sistema e ottimizzandone il suo funzionamento. L'obiettivo principale della CFD è quello di predire il comportamento dei fluidi in diverse condizioni, come ad esempio la velocità del flusso, la pressione, la temperatura, la distribuzione di concentrazione di una sostanza disciolta, la turbolenza e la formazione di vortici.

Le equazioni che governano il moto dei fluidi sono le equazioni di *Navier-Stokes*, che descrivono il comportamento di un fluido viscoso in un campo di forze. Per risolvere queste equazioni, la Fluidodinamica Computazionale utilizza un insieme di metodi numerici, discretizzando il dominio del problema

in una griglia di punti o celle. Questa griglia di calcolo è detta *mesh* e rappresenta il dominio fluido computazionale in cui il problema viene risolto.

In presenza di un regime turbolento del flusso, la Fluidodinamica Computazionale è in grado di restituire modelli e simulazioni molto efficaci, ricorrendo ad approcci semplificativi per la risoluzione delle equazioni di *Navier-Stokes*. I principali approcci risolutivi utilizzati sono tre:

- **RANS.** L'approccio RANS (che sta per *Raynolds-Averaged Navier-Stokes*) si basa sull'assunzione che nel moto turbolento la velocità stazionaria si può scomporre in una velocità media e in una sua fluttuazione nel tempo. Le equazioni così, mediate in un certo intervallo di tempo, consentono un notevole risparmio in termini di tempo e potenza computazionale. Richiedono però l'introduzione di ulteriori equazioni per la chiusura del problema.
- **LES.** L'approccio LES (*Large Eddy Simulation*) si pone come una via di mezzo tra i due approcci risolutivi. Difatti risulta essere più accurato rispetto ad un approccio RANS ed allo stesso tempo meno dispendioso in termini di costo computazionale rispetto ad un approccio DNS. Esso si basa sull'ipotesi che le strutture vorticosi di grandi dimensioni trasferiscono via via la loro energia a strutture vorticosi sempre più piccole fino ad arrivare a disperderla. L'approccio quindi si occupa di simulare solamente le strutture vorticosi più grandi, affidando alla modellazione le strutture via via più piccole.
- **DNS.** L'approccio DNS (*Direct Numerical Simulation*) è invece l'approccio più accurato fra i tre, in quanto risolve le equazioni di Navier-Stokes numericamente, senza alcun utilizzo di modelli di approssimazione della turbolenza. Di conseguenza l'approccio DNS risulta essere il più complesso e costoso a livello computazionale.

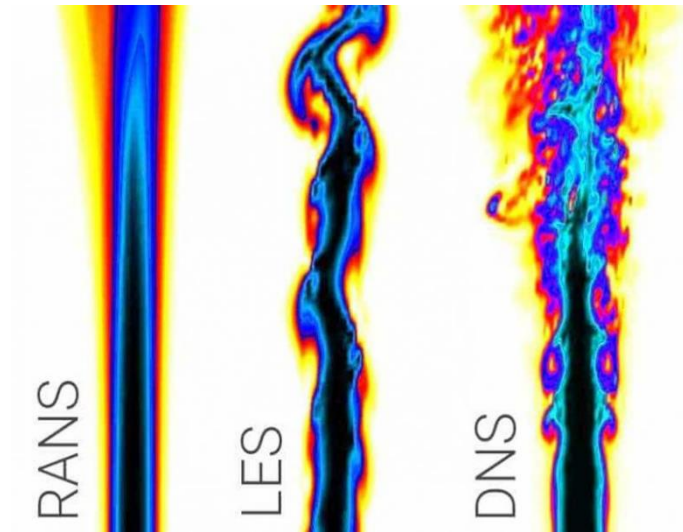


Figura 3: Esempi di risultati per i tre approcci RANS, LES e DNS [2]

L'approccio che verrà utilizzato per risolvere la simulazione presa in esame per questa tesi sarà l'approccio RANS, che presenta un costo computazionale e un livello di approssimazione adeguato al caso preso in esame.

2.4. RANS

Il modello RANS si basa quindi sulle equazioni di Navier-Stokes mediate alla Reynolds, ovvero sull'assunto che una qualsiasi variabile è composta da un valore medio ed una sua fluttuazione.

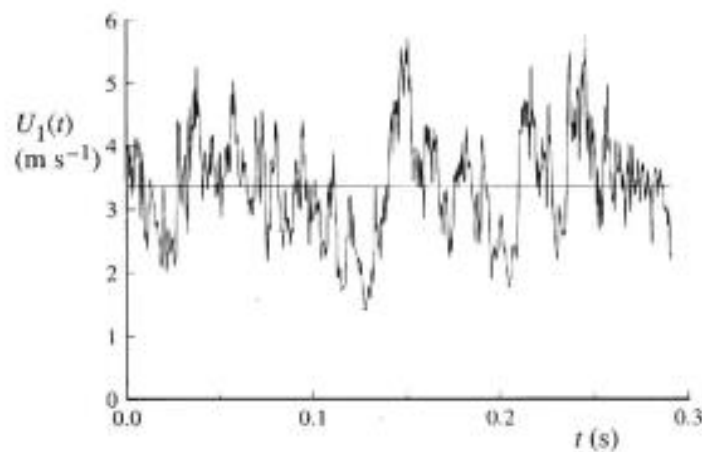


Figura 4: Grafico della velocità con il valore medio e la fluttuazione

Prendendo in esame la velocità, e scomponendola in una componente media pari al valore medio ed in una componente fluttuante otteniamo:

$$\bar{u}(\bar{x}, t) = \bar{U}(\bar{x}) + \bar{u}'(\bar{x}, t) \quad (2.7)$$

Per ipotesi, considerando il campo di moto turbolento e considerando la componente media non dipendente dal tempo, si può affermare che tutta la non stazionarietà della grandezza è nella sua componente fluttuante.

La componente media viene ricavata, nell'ipotesi di flusso statisticamente stazionario, con la media alla Reynolds:

$$\bar{U}(\bar{x}) = \langle \bar{u}(\bar{x}, t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \bar{u}(\bar{x}, t) dt \quad (2.8)$$

La fluttuazione invece viene definita come

$$\bar{u}'(\bar{x}, t) = \bar{u}(\bar{x}, t) - \bar{U}(\bar{x}) \quad (2.9)$$

applicando le medie all'equazione 2.9 otteniamo che la media della fluttuazione è identicamente nulla.

$$\langle \bar{u}'(\bar{x}, t) \rangle = 0 \quad (2.10)$$

Si procede quindi ricavando le equazioni del campo di moto medio. Ipotizzando $\rho = \text{cost}$, per la legge di conservazione della massa ($\bar{\nabla} \cdot \bar{u} = 0$) si ottiene

$$\bar{\nabla} \cdot (\bar{U} + \bar{u}') = 0 \quad (2.11)$$

e poiché la divergenza è un operatore lineare

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{U} + \bar{\nabla} \cdot \bar{u}' = 0 \quad (2.12)$$

ed infine si ottiene la legge di conservazione della massa per il campo di moto medio:

$$\langle \bar{\nabla} \cdot \bar{U} \rangle + \langle \bar{\nabla} \cdot \bar{u}' \rangle = 0 \rightarrow \bar{\nabla} \cdot \langle \bar{U} \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle \bar{u}' \rangle = 0$$

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{U} = 0 \text{ e } \bar{\nabla} \cdot \bar{u}' = 0 \quad (2.13)$$

Per il bilancio della quantità di moto si ha che:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{u} \bar{u}) &= -\frac{1}{\rho} \bar{\nabla} p + \nu \bar{\nabla}^2 \bar{u} \\ \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}'}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot [(\bar{U} + \bar{u}')(\bar{U} + \bar{u}')] &= -\frac{1}{\rho} \bar{\nabla} (\bar{P} + \bar{p}') + \nu \bar{\nabla}^2 (\bar{U} + \bar{u}') \end{aligned} \quad (2.14)$$

e calcolando la media della (2.14) otteniamo infine l'equazione di bilancio della quantità di moto nel campo di moto medio (2.15).

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{U} + \bar{u}') + \bar{\nabla} \cdot \langle \bar{u}' \bar{u}' \rangle = -\frac{1}{\rho} \bar{\nabla} \bar{P} + \nu \bar{\nabla}^2 \bar{U} \quad (2.15)$$

Le equazioni 2.13 e 2.15 sono le equazioni di governo del campo di moto medio. Nell'equazione di conservazione della quantità di moto appare un termine ($\bar{\nabla} \cdot \langle \bar{u}' \bar{u}' \rangle$) che sottrae energia al campo di moto medio e la distribuisce alla fluttuazione.

Il termine $-\langle \bar{u}' \bar{u}' \rangle$ si chiama **tensore degli sforzi di Reynolds**, è il termine che fornisce informazioni sulle fluttuazioni, ed essendo un tensore simmetrico esso è formato da sei componenti. Per descrivere il campo di moto medio, si hanno **4 equazioni in 10 incognite**: si parla quindi di problema di chiusura della turbolenza.

2.5. Modelli per la risoluzione dei flussi turbolenti

Per la risoluzione dei flussi turbolenti il modello RANS richiede l'adozione di modelli matematici complessi che consentano di troncamento il numero di

equazioni ad un certo ordine e modellare il numero di incognite con l'utilizzo di relazioni approssimate, in modo da rendere il problema chiuso.

Tra i modelli a due equazioni più utilizzati in fluidodinamica computazionale vi sono due modelli: il modello $k-\varepsilon$ ed il modello $k-\omega$

2.5.1 Modello k-epsilon

Il modello k-epsilon è un modello a due equazioni, il più comunemente utilizzato nella fluidodinamica computazionale (CFD) per la risoluzione delle equazioni RANS. Questo modello in particolare introduce due equazioni alle derivate parziali per il trasporto di k (energia cinetica turbolenta) ed ε (la velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta).

Le due equazioni introdotte dal modello sono quindi:

- Energia cinetica turbolenta k

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - \rho \varepsilon \quad (2.16)$$

- Velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta ε

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.17)$$

σ_ε e σ_k numeri di Prandtl per ε e k ;

u_i componente della velocità;

E_{ij} componente del tensore di deformazione;

μ_t viscosità turbolenta.

2.6. Strato limite

Preso un flusso a velocità costante che lambisce una superficie, per la condizione di aderenza la velocità del flusso sarà pari alla velocità della parete. A distanza intermedia tra la parete e il flusso si avrà una condizione di raccordo tra la velocità nulla a parete e la velocità del flusso indisturbato: lo spessore dello strato di fluido attraverso cui avviene il raccordo viene indicato con δ e prende il nome di *strato limite*.

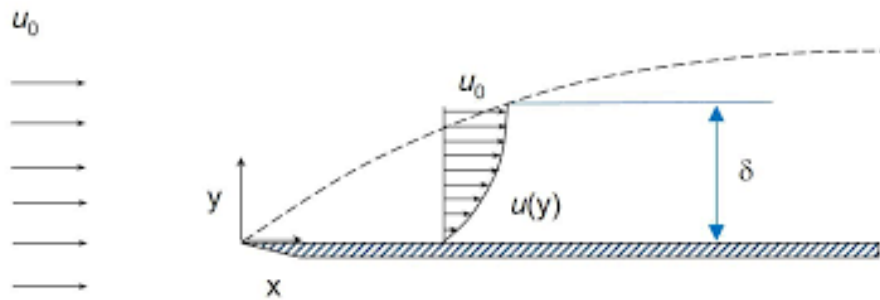


Figura 5: Lamina piana attraversata da un flusso di velocità u_0 parallela alla lastra piana

Di conseguenza in questa regione gli effetti viscosi sono tutt'altro che trascurabili, per effetto del gradiente di velocità. Man mano che ci si allontana da questa regione gli effetti viscosi diventano sempre meno rilevanti fino a diventare completamente trascurabili (flusso indisturbato).

In regime turbolento è possibile suddividere lo strato limite in tre substrati differenti:

- **Substrato laminare:** è la regione più vicina alla parete dove i termini viscosi sono dello stesso ordine di quelli inerziali (flusso laminare);
- **Strato di transizione:** corrisponde alla regione compresa tra substrato laminare e turbolento, in essa coesistono effetti viscosi e turbolenti;

- **Substrato turbolento:** è la regione in cui gli sforzi a parete sono di natura turbolenta (flusso turbolento);

Nella regione del substrato laminare, a causa della condizione di aderenza, i termini turbolenti sono trascurabili rispetto ai termini viscosi. Lo sforzo viscoso a parete può essere esplicitato dalla legge di *Newton*:

$$\frac{\tau_w}{\rho} = \nu \left. \frac{dU}{dy} \right|_{y=0} \quad (2.18)$$

dove in corrispondenza di $y = 0$ corrisponde la condizione di aderenza ($\bar{u} = 0$). Gli sforzi viscosi in corrispondenza della regione del substrato laminare sono molto maggiori degli sforzi turbolenti ($\tau_v \ll \tau_t$) e possono essere considerati costanti, quindi è possibile integrare l'espressione 2.18 ottenendo

$$\sqrt{\frac{\rho}{\tau_w}} u = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \frac{y}{\nu} + c \quad (2.19)$$

$$u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho} \quad \text{e} \quad \delta_\tau = \nu / u_\tau \quad (2.20)$$

delle scale di velocità (u_τ) e lunghezza d'attrito (δ_τ) con le quali è possibile rendere adimensionali le quantità turbolente a parete:

$$U^+ = \frac{U}{u_\tau} = U \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad \text{e} \quad y^+ = \frac{y}{\delta_\tau} = \frac{y}{\nu} \sqrt{\frac{\rho}{\tau_w}} \quad (2.21)$$

Per la costante c nella relazione (2.19) allora risulterà che:

$$U^+ = y^+ \quad (2.22)$$

Da quest'ultima relazione si può dedurre che nella regione di substrato laminare la velocità a parete e la coordinata di parete adimensionalizzata sono legate da una legge lineare.

Nel substrato turbolento, invece, gli sforzi a parete turbolenti non sono più trascurabili e possiedono intensità costante ($\tau_v \ll \tau_t$). Relativamente alla viscosità turbolenta, è possibile trovare una forte analogia con la diffusività delle molecole nella teoria cinetica dei gas. Difatti i piccoli vortici presenti in un flusso a regime turbolento possono essere confrontabili alle molecole che diffondono interagendo tra di loro. Quindi possiamo affermare che:

$$\nu_t = lV = l^2 \left| \frac{dU}{dy} \right| \quad (2.23)$$

Dove l prende il nome di lunghezza di mescolamento. Riprendendo l'espressione della legge della viscosità di Newton, è possibile scrivere gli sforzi a parete come:

$$\frac{\tau_t}{\rho} = \nu_t \frac{dU}{dy} = l^2 \left| \frac{dU}{dy} \right|^2 \quad (2.24)$$

La lunghezza di rimescolamento, riprendendo la condizione di aderenza, risulta proporzionale alla distanza da parete: $l = Ay$. Avendo inoltre supposto che gli sforzi turbolenti sono costanti, possiamo integrare la relazione:

$$U \sqrt{\frac{\rho}{\tau_t}} = \frac{1}{A} \ln y + C \rightarrow U^+ = \frac{1}{\alpha} \ln y^+ + \beta \quad (2.25)$$

I valori di α e β sono delle costanti universali per tutti i flussi turbolenti a parete. Risulta possibile distinguere quindi le tre regioni in funzione della velocità normalizzata U^+ e delle coordinate di parete y^+ , tali che:

- per $y^+ < 5$ si segue la legge $U^+ = y^+$
- per $5 < y^+ < 30$ gli effetti viscosi e turbolenti si sovrappongono
- per $y^+ > 30$ si segue la legge $U^+ = \frac{1}{\alpha} \ln y^+ + \beta$

Risulta evidente che per una simulazione accurata e precisa è di fondamentale importanza lo studio del substrato viscoso a ridosso della parete. In presenza di alti numeri di Reynolds si cerca di avere un y^+ più piccolo possibile, poiché il substrato viscoso è di spessore molto basso. È possibile visualizzare il suddetto valore per la griglia generata per il caso preso in esame.

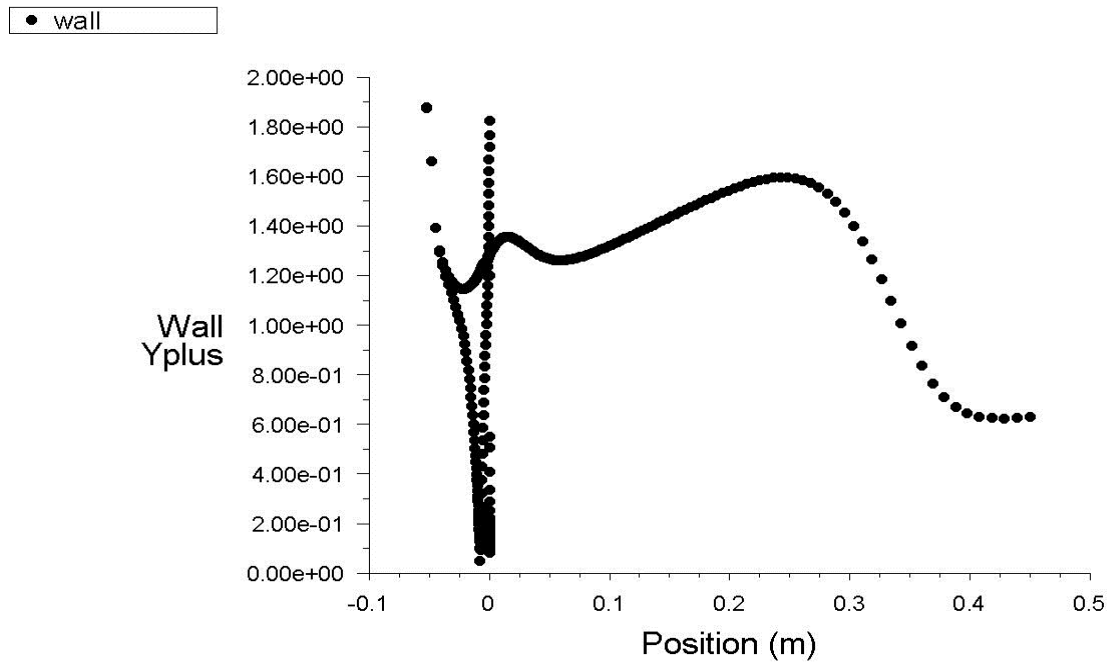


Figura 6: Valore di y^+ in funzione della lunghezza del dominio di calcolo

2.7. Lean Premixed Combustion

La *Lean Premixed Combustion* o combustione premiscelata magra è una tecnica che prevede la miscelazione del combustibile e del comburente prima dell'innesco della fiamma. La combustione si dice *premiscelata* quando il processo di miscelazione del combustibile e del comburente avviene in un momento precedente all'effettivo innesco della fiamma; si dice *diffusiva* se invece i reagenti sono inizialmente separati e si mescolano nel medesimo ambiente in cui avviene l'innesco. La gestione di una combustione premiscelata

risulta molto più complessa rispetto ad una normale combustione a fiamma diffusiva, in quanto richiede un notevole livello di controllo nel processo di miscelazione.

In particolare, risulta complesso per via del ridotto spessore della fiamma propagante, poiché, essa a causa dell'effetto della turbolenza subisce allungamenti che provocano una notevole instabilità di fiamma. Sempre per effetto della turbolenza la fiamma subisce anche un innalzamento della sua velocità, che in casi subsonici è formata da due componenti: una componente laminare ed una turbolenta. Proprio quest'ultima componente genera nel flusso dei vortici che modificano il fronte di fiamma increspandolo e modificandone la struttura.

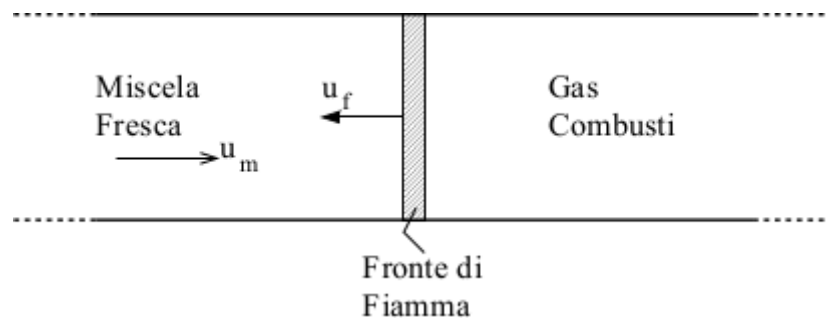


Figura 7: Schema di un fronte di fiamma laminare entro un condotto cilindrico

La stabilizzazione del fronte di fiamma dipende strettamente dalla velocità della miscela fresca u_m e dalla velocità del fronte di fiamma u_f . I casi possibili sono tre:

- $u_f < u_m$: la velocità del fronte di fiamma è minore della velocità della miscela, questa condizione comporta l'instabilità della fiamma ed una possibile fiamma intermittente;
- $u_f = u_m$: il fronte di fiamma ha la stessa velocità della miscela fresca, ci troviamo quindi in condizioni stazionarie;

- $u_f > u_m$: il fronte di fiamma ha velocità maggiore di quella della miscela dei reagenti, in questa condizione potrebbe verificarsi il fenomeno del ritorno di fiamma.

La velocità di fiamma risulta quindi un valore molto importante da monitorare per la stabilizzazione della stessa, bisogna quindi studiare nel dettaglio la struttura interna della fiamma generata, la reazione chimica di combustione e i processi di diffusione che ne derivano. In generale la velocità di propagazione del fronte di fiamma non è estremamente elevata; quindi, la velocità della miscela deve essere mantenuta necessariamente bassa per evitare l'estinzione della fiamma. [9]

Un modo per stabilizzare la fiamma ed evitare il suo spegnimento è quello di creare zone di ricircolo nella regione primaria del combustore, in modo da abbassare la velocità della miscela e aumentare il tempo a disposizione per consentire a tutto il combustibile di bruciare. Nel caso della Vanderbilt University [1], per creare queste zone di ricircolo si introduce un corpo d'intralcio al flusso, detto *bluff-body*.

2.8. Modellazione della fiamma

Nella combustione premiscelata magra, come spiegato in precedenza, la reazione essendo instabile genera un fronte di fiamma molto sottile e frastagliato. Il fronte di fiamma divide quindi la camera di combustione in due parti: la zona in cui vi sono i gas combusti prodotti dalla reazione ed una zona in cui vi sono i gas incombusti. Nella modellazione del fronte di fiamma però non si tiene conto della reazione chimica che avviene all'interno della camera; quindi, per rappresentare e descrivere nel dettaglio la zona in cui avviene la reazione di combustione utilizziamo una **variabile di progresso** indicata con

la lettera “ c ”. La variabile assumerà quindi valori da 0 a 1, in base alla quantità di miscela combusta in un determinato punto della griglia di calcolo. La *variabile di progresso* può essere espressa mediante la temperatura o la massa di combustibile:

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} \quad \text{oppure} \quad c = \frac{Y - Y_u}{Y_b - Y_u} \quad (2.26)$$

Con T e Y indico i valori locali di temperatura e massa di combustibile, con T_b e Y_b i valori di temperatura e massa di combustibile dei gas combusti, infine con T_u e Y_u i valori di temperatura e massa di combustibile dei gas incombusti. [7]

Il flusso considerato essendo un flusso reattivo, ha variazioni di densità molto rilevanti che rendono poco utile l'utilizzo della media alla Reynolds che non terrebbe conto delle variazioni di densità. Si preferisce quindi, per i calcoli che riguardano le reazioni di combustione, l'utilizzo della *media di Favre*.

La densità della miscela espressa con la media alla *Reynolds* è pari a:

$$\langle \rho \rangle = \bar{\rho} = (1 - \bar{c})\rho_u + \bar{c}\rho_b \quad (2.27)$$

ρ_b e ρ_u sono rispettivamente densità dei gas combusti e densità dei gas incombusti, mentre con \bar{c} si indica la *variabile di progresso* mediata alla *Reynolds*. Si può riscrivere la variabile di progresso mediata alla *Reynolds* in funzione di quella mediata alla *Favre*, e si ottiene:

$$\langle c \rangle = \bar{c} = \frac{\sigma \tilde{c}}{1 + (\sigma - 1)\tilde{c}} \quad (2.28)$$

Allo stesso modo possiamo esprimere il valore della densità della miscela mediata alla *Reynolds* in funzione della variabile di progresso mediata alla *Favre*:

$$\langle \rho \rangle = \bar{\rho} = \frac{\rho_u}{1 + (\sigma - 1)\tilde{c}} \quad (2.29)$$

Il problema del calcolo della propagazione del fronte di fiamma viene risolto dall'equazione di trasporto per la variabile di progresso c mediata alla *Favre*, riportata qui sotto.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\tilde{c}) + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{Sc_T} \nabla \tilde{c} \right) + \overline{\rho S_c} \quad (2.30)$$

Dove:

Sc_T è il numero di *Schmidt* turbolento, valore adimensionale definito come il rapporto fra diffusività turbolenta della quantità di moto (ν_T) e diffusività di massa turbolenta (D_T): $Sc_T = \frac{\nu_T}{D_T}$;

$\overline{\rho S_c}$ è il termine di progressione della reazione.

Il termine di progressione della reazione presenta un problema di chiusura. L'approccio utilizzato nel test case analizzato, utilizza l'approccio chiamato **Turbulent Flame Closure (TFC)**. In questo approccio l'espressione del termine diventa:

$$\overline{\rho S_c} = \bar{\rho}_u \bar{U}_T |\nabla \tilde{c}| \quad (2.31)$$

$\bar{\rho}_u$ e \bar{U}_T sono rispettivamente la densità della miscela incombusta e la velocità della fiamma turbolenta. Quest'ultimo termine ha bisogno a sua volta per essere determinato di un'ulteriore chiusura chiamata *Zimont*, presente in ANSYS Fluent, e che assume la seguente forma:

$$\bar{U}_T = A(\bar{u}')^{3/4} \bar{U}_l^{1/4} \alpha^{-1/4} \ell_T^{1/4} \quad (2.32)$$

- A valore adimensionale caratteristico del modello;

- \bar{u}' velocità quadratica media;
- \bar{U}_l velocità di fiamma laminare (costante nel test case);
- α coefficiente di diffusività termica molecolare della miscela incombusta pari a $\alpha = k / (\rho c_p)$;
- ℓ_T lunghezza di scala turbolenta pari a $\ell_T = C_D (u')^3 / \epsilon$.

Questo modello non può sempre essere valido, è necessario che i più piccoli vortici turbolenti siano più piccoli dello spessore di fiamma. Al fine di individuare questa zona di operatività si utilizza il diagramma spettrale chiamato *diagramma di Borghi*.

Nel test case esaminato nella presente tesi [1], la modellazione della fiamma è stata affidata ad un modello RANS $k - \epsilon$ *standard*, coadiuvato da un approccio per la risoluzione della turbolenza basato sulla *variabile di progresso c* con il modello Zimont **Turbulent Flame Closure (TFC)**

2.8.1 Diagramma di Borghi

I regimi di combustione possono essere rappresentati in maniera chiara con diagrammi spettrali. Uno dei primi diagrammi spettrali proposti è stato quello di Borghi, per la rappresentazione sistematica delle fiamme turbolente con combustione premiscelata.

Il diagramma riporta sull'asse delle ascisse la frazione L_T / δ_l , mentre sull'asse delle ordinate u' / S_L^0 . Le due grandezze sono riportate in scala logaritmica ed L_T indica lo spessore della fiamma laminare, mentre u' indica la radice quadrata dell'energia cinetica turbolenta. [9]

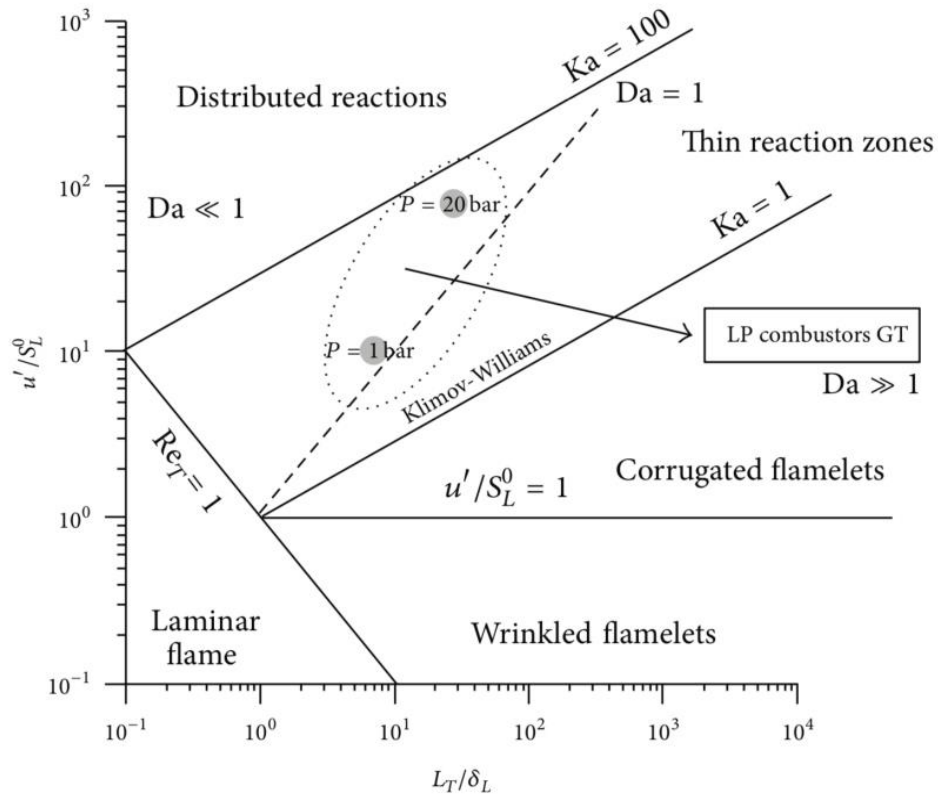


Figura 8: Diagramma di Borghi

In tale diagramma sono presenti tre regioni, definite da un numero di Karlovitz, che nel test case analizzato è pari a:

$$Ka = \left(\frac{\delta_L}{L_k} \right) \cong 10$$

- **Flamelets Regime** per $Ka < 1$: regione a sua volta divisa in due sottocategorie;
 - **Wrinkled flamelets** per $u'/S_L^0 < 1$: la componente turbolenta non è in grado di corrugare la fiamma e quindi la fiamma si propaga secondo una legge laminare;
 - **Corrugated flamelets** per $u'/S_L^0 > 1$: la componente turbolenta è in grado di corrugare la fiamma fino a determinare localmente delle interazioni dei vortici con il fronte di fiamma, individuando

regioni separate tra miscela fresca e miscela completamente combusta.

- **Thin Reaction Zone** per $1 < Ka < 100$: regione in cui si genera un inspessimento del fronte di fiamma dettato dalla presenza di microvortici dell'ordine della scala di *Kolomogorov* che penetrano nel fronte di fiamma e lo increspano.
- **Distributed Reaction** $Ka > 100$: regione in cui la dimensione dei microvortici portano la struttura laminare a perdere il suo regime laminare generando fluttuazioni turbolente.

Solitamente le reazioni che avvengono nel combustore di una turbina a gas sono combustioni che appartengono al regime *Thin Reaction Zone*, fatta eccezione per alcuni sporadici casi che ricadono invece nel regime *Corrugated Reaction*. Tuttavia, per una turbina a gas il regime ideale dovrebbe essere il regime di *Distributed Reaction*, poichè consente di contenere le dimensioni della zona di reazione e quindi ridurre le dimensioni dell'intero dispositivo. A causa di vari problemi e limitazioni le combustioni nelle turbine a gas sono limitate e non possono avvenire nella regione *Distributed Reaction*, ma vi sono dispositivi che operano nella zona di confine tra quest'ultima e la *Thin Reaction Zone*.

3. Syngas

Le turbine a gas in assetto combinato sono ad oggi la soluzione impiantistica più efficiente ed economica per la produzione di energia elettrica, per due motivi principali: elevate prestazioni termodinamiche e bassi costi di installazione. Il limite di questi impianti è rappresentato dall'incapacità di funzionare con combustibili poco pregiati. La combustione dei combustibili poco pregiati come il carbone, avvenendo internamente al fluido di lavoro, genererebbe gas combusti misti a polveri e detriti che porterebbero ad un'usura più rapida dell'impianto.

Attualmente per sostenere la competitività di un paese ed il suo fabbisogno energetico, risulta complesso abbandonare completamente l'utilizzo di determinati combustibili fossili altamente inquinanti ed affidare l'intero settore della produzione di energia elettrica ad un unico combustibile. Risulta quindi fondamentale studiare e comprendere sia nuove fonti rinnovabili con emissioni zero, sia come poter convertire e controllare le emissioni prodotte da impianti preesistenti ed altamente inquinanti. Negli ultimi anni sono stati prodotti numerosi studi sulla gassificazione che rende compatibili le turbine a gas con il carbone e più in generale con i combustibili pesanti.

La gassificazione è un processo che consiste nella trasformazione, attraverso una serie di reazioni chimiche che avvengono all'interno di un reattore chiamato *gassificatore*, di un combustibile liquido o solido in un gas combustibile di sintesi (*syngas*) [2]. Il syngas è costituito principalmente da idrogeno (H_2) e monossido di carbonio (CO), è un gas "pulito", il che lo rende utilizzabile e compatibile con motori a combustione interna. Esso rende quindi compatibili le turbine a gas con il carbone e apre interessanti prospettive in termini di abbattimento delle emissioni di CO_2 . [4]

La gassificazione è un processo perseguito e realizzato a livello industriale da molti anni. Nasce nella seconda metà del 1800, mediante un processo di riscaldamento del carbone in ambiente privo di ossigeno: si produceva un gas (anche detto gas di città) che veniva utilizzato per illuminare le strade. Tuttavia, con la diffusione del petrolio, il processo fu accantonato vista l'ampia disponibilità di combustibile a basso costo. Negli ultimi anni però con la crescente attenzione verso le problematiche ambientali sono stati ripresi numerosi studi sul processo di gassificazione, ed è proprio negli ultimi anni che è nata l'idea degli **IGCC** (*Integrated Gasification Combined Cycle*).

Gli IGCC sono impianti a ciclo combinato, nei quali il carbone viene trasformato in un gas di sintesi, viene raffreddato e ripulito in un primo modulo dell'impianto chiamato *isola di gassificazione*, e successivamente viene impiegato come combustibile per alimentare un ciclo combinato in una seconda sezione chiamata *isola di potenza*. Il processo risulta molto complesso e prevede oltre al gassificatore, la presenza di una serie di elementi aggiuntivi necessari per il completamento del ciclo.

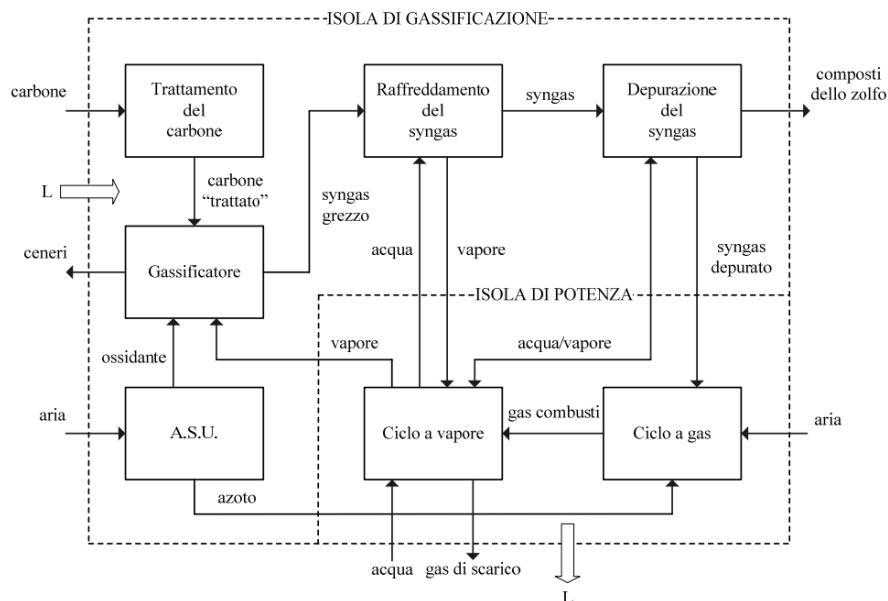


Figura 9: Schema di un impianto IGCC [4]

Dallo schema in Figura 9 si può evincere la complessità dell'impianto e sebbene ad oggi l'esperienza accumulata cominci ad essere significativa e le prospettive di sviluppo particolarmente interessanti, questo sistema presenta sia pregi che difetti.

Il punto di forza principale degli impianti IGCC è il considerevole abbattimento dell'impatto ambientale: grazie all'utilizzo di gas di sintesi vengono abbattute sostanzialmente le emissioni di CO_2 e di NO_x che possono essere controllate ricorrendo alla diluizione del syngas (con azoto ad esempio) nella camera di combustione della turbina a gas; dall'esperienza rilevata dagli impianti IGCC già esistenti, inoltre, si può inoltre dimostrare che le emissioni di polveri sottili sono pressoché trascurabili.

Al contrario la realizzazione di impianti di questo genere ha registrato costi dell'ordine dei 1500 \$/kW con rendimenti modesti che si attestano attorno al 40-42%. L'evoluzione e il futuro competitivo di questa nuova tecnologia passano da un aumento della competitività economica, raggiungibile mediante la riduzione dei costi di investimento, e l'aumento del rendimento globale.

La presente tesi si ripropone di effettuare uno studio del campo fluidodinamico e termodinamico all'interno del combustore della Vanderbilt University, prima utilizzando una combustione premiscelata magra tradizionale (metano) e successivamente una combustione premiscelata magra alimentata con gas di sintesi ($H_2 - CO$).

4. Pre-Processing

4.1. Descrizione esperimento

L'esperimento descritto nella presente tesi è stato ripreso da un lavoro di ricerca svolto dalla Vanderbilt University [1]. Lo studio numerico effettuato sarà poi confrontato con un articolo di ricerca pubblicato dal Dipartimento di Ingegneria Industriale dell'Università di Firenze.

L'obiettivo è quindi: lo studio numerico della fiamma generata da una combustione premiscelata magra all'interno di un bruciatore di una turbina.

Un metodo classico per garantire la stabilità della fiamma di un bruciatore è creare all'interno della camera di combustione una zona di ricircolo dei gas caldi in prossimità della miscela fredda per alimentare in maniera continua la combustione. Nel modello utilizzato dalla Vanderbilt University (VDB) vi è presente un bluff-body, ovvero un corpo inserito all'interno della camera di combustione la cui geometria consente di generare una bolla di ricircolo nella parte posteriore a bassa pressione.

In Figura 2 viene mostrata la fiamma generata dal combustore VDB. La fiamma è confinata da una camera con pareti in quarzo a sezione quadrata, e un bluff-body di forma conica a 45° caratterizzato da un diametro pari a 44,45 mm.

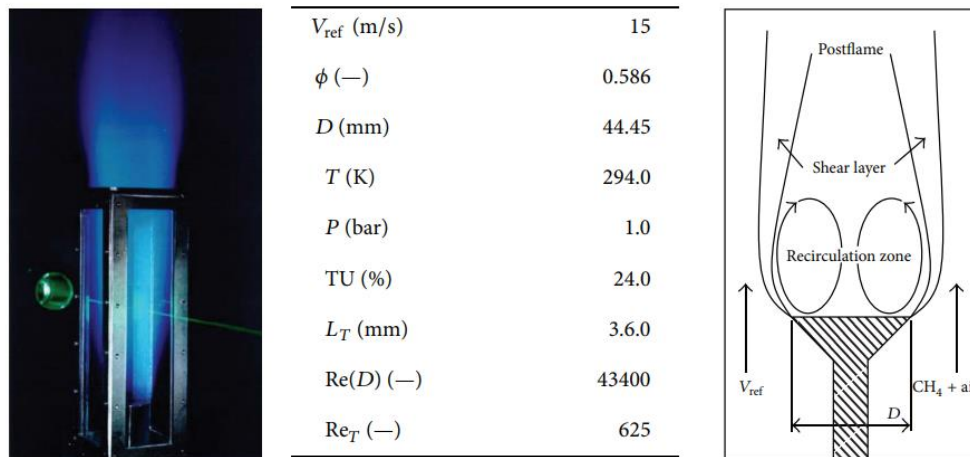


Figura 10: Bruciatore realizzato dalla Vanderbilt University con dati sperimentali

L'esperimento della VDB è stato realizzato utilizzando una miscela magra di metano e aria con rapporto di equivalenza pari a 0,586. Dalla tabella in Figura 2, inoltre, è possibile ricavare numerose informazioni utili alla successiva impostazione numerica del calcolo.

4.2. Griglia di calcolo

La griglia di calcolo è stata realizzata mediante l'utilizzo di Pointwise, un software specializzato per la generazione di mesh o griglie computazionali utilizzate nella simulazione fluidodinamica.

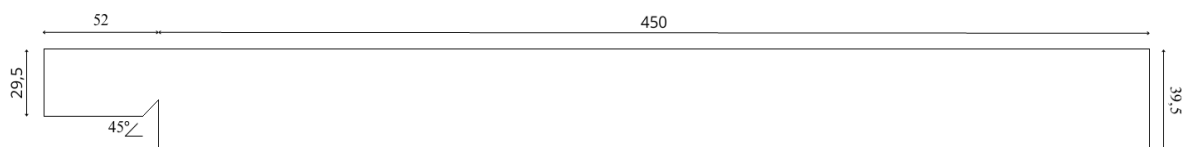


Figura 11: Geometria del test case con misure espresse in mm

La mesh che è stata scelta per effettuare il calcolo è una mesh strutturata, cioè formata da celle quadrangolari. La geometria della camera di combustione, essendo assialsimmetrica, ci ha permesso di generare una griglia che

rappresenta solo una metà dell'intero dominio di calcolo, alleggerendo notevolmente anche il carico computazionale. Difatti nella scelta del numero di celle si verifica un problema di trade-off: aumentando il numero di celle migliora la precisione del calcolo effettuato, ma allo stesso tempo aumenta lo sforzo computazionale e il tempo affinché i risultati del calcolo raggiungano la convergenza. Per la geometria in questione si è deciso di optare per un numero di celle pari a 35860.

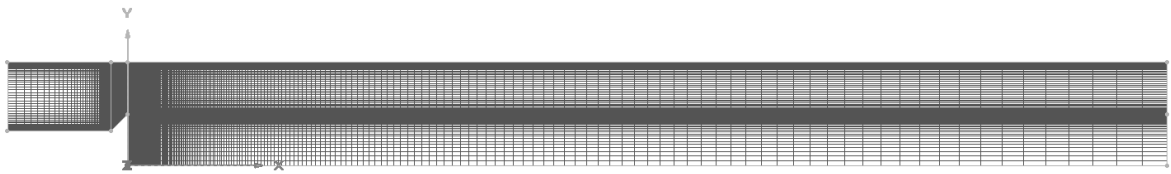


Figura 12: Griglia di calcolo strutturata creata su Pointwise

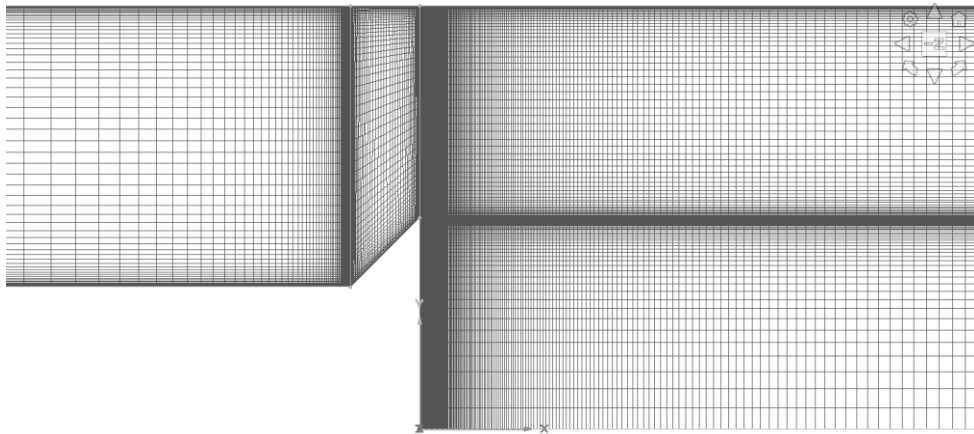


Figura 13: Zoom in dettaglio sulla regione del bluff-body

Di notevole importanza per la correttezza dei calcoli che verranno effettuati è la definizione della mesh in corrispondenza del *bluff-body*. Sul *bluff-body* e sulla parete superiore verrà imposta la condizione di *no-slip*, il che significa che in prossimità di queste due zone si avrà il fenomeno dello strato limite. È quindi importante assicurarsi che i *Length Ratio I* e *J* siano al di sotto di un

valore pari a 1,2 in queste due regioni, in modo da garantire una migliore convergenza dei calcoli.

4.3. Condizioni al contorno

Al fine di eseguire la simulazione numerica del caso precedentemente descritto si devono definire le condizioni al contorno. Il dominio di calcolo bidimensionale che è stato creato presenta le seguenti condizioni al contorno:

- **Sezione di ingresso.** Il profilo di velocità è considerato costante lungo tutta la sezione di entrata; quindi, viene scelta per la sezione di ingresso la condizione di *velocity-inlet*. Dallo studio preso come riferimento [1], la velocità in corrispondenza del restringimento del bluff-body che risulta essere pari a 15 *m/s* e mediante la conservazione della portata si ricava la velocità nella sezione di entrata pari a 11,05 *m/s*. Si imposta inoltre il valore percentuale dell'intensità della turbolenza pari a 24% e la lunghezza di scala integrale L_T pari a 3,6 mm;
- **Sezione di uscita.** Alla sezione di uscita, poiché la pressione verrà considerata costante, si sceglie la condizione di *pressure-outlet*. Anche qui, come per la sezione di ingresso, si assegna il valore percentuale dell'intensità della turbolenza pari a 24% e la lunghezza di scala integrale L_T pari a 3,6 mm;
- **Parete laterale e bluff-body.** Per la parete della camera di combustione ed il bluff-body, si sceglie la condizione di *wall*, prestando particolare attenzione a impostare la condizione di aderenza *no-slip*.
- **Asse di simmetria.** Per l'asse di simmetria si sceglie semplicemente la condizione di *axis*.

5. Calcolo numerico

Il calcolo numerico del flusso è stato effettuato mediante ANSYS Fluent, un software di calcolo fluidodinamico professionale. Nel presente capitolo verranno analizzate nel dettaglio le impostazioni utilizzate per il calcolo numerico mediante il software di tutti i fenomeni descritti nel dettaglio nei capitoli precedenti.

5.1. Impostazione numerica del calcolatore

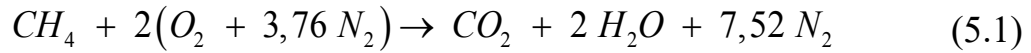
Il solutore è stato impostato su un approccio basato sulla pressione (*pressure-based*), con questa tipologia di approccio il solutore ottiene il campo di velocità dall'equazione della quantità di moto, mentre il campo di pressione viene estratto risolvendo un'equazione correttiva ottenuta manipolando l'equazione di continuità e quella della quantità di moto. Come accennato in precedenza per il calcolo è stato utilizzato un approccio *k-epsilon* standard a due equazioni, lasciando invariate le costanti di modello sui valori di default dati dal solutore.

Dopo la scelta del modello risolutivo per la turbolenza, è stata selezionata la modalità di modellazione del fronte di fiamma. All'interno di ANSYS Fluent è possibile selezionare come tipo di combustione la *Premixed Combustion*, che fornisce un approccio con variabile di progresso per una reazione adiabatica; per la velocità di fiamma è stato utilizzato per la chiusura il modello *Zimont*.

5.1.1 Miscela metano-aria

Al fine di effettuare il calcolo per la simulazione con miscela metano-aria, è indispensabile inserire sul solutore parametri fisico-chimici per ottenere risultati che siano confrontabili con quelli sperimentali.

Nel test-case preso in esame, la miscela presente all'interno del bruciatore, presenta la seguente reazione chimica:



La presente reazione chimica fornisce i coefficienti stechiometrici delle specie dei reagenti, attraverso i quali è possibile calcolare le masse stechiometriche degli stessi: per 16 kg di combustibile (metano) saranno necessari 274,5 kg di ossidante (aria). Calcolando il rapporto tra le masse stechiometriche di comburente e ossidante, si ottiene il rapporto stechiometrico che sarà pari a:

$$\frac{Kg \text{ di aria}}{Kg \text{ di carburante}} = 17,16 \quad (5.2)$$

Si può definire adesso il **rapporto di equivalenza**:

$$\phi = \frac{f}{f_{st}} \quad (5.3)$$

dove f è definito come il rapporto di diluizione o di miscela (*fuel-to-air ratio*); è il rapporto tra la massa di combustibile e la massa di comburente (oppure possono essere utilizzate le portate massiche di questi due).

$$f = \frac{m_c}{m_o} \quad , \quad f = \frac{\dot{m}_c}{\dot{m}_o} \quad (5.4)$$

e f_{st} è il valore stechiometrico del rapporto di diluizione. Si evince subito che ϕ è pari a 1 quando la combustione avviene con proporzioni stechiometriche dei reagenti.

In generale il rapporto di equivalenza raramente assume il valore unitario; si parla quindi di *miscela magra* quando il rapporto di equivalenza è minore di 1, di *miscela ricca* quando il rapporto di equivalenza è maggiore di 1.

Nel test case studiato il valore del rapporto di equivalenza è pari a $\phi = 0,586$, perciò la miscela utilizzata è una *miscela magra*.

Calcolati i dati utili riguardanti la miscela considerata, è possibile ricavare i parametri caratteristici mediante un software che permette di simulare reazioni chimiche, chiamato GasEQ [6]. Mediante questo software è possibile selezionare come miscela predefinita la miscela metano-aria, specificando il rapporto di equivalenza pari a 0,586 e simulando una reazione adiabatrica a pressione costante.

I dati inseriti nel software, oltre al rapporto di equivalenza, sono la temperatura della miscela incombusta pari a 294 K e la pressione impostata sul valore di 0,987 atm (1 bar).

The screenshot displays the GasEQ software interface. The 'Problem Type' is set to 'Adiabatic T and composition at const P'. The 'Reactants' table lists N2, O2, and CH4 with their respective moles and mole fractions. The 'Products' table lists various species including N2, H2O, CO2, CO, O2, OH, H, O, H2, and NO. The 'Stoichiometry, Phi' is 0,586, and the 'Uniform T' is 294 K. The 'Calculate (F10)' button is visible. The bottom section shows a list of physical-chemical properties for both reactants and products, such as Temperature, Pressure, Volume, Moles, Enthalpy, Entropy, and various transport properties.

Species	No.Moles	MolFrac	K
N2	0,79000	0,74421	
O2	0,21000	0,19783	
CH4	0,06153	0,05796	

Species	No.Moles	MolFrac	K
N2	0,78923	0,74344	
H2O	0,12295	0,11582	
CO2	0,06152	0,05795	
CO	6,747e-06	6,36e-06	
O2	0,08611	0,08112	
OH	2,134e-04	2,01e-04	
H	1,682e-07	1,58e-07	
O	6,624e-06	6,24e-06	
H2	4,303e-06	4,05e-06	
NO	0,00155	1,46e-03	

Property	Reactants	Products
Temperature, K	294	1635
Pressure, atm	0,987	0,987
Volume Products/Reactants		5,5616
Moles Products/Reactants		1,00006
H0, kcal/mol	-1,067	-1,071
S0, cal/mol/K	47,641	61,524
Cp, cal/mol/K	7,037	9,138
Gamma, Cp/Cv	1,394	1,278
Mean Molecular Weight, g	28,11	28,11
Density, kg/m3	1,1500	0,20678
Sound speed, m/s	348,0	785,9
Enthalpy, H, kcal/kg	-37,94	-38,12
Entropy, S, cal/kg/K	1695,75	2189,75
Intern Energy, U, kcal/kg	-58,73	-153,72
Free Energy, G, kcal/kg	-536,49	-3618,36
Cp, cal/kg/K	250,33	325,11
Volume/mole, m3	24,4432	135,934
Molecules/cc	2,46E+19	4,43E+18
Moles/cc	4,09E-05	7,36E-06
Viscosity, kg/m/s	1,80E-05	5,80E-05
Kinematic Visc, m2/s	1,56E-05	2,81E-04
ThermCond, cal/m/K/s	5,63E-03	2,32E-02
ThDiffusivity, m2/s	1,96E-05	3,46E-04

Figura 14: Parametri fisico-chimici ottenuti da GasEQ per la miscela metano-aria

Una volta ottenuti i risultati da GasEQ, visibili in figura 14, avremo bisogno di un ultimo valore richiesto da Fluent che è la velocità della fiamma laminare.

Per poter determinare la velocità di fiamma laminare dovremo utilizzare un progetto open source di Cantera [8], che permette di usufruire di algoritmi utili per la risoluzione di problemi riguardanti la termodinamica, la chimica e la fisica.

L'algoritmo in questione si chiama *Flame Speed with Sensitivity Analysis* scritto in Python e che si serve del modello *GRI-Mech 3.0* per la modellazione di combustioni a gas. L'impostazione dell'algoritmo richiede l'inserimento di alcuni dati del problema, che sono:

- Temperatura miscela incombusta: 294 K
- Lunghezza del dominio: 0,45 m
- Rapporto di equivalenza: 0,586

Inserendo i seguenti dati Cantera procederà al calcolo, e si ricava una velocità di fiamma pari a $0,11 \text{ m/s}$.

Una volta ottenuta la velocità di fiamma, è possibile andare ad impostare tutti i dati numerici richiesti da Fluent per il calcolo numerico fluidodinamico.

- Densità della miscela incombusta: $\rho_u = 1,15 \text{ kg/m}^3$
- Temperatura della miscela incombusta: $T_u = 294 \text{ K}$
- Temperatura adiabatica della fiamma: $T_{ad} = 1635 \text{ K}$
- Coefficiente di diffusività termico della miscela incombusta: $\alpha = 1,96 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
- Tasso di deformazione critico: $g_{cr} = 1 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$
- Velocità della fiamma laminare: $S_l = 0,11 \text{ m/s}$

Per la risoluzione della temperatura bisogna imporre un'equazione lineare del tipo:

$$T = (1 - c)T_u + cT_{ad}$$

5.2. Inizializzazione della variabile progresso

Prima di procedere con il calcolo iterativo del test case preso in esame, va inizializzata la variabile di progresso. Senza inizializzare la variabile è possibile notare effettuando delle operazioni di prova che essa è nulla su tutto il dominio, il che non consente di studiare il processo di combustione. Per l'avviamento numerico della variabile è necessario contrassegnare una regione di celle della mesh e correggere manualmente la variabile di progresso ponendola pari a 1.

Il procedimento per inizializzare la variabile è il seguente: Setting Up Domain → Mark/Adapt Cells → Region; una volta selezionata la regione si imposta la variabile progresso pari a 1 dalle impostazioni Solution Initialization → Patch.

5.3. Algoritmo di calcolo

Come algoritmo di calcolo essendo stato scelto un approccio *pressure-based* è possibile effettuare una scelta fra un algoritmo SIMPLE ed un algoritmo SIMPLEC (SIMPLE-Consistent).

Per la risoluzione del caso preso in esame è stato utilizzato un algoritmo SIMPLE standard, inizialmente effettuando iterazioni al primo ordine, ed una volta raggiunta convergenza, sono stati ripetuti i calcoli al secondo ordine.

6. Post-Processing

Nel presente capitolo sarà descritta l'ultima fase della CFD ovvero il Post-Processing. Esso consiste nell'analisi e nella visualizzazione dei risultati ottenuti con l'obiettivo di verificare se la griglia di calcolo realizzata sia adeguata al fenomeno fluidodinamico preso in esame.

Per effettuare la verifica dei risultati ottenuti essi verranno messi a confronto con i modelli trovati in letteratura. Indicheremo con:

- RANS-Zim-FL 2D: i risultati ottenuti con il modello descritto nella presente tesi;
- RANS-Zim-FL 3D: i risultati ottenuti con il modello 3D descritto da A. Andreini, C. Bianchini, A. Innocenti [1];
- Dati sperimentali: i dati delle misurazioni di Nandula et al. [5].

6.1. Miscela metano-aria

La prima grandezza analizzata è la velocità assiale. Facendo un'analisi dei risultati ottenuti in Figura 15, notiamo come nella zona immediatamente a valle del *bluff-body* è presente una bolla di ricircolo, caratterizzata da velocità negativa. Allontanandoci invece dalla regione del bluff-body notiamo valori di velocità sempre maggiori

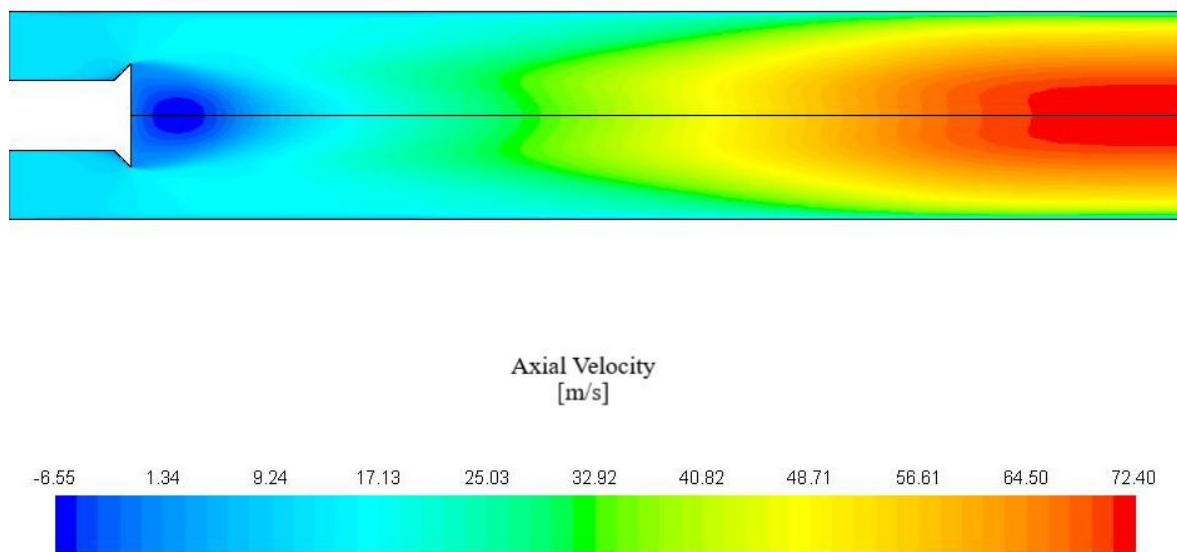


Figura 15: Contours velocità assiale

Sono state selezionate varie sezioni a valle del bluff-body, utili a definire l'andamento lungo le ordinate della grandezza presa in considerazione.

Nel caso della velocità assiale si è deciso di rappresentarla in tre sezioni distinte: $x/D = 0.1$, $x/D = 0.3$ e $x/D = 1$. Per effettuare il confronto è stato necessario definire una funzione mediante l'utilizzo dell'impostazione *Customized function* che ci permette di creare una funzione personalizzata, mettendo in relazione la velocità assiale con la velocità in corrispondenza del restringimento del bluff-body (pari a 15 m/s).

Come è possibile notare, i due modelli confrontati (RANS-Zim-FL 3D e RANS-Zim-FL 2D) risultano ottime approssimazioni per il calcolo della velocità assiale. Possiamo notare una tendenza di entrambi i modelli a sovrastimare i valori della velocità assiale rispetto a quelli misurati sperimentalmente.

In Figura 16 si nota come in corrispondenza della sezione $x/D = 0.1$ entrambi i modelli risultino in linea con i dati sperimentali in prossimità dell'asse di

simmetria, al contrario avvicinandosi a parete i due modelli divergono dai valori sperimentali, sovrastimando la velocità assiale. Dal grafico possiamo notare una regione in cui i valori della velocità assiale sono negativi: questi valori negativi sono dovuti proprio alla bolla di ricircolo creata dal *bluff-body*.

In corrispondenza della sezione $x/D = 0.3$ (Figura 17), invece, si nota che i dati dei due modelli risultano in linea con i dati sperimentali. Dal suddetto grafico si evince una stima leggermente migliore del modello 2D rispetto al modello 3D: quest'ultimo presenta una notevole sovrastima dei valori della velocità assiale avvicinandosi a parete e una leggera sottostima degli stessi in prossimità dell'asse di simmetria.

L'ultima sezione, analizzata in Figura 18, risulta essere in linea con quanto detto precedentemente per le altre due sezioni; è importante sottolineare come in corrispondenza della sezione $x/D = 1$ la regione con valori assiali della velocità negativi è diventata molto ristretta, ma non è scomparsa del tutto.

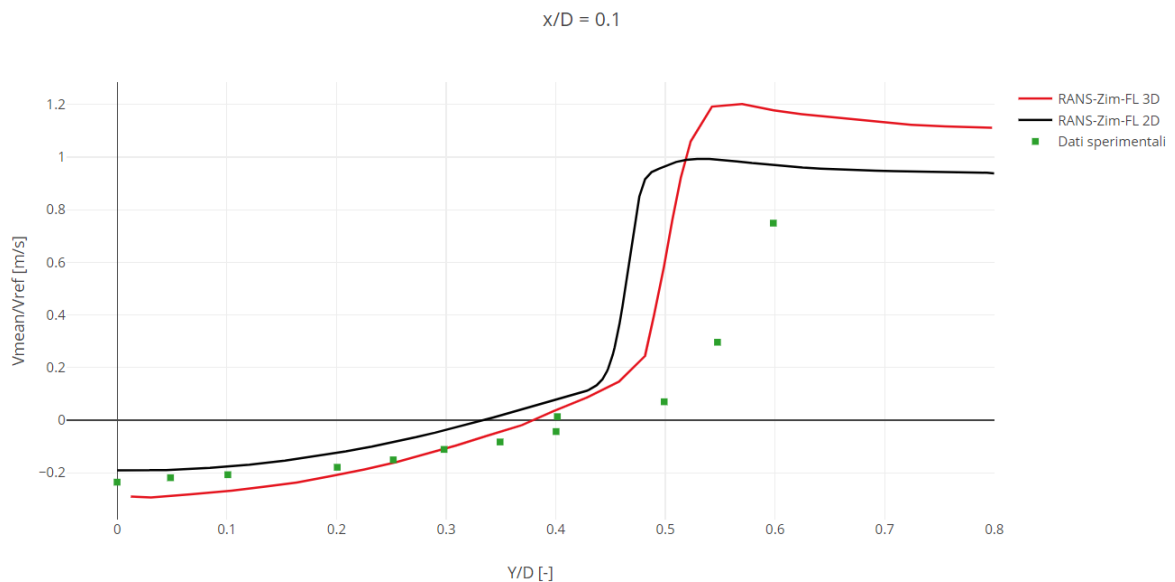


Figura 16: Confronto dei profili di velocità assiale in corrispondenza della sezione

$$x/D = 0.1$$

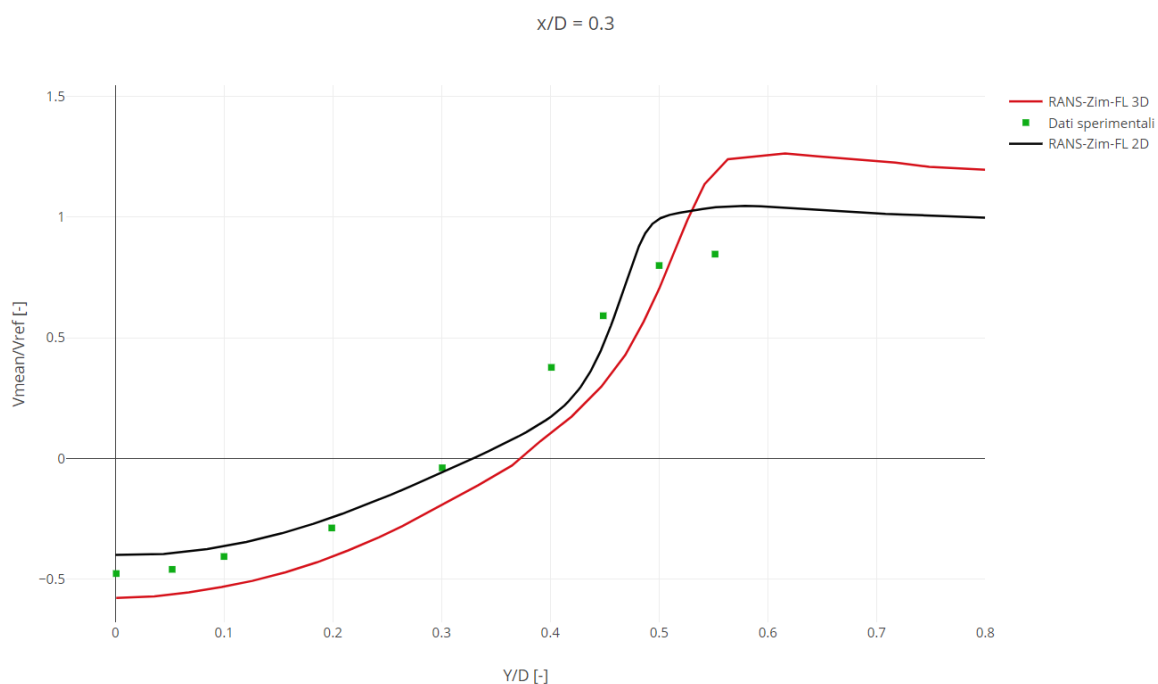


Figura 17: Confronto dei profili di velocità assiale in corrispondenza della sezione

$$x/D = 0.3$$

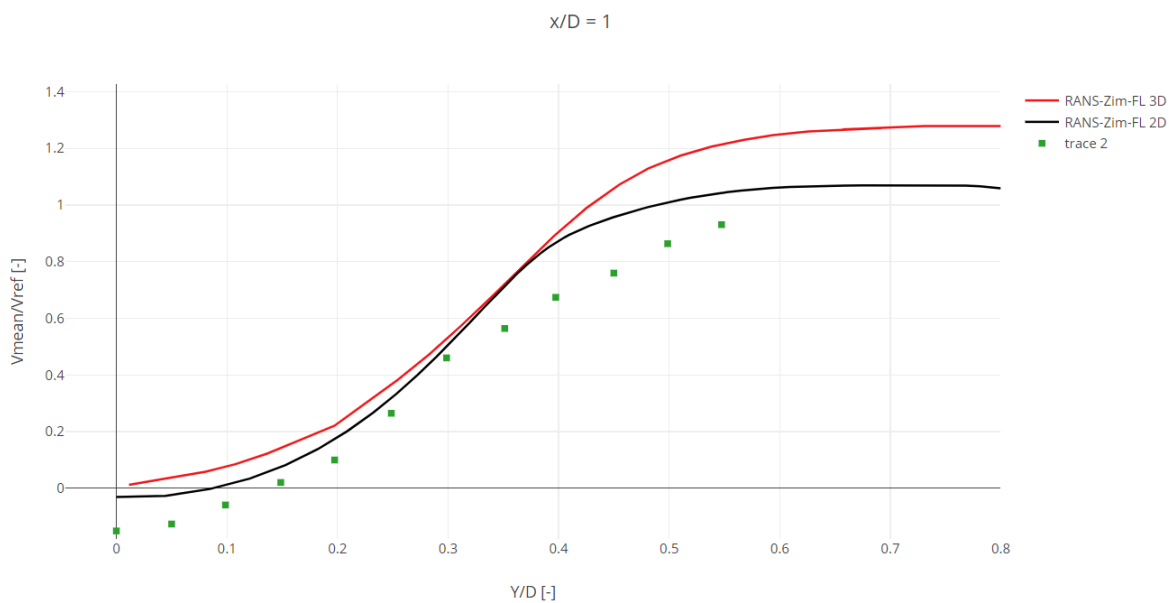


Figura 18: Confronto dei profili di velocità assiale in corrispondenza della sezione

$$x/D = 1$$

Dopo aver studiato la velocità assiale, l'altra grandezza analizzata è la temperatura.

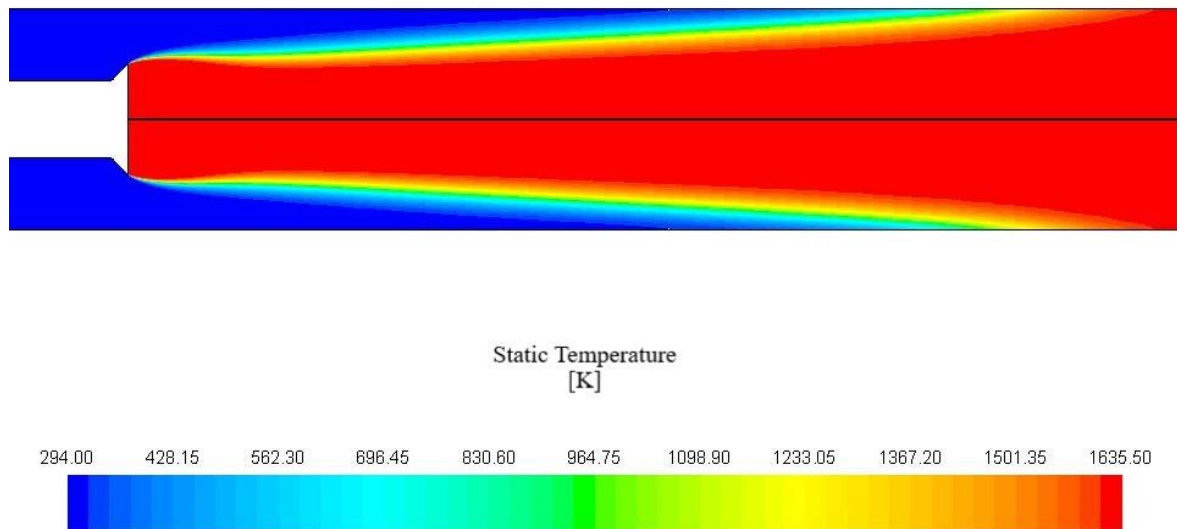


Figura 19: Contours della Temperatura

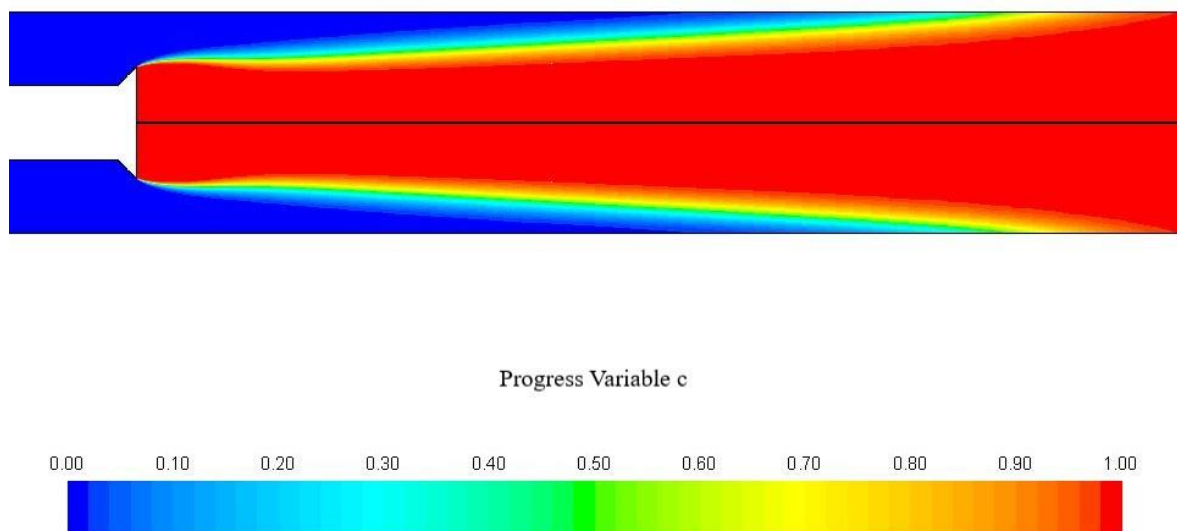


Figura 20: Contours della Variabile di Progresso c

Si può notare dalla Figura 19 e 20 che la fiamma per gran parte della lunghezza del combustore si concentra nella parte centrale lontana da parete. Le due rappresentazioni risultano pressoché sovrapponibili poiché la variabile c assume valore unitario quando la miscela è completamente combusta, e quando la miscela è completamente combusta si hanno elevate temperature. Avvicinandosi alle pareti del combustore notiamo invece presenza di miscela incombusta e quindi miscela fresca.

Per lo studio della temperatura sono state selezionate quattro sezioni in corrispondenza di: $x/D = 0.3$, $x/D = 1.5$, $x/D = 2$, $x/D = 6$.

Al contrario di quanto visto per la velocità assiale, nei modelli realizzati è presente una tendenza alla sottostima della temperatura via via che ci si avvicina a parete, probabilmente dovuta alla presenza della condizione di adiabaticità imposta.

In Figura 21 si nota un'ottima precisione dei risultati ottenuti con entrambi i modelli.

In Figura 22 e 23 in corrispondenza delle sezioni $x/D = 1,5$ e $x/D = 2$ si può evincere che il modello 3D risulta più preciso e più in linea con le misurazioni sperimentali.

Infine, nell'ultima sezione $x/D = 6$, in Figura 24, notiamo una discreta discrepanza tra i dati sperimentali e quelli dei due modelli man mano che ci avviciniamo a parete. Il motivo di questa discordanza nei risultati coincide con l'incapacità del software di stimare correttamente la lunghezza della fiamma. Nonostante ciò, tra i due modelli il più preciso nella simulazione è il modello 3D.

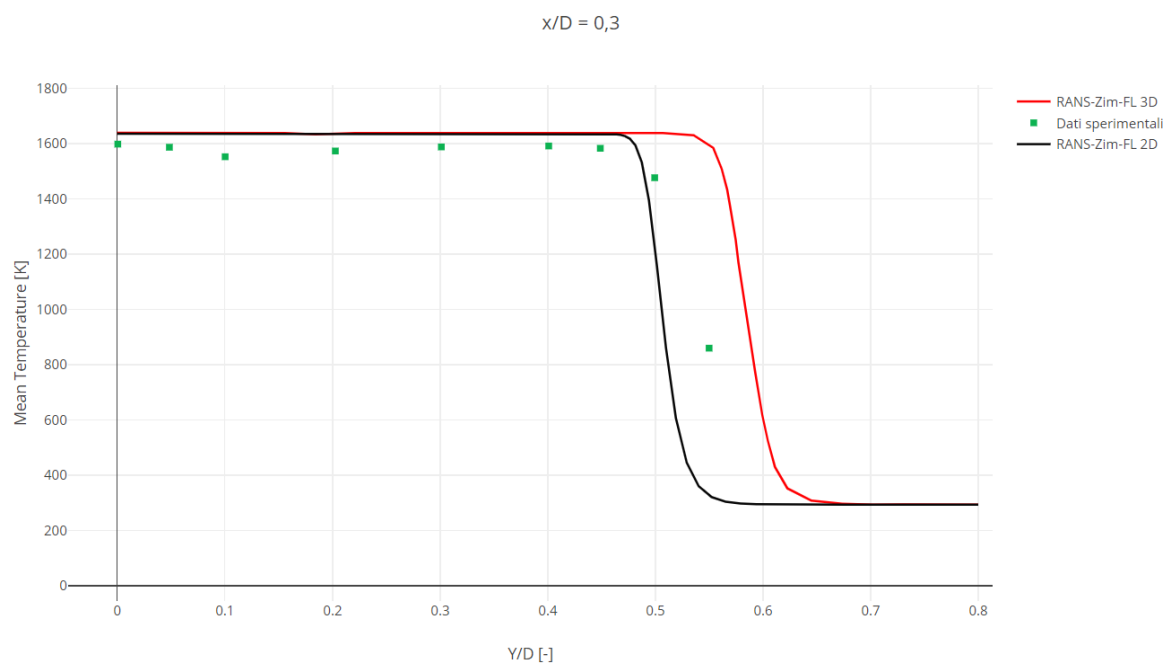


Figura 21: Confronto temperatura in corrispondenza della sezione $x/D = 0,3$

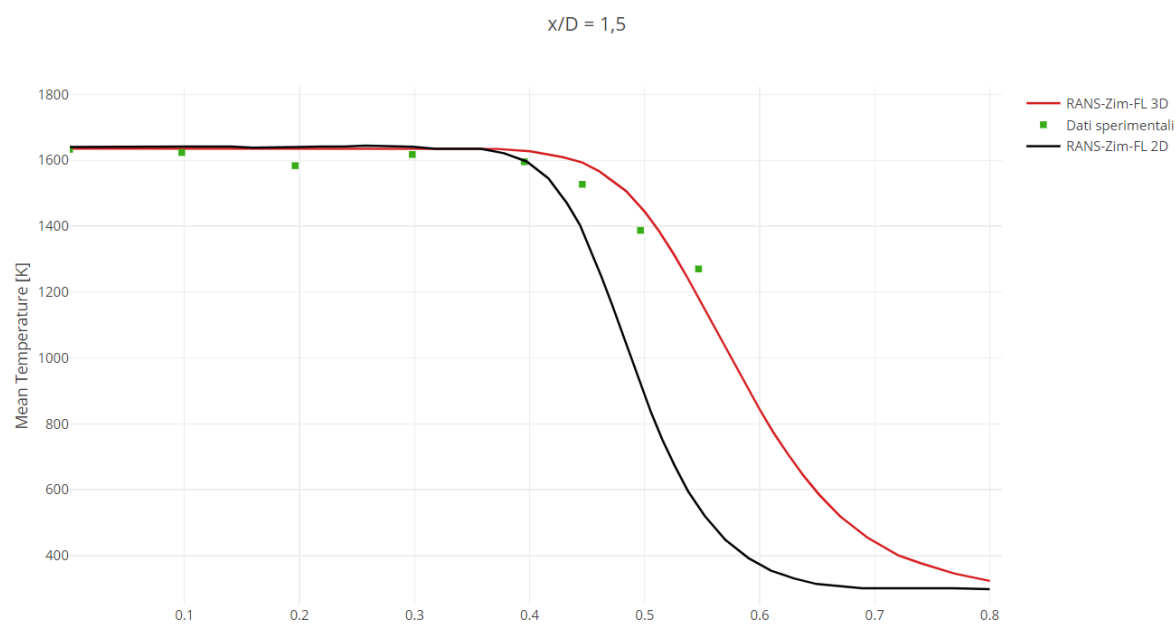


Figura 22: Confronto temperatura in corrispondenza della sezione $x/D = 1,5$

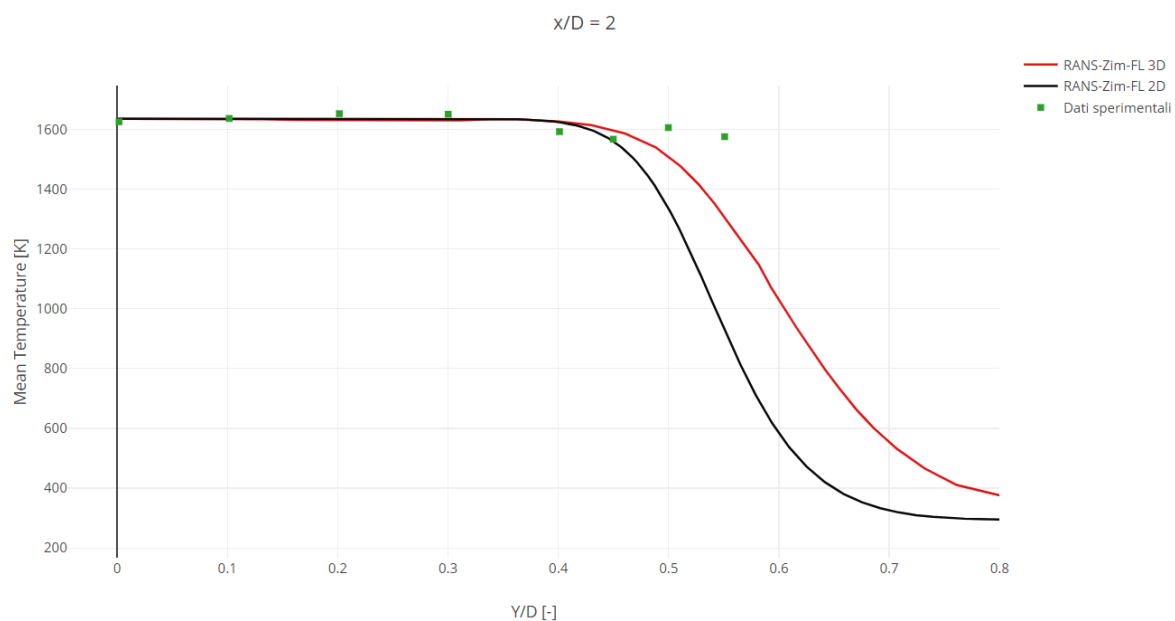


Figura 23: Confronto temperatura in corrispondenza della sezione $x/D = 2$

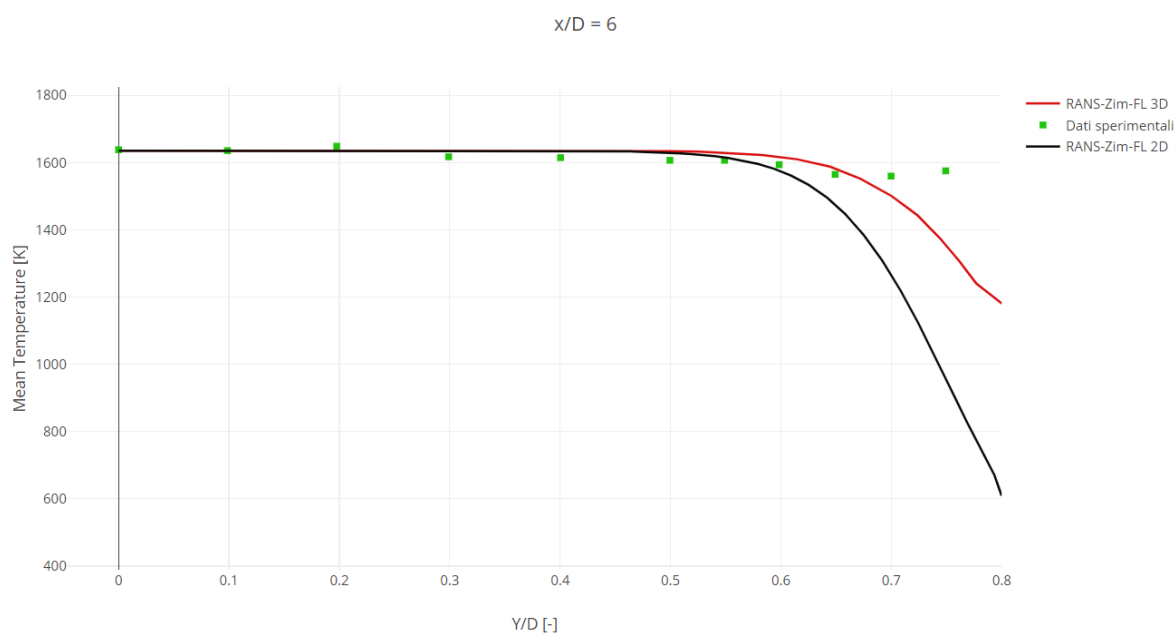


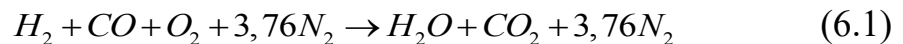
Figura 24: Confronto temperatura in corrispondenza della sezione $x/D = 6$

6.2. Miscela idrogeno-monossido di carbonio-aria

Seguendo quanto detto sulla miscela metano-aria, verranno confrontati i risultati ottenuti nel caso in cui la miscela utilizzata fosse una miscela idrogeno-monossido di carbonio-aria.

Considerando che il syngas è un combustibile principalmente composto da idrogeno e monossido di carbonio, la nostra miscela sarà composta dal 50% di H_2 e 50% CO in volume.

La reazione con la miscela considerata è la seguente:



Come per la miscela metano-aria anche con questa miscela si adotta un rapporto di equivalenza $\phi = 0,586$. Ricaviamo mediante GasEq tutte le proprietà termofisiche e chimiche della miscela, mentre da Cantera ricaviamo la velocità di fiamma.

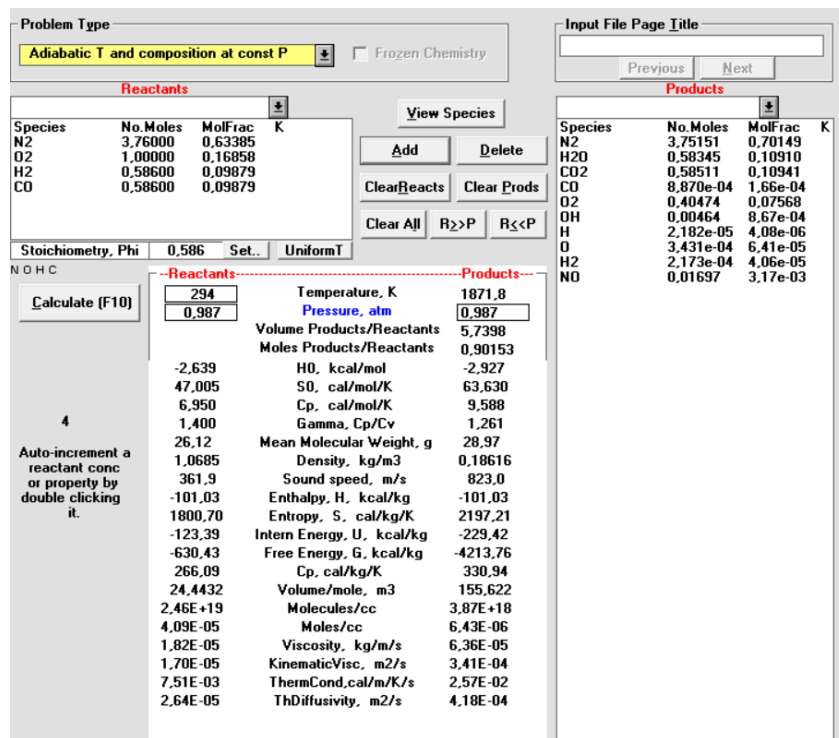


Figura 25: Schermata GasEq per la miscela idrogeno-monossido di carbonio-aria

I dati utili alla simulazione e all'impostazione del calcolo su Fluent sono:

- Densità della miscela incombusta: $\rho_u = 1,0685 \text{ kg/m}^3$
- Temperatura della miscela incombusta: $T_u = 294 \text{ K}$
- Temperatura adiabatica della fiamma (temperatura quando la miscela è completamente bruciata): $T_{ad} = 1871,8 \text{ K}$
- Coefficiente di scambio termico della miscela incombusta:
 $\alpha = 2,64 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
- Velocità della fiamma laminare: $S_L = 0,3960 \text{ m/s}$

Replicando il procedimento descritto nei capitoli precedenti effettuiamo le iterazioni al primo e al secondo ordine e procediamo alla visualizzazione dei risultati ottenuti confrontandoli con quelli della miscela a metano.

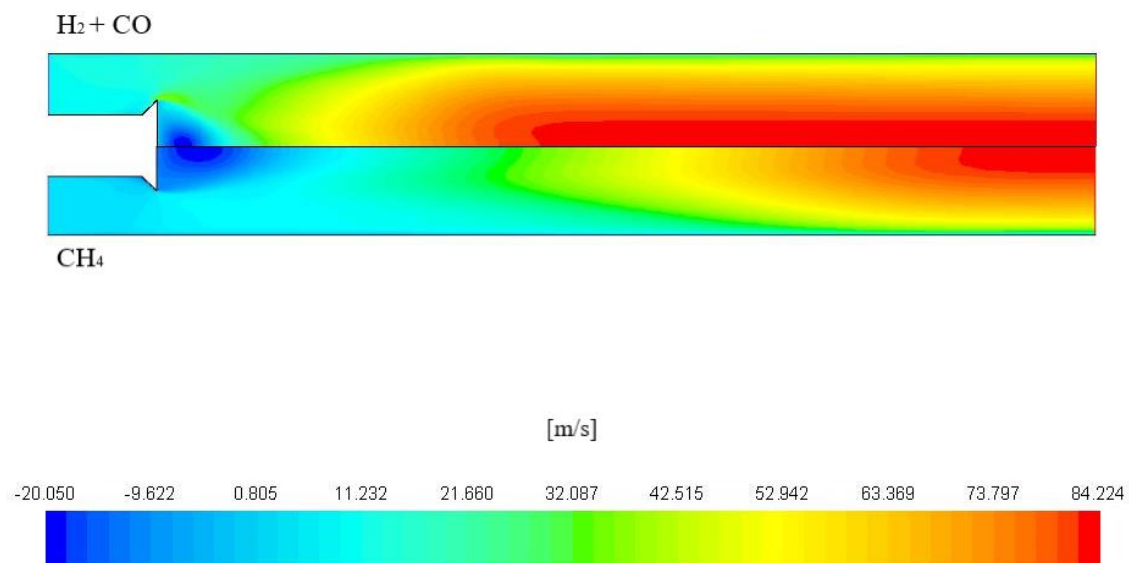


Figura 26: Confronto contours delle velocità assiali

Dalla Figura 26, si può notare come la regione della bolla di ricircolo risulta più piccola rispetto a quella della miscela a metano e allo stesso tempo il valore della velocità assiale raggiunge il massimo subito dopo la regione a valle del bluff-body.

Dai grafici di confronto delle velocità assiali si può notare chiaramente che lungo tutto il dominio risulta che le velocità assiali per il syngas sono notevolmente maggiori rispetto a quelle del caso metano.

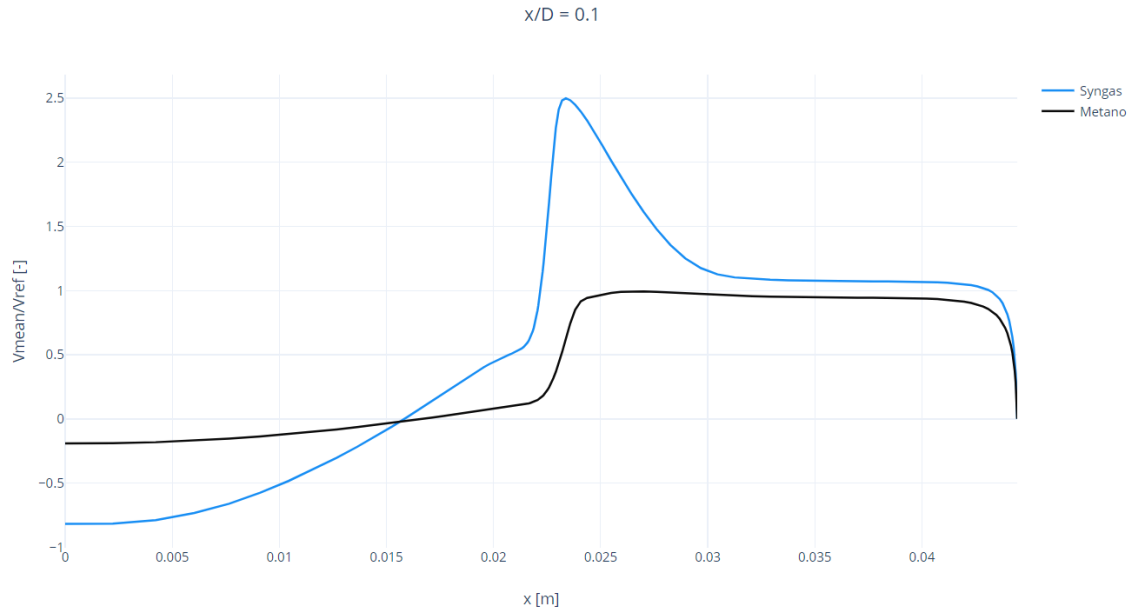


Figura 27: Confronto delle velocità per la sezione $x/D = 0.1$

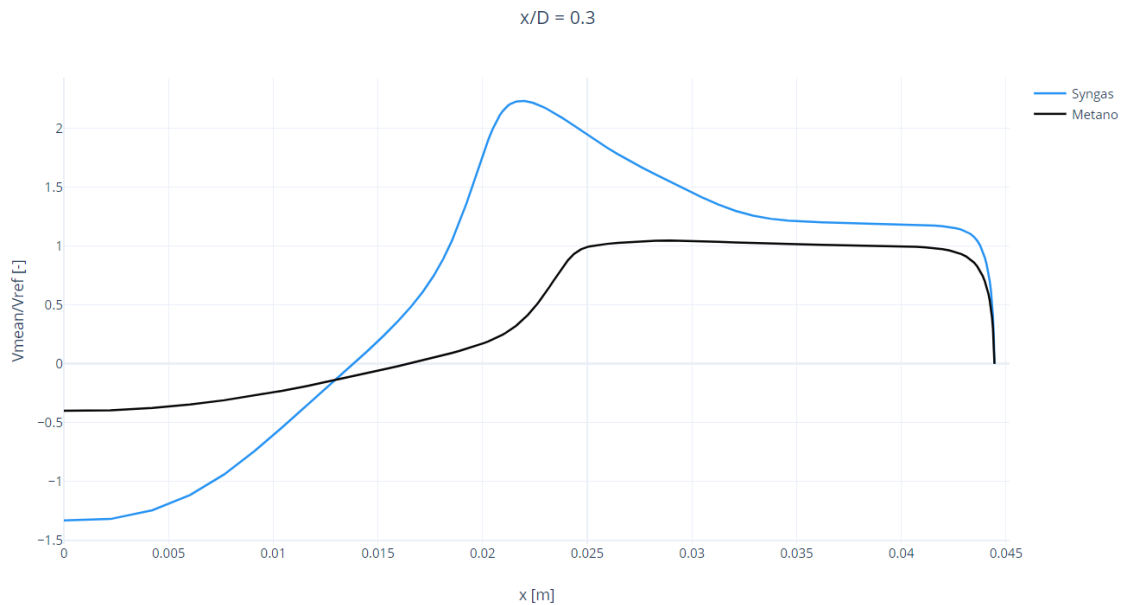


Figura 28: Confronto delle velocità per la sezione $x/D = 0.3$

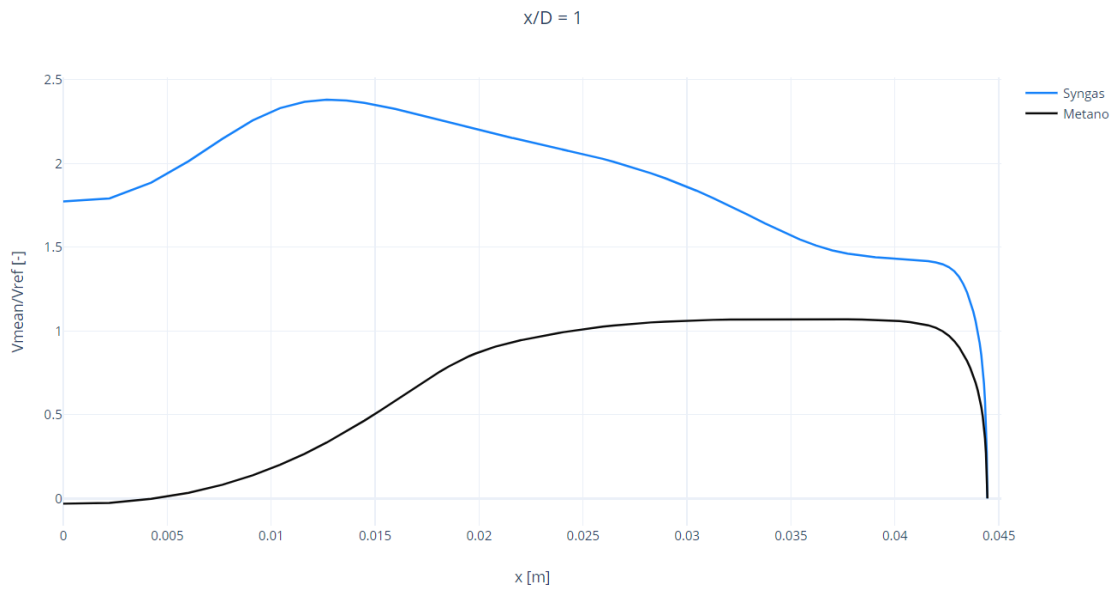


Figura 29: Confronto delle velocità per la sezione $x/D = 1$

Dalle Figure 27 e 28 si denota una regione di ricircolo più piccola rispetto al caso a metano ma con velocità notevolmente superiori in valore assoluto.

Dalla Figura 29, in corrispondenza della fine della bolla di ricircolo per il caso metano, abbiamo già velocità molto alte per il caso syngas.

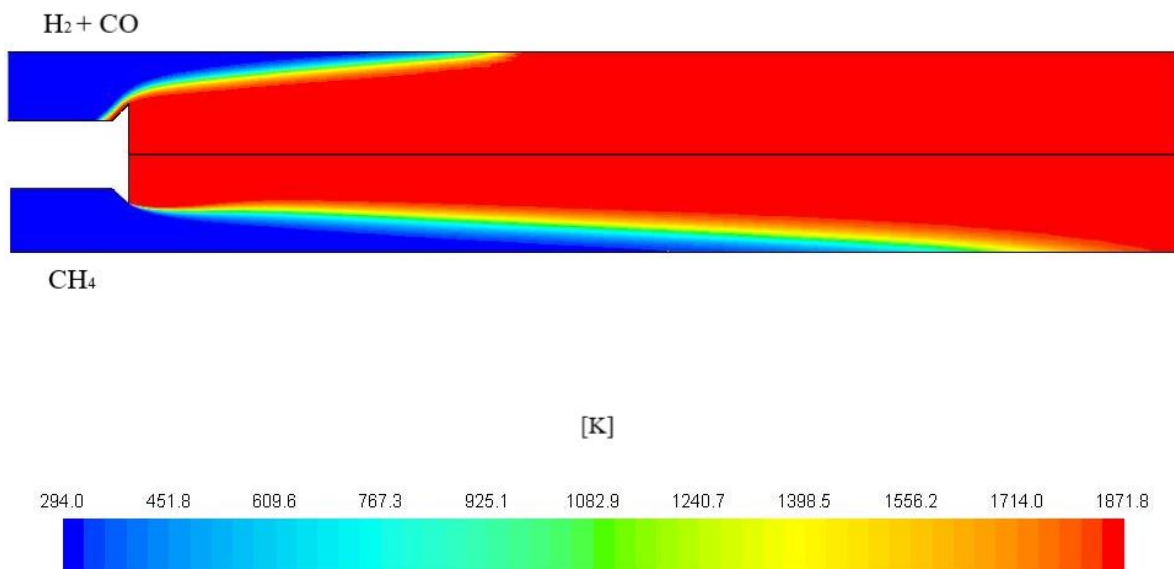


Figura 30: Confronto contours temperatura

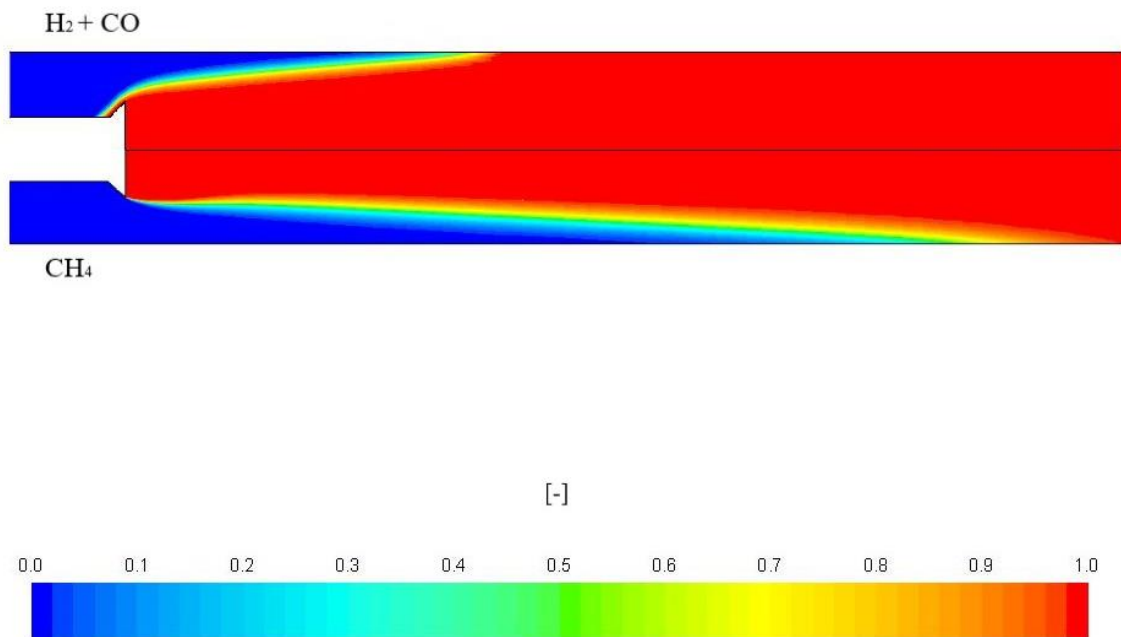


Figura 31: Confronto variabile di progresso

Come già visto per il caso con miscela metano-aria i grafici della temperatura e della variabile di progresso sono del tutto sovrapponibili. È possibile notare come la miscela idrogeno-monossido di carbonio bruci molto prima della miscela con il metano. Inoltre, è possibile notare che, a differenza del caso visto in precedenza, nel caso syngas i gas combustibili sono in parte presenti anche a monte del *bluff-body*.

Procediamo ora con il confronto della temperatura per le due miscele. Dai grafici riscontriamo una temperatura notevolmente maggiore per la miscela idrogeno-monossido di carbonio. In Figura 35, in corrispondenza della sezione $x/D = 6$, la temperatura rimane costante lungo tutta la sezione, comportamento che invece non si verifica per la miscela con il metano dove avvicinandosi a parete presenta miscela fresca incombusta.

In generale dal confronto deduciamo che il bruciatore che utilizza syngas presenta sfide progettuali non indifferenti: temperature molto alte e velocità assiali maggiori del caso del bruciatore con miscela tradizionale.

Allo stesso tempo però è importante notare come il bruciatore che utilizza syngas presenti un netto miglioramento della combustione e con conseguente aumento dell'efficienza del bruciatore, oltre ad una netta riduzione di emissione di gas inquinanti.

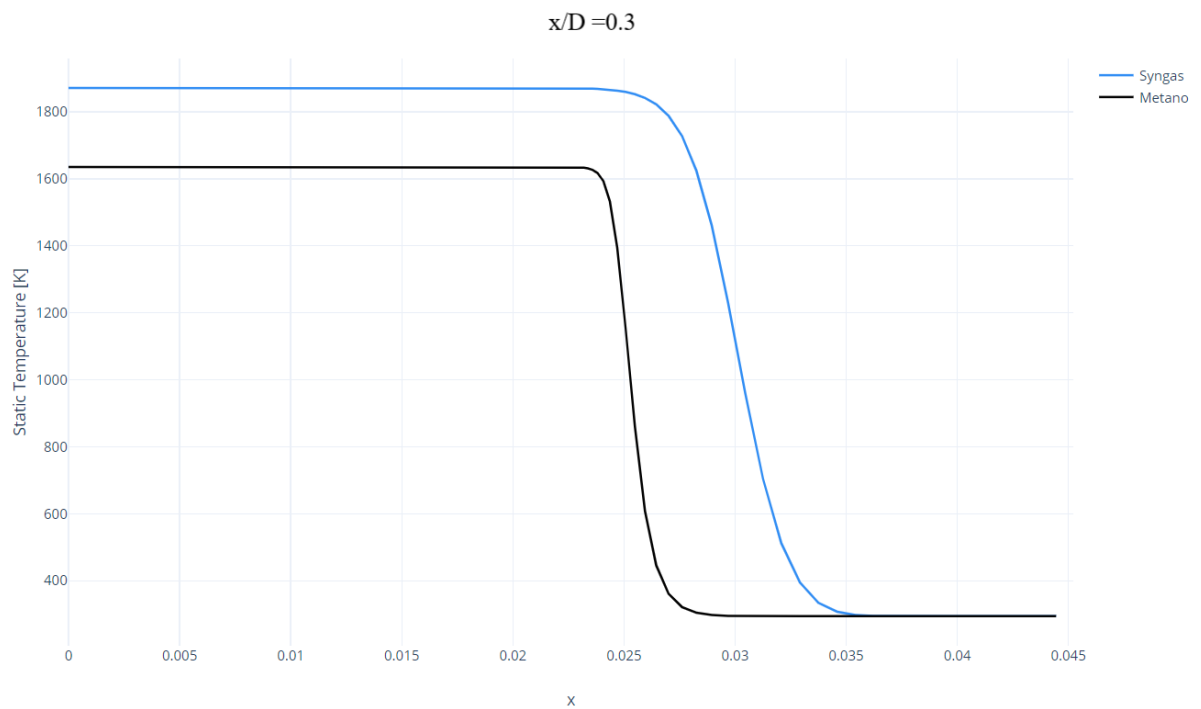


Figura 32: Confronto temperatura per la sezione $x/D = 0,3$

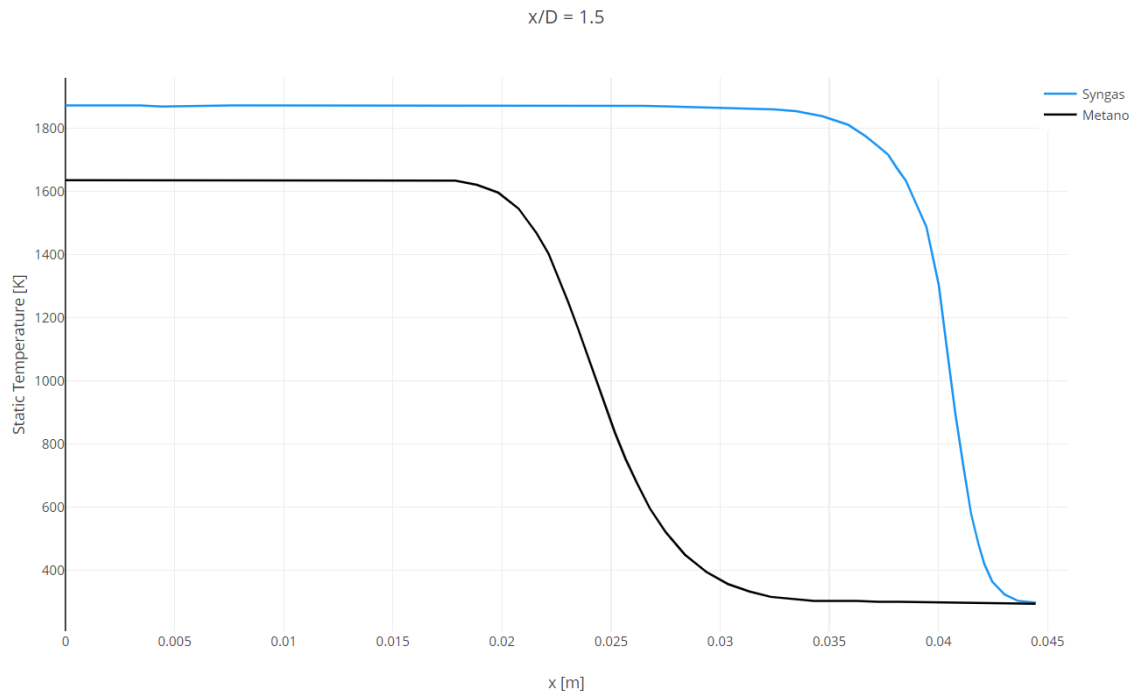


Figura 33: Confronto temperatura per la sezione $x/D = 1,5$

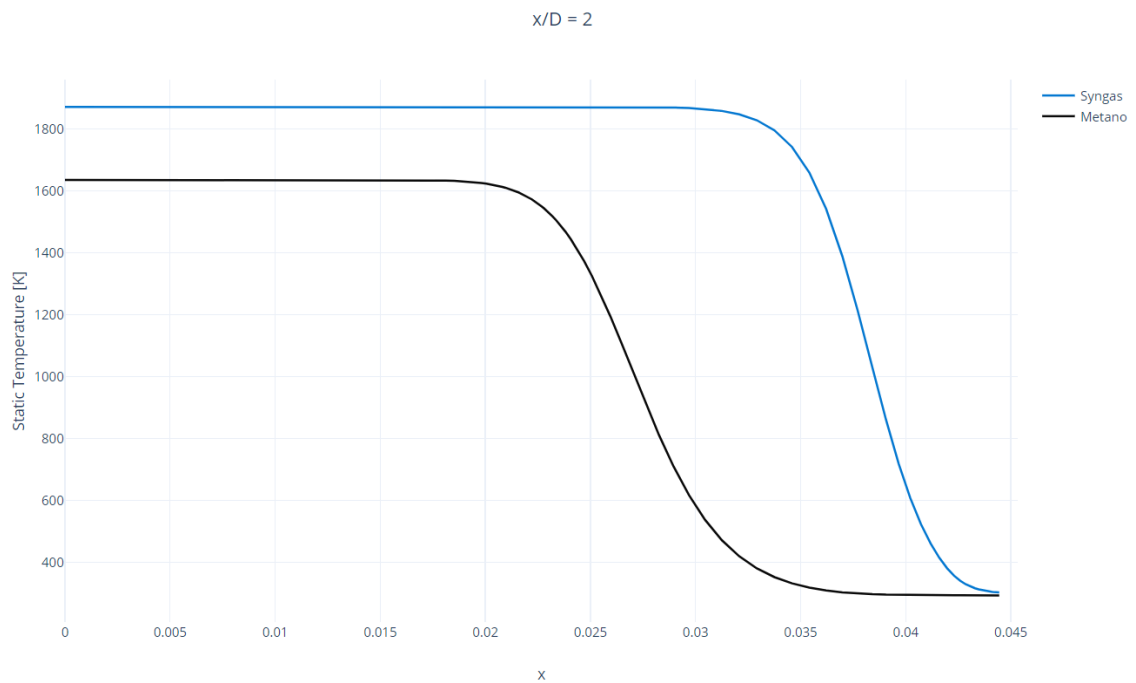


Figura 34: Confronto temperatura per la sezione $x/D = 2$

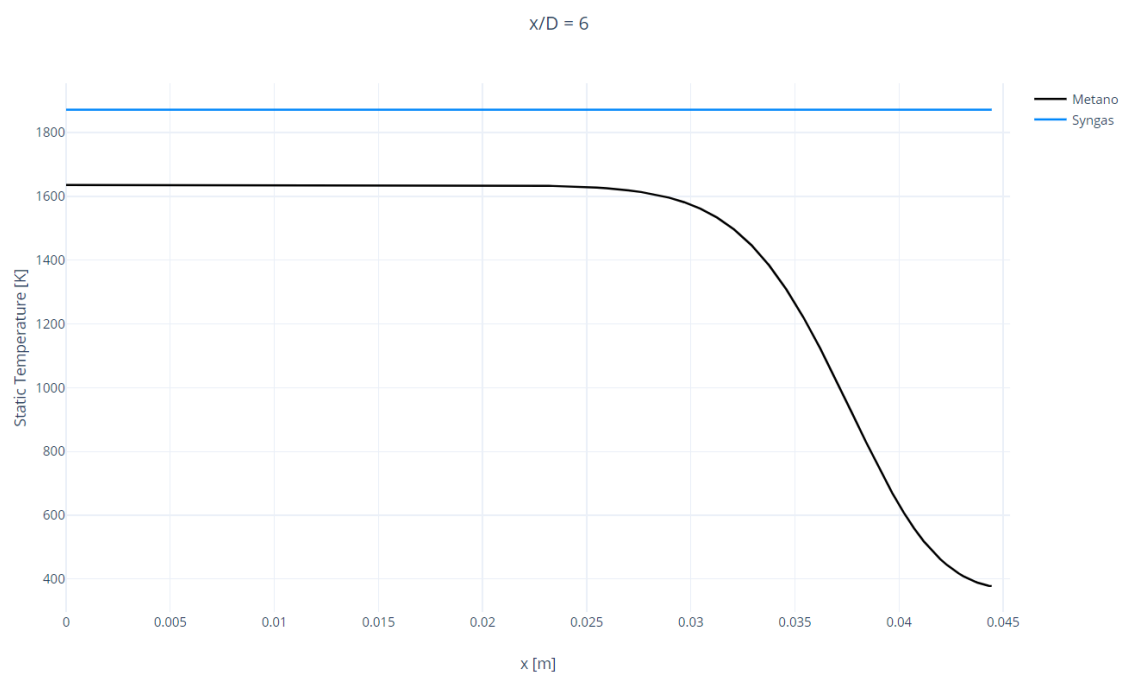


Figura 35: Confronto temperatura per la sezione $x/D = 6$

7. Conclusioni

L'obiettivo di questa tesi è stato quello di realizzare un modello di bruciatore per turbina a gas che operasse con combustione premiscelata magra e che riuscisse a simulare il comportamento di un modello reale. Al fine di perseguire questo obiettivo è stato preso in considerazione il prototipo realizzato dalla Vanderbilt University, operante con una miscela metano-aria.

La realizzazione della griglia per il calcolo numerico ha richiesto alcune semplificazioni: è stata considerata una geometria bidimensionale ed assialsimmetrica e al sistema sono state imposte condizioni adiabatiche. Queste semplificazioni hanno portato ad una notevole riduzione di risorse computazionali per le simulazioni, a scapito di una leggera perdita di accuratezza nelle soluzioni.

L'utilizzo del modello matematico RANS $k-\epsilon$ *standard*, ha permesso di predire con un buon grado di precisione i valori del campo di moto. I valori ottenuti dalla simulazione sono stati successivamente messi a confronto con la simulazione RANS tridimensionale effettuata da *A. Andreini et al.* [1] e le misurazioni sperimentali realizzate da *Nandula et al.* [5]

Durate il confronto sono emerse alcune imprecisioni dei risultati numerici ottenuti rispetto ai dati sperimentali: esse sono dovute alle semplificazioni effettuate come l'assunzione di stazionarietà e adiabaticità del modello che ha portato a non stimare correttamente le perdite locali di calore specialmente in corrispondenza del corpo d'intralcio e delle pareti del combustore. Inoltre, l'utilizzo del modello TFC *Zimont* implementato per la combustione premiscelata non consente di predire il reale allungamento della fiamma.

Si è inoltre proceduto ad analizzare lo stesso modello con una miscela differente (idrogeno-monossido di carbonio-aria) ed è stata messa a confronto

con i risultati numerici della miscela tradizionale a metano. È stato possibile osservare il comportamento del combustore con miscela syngas-aria, apprezzando un miglioramento della combustione con conseguenti effetti positivi sul rendimento del bruciatore.

In conclusione, è stato dimostrato come la fluidodinamica computazionale (CFD) sia uno strumento in grado di fornire informazioni e dati fondamentali per effettuare un'analisi preliminare del problema.

Bibliografia

- [1]: A. Andreini, C. Bianchini, A. Innocenti, “Large Eddy Simulation of a Bluffy Body Stabilized Lean Premixed Flame”, Journal of Combustion, Article ID 710254
- [2]: Turbulence Models in CFD - IdealSimulations © 2020
<https://www.idealsimulations.com/resources/turbulence-models-in-cfd/>
- [3]: Dispense per il corso di Fluidodinamica di Francesco Bonelli, Ingegneria Gestionale - Politecnico di Bari
- [4]: Prof.ssa Ing. Michela Vellini, “GLI IMPIANTI CON GASSIFICAZIONE DEL CARBONE IGCC - Stato dell’arte e prospettive future”, Facoltà di Ingegneria, Università degli studi di Roma “Tor Vergata”
- [5]: P. Nandula, Lean Premixed Flame Structure in Intense Turbulence Rayleigh/Raman/LIF Measurements and Modeling [Ph. D. thesis], Faculty of the Graduate School of Vanderbilt University
- [6]: C. Morley, GasEQ, A Chemical Equilibrium Program for Windows,
<http://www.gaseq.co.uk/>
- [7]: ANSYS Fluent, Theory Guide
- [8]: D.G. Goodwin, “Cantera”, <http://cantera.org/>
- [9]: Antonio Andreini, “Sviluppo di modelli numerici per l’analisi della combustione turbolenta premiscelata nelle turbine a gas”, Facoltà di Ingegneria, Università degli studi di Firenze.