

MASTER EDENET 'INQUINAMENTO FISICO DELL'AMBIENTE'

**MODELLISTICA DELLA  
COMBUSTIONE TURBOLENTA E  
CONTROLLO DELLE EMISSIONI DI INQUINANTI** <sup>1</sup>

Diego Lentini  
Dipartimento di Meccanica e Aeronautica  
Università degli Studi di Roma "La Sapienza"

anno accademico 2002/2003

---

<sup>1</sup> <http://dma.ing.uniroma1.it/STAFF/lentini/lentini.html> (Lecture Notes).

# 1 Premessa

In tutti i processi di combustione si ha emissione di inquinanti. Tali emissioni sono oggetto di normative che stabiliscono le massime concentrazioni delle diverse specie chimiche inquinanti ammesse nei prodotti di combustione. Per alcuni di questi agenti chimici, tali normative stanno diventando sempre più stringenti col passare degli anni, così che il contenimento delle emissioni sta diventando uno dei fattori più importanti da considerare nel progetto di camere di combustioni e caldaie.

Tra gli inquinanti prodotti nei processi di combustione, annoveriamo in particolare:

1.  $\text{NO}_x$ , simbolo con il quale si designano diversi ossidi di azoto <sup>2</sup> (monossido di azoto NO, biossido di azoto  $\text{NO}_2$ , ossido nitroso  $\text{N}_2\text{O}$ ). L'effetto degli ossidi di azoto è differente nella troposfera (lo strato più basso dell'atmosfera, fino a circa 13 km di quota) e nella stratosfera (da circa 13 a 50 km). Le emissioni di  $\text{NO}_x$  da parte di impianti di produzione di energia, autoveicoli, ed altre fonti a terra consistono essenzialmente in NO, ma come i gas di scarico si raffreddano, questa specie si converte in  $\text{NO}_2$  (per esempio, ad una temperatura di 300 K l'equilibrio chimico implica un rapporto tra le concentrazioni in volume di  $\text{NO}_2$  e NO pari a 300000, mentre il rapporto vale 0.14 a 800 K a 0.0035 a 1400 K). Tale  $\text{NO}_2$  entra in una catena chimica che porta alla formazione di ozono  $\text{O}_3$ , il quale a basse quote va considerato come un inquinante in quanto è un potente agente ossidante, per cui risulta irritante in particolare per le mucose. Inoltre, in presenza di composti derivanti dalla combustione di idrocarburi, e sotto l'azione della luce, la  $\text{NO}_2$  dà luogo alla formazione di smog (cosiddetto smog fotochimico). Ancora, reagendo con i radicali OH presenti nell'aria,  $\text{NO}_2$  porta alla formazione di acido nitrico  $\text{HNO}_3$  il quale è uno dei maggiori responsabili delle piogge acide, con un contributo stimato tra il 25% ed il 30% del totale. La  $\text{NO}_2$ , gas di odore pungente, risulta comunque un inquinante di per sé, anche perché negli alveoli si converte negli acidi  $\text{HNO}_2$  e  $\text{HNO}_3$ . Il tempo di residenza di NO e  $\text{NO}_2$  nella troposfera è di pochi giorni, per cui queste specie completano il loro ciclo entro la troposfera stessa. Tuttavia, quella parte di  $\text{NO}_x$  emessa sotto forma di ossido nitroso  $\text{N}_2\text{O}$  ha un tempo di residenza alquanto più lungo, attorno ai 120 anni, per cui questa specie riesce a diffondere entro la stratosfera, dove va a sommarsi alle emissioni di  $\text{NO}_x$  provenienti dai motori a getto. Nella stratosfera si ha una concentrazione relativamente alta ( $3.8 \cdot 10^{-6}$  in volume, contro circa  $5 \cdot 10^{-8}$  nella troposfera) di ozono, il quale si forma per effetto dell'irraggiamento da radiazione ultravioletta di lunghezza d'onda compresa tra i 180 ed i 230 nm (nanometri,  $10^{-9}$  m). L'ozono assorbe la radiazione ultravioletta di lunghezza d'onda compresa tra i 220 ed i 320 nm, proteggendo in tal modo la superficie terrestre dagli effetti di questa radiazione che comporterebbe altrimenti tumori della pelle e danni alle colture. Questo effetto di schermo ai raggi ultravioletti fa anche in modo che non si abbia apprezzabile produzione di ozono attraverso questo meccanismo alle quote più basse. L'ossido nitroso è inoltre un potente gas di serra, con un'efficacia relativa all'anidride carbonica (*Global Warming Potential* – GWP) pari a circa 310;
2. monossido di carbonio CO, gas tossico in quanto presenta una fortissima affinità per l'emoglobina del sangue (circa 210 volte superiore a quella dell'ossigeno molecolare  $\text{O}_2$ ). Risulta letale in concentrazioni dello 0.05%. Il suo tempo di residenza nell'atmosfera è relativamente breve, dell'ordine di due mesi e mezzo, e questo porta a concentrazioni differenti di CO nei due emisferi, circa  $1.2 \cdot 10^{-7}$  nell'emisfero nord (dove sono concentrate la maggior parte delle emissioni) e  $5 \cdot 10^{-8}$  nell'emisfero sud;
3. ossidi di zolfo  $\text{SO}_x$ , normalmente emessi come anidride solforosa  $\text{SO}_2$ , la quale può successivamente ossidarsi nell'ambiente ad anidride solforica  $\text{SO}_3$ . Quest'ultima in contatto con

---

<sup>2</sup> Alcuni autori indicano come  $\text{NO}_x$  solo le specie NO e  $\text{NO}_2$ .

l'umidità atmosferica genera acido solforico, che è il maggior contribuente alle piogge acide. La  $\text{SO}_2$  viene avvertita dall'organismo già in concentrazioni di poco superiori ad una parte per milione (ppm); oltre le 10 ppm dà irritazione della gola e degli occhi, ed a 20 ppm causa immediati attacchi di tosse. Le emissioni di questo tipo sono particolarmente significative nella combustione del carbone;

4. *soot*, o particolato, cioè particelle solide di diametro in generale inferiore ad un micron, che si formano nella combustione di idrocarburi. Tali particelle sono di conseguenza respirate in profondità nei polmoni e risultano nocive alla salute;
5. UHC (*Unburned HydroCarbons*), idrocarburi incombusti, i quali rappresentano comunque una perdita dal punto di vista energetico. Essi inoltre entrano nella catena chimica di altri inquinanti primari, generando inquinanti secondari (vedi sopra il caso degli ossidi di azoto);
6. ceneri, che si formano nella combustione del carbone. Esse presentano tra l'altro un problema di smaltimento, in quanto la quantità che se ne forma è indicativamente intorno al 20% della massa di combustibile bruciato.

Inoltre, i seguenti gas, anche se non possono essere chiamati inquinanti a pieno titolo (i primi due in particolare sono i principali prodotti di combustione degli idrocarburi), hanno importanti effetti ambientali:

- $\text{CO}_2$ , cioè anidride carbonica (o biossido di carbonio), gas di serra, che si stima responsabile tra il 25 ed il 50% del riscaldamento globale del pianeta;
- $\text{H}_2\text{O}$ , cioè acqua (allo stato di vapore o gas), anch'essa importante gas di serra. L'acqua emessa dai motori a getto degli aerei, a causa delle basse temperature che regnano ad alta quota, si condensa in cristalli di ghiaccio formando i cosiddetti *contrails* (condensation trails – scie di condensazione). Anch'essi sono causa di problemi ambientali in quanto aumentano la nuvolosità ad alta quota, che riflette la radiazione solare, e quindi anche quella componente ultravioletta che abbiamo visto essere necessaria per la formazione dell'ozono nella stratosfera;
- $\text{CH}_4$ , cioè metano, anch'esso un potente gas di serra con un GWP pari a 24.5. Occorre comunque osservare che le emissioni di metano da camere di combustione sono praticamente trascurabili, tuttavia la combustione dà indirettamente un contributo in quanto le perdite nei gasdotti portano ad emissioni significative.

Questo elenco non pretende in alcun modo di essere esauriente (si potrebbero citare altre specie prodotte in alcuni processi di combustione come per esempio la diossina che si forma nell'incinerazione di plastiche, etc.).

Occorre comunque sottolineare che, accanto alle emissioni degli inquinanti citati sopra dovute ai processi di combustione, esistono importanti sorgenti naturali di queste specie. Per esempio, le emissioni di metano sono dovute in larga misura a campi coltivati a riso, ai ruminanti, ed altre fonti naturali. Il contributo dovuto alla combustione tuttavia è importante in quanto altera l'equilibrio naturale tra produzione e distruzione.

Inoltre, è ovvio che l'effetto delle emissioni di una specie chimica (inquinante o agente serra) dovute alla combustione sarà tanto più rilevante dal punto di vista ambientale tanto più bassa è la concentrazione di tale specie nell'atmosfera. Abbiamo per esempio citato la  $\text{CO}_2$ , la cui concentrazione attuale nell'atmosfera è di circa 370 ppm (era di 280 ppm in età preindustriale, cioè fino al 18° secolo). La concentrazione di  $\text{H}_2\text{O}$  nell'atmosfera è estremamente variabile, ma può comunque

arrivare fino al 3 – 4% nelle zone di foresta tropicale; è evidente pertanto che le emissioni di tale specie dovute alla combustione hanno comunque un peso molto modesto sul suo bilancio globale.

Per limitare le emissioni di inquinanti, si può pensare a differenti strategie:

- pre-trattamento del combustibile, ad esempio desolforazione;
- post-trattamento dei prodotti di combustione, ad esempio immissione di ammoniaca o urea per abbattere gli ossidi di azoto;
- modifica del processo di combustione, per contenere la formazione di specie inquinanti.

Delle tre alternative, la terza risulta evidentemente la meno costosa, ma richiede la comprensione dettagliata dei meccanismi che hanno luogo in camera di combustione. Occorre comunque premettere che essa, pur risultando molto valida per alcuni inquinanti,  $\text{NO}_x$ , CO, UHC e *soot* in particolare, non risulta applicabile ad altri (ad esempio  $\text{SO}_x$ ).

Scopo di queste note è di fornire gli strumenti per la comprensione e la modellizzazione dei processi di combustione e formazione degli inquinanti, ed indicare le possibili opzioni per il loro controllo.

Occorre sottolineare che gli strumenti modellistici per la previsione delle emissioni di inquinanti che delineremo sono in grado di quantificare tali emissioni solo in modo piuttosto approssimato, tuttavia essi risultano utili in quanto sono in grado di riprodurre qualitativamente gli *andamenti* delle emissioni di inquinanti al variare delle condizioni operative. Essi consentono quindi un'analisi computazionale dell'effetto sulle emissioni di diverse soluzioni, al fine di individuare quella che, rispettando le specifiche progettuali, consente di minimizzare tali emissioni. Tale investigazione, se effettuata invece per via sperimentale (cioè realizzando e provando differenti prototipi) avrebbe costi e tempi incomparabilmente maggiori.

## 2 Introduzione alla combustione turbolenta

Lo studio della combustione in flussi turbolenti coinvolge un gran numero di complessi problemi. Nell'ambito di questa trattazione non potremo considerarli tutti, ed introdurremo ben presto numerose ipotesi semplificative. Riteniamo comunque utile, al fine di acquisire coscienza dei limiti intrinseci dei modelli che descriveremo, citare alcuni tra i principali problemi.

La combustione avviene sempre in fase gassosa; qualora il combustibile sia iniettato in camera di combustione in fase condensata (liquido o solido), sarà quindi necessaria dapprima una transizione di fase fino allo stato di vapore o gas. Se il combustibile è in fase liquida, occorre disperderlo in goccioline mediante iniettori di disegno appropriato, per aumentare la superficie a disposizione per il cambiamento di fase; la transizione di fase avviene quindi per evaporazione sulla superficie delle goccioline stesse, le quali di conseguenza si riducono progressivamente di diametro. In questo processo gioca evidentemente un ruolo importante lo scambio di calore tra le due fasi. Molti combustibili liquidi evaporano facilmente, come i combustibili criogenici (p. es. idrogeno liquido) e gli idrocarburi leggeri, quali le benzine ed il kerosene; nel caso di turbine a gas, l'evaporazione delle goccioline è facilitata dal riscaldamento che l'aria subisce nel compressore. In queste condizioni si può tentativamente ipotizzare che il combustibile vaporizzi non appena iniettato in camera, e trattare quindi la combustione in fase gassosa; tale approssimazione tuttavia è lecita solo nel funzionamento a piena potenza, mentre nel funzionamento a potenza ridotta gli effetti dovuti alla presenza di due fasi non sono trascurabili. Incidentalmente, i motori aeronautici generalmente operano a piena potenza per non più di 40 s (durante la fase di rullaggio e decollo), poi la potenza viene ridotta a circa l'85% del massimo per circa due minuti, e successivamente ulteriormente

ridotta fino ad attestarsi a non più del 30% del massimo in fase di volo di crociera. Questo per limitare le sollecitazioni termiche sulle palette della turbina; è noto infatti che la spinta specifica di una turbina a gas cresce con l'aumentare della temperatura massima del ciclo (quindi al decollo, quando è richiesta la massima spinta, il motore opera con rapporto aria/combustibile più prossimo allo stechiometrico, innalzando quindi la temperatura all'ingresso della turbina). Gli olii pesanti presentano invece una bassa volatilità, per cui la fase liquida persiste più a lungo. Negli endoreattori a propellenti liquidi anche l'ossidante può essere in fase liquida. Nel caso di combustibili solidi, come il carbone ed i grani di endoreattori a propellenti solidi, la combustione richiede la pirolisi e/o sublimazione del combustibile o del grano, processo anch'esso strettamente collegato allo scambio di calore interfase. In endoreattori a propellenti solidi addizionati con polvere metalliche (p. es. alluminio), quest'ultime ossidandosi danno luogo a prodotti che restano allo stato di goccioline o particelle anche alle elevate temperature che prevalgono nella camera di combustione. Particelle solide (cenere) sono generate anche nella combustione del carbone. In molti casi quindi la combustione coinvolge un flusso bifase.

Tuttavia, anche quando il combustibile è iniettato in camera di combustione già in forma gassosa, possono generarsi particelle solide per effetto della combustione. Tutti gli idrocarburi infatti generano *soot* (particolato, o fuliggine, visibile come fumo), cioè particelle incombuste composte prevalentemente dagli elementi idrogeno e carbonio. Anche in questo caso si ha quindi a rigore un flusso bifase; inoltre il *soot* è strettamente associato con lo scambio termico per radiazione. La produzione di *soot* è relativamente limitata nella combustione del metano, ma risulta importante per tutti gli altri idrocarburi.

A causa delle elevate temperature associate con la combustione, lo scambio termico per radiazione (che, per emissione da corpo nero, è legato alla quarta potenza della temperatura) è particolarmente attivo. Esso può essere dovuto a due cause. La prima è legata all'eccitazione dei livelli energetici delle molecole; tornando negli stati energetici più bassi, la molecola emette quanti di energia di ben determinata frequenza (o lunghezza d'onda); si parla quindi di *emissione per bande* del gas. La seconda causa è legata alla presenza di una fase condensata (*soot* nel caso di combustione di idrocarburi, oppure ossido di alluminio in endoreattori a propellenti solidi addizionati con polvere di alluminio) che emette energia per radiazione in modo simile ad un corpo nero, con uno spettro *continuo* secondo la legge di Planck. La radiazione per bande è importante da parte soprattutto delle molecole di  $H_2O$  e  $CO_2$ ; un minore contributo danno le specie  $CO$  e  $CH_4$ . Quando si ha solo radiazione in bande da gas, si parla di fiamme *non luminose*; quando si ha anche il contributo continuo da *soot*, di fiamme *luminose*.

In tutti i sistemi reagenti si ha un numero spesso elevato di specie chimiche, e si ha quindi una *diffusione multicomponente* (ciascuna specie chimica diffonde in ciascuna delle altre specie presenti nel sistema, con uno specifico tasso di diffusione), descrivibile mediante coefficienti di scambio multicomponente, di valutazione alquanto complessa; anche la viscosità e la conducibilità termica della miscela gassosa dipendono in maniera complessa dalla composizione e dalla temperatura.

La cinetica chimica della miscela reagente è molto spesso complessa, ed è descrivibile solo in via approssimata. Le costanti di reazione che appaiono nell'espressione di Arrhenius sono ricavate per via sperimentale, ma differenti metodi sperimentali portano a differenti valori; molto spesso diversi autori adottano per la stessa reazione valori delle costanti che differiscono di diversi ordini di grandezza. Per alcune reazioni, determinazioni recenti hanno portato a valori delle costanti di reazione che differiscono di molti ordini di grandezza rispetto a quelli finora accettati. Queste 'costanti' inoltre spesso non sono tali se non in un limitato campo di temperatura. Infine, è da dire che alcune reazioni esibiscono un comportamento non descrivibile secondo l'espressione di Arrhenius [2, 3].

Per effetto delle escursioni di temperatura che si verificano in flussi reagenti, i calori specifici delle

singole specie chimiche variano. Se prevale l'equilibrio vibrazionale, il calore specifico della singola specie è esprimibile come una funzione della temperatura; tuttavia il calore specifico tende al valore di equilibrio alla temperatura data con un tempo finito, a causa di processi di *rilassamento vibrazionale*. Tali processi sono descrivibili introducendo equazioni per l'energia vibrazionale, nelle quali compare un tempo di rilassamento, funzione della temperatura e della pressione, esprimibile attraverso il modello di Landau e Teller [4]. Esso tiene in conto dei processi di interazione tra le molecole delle diverse specie chimiche, per cui p. es. una molecola della specie  $i$  può eccitarsi (o de-eccitarsi) vibrazionalmente attraverso una collisione con la molecole della specie  $j$ . Si avrà quindi un meccanismo di eccitazione, analogamente al meccanismo di reazione che abbiamo discusso per le reazioni chimiche. Anche in questi modelli compaiono costanti, la cui determinazione pone problemi qualitativamente simili a quelli esposti per le costanti dell'espressione di Arrhenius.

La turbolenza è poi considerata uno degli ultimi problemi irrisolti della fisica. Come vedremo, per una trattazione ingegneristica dei flussi turbolenti occorre ricorrere a *modelli di turbolenza*, dei quali ne esistono molti; essi possono essere categorizzati in differenti livelli di complessità. Quelli di corrente uso applicativo sono i più semplici; questi presentano tuttavia notevoli limiti, in particolare (ma non solo) per quanto riguarda il trasporto di grandezze scalari (come le concentrazioni delle specie chimiche, l'entalpia o la temperatura, cioè proprio le grandezze tipiche dei flussi reagenti). Se poi prendiamo in considerazione lo scambio termico convettivo in flussi turbolenti, possiamo dire che esso rappresenta l'aspetto più difficile da modellare.

È necessario sottolineare che l'assoluta maggioranza dei flussi in applicazioni industriali, nonché in geofisica, sono turbolenti (per esempio, nella camera di combustione di una turbina a gas il numero di Reynolds assume tipicamente valori dell'ordine delle centinaia di migliaia). I flussi laminari sono piuttosto l'eccezione; quelli poi che possono essere approssimati come inviscidi sono ancora più rari. La combustione in flussi turbolenti assomma tutte le difficoltà sopra riportate; inoltre, i vari aspetti della combustione e della turbolenza interagiscono fra loro in modo complesso, moltiplicando la difficoltà di descrizione del problema.

Dalle considerazioni esposte si evince che, per problemi applicativi, bisognerà accontentarsi di risolvere un *modello* del flusso considerato, che necessariamente tratterà in maniera approssimata alcuni aspetti, più che le equazioni 'esatte'. Tali modelli non hanno in generale validità universale, ma sono al contrario limitati nel loro campo di applicazione. Per consentire di introdurre il lettore agli strumenti modellistici fondamentali che mirano a descrivere i flussi turbolenti reagenti, riportiamo in queste note alcuni modelli che possono essere applicati con ragionevole approssimazione in alcuni casi di interesse pratico. Tale modelli, una volta implementati in adatti codici di calcolo fluidodinamici, possono essere usati per prevedere il campo di flusso in fiamme e camere di combustione.

A causa della vastità del tema, adottiamo alcuni punti di vista restrittivi. Consideriamo solo reazioni in fase gassosa (trascurando quindi del tutto eventuali fenomeni di flusso bifase), ed inoltre l'attenzione è in qualche modo sbilanciata a favore dei propulsori aeronautici. Ci concentreremo su metodi di provata applicabilità pratica, ed accenneremo appena ad approcci più avanzati che attraggono l'interesse in vista delle loro potenziali capacità, ma non sono ancora ampiamente adottati nelle applicazioni pratiche.

Come si può facilmente comprendere sulla base delle considerazioni sopra esposte, la previsione dei flussi turbolenti è affetta da grandi incertezze, e la combustione aggiunge un importante contributo. Questo deve essere tenuto in mente quando si confrontano i risultati delle previsioni numeriche con i risultati di esperimenti. Questi ultimi, a loro volta, sono anch'essi oggetto di grandi incertezze, in particolare per flussi turbolenti reagenti. In queste note cercheremo di elaborare commenti, introducendo i vari modelli, sulle incertezze ed i limiti ad essi associati, e sulle implicazioni delle

approssimazioni sulle quali esse si basano. Menzioneremo anche le aree in cui mancano tuttora modelli appropriati.

### 3 Equazioni di Navier–Stokes in forma mediata.

In questa sezione ci occupiamo delle equazioni di conservazione per flussi reagenti gassosi, sotto l'ipotesi di equilibrio vibrazionale (per cui il calore specifico di ogni singola specie è esprimibile come una funzione della temperatura), e delle difficoltà associate con la loro soluzione numerica per flussi turbolenti. Quindi, è presentata la procedura di media che forma la base dei successivi sviluppi.

#### 3.1 Equazioni di conservazione.

Sono qui riassunte le equazioni di conservazione per una miscela gassosa reagente. Per una derivazione completa vedi p. es. [5].

L'aspetto saliente delle miscele gassose reagenti è che la densità, data (per miscele di gas termicamente perfetti) dall'equazione termica di stato

$$\rho = \frac{pW}{R^0 T} \quad (1)$$

varia ampiamente nel campo di moto per l'effetto combinato di variazioni di temperatura e variazioni di composizione, le quali ultime influenzano il peso molecolare della miscela  $W$ ; in flussi ad alta velocità anche la pressione può avere un ruolo. La composizione della miscela può essere espressa o in termini delle frazioni di massa delle singole specie (essendo  $Y_i$  la massa della specie  $i$  riferita ad una massa unitaria di miscela) oppure delle frazioni molari (essendo  $X_i$  le moli della specie  $i$  contenute in una mole di miscela). Il peso molecolare della miscela è allora legato alla composizione in termini di frazioni molari dalla

$$W = \sum_{i=1}^N X_i W_i \quad (2)$$

dove  $N$  è il numero di specie chimiche presenti nel sistema, e  $W_i$  è il peso molecolare della specie  $i$ <sup>3</sup>; infatti una mole di miscela (di massa  $W$ ) è costituita da  $X_1$  moli della specie 1 (la cui massa per mole è  $W_1$ ),  $X_2$  moli della specie 2, etc. La  $W$  può anche essere espressa in termini di frazioni di massa; occorre premettere che le frazioni molari e di massa sono legate dalla relazione

$$Y_i = \frac{X_i W_i}{W} \quad (3)$$

in quanto su una mole di miscela (di massa  $W$ ) la massa della specie  $i$  è data da  $X_i W_i$ . Esplicitando la  $X_i$  dalla (3)

$$X_i = \frac{Y_i W}{W_i} \quad (4)$$

e sommando questa espressione rispetto all'indice  $i$ , si ottiene (il primo membro della sommatoria essendo evidentemente uguale all'unità)

---

<sup>3</sup> Solo  $N - 1$  frazioni di massa (o molari) sono indipendenti, in quanto esse devono rispettare il vincolo che la loro somma sia unitaria.

$$W = \left[ \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i} \right]^{-1} \quad (5)$$

L'equazione termica di stato può pertanto essere scritta come

$$\rho = \frac{p}{R^0 T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i}} \quad (6)$$

Questo preambolo rende esplicito il fatto che il sistema di equazioni di conservazione richiesto per descrivere flussi reagenti comprende, oltre alle equazioni di continuità e della quantità di moto, equazioni per la conservazione dell'energia e per l'evoluzione della concentrazione delle  $N$  specie chimiche. Vedremo fra breve che questo implica, quando si considerano flussi turbolenti, difficoltà di una natura specifica che si aggiungono a quelle già presenti nei flussi inerti.

Nello scrivere le equazioni di conservazione, adatteremo un gran numero di ipotesi semplificative per rendere il problema suscettibile di successivo trattamento matematico. Oltre alle assunzioni ampiamente stabilite che la viscosità sia newtoniana, che la conduzione di calore sia descritta dalla legge di Fourier e che la diffusione delle specie sia descritta dalla legge di Fick, trascureremo alcuni termini nelle equazioni della quantità di moto, dell'energia e delle specie. Più precisamente, nelle equazioni della quantità di moto trascuriamo la viscosità di volume (normalmente piccola per gas). Nell'equazione dell'energia trascuriamo il lavoro delle forze di volume (il che esclude flussi dominati dal galleggiamento come gli incendi). Trascuriamo ancora nell'equazione dell'energia i termini di Dufour (diffusivi-termometrici). Similmente trascuriamo nelle equazioni delle specie i termini di Soret (termo-diffusivi) ed il contributo alla diffusione dovuto ai gradienti di pressione; inoltre in queste equazioni supponiamo che la diffusione avvenga prevalentemente contro un gas 'di sfondo' presente in proporzione decisamente prevalente (come è p. es. il caso dell'azoto nell'aria atmosferica), il che consente di rimpiazzare con accettabile approssimazione i coefficienti di diffusione multicomponente (indicati con  $D_{ij}$ , coefficiente di diffusione della specie  $i$  nella specie  $j$ ) con coefficienti binari  $D_i$  (coefficiente di diffusione della specie  $i$  nel gas di sfondo); è anche possibile utilizzare coefficienti di diffusione rappresentativi cosiddetti 'mediati sulla miscela', dati dall'espressione [6]

$$D_i = (1 - Y_i) / \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq i}}^N \frac{X_m}{D_{mi}} \quad (7)$$

La validità di tale espressione tuttavia è discutibile in presenza di idrogeno [7], il quale peraltro compare in quasi tutti i processi di combustione.

Per una discussione sulla portata di tali assunzioni semplificative vedi [8, 9, 10].

Per quanto concerne la notazione, adottiamo notazione tensoriale cartesiana, con la convenzione che gli indici  $k$  ed  $l$  siano riservati per indicare sommatoria sulle tre direzioni coordinate. Le equazioni di continuità, quantità di moto, energia e delle specie assumono quindi la forma seguente <sup>4</sup>:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k) = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k u_i) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} +$$

---

<sup>4</sup> Con la convenzione sulla sommatoria, l'eq. (8) sta per  $\partial \rho / \partial t + \partial(\rho u_1) / \partial x_1 + \partial(\rho u_2) / \partial x_2 + \partial(\rho u_3) / \partial x_3 = 0$ ; il termine convettivo spaziale dell'eq. (9) per  $\partial(\rho u_1 u_i) / \partial x_1 + \partial(\rho u_2 u_i) / \partial x_2 + \partial(\rho u_3 u_i) / \partial x_3$ , etc.

$$+ \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ik} \right] + \rho g_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho h_0) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k h_0) &= \\ &= \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_k} + \sum_{j=1}^N \left( \rho D_j - \frac{\lambda}{c_p} \right) h_j \frac{\partial Y_j}{\partial x_k} \right] + \Phi - \frac{\partial q_k^R}{\partial x_k} \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Y_i) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) + w_i \quad i = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (11)$$

$\delta_{ik}$  denota il delta di Kronecker, e  $g_i$  la componente dell'accelerazione di gravità nella direzione  $i$ . Nell'equazione dell'energia  $h$  e  $h_0$  indicano rispettivamente l'entalpia statica e di ristagno. Si noti che in questa equazione il termine diffusivo è somma di due contributi, di cui il primo è relativo alla conduzione del calore secondo la legge di Fourier

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} \quad (12)$$

La derivata della temperatura può essere espressa in termini di entalpia e concentrazioni attraverso l'equazione calorica di stato

$$h = \sum_{i=1}^N Y_i h_i(T) \quad (13)$$

dove  $h_i$ , l'entalpia statica della specie  $i$  (per unità di massa), è una funzione nota della temperatura (sotto l'ipotesi di equilibrio vibrazionale):

$$h_i = \Delta h_{i,f}^0 + \int_{T^0}^T c_{p,i}(T) dT \quad (14)$$

$\Delta h_{i,f}^0$  è l'entalpia di formazione della specie  $i$  alla temperatura di riferimento  $T^0$ . Differenziando la (13) si ha quindi

$$dh = \sum_{i=1}^N Y_i \frac{dh_i}{dT} dT + \sum_{i=1}^N h_i dY_i = \sum_{i=1}^N c_{pi}(T) Y_i dT + \sum_{i=1}^N h_i dY_i = c_p dT + \sum_{i=1}^N h_i dY_i \quad (15)$$

essendo  $c_p$  il calore specifico della miscela (a composizione 'congelata', cioè supposta fissa nonostante l'incremento di temperatura)

$$c_p(T, Y_1, Y_2, \dots, Y_N) = \sum_{i=1}^N c_{pi}(T) Y_i \quad (16)$$

Dalla (15) il differenziale della temperatura può essere espresso come

$$dT = \frac{1}{c_p} \left( dh - \sum_{i=1}^N h_i dY_i \right) \quad (17)$$

Questa espressione può essere utilizzata nella legge di Fourier (12), che pertanto si scompone in un termine nel gradiente dell'entalpia statica, ed  $N$  termini nei gradienti delle frazioni di massa delle specie.

Il secondo contributo al termine diffusivo dell'energia è dovuto al fatto che ciascuna specie chimica, diffondendo secondo la legge di Fick, apporta un contributo energetico all'elemento di volume proporzionale a

$$\rho D_j h_j \frac{\partial Y_j}{\partial x_k} \quad (18)$$

Continuando l'esame dell'equazione dell'energia (10),  $\Phi$  è il termine di dissipazione viscosa (dovuto al lavoro delle forze viscoso)

$$\Phi = \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \mu \left[ u_l \left( \frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) - \frac{2}{3} u_k \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right] \right\} \quad (19)$$

e  $q^R$  è il vettore del flusso di calore per radiazione. L'espressione di quest'ultimo è particolarmente complessa; essa implica la risoluzione di un'equazione per l'intensità radiativa  $I$  (energia che passa attraverso la superficie unitaria per unità di tempo, incanalata in un angolo solido unitario). Questa equazione ha una forma integro-differenziale [11], in quanto un elementino di volume scambia energia per radiazione con tutto lo spazio ad esso visibile. Le proprietà ottiche della miscela gassosa dipendono tuttavia (oltre che dalla sua temperatura e composizione chimica) dalla lunghezza d'onda della radiazione, per cui è in realtà necessario raffinare questa analisi introducendo un'intensità radiativa spettrale  $I_\nu$  (per unità di frequenza, o equivalentemente  $I_\lambda$ , per unità di lunghezza d'onda). Si ha quindi un'equazione (detta RTE, Radiative Transfer Equation) con 7 variabili indipendenti (tempo, tre coordinate spaziali, due coordinate direzionali, e la frequenza della radiazione), chiaramente di onerosa risoluzione. Tale equazione, a differenza di quelle del moto che sono integrate sulla griglia di calcolo, deve essere integrata su *linee di vista*.

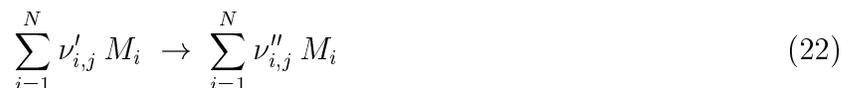
Nell'equazione delle specie (11)  $w_i$  è il termine sorgente delle specie:

$$w_i = W_i \sum_{j=1}^M \Delta \nu_{i,j} \omega_j \quad (20)$$

dove  $\omega_j$  è il tasso di reazione della reazione  $j$  ( $=1,2,\dots,M$ ). Le reazioni sono indicate simbolicamente come



dove  $\nu'_{i,j}$  e  $\nu''_{i,j}$  sono i coefficienti stechiometrici della specie  $i$  come reagente e prodotto, rispettivamente, con  $\Delta \nu_{i,j} = \nu''_{i,j} - \nu'_{i,j}$ . La forma (21) tiene conto esplicitamente dei passi di reazione diretto ed inverso; a volte invece questi passi sono considerati separatamente per cui si adotta la notazione



Quando si adotta la forma (21) si parla di *reazioni reversibili*, quando si adotta la (22) di *passi elementari di reazione*; ovviamente, nel secondo caso il numero di reazioni  $M$  da considerare è il doppio che nel primo. Definiamo inoltre la *molecolarità* (cioè il numero di molecole che devono incontrarsi per far avvenire la reazione) dei passi di reazione diretto ed inverso come

$$m_j = \sum_{i=1}^N \nu'_{i,j} \quad n_j = \sum_{i=1}^N \nu''_{i,j} \quad (23)$$

Il tasso di reazione del  $j$ -esimo passo elementare può essere espresso attraverso la legge di Arrhenius come

$$\omega_j = B_j T^{\alpha_j} \exp\left(-\frac{E_j}{R^0 T}\right) \rho^{m_j} \cdot \prod_{i=1}^N \left(\frac{Y_i}{W_i}\right)^{\nu'_{i,j}} \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (24)$$

In questa espressione  $B_j$ ,  $\alpha_j$  e  $E_j$  possono in prima approssimazione essere prese come costanti, per quanto una descrizione più accurata richiede che siano prese costanti a tratti in appropriati intervalli di temperatura. Quando invece si adotta la forma (21), il tasso di reazione della reazione  $j$  è dato dalla differenza tra i tassi dei passi diretto ed inverso, legati (in condizioni di equilibrio vibrazionale) dalla ‘costante’ di equilibrio  $K_{p,j}$ :

$$K_{p,j} = \exp\left(-\frac{1}{R^0 T} \sum_{i=1}^N \Delta\nu_{i,j} W_i \mu_i^0\right) \quad (25)$$

$\mu_i^0$  denota il potenziale chimico per unità di massa della specie  $i$  alla pressione di riferimento  $p^0$  (quindi, tanto  $\mu_i^0$  che  $K_{p,j}$  sono funzioni della temperatura). Con tali premesse, il tasso di una reazione reversibile può essere espresso come

$$\omega_j = B_j T^{\alpha_j} \exp\left(-\frac{E_j}{R^0 T}\right) \rho^{m_j} \cdot \prod_{i=1}^N \left(\frac{Y_i}{W_i}\right)^{\nu'_{i,j}} \left[1 - \frac{(pW/p^0)^{n_j - m_j}}{K_{p,j}} \prod_{n=1}^N \left(\frac{Y_n}{W_n}\right)^{\Delta\nu_{n,j}}\right] \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (26)$$

Questa presentazione dà una prima idea delle difficoltà associate a flussi reagenti, specialmente se si considera che, anche per sistemi reagenti apparentemente semplici, il numero delle specie  $N$  ed il numero delle reazioni  $M$  possono essere molto grandi a causa della presenza di molti intermediari di reazione ed al verificarsi di molti passi di reazione. La reazione di idrogeno in ossigeno puro implica la considerazione di *almeno* 6 specie e 7 reazioni (reversibili), mentre per una descrizione dettagliata della combustione di un idrocarburo, anche se estremamente semplice come il metano ( $\text{CH}_4$ ), in aria, possono essere richieste da 15 fino a 39 specie, e da 18 a 128 reazioni [12], a seconda del livello di approssimazione ricercato. Se poi consideriamo idrocarburi complessi, può essere necessario considerare p. es. 200 specie e 4000 reazioni.

Una qualche ulteriore semplificazione delle eq. (9,10) è perciò giustificata, specie in vista della loro successiva applicazione a flussi reagenti. I coefficienti di diffusione delle specie possono essere presi uguali per tutte le specie

$$D_i = D \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (27)$$

senza introdurre un grosso errore, eccetto che per l'idrogeno che ha una mobilità sensibilmente maggiore delle altre specie. Tuttavia, come vedremo ad alto numero di Reynolds i flussi dovuti al trasporto molecolare risultano molto più piccoli dei flussi turbolenti, perciò l'assunzione di cui sopra comporta comunque un errore trascurabile. Effetti significativi invece nascono in fiamme laminari per effetto della ‘diffusione differenziale’, cioè di diversi coefficienti di diffusione delle differenti specie. Possiamo poi introdurre i numeri adimensionali di Prandtl, Schmidt e Lewis

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\lambda}, \quad Sc = \frac{\mu}{\rho D}, \quad Le = \frac{Sc}{Pr} \quad (28)$$

che consentono di scrivere il termine dell'eq. (10) che coinvolge gradienti di concentrazione come

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \mu \left( \frac{1}{Sc} - \frac{1}{Pr} \right) \sum_{j=1}^N h_j \frac{\partial Y_j}{\partial x_k} \right] \quad (29)$$

Per la maggior parte delle specie gassose (ancora con l'eccezione dell'idrogeno <sup>5</sup>) risulta  $Le \sim 1$ , cioè  $Pr \sim Sc$ ; indichiamo con  $\sigma$  questo numero di Prandtl/Schmidt. È evidente che grazie all'assunzione di numero di Lewis unitario il termine citato sopra viene eliminato dall'equazione dell'energia. Per quanto riguarda il termine radiativo, osserviamo che esso normalmente non gioca un ruolo importante nelle applicazioni propulsive *dal punto di vista energetico*, in quanto la potenza termica scambiata con le pareti è dell'ordine di qualche punto percentuale al massimo. Occorre invece ovviamente tenerne conto qualora si intenda calcolare la distribuzione di temperatura sulle pareti della camera, e progettare un sistema per la loro refrigerazione; può inoltre avere un effetto significativo sulle emissioni dell'inquinante NO, estremamente sensibile al campo di temperatura. Notiamo che il termine radiativo è invece centrale in altre applicazioni, come p. es. nei generatori di vapore ove oltre il 95% dell'energia generata in camera di combustione è trasferita ai fasci tubieri per radiazione. Allora, con le ipotesi limitative introdotte, le eq. (10,11) possono quindi essere riscritte come

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h_0) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k h_0) = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial h}{\partial x_k} \right] + \Phi \quad (30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) + w_i \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (31)$$

Le equazioni (8,9,30,31) costituiscono un sistema di  $5 + N$  equazioni nelle variabili  $u_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ),  $p$ ,  $h_0$ ,  $Y_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ). L'entalpia statica della miscela è  $h = h_0 - u_k u_k / 2$ ; la densità può essere ottenuta attraverso l'equazione termica di stato (1). La temperatura (richiesta da quest'ultima equazione, ed anche necessaria, insieme con le concentrazioni, per valutare i tassi di reazione ed i coefficienti di diffusione  $\mu$ ,  $\lambda$ ,  $D_{ij}$ , vedi per esempio [13, 14]) può essere ottenuta invertendo l'equazione calorica di stato (13). Il sistema è perciò *chiuso*, e quindi fornisce una descrizione completa dei flussi reagenti, sebbene con qualche assunzione semplificativa. È importante qui sottolineare che esso descrive l'evoluzione dei valori *istantanei* delle varie grandezze.

Quando si cerca di risolvere le equazioni riportate sopra mediante un codice di CFD (*Computational Fluid Dynamics* – fluidodinamica computazionale), i passi di discretizzazione (sia spaziali che temporali) devono essere scelti in modo tale da essere rappresentativi della scala dei fenomeni che avvengono nel flusso considerato. Come primo esempio riportiamo in fig. 1 il caso di un flusso intorno ad un gradino; è chiaro che adottando una griglia di calcolo del tipo di quella schematizzata a linea tratteggiata in fig. 1a, le cui maglie hanno dimensioni superiori a quelle che caratterizzano il gradino, si ottiene sì una soluzione, ma essa non sarà in grado di dare informazioni di alcuna utilità sulla configurazione di flusso indotta dalla presenza del gradino. Occorrerà quindi usare una griglia di calcolo del tipo indicato in fig. 1b, con dimensione delle maglie inferiori alle dimensioni del gradino, ed in grado quindi di descriverlo compiutamente.

Mentre questa non è una restrizione troppo pesante per flussi laminari, essa praticamente preclude l'integrazione diretta delle equazioni citate per flussi turbolenti. Infatti, questi esibiscono fluttuazioni (sia temporali che spaziali) di tutte le grandezze che si estendono fino a scale molto piccole. Consideriamo per esempio un flusso in un canale (fig. 2); se il flusso è laminare, il profilo di velocità ha il tipico andamento parabolico indicato in a). Nel caso b) di flusso turbolento, invece,

<sup>5</sup> Per l'idrogeno molecolare si ha  $Le = 0.30$ , per l'idrogeno atomico  $Le = 0.18$ .

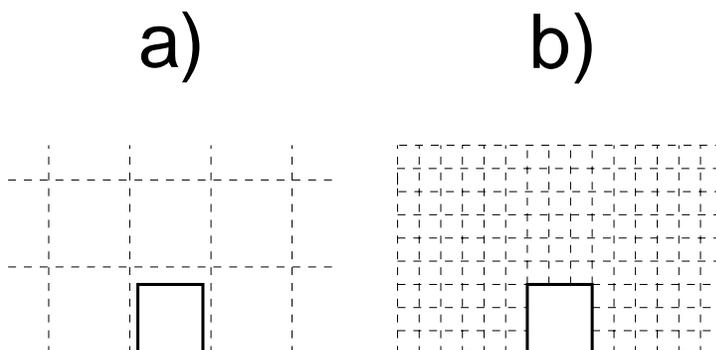


Figura 1: Flusso intorno ad un gradino: a) griglia di calcolo eccessivamente larga, b) griglia di calcolo in grado di risolvere adeguatamente il flusso.

il profilo istantaneo di velocità è caratterizzato da fluttuazioni casuali sia spaziali che temporali, che danno luogo a strutture di flusso caratterizzate da scale molto piccole rispetto alla dimensione del canale. La griglia di calcolo, per poter rappresentare adeguatamente questi flussi, dovrà perciò avere maglie la cui dimensione sia inferiore (o al più uguale) a quella della più piccola scala della turbolenza.

Per flussi *inerti* (senza reazioni chimiche) in particolare, i passi spaziali devono essere scelti in modo tale da essere comparabili con la più piccola lunghezza caratteristica della turbolenza, la lunghezza di Kolmogorov  $l_K$ , che è inversamente proporzionale a  $Re^{3/4}$ . Ciò significa <sup>6</sup> che il numero di punti necessario a risolvere adeguatamente il moto del fluido nella direzione  $x$  è proporzionale a  $Re^{3/4}$ ; un numero di punti dello stesso ordine di grandezza è richiesto nelle altre direzioni coordinate (le fluttuazioni turbolente avvengono sempre in tutte e tre le direzioni spaziali, anche nel caso in cui il moto *medio* abbia una dimensionalità minore, vedi p. es. [16]). Perciò il numero totale di punti di griglia necessari sarà

$$N_{xyz} = N_x N_y N_z = \mathcal{O}(Re^{2.25}) \quad (32)$$

Quando si considera che il valore tipico di  $Re$  per camere di combustione di turbine a gas ed autorettilori è dell'ordine delle centinaia di migliaia, risulta chiaro che l'integrazione numerica diretta delle equazioni di Navier–Stokes (denominata DNS, *Direct Numerical Simulation*) nella forma riportata sopra non è una strada percorribile per flussi turbolenti di interesse pratico. Per quanto riguarda la discretizzazione temporale, in flussi turbolenti *inerti* il più piccolo tempo caratteristico, il tempo di Kolmogorov  $t_K$ , è inversamente proporzionale a  $Re^{1/2}$ , con il risultato che il numero di passi temporali necessari per risolvere adeguatamente il flusso nel tempo sarà

<sup>6</sup> A rigore, andrebbe considerato un numero di Reynolds *turbolento* [15]; tuttavia, ciò non altera sostanzialmente queste considerazioni basate su ordini di grandezza.

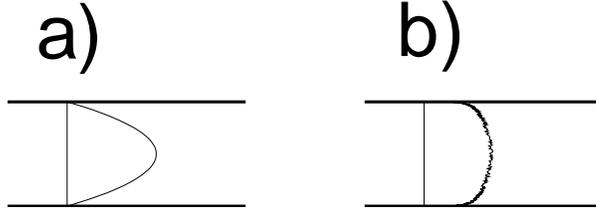


Figura 2: Profili trasversali di velocità in un canale: a) flusso laminare, b) flusso turbolento (valori istantanei).

$$N_t = \mathcal{O}(Re^{1/2}) \quad (33)$$

Quindi, il tempo computazionale richiesto per risolvere flussi inerti turbolenti è *almeno* proporzionale a  $Re^{2.75}$  (una dipendenza più forte può sorgere a causa dell’algoritmo di soluzione adottato). Tuttavia, la situazione è ancora alquanto più critica per flussi *reagenti*. Infatti, in flussi reagenti dobbiamo considerare, oltre alle scale temporali e spaziali fluidodinamiche appena definite, altre scale caratteristiche. Innanzitutto, le scale dei tempi delle reazioni chimiche, che sono generalmente parecchi ordini di grandezza più piccole delle precedenti, richiedendo perciò un corrispondente incremento di  $N_t$  e  $N_{xyz}$ ; poi, le scale dei fenomeni di rilassamento vibrazionale, che sono generalmente assai brevi. Ma la scala dei tempi più breve è quella associata con i fenomeni radiativi, in quanto essi si propagano alla velocità della luce. Riportiamo a titolo indicativo che è stato stimato [17] che il rapporto tra la più grande e la più piccola scala spaziale in un fenomeno di combustione turbolenta è approssimativamente dell’ordine di  $10^9$ . Per discretizzare adeguatamente il flusso nelle tre dimensioni, risolvendo tutte le scale, sarebbero quindi necessari almeno

$$N_{xyz} = \mathcal{O}(10^{27}) \quad (34)$$

nodi di calcolo. A tutt’oggi, le griglie più fini utilizzate sui supercalcolatori più avanzati arrivano al più a circa  $10^{10}$  ( $2048^3$ ) nodi, e questo pur considerando un numero di specie chimiche molto limitato (p. es. quattro specie ‘passive’, cioè che non influenzano significativamente la densità); l’obiettivo indicato dalla (34) è quindi chiaramente fuori portata. Per quanto riguarda la discretizzazione temporale, si stima ancora [17] che il rapporto tra la più grande e la più piccola scala temporale sia dell’ordine di  $10^5$ , per cui occorreranno

$$N_t = \mathcal{O}(10^5) \quad (35)$$

passi temporali per seguire l'evoluzione del flusso. Per completare il quadro, si deve notare che al fine di ottenere informazioni statistiche utili dalla DNS l'integrazione numerica deve essere ripetuta un significativo numero di volte (diciamo qualche decina) con condizioni al contorno lievemente cambiate. Infatti, i flussi ad alto numero di Reynolds sono estremamente sensibili a variazioni anche minime delle condizioni al contorno, e queste, p. es. la velocità dell'ossidante in ingresso in camera di combustione, non avranno mai esattamente il valore nominale, pur risultando molto vicine ad esso.

È ovviamente da tenere presente che i calcolatori diventeranno sempre più veloci in futuro, ma le previsioni attuali indicano che nel 2010 i processori presumibilmente disponibili raggiungeranno frequenze intorno a  $10 \div 15$  GHz [18], contro i 2.8 GHz attuali (anno 2002), con un vantaggio quindi di non più di un ordine di grandezza, mentre nel 2050 saranno presumibilmente circa un milione di volte più veloci di oggi, ma pur sempre troppo lenti per consentire una DNS di flussi turbolenti reagenti. Ad ogni modo, anche se si riuscisse ad integrare numericamente le equazioni di Navier–Stokes, la soluzione sarebbe pur sempre la soluzione di un *modello* (per quanto accurato) del flusso considerato, per le incertezze associate p. es. con la determinazione delle costanti di reazione, discusse nella sez. 2.

Le considerazioni riportate sopra escludono l'uso della DNS come mezzo per ricavare previsioni di flussi turbolenti reagenti ad alto  $Re$  con i calcolatori di oggi, come pure con quelli che potranno essere sviluppati nel prevedibile futuro. Occorre quindi abbandonare ogni tentativo di risolvere le equazioni di Navier–Stokes per i valori *istantanei* delle grandezze; possiamo ottenere tuttavia informazioni statistiche sul campo di moto mediando e risolvendo tali equazioni. Ciò condurrà ad equazioni per il valore *medio* delle varie grandezze e per l'*intensità* delle loro fluttuazioni. Ovviamente, questa informazione è alquanto più limitata rispetto a quella che può essere ottenuta con la DNS, ma questo approccio consente un'enorme riduzione del tempo di calcolo e della memoria richiesti, poiché le scale del moto *medio* sono molto più grandi di quelle delle fluttuazioni turbolente.

### 3.2 Note sull'equilibrio chimico.

In alcuni modelli, in particolare per combustione nonpremiscelata, vedi sez. 6, risulta possibile applicare l'ipotesi di chimica in equilibrio, la quale consente una notevole semplificazione.

In generale, la densità (istantanea) è una funzione di  $N + 2$  variabili di stato, come appare dall'equazione termica di stato (6).

In condizioni di *equilibrio chimico* invece, ogni grandezza di stato può essere espressa in funzione di *due sole* altre variabili di stato, come noto dalla chimica (regola delle fasi) [19].

Richiamiamo la nozione di equilibrio per una generica reazione, che a partire dai reagenti A e B porta alla formazione dei prodotti C e D (e viceversa), con coefficienti stechiometrici  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ :



La condizione di equilibrio della reazione implica che le pressioni parziali delle specie obbediscono alla relazione

$$K_p = \frac{p_C^\gamma p_D^\delta}{p_A^\alpha p_B^\beta} \quad (37)$$

dove la costante d'equilibrio della reazione è una funzione della sola temperatura:

$$K_p = K_p(T) \quad (38)$$

Poiché le pressioni parziali sono legate alla pressione totale tramite le frazioni molari delle specie

$$p_i = X_i p \quad (39)$$

possiamo riscrivere la (37) in termini di frazioni molari

$$K_p = \frac{X_C^\gamma X_D^\delta}{X_A^\alpha X_B^\beta} p^{\gamma+\delta-\alpha-\beta} \quad (40)$$

e quindi definire una costante d'equilibrio in termini di frazioni molari

$$K_X = \frac{X_C^\gamma X_D^\delta}{X_A^\alpha X_B^\beta} \quad (41)$$

che quindi risulta

$$K_X = K_p p^{-\gamma-\delta+\alpha+\beta} \quad (42)$$

e sarà perciò in generale una funzione delle temperatura e della pressione (tranne il caso particolare  $\gamma + \delta = \alpha + \beta$ ):

$$K_X = K_X(T, p) \quad (43)$$

Di relazioni del tipo (41,43) ne possono essere scritte tante quante sono le reazioni che avvengono nel sistema, quindi, adottando la più generale notazione (21) per le reazioni, si ha

$$\prod_{i=1}^N X_i^{\Delta\nu_{i,j}} = K_{X,j}(T, p), \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (44)$$

Queste relazioni consentono in linea di principio di determinare le frazioni molari delle specie che partecipano alla reazione, per ogni valore dalla coppia  $(T, p)$ , cioè

$$X_i = X_i(T, p) \quad (45)$$

anche se la loro risoluzione è tutt'altro che semplice, a causa della loro nonlinearità, per cui sono necessari codici di calcolo dedicati [20, 21]. È poi immediato risalire al peso molecolare mediato attraverso la (2), ed alle frazioni di massa attraverso la (3).

In queste condizioni di *equilibrio chimico* è quindi possibile esprimere ogni grandezza di stato in funzione di *due sole* altre variabili di stato, una volta specificata la proporzione relativa dei reagenti (vedi oltre). Per esempio possiamo scrivere, supponendo di aver fissato la proporzione relativa dei reagenti

$$\rho = \rho(p, T) \quad (46)$$

oppure

$$\rho = \rho(p, h) \quad (47)$$

Ancora, potremmo per esempio scrivere

$$\rho = \rho(p, s), \quad \rho = \rho(p, Y_{H_2O}) \quad (48)$$

$$Y_i = Y_i(h, s), \quad Y_i = Y_i(p, h) \quad (49)$$

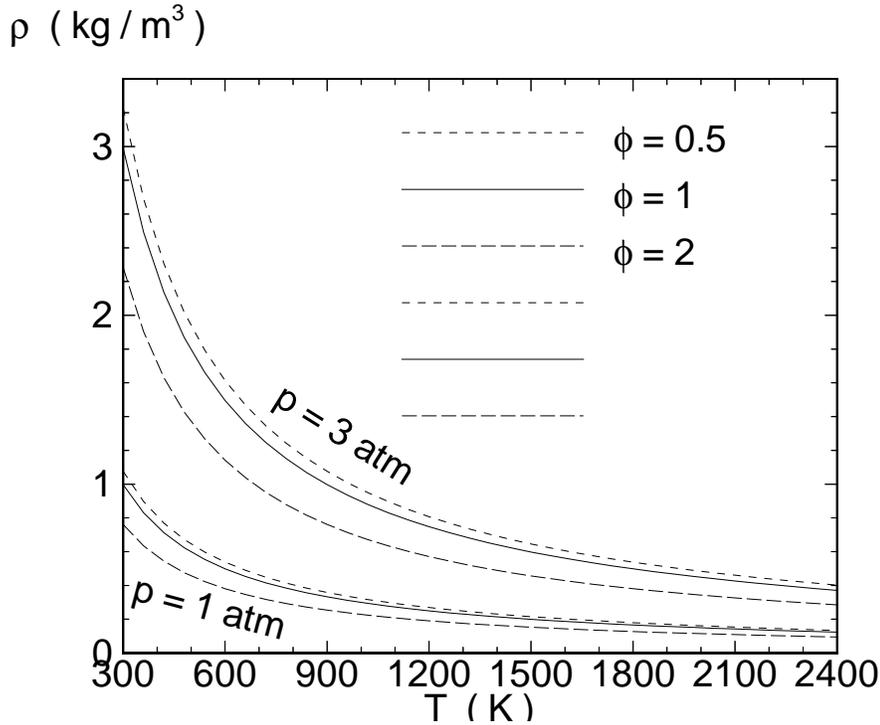


Figura 3: Densità di una miscela reagente idrogeno-aria in equilibrio chimico.

e simili. Va tuttavia sottolineato che la forma della relazione è determinata solo una volta che sia specificata la proporzione dei reagenti, cioè le quantità di combustibile ed ossidante nelle condizioni prima della reazione. Se per esempio consideriamo una miscela ottenuta facendo reagire idrogeno ed aria, la sua densità può essere espressa in funzione di due grandezze di stato, p. es. secondo la (46), però è evidente che la forma della relazione sarà diversa a seconda del valore del rapporto di equivalenza, definito come

$$\varphi = \frac{(F/O)}{(F/O)_{st}} \quad (50)$$

cioè come rapporto in massa combustibile/ossidante, riferito al valore stechiometrico. La fig. 3 riporta la densità  $\rho$  in funzione della temperatura  $T$ , con la pressione  $p$  come parametro, per tre valori del rapporto di equivalenza,  $\varphi = 0.5$  (miscela povera di combustibile),  $\varphi = 1$  (miscela stechiometrica), e  $\varphi = 2$  (miscela ricca). Si può notare come la densità decresce con la temperatura e cresce con la pressione, secondo l'equazione termica di stato (1). Un aumento del rapporto di equivalenza porta ad un aumento del contenuto di idrogeno (leggero) nella miscela, per cui il peso molecolare  $W$  decresce e con esso anche la densità. Occorre quindi, per identificare le condizioni di equilibrio in funzione di due variabili, specificare la proporzione relativa dei reagenti nella miscela, per esempio assegnando il valore del rapporto di equivalenza (oppure un'altra grandezza di analogo significato). Dobbiamo perciò riscrivere più correttamente le (47,49b) nella forma

$$\rho = \rho(p, h; \varphi) \quad (51)$$

$$Y_i = Y_i(p, h; \varphi) \quad (52)$$

ed analogamente per le altre espressioni riportate sopra. Sotto l'ipotesi di chimica in equilibrio non è perciò necessario risolvere le  $N$  equazioni delle specie (le concentrazioni delle specie e la

densità possono essere espresse direttamente espresse tramite relazioni di stato del tipo (52, 51)), per quanto occorra pur sempre un'equazione (che però non comporta un termine di produzione) per individuare il valore del rapporto di equivalenza.

È importante osservare che il rapporto di equivalenza va inteso, nelle considerazioni che seguono, come una grandezza definita a livello puntuale. La definizione (50) appare di immediata applicazione quando si conoscono, nel punto considerato, le concentrazioni in massa di combustibile ed ossidante *prima* della reazione. È possibile tuttavia identificare il rapporto di equivalenza anche a reazione avvenuta, immaginando di poter ‘marcare’, tra i prodotti di reazione contenuti nel volumetto infinitesimo intorno al punto considerato, quegli atomi che originano da atomi contenuti nel combustibile, e determinarne la frazione in massa rispetto alla massa contenuta nel volumetto. La frazione in massa dell'ossidante (ancorché combinato nei diversi prodotti) sarà il complemento ad uno di questa, per cui risulta ancora possibile individuare il rapporto di equivalenza (locale) attraverso la (50).

È poi opportuno sottolineare che in generale, sotto l'ipotesi di equilibrio chimico, i termini sorgenti di produzione delle specie per reazione chimica *non* sono nulli. Tali termini possono essere espressi riscrivendo la (31) come

$$w_i = \frac{\partial}{\partial t} [\rho(p, h, \varphi) Y_i(p, h, \varphi)] + \frac{\partial}{\partial x_k} [\rho(p, h, \varphi) u_k Y_i(p, h, \varphi)] - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu(p, h, \varphi)}{\sigma} \frac{\partial Y_i(p, h, \varphi)}{\partial x_k} \right] \quad (53)$$

dove le  $u_k$ ,  $p$  e  $h$  sono ricavate dalla risoluzione del sistema delle equazioni del moto (escluse appunto le equazioni di conservazione delle specie, per quanto sia pur sempre necessario individuare il rapporto di equivalenza  $\varphi$  od una grandezza di analogo significato). Dalla (53) si trae conferma che in condizioni di equilibrio chimico il termine sorgente delle specie *non* è nullo. Unica eccezione è il caso di sistemi *zero-dimensional* (in cui cioè il flusso è spazialmente omogeneo) a stazionario, nei quali, annullandosi tutte le derivate a secondo membro, si annulla anche il primo membro.

Passando poi a considerare l'espressione di Arrhenius, in condizioni di equilibrio chimico è possibile vedere che nella (26) il termine tra parentesi quadre si annulla. Tuttavia, come abbiamo detto, il tasso di produzione delle specie non si annulla. Infatti, assumere chimica in equilibrio significa assumere reazioni infinitamente veloci, cioè che le costanti di reazione  $B_j$  tendono all'infinito. L'espressione di Arrhenius (26) assume perciò la forma indeterminata  $\infty \cdot 0$ , e perciò non è utilizzabile in condizioni di equilibrio chimico. D'altronde, come già osservato, in equilibrio le equazioni di conservazione delle specie sono ovviamente inutili, in quanto le concentrazioni sono espresse da relazione del tipo (52).

### 3.3 Equazioni mediate

Al fine di derivare informazioni sulla statistica delle variabili che descrivono il flusso, adottiamo l'approccio usuale di decomporre il valore istantaneo di ogni grandezza dipendente in una componente media ed una fluttuante, sostituirle nelle equazioni di Navier–Stokes e quindi mediare. Per ogni grandezza generica  $\phi$  possiamo adottare la decomposizione

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (54)$$

dove  $\bar{\phi}$  è il valore medio, che può essere definito (al tempo  $t$ , essendo  $\Delta t$  un opportuno intervallo temporale, grande rispetto alla scala temporale delle fluttuazioni, sul quale valutare la media) come

$$\bar{\phi}(x) = \frac{1}{\Delta t} \int_{-\Delta t/2}^{\Delta t/2} \phi(x, t + \tau) d\tau \quad (55)$$

e  $\phi'$  la componente fluttuante

$$\phi' = \phi - \bar{\phi} \quad (56)$$

Non è stata indicata esplicitamente (eccetto che nella (55), dove la notazione è necessaria) la dipendenza di  $\phi$  dalle coordinate spaziali e temporali per concisione; inoltre, assumeremo che il valore medio sia indipendente dal tempo per semplicità, per quanto la situazione in cui il moto medio vari con scale temporali molto più grandi delle scale della turbolenza possa anch'essa essere facilmente trattata.

La decomposizione riportata sopra conduce tuttavia ad una notevole proliferazione di termini quando è applicata ai termini convettivi in flussi a densità variabile; per esempio sostituendo la (54) nell'equazione della quantità di moto si ha

$$\begin{aligned} \rho u_k u_i &= (\bar{\rho} + \rho') (\bar{u}_k + u'_k) (\bar{u}_i + u'_i) = \\ &= \bar{\rho} \bar{u}_k \bar{u}_i + \rho' \bar{u}_k \bar{u}_i + \bar{\rho} u'_k \bar{u}_i + \bar{\rho} \bar{u}_k u'_i + \bar{\rho} u'_k u'_i + \rho' u'_k \bar{u}_i + \rho' u'_i \bar{u}_k + \rho' u'_k u'_i \end{aligned} \quad (57)$$

Una volta mediata questa espressione dà (poiché  $\bar{\phi}'$ , valore medio della fluttuazione, è ovviamente nullo)

$$\overline{\rho u_k u_i} = \bar{\rho} \bar{u}_k \bar{u}_i + \bar{\rho} \overline{u'_k u'_i} + \overline{\rho' u'_k \bar{u}_i} + \overline{\rho' u'_i \bar{u}_k} + \overline{\rho' u'_k u'_i} \quad (58)$$

Si vede quindi che l'operazione di media effettuata come sopra (chiamata media convenzionale o di Reynolds) porta alla comparsa di un gran numero di covarianze in cui appare la densità; vedi [8] per una discussione del significato dei diversi termini. Si noti che la proliferazione dei termini è una diretta conseguenza della nonlinearietà dell'espressione considerata. Al fine di contrastare questo inconveniente, si può utilizzare un differente criterio di decomposizione per i flussi a densità variabile qui considerati, denominato media di Favre [22], o pesata con la densità. Essa consiste nel definire una media pesata con la densità (indicata con una tilde)

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}} \quad (59)$$

ed una fluttuazione rispetto ad essa, indicata con un doppio apice

$$\phi'' = \phi - \tilde{\phi} \quad (60)$$

Si noti che  $\overline{\phi''} \neq 0$  ma  $\overline{\rho \phi''} = 0$ , essendo per la (60) mediata  $\overline{\rho \phi''} = \overline{\rho \phi} - \bar{\rho} \tilde{\phi}$ , mentre moltiplicando la stessa (60) per  $\rho$  e mediando si ha  $\overline{\rho \phi''} = \overline{\rho \phi} - \bar{\rho} \tilde{\phi}$ , che in virtù della (59) dà il risultato atteso. Quindi, la decomposizione di Favre dà

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (61)$$

La media di Favre è quindi applicata a tutte le grandezze eccetto la pressione (che compare solo in termini che non coinvolgono la densità) e la densità stessa. Con questa decomposizione il termine convettivo considerato sopra può essere espresso come

$$\rho (\tilde{u}_k + u''_k) (\tilde{u}_i + u''_i) = \rho \tilde{u}_k \tilde{u}_i + \rho u''_k \tilde{u}_i + \rho u''_i \tilde{u}_k + \rho u''_k u''_i \quad (62)$$

ed una volta mediato

$$\overline{\rho u_k u_i} = \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{u}_i + \overline{\rho u''_k u''_i} \quad (63)$$

con un chiaro vantaggio in concisione. L'uso di medie di Favre per flussi reagenti è ora largamente accettato, sebbene qualche autore preferisca ancora invece le medie convenzionali, p. es. [23]. Si noti che l'uso della media di Favre è una pura manipolazione matematica; tutti i termini delle equazioni del moto sono in ogni caso mediati convenzionalmente, e poi quelli in cui compare la densità sono per convenienza espressi secondo le medie di Favre.

I termini del tipo  $\bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_i''}$ , detti *sforzi di Reynolds*, esprimono un flusso della quantità di moto dovuto alle fluttuazioni turbolente, cioè un *trasporto turbolento* della quantità di moto (o, con dizione meno corretta, una diffusione turbolenta). Questo si può capire considerando per esempio il flusso entro un volume  $V$ , limitato da superfici solide, e valutando l'effetto *globale* del termine in questione come il suo integrale su tutto il volume  $V$ . Osservando che nell'equazione della quantità di moto in direzione  $i$  il termine considerato compare come

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_i''}) \quad (64)$$

possiamo valutarne l'effetto globale come

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_i''}) dV \quad (65)$$

La (65) esprime l'integrale di volume di una divergenza (si ricordi che l'indice  $i$  deve essere considerato come fissato, in quanto stiamo valutando l'effetto in direzione  $x_i$ ); per il teorema di Green [24], questo integrale può essere trasformato in un integrale di superficie, ossia

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_i''}) dV = \int_S \bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_i''} n_k dS \quad (66)$$

essendo  $S$  la superficie del volume  $V$ , e  $n_k$  la componente in direzione  $k$  della normale all'elementino di superficie  $dS$  (in realtà l'eguaglianza implica anche un'assunzione sull'orientamento della normale, che però è inessenziale in questo contesto). In corrisponde alla pareti solide tuttavia le velocità, ed in particolare le fluttuazioni di velocità, sono nulle, per cui l'integrale a secondo membro della (66) è nullo. In altre parole  $\bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_i''}$  non ha effetto *diretto* sul moto globale. L'unico effetto che tale termine può avere è allora quello di promuovere una redistribuzione spaziale della quantità di moto, senza produrne o distruggerne; è perciò un termine di *trasporto turbolento*. Tale effetto è quindi qualitativamente analogo a quello della viscosità molecolare (pur con un'importante differenza, come vedremo nella sez. 3.4). Per tali motivi, i termini in questione sono usualmente raggruppati a secondo membro delle equazioni mediate, come quelli di trasporto molecolare (viscosità, conduzione, diffusione).

Osserviamo subito che gli sforzi di Reynolds sono molto più grandi (in valore assoluto) dei rispettivi termini (mediati) di diffusione molecolare per flussi ad alto  $Re$ . Per dimostrarlo, valutiamo gli ordini di grandezza degli sforzi molecolari mediati e degli sforzi di Reynolds. Per i primi, l'ordine di grandezza del gradiente di velocità media sarà dell'ordine di  $\tilde{u}/D$ , essendo  $\tilde{u}$  un valore rappresentativo della velocità media e  $D$  una dimensione caratteristica del flusso (per esempio il diametro, nel flusso in un condotto). Allora l'ordine di grandezza dello sforzo molecolare medio risulta

$$\mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \delta_{ik} = \mathcal{O} \left( \frac{\mu \tilde{u}}{D} \right) \quad (67)$$

Per lo sforzo di Reynolds, dobbiamo identificare un valore caratteristico dell'intensità delle fluttuazioni di velocità, che in un condotto possiamo tipicamente prendere come circa un decimo di  $\tilde{u}$ .

Allora, per quanto riguarda il valore medio del prodotto delle fluttuazioni, dobbiamo considerare che (ineguaglianza di Schwarz <sup>7</sup>)

$$| \widetilde{u_i'' u_k''} | \leq \sqrt{u_k''^2} \sqrt{u_i''^2} \quad (71)$$

dove il segno di eguaglianza vale solo se le fluttuazioni di  $u_k$  e  $u_i$  sono perfettamente correlate (il che avviene solo nel caso  $i = k$ ). A titolo di tentativo, possiamo assumere

$$| \widetilde{u_i'' u_k''} | \sim 0.1 \sqrt{u_k''^2} \sqrt{u_i''^2} \quad (72)$$

Ne segue, avendo come detto supposto che  $\sqrt{u_k''^2} \sim \sqrt{u_i''^2} \sim 0.1 \tilde{u}$ , che l'ordine di grandezza dello sforzo di Reynolds sarà approssimativamente qualcosa del genere

$$\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_k''} = \mathcal{O} \left( 0.001 \bar{\rho} \tilde{u}^2 \right) \quad (73)$$

Se quindi consideriamo il rapporto tra lo sforzo di Reynolds e lo sforzo molecolare medio, il suo ordine di grandezza vale

$$\frac{\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_k''}}{\mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \delta_{ik}} = \mathcal{O} \left( 0.001 \frac{\bar{\rho} \tilde{u} D}{\mu} \right) = \mathcal{O} \left( \frac{Re}{1000} \right) \quad (74)$$

Quindi in flussi ad alto numero di Reynolds <sup>8</sup> i termini di sforzo di Reynolds sono molto più grandi di quelli molecolari; spesso anzi quest'ultimi sono del tutto trascurati rispetto ai primi nelle equazioni del moto mediate. In questa trattazione tuttavia li conserviamo per tener conto di effetti di prossimità alla parete e di condizioni di flusso a numero di Reynolds relativamente basso [25].

Analogamente a quanto visto per le equazioni della quantità di moto, nelle equazioni scalari (energia e specie) compaiono termini del tipo  $\bar{\rho} \widetilde{u_k'' h_0''}$  e  $\bar{\rho} \widetilde{u_k'' Y_i''}$  che sono chiamati *flussi di Reynolds*; anch'essi hanno il significato di trasporto turbolento delle rispettive grandezze. È possibile anche dimostrare che essi sono di gran lunga superiori ai corrispondenti termini di trasporto molecolare. È questo anzi il motivo per cui la combustione viene fatta avvenire in regime turbolento, al fine di avere un

<sup>7</sup> Se, a puro titolo di esempio, supponiamo che le fluttuazioni in un dato punto siano caratterizzate da un andamento sinusoidale nel tempo, ma siano sfasate di un angolo  $\delta$

$$u_i'' = a \sin(\omega t), \quad u_k'' = b \sin(\omega t + \delta) \quad (68)$$

l'intensità delle fluttuazioni di  $u_i$  risulta

$$\widetilde{u_i''^2} = \frac{a^2 \omega}{2\pi} \int_{-\pi/\omega}^{\pi/\omega} \sin^2(\omega t) dt = \frac{a^2}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin^2(x) dx = \frac{a^2}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1 - \cos(2x)}{2} dx = \frac{a^2}{2\pi} \left\{ \left[ \frac{x}{2} \right]_{-\pi}^{\pi} - \left[ \frac{\sin(2x)}{4} \right]_{-\pi}^{\pi} \right\} = \frac{a^2}{2} \quad (69)$$

e quella di  $u_k$  risulta  $\widetilde{u_k''^2} = b^2/2$ . La media del prodotto delle fluttuazioni risulta invece

$$\begin{aligned} \widetilde{u_i'' u_k''} &= \frac{ab \omega}{2\pi} \int_{-\pi/\omega}^{\pi/\omega} \sin(\omega t) \sin(\omega t + \delta) dt = \frac{ab}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(x) \sin(x + \delta) dx = \frac{ab}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(x) [\sin(x) \cos(\delta) - \cos(x) \sin(\delta)] dx = \\ &= \frac{ab}{2\pi} \left\{ \cos(\delta) \int_{-\pi}^{\pi} \sin^2(x) dx - \sin(\delta) \int_{-\pi}^{\pi} \sin(x) \cos(x) dx \right\} = \frac{ab}{2} \cos(\delta) \end{aligned} \quad (70)$$

il cui modulo, per  $\delta \neq k\pi$  ( $k = 0, 1, 2, \dots$ , caso particolare di fluttuazioni in fase o in opposizione di fase), risulta inferiore a  $\sqrt{u_k''^2} \sqrt{u_i''^2} = ab/2$ .

<sup>8</sup>Si ricordi che in flussi turbolenti  $Re > 3000$  ed in molte applicazioni si arriva a valori dell'ordine dei milioni.

miscelamento molto attivo, per cui la reazione può essere completata in una camera di combustione di dimensioni ridotte, con evidenti vantaggi in termini di peso, ingombro e costo.

Nel mediare le equazioni di Navier–Stokes, trascuriamo i termini nella covarianza del coefficiente di trasporto e della grandezza trasportata (cioè termini come  $\overline{\mu' \partial u'_i / \partial x_k}$ , e simili), essendo appunto questi termini piccoli in confronto ai flussi turbolenti<sup>9</sup>. Quindi, con medie di Favre, il sistema delle equazioni di Navier–Stokes *mediate* può essere riscritto, conglobando gli sforzi ed i flussi di Reynolds a secondo membro, come

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k) = 0 \quad (75)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{u}_i) = & - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \delta_{ik} \right] - \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} u_k'' \tilde{u}_i'') + \bar{\rho} g_i \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (76)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{h}_0) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} \right] - \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} u_k'' \tilde{h}_0'') + \bar{\Phi} \quad (77)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} u_k'' \tilde{Y}_i'') + \bar{w}_i \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (78)$$

È evidente che mentre l'equazione di continuità conserva una forma analoga a quella della sua controparte non mediata (grazie alla media di Favre), i termini convettivi nonlineari nelle rimanenti equazioni producono termini addizionali, i cosiddetti (quando<sup>10</sup> sono moltiplicati per  $\bar{\rho}$ ) sforzi  $\overline{u_k'' u_i''}$  e flussi  $\overline{u_k'' h_0''}$ ,  $\overline{u_k'' Y_i''}$  di Reynolds, che rappresentano incognite aggiuntive del problema.

Inoltre, i termini sorgenti delle specie  $\bar{w}_i$  costituiscono incognite aggiuntive specifiche dei problemi di flusso reagente. La situazione è ulteriormente aggravata, per flussi reagenti, dal fatto che le equazioni termiche e caloriche di stato (6,13) devono anch'esse essere mediate e producono perciò le loro incognite aggiuntive, la densità media  $\bar{\rho}$  in particolare (tratteremo questo problema nella sez. 5).

Notiamo che è possibile derivare equazioni per gli sforzi ed i flussi di Reynolds [26, 27], ma in esse compaiono ulteriori termini non chiusi, come  $\overline{u_k'' u_j'' u_l''}$ ,  $\overline{p' \partial u'_i / \partial x_j}$ , etc., per cui il problema non è comunque risolto.

Quindi, il sistema delle equazioni di Navier–Stokes mediate (75–78) non è più chiuso, in quanto contiene più incognite che equazioni. Questo problema della *chiusura* delle equazioni mediate è il problema fondamentale della turbolenza. Esso è comunemente affrontato introducendo adatte ipotesi di chiusura che mettono in relazione le variabili aggiuntive con le grandezze calcolate. Ciò dà luogo a *modelli*, cioè non si considerano più le equazioni che ‘governano’ il flusso, e che quindi danno presumibilmente la soluzione fisicamente corretta quando adeguatamente risolte, ma solo una descrizione semplificata del flusso, fondata su certe assunzioni più o meno plausibili. Perciò, anche la più accurata soluzione di tali modelli produce risultati che possono solo essere considerati un'approssimazione congetturale delle reali condizioni di flusso.

<sup>9</sup> Si noti che abbiamo indicato medie di Favre nei termini diffusivi molecolari mediati, p. es.  $\mu \partial \tilde{u}_i / \partial x_k$ , mentre potrebbe a prima vista sembrare più appropriato utilizzare medie convenzionali. Tuttavia, a parte il fatto che  $\mu$  potrebbe essere scritto  $\rho \nu$  facendo in tal modo comparire esplicitamente la densità e giustificando pertanto l'uso delle medie di Favre, occorre soprattutto considerare che tali termini molecolari sono come detto assolutamente insignificanti rispetto a quelli di trasporto turbolento, per cui la questione è del tutto inessenziale.

<sup>10</sup> Termini come  $\overline{u_k'' u_l''}$  sono chiamati sforzi di Reynolds *cinematici*.

Nella sez. 4 consideriamo i modelli impiegati per esprimere gli sforzi ed i flussi di Reynolds (*chiusura fluidodinamica*), e dedichiamo le sezioni seguenti alla *chiusura termochimica*, cioè all'espressione dei termini specifici dei flussi reagenti.

### 3.4 Effetto del trasporto turbolento sul moto globale

Abbiamo osservato che gli sforzi di Reynolds  $\widetilde{u_i'' u_k''}$  non hanno effetto globale sulla quantità di moto che fluisce attraverso una sezione normale alla direzione  $i$ , per cui rappresentano necessariamente un effetto di redistribuzione spaziale o, come si usa dire, di trasporto turbolento.

Potrebbe allora sembrare, a prima vista, che la turbolenza non influenzi il moto globale. Se consideriamo per esempio il flusso entro un condotto circolare di raggio  $R$ , potremmo pensare che la *velocità di massa* del fluido

$$U_i = \frac{1}{\dot{m}} \int \tilde{u}_i(r) d\dot{m} \quad (79)$$

non sia influenzata dai moti turbolenti, e così pure la caduta di pressione, espressa attraverso il gradiente di pressione media. In realtà si può vedere facilmente che non è così, cioè che  $c'$  è un effetto sul moto globale dovuto però al termine di viscosità molecolare, che è indirettamente alterato dalla turbolenza.

Abbiamo infatti osservato, vedi per esempio la fig. 2, relativa al flusso in un condotto (ancorché i valori di velocità ivi considerati siano quelli istantanei), che in un flusso turbolento il profilo di velocità *media* è alquanto più piatto che in un flusso laminare, almeno nella zona lontana dalle pareti; ciò è appunto dovuto al forte effetto redistributivo spaziale dello sforzo di Reynolds. Vicino alle pareti tuttavia il gradiente di velocità risulta necessariamente estremamente più forte nel caso turbolento che in quello laminare; ci si può convincere di questo osservando che nella fig. 2b lo strato limite risulta talmente sottile da avere spessore minore della linea usata nel disegno per tracciare le pareti. Ciò significa che lo sforzo molecolare mediato (67) alla parete è, in valore assoluto, molto più grande che in un flusso laminare, e porta quindi a perdite di pressione molto maggiori (per esempio, due ordini di grandezza più alte).

In altre parole, mentre il termine di trasporto turbolento ha integrale nullo su un volume chiuso, quello di trasporto molecolare ha integrale *non* nullo.

## 4 Chiusura fluidodinamica.

### 4.1 Ipotesi di trasporto secondo gradiente.

L'operazione di media delle equazioni di Navier–Stokes ha quindi generato termini aggiuntivi, tra i quali  $\widetilde{u_k'' u_i''}$ ,  $\widetilde{u_k'' h_0''}$  e  $\widetilde{u_k'' Y_i}$ . Occorre perciò derivare espressioni per questi termini per chiudere il sistema di equazioni.

In questa sezione cerchiamo di legare gli sforzi ed i flussi di Reynolds a grandezze calcolate (quest'ultime sono ovviamente i valori medi delle tre componenti della velocità media, della pressione, dell'entalpia e delle frazioni di massa), o meglio ai loro gradienti spaziali. Questo è l'approccio più semplice per la chiusura fluidodinamica, basato sull'*ipotesi di trasporto secondo gradiente*. Per fornire una giustificazione di questo approccio, consideriamo dapprima lo sforzo di Reynolds di taglio  $\widetilde{u'' v''}$  in un canale in flusso (statisticamente) stazionario, essendo  $u$  la velocità assiale e  $v$  la velocità trasversale. Analizziamo dapprima l'effetto delle fluttuazioni di  $v$ . Consideriamo per primo il caso in cui il gradiente trasversale del valore *medio* di  $u$  sia negativo (fig. 4a), cioè  $(\partial \tilde{u} / \partial y) < 0$ . Consideriamo una generica ordinata  $y$ , alla quale il valor medio di  $u$  sia  $\tilde{u}(y)$ . Se una particella

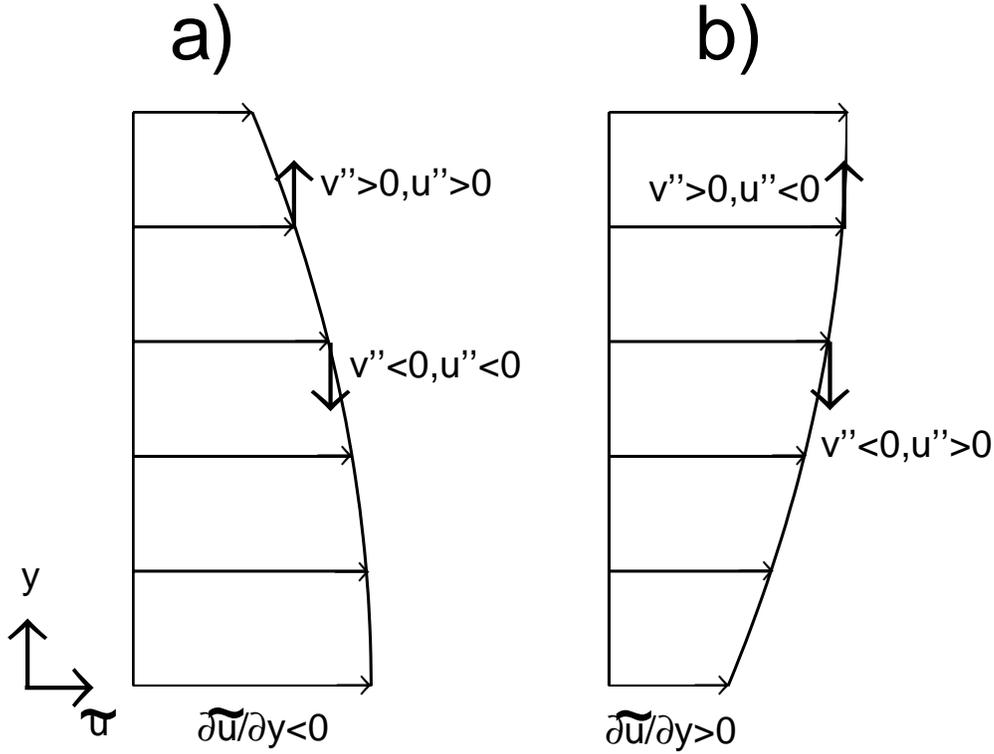


Figura 4: Flusso in un canale: a) gradiente trasversale di  $\tilde{u}$  negativo, b) gradiente trasversale di  $\tilde{u}$  positivo.

fluida posta in  $y$  è spostata verso l'alto per effetto di una fluttuazione turbolenta positiva della componente di velocità trasversale,  $v'' > 0$ , essa si troverà circondata da particelle fluide aventi, *in media*, valori di  $u$  minori di  $\tilde{u}(y)$ , per cui essa darà luogo ad una fluttuazione della componente assiale  $u'' > 0$ ; ne consegue un contributo allo sforzo di Reynolds  $\widetilde{u''v''} > 0$ . Se invece la particella fluida è spostata verso il basso per effetto di una fluttuazione  $v'' < 0$ , essa sarà circondata da particelle fluide con  $u > \tilde{u}(y)$ , perciò essa darà luogo ad una fluttuazione  $u'' < 0$ , con il risultato che ancora  $\widetilde{u''v''} > 0$ . Consideriamo poi il caso di un gradiente trasversale positivo,  $(\partial\tilde{u}/\partial y) > 0$  (fig. 4b). Ragionamenti secondo le stesse linee mostrano che in questo caso si ha invece  $\widetilde{u''v''} < 0$ , in entrambe le situazioni  $v'' > 0$  e  $v'' < 0$ .

Dobbiamo poi considerare l'effetto delle fluttuazioni di  $\tilde{u}$ , che in modo del tutto analogo si può facilmente vedere (fig. 5) che producono un contributo  $\widetilde{u''v''} > 0$  nel caso di gradiente assiale di  $\tilde{v}$  negativo,  $(\partial\tilde{v}/\partial x) < 0$ ; nel caso opposto,  $(\partial\tilde{v}/\partial x) > 0$ , si trova invece  $\widetilde{u''v''} < 0$ .

Queste osservazioni suggeriscono che lo sforzo di Reynolds di taglio  $\widetilde{u''v''}$  può essere tentativamente preso proporzionale alla somma dei gradienti incrociati dei valori *medi* delle componenti di velocità (o meglio, al tensore di deformazione) con segno opposto:

$$\widetilde{u''v''} \propto - \left( \frac{\partial\tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial\tilde{v}}{\partial x} \right) \quad (80)$$

Questa ipotesi è basata sull'assunzione che le particelle fluide si muovano come corpi rigidi (in quanto si è ipotizzato che la particella conservi la sua componente di velocità ortogonale alla componente fluttuante che genera lo spostamento), che chiaramente non è verificata in flussi reali. Perciò l'assunzione di trasporto secondo gradiente può essere considerata solamente come uno strumento per dare un'espressione di tentativo agli sforzi di Reynolds, piuttosto che una relazione di sicuro affidamento.

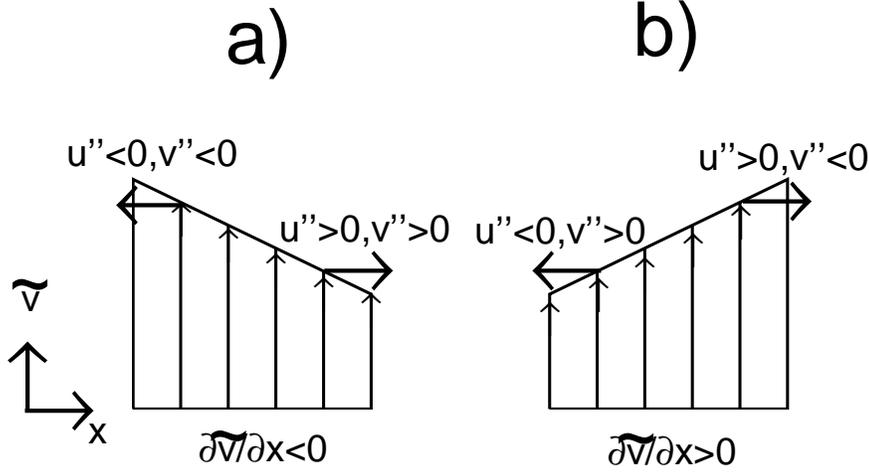


Figura 5: Flusso in un canale: a) gradiente assiale di  $\tilde{v}$  negativo, b) gradiente assiale di  $\tilde{v}$  positivo.

Rimane il problema di determinare il coefficiente di proporzionalità, che si può vedere che ha le dimensioni di una lunghezza per una velocità (incidentalmente, le stesse di una viscosità cinematica). Possiamo perciò congetturare di definirlo come proporzionale al prodotto di una lunghezza caratteristica  $l^*$  del problema per una velocità caratteristica  $u^*$ . Risulta allora possibile definire una *viscosità turbolenta* (cinematica)  $\nu_t$

$$\nu_t \propto u^* l^* \quad (81)$$

ed una viscosità turbolenta dinamica come

$$\mu_t = \bar{\rho} \nu_t \quad (82)$$

Vedremo in seguito i problemi associati all'individuazione delle 'scale' della velocità e delle lunghezze  $u^*$  ed  $l^*$ . Con le definizioni appena date, lo sforzo (cinematico) di taglio di Reynolds può essere scritto

$$\widetilde{u'' v''} = -\nu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) \quad (83)$$

Questa equazione può essere riscritta in forma tensoriale cartesiana:

$$\widetilde{u''_k u''_i} = -\nu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) \quad \text{per } i \neq k \quad (84)$$

Si noti l'analogia con l'espressione degli sforzi molecolari nell'equazione della quantità di moto. Vediamo ora se l'ipotesi di trasporto secondo gradiente è applicabile anche per esprimere gli sforzi *normali* di Reynolds, quelli cioè con  $k = i$ . Allo scopo di ricavare p. es. un'espressione per lo sforzo



espressione chiaramente erronea, in quanto in flussi a densità costante, per i quali l'equazione di continuità mediata impone che la divergenza della velocità media sia nulla, essa dà come risultato zero. Se definiamo un'energia cinetica turbolenta (per ora incognita, ma vedremo come aggirare questo problema, vedi (102,103))

$$\tilde{k} = \frac{\widetilde{u_k'' u_k''}}{2} \quad (87)$$

la somma degli sforzi normali deve necessariamente essere uguale a

$$\widetilde{u_k'' u_k''} = 2\tilde{k} \quad (88)$$

Allora, allo scopo di evitare l'eventualità non fisica di uno sforzo normale di Reynolds non positivo, e di forzare la *somma* degli sforzi normali ad assumere il valore (88), si aggiungono all'eq. (85) due ulteriori termini:

$$\widetilde{u_i''^2} = -2\nu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} + \frac{2}{3}\nu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \frac{2}{3}\tilde{k} \quad (89)$$

In altre parole, si è supposto, in mancanza di migliori indicazioni, che il termine nella divergenza della velocità media e quello nell'energia cinetica turbolenta che compaiono nelle somme (86,88) si equiripartiscano tra i tre sforzi normali di Reynolds. Il risultato può essere generalizzato in forma tensoriale come

$$\widetilde{u_k'' u_i''} = -\nu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left( \nu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \tilde{k} \right) \delta_{ik} \quad (90)$$

che rende questa espressione di applicabilità generale, cioè valida tanto per sforzi tangenziali che normali.  $\delta_{ik}$  denota il delta di Kronecker. Da quanto detto risulta che l'espressione (88) costituisce una ragionevole approssimazione per gli sforzi di taglio di Reynolds, mentre rappresenta un'approssimazione alquanto modesta per quelli normali. Vedremo che questo porta a notevoli limiti.

Per quanto riguarda il trasporto turbolento delle grandezze scalari, consideriamo il flusso  $v''\tilde{\phi}''$  di una generica grandezza scalare  $\phi$  in un canale in flusso (statisticamente) stazionario, dove  $v$  è la velocità trasversale (fig. 7). Considerazioni del tutto analoghe a quelle viste per gli sforzi di taglio di Reynolds portano a concludere che per  $(\partial\tilde{\phi}/\partial y) < 0$ , si ha  $v''\tilde{\phi}'' > 0$ , in entrambe le situazioni  $v'' > 0$  e  $v'' < 0$ . La situazione opposta,  $v''\tilde{\phi}'' < 0$ , si verifica per gradiente di  $\tilde{\phi}$  positivo. Queste osservazioni suggeriscono che  $\widetilde{u_k'' \phi''}$  può essere tentativamente preso proporzionale al gradiente del valore *medio* di  $\phi$ , con segno opposto:

$$v''\tilde{\phi}'' \propto -\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial y} \quad (91)$$

Mettendo in relazione la diffusività turbolenta della particolare grandezza scalare considerata con la viscosità turbolenta (81) mediante appropriati numeri di Prandtl/Schmidt *turbolenti*  $\sigma_\phi$  (per contemplare la possibilità che i coefficienti di proporzionalità nelle (80, 91) possano essere diversi, ancorché interrelati), possiamo finalmente esprimere i flussi di Reynolds come

$$\bar{\rho} v''\tilde{\phi}'' = -\frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial y} \quad (92)$$

Notare ancora l'analogia formale con i flussi di trasporto molecolare. Questa espressione può essere specializzata ai flussi turbolenti di entalpia (statica) e delle specie come

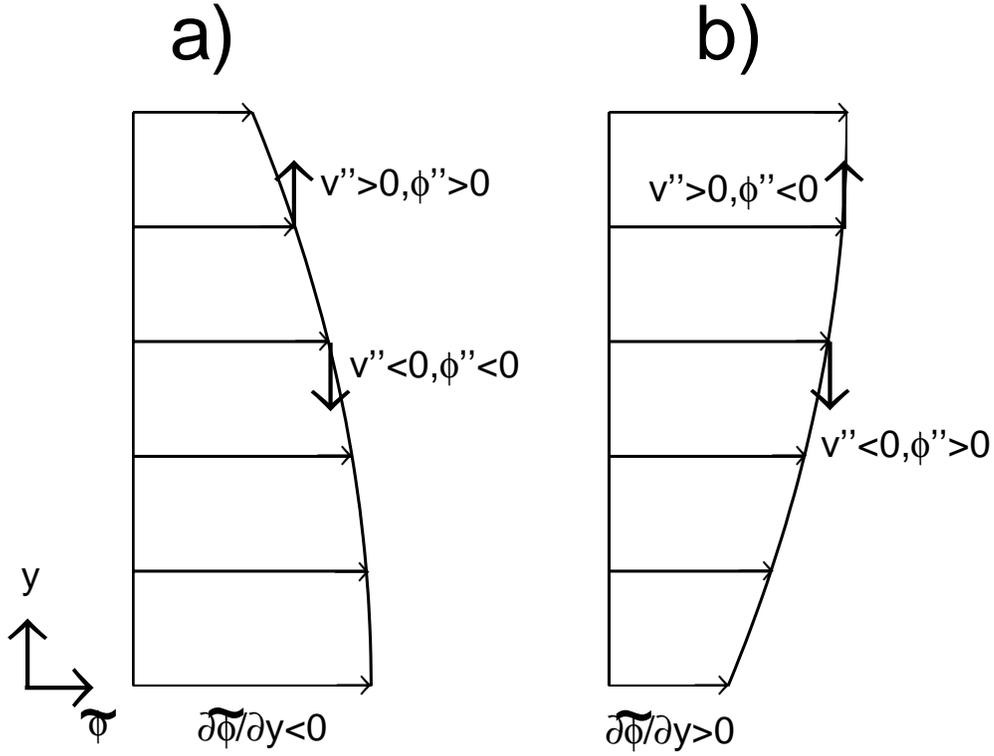


Figura 7: Flussi turbolenti della grandezza scalare  $\phi$  nel flusso in un canale: a) gradiente trasversale negativo, b) gradiente trasversale positivo.

$$\bar{\rho} u_k'' \widetilde{h}'' = -\frac{\mu_t}{\sigma_0} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} \quad (93)$$

$$\bar{\rho} u_k'' \widetilde{Y}_i'' = -\frac{\mu_t}{\sigma_i} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k} \quad (94)$$

Per quanto riguarda l'equazione dell'energia, per semplicità limitiamo da qui in poi la nostra attenzione a flussi a bassa velocità (diciamo a numero di Mach non superiore a circa 0.3), per i quali il contributo dell'energia cinetica turbolenta può essere trascurato in modo che  $\tilde{h}_0 \cong \tilde{h}$  (vedremo poi che questa assunzione è comunque richiesta dai modelli di combustione turbolenta). Questa ipotesi comporta che anche il termine di dissipazione viscosa (19) risulta trascurabile; il suo ordine di grandezza può infatti essere valutato approssimativamente come

$$\bar{\Phi} = \mathcal{O}\left(\mu \frac{\tilde{u}^2}{D^2}\right) \quad (95)$$

mentre quello del termine diffusivo mediato della (77) è (il numero di Prandtl  $\sigma$  assume valori dell'ordine dell'unità per gas)

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} \right] = \mathcal{O}\left(\frac{\mu c_p \tilde{T}}{D^2}\right) = \mathcal{O}\left[\frac{\mu \gamma R \tilde{T}}{(\gamma - 1) D^2}\right] = \mathcal{O}\left[\frac{\mu a^2}{(\gamma - 1) D^2}\right] \quad (96)$$

essendo  $\gamma$  il rapporto dei calori specifici della miscela gassosa reagente ed  $a$  la velocità del suono valutata alla temperatura  $\tilde{T}$ . Il rapporto tra l'ordine di grandezza di  $\bar{\Phi}$  e del termine diffusivo risulta perciò

$$\frac{\bar{\Phi}}{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} \right]} = \mathcal{O} [(\gamma - 1) M^2] \quad (97)$$

per cui  $\bar{\Phi}$  può essere senz'altro trascurato in flussi a bassa velocità.

Allora, con la chiusura al primo ordine le equazioni mediate di Navier–Stokes per flussi a bassa velocità possono essere riscritte come

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k) = 0 \quad (98)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{u}_i) &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ (\mu + \mu_t) \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ik} (\mu + \mu_t) \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \bar{\rho} \tilde{k} \right] + \bar{\rho} g_i \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (99)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_0} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} \right] \quad (100)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_i} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k} \right] + \bar{w}_i \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (101)$$

L'equazione della quantità di moto è spesso scritta in una forma un poco più semplice, definendo la grandezza

$$\bar{p}^* = \bar{p} + \frac{2}{3} \left[ (\mu + \mu_t) \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} + \bar{\rho} \tilde{k} \right] \quad (102)$$

Questa strada è praticabile perché (almeno in flussi a bassa velocità, in cui effetti di compressibilità sono esclusi) la natura della pressione nelle equazioni di conservazione è tale per cui essa non richiede la specificazione di condizioni al contorno, e lo stesso vale per  $\bar{p}^*$ . Possiamo perciò scrivere

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{u}_i) &= -\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ (\mu + \mu_t) \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{\rho} g_i \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (103)$$

In questo modo tra l'altro si evita di far comparire esplicitamente nelle equazioni del moto l'energia cinetica turbolenta  $\tilde{k}$ .

Resta il problema di identificare la velocità e la lunghezza caratteristiche da inserire nell'espressione della viscosità turbolenta. A questo scopo è necessario approfondire l'analogia tra diffusione molecolare e diffusione turbolenta che deriva dall'ipotesi di trasporto secondo gradiente. La diffusione molecolare è dovuta al moto di agitazione termica delle molecole, e la relativa viscosità molecolare risulta proporzionale al prodotto della velocità media delle molecole per il loro cammino libero medio. Nella turbolenza, possiamo pensare che il trasporto di quantità di moto, energia, concentrazione, sia dovuto all'effetto delle fluttuazioni. In questa visione, le molecole sono sostituite da particelle fluide che collidono e quindi scambiano le loro proprietà. Questa analogia mette anche in luce i limiti di questa modellizzazione: chiaramente le particelle fluide non sono corpi rigidi che conservano la loro identità, ed inoltre la distanza percorsa nelle fluttuazioni non è trascurabile

rispetto alle dimensioni del campo di flusso. Tuttavia essa funziona bene in molti casi pratici, perché la viscosità turbolenta può essere identificata con buona approssimazione.

Il ruolo dei modelli di turbolenza del primo ordine si riduce quindi all'identificazione di una scala delle velocità, che può essere intesa come uno scarto quadratico medio delle fluttuazioni di velocità, ed una scala delle lunghezze, che rappresenti una sorta di 'libero cammino medio' percorso da una particella fluida per effetto delle fluttuazioni.

## 4.2 Modelli a zero equazioni.

Nei modelli di turbolenza più semplici le scale della velocità e della lunghezza sono determinate senza introdurre equazioni di conservazione aggiuntive; per questo essi sono classificati come 'modelli a zero equazioni'. Per identificare le scale della velocità e delle lunghezze in questi semplici modelli facciamo riferimento ad un flusso in un canale, senza ricircolazione (vedi p. es. la fig. 4); sia  $y$  la coordinata trasversale. Se indichiamo con  $\sqrt{u''^2}$  lo scarto quadratico medio della velocità, possiamo definire una 'lunghezza di mescolamento'  $l_m$  come la distanza che bisogna coprire, muovendosi in senso trasversale, perché la corrispondente variazione di  $\tilde{u}$  (in modulo) sia proprio pari a  $\sqrt{u''^2}$ . La velocità caratteristica può allora essere riscritta come (ammesso che il profilo di velocità nell'intorno del punto considerato possa in prima approssimazione essere considerato lineare per cui  $\Delta\tilde{u} = \Delta y \cdot \partial\tilde{u}/\partial y$ )

$$u^* = \sqrt{u''^2} = l_m \left| \frac{\partial\tilde{u}}{\partial y} \right| \quad (104)$$

Prendendo  $l_m$  come lunghezza caratteristica  $l^*$  nella (81), la viscosità cinematica turbolenta può essere definita come

$$\nu_t = l_m^2 \left| \frac{\partial\tilde{u}}{\partial y} \right| \quad (105)$$

e quella dinamica come

$$\mu_t = \bar{\rho} l_m^2 \left| \frac{\partial\tilde{u}}{\partial y} \right| \quad (106)$$

Si noti quindi che il coefficiente di proporzionalità previsto dalla (81) è qui preso pari all'unità. In flussi semplici,  $l_m$  può essere presa come una frazione dell'altezza del canale o del diametro del condotto; essa dipende anche dalla particolare configurazione del flusso (getto, scia, flusso piano, assialsimmetrico, etc.), vedi p. es. [28].

In flussi complessi, specie in presenza di ricircolazione, diventa molto difficile assegnare una lunghezza di mescolamento. L'applicabilità del modello è quindi ristretta ai flussi particolarmente semplici sopra citati, per i quali è possibile identificare un valore di  $l_m$  in base all'esperienza. Quando invece, come accade nella maggior parte delle applicazioni di interesse, occorre prevedere il campo di flusso in una configurazione complessa, il metodo risulta praticamente inapplicabile.

Un miglioramento nella modellizzazione della turbolenza può essere ottenuto introducendo equazioni di conservazione per le grandezze che descrivono la turbolenza (per esempio  $u^*$  e  $l^*$ , o grandezze ad esse collegate), che quindi permettano di specificare queste due grandezze, e definire una viscosità turbolenta, anche in flussi complessi, per i quali non si hanno indicazioni *a priori*. Possiamo anzi dire che i modelli 'a due equazioni' costituiscono il livello *minimo* per un modello di turbolenza di applicabilità generale (anche se pur sempre con notevoli limiti, come vedremo).

### 4.3 Modelli a due equazioni.

Nei modelli a due equazioni, la scala delle velocità è determinata attraverso un'equazione (anch'essa opportunamente modellata) per l'energia cinetica turbolenta  $\tilde{k}$ , e la scala delle lunghezze è determinata risolvendo un'ulteriore equazione, per  $l^*$  o per una grandezza ad essa collegata, per esempio il tasso di dissipazione viscosa dell'energia cinetica turbolenta  $\tilde{\epsilon}$ , che ha il significato di un tasso di trasformazione di  $\tilde{k}$  in calore per effetto della viscosità. Nel modello di turbolenza  $k$ - $\epsilon$  (lineare), espresso in forma iniziale in [29] ed in forma consolidata in [30], si adottano appunto queste grandezze per ottenere informazioni sulle scale da utilizzare nella definizione (81) di viscosità turbolenta. Poiché  $\tilde{\epsilon}$  ha le dimensioni di un'energia cinetica diviso un tempo, le scale cercate possono essere ricavate, sulla base di considerazioni di ordine dimensionale, come

$$u^* = \sqrt{\tilde{k}} \quad (107)$$

$$l^* = \frac{\tilde{k}^{3/2}}{\tilde{\epsilon}} \quad (108)$$

Sostituendo queste espressioni, ed introducendo un'opportuna costante di proporzionalità (determinata sperimentalmente) nella (81), si giunge all'espressione della viscosità turbolenta (nella versione del modello  $k$ - $\epsilon$  per flussi a densità variabile), come

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (109)$$

dove a  $C_\mu$  viene usualmente assegnato il valore 0.09. L'energia cinetica turbolenta  $\tilde{k}$  ed il suo tasso di dissipazione viscosa  $\tilde{\epsilon}$  sono determinati risolvendo le rispettive equazioni di conservazione (delle quali la prima può essere facilmente ricavata utilizzando semplicemente l'ipotesi di trasporto secondo gradiente, mentre la seconda è assai più fortemente modellata):

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k} \right] + \bar{\rho} P - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \quad (110)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\epsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial x_k} \right] + C_{\epsilon 1} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} P - C_{\epsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (111)$$

In queste equazioni  $\sigma_k$  e  $\sigma_\epsilon$  rappresentano <sup>12</sup> numeri di Prandtl turbolenti (ai quali sono usualmente assegnati i valori rispettivamente di 1.0 e 1.3),  $C_{\epsilon 1}$  e  $C_{\epsilon 2}$  sono costanti (normalmente prese come 1.44 e 1.92, rispettivamente). Non entriamo nei dettagli della derivazione di queste equazioni, limitandoci ad osservare che in esse figurano un termine convettivo (a primo membro), un termine diffusivo (molecolare e turbolento, primo termine a secondo membro), indi un termine di produzione (così perché risulta quasi sempre positivo) ed uno di dissipazione (essendo  $\tilde{\epsilon}$ , come  $\tilde{k}$ , positiva per definizione, per cui il termine preceduto dal segno meno implica un contributo negativo). In particolare, il termine di produzione risulta esprimibile come

$$\bar{\rho} P = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} - \frac{2}{3} \left( \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \bar{\rho} \tilde{k} \right) \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \quad (112)$$

Con questo modello quindi il numero di equazioni di conservazione da risolvere è incrementato di due. Il modello  $k$ - $\epsilon$ , sebbene non esente da inconvenienti, attualmente è di gran lunga il modello di turbolenza più utilizzato, per la sua relativa completezza e semplicità.

<sup>12</sup> Si osservi che l'indice  $k$  di  $\sigma_k$  in questo caso non indica sommatoria, ma fa semplicemente riferimento all'energia cinetica turbolenta  $\tilde{k}$ .

Incidentalmente, l'adozione di modelli di turbolenza nei codici di calcolo fluidodinamici richiede generalmente uno speciale trattamento dello strato limite [28], per evitare di concentrare una grande parte dei nodi di calcolo in questa sottile regione ove si verificano gradienti molto elevati. Si ricordi a questo proposito che la fig. 2b, relativa a flusso turbolento, mostra in prossimità delle pareti un gradiente di velocità estremamente più alto che non la fig. 2a, relativa a flusso laminare.

## 5 Problemi connessi alla chiusura termochimica.

Una volta effettuata la chiusura fluidodinamica, sono ancora necessarie espressioni per la densità media  $\bar{\rho}$  e per il tasso medio di produzione delle specie  $\bar{w}_i$  per chiudere il sistema delle equazioni di conservazione mediate.

Osserviamo che la densità *istantanea* è data dall'equazione termica di stato (6) che ha la forma funzionale

$$\rho = \rho(p, T, Y_i, i = 1, 2, \dots, N) \quad (113)$$

Questa è una relazione *nonlineare*, il che ha l'importante conseguenza che <sup>13</sup>

$$\bar{\rho} \neq \rho(\bar{p}, \bar{T}, \tilde{Y}_i, i = 1, 2, \dots, N) \quad (114)$$

come può essere verificato direttamente applicando l'usuale tecnica di decomposizione alla (6) e poi mediando (vedi anche la successiva fig. 11). Per quanto riguarda il termine di produzione delle specie, esso è dato dalle (20,24,26) che risultano nella dipendenza funzionale

$$w_i = w_i(\rho, T, Y_j, j = 1, 2, \dots, N) \quad (115)$$

e questa è una relazione *estremamente* nonlineare, per l'effetto sia dell'esponenziale nella temperatura che della produttoria nelle potenze delle frazioni di massa delle specie; anche la dipendenza dalla densità può essere nonlineare. Ciò porta al fatto che

$$\bar{w}_i \neq w_i(\bar{\rho}, \bar{T}, \tilde{Y}_j, j = 1, 2, \dots, N) \quad (116)$$

Usare il segno di uguaglianza in questa espressione può portare ad errori fino a tre ordini di grandezza [10], ed a risultati completamente privi di significato (p. es., anche con segno erroneo). Consideriamo per esempio l'effetto di fluttuazioni di temperatura, mantenendo costanti tutte le altre grandezze. Una fluttuazione positiva di temperatura causa un forte incremento del tasso di produzione rispetto al valore  $w_i(\bar{T})$  corrispondente alla temperatura media, a causa della dipendenza esponenziale del tasso di Arrhenius dalla temperatura. Al contrario, una fluttuazione negativa di temperatura produce una riduzione molto più piccola del tasso di produzione, per lo stesso motivo. Ne segue che bisogna attendersi che  $\bar{w}_i$  sia sensibilmente più grande del valore  $w_i(\bar{T})$ . Invece, l'effetto di fluttuazioni di concentrazione (tenendo invariate tutte le altre grandezze) è di ridurre  $\bar{w}_i$  rispetto al valore  $w_i(\tilde{Y}_i, i = 1, 2, \dots, N)$ . Libby e Williams [8] quantificano questo effetto (per fiamme premiscelate, vedi oltre), nel senso che esso porta il tasso medio di produzione ad essere solo tra il 5 ed il 10% del valore ottenuto trascurando l'effetto delle fluttuazioni.

---

<sup>13</sup> Notare che abbiamo indicato medie convenzionali (cioè di Reynolds) per la temperatura, e medie di Favre per le frazioni di massa delle specie. Per quanto la distinzione sia irrilevante nel presente contesto, abbiamo usato tale convenzione in vista del fatto che misure tramite termocoppie danno dati di temperatura mediati in maniera convenzionale, mentre l'analisi della miscela mediante campionamento con sonde dà composizioni vicine ad una media di Favre.

Al fine di ricavare il valore medio  $\overline{\omega_j}$  del termine sorgente delle specie (obiettivo, insieme alla densità media  $\overline{\rho}$ , della chiusura termochimica), un approccio parallelo a quello seguito nella sez. 3.3 porterebbe a decomporre ogni grandezza che compare nell'espressione del tasso di reazione secondo l'eq. di Arrhenius (24), oppure (26), in un valore medio ed uno fluttuante, per esempio (facendo riferimento alla prima forma, ed adottando medie convenzionali per comodità di esposizione)

$$\omega_j = B_j (\overline{T} + T')^{\alpha_j} \exp \left[ -\frac{E_j}{R^0 (\overline{T} + T')} \right] (\overline{\rho} + \rho')^{m_j} \cdot \prod_{i=1}^N \left( \frac{\overline{Y}_i + Y'_i}{\overline{W}_i} \right)^{\nu'_{i,j}} \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (117)$$

e successivamente mediare. Questa espressione non risulterebbe tuttavia di grande utilità, in particolare a causa della presenza dell'esponenziale nella temperatura; si può allora pensare di effettuare un'espansione in serie di Taylor della (24), intesa come funzione di  $2 + N$  variabili, nell'intorno delle condizioni (che indichiamo simbolicamente con l'indice 0 per concisione)  $\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), con incrementi quindi  $\rho', T', Y'_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), e successivamente mediare. Definiamo quindi il valore del tasso di reazione nelle condizioni '0' come

$$\omega_{j,0} = \omega_j(\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y}_i, i = 1, 2, \dots, N) \quad (118)$$

poi i valori delle derivate prime in tali condizioni come

$$\left( \frac{\partial \omega_j}{\partial \rho} \right)_0 = \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial \rho} \right) (\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y}_i), \quad \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial T} \right)_0 = \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial T} \right) (\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y}_i), \quad \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial Y_m} \right)_0 = \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial Y_m} \right) (\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y}_i) \quad (119)$$

ed in maniera analoga i valori di tutte le derivate successive nelle condizioni citate. L'espansione in serie di Taylor nell'intorno dei valori  $\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) si scrive perciò

$$\begin{aligned} \omega_j = & \omega_{j,0} + \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial \rho} \right)_0 \rho' + \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial T} \right)_0 T' + \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial Y_i} \right)_0 Y'_i + \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial \rho^2} \right)_0 \rho'^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial T^2} \right)_0 T'^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial Y_i^2} \right)_0 Y_i'^2 + \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial \rho \partial T} \right)_0 \rho' T' + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial \rho \partial Y_i} \right)_0 \rho' Y'_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial T \partial Y_i} \right)_0 T' Y'_i + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^N \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial Y_i \partial Y_m} \right)_0 Y'_i Y'_m + \dots \end{aligned} \quad (120)$$

Come si vede, nell'espansione in serie di Taylor, oltre al termine di ordine zero, nascono  $2 + N$  termini del prim'ordine, poi  $(2 + N)(1 + N) / 2$  termini del second'ordine, etc.. Tale espansione deve poi essere mediata per ottenere il valore medio del tasso di reazione; ciò fa automaticamente decadere tutti i termini del prim'ordine (essendo nulla la media della fluttuazione), restano però tutti i termini di ordine superiore:

$$\begin{aligned} \omega_j = & \omega_{j,0} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial \rho^2} \right)_0 \overline{\rho'^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial T^2} \right)_0 \overline{T'^2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial Y_i^2} \right)_0 \overline{Y_i'^2} + \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial \rho \partial T} \right)_0 \overline{\rho' T'} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial \rho \partial Y_i} \right)_0 \overline{\rho' Y'_i} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial T \partial Y_i} \right)_0 \overline{T' Y'_i} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^N \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \omega_j}{\partial Y_i \partial Y_m} \right)_0 \overline{Y'_i Y'_m} + \dots \end{aligned} \quad (121)$$

La valutazione di  $\overline{\omega}_j$  richiederebbe quindi la determinazione, oltre che di  $\overline{\rho}$ ,  $\overline{T}$  e  $\overline{Y}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), di tutte le varianze  $\overline{\rho'^2}$ ,  $\overline{T'^2}$  e  $\overline{Y_i'^2}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), di tutte le covarianze  $\overline{\rho' T'}$ ,  $\overline{\rho' Y_i'}$ ,  $\overline{T' Y_i'}$  e  $\overline{Y_i' Y_m'}$  ( $i, m = 1, 2, \dots, N$ ), nonché dei numerosissimi termini di ordine superiore. La situazione è in particolare aggravata dal fatto che la serie converge molto lentamente rispetto all'ordine dell'espansione (a causa, in particolare, della fortissima nonlinearità introdotta dall'esponenziale), per cui non è possibile limitarsi a considerare solo i primi termini della serie (trascurando i rimanenti), ma occorre invece spingersi fino a termini di ordine elevato. Tale approccio non è perciò assolutamente praticabile, ed occorre cercare una strada alternativa.

Simili osservazioni si applicano all'equazione calorica di stato (13,14) che non consente di ottenere la temperatura media, una volta noti i valori medi di entalpia e composizione, a causa della sua nonlinearità.

Risulta perciò evidente che i flussi turbolenti *reagenti* implicano difficoltà sostanzialmente maggiori che non i corrispondenti flussi *inerti*.

Un approccio ingegneristico per superare queste difficoltà è quello di introdurre *modelli di combustione turbolenta*, che riducono il fenomeno ad una forma trattabile per via computazionale per mezzo di assunzioni, necessariamente piuttosto rozze, e permettono perciò di effettuare la chiusura termochimica. Come ci si può aspettare, tali modelli avranno un campo di applicazione limitato, per cui saranno necessari differenti modelli per adattarsi a differenti situazioni. A questo punto, operiamo una distinzione tra combustione turbolenta *nonpremiscelata* e combustione turbolenta *premiscelata*. Nel regime nonpremiscelato combustibile ed ossidante entrano in camera di combustione in due flussi separati (fig. 8a), mentre nel regime premiscelato essi entrano in uno stato già completamente miscelato (fig. 8b). Esiste naturalmente un altro caso, che può essere chiamato *parzialmente premiscelato* (oppure 'generale'), quello di reagenti che arrivano in camera di combustione in parte premiscelati e parte in flussi separati. La fig. 8c riporta ad esempio, a sinistra, una schematizzazione delle condizioni che possono verificarsi in un motore diesel al momento dell'ignizione (anche se in questi motori il combustibile viene iniettato nel cilindro separatamente dall'aria, in realtà al momento dell'ignizione il combustibile si è già in qualche misura mescolato con questa); a destra invece una schematizzazione di una turbina a gas, in cui la fiamma generata da reagenti premiscelati è stabilizzata mediante una fiamma nonpremiscelata. Nella sez. 6 introduciamo gli strumenti modellistici di base per la combustione turbolenta nonpremiscelata, mentre la sez. 7 è devoluta ai modelli per combustione turbolenta premiscelata. Non tratteremo invece la combustione parzialmente premiscelata, alquanto più complessa da descrivere.

## 6 Modello per combustione turbolenta nonpremiscelata – l'approccio dello scalare conservato.

Presentiamo qui le linee generali della modellizzazione della combustione turbolenta nonpremiscelata, le cui origini risalgono ai lavori di Hawthorne *et al.* [31], Rhodes *et al.* [32], Lockwood e Naguib [33]; recensioni sono proposte nei riferimenti [34, 35, 36].

L'approccio che seguiremo, per reagenti nonpremiscelati, è quello di introdurre opportune ipotesi per ridurre la densità istantanea (6), che come abbiamo detto nella sez. 3.2, è in generale una funzione di  $2 + N$  variabili, ad una funzione di una sola variabile, ed introdurre successivamente opportune ipotesi sulla statistica di tale unica variabile, che ci consentiranno di ricavare i valori medi (ma anche le varianze, etc.) delle grandezze di stato, la densità in particolare.

A tal fine, si introducono le seguenti assunzioni semplificative:

1. Il flusso è a bassa velocità. Questo ha tre implicazioni. In primo luogo, l'ipotesi sotto esame

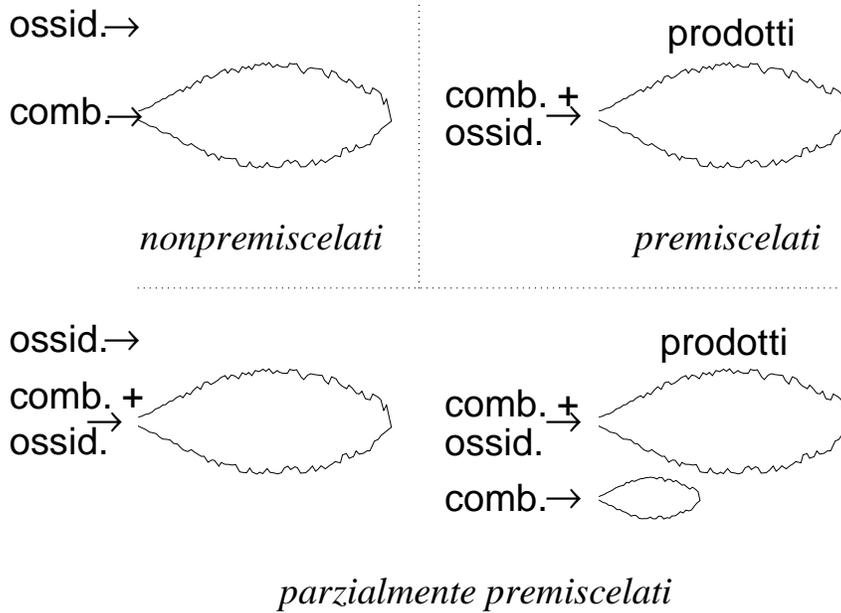


Figura 8: Schematizzazione di combustione con reagenti nonpremiscelati, premiscelati, parzialmente premiscelati.

consente di trascurare nell'equazione dell'energia, come già osservato a proposito della (97), il termine di dissipazione  $\Phi$ . In secondo luogo, nell'equazione dell'energia il contributo dell'energia cinetica del flusso può essere trascurato, permettendo in tal modo di sostituire l'entalpia di ristagno  $h_0$  con la sua controparte statica  $h$ . In terzo luogo infine, la pressione può essere assunta *termochimicamente costante*. Questo significa che, mentre il termine di gradiente di pressione nell'equazione della quantità di moto viene conservato, nelle relazioni di stato come l'equazione termica di stato (1) – dove la pressione appare in forma *non* differenziata – essa può essere approssimata con un valore costante, cioè le sue variazioni spaziali e temporali (sia in valor medio che fluttuazioni) sono considerate irrilevanti ai fini della determinazione della densità. Questa ipotesi è giustificata perché in flussi reagenti gli effetti causati da variazioni della temperatura e del peso molecolare della miscela sopravanzano largamente nella (1) quelli causati da variazioni di pressione, a patto che il flusso sia appunto a bassa velocità. Infatti, dalla (1) osserviamo che, mentre la temperatura può variare tipicamente di circa un ordine di grandezza (p. es. dai circa 300 K corrispondenti alla temperatura ambiente, ai circa 2400 K della combustione adiabatica di idrogeno e aria in proporzione stechiometrica, oppure circa 2200 K per metano ed aria), ed il peso molecolare mediato può al più variare entro circa un ordine di grandezza (nella combustione di idrogeno ed aria, esso può spaziare da  $W \simeq 2$  corrispondente al combustibile, a  $W \simeq 29$  corrispondente all'aria), la pressione sotto la presente ipotesi può invece variare in un campo molto ristretto. Supponendo in prima approssimazione che il flusso possa essere considerato isentropico, ed assumendo per esempio  $M \simeq 0.2$  e  $\gamma = 1.2$ , la pressione potrà variare tra il valore di ristagno  $p_0$  (nel caso estremo in cui, per effetto di una fluttuazione, la velocità si riduce a zero) ed il valore

$$\frac{p_0}{\left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\gamma/(\gamma-1)}} = \frac{p_0}{1.024} \quad (122)$$

cioè appena del 2.4%. Le escursioni di pressione hanno quindi un peso trascurabile nella (1) rispetto a quelle di  $T$  e  $W$ . Si può essere certi che questa assunzione introduce un errore trascurabile fino ad un numero di Mach di 0.3 (che comprende tutte le caldaie ed i combustori di turbine a gas per i quali è sempre  $M < 0.2$ ); ad ogni modo, se si pone pensiero al peso di tutte le altre approssimazioni introdotte fin qui, e di quelle che saranno introdotte fra poco, si può considerare che il relativo errore sia ancora accettabile fino a circa  $M = 0.6$ . Ribadiamo esplicitamente che la pressione è assunta costante solo nell'equazione di stato; nelle equazioni del moto invece, le variazioni di pressione, per quanto piccole, hanno un effetto determinante. Se per assurdo assumessimo la pressione media uniforme (quindi, gradienti di pressione media nulli) anche nelle equazioni della quantità di moto, si vede immediatamente che queste (trascurando il termine gravitazionale), insieme all'equazione di continuità mediata, ammetterebbero allora la soluzione banale  $\tilde{u}_1 = \tilde{u}_2 = \tilde{u}_3 \equiv 0$ .

2. Come è stato già accettato, la diffusione molecolare delle specie è descritta in termini di un singolo coefficiente  $D$ , ed il numero di Lewis è assunto unitario. Assumiamo poi che tutti i numeri di Prandtl/Schmidt turbolenti ( $\sigma_0, \sigma_i, i = 1, 2, \dots, N$ ), possano essere assunti uguali fra loro. Tale valore comune, indicato di seguito come  $\sigma_Z$ , è normalmente preso pari a 0.7, sebbene in realtà esso possa anche dipendere in qualche misura dal particolare flusso considerato [28].
3. Il flusso è adiabatico, nel senso che non c'è scambio termico né per radiazione (ipotesi anche questa già accettata), né per convezione con pareti solide.
4. Le reazioni chimiche sono in equilibrio. Questa ipotesi è giustificata quando i tempi tipici del flusso  $t_f$  (per esempio il tempo di transito di una particella fluida nel combustore) sono lunghi rispetto ai tempi caratteristici delle reazioni chimiche  $t_c$ , quando cioè il numero di Damköhler  $Da = t_f/t_c$  è molto più grande dell'unità. Questa assunzione è verosimilmente più valida per flussi a bassa velocità (coerentemente con la prima ipotesi) e per camere di combustione grandi (entrambi gli effetti portano ad un  $t_f$  alto); inoltre, condizioni di alta temperatura e pressione favoriscono un  $t_c$  piccolo, come può essere dedotto dall'espressione di Arrhenius (24) (il tasso di reazione aumenta esponenzialmente con  $T$ , ed aumenta anche con  $\rho \propto p$ ).

Abbiamo già visto nella sez. 3.2 che sotto l'ipotesi di equilibrio chimico ogni grandezza di stato può essere espressa in funzione di due altre grandezze di stato, più il rapporto di equivalenza, od una grandezza di analogo significato. Poiché abbiamo visto che per l'ipotesi 1) la pressione può essere assunta costante nell'equazione termica di stato, possiamo scegliere quale coppia di variabili di stato pressione ed entalpia, ed essendo la prima termochimicamente costante si può scrivere

$$\rho = \rho(h; \varphi) \quad (123)$$

Al posto del rapporto di equivalenza  $\varphi$  possiamo adottare lo *scalare conservato* (detto anche *frazione di miscela*), indicato come  $Z$ , con il significato di frazione di massa del combustibile, *sia in forma incombusta che parzialmente o totalmente bruciato* (esso può quindi spaziare nel campo compreso tra zero ed uno). In altre parole,  $Z$  ha il significato di frazione di massa di fluido costituito da atomi che originano dal flusso di combustibile iniettato in camera, *indipendentemente da come questi atomi si siano poi legati a costituire altre specie chimiche*, per effetto delle reazioni. Questa definizione

permette di esprimere facilmente il rapporto di equivalenza locale (50) in funzione di  $Z$ . Infatti, il valore di  $Z$  in un dato punto rappresenta la frazione in massa di fluido che origina dal flusso di combustibile, e quindi  $1 - Z$  la frazione in massa del fluido che origina dal flusso di ossidante, per cui

$$\varphi = \frac{(F/O)}{(F/O)_{st}} = \frac{\frac{Z}{1-Z}}{\left(\frac{Z}{1-Z}\right)_{st}} \quad (124)$$

Lo scalare conservato può essere pensato come frazione di massa di un'ipotetica specie chimica non reagente (poiché consideriamo in esso il combustibile, indipendentemente dal fatto che sia incombusto oppure bruciato), la cui evoluzione è pertanto descritta da un'equazione del tipo (31), ma con termine sorgente nullo (perché, sottolineiamo ulteriormente, non ci interessa in questo contesto il modo in cui il fluido che origina dal combustibile reagisce per dar luogo a prodotti). Si ha quindi un'equazione puramente convettiva-diffusiva (da cui il nome scalare *conservato*); per i valori istantanei si ha

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Z) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Z) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial Z}{\partial x_k} \right] \quad (125)$$

Notiamo che sotto le ipotesi citate l'eq. dell'energia (30) si scrive

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k h) = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial h}{\partial x_k} \right] \quad (126)$$

ed ha quindi una forma molto simile alla (125); se poi consideriamo la forma stazionaria delle (125, 126), possiamo osservare come esse abbiano esattamente la stessa forma e gli stessi coefficienti. Analizziamo però le condizioni ai differenti contorni. Le condizioni al contorno di ingresso sono differenti per  $Z$  e per  $h$ ; infatti la prima grandezza vale uno nel flusso di combustibile in ingresso, e zero nel flusso di ossidante, mentre l'entalpia assume rispettivamente i valori che designamo come  $h_f$ , entalpia del combustibile, ed  $h_o$ , entalpia dell'ossidante. Possiamo però riportare le condizioni d'ingresso per l'entalpia nella stessa forma di quelle di  $Z$ , risolvendo un'equazione per un'entalpia opportunamente scalata:

$$\frac{h - h_o}{h_f - h_o} \quad (127)$$

che porta i valori all'ingresso ad essere uguali ad uno nel flusso di combustibile ed uguali a zero nel flusso di ossidante. Un'equazione di conservazione per la grandezza definita dalla (127) si ricava immediatamente dalla (126) dividendola per  $h_f - h_o$ . Per quanto riguarda le condizioni di contorno alla parete, anch'esse risultano essere dello stesso tipo, in quanto per  $Z$  non c'è ovviamente flusso attraverso la parete, come pure per l'entalpia, e quindi anche il suo corrispondente scalato (127), avendo supposto che la parete sia adiabatica, per cui non c'è flusso di calore attraverso di essa. Per quanto riguarda le condizioni al contorno di uscita dalla camera, possiamo ragionevolmente assumere sia per  $Z$  che per l'entalpia, e quindi per la grandezza (127), che i gradienti in direzione normale alla superficie della sezione d'uscita siano nulli (flusso completamente sviluppato). Allora, poiché le equazioni per  $Z$  e per l'entalpia scalata (127) hanno la stessa forma, gli stessi coefficienti e le stesse condizioni al contorno, è immediato rendersi conto che lo scalare conservato rappresenta tanto la frazione di massa del combustibile, sia bruciato che non, quanto la grandezza (127). L'entalpia statica può quindi essere espressa come

$$h = h_o + Z(h_f - h_o) \quad (128)$$

Quindi, sotto le ipotesi correnti tanto l'entalpia che il rapporto di equivalenza possono essere espressi in funzione di  $Z$ , per cui la densità per la (123) risulta anche'essa una funzione della sola  $Z$ :

$$\rho = \rho[h(Z); \varphi(Z)] = \rho(Z) \quad (129)$$

La funzione di  $Z$  definita dalla (129) può essere calcolata mediante appositi codici di calcolo per chimica in equilibrio [20, 21], i quali forniscono anche i valori di tutte le altre grandezze di stato come temperatura, concentrazioni, entropia, etc.

Siamo ora in condizione di affrontare il problema della chiusura per la densità media in flussi turbolenti. Possiamo tentativamente introdurre una *funzione densità di probabilità* (pdf – probability density function) dello scalare conservato, indicata come  $P(Z)$  (la dipendenza dalle coordinate spaziali è omessa per concisione), e *definita* in modo tale che

$$P(Z) dZ \quad (130)$$

dia la probabilità che lo scalare conservato sia compreso tra i valori  $Z$  e  $Z + dZ$ . Se questa pdf fosse nota, allora la densità media potrebbe essere ottenuta pesando  $\rho(Z)$  con la sua probabilità  $P(Z)$ :

$$\bar{\rho} = \int_0^1 \rho(Z) P(Z) dZ \quad (131)$$

Questa espressione sembrerebbe di non grande aiuto, in quanto il problema della determinazione di  $\bar{\rho}$  è stato scambiato con quello di determinare la forma della pdf. Tuttavia, può essere mostrato [34] che l'integrale (131) è relativamente insensibile a questa forma, purché essa sia scelta oculatamente. Possiamo perciò adottare una forma della pdf *presunta*, con una ragionevole aspettativa di introdurre solo un limitato errore nel calcolo di  $\bar{\rho}$ . Si noti che questa insensibilità è parzialmente dovuta al fatto che l'andamento di  $\rho$  in funzione di  $Z$  è relativamente dolce, come viene mostrato in fig. 9 per differenti combinazioni combustibile/aria. Sebbene tali curve mostrino ginocchi relativamente marcati vicino al valore stechiometrico di  $Z$  ( $Z_{st} = 0.028$  per il sistema idrogeno-aria,  $Z_{st} = 0.055$  per quello metano-aria), esse possono ancora essere considerate relativamente dolci (vedremo fra breve come invece questa condizione *non* è verificata per il tasso di produzione delle specie, vedi fig. 12).

Possiamo pensare di assegnare una forma di tentativo della pdf sulla base dei valori calcolati (nel punto considerato) dei successivi momenti dello scalare conservato, cioè  $\tilde{Z}$ ,  $\tilde{Z}''^2$ ,  $\tilde{Z}''^3$ , ..., per i quali perciò devono essere derivate equazioni di conservazione appropriatamente modellate. Un'equazione per  $\tilde{Z}$  può essere immediatamente ricavata mediando la (125) ed introducendo l'ipotesi di trasporto secondo gradiente (94), od ancora più direttamente, considerando che  $Z$  rappresenta una frazione di massa di una quantità con termine sorgente nullo, dalla (101):

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_Z} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_k} \right] \quad (132)$$

Un'equazione per la varianza  $\tilde{Z}''^2$  dello scalare conservato può essere ricavata (tralasciamo i relativi sviluppi) e, modellandone il termine di trasporto turbolento secondo l'ipotesi di trasporto secondo gradiente, assume la forma

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Z}''^2) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_{Z''^2}} \right) \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_k} \right] + 2 \frac{\mu_t}{\sigma_Z} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_k} - \bar{\rho} \tilde{\chi} \quad (133)$$

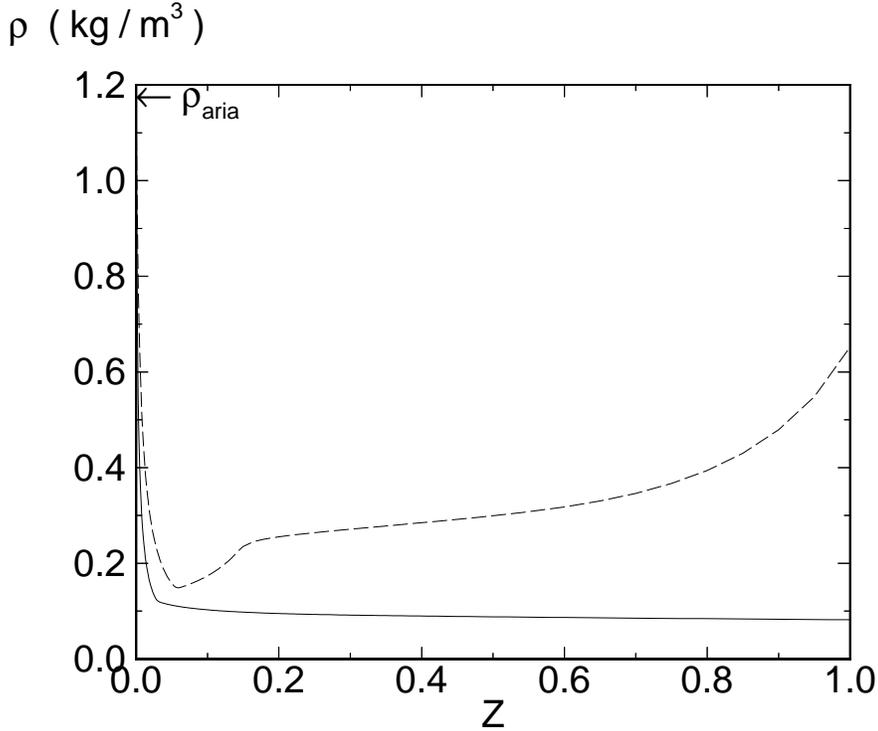


Figura 9: Densità in funzione dello scalare conservato: linea continua, fiamma idrogeno/aria; linea tratteggiata, fiamma metano/aria. Temperatura dei reagenti uguale a 300 K e pressione atmosferica in entrambi i casi.

dove, incidentalmente, è possibile riconoscere a secondo membro una struttura simile a quella delle equazioni dell'energia cinetica turbolenta e della sua dissipazione viscosa, alle quali si è fatto cenno nella sezione 4.3, vedi eq. (110,111), e cioè un termine di diffusione (molecolare e turbolenta), un termine di produzione ed un termine di dissipazione (detta dissipazione *scalare*, per distinguerla da  $\tilde{\epsilon}$ , quest'ultima detta anche dissipazione *meccanica*). La dissipazione scalare ha il significato di tasso di decadimento nel tempo della varianza delle fluttuazioni dello scalare conservato; essa può essere modellata secondo Kolmogorov, assumendo che sia tanto più intensa quanto maggiore è l'intensità delle fluttuazioni (cioè la varianza), e dividendo per una scala dei tempi (che nel modello  $k-\epsilon$  è proporzionale a  $\tilde{k}/\tilde{\epsilon}$ ) per cui

$$\tilde{\chi} = C_{\chi} \frac{\tilde{\epsilon} \widetilde{Z}''^2}{\tilde{k}} \quad (134)$$

dove alla costante di modellizzazione  $C_{\chi}$  si assegna il valore 2.0. Tuttavia, la derivazione di equazioni modellate per i momenti di ordine superiore (ossia  $\widetilde{Z}''^3$ , etc.) pone tremende difficoltà, e ci si può anche domandare se esse possano effettivamente portare ad un miglioramento sostanziale delle previsioni, data la rozzezza delle assunzioni introdotte a vari stadi. Perciò, i modelli di uso corrente impiegano solo le equazioni per i primi due momenti dello scalare conservato (132,133), cioè la media e la varianza, e la forma della pdf è assegnata su tali basi. Possiamo perciò indicare esplicitamente la pdf come

$$P(Z; \tilde{Z}, \widetilde{Z}''^2) \quad (135)$$

per sottolineare che essa è una funzione di  $Z$ , con i valori locali di  $\tilde{Z}$  e  $\widetilde{Z}''^2$  come parametri, od ancor meglio come

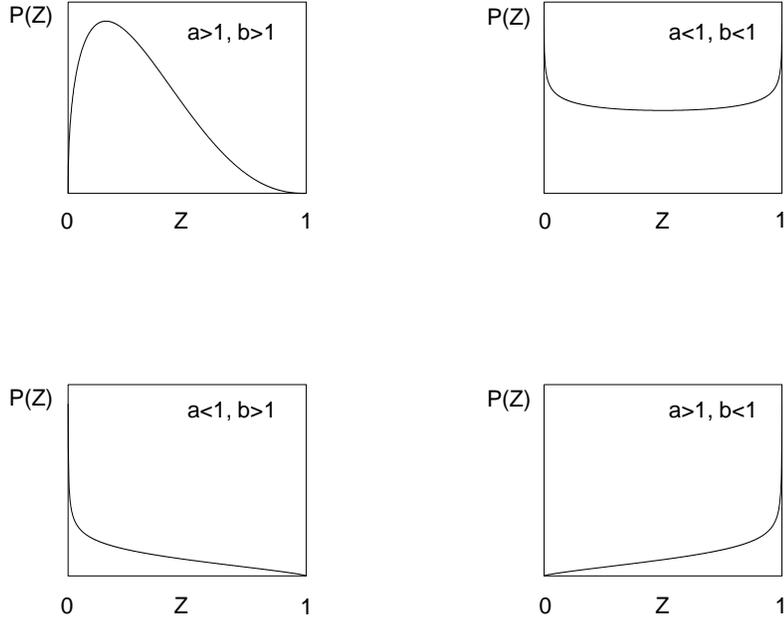


Figura 10: Aspetto della funzione beta per diversi valori dei parametri  $a$  e  $b$ .

$$P[Z; \tilde{Z}(\mathbf{x}), \tilde{Z}^{m2}(\mathbf{x})] \quad (136)$$

per rimarcare la dipendenza spaziale di questi due parametri. Nel seguito tuttavia adotteremo per concisione la notazione  $P(Z)$ , con l'intesa che essa abbia il significato espresso dalla (136).

Potremmo allora p. es. pensare di assegnare la pdf come una gaussiana; tuttavia, questa è una distribuzione applicabile a quantità non limitate (cioè che variano da  $-\infty$  a  $+\infty$ ), mentre lo scalare conservato è limitato tra zero ed uno. Occorre quindi che la forma della pdf includa anche i casi estremi di ossidante puro (quindi  $Z$  identicamente uguale a zero) e combustibile puro ( $Z$  identicamente uguale ad uno), come si verifica sicuramente all'ingresso dei reagenti in camera; con la definizione data sopra della pdf (130), questo corrisponde al fatto che  $P(0)$  o  $P(1)$  si avvicinano ad un delta di Dirac. Una condizione simile può comunque verificarsi anche all'interno del campo, in zone dove cioè lo scalare conservato può assumere i valori estremi (zero ed uno) per una frazione finita di tempo. È più probabile che questa situazione si verifichi vicino alle zone dove i flussi di combustibile ed ossidante entrano in contatto, a causa della natura sinuosa del *mixing layer* che nasce fra i due. Un punto in questa regione può essere raggiunto, in differenti istanti, o da combustibile od ossidante puri (dando in tal modo i delta agli estremi), o da una miscela dei due (pdf finita). Tale fenomeno, chiamato *intermittenza* – vedi [8], deve essere tenuto in conto dalla pdf, che deve perciò poter contemplare l'eventualità di picchi agli estremi della distribuzione.

Un artificio per adattare la distribuzione gaussiana a quantità limitate è quello di collassare le code della distribuzione che si estendono sotto lo zero e sopra l'unità in funzioni delta di Dirac ai rispettivi estremi ('clipped' Gaussian); chiaramente questa procedura è poco giustificata. Una scelta più adatta per la pdf è la funzione beta

$$P(Z) = C Z^{a-1} (1 - Z)^{b-1} \quad (137)$$

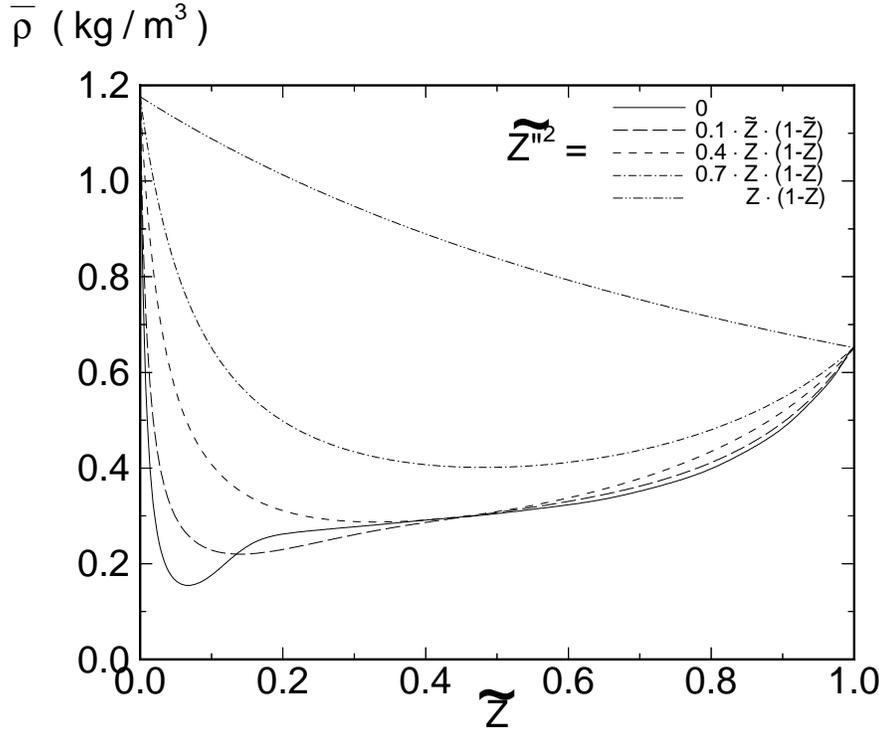


Figura 11: Densità *media* in funzione della media e della varianza dello scalare conservato, per una fiamma metano/aria (temperatura dei reagenti uguale a 300 K e pressione atmosferica).

dove  $C$  è un fattore di normalizzazione inteso a rendere l'integrale della pdf da zero ad uno uguale all'unità:

$$C = \left[ \int_0^1 Z^{a-1} (1-Z)^{b-1} dZ \right]^{-1} \quad (138)$$

e gli esponenti  $a$  e  $b$  possono essere espressi in termini della media e della varianza di  $Z$ :

$$a = \frac{\tilde{Z}^2 (1 - \tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - \tilde{Z} \quad (139)$$

$$b = \frac{\tilde{Z} (1 - \tilde{Z})^2}{\tilde{Z}''^2} - 1 + \tilde{Z} \quad (140)$$

Si noti che la funzione beta risulta in picchi di Dirac agli estremi quando  $a < 1$  e/o  $b < 1$ , vedi fig. 10. Questo perché gli esponenti di  $Z$  ed  $1 - Z$  nella (137), rispettivamente, diventano negativi; quindi, se p. es.  $a < 1$ , per  $Z \rightarrow 0$  la funzione beta (137) tenderà a  $C/Z^{1-a}$ , quindi ad  $\infty$ , essendo  $1 - a$  positivo. Infine, notiamo esplicitamente che le (137-140) conducono ovviamente alla forma funzionale (136) per la pdf. Allora, con la forma presunta per la pdf, l'equazione (131) può essere usata per effettuare la chiusura termochimica. La densità media risulta perciò avere la forma

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2) = \bar{\rho}[\tilde{Z}(\mathbf{x}), \tilde{Z}''^2(\mathbf{x})] \quad (141)$$

La fig. 11 mostra la densità *media* per un sistema reagente metano-aria (vedi anche fig. 9) in funzione della media e della varianza dello scalare conservato, secondo la (141), avendo assunto una funzione beta per la sua pdf. Si noti l'importante effetto delle fluttuazioni; il valore  $\tilde{Z}''^2 = \tilde{Z}(1-\tilde{Z})$  rappresenta il valore limite della varianza (essendo il campo di variazione di  $Z$  limitato, è possibile

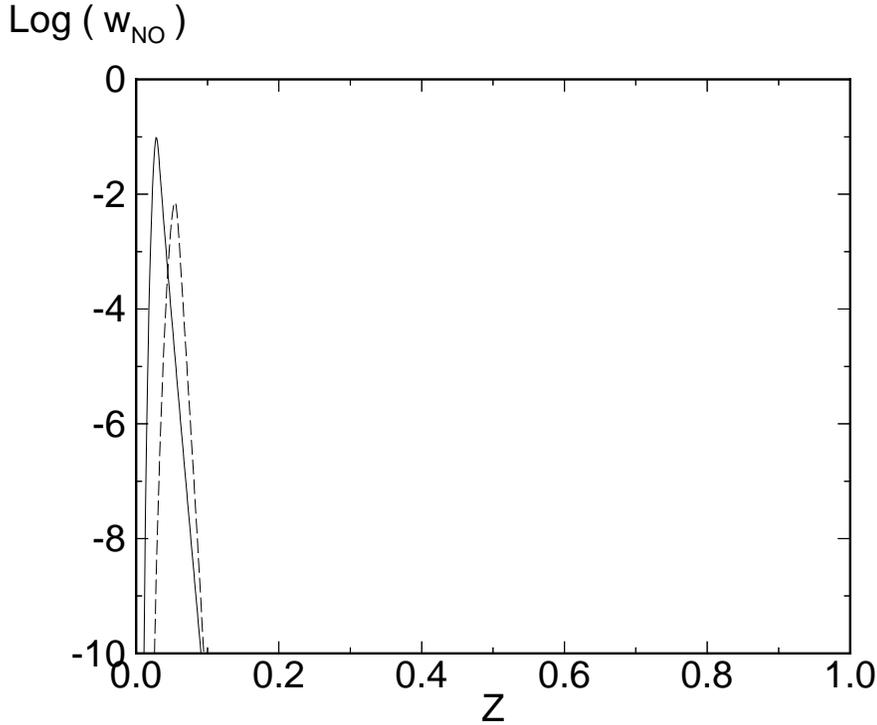


Figura 12: Termine sorgente della specie NO (ossido di azoto) in funzione dello scalare conservato: linea continua, fiamma idrogeno/aria; linea tratteggiata, fiamma metano/aria. Temperatura dei reagenti uguale a 300 K e pressione atmosferica in entrambi i casi.

dimostrare che l'intensità delle fluttuazioni non può superare questo valore limite). Da queste osservazioni si evince come non sia assolutamente lecito trascurare l'interazione tra combustione e turbolenza. L'effetto delle fluttuazioni è poi estremizzato nel caso della valutazione del tasso medio di produzione delle specie, a causa della sua forte non linearità che lo porta a variare in un campo estremamente ampio di ordini di grandezza (ed è appunto per questo che l'approccio considerato evita di far comparire le  $\overline{w_i}$ ). Riportiamo come esempio in fig. 12 il termine di produzione dell'ossido di azoto NO, che sotto opportune ipotesi può anch'esso essere espresso in funzione del solo scalare conservato (si osservi che la scala delle ordinate è logaritmica). Cogliamo inoltre l'occasione per rimarcare ancora una volta che, mentre il termine sorgente *dello scalare conservato* è nullo, quello *delle specie chimiche* non lo è, vedi sez. 3.2.

In modo molto simile a quanto visto sopra, si possono ottenere tanto medie convenzionali che di Favre di tutte le grandezze di stato; per esempio

$$\overline{T} = \int_0^1 T(Z) P(Z) dZ \quad (142)$$

$$\tilde{Y}_i = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^1 \rho(Z) Y_i(Z) P(Z) dZ \quad (143)$$

dove  $T(Z)$  e  $Y_i(Z)$  denotano la temperatura e le concentrazioni di equilibrio come funzioni di  $Z$ . Si possono anche ottenere i momenti secondi delle grandezze di stato, per esempio:

$$\overline{T'^2} = \int_0^1 [T(Z) - \overline{T}]^2 P(Z) dZ = \overline{T^2} - \overline{T}^2 \quad (144)$$

$$\widetilde{Y_i''^2} = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^1 \rho(Z) [Y_i(Z) - \tilde{Y}_i]^2 P(Z) dZ = \widetilde{Y_i^2} - \tilde{Y}_i^2 \quad (145)$$

e similmente per momenti di ordine superiore. Nella (144)  $T(Z) - \bar{T}$  sta ad indicare una fluttuazione, la quale viene dunque pesata con la probabilità infinitesima  $P(Z) dZ$ ; analogamente per la (145).

In conclusione, l'approccio dello scalare conservato permette di fare a meno di calcolare il termine sorgente medio  $\bar{w}_i$  grazie a (*inter alia*) l'assunzione di equilibrio chimico. Quindi si assume che la combustione sia controllata dal processo di miscelamento, o diffusione (molecolare e turbolenta), dei due flussi di combustibile ed ossidante, piuttosto che dai tassi di reazione chimica. Quando questo approccio viene accoppiato con il modello  $k-\epsilon$ , esso implica la soluzione delle equazioni (98, 99 o 103, 132, 110, 111, 133), chiuse per mezzo dell'equazione (131). Incidentalmente, è il caso di notare che la valutazione dell'integrale (131) deve essere effettuata in ogni punto della griglia e (quando vengono adottati solutori di tipo iterativo) ad ogni passo; la sua accurata valutazione per quadratura numerica può richiedere parecchie centinaia di punti nello spazio di  $Z$  [37]. Di conseguenza, il tempo di calcolo è sostanzialmente aumentato rispetto ad analoghi calcoli di flussi inerti (tipicamente di un ordine di grandezza). Per ovviare a tale inconveniente sono state messe a punto particolari formulazioni [36, 38, 39, 40, 41].

È possibile a questo punto apprezzare pienamente l'utilità delle ipotesi introdotte, che hanno permesso di ridurre l'espressione della densità *istantanea* (nonché di tutte le altre grandezze di stato) ad una funzione di una sola grandezza, lo scalare conservato  $Z$ . Se infatti fossimo partiti dall'equazione di stato nella sua forma generale (6), un approccio basato sulla pdf avrebbe richiesto l'introduzione di una pdf *congiunta* di  $p, T, Y_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), indicata come  $P(p, T, Y_i, i = 1, 2, \dots, N)$ , definita in modo tale che

$$P(p, T, Y_i, i = 1, 2, \dots, N) dp dT \prod_{i=1}^N dY_i \quad (146)$$

rappresenti la probabilità si verifichino *simultaneamente* le seguenti condizioni: pressione compresa tra i valori  $p$  e  $p + dp$ , temperatura compresa tra i valori  $T$  e  $T + dT$ , frazioni di massa comprese tra i valori  $Y_i$  e  $Y_i + dY_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ). Volendo specificare una forma presunta di tale pdf congiunta, occorrerebbe conoscere (almeno) i valori dei momenti primi  $\bar{p}, \bar{T}, \bar{Y}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), e dei momenti secondi  $\overline{p'^2}, \overline{T'^2}, \overline{Y_i''^2}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ),  $\overline{p'T'}, \overline{p'Y_i'}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ),  $\overline{T'Y_i''}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ). Anche ammesso che ciò sia possibile, resterebbe il problema che per valutare il valore medio della funzione sorgente delle specie che compare nelle equazioni mediate delle specie (nonché altri termini nelle equazioni dei momenti secondi) occorrerebbe usare l'espressione

$$\bar{w}_i = \prod_{i=1}^N \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty w_i(p, T, Y_i, i = 1, 2, \dots, N) P(p, T, Y_i, i = 1, 2, \dots, N) dp dT dY_i \quad (147)$$

la quale tuttavia, a differenza della (131), non è affatto insensibile alla forma adottata per la pdf, in quanto l'integrando  $w_i(p, T, Y_i, i = 1, 2, \dots, N)$  è una funzione che varia di molti ordini di grandezza, vedi p.es. la fig. 12, a differenza della densità espressa come funzione di  $Z$ , fig. 9. Ad onor del vero, bisogna comunque dire che sotto l'ipotesi di flusso a bassa velocità si potrebbe ancora considerare la pressione termochimicamente costante e depennarla dalle equazioni (146,147), ma questo semplifica ben poco il problema.

Al fine di indicare il grado di affidabilità dei risultati ottenuti attraverso il modello dello scalare conservato – usando in particolare la forma proposta in [38, 39], riportiamo alcuni confronti di

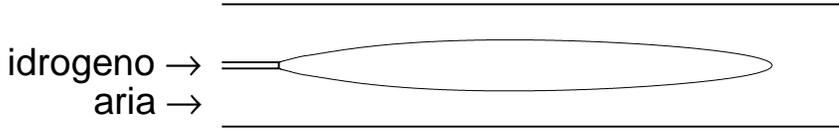


Figura 13: Schema della fiamma turbolenta nonpremiscelata studiata da Bilger e collaboratori (la linea sottile indica il luogo ove  $\tilde{Z} = Z_{st}$ ).

previsioni numeriche [42] con dati sperimentali. Quest'ultimi fanno riferimento alle estese indagini condotte da Bilger e collaboratori alla University of Sydney su fiamme idrogeno-aria senza ricircolazione. L'apparato sperimentale è schematizzato nella fig. 13; esso consiste di un ugello centrale (diametro  $D = 7.62$  mm) che inietta idrogeno ad una velocità di massa  $U = 151.1$  m/s in un flusso d'aria coassiale che fluisce ad una velocità di 15.1 m/s. Consideriamo qui il caso di un gradiente assiale della pressione media  $\bar{p}_x = -18$  Pa/m; ulteriori dettagli su questo caso sono riportati in [43, 44, 45, 46]. Le misure sono effettuate lungo l'asse di simmetria, ed a stazioni trasversali a  $x/D = 40, 80, 120$ ; è anche misurato il contorno stechiometrico medio.

Il modello computazionale impiegato invoca l'approssimazione di flusso parabolizzato<sup>14</sup>, ed adotta un'opportuna modifica del modello di turbolenza descritto nella sez. 4.3, cioè il modello  $k-\epsilon 1$  [28, 30] che è specialmente adatto a flussi assialsimmetrici<sup>15</sup>. Le previsioni numeriche sono effettuate su una griglia computazionale con 50 nodi in direzione radiale e ben 1000 nodi in direzione assiale, al fine di minimizzare gli errori di discretizzazione.

La fig. 14 riporta un confronto del contorno previsto e misurato del fronte stechiometrico medio, cioè del luogo ove  $\tilde{Z} = Z_{st}$ . Si osserva che il modello usato sovrastima un poco la lunghezza della fiamma; nella parte iniziale della fiamma si nota una ridotta diffusione radiale del combustibile (rispetto ai

<sup>14</sup>In flussi con una direzione dominante (p. es.  $x$ ), quindi in particolare senza ricircolazione, si può dimostrare che i termini diffusivi in cui compaiono derivate in  $x$  sono trascurabili rispetto agli altri, sulla base di considerazioni sugli ordini di grandezza. Una volta eliminati questi termini, la natura matematica delle equazioni di conservazione non è più ellittica ma parabolica. Per una discussione del grado di approssimazione di questa assunzione per flussi turbolenti vedi [47].

<sup>15</sup>Il modello  $k-\epsilon$  come descritto nella sez. 4.3 dà circa lo stesso tasso di diffusione quando è applicato a flussi piani ed assialsimmetrici, mentre è noto che questi ultimi mostrano un tasso sensibilmente ridotto [48]. Il modello  $k-\epsilon 1$  introduce una correzione per questo attraverso un'appropriata modifica di alcuni coefficienti del modello; può essere tuttavia applicato solo a flussi parabolizzati.

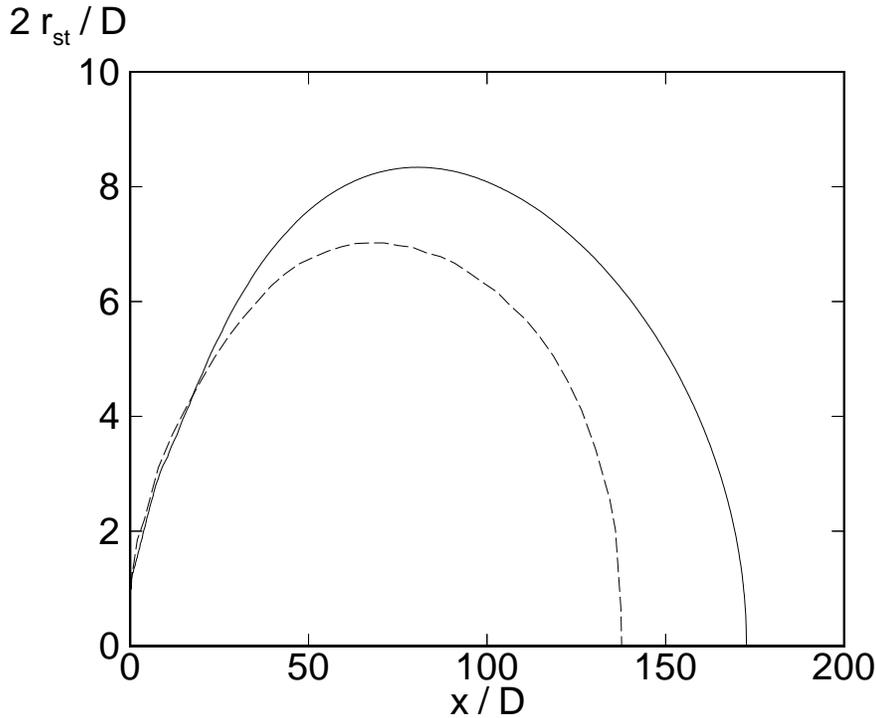


Figura 14: Posizione del fronte di fiamma stechiometrico medio ( $\tilde{Z} = Z_{st}$ ). Linea tratteggiata, risultati sperimentali (Kent e Bilger 1977); linea continua, previsioni numeriche.

dati sperimentali), che indica un tasso iniziale di miscelamento (tra i due flussi) sottostimato. Tale risultato è evidente anche dalla fig. 15 che presenta il comportamento sull'asse di simmetria della media dello scalare conservato; i risultati più a valle indicano invece uno stretto accordo. Questi aspetti sono confermati dai profili radiali presentati nella fig. 16. Il disaccordo nella porzione iniziale della fiamma deve probabilmente essere ascritto ai limiti del modello di turbolenza [49].

La velocità media sull'asse di simmetria è riportata in fig. 17; il confronto con i dati sperimentali è eccellente, sebbene il valore misurato a  $x/D = 40$  suggerisca che qualche problema possa sorgere anche per questa grandezza nella parte iniziale della fiamma, come mostrato più chiaramente dai profili radiali in fig. 18. I confronti riportati sin qui concernono momenti primi, cioè valori medi. Le assunzioni introdotte per effettuare la chiusura fluidodinamica coinvolgono invece gli sforzi ed i flussi di Reynolds, cioè momenti secondi; in particolare, quando si usa la forma parabolizzata delle equazioni di conservazione mediate, l'unico sforzo di Reynolds che compare nel modello matematico è lo sforzo di taglio  $\bar{\rho} \widetilde{u''v''}$ .

I profili radiali dello sforzo di taglio di Reynolds sono confrontati con i dati sperimentali in fig. 19<sup>16</sup>. L'accordo è meno stretto che per le grandezze medie, poiché questo termine è completamente modellizzato. Sebbene il modello adottato sovrastimi lo sforzo di taglio a  $x/D = 40$  e lo sottostimi nelle stazioni più a valle, specialmente a  $x/D = 120$ , tali confronti indicano argomenti a favore dell'approssimazione di trasporto secondo gradiente, in particolare nella forma adottata dal modello  $k-\epsilon$ .

Le assunzioni per effettuare la chiusura termochimica coinvolgono invece la forma della pdf, che è assegnata sulla base dei valori locali di  $\tilde{Z}$  e  $\widetilde{Z''^2}$ . Una verifica di queste assunzioni implicherebbe confronti di  $\tilde{Z}$  (già riportati), di  $\widetilde{Z''^2}$ , e della forma della pdf.

<sup>16</sup>Tali risultati sono presentati in forma cartesiana, anziché assialsimmetrica, per evitare la comparsa di una cuspidi per  $r = 0$ .

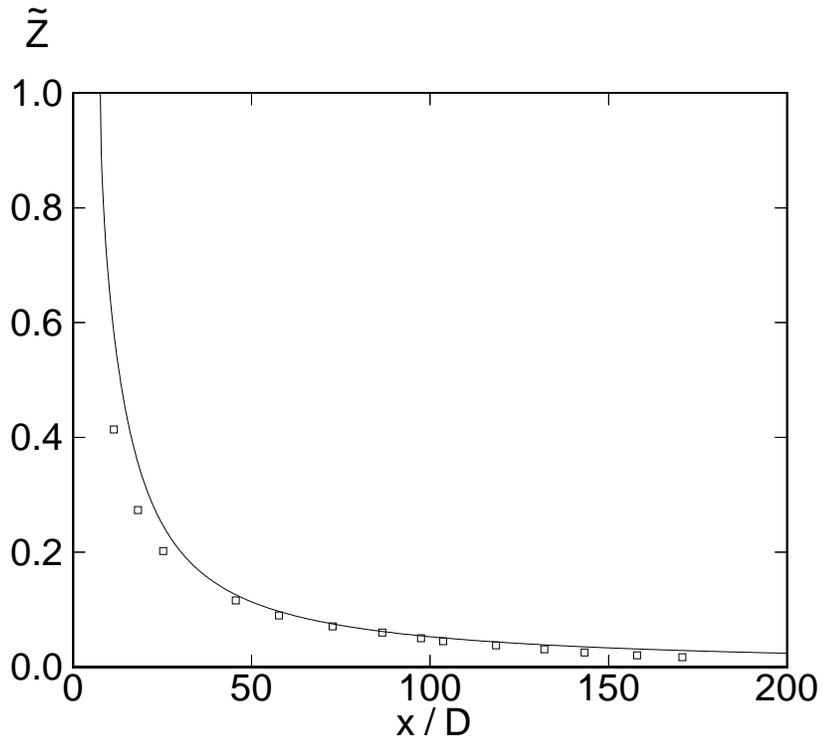


Figura 15: Andamento della media dello scalare conservato sull'asse di simmetria. Quadrati, dati sperimentali (Kent e Bilger 1973); linea continua, previsioni numeriche.

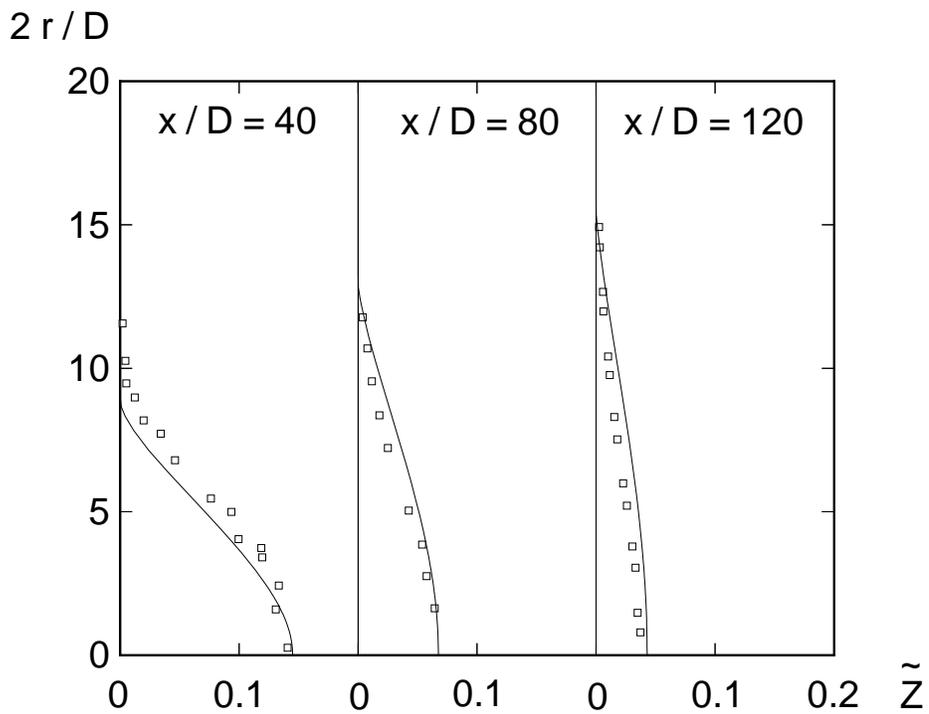


Figura 16: Profili radiali della media dello scalare conservato. Quadrati, dati sperimentali (Kent e Bilger 1973); linea continua, previsioni numeriche.

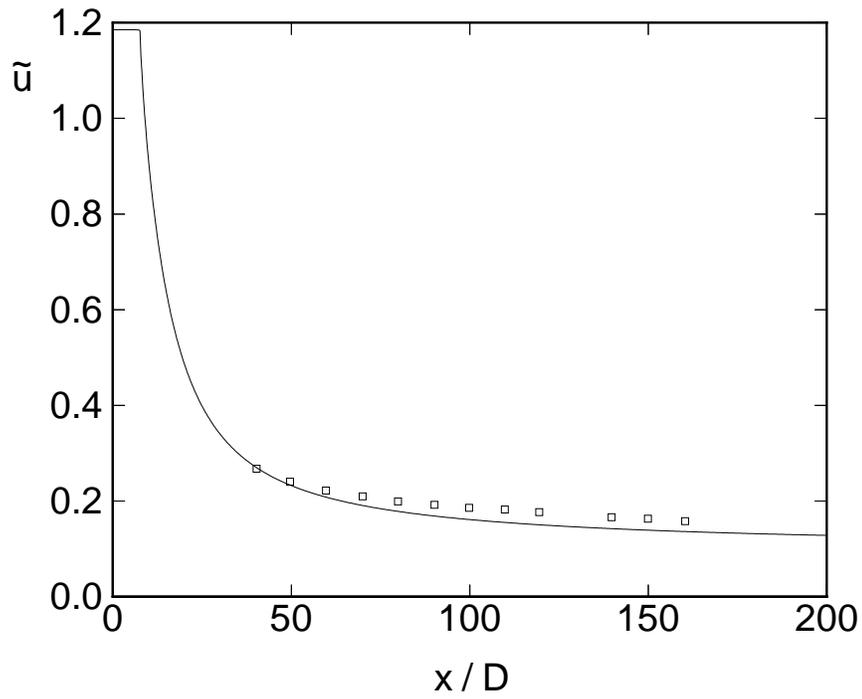


Figura 17: Andamento sull'asse di simmetria della velocità assiale media (resa adimensionale rispetto ad  $U$ ). Quadrati, dati sperimentali (Stårner e Bilger 1980); linea continua, previsioni numeriche.

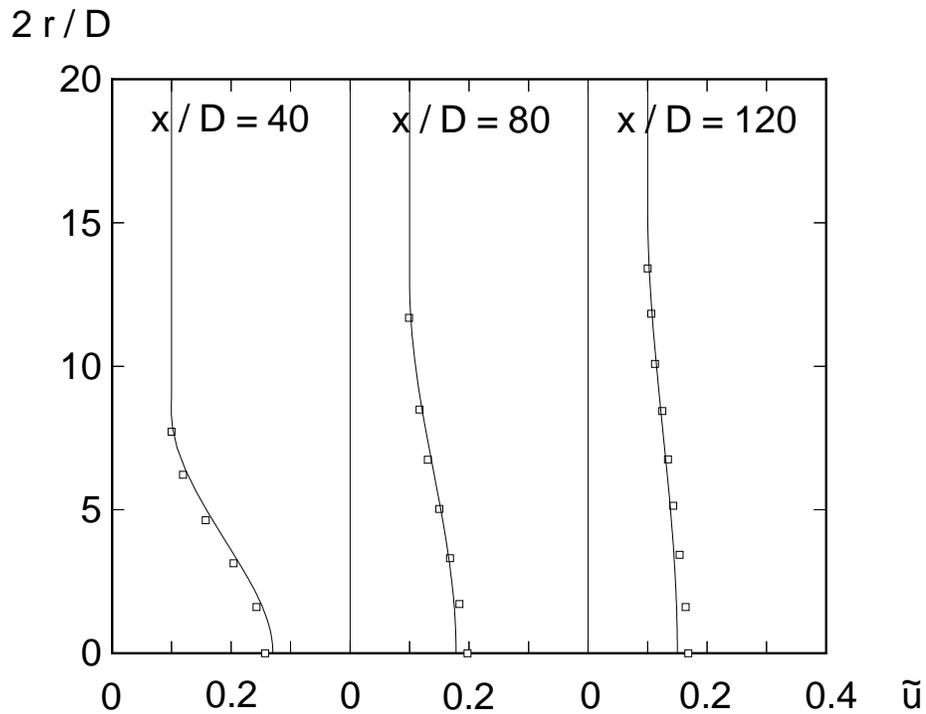


Figura 18: Profili radiali della velocità assiale media (resa adimensionale rispetto ad  $U$ ). Quadrati, dati sperimentali (Stårner e Bilger 1980); linea continua, previsioni numeriche.

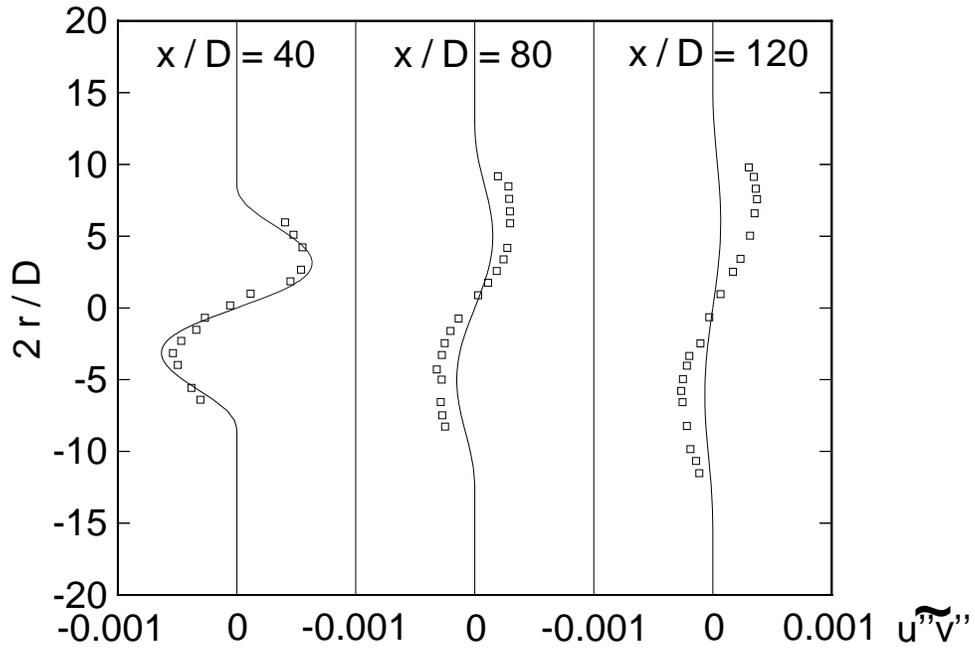


Figura 19: Profili radiali dello sforzo di taglio di Reynolds (reso adimensionale rispetto ad  $U^2$ ). Quadrati, dati sperimentali (Stårner e Bilger 1980); linea continua, previsioni numeriche.

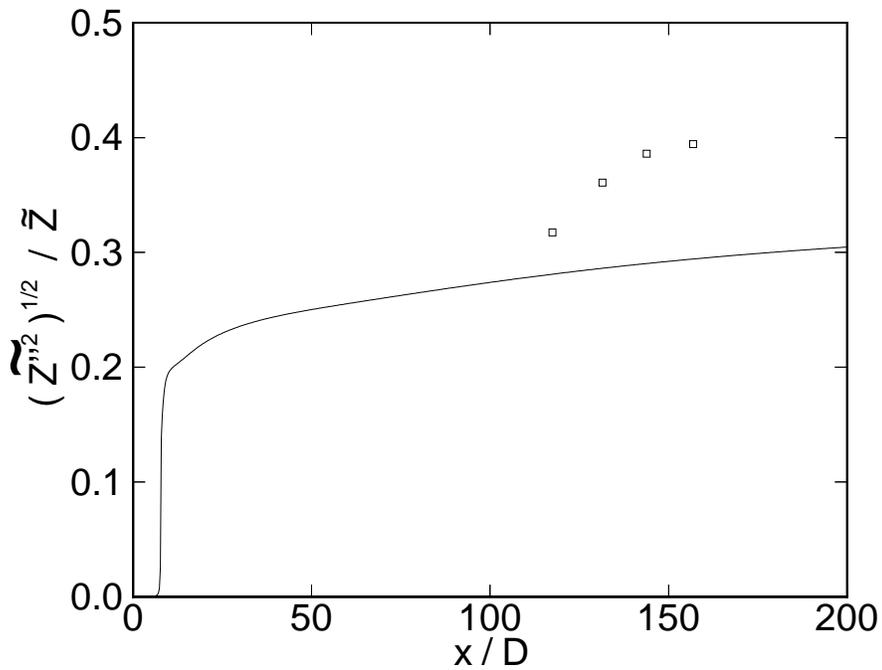


Figura 20: Andamento sull'asse di simmetria dell'intensità delle fluttuazioni dello scalare conservato. Quadrati, dati sperimentali (Kent e Bilger 1977); linea continua, previsioni numeriche.

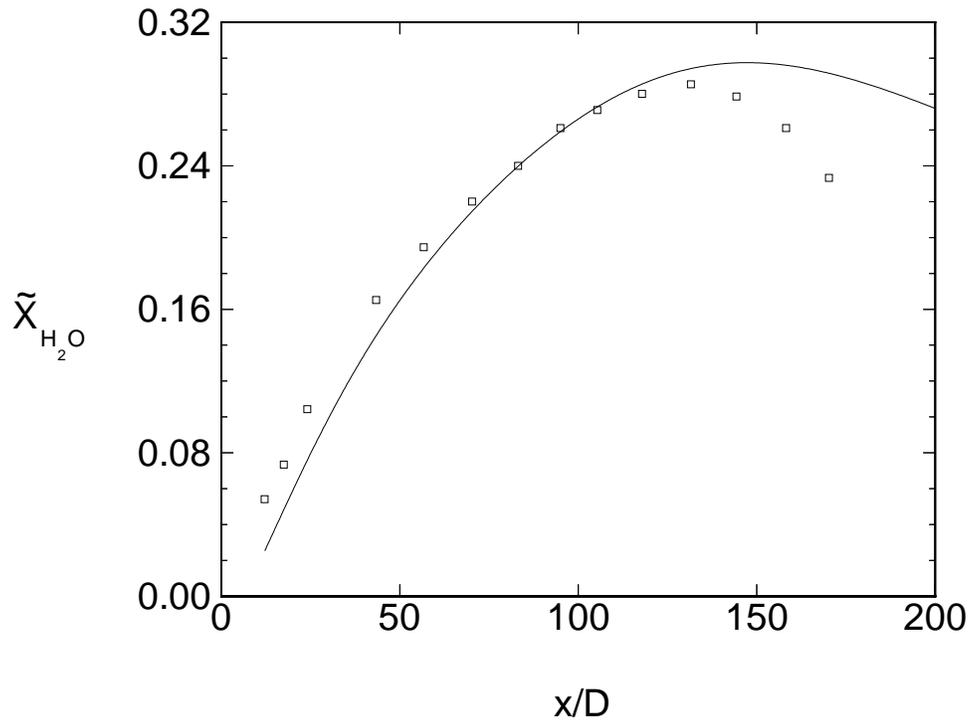


Figura 21: Andamento sull'asse di simmetria della frazione molare media del gas d'acqua. Quadrati, dati sperimentali (Kent e Bilger 1973); linea continua, previsioni numeriche.

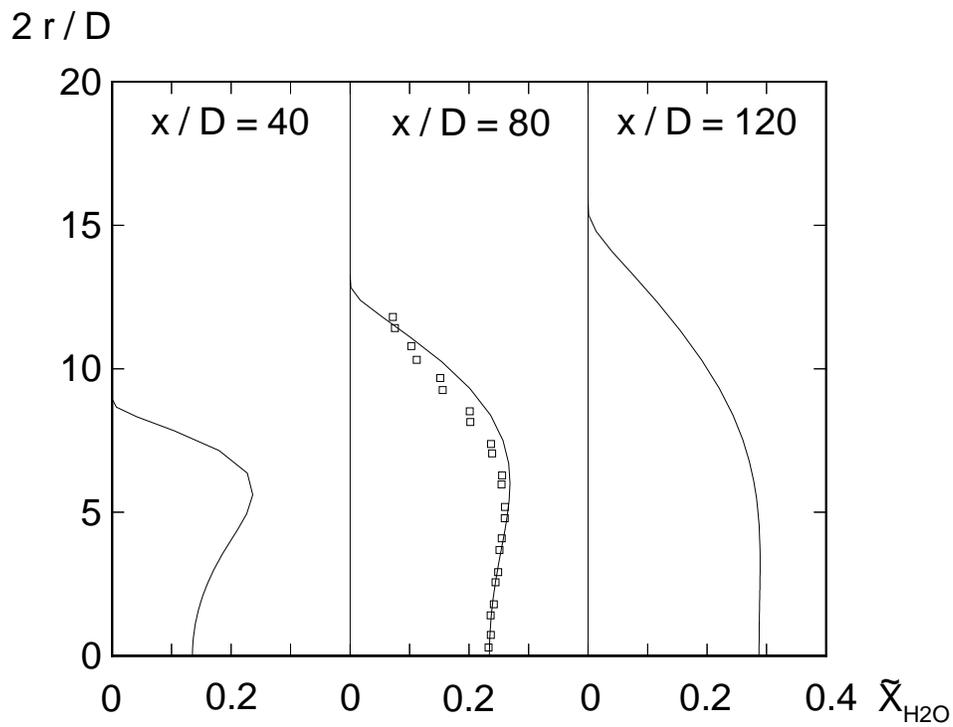


Figura 22: Profili radiali della frazione molare media del gas d'acqua. Quadrati, dati sperimentali (Kent e Bilger 1973); linea continua, previsioni numeriche.

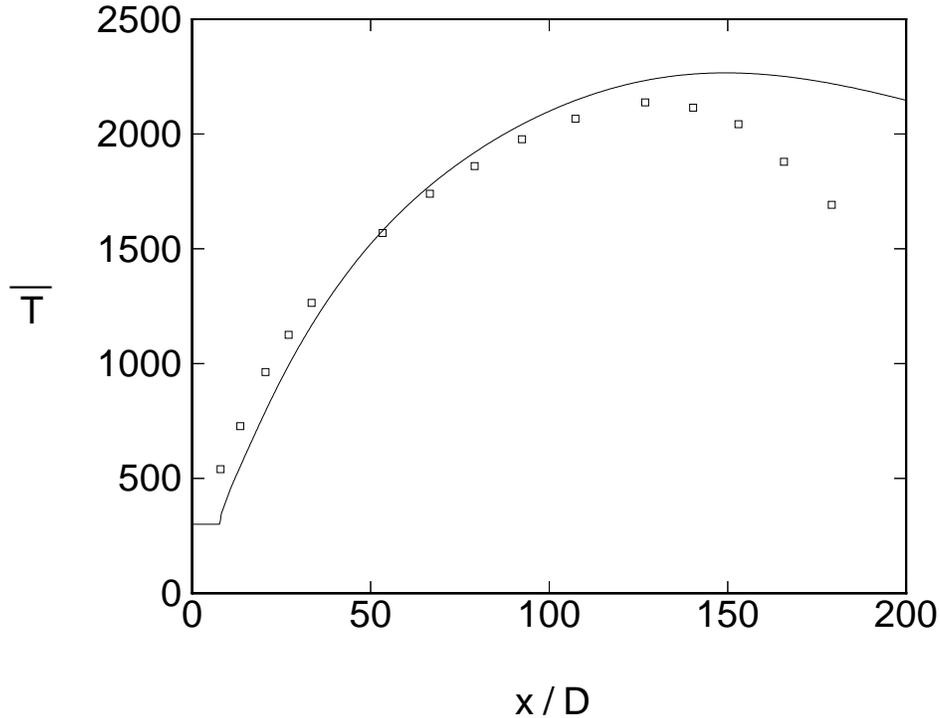


Figura 23: Andamento sull'asse di simmetria della temperatura media (in K). Quadrati, dati sperimentali (Kent e Bilger 1973); linea continua, previsioni numeriche.

Kent e Bilger [50] riportano dati limitati per l'intensità delle fluttuazioni dello scalare conservato sull'asse di simmetria, che sono confrontati con risultati ottenuti dal modello presente in fig. 20. L'accordo può essere considerato buono in vista del fatto che l'equazione (133) di  $\widetilde{Z}''^2$  è pesantemente modellata. Una verifica della forma della pdf non può essere effettuato nel caso test considerato a causa della mancanza di dati sperimentali. Riportiamo a titolo indicativo in fig. 24 alcuni confronti [38] per una quantità strettamente collegata, la pdf della temperatura, per una fiamma metano-aria [51], i quali indicano un equo accordo eccetto, ancora, per la parte iniziale della fiamma.

Valori medi (come pure momenti di ordine superiore) di tutte le grandezze di stato possono essere ottenuti applicando formule analoghe a (137,138). Riportiamo simili confronti per la media di Favre della frazione molare di  $H_2O$  e per la media convenzionale della temperatura. I valori sull'asse di simmetria della prima grandezza sono riportati in fig. 21, mentre in fig. 22 sono presentati profili radiali. Per la temperatura media, un confronto dei valori sull'asse di simmetria è riportato in fig. 23. Sia la fig. 21 che la fig. 23 mostrano che la grandezza media è sottostimata nella parte iniziale della fiamma, ed è sovrastimata per grandi valori di  $x/D$ . Questo comportamento è consistente con il fatto che le fig. 14 e 15 indicano un tasso di miscelamento sottostimato nella parte iniziale della fiamma (cioè nelle simulazioni l'aria non raggiunge l'asse di simmetria tanto quanto misurato, per cui la combustione è inibita). Per quanto concerne la parte finale della fiamma, la sovrastima della temperatura media può essere parzialmente spiegata con il fatto che la varianza  $\widetilde{Z}''^2$  è sottostimata in questa regione (fig. 20), in quanto l'effetto delle fluttuazioni è di ridurre la temperatura media.

I valori calcolati, mediati alla Favre, delle velocità e degli sforzi di Reynolds sono qui confrontati con misure effettuate mediante anemometria laser Doppler, che dà medie convenzionali. Sebbene il trascurare i differenti criteri di media non sia corretto in linea di principio, i modelli di turbolenza con chiusura basata sull'ipotesi di trasporto secondo gradiente sono fondati su assunzioni che ten-

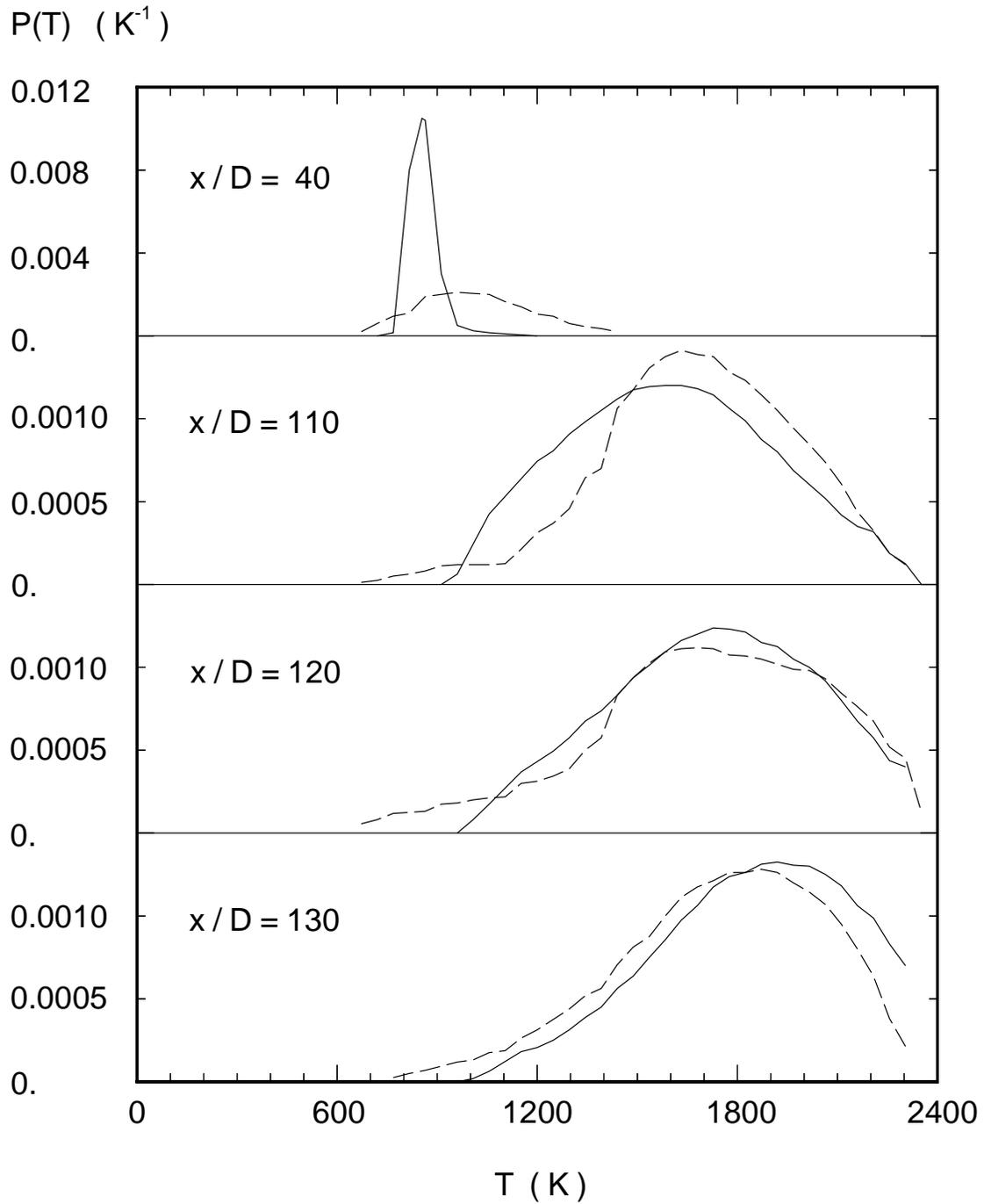


Figura 24: Fiamma metano/aria, pdf della temperatura a differenti stazioni assiali (dall'alto verso il basso): a)  $x/D = 40$ ; b)  $x/D = 110$ ; c)  $x/D = 120$ ; d)  $x/D = 130$ . Linea tratteggiata, dati sperimentali per una fiamma metano/aria (Lenz e Günther 1980); linea continua, previsioni numeriche.

gono in conto in maniera molto modesta di questa differenza, che inoltre è presumibilmente piccola per le componenti di velocità. Per le grandezze di stato invece queste differenze possono essere molto rilevanti.

Nel complesso, il modello presente è in grado, almeno per il flusso considerato, di generare previsioni che sono sufficientemente accurate da permettere di trarre utili conclusioni in sede di progetto di combustori.

## 7 Modello di combustione turbolenta premiscelata – l’approccio della variabile di progresso.

Nella sez. 6 è stato mostrato che nella combustione turbolenta *nonpremiscelata* le reazioni chimiche sono essenzialmente limitate dal tasso con cui i reagenti diffondono (sia in senso molecolare che turbolento) l’uno entro l’altro<sup>17</sup>. La combustione turbolenta *premiscelata* permette di superare questo limite, poiché combustibile ed ossidante entrano nella camera di combustione in una condizione già intimamente miscelata, così che la reazione può avere luogo alquanto rapidamente. Perciò, la combustione turbolenta premiscelata consente una reazione più veloce, o equivalentemente, camere di combustione più compatte (e leggere). Tuttavia, un serio ostacolo è il pericolo che i reagenti, entrando nella camera di combustione già pronti a reagire, possano dar luogo ad un rilascio di energia esplosivo a causa della temperatura molto alta che regna nella camera stessa. In ogni caso, risulta comunque difficile controllare la stabilità della combustione in quanto non vi è un punto preferenziale di ancoraggio della fiamma (a differenza di quanto avviene nel caso nonpremiscelato, in cui la fiamma si ancora nel luogo a composizione stechiometrica che si stabilisce tra i flussi di combustibile ed ossidante entranti in camera). Ciò ostacola l’applicazione di questo regime alla combustione continua, mentre esso trova un’importante applicazione nei motori alternativi (in particolare con alimentazione a carburatore, anche se i motori ad iniezione con precamera si trovano ad operare in condizioni non molto diverse – mentre i motori ad iniezione diretta operano in regime nonpremiscelato). Nondimeno, la combustione premiscelata è oggetto di crescente interesse per quanto riguarda le turbine a gas, poiché essa consente di contenere le emissioni di ossido di azoto NO, problema particolarmente sentito per i combustori aeronautici (infatti l’ossido di azoto attacca l’ozono, la cui concentrazione è prossima al massimo proprio alle altitudini di volo tipiche degli aerei). Recensioni sulla combustione premiscelata sono proposte da Bray [55], Pope [52], Veynante e Vervisch [36].

Poiché questo regime è intrinsecamente più difficile da trattare (esso richiede la valutazione del termine mediato di produzione delle specie, ed inoltre comporta fenomeni di trasporto scalare non secondo gradiente), i modelli per combustione turbolenta premiscelata attualmente sono in forma meno avanzata che non quelli per combustione nonpremiscelata [53]. In questa sezione riportiamo un semplice approccio [54, 55] il quale, per quanto intrinsecamente incapace di descrivere alcuni aspetti peculiari della combustione premiscelata, può essere usato per predire tali flussi con un certo successo.

In questa sezione, come nella precedente, introduciamo un certo numero di ipotesi semplificative;

---

<sup>17</sup>Le fiamme nonpremiscelate sono perciò anche chiamate fiamme *diffusive*. Tuttavia, occorre notare che, per reagenti *premiscelati*, la combustione della miscela combustibile/ossidante avviene solo se il suo rapporto di equivalenza  $\varphi$  ricade all’interno dei *limiti di infiammabilità* alla pressione operativa data. Per esempio, una miscela metano/aria alla pressione atmosferica brucia solo se  $0.5 \leq \varphi \leq 1.5$ . Se invece  $\varphi$  fosse maggiore di 1.5, la miscela iniettata p. es. in aria brucierebbe attraverso un processo controllato dalla diffusione, cioè come una fiamma nonpremiscelata, che si stabilirebbe nell’intorno della zona ove  $\varphi$ , per effetto della diluizione in aria, è prossimo all’unità. Se poi  $\varphi$  fosse minore di 0.5, non si potrebbe avere combustione alcuna (a meno di non ipotizzare che questa miscela sia iniettata in un’atmosfera ricca di metano).

1. Il flusso è a bassa velocità, il che implica che  $\Phi \cong 0$ ,  $h_0 \cong h$  e che la pressione può essere assunta termochimicamente costante.
2. La diffusione delle specie è ancora descritta in termini di un singolo coefficiente  $D$ , ed il numero di Lewis è assunto unitario; questo permette di eliminare il termine di diffusione differenziale dall'equazione dell'energia.
3. Il flusso è adiabatico, per cui il termine radiativo è trascurato, e non si ha scambio convettivo alle pareti solide.
4. Il sistema contiene solo quattro specie chimiche<sup>18</sup>, combustibile ( $i = 1$ ), ossidante ( $i = 2$ ), prodotti ( $i = 3$ ), ed un inerte ( $i = 4$ ), che quando si utilizza l'aria atmosferica è ovviamente l'azoto. I prodotti intermedi di reazione sono trascurati.
5. La reazione chimica è descritta per mezzo di un unico passo irreversibile, ed avviene in sottili lamine (vedi oltre).
6. Il peso molecolare  $W$  ed il calore specifico  $c_p$  della *miscela* sono assunti costanti. Queste ipotesi, apparentemente alquanto drastiche, sono ragionevolmente approssimate in molti casi. Se per esempio consideriamo la combustione di una miscela stechiometrica di metano ed aria (per la quale assumiamo per semplicità che per ogni molecola di  $O_2$  ve ne siano 3.76 di  $N_2$ ), si ha che il peso molecolare della miscela fresca è 27.6 kg/kmole, e quello della miscela completamente bruciata risulta uguale (ammesso che, coerentemente con l'ipotesi 5, il metano sia totalmente ossidato ad  $H_2O$  e  $CO_2$ ). L'approssimazione risulta invece meno buona per miscele (stechiometriche) di idrogeno e aria, per le quali si hanno 20.9 kg/kmole per miscela fresca, e 24.5 kg/kmole per miscela completamente bruciata<sup>19</sup>. La seconda parte dell'ipotesi, concernente il calore specifico della miscela, è in qualche modo legata alla prima; il calore specifico *per unità di massa*  $c_p$  può infatti essere scritto come il calore specifico *per unità molare* diviso il peso molecolare  $W$ . A questo riguardo, la teoria cinetica dei gas (pur con la sua limitata validità in questo contesto) indica infatti che il calore specifico *per unità molare* di un gas dipende solo dal numero di atomi che compongono la molecola. Ne consegue che l'ordine dell'approssimazione relativa alla costanza di  $c_p$  è paragonabile a quello relativo alla costanza di  $W$ .

Chiaramente, per flussi premiscelati non possiamo adottare l'assunzione di chimica in equilibrio; lo stato di equilibrio corrisponderebbe alla miscela completamente bruciata, fin dalla sua immissione in camera (la miscela fresca che viene immessa in camera è quindi evidentemente *non* in equilibrio, in quanto basta una perturbazione – una fonta di accensione – per farne variare drasticamente

---

<sup>18</sup> In realtà ciascuna di queste quattro specie chimiche potrebbe essere pensata come a sua volta costituita da più specie, *purché in rapporto di massa fissato*. Per esempio, il combustibile potrebbe essere una miscela di 70% di propano e 30% di butano (in massa, che potrebbe rappresentare una composizione tipica di un GPL). Ancora, nella combustione del metano, schematizzata secondo la reazione  $CH_4 + 2 O_2 \rightarrow CO_2 + 2 H_2O$  in base alla successiva ipotesi 5), i prodotti sono una miscela di  $CO_2$  ed  $H_2O$  in proporzione di massa  $W_{CO_2} : 2 W_{H_2O}$ . Infine, anche l'inerte presente nell'aria atmosferica potrebbe essere pensato, per maggior dettaglio, come una miscela di azoto ed argon, in proporzione di massa 1:0.017.

<sup>19</sup> Si noti che l'ipotesi di  $W$  costante non sarebbe assolutamente applicabile alla combustione nonpremiscelata, dove, come abbiamo notato introducendo l'ipotesi di pressione termochimicamente costante, il peso molecolare può variare fino a circa un ordine di grandezza. Nel caso di combustione premiscelata invece, essendo il rapporto di equivalenza uniforme, le uniche variazioni del peso molecolare medio sono dovute a reazioni di dissociazione–ricombinazione, in cui cioè a partire da due molecole di reagenti se ne formano tre di prodotti, o viceversa. In secondo luogo, nel caso si usi l'aria come ossidante, la presenza di un'alta percentuale di inerte (azoto) tende a mitigare le variazioni di  $W$ .

lo stato). Questo implica che non è possibile eludere il problema di valutare il tasso medio di produzione delle specie, con le sue associate difficoltà.

Affrontiamo dapprima il problema di determinare la densità media della miscela  $\bar{\rho}$ ; partiamo dall'espressione per la sua controparte istantanea  $\rho$ . Dopo aver assunto costanti  $p$  e  $W$ , l'equazione termica di stato (1) indica che la densità istantanea è ridotta ad una funzione della sola  $T$ . Quest'ultima può essere messa in relazione con la composizione della miscela (espressa in termini della frazione di massa delle 4 specie considerate) per mezzo dell'equazione calorica di stato (13). Notare che l'entalpia della miscela è uniforme su tutto il campo, a causa delle assunzioni 2) e 3), e per il fatto che le variazioni di energia cinetica sono trascurabili. Essa è data da

$$h = \sum_{i=1}^4 Y_i h_i(T) = \int_{T^0}^T \sum_{i=1}^4 Y_i c_{p,i} dT + \sum_{i=1}^4 Y_i \Delta h_{f,i}^0 = \int_{T^0}^T c_p dT + \sum_{i=1}^4 Y_i \Delta h_{f,i}^0 \quad (148)$$

ed avendo assunto  $c_p$  della *miscela* costante

$$h = c_p (T - T^0) + \sum_{i=1}^4 Y_i \Delta h_{f,i}^0 \quad (149)$$

Vogliamo ora esprimere, nel termine in cui compaiono le entalpie di formazione, le frazioni di massa delle specie in funzione di una sola di esse, che scegliamo come la frazione di massa dei prodotti,  $Y_3$ . Osserviamo innanzitutto che la frazione di massa dell'inerte è costante al valore che ha nella miscela fresca:

$$Y_4 = Y_{40} \quad (150)$$

Supponiamo poi che il singolo passo di reazione considerato (ipotesi 5) richieda  $a$  kg della specie 1 e  $b$  kg della specie 2 per formare un chilogrammo di prodotti (specie 3); ovviamente  $a + b = 1$ . Allora, se in una data condizione la frazione di massa dei prodotti è  $Y_3$ , la frazione di massa del combustibile sarà necessariamente

$$Y_1 = Y_{10} - a Y_3 \quad (151)$$

ed analogamente quella dell'ossidante

$$Y_2 = Y_{20} - b Y_3 \quad (152)$$

perché evidentemente sono necessari  $a Y_3$  kg di combustibile e  $b Y_3$  kg di ossidante per formare  $Y_3$  kg di prodotti. È allora possibile riscrivere la (149) come

$$h = c_p (T - T^0) + (Y_{10} - a Y_3) \Delta h_{f,1}^0 + (Y_{20} - b Y_3) \Delta h_{f,2}^0 + Y_3 \Delta h_{f,3}^0 + Y_{40} \Delta h_{f,4}^0 \quad (153)$$

ossia

$$h = c_p (T - T^0) + Y_{10} \Delta h_{f,1}^0 + Y_{20} \Delta h_{f,2}^0 + Y_{40} \Delta h_{f,4}^0 + (-a \Delta h_{f,1}^0 - b \Delta h_{f,2}^0 + \Delta h_{f,3}^0) Y_3 \quad (154)$$

L'ultima parentesi tonda rappresenta la variazione di entalpia che si ha nella formazione di un

chilogrammo di prodotti a partire dai reagenti <sup>20</sup>, ossia il calore che deve essere *fornito* al sistema (ricordiamo che in termodinamica il calore ha segno positivo quando è assorbito dal sistema) per fare avvenire la reazione, nelle condizioni di temperatura di riferimento ( $T = T^0$ ). Esso è ovviamente uguale ed opposto al calore che viene *rilasciato* nella formazione di un chilogrammo di prodotti, e che indichiamo con  $\Delta h_p$  (in chimica viene infatti adottata la convenzione secondo la quale è considerato positivo il calore rilasciato). Possiamo perciò scrivere

$$h = c_p (T - T^0) + Y_{10} \Delta h_{f,1}^0 + Y_{20} \Delta h_{f,2}^0 + Y_{40} \Delta h_{f,4}^0 - \Delta h_p Y_3 \quad (155)$$

Introduciamo una  $h^*$  definita come

$$h^* = h + c_p T^0 - Y_{10} \Delta h_{f,1}^0 - Y_{20} \Delta h_{f,2}^0 - Y_{40} \Delta h_{f,4}^0 \quad (156)$$

che ovviamente è ancora una costante. Possiamo quindi scrivere

$$h^* = c_p T - Y_3 \Delta h_p \quad (157)$$

che mette in relazione  $T$  con  $Y_3$ . Indichiamo ora con il suffisso 0 le condizioni che si riferiscono alla miscela fresca, e con  $\infty$  quelle che si riferiscono alla miscela completamente bruciata. Introduciamo la *variabile di progresso*  $c$  attraverso la relazione

$$c = \frac{Y_3}{Y_{3,\infty}} \quad (158)$$

dove  $Y_{3,\infty}$  denota la frazione di massa dei prodotti nella miscela completamente bruciata. La variabile di progresso esprime la misura in cui il combustibile e l'ossidante contenuti nella miscela hanno reagito per formare prodotti, e spazia tra i valori zero (miscela fresca) ed uno (miscela completamente bruciata). Introduciamo inoltre la notazione

$$\tau = \frac{\Delta h_p}{h^*} Y_{3,\infty} \quad (159)$$

$\tau$ , detto parametro di rilascio di calore, dipende dai reagenti che compongono la miscela, ed in particolare dal suo rapporto di equivalenza, per cui possiamo scrivere (*una volta specificati* combustibile ed ossidante)

$$\tau = \tau(\varphi) \quad (160)$$

L'eq. (157) può quindi essere usata per ricavare  $T$  come

$$T = \frac{h^*}{c_p} (1 + \tau c) \quad (161)$$

Se in questa espressione poniamo  $c = 0$  (miscela fresca) dobbiamo ovviamente ottenere a primo membro la temperatura  $T_0$  della stessa (da non confondere con la temperatura di riferimento  $T^0$ , alla quale sono valutate le entalpie di formazione delle specie chimiche), per cui deve essere

---

<sup>20</sup> Si noti che questa è cosa diversa dall'entalpia di formazione della specie 3 ( $\Delta h_{f,3}^0$ ), che è la quantità di calore che occorre fornire al sistema per produrre un'unità di massa della specie 3 a partire *dagli elementi* che la compongono; quella indicata tra parentesi quadre nella (154) è invece la quantità di calore che occorre fornire al sistema per formare un'unità di massa della specie 3 a partire *dai reagenti*, cioè nel nostro caso le specie 1 e 2. Si osservi come questa quantità è tipicamente negativa (infatti nella combustione si ha formazione di prodotti con rilascio di calore). Ad esempio, il calore *di formazione* della  $\text{CO}_2$  fa riferimento alla reazione di formazione  $\text{C(s)} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$  (che produce  $\text{CO}_2$  a partire dagli elementi carbonio – solido – ed ossigeno); ma la  $\text{CO}_2$  potrebbe invece essere prodotta a partire dai reagenti  $\text{CO}$  e  $\text{O}_2$  secondo la reazione  $\text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ , e corrispondentemente può essere definito un calore che deve essere *fornito* al sistema per far avvenire la reazione a partire dai reagenti  $\text{CO}$  ed  $\text{O}_2$ .

$$\frac{h^*}{c_p} = T_0 \quad (162)$$

La (161) può quindi essere riscritta come

$$T = T_0 (1 + \tau c) \quad (163)$$

Se poi in questa espressione poniamo  $c = 1$  (miscela completamente bruciata), dobbiamo evidentemente ottenere a primo membro la temperatura corrispondente  $T_\infty$ . Quindi al parametro  $\tau$  può essere attribuito il significato

$$\tau = \frac{T_\infty}{T_0} - 1 \quad (164)$$

che richiama la dipendenza osservata a proposito della (160). Quindi, con

$$\rho_0 = \frac{pW}{R^0 T_0} \quad (165)$$

che denota la densità della miscela fresca, l'equazione termica di stato (1) può essere scritta come

$$\rho = \frac{\rho_0}{1 + \tau c} \quad (166)$$

Osserviamo che questa può essere riscritta come

$$\rho + \tau \rho c = \rho_0 \quad (167)$$

Mediando si ottiene

$$\bar{\rho} + \tau \bar{\rho} \bar{c} = \rho_0 \quad (168)$$

e ricordando la definizione (59) di media di Favre

$$\bar{\rho} + \tau \bar{\rho} \tilde{c} = \rho_0 \quad (169)$$

dalla quale si ottiene infine

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_0}{1 + \tau \tilde{c}} \quad (170)$$

Questa permette di ottenere  $\bar{\rho}$  una volta che la media della variabile di progresso  $\tilde{c}$  è nota. Si noti che, a differenza del regime nonpremiscelato, non è stato necessario introdurre una pdf per ricavare l'espressione della densità media. Questa circostanza è determinata dal fatto che, grazie in particolare alle ipotesi di peso molecolare della miscela  $W$  uniforme, e di  $c_p$  ed  $h$  uniformi (che ha permesso di esprimere  $T$  come una funzione lineare di  $c$ , grazie anche all'ipotesi sulla presenza di sole 4 specie), la densità istantanea (166) è stata espressa come il rapporto tra una costante ed una funzione *lineare* di  $c$  (mentre questo non avviene per la  $\rho(Z)$  di equilibrio nel caso di combustione nonpremiscelata, vedi fig. 9).

Per poter applicare la (170), occorre determinare il valore locale di  $\tilde{c}$ , che può essere ricavato risolvendo un'equazione di conservazione mediata, che si ottiene dividendo la (101), scritta per la specie 3, per  $Y_{3,\infty}$ , in base alla definizione (158) di variabile di progresso, cioè

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_k} \right] + \bar{w} \quad (171)$$

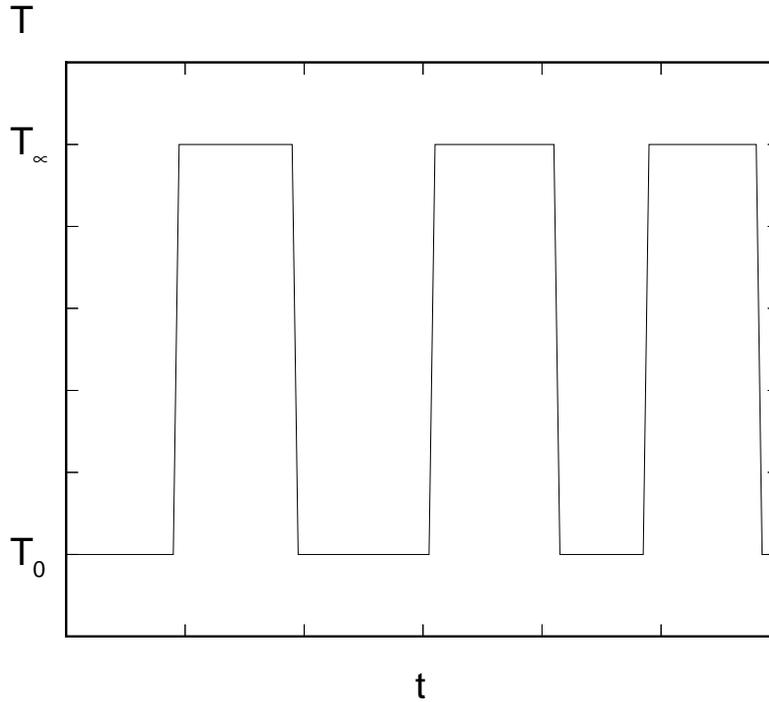


Figura 25: Tipico andamento temporale della temperatura istantanea in un punto di una camera di combustione con reagenti premiscelati.

con  $\bar{w} = \bar{w}_3/Y_{3,\infty}$ ; il numero di Schmidt turbolento  $\sigma_c$  è normalmente preso come 0.7. Notiamo che l'eq. (171) implica l'assunzione di trasporto secondo gradiente, che è discutibile per flussi premiscelati (vedi sez. 21). Essa contiene inoltre il termine di produzione mediato  $\bar{w}$  che è difficile da modellare a causa dell'estrema nonlinearietà dell'espressione di Arrhenius.

Per esprimere  $\bar{w}$  adottiamo un semplice modello, in cui si assume che la combustione siano controllata dal miscelamento, più che dalla cinetica chimica. Dobbiamo a questo scopo approfondire la seconda parte dell'ipotesi 5 (combustione in sottili lamine) avanzata all'inizio della presente sezione. Se inseriamo una sonda per misurare la temperatura istantanea in un dato punto di una camera di combustione, questa registrerà nel tempo un andamento che ha tipicamente l'aspetto riportato nella fig. 25. Si osserva che la temperatura per la maggior parte del tempo assume l'uno o l'altro dei valori limite  $T_0$  (miscela fresca) o  $T_\infty$  (miscela completamente bruciata), mentre la frazione di tempo in cui la temperatura istantanea assume valori intermedi è decisamente molto piccola. Questo vuol dire che il volume della camera di combustione è prevalentemente occupato da regioni di miscela fresca e regioni di miscela completamente bruciata, mentre il volume occupato da miscela reagente è molto piccolo, ossia i due tipi di regioni appena citati sono separati da interfacce reagenti molto sottili (*lamine*), vedi fig. 26. Se quindi si assume che la miscela reagente sia composta essenzialmente di pacchetti di gas fresco e completamente bruciato, allora è ragionevole assumere che  $\bar{w}$  sia proporzionale alla probabilità di un'interazione tra pacchetti freschi e completamente bruciati (che porta ad un'accensione della miscela fresca) moltiplicata la frequenza di tali interazioni (o equivalentemente, diviso il tempo tra due successive interazioni) [56]. In questo quadro, la miscela con un dato  $\tilde{c}$  consiste di una frazione  $\tilde{c}$  di pacchetti completamente bruciati ed una frazione  $(1 - \tilde{c})$  di pacchetti freschi, per cui la probabilità di interazione è il prodotto  $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ ; per il tempo di interazione possiamo ancora assumerlo proporzionale a  $\tilde{k}/\tilde{\epsilon}$  (si ricordi che  $\tilde{\epsilon}$  ha dimensioni di un'energia per unità di massa diviso un tempo), il che porta all'equazione

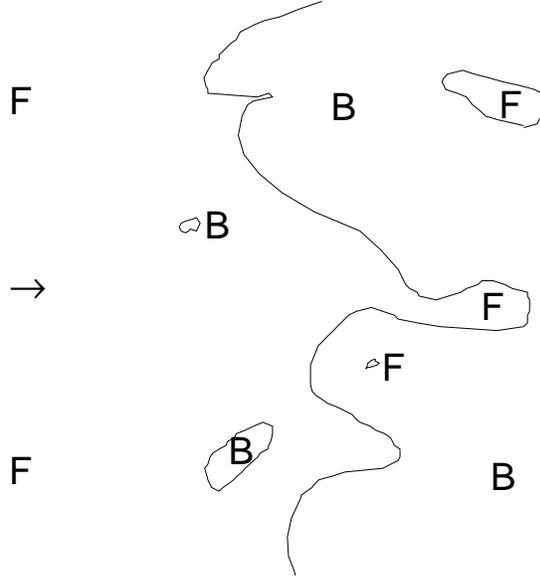


Figura 26: Tipico aspetto istantaneo di un fronte di fiamma premiscelato, con regioni di miscela fresca (F) e regioni di miscela completamente bruciata (B), separate da sottili lamine reagenti (linee).

$$\bar{w} = C \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (172)$$

dove  $C$  è una costante di modellizzazione. Questo completa la chiusura termochimica delle equazioni di conservazione mediate.

Quindi, l'approccio della variabile di progresso implica la soluzione delle eq. (98,99 oppure 103, 110, 111, e 171), con le assunzioni (170) e (172) per la chiusura termochimica. Non è richiesta un'equazione di conservazione per la varianza della variabile di progresso perché, come già osservato, fino a questo punto non è stato necessario introdurre una pdf, grazie alle ipotesi adottate.

Una volta noto il valore locale di  $\tilde{c}$  è possibile ricavare la media *di Favre*<sup>21</sup> della temperatura moltiplicando l'eq. (163), lineare in  $c$ , per  $\rho$

$$\rho T = T_0 (\rho + \tau \rho c) \quad (174)$$

e mediando, ricordando ancora la definizione di media di Favre (59)

$$\overline{\rho T} = T_0 (\overline{\rho} + \tau \overline{\rho c}) \quad (175)$$

$$\overline{\rho \tilde{T}} = T_0 (\overline{\rho} + \tau \overline{\rho \tilde{c}}) \quad (176)$$

---

<sup>21</sup>Dalla (163) si può immediatamente ricavare un'espressione per la media *convenzionale* (di Reynolds) della temperatura:

$$\bar{T} = T_0 (1 + \tau \bar{c}) \quad (173)$$

ma il valore della media convenzionale della variabile di progresso che compare a secondo membro,  $\bar{c}$ , non è disponibile, a differenza di  $\tilde{c}$ , per cui questa espressione non è utilizzabile a questo stadio; vedi oltre, eq. (193).

da cui

$$\tilde{T} = T_0 (1 + \tau \tilde{c}) \quad (177)$$

In modo analogo, è possibile mediare le relazioni *lineari* (158,151,152) per ottenere le medie di Favre della frazione di massa di prodotti, combustibile e ossidante

$$\tilde{Y}_3 = Y_{3,\infty} \tilde{c} \quad (178)$$

$$\tilde{Y}_1 = Y_{10} - a \tilde{Y}_3 = Y_{10} - a Y_{3,\infty} \tilde{c} \quad (179)$$

$$\tilde{Y}_2 = Y_{20} - b \tilde{Y}_3 = Y_{20} - b Y_{3,\infty} \tilde{c} \quad (180)$$

mentre la media della frazione di massa dell'inerte è ovviamente uniforme, con valore  $Y_{40}$ .

Per ricavare invece le varianze di temperature e frazioni di massa, nonché per ricavare le medie convenzionali delle stesse grandezze, è necessario introdurre una pdf della variabile di progresso  $P(c)$ , che ne descriva il comportamento statistico. In considerazione del fatto che la miscela reagente è composta da pacchetti di miscela fresca ( $c = 0$ ), di miscela completamente bruciata ( $c = 1$ ), e di miscela che subisce reazione ( $0 < c < 1$ ), la pdf della variabile di progresso può essere decomposta esplicitamente nella somma di questi tre contributi, cioè,

$$P(c) = \alpha \delta(c) + \beta \delta(1 - c) + \gamma f(c) \quad (181)$$

dove  $\alpha$  indica la frazione temporale in cui la variabile di progresso (nel punto considerato) ha un valore uguale a zero; in modo simile  $\beta$  è la frazione temporale per  $c = 1$  e  $\gamma$  per i valori  $0 < c < 1$  ( $\delta$  denota un impulso di Dirac). La pdf  $f(c)$  è chiamata pdf del modo reagente. Tutte queste grandezze sono funzioni delle coordinate spaziali, sebbene questa dipendenza non sia stata qui indicata per concisione; vedi oltre, eq. (191). Le pdf  $P(c)$  e  $f(c)$  sono normalizzate individualmente così che

$$\int_0^1 P(c) dc = 1 \quad (182)$$

$$\int_{0+}^{1-} f(c) dc = 1 \quad (183)$$

le quali danno il risultato

$$\alpha + \beta + \gamma = 1 \quad (184)$$

Sotto l'assunzione di combustione in sottili lamine è  $\gamma \ll 1$ , per cui la pdf (181) si riduce a

$$P(c) \cong \alpha \delta(c) + \beta \delta(1 - c) \quad (185)$$

con

$$\alpha + \beta \cong 1 \quad (186)$$

Questi due coefficienti possono essere stimati per mezzo del valore locale di  $\tilde{c}$ , noto dalla soluzione della (171), esprimendolo, in maniera analoga alla (143), come

$$\tilde{c} = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^1 c \rho(c) P(c) dc \cong \frac{\beta \rho_\infty}{\bar{\rho}} = \beta \frac{1 + \tau \tilde{c}}{1 + \tau} \quad (187)$$

poiché la pdf è non nulla solo per  $c = 0$  (dove però l'integrando ovviamente si annulla) e per  $c = 1$  (dove  $\rho = \rho_\infty$ ). Ne segue che

$$\beta \cong \frac{(1 + \tau) \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}} \quad (188)$$

$$\alpha \cong 1 - \beta = \frac{1 - \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}} \quad (189)$$

con l'ultima ottenuta attraverso la condizione di normalizzazione espressa dalla (186). La pdf della variabile di progresso può quindi essere scritta esplicitamente come

$$P(c) \cong \frac{1 - \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}} \delta(c) + \frac{(1 + \tau) \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}} \delta(1 - c) \quad (190)$$

Per quanto detto, la (190) va interpretata come una

$$P(c) = P[c; \tilde{c}(\mathbf{x})] \quad (191)$$

Allora, la media convenzionale della temperatura, calcolata come

$$\bar{T} = \int_0^1 T_0 (1 + \tau c) P(c) dc \quad (192)$$

risulta essere

$$\bar{T} = T_0 \frac{1 + 2\tau \tilde{c} + \tau^2 \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}} \quad (193)$$

In modo simile, la varianza convenzionale della temperatura risulta

$$\overline{T'^2} = T_0^2 \frac{\tau^2 (1 + \tau) \tilde{c} (1 - \tilde{c})}{(1 + \tau \tilde{c})^2} \quad (194)$$

La forma (190) consente tra l'altro di calcolare il valore limite della varianza della grandezza scalare  $c$  quando appunto si assume che la pdf sia data da due soli picchi di Dirac agli estremi:

$$\widetilde{c'^2} = \frac{\overline{\rho c'^2}}{\bar{\rho}} = \frac{\rho_0}{\bar{\rho}} \int_0^1 \frac{(c - \tilde{c})^2}{1 + \tau c} P(c) dc = (1 + \tau \tilde{c}) \left( \alpha \tilde{c}^2 + \beta \frac{(1 - \tilde{c})^2}{1 + \tau} \right) = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (195)$$

In questo approccio la dipendenza dai particolari reagenti considerati è condensata nel valore del parametro di rilascio di calore  $\tau$ , che assume valori che vanno da 3 a 9 (a seconda dei reagenti utilizzati nella miscela fresca, e del suo rapporto di equivalenza); non viene tenuto in conto esplicitamente il meccanismo di reazione, poiché si presume che la reazione sia controllata dal miscelamento piuttosto che dalla cinetica chimica. L'unica costante di modellizzazione è  $C$ , per la quale purtroppo non esiste un valore accettato universalmente come ottimale; si assumono generalmente valori compresi tra 4 e 32. La mancanza di un valore univocamente definito per questa costante è evidentemente un inconveniente fondamentale di questo approccio di modellizzazione. Incidentalmente, questo modello è molto simile al modello 'eddy break-up' di Spalding [57], in cui la dipendenza del tasso medio di reazione dal prodotto  $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$  è invece preso come una radice quadrata.

L'approccio della variabile di progresso è qui applicato al calcolo di una fiamma premiscelata oggetto di indagini sperimentali da parte di Yoshida [58]. L'apparato sperimentale è schematizzato in fig. 27. Una miscela di gas naturale ed aria con rapporto di equivalenza  $\varphi = 0.8$  è scaricata da un tubo

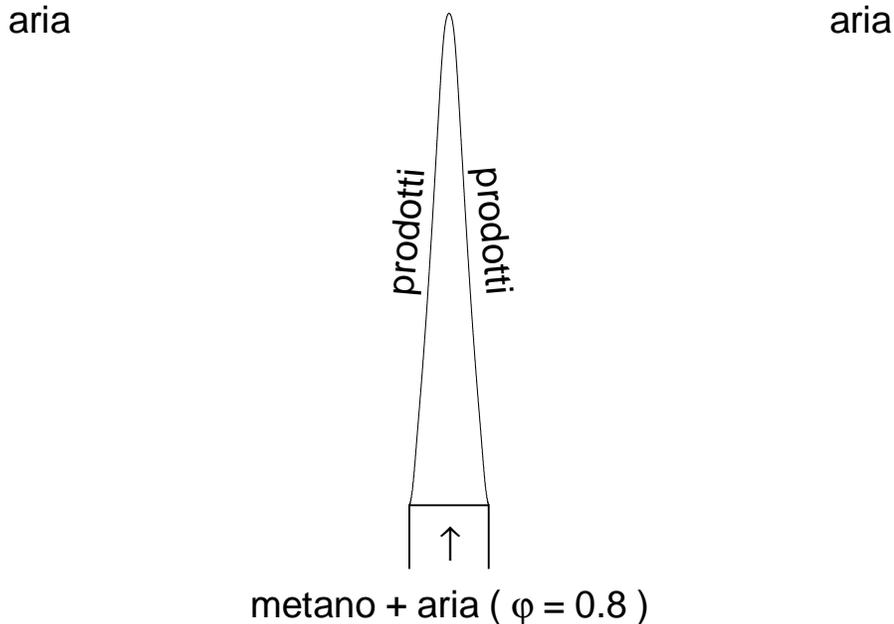


Figura 27: Schema della fiamma turbolenta premiscelata investigata da Yoshida (la linea sottile indica il luogo ove  $\tilde{c} = 0.5$ ).

verticale di diametro  $D = 40$  mm, ad una velocità di massa  $U = 5.44$  m/s, in aria in quiete. Il miscelamento tra il flusso premiscelato e l'aria implica un campo di entalpia non uniforme, per cui a rigore non si ha una fiamma premiscelata pura; viene perciò adottata un'opportuna estensione dell'approccio riportato sopra, secondo le linee di Bray *et al.* [59]<sup>22</sup>. Sono ottenuti profili radiali alle stazioni  $x/D = 1.75, 2.375, e 3$ .

Questo caso test è modellizzato [42] adottando l'approssimazione di flusso parabolizzato (vedi nota 10), ed il modello di turbolenza  $k-\epsilon$  (vedi nota 11). Si assume che il gradiente assiale della pressione media sia dato dal battente idrostatico. Lo stesso caso test è simulato da Davé e Kollmann [60], per quanto con un modello più raffinato che tiene conto del trasporto non secondo gradiente. La fig. 28 riporta i profili radiali della componente assiale della velocità media alle tre stazioni trasversali considerate.

Si ottiene un accordo soddisfacente scegliendo il valore  $C = 8$  (lo stesso adottato da Davé e Kollmann) per la costante nell'eq. (172), sebbene la velocità sia leggermente sovrastimata sull'asse di simmetria. Questo accordo non implica che la turbolenza sia modellizzata con pieno successo, come si può vedere dalla fig. 29, in cui sono presentati i profili dello sforzo di taglio di Reynolds. È evidente che questa grandezza è prevista in modo molto modesto, il che indica limiti nell'applicabilità del modello. Incidentalmente, altri risultati numerici [60] mostrano un simile disaccordo per  $\widetilde{u''v''}$  (sebbene in misura un poco minore), con andamenti radiali analoghi alle previsioni qui presentate. L'accordo per  $\tilde{u}$  deve perciò essere considerato in qualche misura un segno della moderata sensibilità dei momenti primi alla modellizzazione adottata per i momenti secondi. La figura 30 presenta profili radiali della media (convenzionale) della differenza di temperatura tra il flusso e

<sup>22</sup>In questo caso le variabili di stato sono ridotte ad una funzione di *due* grandezze, la variabile di progresso ed un'entalpia adimensionale. Quest'ultima quantità è trattata come uno scalare conservato, e si introducono equazioni modellate per la sua media e varianza per determinare la sua pdf.

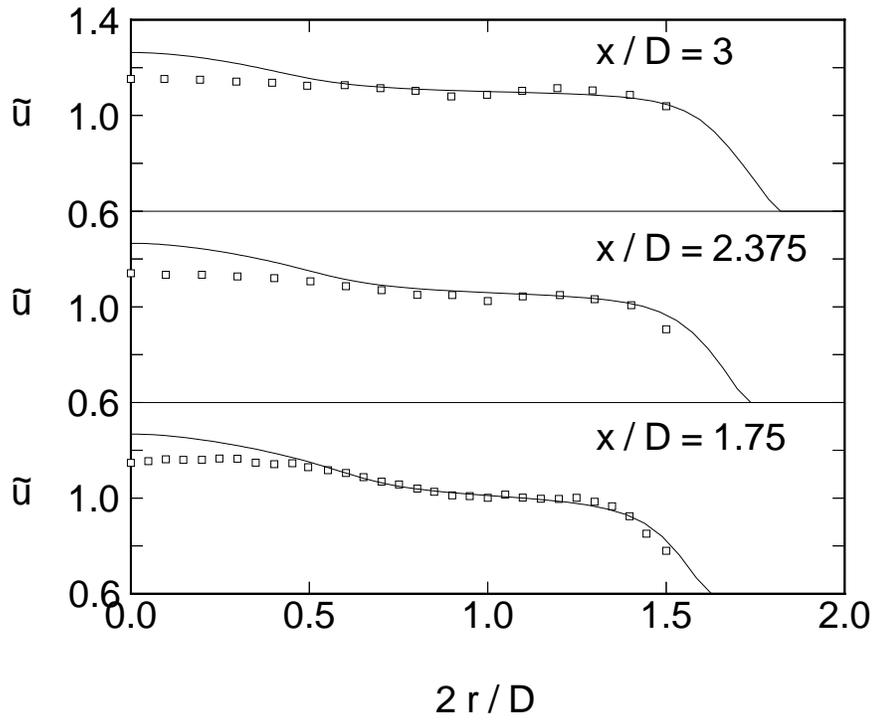


Figura 28: Profili radiali della velocità assiale media (resa adimensionale rispetto ad  $U$ ). Quadrati, risultati sperimentali (Yoshida 1981); linea continua, previsioni numeriche.

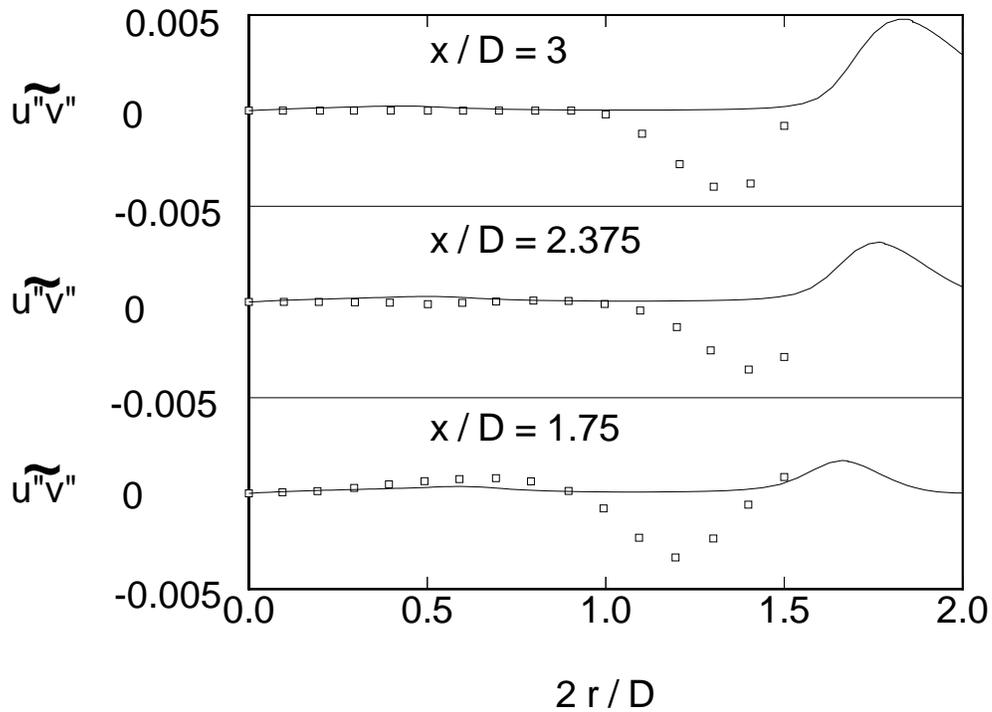


Figura 29: Profili radiali dello sforzo di taglio di Reynolds (reso adimensionale con  $U^2$ ). Quadrati, dati sperimentali (Yoshida 1981); linea continua, previsioni numeriche.

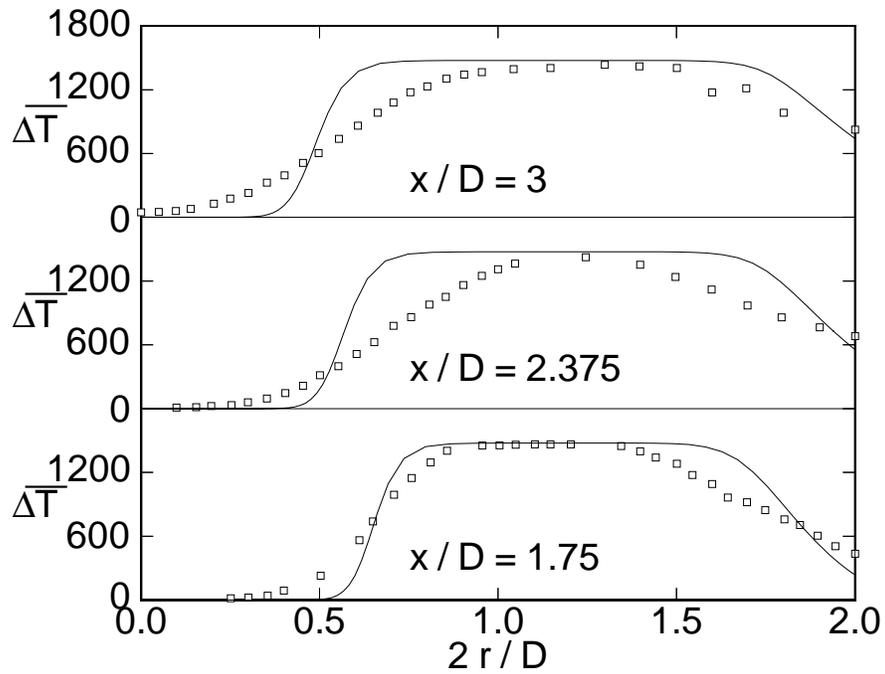


Figura 30: Profili radiali della differenza di temperatura media rispetto all'aria ambiente (in K). Quadrati, dati sperimentali (Yoshida 1981); linea continua, previsioni numeriche.

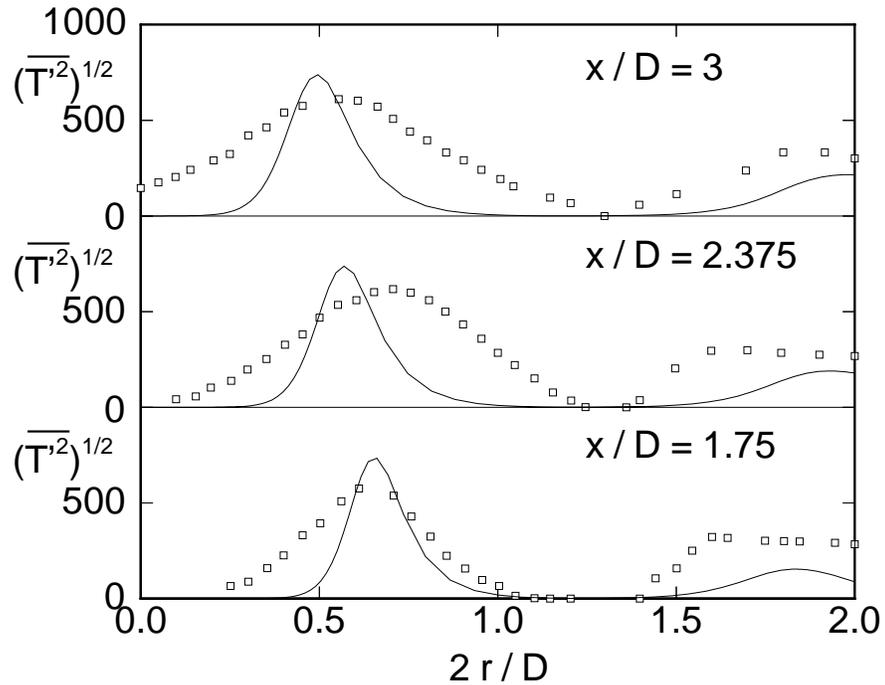


Figura 31: Profili radiali della deviazione standard della temperatura (in K). Quadrati, dati sperimentali (Yoshida 1981); linea continua, previsioni numeriche.

l'aria ambiente; sebbene si osservi un accordo qualitativo, i gradienti di temperatura calcolati sono più ripidi di quelli misurati, specialmente alle stazioni  $x/D = 2.375$  e  $3$ , il che indica una diffusione scalare sottostimata. È possibile ovviare artificialmente a questo effetto diminuendo il valore del numero di Prandtl/Schmidt turbolento  $\sigma_c$ , qui preso come  $0.7$ . Non ricorriamo qui a questo artificio, in quanto non sembrano esserci motivi sufficienti per discostarsi dal valore considerato sopra (dati sperimentali [44, 61], pur se relativi a fiamme nonpremiscelate, indicano valori di  $0.7$  o un poco superiori). Infine, la fig. 31 riporta confronti della deviazione standard delle fluttuazioni di temperatura, la verifica più diretta della consistenza del modello di combustione turbolenta. Anche per queste fluttuazioni sono predetti gradienti più ripidi di quelli misurati in prossimità della zona di fiamma. Tuttavia, è interessante sottolineare che gli aspetti qualitativi generali sono ben riprodotti. Infatti, le fluttuazioni di temperatura calcolate sono nulle in prossimità dell'asse (dove la temperatura è uniforme al valore  $T_0$ ), hanno quindi un massimo vicino alla posizione media della fiamma, poi decrescono a zero (a  $x/D = 1.75$  e  $2.375$ ), dove la miscela è completamente bruciata in prodotti (temperatura uniforme al valore  $T_\infty$ ), e successivamente crescono nuovamente a causa del miscelamento turbolento dei prodotti, caldi, e dell'aria circostante, fredda. A  $x/D = 3$ , le regioni di fiamma, prodotti, ed aria esterna sono meno chiaramente identificabili.

In conclusione, i risultati mostrano un accordo più modesto rispetto a quello ottenuto per fiamme nonpremiscelate, indicando così lo stato meno sviluppato dei modelli di combustione premiscelata. Davé e Kollmann riportano un accordo significativamente migliore per i profili di temperatura usando un modello di turbolenza con chiusura sui momenti secondi, che evita l'assunzione di trasporto secondo gradiente. Tuttavia, questo migliore accordo è in parte ottenuto introducendo delle modifiche *ad hoc* del modello riportato sopra. Per esempio, nell'eq. (172)  $\bar{p}$  è sostituito con  $\rho_0$  per il semplice motivo che questo stratagemma dà un accordo più stretto con i risultati sperimentali.

## 8 Generalità sulla quantificazione delle emissioni di inquinanti

La concentrazione degli inquinanti nei prodotti di combustione può essere espressa in diversi modi. La concentrazione volumetrica (spesso espressa in ppm, parti per milione, o ppmv per richiamare il riferimento al volume) coincide con la frazione molare introdotta nella sez. 2. Quando si fa riferimento ai fumi 'secchi' (*dry*), cioè depurati dal vapore acqueo, si usa talvolta la notazione ppmvd. La concentrazione in massa è frequentemente espressa in grammi per *normal* metro cubo di fumi, dove l'aggettivazione indica che il volume dei fumi è calcolato con riferimento a condizioni standard di temperatura e pressione ( $T = 25\text{ C} = 298.15\text{ K}$ ,  $p = 1\text{ atm}$ ); in tali condizioni una chilomole (che è l'unità molare nel sistema SI) occupa un volume di  $22.4\text{ m}^3$ , per cui per esempio una concentrazione volumetrica di un ppm di CO corrisponde a  $10^{-6}$  chilomoli per chilomole di miscela, ossia a

$$\frac{28 \cdot 10^{-6}\text{ kg}}{22.4\text{ m}^3} = 1.25 \frac{\text{mg}}{\text{Nm}^3} \quad (196)$$

essendo il peso molecolare del monossido di carbonio pari a  $28\text{ kg/kmol}$ . Occorre, per dare significato ad entrambi i criteri di misura delle concentrazioni, specificare la diluizione dei fumi attraverso il contenuto di ossigeno (per esempio fissato al valore di riferimento del 15% in volume per le turbine a gas <sup>23</sup>, al 6% per le caldaie che impiegano combustibili solidi, al 3% per quelle che impiegano

<sup>23</sup>Le turbine a gas adottano un largo eccesso di aria per contenere la temperatura dei gas in uscita dalla camera di combustione, in quanto questi vanno poi ad investire le palette della turbina, le quali sono sottoposte a notevolissimi sforzi centrifughi a causa della rotazione (tipicamente tra i 6000 ed i 16000 giri al minuto). Com'è noto, le proprietà

combustibili gassosi o liquidi, ed infine al 5% per i motori alternativi); se la concentrazione di  $O_2$  nei fumi è diversa da quella di riferimento, si corregge la concentrazione delle emissioni per riportarla alle condizioni prescritte. Per esempio, se le norme fanno riferimento ad una concentrazione volumetrica (in percentuale) di ossigeno che indichiamo con  $y$ , mentre le emissioni attuali presentano una concentrazione  $x$ , occorre determinare la concentrazione volumetrica delle emissioni alla concentrazione di  $O_2$  di riferimento come

$$\text{ppm}_y = \text{ppm}_x \frac{21 - y}{21 - x} \quad (197)$$

essendo 21 la percentuale di ossigeno nell'aria atmosferica. In molti casi si usa l'indice di emissione (*emission index*), che esprime i grammi di inquinante prodotti per chilogrammo di combustibile bruciato, g/kg<sub>f</sub>. Si designa con  $EINO_x$  l'indice relativo alle emissioni di  $NO_x$ , con  $EICO$  quello relativo alle emissioni di CO,  $EIUHC$  quello relativo alle emissioni di idrocarburi incombusti, etc. Altri criteri possono essere utilizzati in vista del particolare impiego, per esempio per autoveicoli si possono quantificare le emissioni in grammi per chilometro percorso, etc.

Vogliamo ora cercare di quantificare le emissioni di inquinanti da una camera di combustione, individuando la concentrazione media delle specie chimiche di interesse nei prodotti di combustione. Tali previsioni numeriche sono intese a trovare la configurazione più conveniente per la camera di combustione (in termini di emissioni di inquinanti, efficienza di combustione, requisiti di scambio termico, etc.) senza passare attraverso la lunga e costosissima procedura tradizionale di costruire e sperimentare prototipi della camera di combustione stessa. Come vedremo, non ci si può certamente attendere una previsione esatta del comportamento della camera, però spesso si possono trarre utili indicazioni sugli *andamenti* delle grandezze in questione al variare dei parametri di progetto.

Un'applicazione pedissequa del modello esaminato nella sez. 6 per combustione nonpremiscelata porterebbe a determinare la frazione di massa mediata della specie chimica  $i$  in questione tramite la (143), che qui ripetiamo

$$\tilde{Y}_i = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^1 \rho(Z) Y_i(Z) P(Z) dZ \quad (198)$$

Similmente, per combustione premiscelata il modello descritto nella sez. 7 porterebbe ad individuare la frazione di massa mediata dei prodotti dalla (178), che ripetiamo anch'essa

$$\tilde{Y}_3 = Y_{3,\infty} \tilde{c} \quad (199)$$

e supponendo che sia possibile identificare quanta parte dei prodotti consiste della specie  $i$  (vedi nota 18), risulterebbe ancora possibile calcolare la frazione di massa mediata  $\tilde{Y}_i$  della specie inquinante considerata.

La validità di tali previsioni della concentrazione media della specie  $i$  è tuttavia ovviamente legata alla misura in cui la chimica di tale specie approssima le ipotesi formulate al riguardo dai due modelli esaminati, e cioè in particolare l'ipotesi di equilibrio chimico per il regime di combustione nonpremiscelata, e l'ipotesi di chimica governata dal miscelamento turbolento (combustione in sottili lamine) per il regime di combustione premiscelata. Occorre poi ricordare che abbiamo introdotto l'ipotesi di equidiffusività per le specie e l'energia (avendo posto il coefficiente che appare nel termine di diffusione,  $\rho D_i$ , uguale per tutte le specie, ed uguale all'analogo coefficiente per l'energia,  $\lambda/c_p$ ). Inoltre, abbiamo assunto il flusso adiabatico, ipotesi evidentemente applicabile ad alcune classi di combustori (turbine a gas, motori alternativi) ma non ad altre (vedi caldaie di generatori di vapore, nei quali lo scambio termico con la parete è proprio l'obiettivo).

---

di resistenza meccanica dei materiali peggiorano al crescere della temperatura.

La formazione delle maggior parte delle specie inquinanti (con la significativa eccezione di  $\text{SO}_x$ ) è tuttavia controllata da processi a cinetica chimica relativamente lenta, per cui certamente non è accettabile per queste specie l'ipotesi di equilibrio chimico (per combustione nonpremiscelata), né è pensabile che il processo di formazione si esaurisca entro le sottili lamine che caratterizzano le reazioni energetiche nella combustione premiscelata. Occorrerà quindi introdurre modelli *ad hoc* per questi inquinanti, i quali traggono vantaggio dal fatto che essi sono normalmente presenti solo a livello di tracce, per cui l'evoluzione della loro concentrazione non influenza apprezzabilmente le reazioni energetiche (ma ne è invece influenzata). Questa ipotesi è senz'altro accettabile per  $\text{NO}_x$  (la cui concentrazione nei prodotti di combustione è normalmente dell'ordine delle decine, o al massimo di poche centinaia, di ppm), ma è meno soddisfacente per CO, che è un prodotto intermedio dell'ossidazione del carbonio contenuto negli idrocarburi.

Quanto sopra esposto sottolinea la compresenza di più scale dei tempi coinvolte nei processi di combustione (scale dei tempi dei processi energetici, tipicamente brevi ad eccezione della reazione di ossidazione del monossido di carbonio; ossidazione di CO a  $\text{CO}_2$ , intermedia; formazione di ossido di azoto 'termico', lunga; scambio termico radiativo, brevissima, etc.). Occorre quindi innanzitutto identificare un criterio per stabilire se i processi chimici che coinvolgono le specie di interesse (gli inquinanti in particolare) possano essere considerati prossimi a condizioni di chimica veloce (quindi di equilibrio per reagenti nonpremiscelati, di combustione in lamine sottili per reagenti premiscelati), oppure no. A tale scopo è opportuno introdurre i differenti possibili regimi di combustione turbolenta.

## 9 Regimi di combustione turbolenta

I modelli che sono stati esaminati nelle sezz. 6 e 7 non tengono in alcun conto la velocità finita con la quale avvengono le reazioni (quello per combustione nonpremiscelata perché introduce l'ipotesi di equilibrio chimico, quello per combustione premiscelata perché assume la combustione controllata dal miscelamento turbolento). Ciò consente di generare previsioni accettabili del campo di moto e della concentrazione delle principali specie chimiche in molte fiamme, tuttavia porta a previsioni molto modeste per le specie la cui formazione e distruzione è associata con reazioni chimiche relativamente lente. Tra queste in primo luogo gli ossidi di azoto (i quali tuttavia sono normalmente presenti solo a livello di tracce per cui si possono adottare approcci computazionali che traggono vantaggio da questa caratteristica, vedi sez. 11), poi diversi intermediari di reazione come per esempio H, O, OH ed infine, per fiamme alimentate con idrocarburi, gli ossidi di carbonio; infatti l'ossidazione del carbonio contenuto nelle molecole del combustibile a monossido di carbonio CO è veloce, mentre la successiva ulteriore ossidazione ad anidride carbonica  $\text{CO}_2$  è relativamente lenta. A titolo di esempio, il tempo chimico  $t_c$  che caratterizza le reazioni energetiche nella combustione di idrogeno ed aria alla pressione atmosferica può essere valutato in circa  $2 \cdot 10^{-5}$  s, mentre il valore analogo per una fiamma metano/aria è intorno ai  $3 \cdot 10^{-4}$  s, a causa della più lenta cinetica della conversione di CO a  $\text{CO}_2$ . I processi che portano alla formazione di NO cosiddetto 'termico' (vedi oltre) comportano invece tempi ben più lunghi, dell'ordine dei  $2 \cdot 10^{-2}$  s. Ovviamente i valori citati sono da intendersi come indicativi, in quanto dipendono dalle condizioni operative (pressione, temperatura dei reagenti, rapporto di equivalenza).

Occorre quindi, come abbiamo detto, identificare un criterio che consenta di acclarare se la chimica della specie in questione possa essere assunta prossima all'equilibrio (nel caso di combustione nonpremiscelata) o comunque veloce, quindi in sottili lamine e dominata di conseguenza dal mescolamento turbolento (nel caso di combustione premiscelata), o se invece sia necessario introdurre un qualche trattamento per la velocità finita delle reazioni. Tale criterio deve quindi essere basato su

un confronto tra il tempo caratteristico delle reazioni che portano alla formazione della specie sotto esame, che indichiamo con  $t_c$ , ed un tempo caratteristico del flusso turbolento. Per quest'ultimo possiamo in realtà identificare due scale estreme: il tempo più breve associato con le fluttuazioni turbolente, che abbiamo visto essere il tempo di Kolmogorov  $t_K$ , ed il tempo più lungo che chiamiamo tempo integrale  $t_I$  (che può essere assunto rappresentativo dei fenomeni che avvengono su grande scala). Allora, se risulta  $t_c \ll t_K$ , possiamo ragionevolmente assumere che la specie sia prossima alle condizioni di equilibrio chimico o di chimica veloce, in quanto il tempo chimico caratteristico è molto più breve della più piccola scala della turbolenza. Se invece si ha semplicemente la condizione meno restrittiva  $t_c < t_K$  (regime delle *flamelets* laminari), è possibile adottare un'estensione dei modelli già visti che porta ad esprimere il valore istantaneo di ogni variabile di stato in funzione di *due* grandezze fondamentali; occorre cioè aggiungere, come vedremo, una seconda grandezza oltre allo scalare conservato  $Z$  (per combustione nonpremiscelata) o alla variabile di progresso  $c$  (per combustione premiscelata). L'altro caso estremo è quello in cui  $t_c \gg t_I$ , in cui cioè la chimica della specie considerata è molto più lenta di tutte le scale temporali della turbolenza. In tali condizioni possiamo pensare che la chimica avanzi così lentamente che le fluttuazioni turbolente non hanno sostanzialmente nessuno effetto su di essa, per cui potremmo calcolare la concentrazione media della specie in questione risolvendo la relativa equazione mediata per  $\bar{Y}_i$ , con il termine sorgente valutato semplicemente in termini di valori medi (cioè senza introdurre una pdf). Tale situazione estrema è tuttavia improbabile, mentre più realistica è la condizione meno restrittiva  $t_c > t_I$  (regime di fiamma ispessita). In questo caso non sarà ovviamente possibile esprimere il valore istantaneo della concentrazione della specie attraverso relazioni di stato, in quanto essa si forma con tempi molto più lunghi di quelli associati con le altre grandezze di stato, come l'entalpia. Si può invece pensare di risolvere un'equazione mediata per la specie in questione, in cui però occorre tenere in conto l'effetto delle fluttuazioni turbolente nella valutazione del termine sorgente mediato. Il caso intermedio  $t_K < t_c < t_I$  (regime delle *flamelets* perturbate) è invece più difficile da trattare, anche se effettivamente può presentarsi in alcune situazioni, per cui gli dedicheremo solo un cenno.

L'ordine di grandezza dei tempi di Kolmogorov  $t_K$  ed integrale  $t_I$  dipende ovviamente dalle condizioni operative della particolare camera di combustione sotto esame. Osserviamo in particolare che nei motori intrinsecamente operanti in regime nonstazionario, come i motori alternativi, la scala di Kolmogorov può scendere a valori dell'ordine del microsecondo.

Nel seguito, vedi sezz. 11, 12, delineeremo prima i modelli per la valutazione di NO e CO basati su un'immediata estensione dei due approcci (scalare conservato per combustione nonpremiscelata, e variabile di progresso per combustione premiscelata) descritti in precedenza, ed esamineremo poi come questi modelli possono essere migliorati per tenere conto degli effetti di chimica a velocità finita.

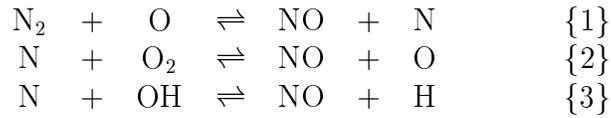
Occorre però premettere i dettagli dei processi di formazione di queste due specie.

## 10 Meccanismi di formazione degli ossidi d'azoto

La formazione di ossidi di azoto avviene tramite diversi meccanismi, che esaminiamo di seguito.

### 10.1 Meccanismo termico

Il meccanismo di formazione più importante in molti casi è quello di Zel'dovich, detto anche *termico* perché estremamente sensibile alla temperatura (a titolo di esempio, il tasso di produzione di NO può aumentare di tre ordini di grandezza se la temperatura è innalzata dai 1800 ai 2200 K). Tale meccanismo comprende le tre reazioni seguenti:



delle quali la {1} è quella controllante, a causa della sua elevatissima energia di attivazione  $E_1$  (corrispondente ad una temperatura di attivazione  $E_1/R^0$  di 38370 K). A questo proposito, osserviamo che la reazione di dissociazione–ricombinazione dell’azoto



non contribuisce significativamente a formare atomi di azoto che inneschino le reazioni {2,3}, perché la sua temperatura di attivazione è ancora maggiore (114000 K), per cui la trascuriamo del tutto in questo meccanismo. Incidentalmente, l’ossigeno atomico che compare nella {1} si forma prevalentemente per dissociazione dell’ossigeno molecolare, ad alta temperatura. L’alta energia di attivazione della {1} implica che tale reazione procede molto lentamente rispetto a quelle energetiche, per cui costituisce una sorta di ‘collo di bottiglia’ che determina il tasso di formazione di NO. In una singola reazione {1} si forma dunque una molecola di NO, più un altro atomo di N che può reagire secondo la {2} o la {3} per dar luogo alla formazione di un’altra molecola di NO. Poiché le reazioni {2} e {3} sono molto più veloci della {1}, possiamo assumere che non appena un atomo di N é prodotto per effetto di una singola reazione {1}, esso dà praticamente subito luogo alla formazione di un’altra molecola di NO, o tramite la reazione {2}, oppure attraverso la {3}. Quindi, una singola reazione {1} porta alla formazione diretta di una molecola di NO, ed alla formazione immediatamente successiva (con una scala dei tempi molto più piccola) di un’altra molecola di NO. In conclusione, possiamo indicare il tasso di formazione di NO attraverso il meccanismo termico (al quale assegnamo l’indice 1, per distinguerlo dagli altri contributi che esamineremo successivamente) come

$$w_{NO,1} = 2 W_{NO} B_1 \rho^2 T^{\alpha_1} \exp\left(-\frac{E_1}{R^0 T}\right) \frac{Y_O}{W_O} \frac{Y_{N_2}}{W_{N_2}} \quad (200)$$

dove il 2 a secondo membro sta appunto ad indicare la formazione di due molecole di NO (una diretta, l’altra indiretta) in ciascuna reazione {1}. Adottando i valori delle costanti di reazione riportati da [62] si ottiene

$$w_{NO,1} = 2.44 \cdot 10^{10} \rho^2 \exp\left(-\frac{38370}{T}\right) Y_O Y_{N_2} \quad \text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s}) \quad (201)$$

con  $T$  espresso in K e  $\rho$  in  $\text{kg}/\text{m}^3$ . In alcuni casi può risultare conveniente esprimere  $w_{NO,1}$  in funzione della concentrazione di ossigeno molecolare  $\text{O}_2$ , anziché di ossigeno atomico O; questo è possibile se si assume che la reazione di dissociazione–ricombinazione dell’ossigeno



sia in equilibrio. Sotto questa ipotesi la concentrazione di ossigeno atomico è legata a quella dell’ossigeno molecolare attraverso la costante di equilibrio  $K_{p,\text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{O}}$  (funzione della temperatura)

$$K_{p,\text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{O}}(T) = \frac{p_{\text{O}}^2}{p_{\text{O}_2}} = p \frac{X_{\text{O}}^2}{X_{\text{O}_2}} = p \frac{(W Y_{\text{O}}/W_{\text{O}})^2}{W Y_{\text{O}_2}/W_{\text{O}_2}} = p W \frac{(Y_{\text{O}}/W_{\text{O}})^2}{Y_{\text{O}_2}/W_{\text{O}_2}} = \rho R^0 T \frac{(Y_{\text{O}}/W_{\text{O}})^2}{Y_{\text{O}_2}/W_{\text{O}_2}} \quad (202)$$

e di conseguenza la (201) può essere riscritta nella forma

$$w_{NO,1} = 7.75 \cdot 10^{12} \rho^{3/2} T^{-0.0675} \exp\left(-\frac{67915}{T}\right) Y_{O_2} Y_{N_2} \quad \text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s}) \quad (203)$$

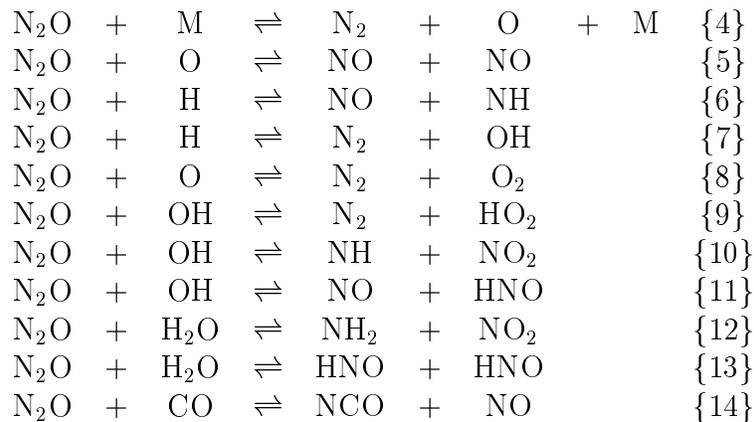
Dalle (201, 203) si evince che questo meccanismo è anche favorito da un eccesso di ossidante, per quanto diminuendo  $\varphi$  rispetto al valore unitario (cioè stechiometrico) la temperatura si riduce; il massimo del termine di produzione si ha intorno a  $\varphi = 0.8$ . Osserviamo poi che nelle reazioni {1,2} uno dei reagenti che compare nel membro di sinistra è tra i componenti principali della miscela reagente, per cui gli associati tassi di reazione saranno relativamente elevati, a causa dell'alta concentrazione. Nella reazione {3} non compaiono invece componenti principali della miscela reagente, per cui il tasso di reazione sarà relativamente contenuto; quando quest'ultima reazione è considerata, si parla di 'meccanismo di Zel'dovich *esteso*'. Si noti che è stato possibile esprimere il termine sorgente in funzione delle concentrazioni delle sole specie che compaiono nel membro di sinistra della {1}; essendo la concentrazione di NO ben al di sotto del valore di equilibrio a causa del lento avanzare della reazione {1}, il contributo delle reazioni inverse (da destra verso sinistra) di {1,2,3} risulta infatti trascurabile. Sottolineiamo che le (200,201,203) forniscono i valori *istantanei* del tasso di produzione di NO; vedremo poi come valutare i relativi valori mediati.

A causa dei lunghi tempi chimici caratteristici associati con questo meccanismo, dell'ordine dei 20 ms, lo NO termico viene prevalentemente a formarsi nella regione a valle della fiamma (*post-flame zone*).

## 10.2 Meccanismo dell'ossido nitroso N<sub>2</sub>O

In questo meccanismo [63] il monossido di azoto NO si forma per ossidazione dell'ossido nitroso N<sub>2</sub>O. Come abbiamo già osservato nella sez. 1, l'ossido nitroso è un importante inquinante di per sé, ed anche un potente gas di serra, con un *Global Warming Potential* (GWP) pari a circa 310. La formazione di ossido nitroso può essere dovuta alla presenza di azoto legato al combustibile (vedi oltre), ma è stato dimostrato sia sperimentalmente che mediante simulazione numerica che può avere luogo anche in combustibili che non contengono azoto legato, come il syngas (una miscela di 40% CO, 30% H<sub>2</sub>, 30% N<sub>2</sub> in volume) [64] e gli idrocarburi [65].

Per combustibili che non contengono azoto legato, può essere considerato il seguente meccanismo di reazione [66, 63, 67, 68]:



La produzione di N<sub>2</sub>O avviene dunque principalmente attraverso i passi inversi (da destra verso sinistra) delle reazioni {4,7-9}, mentre i passi diretti (da sinistra verso destra) delle reazioni {5,6,11,14} descrivono la sua conversione ad NO, cioè il contributo del meccanismo dell'ossido nitroso.

Per combustibili che invece contengono azoto legato, nelle forme di  $\text{NH}_2$  o  $\text{NH}_3$ , si ha prima una decomposizione di queste specie a  $\text{NH}$ , che dà luogo alla formazione di  $\text{N}_2\text{O}$  secondo il passo inverso della {6}, attivando quindi questo meccanismo.

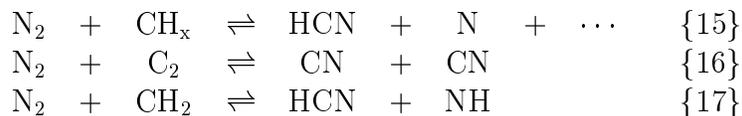
Si noti che nelle reazioni {5,6,11,14} il monossido di azoto  $\text{NO}$  appare sul lato destro; questo comporta un accoppiamento del meccanismo dell'ossido nitroso con gli altri meccanismi, in quanto l'ossido di azoto da tenere in conto sul lato destro del segno di reazione è quello dovuto a *tutti* i meccanismi operanti.

Tale meccanismo è relativamente lento, per quanto alquanto più veloce di quello termico.

### 10.3 Meccanismo *prompt*

Il meccanismo cosiddetto *prompt*, o di Fenimore, coinvolge una serie di reazioni che passano attraverso la formazione di acido cianidrico  $\text{HCN}$ . Questo meccanismo è pertanto attivo nella combustione di tutti gli idrocarburi (mentre è ovviamente assente nella combustione di idrogeno, o di monossido di carbonio). Esso è caratterizzato da tempi chimici caratteristici alquanto più brevi di quelli relativi allo  $\text{NO}$  termico, e comparabili (ancorché più lunghi) ai tempi caratteristici delle reazioni energeticamente significative. Lo  $\text{NO}$  *prompt* viene perciò a formarsi in prossimità del fronte di fiamma.

I passi principali di questo meccanismo includono le seguenti reazioni:



La reazione {15} presuppone (eccetto che nel caso di combustione di idrocarburi del gruppo  $\text{C}_{1-}$ , cioè con un solo atomo di carbonio, come il metano) la compresenza di una lunga serie di reazioni che porta a scindere il generico idrocarburo con formulazione  $\text{C}_m\text{H}_n$  in idrocarburi più semplici, sino ad arrivare appunto a composti del gruppo  $\text{C}_{1-}$ , quindi con formula del tipo  $\text{CH}_x$ . Giunti a questa situazione, il passo diretto della reazione {15} porta alla formazione di azoto atomico  $\text{N}$ , permettendo quindi di attivare le successive reazioni di formazione del monossido di azoto, come le {2,3}. Incidentalmente, la reazione {15} è in competizione con la {16}, che porta alla formazione del gruppo cianuro. La reazione dell'azoto atmosferico con  $\text{CH}_2$  può anche portare alla formazione di  $\text{NH}$  secondo la {17}, altra specie che entra nel bilancio del monossido di azoto, vedi sez. 10.2, reazioni {6,10}.

Il meccanismo *prompt* è quindi legato alla presenza di combustibile, o di frammenti del tipo  $\text{CH}_x$  derivanti dalla scissione del combustibile; risulta perciò attivo in particolare nelle regioni ricche di combustibile della camera ( $\varphi > 1$ ). Esso può assumere una discreta importanza in situazioni in cui il contributo termico è depresso a causa della bassa temperatura. Inoltre, l'importanza relativa del meccanismo *prompt* diminuisce all'aumentare della pressione.

### 10.4 Meccanismo dell'azoto legato al combustibile

Alcuni combustibili contengono una certa quantità di azoto legato (*fuel-bound nitrogen*) alle molecole del combustibile stesso, o più comunemente alle molecole di qualche sostanza presente a livello di traccia nel combustibile. Gli idrocarburi leggeri (benzine, cherosene) generalmente contengono quantità molto piccole di idrogeno legato, meno dello 0.06%, ma gli olii pesanti ne contengono in genere circa lo 0.5%, potendo arrivare fino allo 1.8%. I diversi tipi di carbone in particolare contengono importanti quantità di azoto legato, fino al 2%. Il meccanismo che porta alla formazione

di monossido di azoto passa attraverso la formazione di acido cianidrico HCN ed ammoniaca NH<sub>3</sub>, le quali vengono successivamente ossidate secondo reazioni del tipo



in competizione con reazioni che invece riducono NO ad azoto molecolare, del tipo



Questo meccanismo risulta più veloce di quello termico. Esso rappresenta la principale sorgente di NO per combustibili che contengono importanti quantità di azoto legato, come il carbone.

## 10.5 Altri meccanismi

Altri meccanismi di formazione del monossido di azoto passano attraverso la formazione di biossido di azoto NO<sub>2</sub> [66], o di NNH e N<sub>2</sub>H<sub>3</sub> [69, 70]. Essi hanno tuttavia in genere un'importanza minore di quelli sopra descritti.

## 10.6 Peso relativo dei diversi meccanismi

La seguente tabella, ripresa da [71] ed integrata con altri risultati da [64], presenta un'indicazione orientativa del peso relativo dei diversi meccanismi nelle emissioni di ossidi di azoto:

fiamma	condizioni	NO totale (ppm)	termico %	<i>prompt</i> %	N <sub>2</sub> O %
CH <sub>4</sub> /aria	$\varphi = 1, p = 0.1 \text{ atm}$	9	25	73	1
premiscelata	$\varphi = 1, p = 1 \text{ atm}$	111	85	10	5
laminare	$\varphi = 1, p = 10 \text{ atm}$	315	72	21	10
	$\varphi = 1.05, p = 1 \text{ atm}$	29	83	17	0
	$\varphi = 1.16, p = 1 \text{ atm}$	20	50	50	0
	$\varphi = 1.27, p = 1 \text{ atm}$	20	10	90	0
	$\varphi = 1.32, p = 1 \text{ atm}$	23	5	95	0
CH <sub>4</sub> -N <sub>2</sub> /aria	$a = 10 \text{ s}^{-1}, p = 1 \text{ atm}$	120	20	69	11
nonpremiscelata	$a = 36 \text{ s}^{-1}, p = 1 \text{ atm}$	65	7	86	7
laminare	$a = 70 \text{ s}^{-1}, p = 1 \text{ atm}$	43	5	90	5
CO-H <sub>2</sub> -N <sub>2</sub> /aria	$a = 70 \text{ s}^{-1}, p = 1 \text{ atm}$	41.8	86	0	14
nonpremiscelata	$a = 180 \text{ s}^{-1}, p = 1 \text{ atm}$	16.1	63	0	37
laminare					

Dall'analisi dei dati relativi alla fiamma premiscelata laminare metano/aria a composizione stechiometrica (rapporto di equivalenza  $\varphi$  unitario) si deduce che il meccanismo termico è prevalente, eccetto che a basse pressioni, dove prevale il meccanismo *prompt*; il peso del meccanismo dell'ossido nitroso aumenta all'aumentare della pressione. Aumentando invece la concentrazione di combustibile nella miscela, ed in particolare andando verso miscele ricche ( $\varphi > 1$ ), il peso del

meccanismo termico, estremamente sensibile alla temperatura, diminuisce poiché il combustibile in eccesso porta a temperature più basse, e ad una carenza di ossigeno che inibisce le reazioni {1,2}; si noti come anche il livello delle emissioni totali sia sensibilmente diminuito rispetto al caso stechiometrico a pressione atmosferica. Il meccanismo *prompt* diventa allora percentualmente prevalente. Il contributo dell'ossido nitroso scompare, anche perché la carenza di ossigeno inibisce la reazione inversa della {4} (che porterebbe alla formazione di  $N_2O$ ).

Per quanto riguarda la fiamma laminare nonpremiscelata alimentata con una miscela al 50% (in volume) di metano ed aria, occorre tener presente che, essendo nel caso considerato il combustibile vero e proprio (metano) diluito con un inerte, questo tende ad abbassare la temperatura e quindi a deprimere notevolmente il peso del contributo termico. I risultati sono parametrati con lo *strain rate* (tasso di deformazione), indicato come  $a$ , che ha le dimensioni dell'inverso di un tempo (vedi sez. 13). Possiamo dire che a valori di  $a$  più alti corrispondono tempi di residenza più brevi, per cui si ha meno tempo per completare le reazioni, e più importanti effetti di chimica a velocità finita. Si può osservare come a valori di  $a$  più alti corrisponda una notevole riduzione delle emissioni totali di NO, dovuta al fatto che essendoci meno tempo a disposizione per completare le reazioni, le reazioni di ossidazione del metano non arriveranno all'equilibrio, cioè a rilasciare la massima possibile energia, per cui le temperature raggiunte saranno più basse, ed il meccanismo termico risulta di conseguenza depresso. Inoltre, diminuisce il tempo a disposizione per la formazione di NO. Queste considerazioni spiegano anche il contributo relativo decrescente del meccanismo termico all'aumentare dello *strain rate*.

Infine, i risultati relativi alla fiamma laminare nonpremiscelata alimentata con syngas confermano che le emissioni di NO si riducono all'aumentare dello *strain rate* per effetto delle più basse temperature e della carenza di ossidante. Allo stesso tempo, diminuisce percentualmente il contributo del meccanismo termico, ed aumenta (percentualmente) quello del meccanismo dell'ossido nitroso, ma è possibile constatare che in assoluto le emissioni dovute a quest'ultimo meccanismo restano praticamente inalterate. Il meccanismo *prompt* come si vede non dà contributo per questo combustibile.

Possiamo dire che, eccetto nel caso di combustione del carbone (in cui prevalgono le emissioni da azoto legato al combustibile), il meccanismo prevalente quando si hanno importanti emissioni di NO è quello termico.

## 11 Previsione delle emissioni di NO termico

Come appena detto, in molte situazioni il meccanismo assolutamente prevalente nella formazione di ossidi di azoto (almeno nel caso in cui il combustibile non contenga azoto legato) è quello termico. Questa è per esempio la situazione prevalente per quanto riguarda le emissioni da motori automobilistici ed aeronautici. Il meccanismo termico, come abbiamo detto, è caratterizzato da tempi chimici  $t_c$  alquanto lunghi, per cui risulta in genere ampiamente soddisfatta la condizione  $t_c > t_I$ , ossia i tempi di formazione dell'ossido di azoto sono più lunghi della più lunga scala della turbolenza. In queste condizioni non è certamente possibile adottare espressioni del tipo (198) per esprimere la concentrazione media di NO in una fiamma turbolenta (nonpremiscelata). Possiamo però trarre vantaggio dalla circostanza  $t_c > t_I$  per introdurre un'equazione di conservazione mediata per la media di Favre della frazione di massa di ossido di azoto, che ha quindi la forma (78) (adottando l'ipotesi di trasporto secondo gradiente per la chiusura fluidodinamica)

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}_{NO}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_{NO}} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_{NO}}{\partial x_k} \right] + \bar{w}_{NO} \quad (204)$$

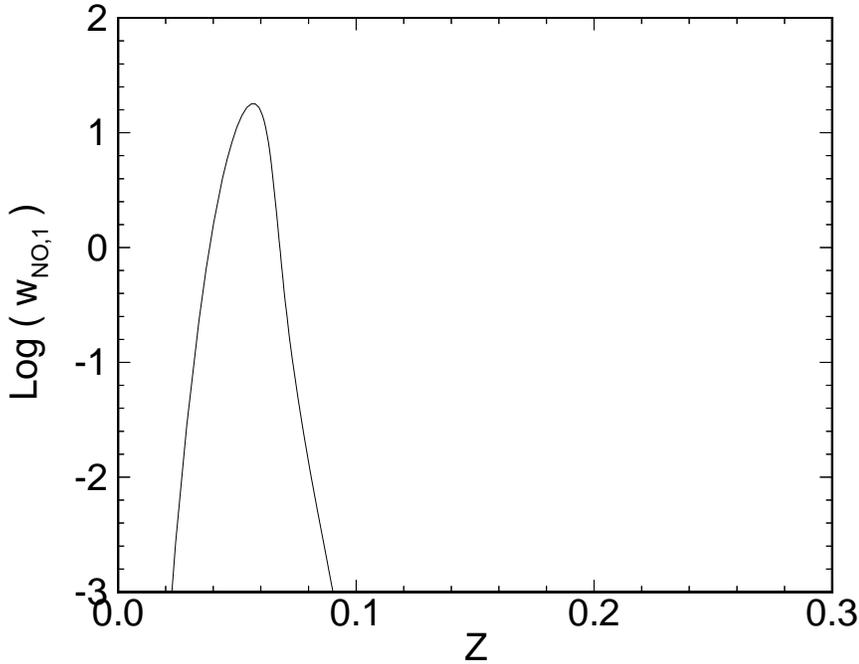


Figura 32: Tasso di produzione di NO termico [in  $\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s})$ ] in funzione dello scalare conservato, per una fiamma propano/aria.

Il problema in questa formula è quello di trovare un'espressione per il tasso mediato di produzione del monossido di azoto. Se consideriamo il solo meccanismo termico, sappiamo dalle (200,201) che il tasso istantaneo risulta essere una funzione di densità, temperatura, concentrazione di ossigeno atomico O e di azoto molecolare  $\text{N}_2$ . Per combustione nonpremiscelata, sotto l'approccio dello scalare conservato, queste quattro grandezze di stato possono essere espresse in funzione dello scalare conservato  $Z$ , per cui risulta

$$w_{NO} = w_{NO}(\rho, T, Y_O, Y_{N_2}) = w_{NO}(Z) \quad (205)$$

Per ricavare il valore medio, occorre pesare il valore istantaneo con la funzione densità di probabilità, analogamente alla (131)

$$\bar{w}_{NO} = \int_0^1 w_{NO}(Z) P(Z) dZ \quad (206)$$

La forma della funzione  $w_{NO}(Z)$  è riportata in fig. 32 per combustione di propano e aria (con propano iniettato alla temperatura di 300 K ed aria immessa a 852 K, pressione 2.985 MPa, condizioni che riproducono quelle tipiche in una turboreattore al momento del decollo; si considera il propano come combustibile in quanto riproduce gli aspetti chimici essenziali della combustione di idrocarburi più complessi), sotto l'ipotesi che le specie energetiche siano in equilibrio chimico; si noti che la reazione è concentrata in uno stretto intervallo intorno alle condizioni stechiometriche. Questo andamento è quindi decisamente diverso da quello, relativamente dolce, mostrato ad esempio dalla densità espressa come funzione di  $Z$ , vedi fig. 9, e questo implica che il tasso *mediato* di produzione di NO termico risulta *molto* sensibile alla forma della pdf adottata (a differenza di quanto avviene per la densità media). Possiamo dire che quando si riesce a prevedere le emissioni di NO entro un fattore 2 rispetto a quelle effettive, si è già ottenuto un risultato molto buono.

Per combustione premiscelata, sarà analogamente necessario esprimere il termine di produzione di NO in funzione della variabile di progresso. Osserviamo tuttavia che non è possibile utilizzare in questo caso le (200,201), poiché il modello della variabile di progresso comprende solo quattro specie chimiche, tra le quali non figura l'ossigeno atomico. Occorre allora partire dalla espressione (203), che come detto comporta però l'ulteriore assunzione di equilibrio chimico per la reazione di dissociazione-ricombinazione dell'ossigeno. Poiché in essa tutte le grandezze che compaiono a secondo membro sono esprimibili in funzione della variabile di progresso  $c$ , si ha

$$w_{NO} = w_{NO}(\rho, T, Y_{O_2}, Y_{N_2}) = w_{NO}(c) \quad (207)$$

ed il valore mediato sarà ancora ottenibile introducendo una funzione densità di probabilità della variabile di progresso, analogamente alla (192)

$$\bar{w}_{NO} = \int_0^1 w_{NO}(c) P(c) dc = \beta w_{NO,\infty} \quad (208)$$

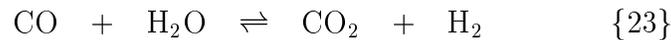
Si noti che, a causa della forma (181,185) assunta per la pdf di  $c$ , contribuisce al tasso mediato di formazione solo la miscela completamente bruciata (termine in  $\beta$ ), in quanto la miscela fresca si trova a bassa temperatura, ed è stato trascurato il contributo del modo reagente (termine in  $\gamma$ ). Occorre comunque osservare che assumere che l'ossigeno atomico sia in equilibrio è un'approssimazione piuttosto dubbia. Infatti, nella reazione di dissociazione-ricombinazione dell'ossigeno



il passo diretto implica la collisione di due molecole, evento relativamente frequente, mentre il passo inverso richiede la collisione di tre molecole, evento piuttosto raro, per cui la reazione sarà verosimilmente spostata a destra rispetto a quanto prevede l'equilibrio chimico; ciò vuol dire che la concentrazione di ossigeno atomico sarà in genere superiore a quella di equilibrio. La stessa cosa vale per altri atomi e radicali, come H ed OH, la cui concentrazione può arrivare ad essere fino a 700 volte superiore a quella calcolata sotto l'ipotesi di equilibrio.

## 12 Previsione delle emissioni di CO

Come abbiamo già osservato, la formazione di CO a partire da un idrocarburo o da carbone è veloce, ma la successiva ossidazione a CO<sub>2</sub> è relativamente lenta. Le principali reazioni responsabili dell'ossidazione del monossido di carbonio CO ad anidride carbonica CO<sub>2</sub> sono



Di queste, la prima (detta reazione di '*water shift*') è prevalente a temperature relativamente basse, ed è piuttosto lenta; la seconda invece prevale a temperature più alte, ed è relativamente più veloce. Per combustione turbolenta nonpremiscelata, l'ipotesi di equilibrio chimico adottata dal modello dello scalare conservato non tiene in alcun conto gli effetti della cinetica chimica sopra citata, per cui tentare di esprimere la concentrazione media di monossido di carbonio attraverso la (198), specializzata nella forma

$$\tilde{Y}_{CO} = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^1 \rho(Z) Y_{CO}(Z) P(Z) dZ \quad (209)$$

porta a risultati inattendibili. Basti pensare che in fiamme laminari metano/aria, calcoli di equilibrio prevedono una concentrazione di picco di CO pari al 25%, mentre esperimenti indicano una concentrazione massima entro lo spessore della fiamma del 5% circa.

Per combustione turbolenta premiscelata poi, adottando le ipotesi del modello della variabile di progresso, poiché nella combustione di idrocarburi sotto l'ipotesi di un solo passo di reazione irreversibile si ha formazione dei soli prodotti  $H_2O$  e  $CO_2$ , la concentrazione prevista di CO risulterebbe identicamente nulla.

È quindi necessario ricorrere in ogni caso ai modelli per chimica a velocità finita che esaminiamo di seguito.

### 13 Modello ‘stretched laminar flamelets’ per combustione turbolenta nonpremiscelata con chimica a velocità finita

Modelli per combustione turbolenta che tengono conto della velocità finita delle reazioni sono stati sviluppati sulla base dell'approccio delle ‘*stretched laminar flamelets*’ [72, 73, 74, 75, 76, 77]. Nell'approccio delle *stretched laminar flamelets* la fiamma turbolenta è vista come un insieme di sottili fiamme laminari trasportate dalla turbolenza.

Tale approccio è basato sull'assunzione che in una fiamma le reazioni abbiano luogo in ‘fiammelle’ sottili (rispetto alle scale della turbolenza); in tali condizioni, poiché una dimensione (lo spessore) della fiamma risulta di gran lunga inferiore alle restanti due, è possibile operare uno sviluppo matematico che porta, come vedremo subito, a descrivere i valori delle grandezze di stato entro la fiamma stessa in funzione di due grandezze fondamentali (quindi non più una sola, come nel caso degli approcci dello scalare conservato o della variabile di progresso), delle quali la seconda quantifica gli effetti della chimica a velocità finita.

Iniziamo ad esporre il concetto per il caso di combustione turbolenta nonpremiscelata. Consideriamo l'equazione di conservazione della specie chimica  $i$ , scritta per i valori istantanei (31); per comodità sottraiamo da essa l'equazione di continuità (8) moltiplicata per  $Y_i$ , in modo da ottenere la cosiddetta forma non-conservativa:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) + w_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (210)$$

Abbiamo inoltre esplicitamente indicato il coefficiente di diffusione come  $\rho D$  (anziché come  $\mu/\sigma$ ). A questo punto, introduciamo la seguente trasformazione di coordinate

$$\begin{aligned} \tau &= t \\ Z &= Z(x_1, x_2, x_3, t) \\ Z_2 &= x_2 \\ Z_3 &= x_3 \end{aligned} \quad (211)$$

dalla quale le variabili indipendenti originarie possono essere espresse in funzione di quelle nuove secondo le

$$t = t(\tau, Z) \quad (212)$$

$$\begin{aligned}
x_1 &= x_1(Z) \\
x_2 &= x_2(Z, Z_2) \\
x_3 &= x_3(Z, Z_3)
\end{aligned}$$

Intendiamo dunque riscrivere la (210) adottando come variabili indipendenti  $\tau$ ,  $Z$ ,  $Z_2$  e  $Z_3$ . Il termine di derivata temporale può essere espresso come

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{d\tau}{dt} \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z} \quad (213)$$

mentre le tre derivate spaziali possono essere espresse nella forma

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial Z}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial Z} \quad (214)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial Z} + \frac{\partial Z_2}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial Z_2} = \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial Z} + \frac{\partial}{\partial Z_2} \quad (215)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_3} = \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial Z} + \frac{\partial Z_3}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial Z_3} = \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial Z} + \frac{\partial}{\partial Z_3} \quad (216)$$

Ne segue che i termini di transiente e convettivo della (210) possono essere riscritti come

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \quad (217)$$

$$u_k \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} = u_1 \frac{\partial Z}{\partial x_1} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + u_2 \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + u_3 \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + u_2 \frac{\partial Y_i}{\partial Z_2} + u_3 \frac{\partial Y_i}{\partial Z_3} \quad (218)$$

Per il termine diffusivo, che possiamo scrivere per esteso come

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x_3} \right) \quad (219)$$

cominciano ad espandere le derivate interne alle parentesi

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) = \\
&= \frac{\partial}{\partial x_1} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_1} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial Z_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial Z_3} \right)
\end{aligned} \quad (220)$$

Questa può essere riscritta come

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) = \\
&= \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_3} \right) \right] \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + \\
&\quad + \rho D \left[ \frac{\partial Z}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left( \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \right) + \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \right) + \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \right) \right] +
\end{aligned}$$

$$+ \frac{\partial \rho D}{\partial x_2} \frac{\partial Y_i}{\partial Z_2} + \frac{\partial \rho D}{\partial x_3} \frac{\partial Y_i}{\partial Z_3} + \rho D \left[ \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \frac{\partial Y_i}{\partial Z_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \frac{\partial Y_i}{\partial Z_3} \right) \right] \quad (221)$$

ed ancora

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) = \\ & = \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_3} \right) \right] \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + \\ & + \rho D \left[ \left( \frac{\partial Z}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial x_2} \right)^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial x_3} \right)^2 \right] \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \rho D \left( \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z_2 \partial Z} + \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z_3 \partial Z} \right) + \\ & + \frac{\partial \rho D}{\partial x_2} \frac{\partial Y_i}{\partial Z_2} + \frac{\partial \rho D}{\partial x_3} \frac{\partial Y_i}{\partial Z_3} + \rho D \left( \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial Y_i^2}{\partial Z_2 \partial Z} + \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial Y_i^2}{\partial Z_3 \partial Z} \right) + \rho D \left( \frac{\partial Y_i^2}{\partial Z_2^2} + \frac{\partial Y_i^2}{\partial Z_3^2} \right) \end{aligned} \quad (222)$$

Posto

$$R' = \rho \left( u_2 \frac{\partial Y_i}{\partial Z_2} + u_3 \frac{\partial Y_i}{\partial Z_3} \right) \quad (223)$$

$$R'' = \frac{\partial \rho D}{\partial x_2} \frac{\partial Y_i}{\partial Z_2} + \frac{\partial \rho D}{\partial x_3} \frac{\partial Y_i}{\partial Z_3} + \rho D \left[ 2 \left( \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z_2 \partial Z} + \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z_3 \partial Z} \right) + \left( \frac{\partial Y_i^2}{\partial Z_2^2} + \frac{\partial Y_i^2}{\partial Z_3^2} \right) \right] \quad (224)$$

e chiamato tasso di dissipazione scalare la grandezza

$$\chi = 2 D \left[ \left( \frac{\partial Z}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial x_2} \right)^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial x_3} \right)^2 \right] \quad (225)$$

ossia, in notazione tensoriale

$$\chi = 2 D \frac{\partial Z}{\partial x_k} \frac{\partial Z}{\partial x_k} \quad (226)$$

allora l'equazione di conservazione delle specie (210) si riscrive

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} + \rho \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + \rho u_k \frac{\partial Z}{\partial u_k} \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} + R' = \left[ \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_k} \right) \right] \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + R'' + w_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (227)$$

Se a questa equazione sottraiamo l'eq. (125) di conservazione dello scalare conservato, che qui riscriviamo nella forma, essendo  $\mu/\sigma = \rho D$

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial Z}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_k} \right] \quad (228)$$

moltiplicata per  $\partial Y_i / \partial Z$ , si ha

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} + R' = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + R'' + w_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (229)$$

Come si vede, in questa equazione compaiono tre gruppi di termini: un termine di variazione nel tempo, tre termini di derivate spaziali, ed un termine sorgente. A questo punto, introduciamo

l'osservazione cruciale: il termine in  $\chi$  è assolutamente prevalente rispetto agli altri due termini spaziali ( $R'$  e  $R''$ ) in quanto, essendo la fiamma sottile, le derivate  $\partial Z/\partial x_k$  che compaiono nella (226) sono molto elevate, ed ancor più lo sono una volta elevate al quadrato. Questa osservazione porta a trascurare i termini  $R'$  ed  $R''$ , per cui la (229) si può semplicemente riscrivere come

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + w_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (230)$$

Per fiammelle stazionarie, questa porta al seguente bilancio per la specie  $i$ , che comprende solo i termini di diffusione e reazione:

$$\rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + w_i(\rho, T, Y_j, j = 1, 2, \dots, N) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (231)$$

dove abbiamo esplicitamente indicato la dipendenza del tasso di produzione della generica  $i$ -esima specie da densità, temperatura, e dalla concentrazione di tutte le specie. Un'equazione di forma simile può essere ricavata per l'energia, sotto forma di entalpia (in questo caso compare solo il termine diffusivo):

$$\rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} = 0 \quad (232)$$

Se conoscessimo  $\chi$ , potremmo allora risolvere il sistema (implicito) delle  $N + 1$  equazioni (231, 232), insieme alle equazioni di stato termica (6) e calorica (13), nell'intervallo  $[0 \leq Z \leq 1]$ , il che permetterebbe quindi di ricavare le grandezze di stato nella forma

$$\rho = \rho(Z, \chi) \quad (233)$$

$$h = h(Z, \chi) \quad (234)$$

$$T = T(Z, \chi) \quad (235)$$

$$Y_i = Y_i(Z, \chi) \quad (236)$$

e simili. Queste espressioni possono essere confrontate con quelle valide nel caso di chimica in equilibrio, (129, 127) e simili, nelle quali le variabili di stato figuravano come funzione del solo scalare conservato  $Z$ . Si noti quindi che in condizioni di equilibrio chimico le relazioni che esprimono le varie grandezze di stato in funzione di  $Z$  sono del tutto indipendenti dalla scala spaziale del fenomeno di combustione considerato, sia che si tratti di un sottile fronte di fiamma di spessore di qualche decimo di millimetro, sia che si tratti di combustione su larga scala come nella caldaia di una centrale elettrica, o in un incendio. Tale situazione risulta evidentemente ben poco credibile per specie chimiche la cui concentrazione è in realtà controllata da reazioni relativamente lente, per le quali il tempo di residenza (ovviamente legato alla scala spaziale) gioca quindi un ruolo cruciale. L'approccio delle *stretched laminar flamelets* permette invece di ritenere gli effetti della cinetica chimica, in quanto nelle (232) compaiono i tassi di produzione delle specie, ed in questo modo introduce la dipendenza da una seconda variabile, il tasso di dissipazione scalare definito dalla (226). Come si vede, in  $\chi$  compare una derivata spaziale, per cui risulta ristabilita la dipendenza da una scala spaziale: in particolare,  $\chi$  risulterà tipicamente alto in fiamme molto sottili (essendo molto piccola la dimensione spaziale che compare a denominatore della derivata spaziale), ed invece piccolo in fiamme più estese, ossia prossime all'equilibrio in virtù degli associati lunghi tempi di

residenza. Quindi a valori di  $\chi$  bassi corrisponde chimica prossima all'equilibrio, e viceversa a  $\chi$  alti corrispondono importanti effetti di chimica a velocità finita.

Si noti che in questo approccio le fiamme laminari hanno una loro struttura interna, determinata dalla soluzione delle (231,232). Dalle (231) risulta che la concentrazione delle specie, e di conseguenza tutte le altre grandezze di stato, sono determinate da equazioni di bilancio in cui entrano in gioco la cinetica chimica (attraverso  $w_i$ ) e la diffusione (attraverso il termine in  $\chi d^2Y_i/dZ^2$ ). La temperatura, come abbiamo detto, può essere ricavata da entalpia e concentrazioni invertendo l'equazione calorica di stato (13); assegnate le concentrazioni, l'entalpia risulta infatti una funzione crescente della temperatura, per cui facilmente invertibile. Il profilo di temperatura come funzione della coordinata  $Z$  attraverso la fiamma presenterà un picco intorno alle condizioni stechiometriche (intorno alle quali avviene la maggior parte del rilascio di calore). Il profilo in funzione di  $Z$  può anche essere convertito in un profilo in funzione di una coordinata spaziale  $x$  attraverso la fiamma (orientata normale ad essa) se è noto  $\chi$ ; con questa scelta dell'orientamento delle coordinate la definizione (225) si riduce infatti a (essendo nulle le derivate in direzione ortogonale ad  $x$ )

$$\chi = 2D \left( \frac{dZ}{dx} \right)^2 \quad (237)$$

Ne segue

$$dx = \sqrt{\frac{\chi}{2D}} dZ \quad (238)$$

Questa relazione esprime dunque un legame fra i  $dZ$  ed i corrispondenti  $dx$ , per cui è possibile usare le coordinate  $Z$  e  $x$  in modo intercambiabile, una volta specificato  $\chi$ .

A titolo di esempio, la fig. 33, relativa a combustione syngas/aria, riporta gli andamenti della temperatura per un valore di  $\chi_c$  basso, corrispondente ad una fiamma relativamente spessa (il significato dell'indice  $c$  attribuito a  $\chi$  sarà spiegato fra breve), e per un valore di  $\chi_c$  elevato, corrispondente ad una fiamma sottile. Si può notare come nel caso di  $\chi_c$  elevato si hanno gradienti di temperatura molto più elevati che nel caso a basso  $\chi_c$ . Poiché il flusso di calore trasmesso per conduzione è proporzionale al gradiente di temperatura, si ha nella fiamma a  $\chi_c$  alto un forte trasferimento di calore dalla zona ad alta temperatura (in prossimità delle condizioni stechiometriche) verso i due lati della fiamma (lato ossidante a sinistra e lato combustibile a destra), fatto che è responsabile della più bassa temperatura di picco osservata (in confronto al caso a basso  $\chi_c$ ). All'aumentare di  $\chi_c$ , si arriva ad una condizione limite in corrispondenza alla quale il calore trasmesso per conduzione diventa più grande del calore rilasciato dalle reazioni, e la fiamma si estingue. L'ultimo valore di  $\chi_c$  per il quale la fiamma resta ancora accesa viene indicato come  $\chi_q$ , dove la  $q$  sta per *quenching*, estinzione. Quindi, per tutti valori di  $\chi_c > \chi_q$  la fiamma risulta estinta (che è evidentemente il caso limite degli effetti di chimica a velocità finita).

La fig. 33 evidenzia anche come la relazione tra  $Z$  ed  $x$  sia nonlineare. In particolare, si hanno elevati valori di  $dZ/dx$  in prossimità delle condizioni stechiometriche, e valori più bassi lontano dal fronte di fiamma, che tendono ad annullarsi del tutto lato ossidante e lato combustibile. Di conseguenza, ne segue che il tasso di dissipazione scalare, dato dalla (237), non sarà costante attraverso la fiamma. Occorre precisare che ciò risulta dovuto, oltre alla citata nonlinearietà della relazione  $Z-x$ , anche al fatto che il coefficiente di diffusione che compare nella (237), essendo funzione di temperatura e composizione, varia anch'esso attraverso la fiamma. Quindi, quando sopra abbiamo ipotizzato di conoscere  $\chi$ , avremmo dovuto in realtà precisare 'ipotizzato di conoscere  $\chi$  come funzione di  $Z$ ' (o equivalentemente di  $x$ ).

La variabilità di  $\chi$  attraverso la fiamma indica l'opportunità di individuare un valore rappresentativo di questa grandezza attraverso la fiamma. In altre parole, anziché esprimere ogni grandezza di stato

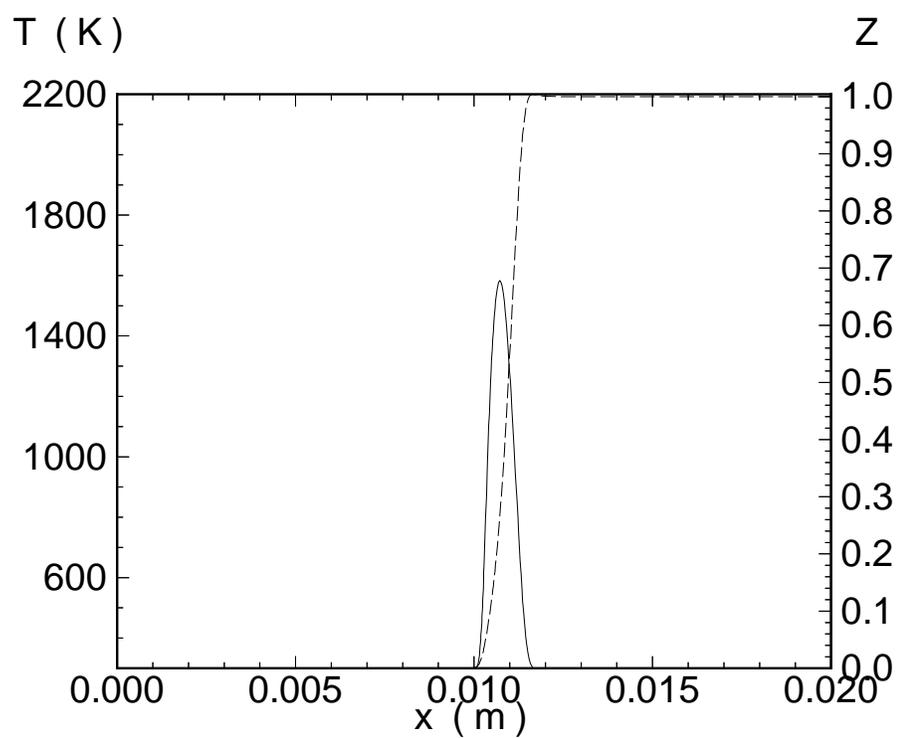
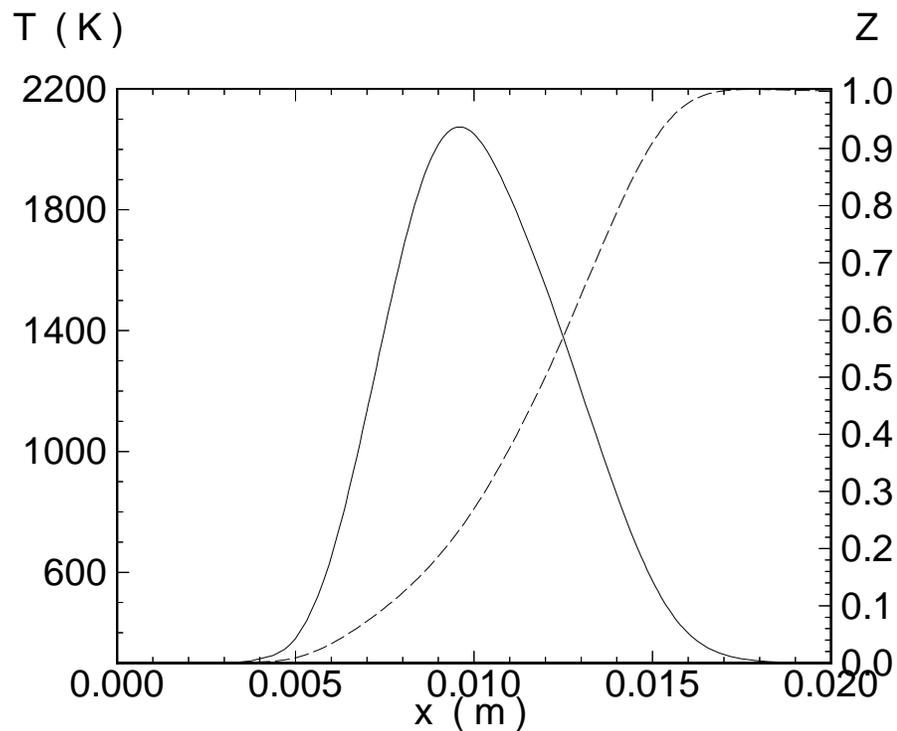


Figura 33: Andamento della temperatura (linea continua) e dello scalare conservato (linea tratteggiata) attraverso una fiamma syngas/aria: sopra,  $\chi_c = 9 \text{ s}^{-1}$ ; sotto,  $\chi_c = 540 \text{ s}^{-1}$ . Temperatura dei reagenti uguale a 300 K, pressione atmosferica.

come un'effettiva funzione di due variabili, secondo per esempio la (236), si preferisce esprimerla piuttosto come funzione di  $Z$  con parametro  $\chi_c$

$$Y_i = Y_i(Z; \chi_c) \quad (239)$$

dove  $\chi_c$  è il valore del tasso di dissipazione scalare *condizionato*, cioè preso in corrispondenza ad un punto rappresentativo della fiamma, come il fronte di fiamma, per esempio identificato con le condizioni stechiometriche (per le quali talvolta si adotta la notazione  $\chi_{st}$  al posto di  $\chi_c$ ) oppure con il punto di massima temperatura (nel qual caso si adotta talvolta la notazione  $\chi_{max}$ ).

L'approccio considerato consente dunque di esprimere in una fiamma laminare sottile ciascuna grandezza di stato come funzione di due variabili, o meglio della variabile  $Z$  e del parametro  $\chi_c$ , il quale ultimo quantifica gli effetti della chimica a velocità finita. Tale espressione potrà essere applicata ai valori *istantanei* delle grandezze di stato in fiamme turbolente nel caso in cui lo spessore di tali fiamme laminari sia inferiore alla più piccola scala spaziale della turbolenza, la lunghezza di Kolmogorov. In realtà, un confronto basato sulle scale spaziali è corretto solo per combustione premiscelata (nelle fiamme laminare premiscelate lo *spessore* della zona dove vengono consumati i reagenti risulta indipendente dalle dimensioni complessive del fenomeno di combustione; per esempio nella combustione di una miscela metano/aria a pressione atmosferica lo spessore tipico della fiamma laminare è di circa 0.4 mm), mentre per combustione nonpremiscelata (nel qual caso non esiste uno spessore intrinseco della fiamma) è più corretto un confronto sulle scale dei tempi, come accennato nella sez. 9. Se le condizioni della fiamma turbolenta implicano appunto che prevale la condizione  $t_c < t_K$  (ossia che il tempo chimico caratteristico, in questo caso delle reazioni *energeticamente significative*, è più piccolo della più piccola scala della turbolenza), allora la fiamma turbolenta risulterà composta da un insieme di sottili fiamme laminari (dette quindi *flamelets*, fiammelle) che vengono trasportate e distorte dai moti turbolenti. Entro ognuna di queste sottili fiamme, sarà possibile esprimere i valori *istantanei* della generica grandezza di stato  $\phi$  (densità, temperatura, frazione di massa, etc.) in una forma del tipo (239), ossia

$$\phi = \phi(Z; \chi_c) \quad (240)$$

da confrontare per esempio con la (129), valida per chimica in equilibrio. Per ottenere il valore medio di  $\phi$  è allora necessario introdurre una funzione densità di probabilità delle due variabili  $Z$  e  $\chi_c$ , indicata come  $P(Z, \chi_c)$ , tale che  $P(Z, \chi_c) dZ d\chi_c$  rappresenti la probabilità che nel punto considerato lo scalare conservato assuma valori compresi tra  $Z$  e  $Z + dZ$ , e simultaneamente il tasso di dissipazione scalare condizionato assuma valori compresi tra  $\chi_c$  e  $\chi_c + d\chi_c$ . Il valore medio potrà allora essere espresso come

$$\bar{\phi} = \int_0^\infty \int_0^1 \phi(Z, \chi_c) P(Z, \chi_c) dZ d\chi_c \quad (241)$$

dove il primo integrale si riferisce all'integrazione rispetto a  $\chi_c$  (che può assumere valori compresi tra 0 ed  $\infty$ ). La difficoltà è, al solito, nell'identificazione di una forma ragionevole per la funzione densità di probabilità di  $Z$  e  $\chi_c$ ; sulla base di indicazioni sperimentali e numeriche, ma in buona parte anche per convenienza computazionale, si assume *indipendenza statistica* tra  $Z$  e  $\chi_c$ , cioè si ammette di poter scindere la pdf di  $Z$  e  $\chi_c$  nel prodotto di due pdf di una singola variabile, cioè

$$P(Z, \chi_c) = P(Z) P(\chi_c) \quad (242)$$

L'identificazione di una forma presunta ragionevole per  $P(Z)$  (per esempio, una funzione beta) e  $P(\chi_c)$  è un problema al quale si può dare una risposta soddisfacente. Per il tasso di dissipazione scalare si può infatti assumere una distribuzione log-normale, come dapprima ipotizzato da Kolmogorov [78], e poi confermato da tutte le risultanze sperimentali:

$$P(\chi_c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\hat{\sigma} \chi_c} \exp \left[ -\frac{1}{2\hat{\sigma}^2} \left( \log \frac{\chi_c}{\chi_{ref}} - \hat{\mu} \right)^2 \right] \quad (243)$$

dove è stata adottata la seguente stipulazione per definire  $\hat{\mu}$

$$\frac{\tilde{\chi}}{\chi_{ref}} = \exp \left( \hat{\mu} + \frac{\hat{\sigma}^2}{2} \right) \quad (244)$$

dove  $\tilde{\chi}$  si ricava dalla (134), mentre  $\hat{\sigma}$  è un parametro della distribuzione, di definizione un poco controversa. Risultati sperimentali [79] suggeriscono un valore

$$\hat{\sigma} = 2 \quad (245)$$

mentre altri autori preferiscono un valore attorno a 1.2, oppure ricorrono ad un'espressione del tipo

$$\hat{\sigma} = \sqrt{A_\chi + \mu_\chi \log(0.1 Re)} \quad (246)$$

che pur avendo una qualche giustificazione teorica, richiede di individuare i valori dei coefficienti  $A_\chi$  e  $\mu_\chi$  del modello. In mancanza di altre indicazioni, si ricorre ad un'ottimizzazione al calcolatore per identificare i valori più opportuni, operazione che evidentemente può andar bene per un singolo caso, ma manca di generalità.

Definita quindi la forma della funzione densità di probabilità di  $Z$  e  $\chi_c$ , è allora possibile ricavare i valori medi (di Reynolds) di tutte le grandezze di stato attraverso la (241). Attraverso opportune estensioni delle (143–145) è poi possibile ricavare i valori delle medie di Favre, nonché varianze di Reynolds e di Favre di tutte le grandezze di stato.

Resta da affrontare il problema di come ricavare le relazioni del tipo (239,240). Una via possibile è quella di risolvere le  $N + 1$  equazioni (231,232), assegnando  $\chi$  come funzione di  $Z$  attraverso una soluzione di similarità (a rigore valida sotto l'ipotesi di prodotto  $\rho^2 D$  costante) del tipo [72]

$$\chi = \frac{a_s}{\pi} \exp \left\{ -2 [\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2 \right\} \quad (247)$$

dove  $\operatorname{erfc}$  indica la funzione errore complementare<sup>24</sup>. In questa espressione  $a_s$  rappresenta lo *strain rate* in corrispondenza al punto di stagnazione di una fiamma in controflusso, con il significato di un gradiente di velocità (vedi sez. 14 per maggiori delucidazioni). Ne segue che lo *strain rate* ha dimensioni dell'inverso di un tempo, come il tasso di dissipazione scalare. Il significato fisico delle due grandezze è tuttavia differente; il tasso di dissipazione scalare (nella cui espressione compare un coefficiente di diffusione) ha il significato dell'inverso di un tempo di diffusione, mentre lo *strain rate* (in cui compare appunto una velocità, o meglio il suo gradiente) ha il significato dell'inverso di un tempo convettivo.

Variando nella relazione (247) il valore di  $a_s$ , si ottengono soluzioni corrispondenti a differenti valori di  $\chi$ , ed è possibile identificare per ogni soluzione i relativi valori di  $\chi(Z)$ , ed in particolare quello  $\chi_c$  condizionato al fronte di fiamma, per esempio valutato nel punto stechiometrico, oppure

<sup>24</sup>La funzione errore è definita come

$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (248)$$

e la funzione errore complementare come

$$\operatorname{erfc} x = 1 - \operatorname{erf} x \quad (249)$$

alternativamente di massima temperatura. Una soluzione per un singolo valore di  $\chi_c$ , comprendente quindi tutti i valori delle grandezze di stato al variare di  $Z$ , è chiamata una *fiammella*. Il valore di  $\chi_c$  andrà fatto variare da zero (soluzione in equilibrio chimico completo) fino al limite di estinzione  $\chi_q$  (da identificare attraverso i calcoli mediante successivi tentativi, aumentando  $a_s$  fino ad ottenere lo spegnimento della fiamma); inoltre occorre considerare lo stato inerte (semplice miscelamento di ossidante e combustibile, senza reazione) che descrive il comportamento per  $\chi_c > \chi_q$ . L'insieme delle *fiammelle* in tal modo determinate viene chiamato una *libreria* (o talvolta una *biblioteca*) di fiammelle laminari.

Incidentalmente, il tasso di dissipazione scalare viene talvolta designato come *stretch*, ed il fatto di utilizzare una libreria di fiammelle sottoposte a differenti livelli di *stretch* rende conto del nome del modello.

Un approccio alternativo a quello delle *stretched laminar flamelets*, applicabile tanto a combustione premiscelata che nonpremiscelata, come pure al caso generale di combustione parzialmente premiscelata, è quello del *trasporto della pdf* [80, 81, 82, 83, 84]. Esso, a differenza dell'approccio considerato sopra, è applicabile solo quando  $t_K < t_c < t_I$ , cioè nel regime delle *flamelets* perturbate. In questo approccio viene considerata un'equazione di conservazione per la pdf congiunta delle frazioni di massa delle  $N$  specie chimiche e dell'entalpia, designata quindi come  $P(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, h)$ ; essa è quindi tale che  $P(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, h) dY_1 dY_2 \cdots dY_N dh$  ha il significato di probabilità che simultaneamente la frazione di massa della specie 1 sia compresa tra i valori  $Y_1$  e  $Y_1 + dY_1$ , la frazione di massa della specie 2 sia compresa tra  $Y_2$  e  $Y_2 + dY_2$ , etc., la frazione di massa della specie  $N$  sia compresa tra  $Y_N$  e  $Y_N + dY_N$ , e l'entalpia sia compresa tra i valori  $h$  e  $h + dh$ . In tale equazione di conservazione tuttavia alcuni termini devono essere modellati. Ammesso comunque di essere riusciti a trovare la soluzione in un dato punto del campo, i valori mediati di tutte le grandezze di stato, i cui valori istantanei nel caso più generale (senza cioè aver assunto equilibrio chimico o altro, se non pressione termochimicamente costante) sono funzioni delle concentrazioni delle  $N$  specie e dell'entalpia, possono essere espressi come

$$\bar{\phi} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^1 \cdots \int_0^1 \int_0^1 \phi(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, h) P(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, h) dY_1 dY_2 \cdots dY_N dh \quad (250)$$

L'applicazione di questo approccio a flussi in geometrie complesse è tuttavia problematica.

## 14 Estensione del modello per tener conto della diffusione differenziale

Dall'analisi degli sviluppi che portano alle (231,232) si può osservare come la coordinata  $Z$ , che è stata fin qui identificata come lo scalare conservato (precedentemente definito come frazione in massa del combustibile, tanto in forma combusta che incombusta), in realtà svolge semplicemente la funzione di una coordinata attraverso la fiamma. Essa perciò potrebbe essere identificata con altre grandezze, purché esse varino in modo monotono attraverso la fiamma laminare e siano descritte da equazioni puramente convettive-diffusive, cioè con termine sorgente nullo.

Tra le grandezze che possiamo considerare in alternativa figura la frazione di massa *elementale* (o atomica)  $Z_j$  dei differenti elementi che sono presenti, definita come la frazione di massa della miscela reagente che è costituita da atomi del  $j$ -esimo elemento (con  $j = 1, 2, \dots, L$ , essendo  $L$  il numero di elementi che compaiono nelle  $N$  specie), senza tenere in alcun conto il modo con cui tali atomi sono legati per formare le differenti specie chimiche. Essa è legata alla frazione di massa delle specie attraverso la relazione

$$Z_j = \sum_{i=1}^N \mu_{ji} Y_i \quad (251)$$

dove i coefficienti  $\mu_{ji}$  esprimono la frazione di massa della molecola della  $i$ -esima specie costituita da atomi del  $j$ -esimo elemento; chiaramente essi sono costanti (per esempio la frazione dell'elemento H nella specie  $H_2O$  è  $W_{H_2}/W_{H_2O}$ ). Poiché la relazione (251) è lineare a coefficienti costanti, possiamo immediatamente ricavare un'equazione di conservazione per  $Z_j$  operando una combinazione lineare delle equazioni (31) per le frazioni di massa *delle specie*, con gli stessi coefficienti  $\mu_{ji}$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Z_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Z_j) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D \frac{\partial Z_j}{\partial x_k} \right) \quad j = 1, 2, \dots, L \quad (252)$$

Incidentalmente, in questa equazione abbiamo usato l'equivalenza  $\mu/\sigma = \rho D$ . Si noti che la combinazione lineare dei tassi di produzione delle specie risulta in un tasso nullo per gli elementi, come ovvio in quanto gli elementi non sono né creati né distrutti nelle reazioni chimiche. Si noti che l'equazione (252) è dello stesso tipo di quella per lo scalare conservato.

In una fiamma laminare, la frazione di massa del generico elemento  $j$  assume il valore  $Z_{j,o}$  lato ossidante, ed il valore  $Z_{j,f}$  lato combustibile. Per effetto della diffusione (molecolare e turbolenta), attraverso lo spessore della fiamma  $Z_j$  varierà tra questi due valori estremi. Il campo di variazione può essere ridotto all'intervallo tra zero ed uno adottando la seguente normalizzazione

$$\frac{Z_j - Z_{j,o}}{Z_{j,f} - Z_{j,o}} \quad (253)$$

Occorre tuttavia osservare che, se i meccanismi di diffusione differenziale sono presi in considerazione, la variazione di  $Z_j$ , e quindi anche della forma normalizzata (253), potrebbe non essere monotona. Questa situazione può verificarsi, anche se in limitate regioni della fiamma, quando i coefficienti di diffusione delle diverse specie sono significativamente diversi tra loro, cosa che è vera in particolare per l'idrogeno (sia molecolare che atomico). È tuttavia possibile in generale adottare un'opportuna media pesata delle frazioni di massa normalizzate dei diversi elementi, la quale soddisfi il requisito di monotonicità. Possiamo perciò adottare la seguente definizione per  $Z$ :

$$Z = \sum_{j=1}^L \gamma_j \frac{Z_j - Z_{j,o}}{Z_{j,f} - Z_{j,o}} \quad (254)$$

dove i coefficienti  $\gamma_j$  devono essere determinati opportunamente al fine di assicurare la monotonicità di  $Z$  come funzione di  $x$ .

Adottando come variabile  $Z$  attraverso la fiamma lo scalare conservato in tal modo definito, risulta allora possibile tenere in conto anche gli effetti di diffusione differenziale. Ovviamente, la libreria di fiamme laminari deve a questo scopo essere opportunamente definita.

A questo scopo, si adottano fiamme laminari calcolate mediante appositi codici [85, 86, 6] che tengono in conto tanto la chimica a velocità finita, quanto le proprietà di trasporto dettagliate delle specie e dell'energia (abbandonando quindi l'ipotesi di eguali diffusività). Tali codici fanno in genere riferimento ad una configurazione di fiamma 'in controflusso', in cui ossidante e combustibile sono iniettati l'uno contro l'altro in due getti contrapposti allineati; si stabilisce quindi una fiamma piana al contatto fra i due getti. Il calcolo di tale fiamma viene condotto solo sull'asse dei getti, in quanto ciò permette di adottare una conveniente formulazione monodimensionale. Il livello di *stretch* viene imposto indirettamente assegnando le velocità dei due getti: tanto maggiori sono tali velocità, tanto minore sarà il tempo a disposizione per completare le reazioni, e ciò corrisponde a maggiori effetti di chimica a velocità finita. Per quantificare tali effetti, consideriamo l'andamento

delle velocità lungo l'asse dei due getti, adottato come asse  $x$ . Con riferimento per esempio alla fig. 33, abbiamo che da sinistra è immesso l'ossidante (nella direzione positiva dell'asse  $x$ , quindi con velocità positiva), mentre da destra è immesso in senso opposto il combustibile (quindi con velocità negativa). La velocità sull'asse varia tra questi due estremi, ed in particolare in un punto detto di *stagnazione*, la velocità risulta nulla. Esisterà quindi un gradiente di velocità lungo l'asse, che può servire allo scopo che ci siamo prefissi. Se consideriamo il valore (assoluto) del gradiente di velocità in un punto particolare dell'asse, per esempio nel punto di stagnazione, che chiamiamo *strain rate* (tasso di deformazione) ed indichiamo con  $a_s$ , possiamo adottarlo come indice degli effetti di chimica a velocità finita. Vedremo poi come identificare il corrispondente valore di  $\chi_c$ . Le grandezze di stato saranno perciò ricavate lungo l'asse dei due getti contrapposti nella forma

$$\phi = \phi(x; a_s) \quad (255)$$

Tra le varie grandezze di stato, le frazioni di massa delle diverse specie chimiche in particolare permettono di ricavare le frazioni di massa elementali attraverso le (251), e quindi lo scalare conservato secondo la definizione adottata (254), per cui è anche possibile scrivere

$$Z = Z(x; a_s) \quad (256)$$

Avendo opportunamente scelto la definizione (254) dello scalare conservato in modo da assicurare che la  $Z$  come funzione di  $x$  sia monotona, risulta possibile invertire la (256) per ottenere una

$$x = x(Z; a_s) \quad (257)$$

Sostituendo questa espressione nella (255) si ottiene una forma

$$\phi = \phi[x(Z; a_s); a_s] = \phi(Z; a_s) \quad (258)$$

del tipo cioè richiesto dalla formulazione *stretched laminar flamelets*, anche se resta da identificare il valore di  $\chi_c$  corrispondente ad  $a_s$  (ossia, alle velocità imposte ai due flussi). A tal fine occorre evidentemente utilizzare la (226), dove la derivata  $dZ/dx$  si può facilmente ricavare dalla (256). L'individuazione del coefficiente di diffusione  $D$  da adottare nella (226) tuttavia non è immediata, a causa della definizione un poco artificiosa introdotta per lo scalare conservato (254). Una possibile definizione di  $D$  coerente con le (251,254) potrebbe per esempio essere

$$D = \sum_{j=1}^J \gamma_j \sum_{i=1}^N \mu_{ji} Y_i D_i \quad (259)$$

dove  $D_i$  è il coefficiente di diffusione della specie  $i$ , vedi (7,11). Ad ogni modo, quest'ultimo è più che altro un semplice problema di definizione.

Con queste premesse, è quindi possibile calcolare il valore di  $\chi$  attraverso tutta la fiamma laminare, ed in particolare il valore che abbiamo denotato come  $\chi_c$ , condizionato al fronte di fiamma, per esempio in corrispondenza al punto stechiometrico, oppure di massima temperatura. Risulta allora possibile scrivere le (258) nella forma (240), richiesta dal modello.

Il modello *stretched laminar flamelets* risulta perciò in grado di trattare tanto la chimica a velocità finita (nell'ambito del regime  $t_c < t_K$ ) che la diffusione differenziale.

A titolo di esempio, riportiamo in fig. 34 gli andamenti di temperatura e concentrazione di ossigeno atomico (importante per la determinazione di NO, secondo la reazione {1}); si può notare come valori crescenti di  $\chi_c$  determinano un abbassamento della temperatura di picco della fiamma, ed un allargamento del picco stesso nello spazio di  $Z$ . Si noti anche lo stato inerte corrispondente a semplicemente miscelamento tra propano (a 300 K) ed aria (a 852 K). Per quanto riguarda l'ossigeno

atomico, si osserva dapprima un incremento della concentrazione all'aumentare di  $\chi_c$ , e successivamente una sua diminuzione. Questo perché la diminuzione dei tempi di residenza attraverso la fiamma, associata all'aumento di  $\chi_c$ , comporta dapprima uno sbilanciamento verso destra della reazione {22}, come indicato nella sez. 11; tuttavia, la sensibile diminuzione di temperatura associata con valori molto alti di  $\chi_c$  inibisce anche la dissociazione dell'ossigeno molecolare, cioè il passo diretto della {22}, per cui si forma molto poco ossigeno atomico.

L'effetto risultante sul termine di produzione di NO termico può essere constatato dalla fig. 35.

## 15 Modello 'stretched laminar flamelets' per combustione turbolenta premiscelata

Abbiamo visto che il modello della variabile di progresso per combustione turbolenta premiscelata consente di valutare unicamente la concentrazione delle quattro specie principali (combustibile, ossidante, prodotti, inerte), vedi sez. 7, mentre non consente di stimare la concentrazione di prodotti intermedi di reazione (come CO, ed anche radicali come O, H, OH). Un modello che consente di superare questo limite è ancora basato su una descrizione della combustione turbolenta premiscelata come un insieme di fiammelle laminari trasportate dalla turbolenza [87, 88, 59, 89]. Osserviamo in particolare che la combustione nei motori a scoppio (alimentati a carburatore) avviene tipicamente nel regime  $t_c < t_K$  delle *laminar flamelets*.

Anche in questo caso possiamo pensare di riscrivere le equazioni del moto adottando una trasformazione analoga alla (212), nella quale possiamo adottare come coordinata attraverso la fiamma la variabile di progresso, che possiamo per convenienza definire in questo caso come

$$c = \frac{T - T_0}{T_\infty - T_0} \quad (260)$$

Si noti che questa definizione è equivalente alla relazione (163), la quale però era stata ottenuta introducendo le sei ipotesi citate nella sez. 7. In questo contesto conserviamo solo le ipotesi di flusso a bassa velocità, adiabatico, e di combustione in sottili lamine; la (260) va intesa come una nuova *definizione* della variabile di progresso (adottabile in quanto la temperatura ha il desiderato andamento monotono attraverso la fiamma laminare), che rimpiazza la (158).

Mediante sviluppi analoghi a quelli visti nella sez. 13 si può arrivare ad esprimere il valore di una generica grandezza di stato  $\phi$  attraverso lo spessore di una fiamma laminare premiscelata sottoposta a *stretch* nella forma, analoga alla (240)

$$\phi = \phi(c; \chi_c) \quad (261)$$

dove  $\chi_c$  è il valore condizionato al fronte di fiamma di un tasso di dissipazione scalare definito in modo analogo alla (226)

$$\chi = 2D \frac{\partial c}{\partial x_k} \frac{\partial c}{\partial x_k} \quad (262)$$

Nel caso premiscelato, la locazione in corrispondenza alla quale valutare  $\chi_c$  può essere identificata con la posizione entro la fiamma ove la variabile di progresso raggiunge il valore  $c = 0.5$ . Per giustificare questa scelta, osserviamo che dalla (171) si evince facilmente che il tasso di produzione *mediato* raggiunge il massimo per  $\tilde{c} = 0.5$ ; nel caso attualmente in esame le cose possono essere lievemente diverse a causa delle differenti ipotesi e del significato un poco differente attribuito a  $c$ , e poi del fatto che stiamo considerando i valori *istantanei* del tasso di produzione, tuttavia è

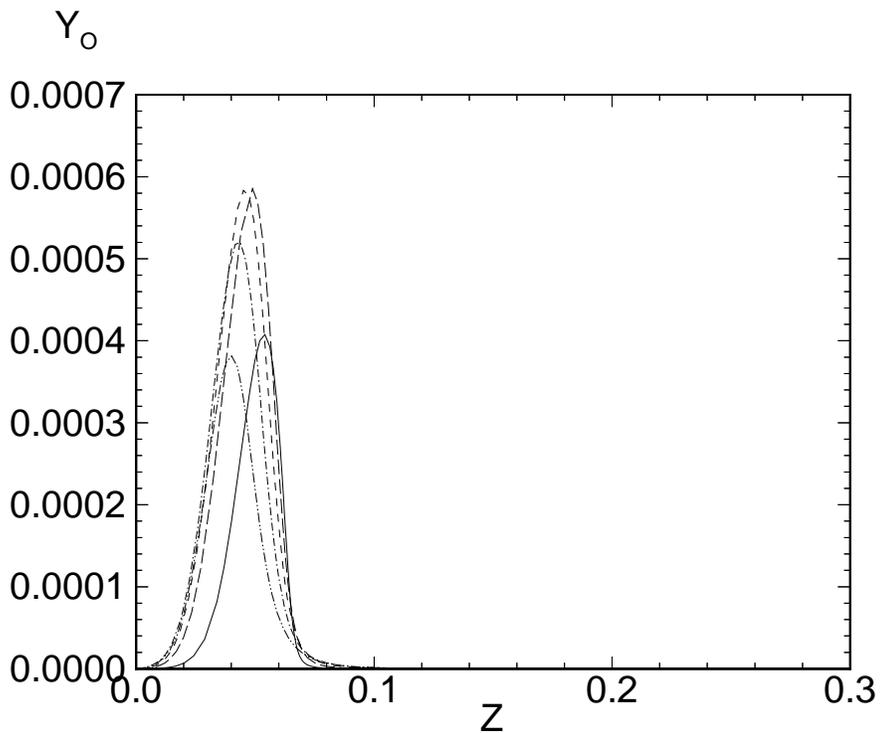
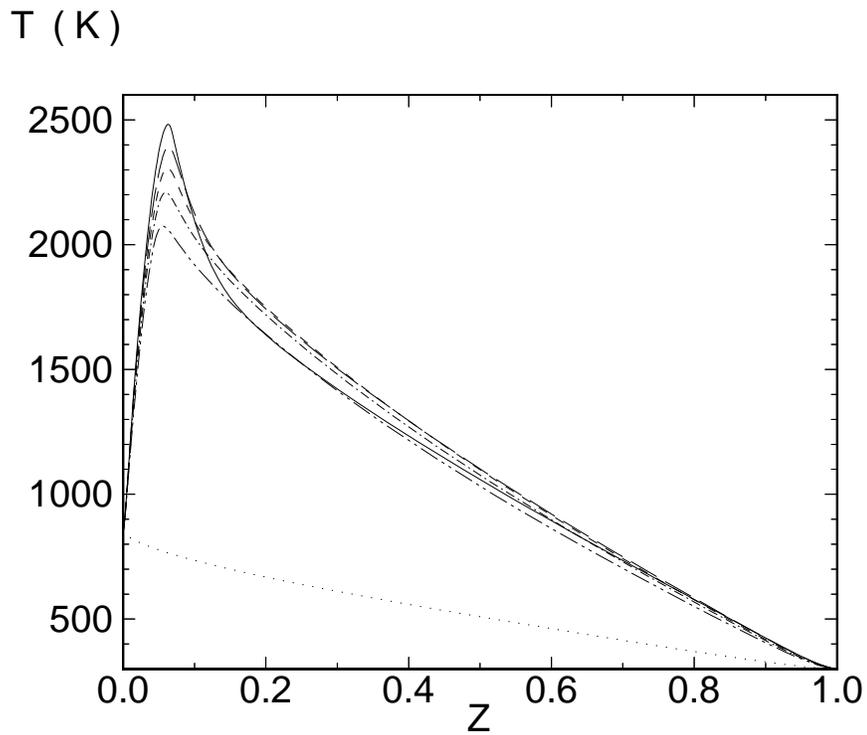


Figura 34: Temperatura (sopra) e concentrazione di ossigeno atomico (sotto) in una fiamma propano/aria, in funzione di  $Z$ , per: —  $\chi_c = 0.4 \text{ s}^{-1}$ , — —  $\chi_c = 12 \text{ s}^{-1}$ , — · —  $\chi_c = 26 \text{ s}^{-1}$ , · · —  $\chi_c = 309 \text{ s}^{-1}$ , — · · —  $\chi_c = 327 \text{ s}^{-1}$ , ··· stato inerte.

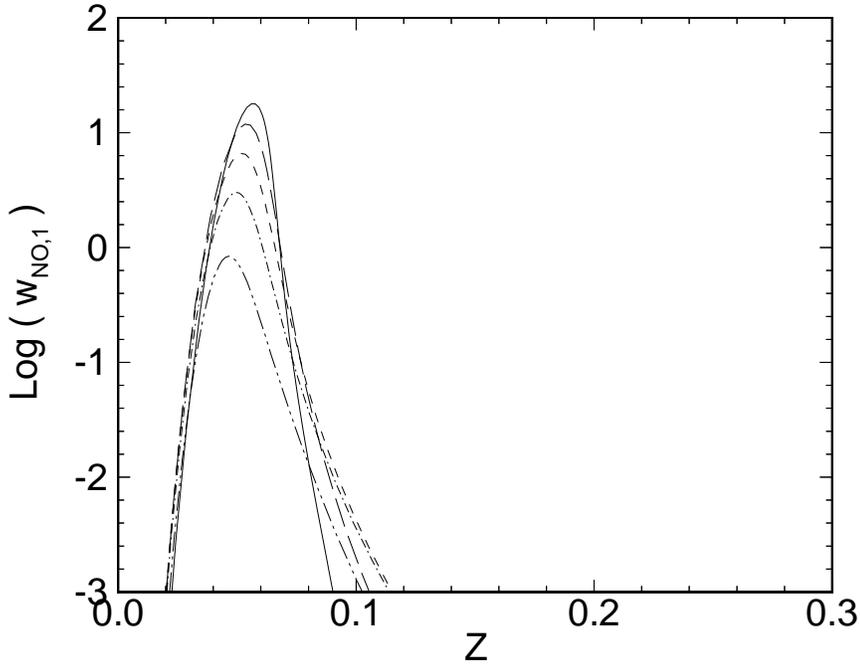


Figura 35: Tasso di produzione di NO termico [in  $\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s})$ ] in funzione dello scalare conservato e di  $\chi_c$ , per una fiamma propano/aria.

lecito continuare a supporre che la regione di massima attività chimica (ossia, quello che possiamo identificare come ‘fronte di fiamma’) si trovi nei pressi di  $c = 0.5$ .

Come per il caso nonpremiscelato, vedi sez. 14, le fiammelle laminari possono essere calcolate mediante appositi codici [85, 86, 6] tenendo conto di chimica a velocità finita e proprietà di trasporto dettagliate. Si fa ancora in genere riferimento ad una configurazione di fiamma ‘in controflusso’, in cui però i due getti contrapposti allineati sono alimentati uno con miscela fresca, l’altro con miscela completamente bruciata. Soluzione ancora migliore è quella di considerare due getti contrapposti, entrambi alimentati con miscela fresca, che formano perciò due fiamme premiscelate cosiddette ‘back to back’, con la miscela completamente bruciata che si localizza tra queste due fiamme; in questo modo si evita qualsiasi arbitrarietà nella definizione delle condizioni (temperatura e composizione) della miscela completamente bruciata. Anche in questo caso, il calcolo della fiamma laminare viene condotto solo sull’asse dei getti, ed il livello di *stretch* viene imposto indirettamente assegnando le velocità dei due getti, le quali determinano i valori dello *strain rate* (nel punto di stagnazione)  $a_s$ , come pure il valore del tasso di dissipazione scalare condizionato  $\chi_c$ . Le grandezze di stato (frazioni di massa delle specie e temperatura in particolare) saranno perciò ricavate lungo l’asse dei due getti contrapposti (adottato come asse  $x$ ) nella forma

$$\phi = \phi(x; a_s) \quad (263)$$

Dalla temperatura si ricava, per ogni  $x$ , il corrispondente valore della variabile di progresso definita dalla (260), per cui è anche possibile scrivere

$$c = c(x; a_s) \quad (264)$$

Essendo la  $c$  come funzione di  $x$  monotona entro lo spessore della fiamma, risulta possibile invertire la (264) per ottenere una

$$x = x(c; a_s) \quad (265)$$

Sostituendo questa espressione nella (263) si ottiene una forma

$$\phi = \phi[x(c; a_s); a_s] = \phi(c; a_s) \quad (266)$$

del tipo quindi richiesto dalla formulazione *stretched laminar flamelets*. Per identificare il valore di  $\chi_c$  corrispondente ad  $a_s$  (ossia, alle velocità imposte ai due flussi) si utilizza la (262), dove la derivata  $dc/dx$  si ricava dalla (264). In questo caso, in vista della definizione (260) adottata per la variabile di progresso, appare opportuno utilizzare un coefficiente di diffusione  $D$  relativo alla temperatura (o equivalentemente all'entalpia), per cui si può porre

$$D = \frac{\lambda}{\rho c_p} \quad (267)$$

Si ottengono in definitiva i valori delle grandezze di stato espressi nella forma desiderata (263).

Per valutare i valori *mediati* delle grandezze di stato, possiamo pensare di pesare la (266) con una funzione densità di probabilità; in questo caso però occorre considerare una pdf di due variabili,  $c$  e  $\chi_c$ , che indichiamo come  $P(c, \chi_c)$ . Essa è quindi definita in modo tale che  $P(c, \chi_c) dc d\chi_c$  rappresenti la probabilità che nel punto considerato la variabile di progresso assuma valori compresi tra  $c$  e  $c + dc$ , e simultaneamente il tasso di dissipazione scalare assuma valori compresi tra  $\chi_c$  e  $\chi_c + d\chi_c$ . I valori medi delle grandezze di stato, come pure della frazione di massa (266), possono di conseguenza essere espressi come

$$\bar{\phi} = \int_0^\infty \int_0^1 \phi(c, \chi_c) P(c, \chi_c) dc d\chi_c \quad (268)$$

Occorre perciò identificare una forma plausibile per la pdf  $P(c, \chi_c)$ . Come prima approssimazione possiamo ipotizzare, parallelamente a quanto abbiamo fatto per combustione nonpremiscelata, un'indipendenza statistica di  $c$  e  $\chi_c$ :

$$P(c, \chi_c) = P(c) P(\chi_c) \quad (269)$$

Per  $P(c)$ , ricordiamo che in combustione premiscelata la pdf della variabile di progresso ha un'espressione del tipo (181), che qui riportiamo

$$P(c) = \alpha \delta(c) + \beta \delta(1 - c) + \gamma f(c) \quad (270)$$

cioè consta di un picco di Dirac per  $c = 0$  (miscela fresca), un picco di Dirac per  $c = 1$  (miscela completamente bruciata), ed infine un contributo del modo reagente. Quest'ultimo contributo era stato trascurato nella sez. 7, ma qui intendiamo invece valutarlo, in quanto risulta necessario per poter estendere la trattazione ad altre specie oltre combustibile, ossidante, prodotti ed inerte. Per la pdf del modo reagente, potremmo per esempio al limite ipotizzare una  $f(c)$  costante con  $c$  (quindi identicamente uguale ad uno, dovendo soddisfare la condizione di normalizzazione), in quanto ciò rappresenterà comunque un miglioramento rispetto alla linea seguita nella formulazione originaria, vedi sez. 7, in cui tale modo viene trascurato del tutto ponendo  $\gamma = 0$ . Manteniamo comunque la notazione  $f(c)$  (che sottolinea la dipendenza da  $c$ ) per generalità; vedremo poi come affinare il modello.

Per quanto riguarda la pdf  $P(\chi_c)$ , assumiamo ancora, analogamente a quanto abbiamo operato per il caso nonpremiscelato, che essa sia descrivibile come una pdf log-normale, cioè del tipo (243). Il valor medio  $\tilde{\chi}$  sarà esprimibile attraverso l'analogia della (134), scritta per  $c''^2$  anziché  $\tilde{Z}''^2$ .

Rimangono da individuare i valori delle intensità  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ .  $\beta$  può ancora in prima approssimazione essere ricavato dalla (188). Mentre sotto l'ipotesi di combustione controllata dal miscelamento abbiamo assunto  $\gamma \simeq 0$ , e quindi utilizzato la (186), nel caso presente come detto vogliamo quantificare gli effetti di chimica a velocità finita, e quindi dobbiamo necessariamente valutarlo. A questo scopo, osserviamo che sotto le ipotesi correnti è senz'altro identificabile il valore *istantaneo* del termine sorgente della variabile di progresso, che qui abbiamo definito attraverso la (260). A rigore, occorrerebbe ricavare un'equazione di conservazione per la temperatura (a partire da quella per l'entalpia), ed adimensionalizzarla dividendola per il denominatore  $T_\infty - T_0$  della (260); il termine sorgente di tale equazione risulta ancora esprimibile nella forma (266), essendo funzione delle diverse variabili di stato. In maniera forse un po' più intuitiva, possiamo osservare che anche con la nuova definizione (260), la variabile di progresso conserva ancora essenzialmente (anche se non rigorosamente) il significato (158), cioè di rapporto tra termine sorgente dei prodotti, diviso la frazione di massa dei prodotti nella miscela completamente bruciata; questo rende ancora più evidente che  $w$  è una funzione delle variabili di stato, e può quindi essere espresso nella forma (266). Il termine *mediato* di produzione dei prodotti in un dato punto di una fiamma turbolenta può perciò essere espresso tramite la (268), utilizzando la pdf (275,276) dove però solo il modo reagente contribuisce al termine di produzione. Si può quindi esprimere il termine mediato nella forma

$$\bar{w} = \gamma \int_0^\infty \int_0^1 w(c; \chi_c) f(c) P(\chi_c) dc d\chi_c \quad (271)$$

Questa espressione deve essere confrontata con l'espressione empirica (172); eguagliandole, se ne ricava un'espressione per  $\gamma$ :

$$\gamma = C \frac{\tilde{c}}{\tilde{k}} \frac{\tilde{c} (1 - \tilde{c})}{\int_0^\infty \int_0^1 w(c; \chi_c) f(c) P(\chi_c) dc d\chi_c} \quad (272)$$

dove ovviamente  $\tilde{c}$ ,  $\tilde{k}$ ,  $\tilde{c}$ , nonché la  $\tilde{\chi}$  che compare nelle espressioni (243, 244) della distribuzione log-normale, devono essere considerate come funzioni del punto. L'intensità  $\alpha$  si può infine ricavare dalla (184):

$$\alpha = 1 - \beta - \gamma \quad (273)$$

Questo completa la chiusura termochimica. Possiamo a questo punto valutare le frazioni di massa *mediate* (alla Favre, per esempio) delle specie i cui tempi chimici caratteristici rispettano la condizione  $t_c < t_K$  come

$$\tilde{Y}_i = \frac{1}{\bar{\rho}} \left[ \alpha \rho_0 Y_{i,0} + \beta \rho_\infty Y_{i,\infty} + \gamma \frac{\rho_0}{1 + \tau c} \int_0^\infty \int_0^1 Y_i(c; \chi_c) f(c) P(\chi_c) dc d\chi_c \right] \quad (274)$$

Occorre tuttavia osservare che, a differenza di quanto proposto per combustione nonpremiscelata, in questo caso l'ipotesi di indipendenza statistica di  $c$  e  $\chi_c$  risulta meno giustificata [88]; adottiamo invece le seguenti assunzioni, che costituiscono un affinamento delle precedenti (268–274). La pdf delle due variabili  $c$  e  $\chi_c$  può essere scissa, per note proprietà statistiche, nel prodotto di una pdf di  $c$  *condizionata* al valore  $\chi_c$ , moltiplicata per la pdf di  $\chi_c$  stesso:

$$P(c, \chi_c) = P(c | \chi_c) P(\chi_c) \quad (275)$$

dove  $P(c | \chi_c)$  rappresenta appunto la pdf condizionata sopra indicata. Per esprimere quest'ultima, consideriamo una fiammella laminare corrispondente ad un particolare valore del parametro  $\chi_c$ ,

e cerchiamo di identificare la forma della pdf condizionata  $P(c | \chi_c)$ . La pdf condizionata della variabile  $c$  può in questo caso essere espressa come

$$P(c | \chi_{c,l}) = \alpha \delta(c) + \beta \delta(1 - c) + \gamma f(c | \chi_c) \quad (276)$$

cioè consta al solito di un picco di Dirac per  $c = 0$ , un picco per  $c = 1$ , ed infine un contributo del modo reagente, che però dipende dal particolare valore del parametro  $\chi_c$  considerato. Tale pdf del modo reagente può essere espressa nel modo seguente [54]

$$f(c | \chi_c) = \left[ \frac{dc}{dx/\delta_L} \right]^{-1} \quad (277)$$

dove  $\delta_L$  indica lo spessore della fiamma laminare sottoposta ad uno *stretch* di intensità  $\chi_c$ , e  $dx$  è lo spessore fisico della fiamma laminare corrispondente allo spessore  $dc$  nello spazio della variabile di progresso.

In modo simile a quanto già visto per le eq. (271–274), si trova

$$\bar{w} = \gamma \int_0^\infty \int_0^1 w(c; \chi_c) f(c | \chi_c) P(\chi_c) dc d\chi_c \quad (278)$$

$$\gamma = C \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\int_0^\infty \int_0^1 w(c; \chi_c) f(c | \chi_c) P(\chi_c) dc d\chi_c} \quad (279)$$

L'intensità  $\alpha$  si ricava ancora dalla (273). La media di Favre della frazione di massa della specie  $i$  si esprime quindi (ammesso che  $t_c < t_K$ )

$$\tilde{Y}_i = \frac{1}{\bar{\rho}} \left[ \alpha \rho_0 Y_{i,0} + \beta \rho_\infty Y_{i,\infty} + \gamma \frac{\rho_0}{1 + \tau c} \int_0^\infty \int_0^1 Y_i(c; \chi_c) f(c | \chi_c) P(\chi_c) dc d\chi_c \right] \quad (280)$$

Questa espressione è dunque in particolare applicabile a specie come CO, caratterizzate da scale dei tempi intermedie per cui la condizione  $t_c < t_K$  è presumibilmente avvicinata.

Occorre comunque notare che il sussistere della condizione  $t_c < t_K$  non deve essere interpretata come un vincolo rigido, in particolare a causa della difficoltà ad identificare i tempi caratteristici ed i regimi di combustione. Espressioni del tipo (280) potrebbero per esempio ancora risultare utilizzabili nel caso in cui il tempo chimico arrivi ad essere addirittura superiore al tempo di Kolmogorov, purché non più di un ordine di grandezza

Per specie per le quali al contrario vale la condizione  $t_c > t_I$  (come è tipicamente il caso dello NO termico), occorre invece introdurre un'equazione di conservazione mediata per la sua frazione di massa, nella quale occorre valutare il termine *mediato* di produzione della specie. Si può osservare che, essendo dalla (266) note in particolare le frazioni di massa delle specie, la densità e la temperatura in funzione di  $c$  e del parametro  $\chi_c$ , è anche possibile esprimere il tasso di produzione di tutte le specie in funzione delle stesse grandezze:

$$w_i = w_i(c; \chi_c) \quad (281)$$

e poi valutarne la media con un'espressione analoga alla (278), cioè

$$\bar{w}_i = \gamma \int_0^\infty \int_0^1 w_i(c; \chi_c) f(c | \chi_c) P(\chi_c) dc d\chi_c + \beta w_{i,\infty} \quad (282)$$

Si noti che abbiamo aggiunto un termine relativo alla produzione della specie  $i$  in condizioni di miscela completamente bruciata ( $c = 1$ ), a differenza di quanto abbiamo fatto per i prodotti

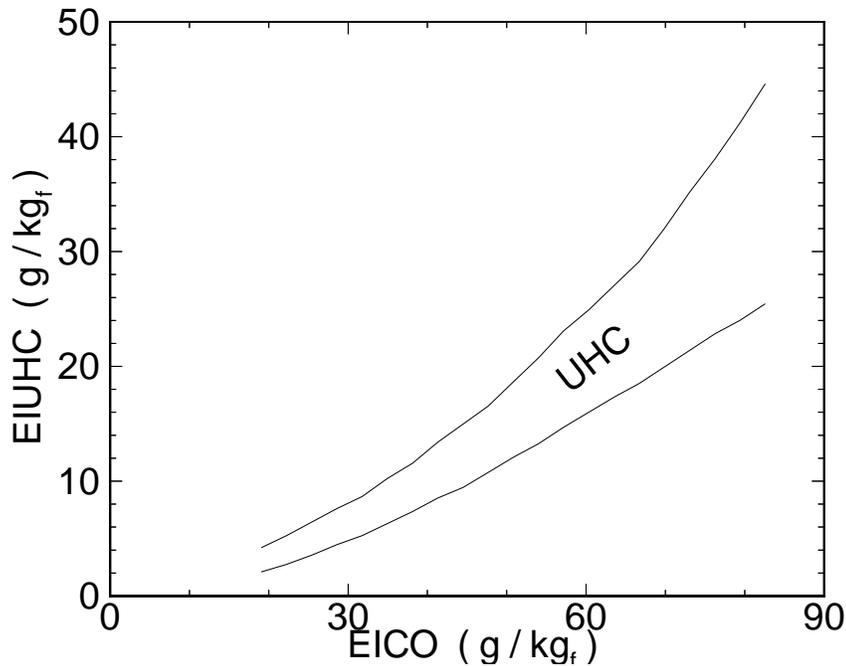


Figura 36: Tipica fascia di correlazione tra le emissioni di UHC e CO in una turbina a gas.

principali della combustione (271,278), il cui tasso di produzione si annulla effettivamente per miscela completamente bruciata. Infatti una miscela calda, ancorché completamente bruciata, continuerà a produrre, per esempio, ossido di azoto NO.

## 16 Previsione delle emissioni di idrocarburi incombusti (UHC)

Gli idrocarburi incombusti sono specie chimiche la cui concentrazione media potrebbe in linea di principio essere calcolata mediante modelli *stretched laminar flamelets*. Tuttavia, occorre osservare che i meccanismi che descrivono il dettaglio della formazione e distruzione di queste specie sono largamente sconosciuti. Alcuni tentativi di descrizione considerano combustibili cosiddetti *surrogati* [90, 91], che sostituiscono la composizione degli idrocarburi, estremamente complessa (comprendendo in genere migliaia di specie chimiche) – nonché variabile in relazione alla fonte di approvvigionamento, con una composizione fittizia con la quale si tenta di riprodurre grosso modo le principali caratteristiche chimiche dei combustibili. Per esempio, alcuni autori [90] approssimano il cherosene come una miscela di 11% di toluene  $C_7H_8$  ed 89% di *n*-decano  $C_{10}H_{22}$ ; un meccanismo comprendente 200 specie chimiche e 1100 reazioni è quindi utilizzato per descrivere la cinetica chimica della combustione. In alcuni casi, si arriva a considerare fino a 4000 reazioni. Occorre comunque osservare che la definizione di tali combustibili *surrogati* e della loro cinetica chimica è avvolta da grande incertezze. Eventuali previsioni della concentrazione media degli idrocarburi incombusti ricavata seguendo le linee indicate sopra sarebbero perciò alquanto aleatorie.

Dal punto di vista pratico, si osserva che le emissioni di UHC sono strettamente correlate a quelle di CO, poiché, come l'ossidazione di CO a  $CO_2$  è favorita da condizioni di alta temperatura, ambiente ricco di ossidante e lunghi tempi a disposizione per l'ossidazione, parimenti le stesse condizioni favoriscono la completa combustione degli idrocarburi incombusti. Tale osservazione è supportata da risultanze sperimentali [92], vedi fig. 36. Tale figura mostra come le emissioni di

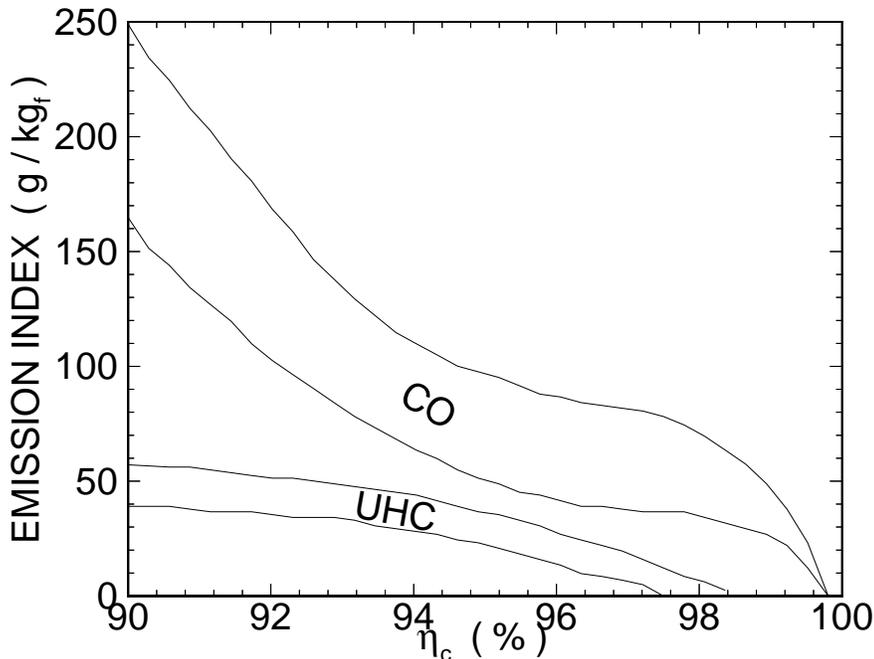


Figura 37: Tipiche fasce di correlazione tra le emissioni di UHC e CO in una turbina a gas, e corrispondente effetto sul rendimento di combustione.

UHC aumentano di pari passo con quelle di CO. Una riduzione delle emissioni di CO ed UHC implica una combustione più completa, che porta di conseguenza ad un più pieno sfruttamento del potenziale energetico del combustibile, quindi ad un aumento del rendimento di combustione, come si può vedere dalla fig. 37. Si noti che l'efficienza di combustione non raggiunge comunque mai il 100%, anche per ossidazione completa di CO e UHC; questa circostanza è dovuta alle perdite di calore attraverso le pareti della camera di combustione.

## 17 Previsione delle emissioni di *soot*

La formazione di *soot* avviene durante i processi di pirolisi e combustione ad alta temperatura di tutti gli idrocarburi [93, 94]. La pirolisi porta in particolare alla produzione di acetilene  $C_2H_2$ , la quale gioca un ruolo centrale nella formazione di *soot*. Attraverso di essa si ha la formazione delle prime particelle, le quali hanno diametri intorno ad 1 nm ( $10^{-9}$  m). Queste particelle successivamente crescono in dimensione per effetto di due meccanismi: a) coagulazione per collisione, e b) crescita in superficie. Il primo processo è fisico, il secondo chimico. Attraverso questi meccanismi le particelle crescono sino a raggiungere dimensioni dell'ordine di 1  $\mu$ m ( $10^{-6}$  m) o poco più. I processi di crescita sono tuttavia contrastati da processi di ossidazione delle particelle di *soot*, costituite principalmente da carbonio, poi da idrogeno, ed in misura minore da ossigeno. L'ossidazione avviene per attacco da parte di ossigeno molecolare  $O_2$  e di gruppi ossidrilici OH; in alcuni casi anche ossigeno atomico O,  $H_2O$  e  $CO_2$  possono avere un ruolo.

Questa premessa rende evidente il fatto che la concentrazione di *soot* è controllata da fenomeni non solo chimici, ma anche fisici. Tentativi di descrizione dei fenomeni chimici hanno portato a compilare meccanismi di reazione che coinvolgono centinaia di passi di reazione; il ruolo dei meccanismi fisici può tuttavia risultare dominante. Tutto ciò rende la quantificazione delle emissioni di *soot* alquanto

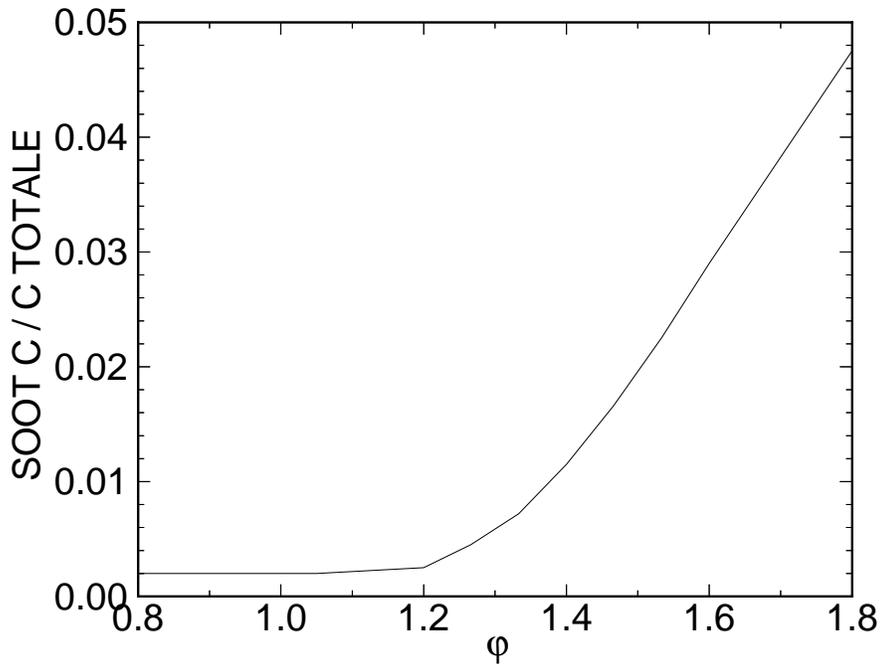


Figura 38: Frazione di carbone convertito in *soot* nella combustione di miscele di vapore di cherosene ed aria, in funzione del rapporto di equivalenza.

incerta. In molte applicazioni ci si accontenta perciò di un approccio parallelo a quello citato per gli idrocarburi incombusti, secondo il quale condizioni di alta temperatura, ambiente ossidante e lunghi tempi di residenza favoriscono l'ossidazione del *soot*. Quindi, le stesse condizioni che limitano le emissioni di CO, limitano anche le emissioni di *soot*. In alcuni fiamme di laboratorio si è addirittura osservata una proporzionalità diretta tra le emissioni di CO e *soot*, dell'ordine di 0.37 kg di CO emessa per kg di *soot* [95]. In realtà, occorre precisare che la formazione di *soot* si ha solo in combustione ricca, in particolare per  $\phi > 1.3$ , vedi anche la fig. 38 relativa a combustione di miscele di vapori di cherosene ed aria a pressioni tra 1.1 e 2.1 MPa [92]. Questa osservazione suggerisce anche che adottando combustione premiscelata, con un rapporto di equivalenza della miscela  $\phi < 1.3$ , si riesce praticamente ad eliminare del tutto le emissioni di *soot*. Nel caso di combustione nonpremiscelata invece esistono sempre zone dove localmente si ha  $\phi > 1.3$ , con conseguenti emissioni di *soot*.

In alcune applicazioni tuttavia sono necessarie indicazioni meno generiche sulle emissioni di *soot*, per esempio quando è necessario quantificare la radiazione da questo emessa (vedi sez. 20.2), oppure per motori diesel, i quali sono oggetto di specifiche regolamentazioni sulle emissioni di questo tipo. La questione se il processo di formazione del *soot* possa essere considerato 'veloce' oppure 'lento' è piuttosto dibattuta; tuttavia sicuramente il processo di ossidazione è relativamente lento, per cui la concentrazione del *soot* non può essere espressa tramite relazioni di stato del tipo (240). Occorre perciò introdurre (almeno) un'equazione di conservazione mediata per descrivere l'evoluzione della concentrazione media di *soot*. Sono disponibili alcuni modelli, nei quali sono introdotte una o due equazioni aggiuntive per descrivere il fenomeno (si parla pertanto di modelli ad una ed a due equazioni). La drastica riduzione della complessità del problema, rispetto alla situazione prospettata sopra, suggerisce che ci si possa attendere da questi modelli previsioni solo largamente approssimative della realtà. Un modello largamente utilizzato per combustione nonpremiscelata è

dovuto a Moss e collaboratori [96], e prevede due equazioni di conservazione, una per la densità numerica media  $\tilde{n}$  delle particelle di *soot*, ossia il numero medio di particelle per unità di volume, ed un'altra per la frazione di volume media  $\tilde{f}_v$  della miscela occupata da queste particelle:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \tilde{u}_k \frac{\tilde{n}}{N_0} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_Z} \frac{\partial(\tilde{n}/N_0)}{\partial x_k} \right] + \alpha - \beta \left( \frac{\tilde{n}}{N_0} \right)^2 - N_0^{1/3} \bar{\rho} \bar{\varepsilon} \left( \frac{\rho_s \tilde{f}_v}{\bar{\rho}} \right)^{-1/3} \left( \frac{\tilde{n}}{\rho N_0} \right)^{4/3} \quad (283)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho_s \tilde{u}_k \tilde{f}_v \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_Z} \frac{\partial(\rho_s \tilde{f}_v)}{\partial x_k} \right] + \gamma \tilde{n} + \delta - N_0^{1/3} \bar{\rho} \bar{\varepsilon} \left( \frac{\rho_s \tilde{f}_v}{\bar{\rho}} \right)^{2/3} \left( \frac{\tilde{n}}{\rho N_0} \right)^{4/3} \quad (284)$$

dove  $N_0$  è il numero di Avogadro,  $\rho_s$  è la densità del *soot* (posta pari a 1800 kg/m<sup>3</sup>), ed i termini in  $\alpha$  (e  $\delta$ ),  $\beta$ ,  $\gamma$  descrivono rispettivamente i processi di nucleazione, coagulazione e crescita superficiale:

$$\alpha = C_\alpha \bar{\rho}^2 \sqrt{\bar{T}} \bar{X}_c \exp\left(-\frac{T_\alpha}{\bar{T}}\right) \quad (285)$$

$$\beta = C_\beta \sqrt{\bar{T}} \quad (286)$$

$$\gamma = C_\gamma \bar{\rho} \sqrt{\bar{T}} \bar{X}_c \exp\left(-\frac{T_\gamma}{\bar{T}}\right) \quad (287)$$

$$\delta = 144 \alpha \quad (288)$$

$\bar{X}_c$  indica la media di Favre della frazione molare del combustibile; nell'ambito dell'approccio dello scalare conservato, questa grandezza, come pure  $\bar{\rho}$  e  $\bar{T}$ , può essere espressa in funzione dei valori locali della media e della varianza dello scalare conservato, vedi (143,131,142), la cui evoluzione è ancora descritta dalle equazioni (132,133). Se si adotta l'approccio delle *stretched laminar flamelets* occorre aggiungere la dipendenza dalla media del tasso di dissipazione scalare, data dalla (134). I valori  $C_\alpha$ ,  $C_\beta$ ,  $C_\gamma$ ,  $T_\alpha$ ,  $T_\gamma$  sono costanti del modello, identificate come

$$C_\alpha = 65400 \text{ m}^3/(\text{kg}^2 \text{ K}^{1/2} \text{ s}) \quad (289)$$

$$C_\beta = 13000000 \text{ m}^3/(\text{K}^{1/2} \text{ s}) \quad (290)$$

$$C_\gamma = 0.1 \text{ m}^3/(\text{kg}^{2/3} \text{ K}^{1/2} \text{ s}) \quad (291)$$

$$T_\alpha = 46100 \text{ K} \quad (292)$$

$$T_\gamma = 12600 \text{ K} \quad (293)$$

Il fatto che i termini in  $\alpha$  e  $\delta$  rappresentino il contributo della nucleazione si può intuire dalla circostanza che essi sono sempre positivi. Il termine in  $\beta$ , negativo, compare solo nell'equazione per  $\tilde{n}$ , mentre non influenza  $\tilde{f}_v$ , il che fa intuire il significato coagulativo. Invece il termine in  $\gamma$  compare solo nell'equazione per  $\tilde{f}_v$  con il segno positivo, il che è coerente con il significato citato di crescita superficiale. L'ultimo termine delle (283,284) tiene conto dell'ossidazione del *soot* da parte di O<sub>2</sub>, secondo il modello [97]. In questo termine la grandezza  $\bar{\varepsilon}$  (da non confondere con la dissipazione

meccanica  $\tilde{\epsilon}$ ) è una complessa funzione della temperatura e della pressione parziale dell'ossigeno molecolare. Il modello è stato poi esteso [98] per tener conto anche dell'effetto ossidante di OH, secondo il modello [99].

Un evidente limite di questo modello, come pure di altri simili [100, 101, 102], è che non viene tenuta in alcun conto l'interazione chimica fra la fase gassosa ed il *soot*, il fatto cioè che atomi (in particolare di carbonio) sono estratti dalla fase gassosa per formare particelle; di questo meccanismo non vi è traccia nel modello, che continua a descrivere la fase gassosa in termini di scalare conservato (quindi senza termini di produzione/distruzione).

## 18 Controllo delle emissioni di inquinanti

Da quanto abbiamo esposto nella sez. 1, si evince l'interesse a controllare le emissioni di inquinanti da tutti i sistemi che utilizzano la combustione. Tra essi, come abbiamo detto, sono oggetto di particolare attenzione gli ossidi di azoto  $\text{NO}_x$ , il monossido di carbonio CO, gli idrocarburi incombusti UHC, e gli ossidi di zolfo  $\text{SO}_x$ . Abbiamo anche detto che l'acqua  $\text{H}_2\text{O}$  rilasciata sotto forma di vapore o di gas, e l'anidride carbonica  $\text{CO}_2$  sono importanti agenti di serra; tuttavia, costituendo i prodotti di combustione principali degli idrocarburi, l'unico mezzo per ridurre le emissioni è quello di innalzare il rendimento di combustione  $\eta_c$ , ossia la frazione del potenziale energetico del combustibile che viene effettivamente utilizzata, in modo da ridurre il consumo. Abbiamo inoltre detto che nella combustione dei diversi tipi di carbone si ha una notevole produzione di cenere.

È importante osservare che, mentre è facile individuare strategie che consentono di limitare le emissioni di *singoli* inquinanti, queste strategie portano a requisiti in conflitto tra di loro quando si tratta di contenere le emissioni di *più* specie inquinanti. Possiamo infatti individuare due classi di inquinanti che portano a requisiti opposti per il contenimento delle emissioni:

- ossidi di azoto  $\text{NO}_x$ , i quali sono in gran parte generati attraverso il meccanismo termico, estremamente sensibile alla temperatura. Per ridurre le relative emissioni, è quindi necessario limitare la temperatura alla quale si opera (per esempio facendo avvenire la combustione in condizioni relativamente lontane da quelle stechiometriche, oppure raffreddando la fiamma mediante iniezione di gas freddi o acqua). Inoltre, per contenere le emissioni di NO termico, è opportuno operare in condizioni di penuria di ossidante, cioè con rapporti di equivalenza  $\varphi > 1$ , perché le reazioni {1,2} del meccanismo termico risultano favorite dalla presenza di ossidante (sotto forma di ossigeno atomico o molecolare); una penuria di OH risulta anch'essa vantaggiosa, in quanto inibisce la reazione {3}. Ancora, poiché la formazione di NO termico è un processo alquanto lento (rispetto alle tipiche scale dei tempi delle reazioni significative dal punto di vista energetico) risulta indicato contenere i tempi di residenza in camera di combustione. Si noti però che in molte applicazioni c'è un interesse ad operare ad alta temperatura, in quanto ciò porta in genere ad aumentare il lavoro specifico compiuto dal fluido operativo; per esempio, nelle turbine a gas una più alta temperatura in camera di combustione permette di elaborare portate minori (a parità di potenza), e quindi di avere motori più compatti e leggeri (vantaggio quest'ultimo particolarmente apprezzato nel campo aeronautico);
- monossido di carbonio CO, idrocarburi incombusti UHC e *soot*. Abbiamo visto che CO si ossida a  $\text{CO}_2$  principalmente attraverso le reazioni {23,24}; tali reazioni sono favorite dall'alta temperatura, quindi per ridurre le emissioni di CO è opportuno operare ad alta temperatura, cioè in condizione prossime allo stechiometrico, compatibilmente con i limiti imposti dalle massime temperature accettabili dalla camera. Se tali limiti impongono di operare in

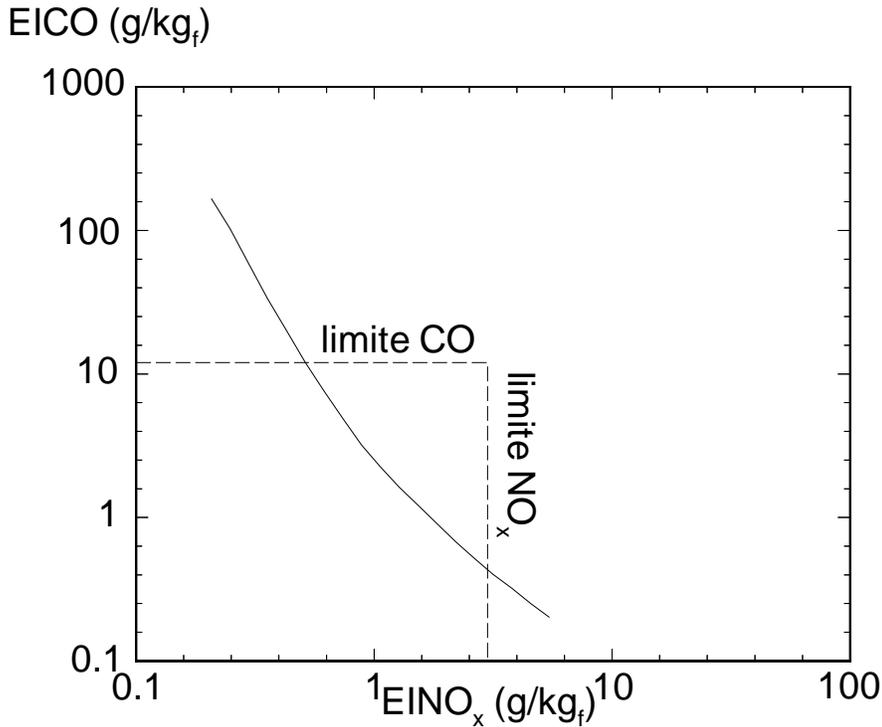


Figura 39: Tipico andamento delle emissioni di  $\text{NO}_x$  e CO in una turbina a gas al variare delle condizioni operative.

condizioni un poco discoste da quelle stechiometriche, è casomai opportuno far avvenire la combustione in condizioni povere di combustibile ( $\varphi < 1$ ), in modo che vi sia eccesso di specie ossidanti, come OH, e quindi favorire la reazione di conversione {24}. È inoltre opportuno disegnare la camera di combustione in modo tale che il tempo di residenza sia abbastanza lungo da consentire di completare la conversione di CO a  $\text{CO}_2$ . Le tre condizioni indicate (alta temperatura, ambiente ossidante, tempi di residenza lunghi) portano anche a contenere le emissioni di idrocarburi incombusti e di *soot*, come osservato nelle sez. 16, 17. Infine, una migliore conversione di CO a  $\text{CO}_2$ , insieme ad una riduzione degli incombusti e delle emissioni di *soot*, porta all'importante risultato di migliorare il rendimento di combustione  $\eta_c$ , ossia di diminuire i consumi (ed indirettamente quindi a ridurre anche le emissioni di gas di serra).

I requisiti per ridurre le emissioni di  $\text{NO}_x$  sono quindi del tutto opposti a quelli che consentono di ridurre le emissioni di CO, UHC, *soot*, e di migliorare il rendimento di combustione  $\eta_c$  ed il lavoro specifico. La situazione è esemplificata dalla fig. 39, la quale riporta una tipica curva caratteristica dell'andamento delle emissioni di CO e  $\text{NO}_x$  in una turbina a gas. Come si vede, una riduzione delle emissioni di  $\text{NO}_x$  si può avere solo a prezzo di un incremento delle emissioni di CO, e viceversa. In particolare, per una turbina a gas aeronautica, le condizioni all'estremo a destra in basso della curva sono avvicinate al momento del decollo, quando è richiesta la massima spinta (se il motore è un turbogetto) o la massima potenza (se è un turboelica), per cui la combustione viene fatta avvenire in condizioni prossime allo stechiometrico per innalzare quanto più possibile la temperatura e quindi il lavoro specifico (lavoro compiuto da un'unità di massa di fluido operativo). Le condizioni all'estremo in alto a sinistra della curva sono invece conseguite quando il motore lavora in *idle*, cioè gira senza produrre apprezzabile potenza, come si verifica in alcune fasi di *taxing* a terra. Il punto di lavoro del motore, per poter rispettare i limiti sulle emissioni tanto di CO che di  $\text{NO}_x$ , dovrà perciò trovarsi nel tratto della curva che si trova all'interno del quadrato tratteggiato. Se ne

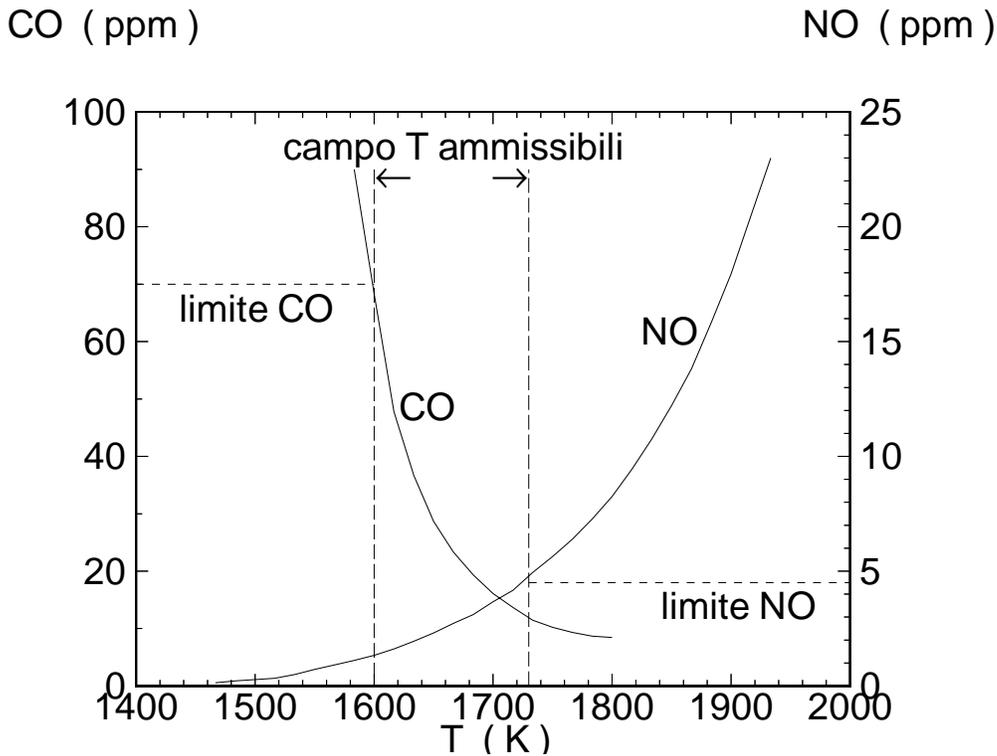


Figura 40: Tipico andamento delle emissioni di  $\text{NO}_x$  e CO in un motore alternativo al variare della temperatura della zona di fiamma.

deduce perciò che il confronto tra differenti soluzioni di progetto della camera di combustione non andrà tanto effettuato sulle emissioni di CO e di  $\text{NO}_x$  *prese singolarmente*, ma su tutta la curva caratteristica delle emissioni. Una soluzione progettuale potrà allora essere considerata migliore di un'altra se porta ad una curva caratteristica più vicina all'origine.

La situazione può anche essere illustrata riportando le emissioni di CO e  $\text{NO}_x$  in funzione di uno dei parametri controllanti indicati sopra, per esempio la temperatura. La fig. 40 riporta i tipici andamenti delle emissioni di questi due inquinanti in funzione della temperatura della zona di fiamma per un motore alternativo, insieme alle condizioni che corrispondono ai limiti di emissione per autoveicoli. Come ci si poteva attendere, le emissioni di CO diminuiscono con la temperatura, mentre quelle di  $\text{NO}_x$  aumentano. Il motore rientra nei limiti sulle emissioni di CO se opera ad una temperatura maggiore di 1600 K, mentre soddisfa i limiti sulle emissioni di  $\text{NO}_x$  se opera ad una temperatura inferiore a 1730 K. Ne consegue che, per rispettare entrambi i limiti, il motore dovrà operare a temperature comprese nell'intervallo tra i 1600 ed i 1730 K. Questa indicazione sottolinea come la limitazione delle emissioni di inquinanti esiga un accurato controllo delle condizioni di combustione.

Andamenti analoghi a quelli riportati in fig. 40 si sarebbero potuti ricavare riportando in ascissa l'uno o all'altro dei rimanenti parametri controllanti indicati sopra, ossia il rapporto di equivalenza  $\varphi$  oppure il tempo di residenza in camera di combustione. In quest'ultimo caso, per esempio, si sarebbero ottenute basse emissioni di  $\text{NO}_x$  ed alte emissioni di CO per bassi valori del tempo di residenza, e viceversa per alti valori.

L'importanza di contenere la temperatura entro stretti limiti comporta anche che occorre controllare l'intensità delle fluttuazioni turbulente. Fluttuazioni di temperatura sono dovute in particolare a possibili non uniformità della distribuzione aria-combustibile, le quali possono generare sacche che bruciano a temperature al di fuori dei limiti consentiti. Anche se di estensione limitata, queste

sacche possono dar luogo ad importanti emissioni dell'uno o dell'altro inquinante. Occorre quindi fare in modo da assicurare l'uniformità delle condizioni di combustione.

Diversi sono gli accorgimenti che possono essere usati, nei molti dispositivi che sfruttano la combustione, per conseguire una riduzione delle emissioni delle due classi di inquinanti sopra considerate. Ci limitiamo a riportare a titolo indicativo la soluzione della combustione a stadi (*staged combustion*), di possibile utilizzo nelle turbine a gas, che esemplifica bene come possono essere sfruttate in pratica le indicazioni ricavate sopra. In una turbina a gas il fluido operativo (essenzialmente aria atmosferica, più una piccola percentuale di combustibile che brucia producendo prodotti di combustione) deve essere portato dalla temperatura relativamente bassa (con la quale affluisce dal compressore che precede la camera di combustione) ad un'alta temperatura per poter produrre lavoro nell'espansione in turbina (espansione che eventualmente, se si tratta di una turbina a gas aeronautica, prosegue nell'ugello). La temperatura accettabile in turbina è limitata dalla resistenza del materiale che costituisce le palette; per questo motivo si opera con un forte eccesso di aria (combustione globalmente povera,  $\varphi < 0.4$ ). Tuttavia, combustibile ed ossidante possono accendersi solo in proporzioni prossime allo stechiometrico (per esempio,  $0.5 < \varphi < 1.5$ ), per cui la camera di combustione deve prevedere una zona *primaria*, nella quale appunto si fa avvenire la combustione in condizioni prossime allo stechiometrico, ed una successiva zona di diluizione, in cui i prodotti di combustione sono diluiti con abbondante aria per contenere la temperatura entro livelli accettabili per la turbina. Nel combustore di una turbina a gas convenzionale, l'innalzamento di temperatura avviene mediante un singolo stadio, e porta quindi a temperature molto elevate nella zona primaria (con conseguenti elevate emissioni di  $\text{NO}_x$ ), e temperature relativamente basse nella parte secondaria, con conseguenti elevate emissioni di CO, vedi fig. 41 (in alto<sup>25</sup>). In un combustore a stadi invece, laddove la temperatura della zona primaria diviene troppo alta per rispettare i limiti sugli ossidi di azoto, la combustione viene rapidamente soppressa immettendo aria fredda, in modo tale da far scendere la temperatura – pur mantenendola al disopra del valore al disotto del quale si hanno eccessive emissioni di CO, poi viene immesso altro combustibile per far risalire la temperatura, ed eventualmente il processo può essere ripetuto per più stadi. La situazione è esemplificata dalla fig. 41 (in basso), che fa riferimento ad uno *staging* assiale (ma si potrebbe anche adottare una soluzione con *staging* radiale).

Come abbiamo detto, la CO si forma nelle regioni fredde del combustore, quindi nelle turbine a gas essa si forma in particolare vicino alle pareti della camera, che sono raffreddate. Questo indica che per contenere le emissioni di CO conviene adottare combustori con un basso rapporto tra superficie delle pareti e volume (quindi per esempio combustori anulari anziché 'a canna').

Occorre comunque osservare che per il controllo delle emissioni di inquinanti sono ampiamente adottate, nelle turbine a gas in particolare, soluzioni dettate dall'esperienza mediante processi di *try-and-cut* (prova e aggiusta). In questo contesto, i modelli per la previsione delle emissioni di inquinanti considerati in queste note possono dare un importante contributo, in quanto permettono di sostituire le lunghe e costose prove sperimentali con previsioni numeriche generate mediante codici di fluidodinamica computazionale, che al confronto sono rapide ed economiche. Tali previsioni consentono di individuare gli andamenti tendenziali delle emissioni di inquinanti al variare dei parametri di progetto. Naturalmente, l'affidabilità delle previsioni numeriche dipende direttamente dalla bontà del modello utilizzato.

---

<sup>25</sup>In realtà in una turbina a gas la temperatura varia in tutte e tre le direzioni coordinate. La figura deve perciò essere interpretata in senso qualitativo, come un andamento lungo l'asse della camera di una media spaziale della temperatura, operata su una sezione normale all'asse stesso.

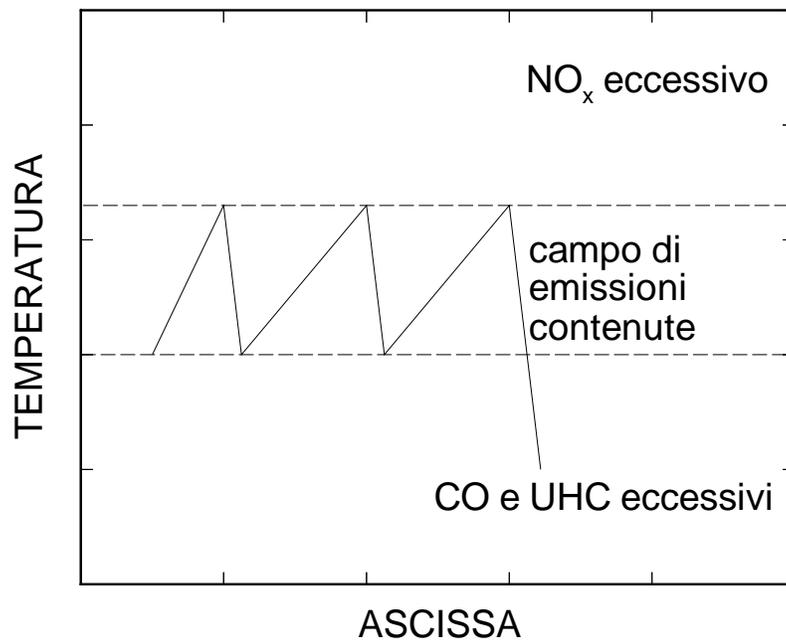
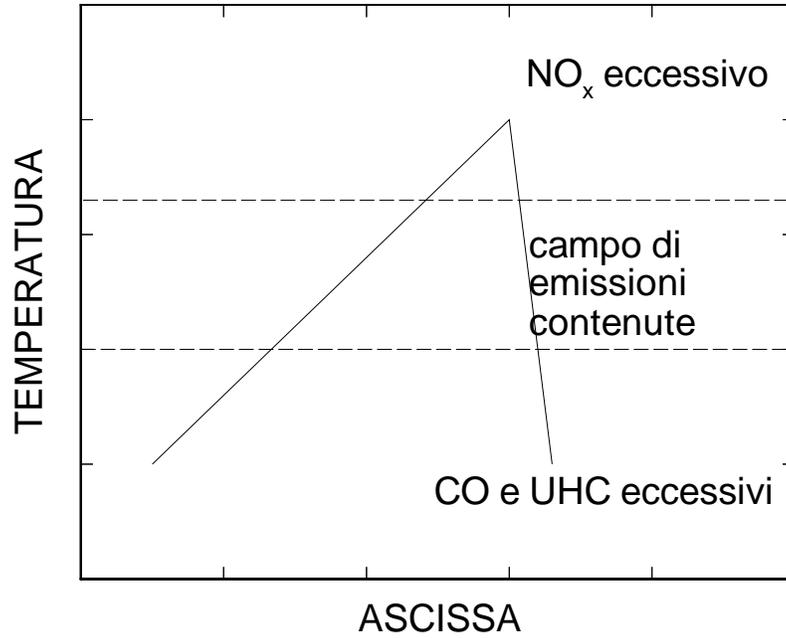


Figura 41: Andamento indicativo delle temperature lungo l'asse di un combustore per turbina a gas convenzionale (in alto) e di un combustore a tre stadi (in basso).

## 18.1 Controllo delle emissioni di SO<sub>x</sub>

I processi che portano alla formazione di ossidi di zolfo SO<sub>x</sub> sono caratterizzati da chimica veloce, per cui sostanzialmente tutto lo zolfo contenuto nel combustibile si trasforma in SO<sub>x</sub>. L'unico mezzo per contenere quindi le emissioni di queste specie inquinanti è il pre-trattamento del combustibile al fine di ridurre il contenuto di zolfo (procedimento comunque costoso), oppure l'abbattimento delle emissioni mediante post-trattamento dei prodotti di combustione, vedi sez. 19.2.

# 19 Abbattimento delle emissioni di inquinanti

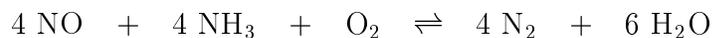
In molti casi le misure che possono essere prese per contenere le emissioni di inquinanti secondo le linee precedentemente indicate non sono sufficienti ad assicurare il rispetto delle normative sulle emissioni. Occorre quindi utilizzare altre tecniche, che in buona parte si configurano come un post-trattamento dei prodotti che escono dalla camera di combustione. Esaminiamo queste tecniche per i differenti inquinanti.

## 19.1 Abbattimento delle emissioni di NO<sub>x</sub>

Queste tecniche sono anche indicate come De-NO<sub>x</sub>. Questi metodi non sono però in particolare applicabili a turbine a gas aeronautiche, in quanto richiedono l'impiego di ingenti quantità di sostanze ausiliare, ed inoltre, nel caso della SCR, non sono utilizzabili causa la troppo alta temperatura in uscita dei prodotti di combustione, e le inaccettabili cadute di pressione che comporterebbero (per non parlare di pesi ed ingombri).

### 19.1.1 Riduzione selettiva non catalitica (SNCR)

La riduzione selettiva non catalitica (*Selective Non-Catalytic Reduction*, SNCR) prevede l'iniezione di ammoniaca NH<sub>3</sub> oppure urea NH<sub>2</sub>CO le quali, in una finestra di temperatura compresa tra i 1200 ed i 1300 K circa, riducono il monossido di azoto, in un ambiente ossidante, secondo la reazione

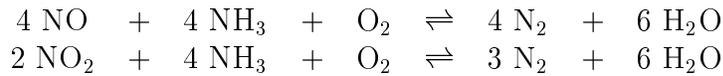


Occorre quindi scegliere il punto di iniezione in modo che la temperatura prevalente dei prodotti di combustione ricada nell'intervallo indicato (peraltro piuttosto limitato).

Altre tecniche prevedono l'iniezione di acqua H<sub>2</sub>O in camera, che consente di abbassare la temperatura di combustione e quindi ridurre le emissioni di NO<sub>x</sub>, senza penalizzare eccessivamente le emissioni di CO grazie all'attivazione della reazione {23} di ossidazione del monossido di carbonio a CO<sub>2</sub>. Tuttavia la riduzione della temperatura penalizza il lavoro specifico ottenibile, ed è inoltre richiesta una portata di acqua compresa tra 0.5 e 2 volte la portata di combustibile. Ancora, nel processo RAPRENO<sub>x</sub> [66], l'abbattimento dello NO è conseguito mediante iniezione di acido cianurico HCN.

### 19.1.2 Riduzione selettiva catalitica (SCR)

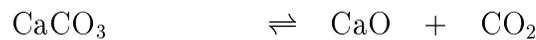
La riduzione selettiva catalitica (*Selective Catalytic Reduction*, SCR) permette di operare a temperature alquanto più basse, dell'ordine dei 600–700 K. I prodotti di combustione, ancora addizionati con ammoniaca, vengono fatti passare attraverso un catalizzatore con una struttura a nido d'ape (in modo da offrire una grande superficie di contatto tra i gas ed il catalizzatore solido), costituito da ossidi metallici (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, WO<sub>3</sub>, MoO<sub>3</sub>). L'azione del catalizzatore promuove le reazioni



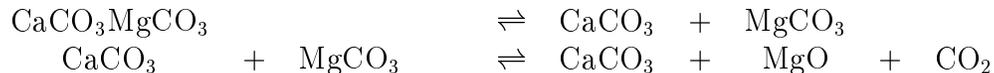
L'efficienza di rimozione può arrivare al 90%. La presenza del catalizzatore richiede però particolare attenzioni. I fumi di alcuni combustibili pesanti possono 'avvelenare' il catalizzatore per la presenza di tracce di arsenico e vanadio; la stessa cosa avverrebbe utilizzando benzina addizionata con tetraetilato di piombo come antidetonante. Inoltre, occorre possibilmente eliminare le polveri dai fumi, vedi sez. 19.3, per evitare che esse intasino le celle del catalizzatore. L'uso di precipitatori elettrostatici a tale scopo, alle temperature di 600–700 K, comporterebbe soluzioni costose (essendo l'ottimo per i precipitatori intorno ai 350–550 K). Si possono alternativamente usare tecniche rigenerative, nelle quali i fumi ancora caldi passano dapprima attraverso uno scambiatore di calore in cui sono raffreddati grazie ad un fluido ausiliario (che quindi si riscalda), fino a giungere ad una temperatura tale da consentire la precipitazione elettrostatica delle polveri (ed eventualmente eliminando anche  $\text{SO}_x$  a freddo, con le tecniche descritte nella sez. 19.2, in quanto dannosi per SCR), dopodiché i fumi sono nuovamente inviati in controcorrente in uno scambiatore di calore dove sono riscaldati dal fluido ausiliario (ormai caldo) sopra citato, fino a raggiungere una temperatura tale da consentire la SCR. Nel caso non sia conveniente utilizzare questa soluzione, si possono inviare nel catalizzatore i fumi non filtrati, ma occorre operare pulizie periodiche del catalizzatore stesso. Un inconveniente comune a SCR e SNCR è che i fumi possono contenere una certa quantità di ammoniaca, la quale deve essere contenuta sotto 5 ppm. Ciò può nel caso della SCR comportare la periodica sostituzione del catalizzatore, per esempio dopo un periodo di impiego da uno a quattro anni.

## 19.2 Abbattimento delle emissioni di $\text{SO}_x$

Queste tecniche prevedono la 'cattura' dell'anidride solforosa  $\text{SO}_2$ , sia direttamente in camera di combustione oppure a valle di essa, mediante sostanze sorbenti quali calce ( $\text{CaO}$ ), calce idrata [ $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ], calcare ( $\text{CaCO}_3$ ) o dolomite ( $\text{CaCO}_3\text{MgCO}_3$ ). La specie che effettivamente cattura la  $\text{SO}_2$  è in ogni caso la  $\text{CaO}$ , quindi nel caso si utilizzi il calcare, esso viene prima decomposto termicamente attraverso la reazione



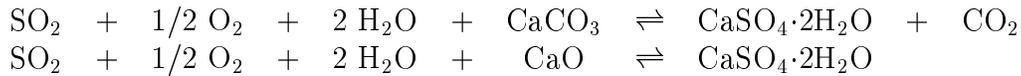
Qualora si usi dolomite, essa viene dapprima decomposta a  $\text{CaCO}_3$  attraverso le reazioni



e quindi decomposta a  $\text{CaO}$  secondo la reazione già vista. Analoga decomposizione a  $\text{CaO}$  si produce usando calce idrata. Una volta disponibile la  $\text{CaO}$ , l'anidride solforosa viene catturata come solfato di calcio (solido, quindi separabile dai fumi attraverso precipitatori elettrostatici) attraverso la reazione



la quale risulta particolarmente efficace nel campo di temperature comprese tra i 1100 ed i 1400 K. Il punto in cui iniettare il sorbente deve essere quindi scelto in modo da avvicinare questa condizione. Altre tecniche, sempre basate sull'uso di  $\text{CaO}$  o  $\text{CaCO}_3$ , possono essere utilizzate a temperature più basse in torri aperte dalle quali viene iniettato il sorbente in soluzione liquida. Le reazioni che portano alla rimozione di anidride solforosa sono (a seconda che si usi calcare o calce)



Il sottoprodotto del processo è quindi gesso, che può essere riciclato per altri impieghi.

### 19.3 Abbattimento delle emissioni di *soot* e ceneri

Per rimuovere *soot* e ceneri volatili (quest'ultime si formano nella combustione del carbone) si può ricorrere a precipitatori elettrostatici. I fumi vengono fatti passare attraverso piastre tra le quali è stabilita una differenza di potenziale. Gli ioni che sono emessi dalle piastre si attaccano alle particelle di *soot* o di cenere, le quali saranno poi attratte dalla piastra a carica di segno opposto. Le piastre devono essere periodicamente 'raschiate' per rimuovere le polveri su di esse depositate; in alcuni casi si ricorre ad un sistema vibrante ad una frequenza di qualche kHz per scuotere le polveri.

Si può anche ricorrere al filtraggio dei fumi attraverso appositi feltri.

### 19.4 Abbattimento delle emissioni di CO<sub>2</sub>

In considerazione del suo potenziale come gas di serra, si è pensato di adottare tecniche di rimozione anche per l'anidride carbonica. Sono previste tecniche in cui la CO<sub>2</sub> viene 'sequestrata' o negli oceani o nel sottosuolo. Nel primo caso, la CO<sub>2</sub> può essere direttamente dissolta negli oceani, oppure liquefatta per formare un lago sul fondo, o addirittura congelata e lasciata depositare sul fondo. Nel secondo caso, si può pensare di farla assorbire da strati rocciosi porosi, ad esempio costituiti da arenaria, oppure di pomparla in miniere di carbone non sfruttabili economicamente, o in pozzi petroliferi o metaniferi esauriti, od ancora in acque sotterranee saline [103]. Queste ipotesi comunque sono tutte da verificare in termini di costi e sicurezza.

Ad ogni modo, il mezzo primario per ridurre le emissioni di CO<sub>2</sub> è l'utilizzo di combustibili ad alto rapporto idrogeno/carbone H/C. Questo rapporto è sostanzialmente zero per il carbone, ha valori intorno a 2 per idrocarburi liquidi, e raggiunge un massimo pari a 4 per il metano CH<sub>4</sub>.

## 20 Modellistica dello scambio termico radiativo

In alcune applicazioni, lo scambio termico con superfici solide gioca un ruolo essenziale nel determinare il campo di temperatura entro la camera di combustione o caldaia, e di conseguenza le emissioni degli inquinanti. In alcune applicazioni, come le caldaie dei generatori di vapore, lo scambio termico con le pareti è proprio l'obiettivo progettuale. Tale scambio termico può avvenire per convezione e per irraggiamento. In particolare, nelle grandi caldaie di centrali termoelettriche lo scambio termico per radiazione può arrivare a contribuire oltre il 95% allo scambio termico complessivo. Consideriamo perciò in particolare l'aspetto radiativo, comunque di peculiare interesse nei processi di combustione.

Si noti che lo scambio termico influenza anche il campo di moto, in quanto la densità è influenzata dalla temperatura attraverso l'equazione termica di stato (1,6).

Se consideriamo combustione nonpremiscelata (i ragionamenti che seguono possono essere estesi a combustione premiscelata, mediante un opportuno parallelo con le sez. 7 e 15), dobbiamo modificare l'approccio dello scalare conservato (che nella sua forma originaria è basato sull'ipotesi di flusso adiabatico), o quello delle *stretched laminar flamelets* che è una sua derivazione. Al fine di considerare lo scambio termico, occorre introdurre una terza quantità oltre a  $Z$  e  $\chi_c$ , poiché in questo caso lo scalare conservato non rappresenta più l'entalpia secondo la (128). È conveniente

introdurre un ‘difetto di entalpia’ [104] qui indicato come  $\zeta$ , definito come la differenza tra l’entalpia effettiva e l’entalpia di una fiamma adiabatica con lo stesso valore di  $Z$  [105]. Allora, il valore istantaneo di una generica grandezza di stato  $\phi$  può essere espresso come

$$\phi = \phi(Z; \chi_c; \zeta) \quad (294)$$

I valori medi delle grandezze di stato in una fiamma turbolenta possono essere ricavati introducendo una pdf congiunta delle tre variabili  $Z$ ,  $\chi_c$  and  $\zeta$ . Quindi, si possono ottenere medie convenzionali tramite convoluzione con la pdf, cioè

$$\bar{\phi} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^1 \phi(Z; \chi_c; \zeta) P(Z, \chi_c, \zeta) dZ d\chi_c d\zeta \quad (295)$$

dove il campo di integrazione di  $\zeta$  è stato esteso, per maggior generalità, per comprendere gli effetti tanto di perdita che di acquisto di calore. Le medie di Favre possono essere ricavate in modo simile, come media convenzionale del prodotto della grandezza di stato considerata per la densità, diviso la densità media.

Assumendo che le tre grandezze di stato fondamentali siano statisticamente indipendenti, la pdf congiunta può essere scissa nel prodotto di tre pdf ordinarie:

$$P(Z, \chi_c, \zeta) = P(Z) P(\chi_c) P(\zeta) \quad (296)$$

Questa ipotesi richiede qualche commento, essendo l’indipendenza rispetto a  $\zeta$  effettivamente stata introdotta per pura convenienza computazionale; ad ogni modo, occorre osservare che mentre  $Z$  e l’entalpia sono fortemente accoppiate (nel caso limite di flusso adiabatico, sono legate linearmente), questo non è più vero per  $Z$  ed il *difetto* di entalpia  $\zeta$ , poiché quest’ultima grandezza ha un significato del tutto indipendente da  $Z$ , essendo legata allo scambio termico radiativo (e/o convettivo) piuttosto che a convezione e diffusione (molecolare e turbolenta). Rimane da identificare la forma della pdf  $P(\zeta)$ . Assumiamo come prima approssimazione semplicemente una funzione  $\delta$  (ovverosia un picco per  $\zeta$  uguale al valore medio locale  $\tilde{\zeta}$ , il che equivale a trascurare l’effetto delle fluttuazioni del difetto di entalpia)

$$P(\zeta) = \delta(\zeta - \tilde{\zeta}) \quad (297)$$

per facilità di incorporazione in codici calcolo esistenti, per quanto sia possibile una determinazione più accurata [106].

I dati termochimici richiesti come input dal modello prevedono una libreria di fiammelle laminari, cioè un insieme di profili di fiammelle che diano le proprietà di stato di interesse come funzione di  $Z$ , con  $\chi_c$  e  $\zeta$  come parametri. I profili devono essere organizzati in ‘scaffali’, dove un singolo scaffale contiene fiammelle che fanno riferimento a valori di  $\chi_c$  che vanno dall’equilibrio all’estinzione, più lo stato inerte di miscelamento puro, ed ogni scaffale si riferisce ad un differente valore di  $\zeta$ . Queste fiammelle possono essere ancora calcolate con i codici citati nella sez. 13. Se si trascura la diffusione differenziale, si può facilmente calcolare una fiammella laminare con un difetto di entalpia assegnato, uniforme attraverso la fiammella stessa, semplicemente assegnando appropriate condizioni di temperatura al contorno ai lati combustibile ed ossidante (per grandi valori negativi di  $\zeta$  l’approccio deve tuttavia essere modificato, per evitare temperature irrealisticamente basse). Quando tuttavia si introduce la diffusione differenziale, il difetto di entalpia non risulterà uniforme attraverso la fiammella, ma è ancora possibile, con opportuni accorgimenti, definire le grandezze di stato in funzione delle tre grandezze fondamentali citate [106].

Osserviamo quindi come questo modello per la chiusura termochimica in fiamme nonpremiscelate turbolente sottoposte a scambio termico richieda, rispetto ai modelli adiabatici, una più ampia libreria di fiammelle, ed inoltre il valore del difetto medio di entalpia  $\tilde{\zeta}$  richiesto dalla pdf (297). Tale valore è poi legato all'entalpia media  $\tilde{h}$  ed al valore dello scalare conservato medio  $\tilde{Z}$  nel punto nel punto considerato. Infatti, se per semplicità trascuriamo in questo contesto la diffusione differenziale, l'entalpia media in combustione *adiabatica* può essere ottenuta dalla (128), opportunamente mediata, come

$$\tilde{h}_{ad} = h_o + \tilde{Z}(h_f - h_o) \quad (298)$$

e quindi il difetto di entalpia medio può essere ottenuto attraverso la relazione

$$\tilde{\zeta} = \tilde{h} - \tilde{h}_{ad} \quad (299)$$

se è nota l'entalpia media effettiva  $\tilde{h}$ . Affrontiamo quindi il problema di determinare  $\tilde{h}$ .

Nello studio della combustione in presenza di scambio termico radiativo, dobbiamo considerare l'equazione dell'energia mediata (100) (e modellata secondo l'ipotesi di trasporto secondo gradiente) in una forma che ritiene il termine nella divergenza del flusso radiativo, vedi anche (10), ossia

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma_m} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} \right] - \frac{\partial \bar{q}_k^R}{\partial x_k} \quad (300)$$

Si noti che abbiamo qui indicato il numero di Prandtl molecolare come  $\sigma_m$ , per evitare confusione con lo costante di Stefan–Boltzmann che introdurremo fra breve, ed il numero di Prandtl turbolento come  $\sigma_t$  (il quale, nei modelli di combustione turbolenta, viene anche posto uguale a  $\sigma_Z$  oppure  $\sigma_c$ , a seconda che si consideri combustione nonpremiscelata oppure premiscelata).

Notiamo che questo modello può essere utilizzato anche per tener conto dello scambio convettivo alle pareti, per il quale occorre comunque disporre di adeguati modelli (essendo lo scambio termico turbolento una delle quantità più difficili da riprodurre attraverso modelli).

## 20.1 Fiamme non luminose

Miscela reagenti che *non* contengano una frazione significativa di particelle (*soot*, o ceneri) danno radiazione solo per *bande*, vedi sez. 2, ossia radiazione in ben determinate frequenze. Tale radiazione è in generale poco luminosa, per cui si parla anche di fiamme *non luminose*. Tipico è il caso dell'idrogeno che brucia con una pallida fiamma rosa. Anche la componente azzurra della radiazione emessa da fiamme alimentate a metano ha questa origine; incidentalmente, il metano è l'unico idrocarburo in cui la radiazione per bande è prevalente (in tutti gli altri idrocarburi è nettamente prevalente la radiazione da *soot*).

La divergenza del flusso termico radiativo mediato che compare nella (300) deve essere ottenuta mediando, attraverso un'opportuna pdf, l'espressione per i valori istantanei, relativa a fiamme non luminose [107, 108]:

$$\frac{\partial q_k^R}{\partial x_k} = 4\pi\kappa I_b - \kappa \int_0^{4\pi} I(\Omega) d\Omega \quad (301)$$

In questa espressione,  $I_b$  è l'intensità (potenza per unità di superficie) totale (ossia relativa a tutte le possibili lunghezze d'onda, o frequenze, della radiazione) della radiazione da corpo nero

$$I_b = \sigma T^4 \quad (302)$$

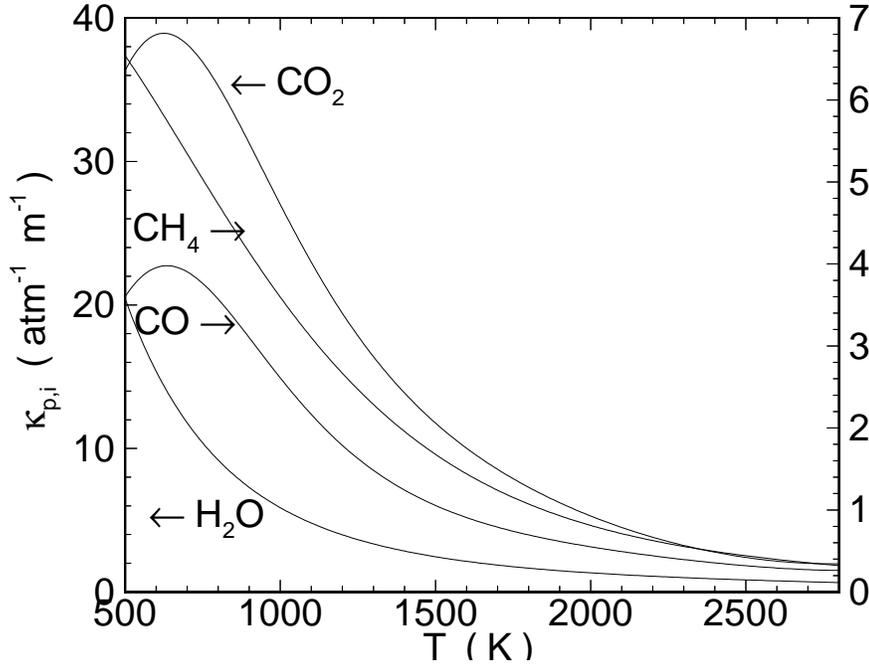


Figura 42: Coefficienti di assorbimento in termini di pressione parziale per le specie  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$ .

$\sigma$  è la costante di Stefan–Boltzmann, pari a  $5.675 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4)$ . Il coefficiente di assorbimento della miscela è

$$\kappa = p \sum_i \kappa_{p,i}(T) X_i \quad (303)$$

Qui i  $\kappa_{p,i}$  sono i coefficienti di assorbimento delle singole specie, la cui frazione molare è indicata come  $X_i$ , in termini di pressioni parziali; essi consentono di esprimere il coefficiente di assorbimento della specie  $i$  nella forma

$$\kappa_i(p, T) = p \kappa_{p,i}(T) \quad (304)$$

Infatti l'assorbimento di radiazione da parte di un gas è proporzionale a numero di molecole per unità di volume, quindi alla densità o equivalentemente alla pressione. Tale coefficiente di assorbimento compare nell'espressione dell'attenuazione dell'intensità di un fascio di radiazione collimata nell'attraversare uno spessore  $dx$  del gas  $i$ :

$$-dI = \kappa_i I dx \quad (305)$$

Questa formula esprime dunque il concetto che l'attenuazione dell'intensità è tanto maggiore quanto più grande è l'intensità stessa, e quanto maggiore è lo spessore di gas attraversato.

Tornando alla (303), la sommatoria è estesa alle specie radianti  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{SO}_2$ , per quanto generalmente le prime due siano ampiamente dominanti. La fig. 42 riporta gli andamenti dei coefficienti  $\kappa_{p,i}$  in funzione della temperatura per le prime quattro specie citate; le unità usate in questo caso sono  $\text{atm}^{-1} \text{ m}^{-1}$ .

Infine, nella (301)  $I(\Omega)$  denota l'intensità radiante totale nella direzione dell'angolo solido  $\Omega$ , ossia la potenza (sull'intera gamma di frequenze) per unità di area ed unità di angolo solido.

L'espressione (301) della divergenza del flusso radiativo esprime quindi un bilancio tra la potenza emessa sotto forma di radiazione (primo termine) da un volumetto di gas sito nel punto in esame, e quella assorbita (in senso algebrico, secondo termine). Per valutare il secondo termine occorre considerare la radiazione (emessa dal gas o da pareti solide ad alta temperatura) che incide nel punto considerato da tutte le possibili direzioni spaziali, ed effettuare poi un'integrazione sull'intero angolo solido di  $4\pi$  steradiani.

In alcune situazioni è in prima approssimazione possibile ammettere che il gas emetta solamente radiazione, senza assorbirne apprezzabilmente; il secondo termine della (301) è quindi trascurato. Questa potrebbe essere la situazione per fiamme di piccole dimensioni a bassa pressione. In tale situazione è possibile adottare l'ipotesi di *mezzo otticamente sottile*. Questa ipotesi porta ovviamente a sovrastimare l'effetto della radiazione, perché si suppone che il gas emetta radiazione, senza riassorbirne.

In tutte le altre situazioni, ed in particolare per applicazioni industriali, è invece necessario calcolare l'integrale sull'angolo solido indicato nella (301). Si noti come questo integrale introduce informazioni a livello non locale, a differenza di tutti gli altri termini delle equazioni del moto. Per valutare la divergenza del flusso radiativo, adottiamo l'approccio del 'discrete transfer' [109]. In questo metodo, l'integrale è valutato come una sommatoria su un numero grande, ma finito, di direzioni. L'espressione risultante per la divergenza nel punto considerato  $\mathbf{x}$  è

$$\frac{\partial q_k^R}{\partial x_k} = 4\pi \kappa(\mathbf{x}) I_b(\mathbf{x}) - \kappa(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left[ I_{\infty ij} \exp\left(-\sum_{l=1}^{L_{ij}} \kappa_l \Delta s_l\right) + \sum_{m=1}^{L_{ij}} I_{bm} \exp\left(-\sum_{l=1}^m \kappa_l \Delta s_l\right) \right] d\Omega_{ij} \quad (306)$$

Si è qui assunto che l'intero angolo solido di  $4\pi$  steradiani sia suddiviso in angoli solidi piccoli (ma finiti), lungo le direzioni definite da una latitudine  $\theta$  ed un azimuth  $\psi$ , originanti dal punto considerato; il campo di  $\theta$  (da  $-\pi$  to  $+\pi$ , eccetto che ai contorni) è diviso in  $I$  valori, e similmente il campo di  $\psi$  (da  $0$  a  $2\pi$ , eccetto che ai contorni) in  $J$  valori. Per semplicità di notazione, i  $4\pi$  steradiani sono discretizzati su una griglia ortogonale sul piano  $\psi$ - $\theta$  (ma l'estensione a griglie non ortogonali è immediata). Su ciascun raggio viene definita un'ascissa  $s$ , con origine nel punto considerato  $\mathbf{x}$ ; la lunghezza del raggio nella direzione  $i, j$  è suddiviso in  $L_{ij}$  intervalli, con indice corrente  $l$  ( $m$  denota un indice ausiliario con il medesimo significato). Quindi,  $\kappa_l$  e  $I_{bl}$  indicano i valori dei coefficienti di assorbimento e delle intensità da corpo nero ad un'ascissa  $s_l$  lungo il raggio nella particolare direzione  $i, j$  considerata (quest'ultima non è esplicitamente designata per non appesantire la notazione).  $I_{\infty ij}$  denota poi l'intensità all'estremo remoto del raggio  $i, j$ , cioè in corrispondenza ad una parete solida. L'angolo solido incrementale nella (306) è

$$d\Omega_{ij} = \cos \theta_i d\theta_i d\psi_j \quad (307)$$

Le coordinate del punto all'ascissa  $s_l$  lungo il raggio in direzione  $i, j$  possono essere espresse, se assumiamo che l'azimuth  $\psi$  giaccia nel piano  $x_2$ - $x_3$ , come

$$x_{1l} = x_1 + s_l \sin \theta_i, \quad x_{2l} = x_2 + s_l \cos \theta_i \cos \psi_j, \quad x_{3l} = x_3 + s_l \cos \theta_i \sin \psi_j \quad (308)$$

Da questa equazione e dalla (294), segue che il coefficiente di assorbimento alla generica ascissa  $s_l$  lungo il raggio in direzione  $i, j$ , indicato come  $\kappa_l$  nella (306), può essere posto nella forma

$$\kappa_l = \kappa(\mathbf{x}_l) = \kappa[Z(\mathbf{x}_l), \chi_c(\mathbf{x}_l), \zeta(\mathbf{x}_l)] \quad (309)$$

La stessa relazione funzionale vale per  $I_b$ , in virtù della (302). La (306) deve essere mediata; il termine  $I_{bm}$  in (306) è mediato con la pdf corrispondente all'ascissa corrente  $s$  lungo il raggio, cioè valutata tra i punti  $m$  e  $m + 1$ . Questo significa usare valori rappresentativi della media e della varianza di  $Z$ , e delle medie di  $\chi_c$  e  $\zeta$  nel punto in esame. In altri termini, la media di  $I_{bm}$  è valutata ad ogni punto lungo un raggio per mezzo della pdf in quel punto, e questo per ogni raggio. In modo simile, il  $\kappa_l$  che compare sotto la sommatoria è valutato tra i punti  $l$  e  $l + 1$ . Il coefficiente di assorbimento  $\kappa(\mathbf{x})$  che moltiplica la doppia sommatoria si riferisce invece al punto origine dei raggi, ed è quindi valutata tramite la pdf locale nel punto  $\mathbf{x}$ .

## 20.2 Fiamme luminose

Qualora la fiamma produca importanti quantità di *soot*, come è il caso di tutte le fiamme alimentate con idrocarburi (eccetto il metano, che ne genera relativamente poco), si ha abbondante radiazione su uno spettro continuo da parte delle particelle di *soot* ad alta temperatura. La fiamma in questo caso è brillante, per cui si parla di *fiamme luminose*. All'espressione della divergenza del flusso termico radiativo deve essere aggiunto un termine relativo alla radiazione dalle particelle, per cui si ha

$$\frac{\partial \bar{q}_k^R}{\partial x_k} = 4 \pi \kappa I_b - \kappa \int_0^{4\pi} I(\Omega) d\Omega + C_0 \tilde{f}_v T^5 \quad (310)$$

dove nell'ultimo termine [110]  $C_0$  è una costante, dipendente dalle caratteristiche ottiche delle particelle, valutata come (per *soot* prodotto nella combustione di acetilene)

$$C_0 = 2.77 \cdot 10^{-4} \text{ W}/(\text{m}^3\text{K}^5) \quad (311)$$

$\tilde{f}_v$  è la frazione di volume occupata dal *soot*, che quindi deve essere valutata mediante uno dei modelli citati nella sez. 17, ed infine  $T$  è la temperatura.

Nel caso di fiamme che contengono un'elevata concentrazione di *soot* e ceneri, come è il caso di fiamme alimentate a carbone, l'equazione (310) deve essere modificata per tenere conto del fatto che la radiazione, passando attraverso queste particelle, subisce un fenomeno di *scattering*.

## 21 Limiti ed estensioni della modellistica

È stato osservato che la modellistica riportata nelle precedenti sezioni si basa su diverse ipotesi restrittive; inoltre esistono regimi per i quali non sono stati sinora proposti modelli validi. Riporiamo qui brevemente alcuni limiti della modellistica sopra esposta, con accenni agli approcci che permettono (laddove è possibile) di superarli.

1. Flussi bifase. Moltissime applicazioni pratiche prevedono l'uso di combustibili liquidi o solidi, ed i modelli per flussi gassosi non possono quindi essere usati. Tuttavia, questa può non essere una limitazione per turbine a gas che impiegano combustibile relativamente volatile come il cherosene, con l'aria preriscaldata nel compressore. Infatti, se il combustibile è sufficientemente atomizzato (diametro medio di Sauter delle gocce inferiore a  $50 \mu\text{m}$ ) esso in effetti brucia come un vapore, almeno nell'operazione a piena potenza [49] (nell'operazione a potenza ridotta, che comprende per turbine aeronautiche la fase di volo di crociera, gli effetti bifase possono invece non risultare trascurabili). Al contrario, modelli che contemplano solo la fase gassosa non possono essere applicati a caldaie industriali e turbine che bruciano combustibili pesanti, od alla combustione del carbone polverizzato. Quando si ha un flusso bifase, la fase

gassosa è continua e quindi il suo moto è descrivibile mediante un approccio euleriano, mentre la fase condensata (cioè liquida o solida) non lo è, per cui il suo moto deve essere descritto mediante un approccio lagrangiano. Perciò, occorre in questi casi usare modelli di calcolo basati su tecniche di *tracking* delle goccioline (o particelle) iniettate con frequenza casuale, oppure occorre risolvere un'equazione per la pdf della densità numerica delle stesse; entrambi gli approcci danno luogo ad un enorme incremento del tempo di calcolo.

In un flusso bifase si ha scambio di massa, quantità di moto ed energia fra le due fasi [111]. Se per semplicità supponiamo che la fase condensata sia costituita da goccioline sferiche (di raggio generico  $r_d$ , densità  $\rho_d$ , velocità  $u_d$ , temperatura  $T_d$ ), una singola gocciolina risulta trascinata dal gas per effetto di una forza di trascinamento

$$\delta D = C_D \frac{\rho (u - u_d)^2}{2} \pi r_d^2 \quad (312)$$

dove  $C_D$  è il coefficiente di resistenza aerodinamico della gocciolina (funzione del numero di Mach del moto relativo tra gas e gocciolina), la frazione esprime la pressione dinamica corrispondente al moto relativo, ed infine  $\pi r_d^2$  è l'area trasversale della gocciolina. La potenza termica scambiata per convezione tra gas e gocciolina può poi essere espressa come

$$\delta Q = h_c (T - T_d) 4 \pi r_d^2 \quad (313)$$

dove  $h_c$  è il coefficiente di scambio termico per convezione tra gas e gocciolina (incidentalmente, di difficile valutazione), il secondo fattore rappresenta la corrispondente differenza di temperatura, mentre l'ultimo fattore è la superficie della gocciolina. Per quanto abbiamo detto, occorre tuttavia tener presente che se la fase condensata è solida (quindi una particella), si possono avere importanti scambi di calore anche per radiazione. Tale potenza termica fa evaporare nell'unità di tempo una massa di liquido

$$\frac{\delta m}{dt} = \frac{\delta Q}{\Delta h_v} \quad (314)$$

dove  $\Delta h_v$  è l'entalpia latente di vaporizzazione del liquido (per una particella occorre considerare l'entalpia latente di sublimazione). L'evaporazione (o sublimazione) porta ad una riduzione del raggio della gocciolina (o particella) nell'unità di tempo data da

$$\frac{\delta r_d}{dt} = - \frac{\delta m/dt}{4 \pi r_d^2 \rho_d} \quad (315)$$

L'interazione con la turbolenza rende il flusso bifase particolarmente difficile da descrivere [112]. Occorre comunque notare che in alcune applicazioni operanti ad alta pressione (camere di combustione di endoreattori, turbine a gas, e motori diesel) i reagenti (combustibile, ed eventualmente anche l'ossidante per gli endoreattori) possono essere immessi a pressioni superiori al valore critico (combustione supercritica), con conseguenti peculiarità di comportamento [113].

2. Modellistica della turbolenza. Le incertezze associate con la modellistica della turbolenza giocano un ruolo cruciale nell'affidabilità dei risultati ottenuti con modelli numerici. Il modello  $k-\epsilon$ , per quanto largamente accettato come uno strumento di modellistica ben sperimentato, non è certo esente da deficienze [10, 49, 114]. Queste si manifestano in particolare in flussi in presenza di ricircolazione, *swirl*, su superfici non piane, in condotti a sezione non circolare,

e diretti normalmente ad una parete, cioè praticamente in tutte le applicazioni pratiche. In presenza di trasporto turbolento di grandezze scalari, l'ipotesi di trasporto secondo gradiente dà inoltre previsioni estremamente modeste. Una migliore descrizione fisica della turbolenza può essere ricercata ricorrendo a modelli di turbolenza con chiusura sui momenti secondi. Questi implicano la soluzione, oltre che delle equazioni per i momenti primi, di equazioni di conservazione modellate per i momenti secondi, cioè gli sforzi ed i flussi di Reynolds; quest'ultime a loro volta conteranno momenti del terz'ordine, e numerosi altri termini, che occorre modellare. Tuttavia, il peso delle assunzioni di modellistica introdotte a questo livello più alto sarà presumibilmente inferiore. Per flussi a densità costante [115, 114], le equazioni addizionali coinvolgono gli sforzi di Reynolds  $\rho \overline{u'_k u'_i}$ . In aggiunta a questi, per flussi reagenti (dove gli sforzi di Reynolds assumono la forma  $\overline{\rho u''_k u''_i}$ ), bisogna introdurre equazioni per i flussi scalari  $\overline{\rho u''_k \phi''}$ , ed eventualmente per le covarianze densità-velocità  $\overline{\rho' u'_i}$  e la dissipazione scalare  $\tilde{\chi}$ . Ciò implica un notevole incremento del lavoro di codifica e di calcolo. Modelli per flussi a densità variabile sono presentati in [9, 116, 117]. I modelli con chiusura sui momenti secondi sono comunque alquanto complessi e presentano problemi numerici totalmente differenti da quelli con chiusura sui momenti primi [118].

Un livello di modellistica della turbolenza intermedio tra i modelli sui momenti primi classici, come il  $k$ - $\epsilon$ , e quelli con chiusura sui momenti secondi, è quello dei modelli *nonlineari*, sempre con chiusura sui momenti primi, in cui però la classica relazione di trasporto secondo gradiente (90), lineare nel tensore di deformazione, è sostituita con una relazione nonlineare, quadratica [119], o cubica [120, 121, 122]. Adottando per esempio una relazione quadratica si ha la forma

$$\begin{aligned} \widetilde{u''_i u''_j} = & \frac{2}{3} \tilde{k} \delta_{ij} + \alpha_1 \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \\ & + \alpha_2 \frac{\tilde{k}^3}{\tilde{\epsilon}^2} \left[ \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} \delta_{ij} \right] + \\ & + \alpha_3 \frac{\tilde{k}^3}{\tilde{\epsilon}^2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \\ & + \alpha_4 \frac{\tilde{k}^3}{\tilde{\epsilon}^2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \end{aligned} \quad (316)$$

dove si può riconoscere che la prima riga corrisponde al modello  $k$ - $\epsilon$  standard. Altri modelli di questa classe sono invece intesi a migliorare la descrizione del trasporto turbolento di grandezze scalari (ossia, dei flussi di Reynolds) data dal modello  $k$ - $\epsilon$  standard [123, 124], per esempio adottando la seguente relazione nonlineare

$$\widetilde{u''_i \phi''} = \beta_1 \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_i} + \frac{\tilde{k}^3}{\tilde{\epsilon}^2} \left( \beta_2 \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \beta_3 \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} \quad (317)$$

Ancora, il primo termine a secondo membro corrisponde alla modellistica standard.

Una previsione accurata del flusso in prossimità di pareti richiede poi modelli specializzati [25, 125, 122]. Tali effetti di parete rivestono particolare importanza quando si intenda prevedere lo scambio termico convettivo con la parete.

Un particolare effetto di diffusione non secondo gradiente delle grandezze scalari si verifica nella combustione turbolenta premiscelata. Una dettagliata discussione di un modello che

tiene conto di questo effetto è data da [126]. La sua applicazione pratica tuttavia è ancora di là da venire.

3. Flussi ad alta velocità. Questi flussi si presentano in applicazioni a (per il momento ipotetici) autoreattori a combustione supersonica, o *scramjets* (*Supersonic Combustion Ramjets*). In tali condizioni, non possiamo più assumere che  $h_0 \cong h$ , né che la pressione sia termochimicamente costante. Allora, per flussi nonpremiscelati, l'equazione di conservazione per lo scalare conservato rappresenta  $h_0$  piuttosto che  $h$ , e sarà quindi necessaria una pdf congiunta di (almeno) lo scalare conservato e l'energia cinetica per pesare le relazioni di stato quando si valutano i valori medi. Non si hanno indicazioni per assegnare la forma di tale pdf, ed il risultato non è affatto insensibile ad essa. Similmente, in flussi premiscelati l'entalpia  $h$  non può più essere assunta uniforme in tutto il campo (o trattata come uno scalare conservato), invalidando così l'approccio della variabile di progresso.

Questa limitazione dei modelli di combustione turbolenta, sebbene non abbia conseguenze per camere di combustione convenzionali, rende problematica la descrizione del flusso in autoreattori a combustione supersonica. Sviluppi proposti per superare questo limite sono basati sull'uso di pdf presunte di più variabili [127, 128] o sull'approccio del trasporto della pdf [129], ma sono ancora in uno stato di tentativo.

## Riferimenti bibliografici

- [1] Bradshaw, P., *Exp. Fluids* 16:203, 1994.
- [2] Kee, R.J, Rupley, F.M., Meeks, E. and Miller, J.A., Rept. SAND 96-8216, 1996.
- [3] Marshall, P., Ko, T. e Fontijn, A., *J. Phys. Chem.* 93:1922, 1989.
- [4] Vincenti, W.G. e Kruger, C.H., *Introduction to physical gas dynamics*, Krieger, Malabar, 1965.
- [5] Williams, F.A., *Combustion theory*, Benjamin/Cummings, Menlo Park, 1985.
- [6] Lutz, A.E., Kee, R.J, Grcar, J.F. and Rupley, F.M., Rept. SAND 96-8243, 1997.
- [7] Pitsch, H. and Peters, N., *Combust. Flame* 114:26, 2000.
- [8] Libby, P.A. e Williams, F.A., in *Turbulent reacting flows* (Libby, P.A. e Williams, F.A., eds.), Springer-Verlag, Berlin, 1980, 1.
- [9] Jones, W.P., in *Prediction methods for turbulent flows* (Kollmann, W., ed.), Hemisphere, Washington, 1980, 379.
- [10] Jones, W.P. e Whitelaw, J.H., *Combust. Flame* 48:1, 1982.
- [11] Viskanta, R. e Mengüç, M.P., *Prog. Energy Combust. Sci.* 13:97, 1987.
- [12] Rogg, B., Behrendt, F. e Warnatz, J., *21st Symp. (Int.) on Combust.*, 1986, 1533.
- [13] Dixon-Lewis, G., in *Combustion Chemistry* (Gardiner, W.C. ed.), Springer-Verlag, New York, 1984, 1.
- [14] Ern, A. e Giovangigli, V., *Multicomponent transport algorithms*, Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [15] Tennekes, H. e Lumley, J.L., *A first course in turbulence*, MIT Press, 1972.
- [16] Bradshaw, P., *An introduction to turbulence and its measurement*, Pergamon, Oxford, 1971.

- [17] Kaplan, C.R., Baek, S.W., Oran, E.S. e Ellzey, J.L., *Combust. Flame* 96:1, 1982.
- [18] Agarwal, A., *Sci. Am.* 281:44, 1999.
- [19] Silvestroni, P., *Fondamenti di chimica*, Veschi, Milano, 1988.
- [20] Gordon, S. e McBride, B.J., NASA SP 273, 1971.
- [21] Reynolds, W.C., The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN, Dept. Mech. Engineering, Stanford Univ., 1986.
- [22] Favre, A., *J. Mecanique* 4:361, 1965.
- [23] Janicka, J. e Kollmann, W., *Combust. Flame* 44:319, 1982.
- [24] Aris, R., *Vectors, tensors, and the basic equations of fluid mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1962.
- [25] Patel, V.C., Rodi, W. e Scheurer, G., *AIAA J.* 23:1308, 1985.
- [26] Schiestel, R., *Modélisation et simulation des écoulements turbulents*, Hermès, Paris, 1993.
- [27] Wilcox D.C., *Turbulence modeling for CFD*, DCW Ind., La Cañada, 1993.
- [28] Rodi, W., *Turbulence models and their application to hydraulics – a state of the art review*, Int. Ass. Hydraulic Research, Delft, 1980.
- [29] Jones, W.P. e Launder, B.E., *Int. J. Heat Mass Transf.* 15:301, 1972.
- [30] Launder, B.E. e Spalding, D.B., *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 3:269, 1974.
- [31] Hawthorne, W.R., Weddell, D.S. e Hottel, H.C., *3rd Symp. on Combustion, Flame, and Explosion Phenomena*, Williams and Wilkins, Baltimore, 1949, 267.
- [32] Rhodes, R.P., Harsha, P.T. e Peters, C.E., *Acta Astronautica* 1:443, 1974.
- [33] Lockwood, F.C. e Naguib, A.S., *Combust. Flame* 24:109, 1975.
- [34] Bilger, R.W., in *Turbulent reacting flows*, Libby, P.A. e Williams, F.A., eds., Springer-Verlag, Berlin, 1980, 65.
- [35] Bilger, R.W., *Ann. Rev. Fluid Mech.* 21:101, 1989.
- [36] Veynante, D. e Vervisch, L., *Prog. Energy Combust. Sci.* 28:193, 2002.
- [37] Lentini, D. e Jones, W.P., in NASA CP 3078, 1991.
- [38] Lentini, D., AIAA-90-0730, 1990.
- [39] Lentini, D., *Meccanica* 27:55, 1992.
- [40] Priddin, C.H., in *Advances in turbulence 3* (Johansson, A.V. e Alfredsson, P.H. eds.), Springer-Verlag, Berlin, 1991, 279.
- [41] Jones, W.P., “BOFFIN: a computer program for flow and combustion in complex geometries”, 1994.
- [42] Lentini, D., in *Environmental implications of combustion processes* (Puri, I.K., ed.), CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [43] Kent, J.H. e Bilger, R.W., *14th Symp. (Int.) on Combust.*, 1973, 615.

- [44] Glass, M. e Bilger, R.W., *Combust. Sci. and Tech.* 18:165, 1978.
- [45] Stårner, S.H. e Bilger, R.W., *Combust. Sci. and Tech.* 21:259, 1980.
- [46] Stårner, S.H. e Bilger, R.W., *18th Symp. (Int.) on Combust.*, 1981, 921.
- [47] Cebeci, T. e Bradshaw, P., *Physical and computational aspects of convective heat transfer*, Springer-Verlag, New York, 1984.
- [48] Launder, B.E. e Morse, A., in *1st Turb. Shear Flows*, Springer-Verlag, Heidelberg, 1979, 279.
- [49] Jones, W.P. e Whitelaw, J.H., *20th Symp. (Int.) on Combust.*, 1984, 233.
- [50] Kent, J.H. e Bilger, R.W., *16th Symp. (Int.) on Combust.*, 1977, 1643.
- [51] Lenz, W. e Günther, R., *Combust. Flame* 37:63, 1980.
- [52] Pope, S.B., *Ann. Rev. Fluid Mech.* 19:237, 1987.
- [53] Bray, K.N.C. e Libby, P.A., in *Fluid dynamical aspects of combustion theory* (Onofri, M. e Tesei, A. eds.), Longman, Harlow, 1991, 113.
- [54] Bray, K.N.C. e Moss, J.B., *Acta Astronautica* 4:291, 1977.
- [55] Bray, K.N.C., in *Turbulent reacting flows* (Libby, P.A. e Williams, F.A., eds.), Springer-Verlag, Berlin, 1980, 115.
- [56] Borghi, R., in *Gas turbine combustion*, VKI Lecture Notes 1990-02.
- [57] Spalding, D.B., *13th Symp. (Int.) on Combust.*, 1971, 649.
- [58] Yoshida, A., *18th Symp. (Int.) on Combust.*, 1981, 931.
- [59] Bray, K.N.C., Champion, M., Davé, N. e Libby, P.A., *Combust. Sci. and Tech.* 46:31, 1986.
- [60] Davé, N. e Kollmann, W., *Phys. Fluids* 30:345, 1987.
- [61] Ebrahimi, I. e Kleine, R., *16th Symp. (Int.) on Combust.*, 1977, 1711.
- [62] Hanson, R.K. e Salimian, S., in *Combustion Chemistry* (Gardiner, W.C., ed.), Springer-Verlag, New York, 1984, 361.
- [63] Hayhurst, A.N. e Lawrence, A.D., in *Prog. Energy Combust. Sci.* 18:529, 1992.
- [64] Drake, M.C. e Blint, R.J., *Combust. Flame*, 83:185, 1991.
- [65] Lentini, D., Accettato per la pubblicazione su *J. of Power and Energy* (Proc. Instn. Mech. Engrs. Part A), 2002.
- [66] Miller, J.A. e Bowman, C.T., *Prog. Energy Combust. Sci.* 15:287, 1989.
- [67] Glarborg, P., Dam-Johansen, K., Miller, J.A., Kee, R.J. e Coltrin, M.E., *Int. J. Chem. Kin.* 26:421, 1994.
- [68] Konnov, A.A., <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>, 2000.
- [69] Konnov, A.A., Colson, G. e de Ruyck, J., *Combust. Flame* 121:548, 2000
- [70] Konnov, A.A., e de Ruyck, J., sottoposto a *Combust. Sci. and Tech.*, 2001.
- [71] Bowman, C.T., in *24th Symp. (Int.) on Combust.*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1992.

- [72] Peters, N., *Prog. Energy Combust. Sci.* 10:319, 1984.
- [73] Peters, N., *21st Symp. (Int.) on Combust.*, 1986, 1231.
- [74] Liew, S.K., Bray, K.N.C. e Moss, J.B., *Combust. Flame* 56:199, 1984.
- [75] Haworth, D.C., Drake, M.C. e Blint, R.J., *Combust. Sci. and Tech.* 60:287, 1988.
- [76] Lentini, D., 46° Congresso Nazionale ATI, SGE, Padova, 1991.
- [77] Lentini, D., *Combust. Sci. and Tech.* 100:95, 1994.
- [78] Kolmogorov, A.N., *J. Fluid Mech.* 13:82, 1962.
- [79] Sreenivasan, K.R., Antonia, R.A. e Danh, H.Q., *Phys. Fluids* 20:1238, 1977.
- [80] Pope, S.B., *Prog. Energy Combust. Sci.*, 1985.
- [81] Pope, S.B., *23th Symp. (Int.) on Combust.*, 1990.
- [82] Pope, S.B., *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1994.
- [83] Kollmann, W., *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 1:249, 1990.
- [84] Dopazo, C., in *Turbulent Reacting Flows* (Libby, P.A. e Williams, F.A., eds.), Academic Press, London, 1994.
- [85] Rogg, B., Technical Report CUED/A-THERMO/TR39, Cambridge Univ., Department of Engineering, 1991.
- [86] Pitsch, H., FlameMaster, a C++ computer program for 0D combustion and 1D laminar flame calculations, 1993.
- [87] Bray, K.N.C., Libby, P.A. e Moss, J.B., *Combust. Sci. and Tech.* 41:143, 1984.
- [88] Bray, K.N.C., in *9th Australasian Fluid Mech. Conf.*, Auckland, 1986.
- [89] Bray, K.N.C., Champion, M. e Libby, P.A., *22nd Symp. (Int.) on Combust.*, 1988, 763.
- [90] Patterson, P.M., Kyne, A.G., Pourkashanian, M., Williams, A. e Wilson, C.W., *J. Prop. P.* 16:453, 2001.
- [91] Edwards, T. e Maurice, L.Q., *J. Prop. P.* 16:461, 2001.
- [92] Lefebvre, A.H., *Gas turbine combustion*, Hemisphere, New York, 1983.
- [93] Hamins, A., in *Environmental Implications of Combustion Processes* (Puri, I.K., ed.), CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [94] Kennedy, I.M., *Prog. Energy Combust. Sci.* 23:95, 1997.
- [95] Köylü, Ü.Ö. e Faeth, G.M., *ASME J. Heat Transfer* 115:409, 1993.
- [96] Moss, J.B., Stewart, C.D. e Syed, K.Y., *22nd Symp. (Int.) on Combust.*, 1988.
- [97] Nagle, J. e Strickland-Constable, R.F., in *5th Carbon Conference* 1:154, 1962.
- [98] Moss, J.B., Stewart, C.D. e Young, K.J., *Combust. Flame* 101:491, 1995.
- [99] Fenimore, C.P. e Jones, G.W., *J. Phys. Chem.* 71:593, 1967.
- [100] Syed, K.J., Stewart, C.D., e Moss, J.B., *23rd Symp. (Int.) on Combust.*, 1990, 1533.

- [101] Fairweather, M., Jones, W.P., Ledin, H.S. e Lindstedt, R.P., in *24th Symp. (Int.) on Combust.*, 1992, 1067.
- [102] Said, R., Garo, A. e Borghi, R., *Combust. Flame*, 108:71, 1997.
- [103] Herzog, H., Eliasson, B. e Kaarstad, O., *Sci. Am.* febbraio 2000, p. 54.
- [104] Bray, K.N.C. e Peters, N., *Turbulent Reacting Flows* (Libby, P.A. e Williams, F.A., eds.), Academic Press, London, 1994.
- [105] Marracino, B. e Lentini, D., *Combust. Sci. and Tech.* 128:23, 1997.
- [106] Giordano, P. e Lentini, D., *Combust. Sci. and Tech.* 172:1, 2001.
- [107] Hottel, H.C. e Sarofim, A., *Radiative Transfer*, McGraw-Hill, 1967.
- [108] Modest, M.F., *Radiative heat transfer*, McGraw-Hill, New York, 1993.
- [109] Lockwood, F.C. e Shah, N., *18th Symp. (Int.) on Combust.*, 1981.
- [110] Gore, J.P. e Jang, J.H., *ASME J. Heat Transfer* 114:234, 1992.
- [111] Zucrow, M.J. e Hoffman, J.D., *Gas Dynamics*, Vol. II, Cap. 14, Wiley, New York, 1976.
- [112] Faeth, G.M., *Prog. Energy Combust. Sci.* 13:293, 1987.
- [113] Bellan, J., *Prog. Energy Combust. Sci.* 26:329, 2000.
- [114] Launder, B.E., in *Twelfth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, Morton, K.W., ed., Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [115] Hanjalić, K. e Launder, B.E., *J. Fluid Mech.* 52:609, 1972.
- [116] Jones, W.P., in *Turbulent Reacting Flows* (Libby, P.A. e Williams, F.A., eds.), Academic Press, London, 1994.
- [117] Dibble, R.W., Kollmann, W., Farshchi, M. e Schefer, R.W., *21st Symp. (Int.) on Combust.*, 1986, 1329.
- [118] Ha Minh, H.A., in *13th Int. Conf. Num. Meth. Fluid Dynam.* (Napolitano, M. e Sabetta, F., eds.), Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [119] Speziale, C.G., *J. Fluid Mech.* 178:459, 1987.
- [120] Craft, T.J., Launder, B.E. e Suga, K., in *5th IAHR Symp. Refin. Flow Modell. and Turb. Measur.*, Presse Ponts et Chaussées, Paris, 1993, 125.
- [121] Craft, T.J., Launder, B.E. e Suga, K., *Int. J. Heat Fluid Flow* 17:116, 1996.
- [122] Launder, B.E., in *Turbulence and Transition Modelling* (Hallböck, M., Johansson, A.V., Henningson, D.S. and Alfredsson, H.P., Eds.), Kluwer, Dordrecht, 1996.
- [123] Hanjalić, K., in *10th Int. Heat Transfer Conf.*, Brighton, 1994.
- [124] Launder, B.E., in *Turbulence, Heat and Mass Transfer* (Hanjalić, K. e Pereira, J.C.F., eds.), Begell House, New York, 1995.
- [125] Li, S.P. e Launder, B.E., in *Phys. Fluids*, 1994.
- [126] Bray, K.N.C., Libby, P.A. e Moss, J.B., *Combust. Flame* 61:87, 1985.

- [127] Baurle, R.A., Alexopoulos, G.A. e Hassan, H.A., *J. Prop. P.* 10:473, 1994.
- [128] Boccanera, M. e Lentini, D., *Euromech Colloquium* 403, Poitiers, 1999.
- [129] Eifler, P. e Kollmann, W., AIAA-93-0448, 1993.