

UNIMORE

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MODENA E REGGIO EMILIA

Dipartimento di Ingegneria “Enzo Ferrari”

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria del Veicolo

Sviluppo e validazione sperimentale di un modello CFD per bruciatore alimentato da syngas

Relatore:

Prof. Fabio Berni

Correlatore:

Ing. Marco Puglia

Candidato:

Pietro Autiero

matr.: 136048

Alla mia famiglia

Indice

Abstract **5**
Introduzione **7**
Capitolo 1 - Contesto e motivazioni dello studio **10**
1.1 Valorizzazione energetica della biomassa mediante gassificazione 10
1.1.1 Configurazioni dei gassificatori a letto fisso 10
1.2 Caratteristiche del syngas derivato da biomassa 11
1.3 Contaminanti e trattamento del gas 13
1.4 Combustione premiscelata e influenza della composizione 13
1.5 Emissioni di CO e NOx 14
1.6 Motivazione dell'approccio numerico-sperimentale 15
Capitolo 2 - Apparato sperimentale **17**
2.1 Architettura generale dell'impianto 17
2.2 Femto Gasifier 18
2.3 Strumentazione associata al gassificatore 19
2.4 Pulizia del syngas 20
2.5 Campionamento e analisi della composizione del gas 21
2.6 Miscelazione aria-syngas e ingresso nel bruciatore 22
2.7 Misura delle temperature nel bruciatore e sulla parete esterna 23
2.7.1 Osservazione qualitativa della fiamma e acquisizioni termografiche 25
2.8 Analisi dei prodotti della combustione 26
2.9 Grandezze sperimentali utilizzate per la modellazione 28
Capitolo 3 - Fondamenti di fluidodinamica computazionale e modellazione della combustione **29**
3.1 Introduzione alla fluidodinamica computazionale 29
3.2 Metodo dei volumi finiti 30
3.3 Modellazione della turbolenza 31
3.3.1 Approcci alla simulazione della turbolenza 31
3.3.2 Media di Reynolds e problema della chiusura 32
3.3.3 Ipotesi di Boussinesq e viscosità turbolenta 33
3.3.4 Modelli a due equazioni: il modello k-ε 34
3.3.5 Trattamento della regione di parete 35
3.3.6 Importanza modello di combustione 35
3.4 Combustione turbolenta 36
3.5 Scale caratteristiche della combustione: numeri di Damköhler e Karlovitz 37
3.5.1 Diagramma di Borghi-Peters e regime flamelet 38
Regime flamelet 38
Wrinkled e corrugated flamelets 39
Transizione verso le thin reaction zones 40
Collocazione del caso oggetto di studio 41
3.6 Equazioni di trasporto delle specie 42
3.7 Principali famiglie di modelli di combustione 42
3.7.1 Classificazione generale dei modelli di combustione 43
3.7.2 Modelli a cinetica finita 43
3.7.3 Modelli controllati dal mixing: Eddy Break-Up ed Eddy Dissipation 44
3.7.4 Modelli ibridi 44
3.7.5 Modelli flamelet 45
3.7.6 Extended Coherent Flame Model e ECFM-3Z 46
3.8 Complex Chemistry 47
3.9 Eddy Dissipation Concept 48
3.10 Modelli basati sulla propagazione della fiamma: Turbulent Flame Closure 49
3.11 Inquadramento concettuale di EDC e TFC 51
3.12 Trasferimento termico radiativo 52
Capitolo 4 - Set-up numerico **53**
4.1 Metodologia generale 53
4.2 Modello tridimensionale di mixing 54
4.2.1 Geometria e funzione del dominio 54
4.2.2 Discretizzazione 55
4.2.3 Modelli fisici e verifica del mixing 56
4.3 Architettura del modello del bruciatore 59
4.4 Geometria del modello assialsimmetrico 60
4.4.1 Geometria bruciatore e suddivisione dei domini 60

4.4.2 Modellazione e posizionamento delle termocoppie 61
4.5 Discretizzazione del nuovo dominio 62
4.5.1 Strategia di mesh 62
4.5.2 Analisi sistematica di sensibilità alla mesh 64
4.6 Organizzazione multiphysics 65
4.7 Dominio fluido reagente 66
4.7.1 Formulazione fluidodinamica 66
4.7.2 Proprietà di trasporto 66
4.8 Modellazione della chimica 67
4.8.1 Complex Chemistry 67
4.9 Turbulent Flame Speed Closure 68
4.9.1 Formulazione del TFC 68
4.9.2 Laminar Flame Speed e Table Generator 68
4.9.3 Correlazione di Peters e parametri standard 68
4.10 Innesco numerico della combustione 69
4.11 Modellazione dello scambio radiativo 70
4.12 Domini solidi 72
4.12.1 Pareti del bruciatore 72
4.12.2 Termocoppie 72
4.13 Dominio dell'ambiente esterno 73
4.14 Preparazione delle condizioni di ingresso 74
4.14.1 Elaborazione delle due correnti sperimentali 74
4.14.2 Calcolo della velocità uniforme all'inlet 75
4.15 Tracciabilità dei casi e Outputs di riferimento 76
Capitolo 5 - Analisi dei risultati 79
5.1 Obiettivi e strategia di analisi 79
5.1.1 Ricostruzione del rapporto aria-combustibile 79
5.2 Quadro dei casi operativi 81
5.3 Sensibilità alla discretizzazione spaziale 81
5.4 Analisi del campo termico 84
5.4.1 Temperature interne e termocoppie 84
5.4.2 Lettura del campo bidimensionale di temperatura 85
5.4.3 Temperatura della parete esterna 86
5.5 Analisi delle specie allo scarico 88
5.5.1 Ossigeno residuo 88
5.5.2 Anidride carbonica 89
5.5.3 Monossido di carbonio 90
5.6 Analisi degli ossidi di azoto 93
5.6.1 Confronto generale 93
5.6.2 Specie azotate in ingresso e definizione dei casi finali 94
5.6.3 Interazione tra mesh e composizione azotata 95
5.6.4 Significato fisico dell'inclusione di NO nel syngas 96
5.7 Analisi integrata dei principali casi 96
5.7.1 Novembre 97
5.7.2 Gennaio 100
5.7.3 Bombola 1 103
5.7.4 Bombola 2 106
5.7.5 Bombola 0.1 109
Capitolo 6 - Conclusioni 112
6.1 Valutazione complessiva del modello 112
6.2 Sintesi dei risultati e sviluppi della validazione 113
Elenco delle figure 114
Elenco delle tabelle 116
Bibliografia 117

Abstract

La gassificazione della biomassa consente di convertire risorse solide e residui di origine biogenica in un combustibile gassoso utilizzabile in sistemi di conversione energetica. Il syngas così prodotto è tuttavia caratterizzato da una composizione fortemente variabile, nella quale la presenza relativa di H_2, CO, CH_4, specie inerti e contaminanti influenza direttamente reattività, stabilità di fiamma, trasferimento termico ed emissioni. La caratterizzazione di un bruciatore alimentato con questo combustibile richiede pertanto un approccio nel quale sperimentazione e modellazione numerica siano utilizzate in modo complementare.

Il presente lavoro riguarda lo sviluppo e la calibrazione di un modello CFD di un bruciatore premiscelato alimentato con syngas derivato da biomassa. La metodologia numerica è articolata in due livelli complementari: un modello tridimensionale non reagente della sezione di miscelazione aria-syngas, utilizzato per verificare la sufficiente omogeneità della miscela a monte del bruciatore, e un modello bidimensionale assialsimmetrico della regione di combustione. Quest'ultimo comprende il fluido reagente, quattro corpi solidi rappresentativi delle pareti, un dominio fluido esterno e undici corpi solidi associati alle termocoppie sperimentali.

Il campo turbolento è descritto in formulazione RANS mediante modello Realizable k-ε Two-Layer. La cinetica chimica è risolta attraverso Complex Chemistry utilizzando il meccanismo GRI-Mech 2.11, costituito da 49 specie e 279 reazioni, mentre l'interazione turbolenza-combustione viene trattata mediante Turbulent Flame Speed Closure con correlazione di Peters. La Laminar Flame Speed viene determinata per le singole condizioni operative mediante il Table Generator di STAR-CCM+ e la combustione viene inizialmente innescata mediante un Temperature Ignitor temporaneo. Il trasferimento radiativo è risolto con Discrete Ordinates Method; durante la fase di sviluppo è stata utilizzata una formulazione Gray meno onerosa, mentre le simulazioni definitive impiegano K-Distribution in entrambi i domini fluidi.

Le condizioni di ingresso vengono ricostruite caso per caso a partire dai dati sperimentali. Le portate delle singole specie dell'aria e del syngas sono trasformate nelle frazioni massiche della miscela premiscelata da assegnare all'unico inlet del modello; da portata totale, densità e area di passaggio viene inoltre calcolata una velocità uniforme specifica per ciascun punto

operativo. Le variazioni del rapporto aria-combustibile sono ottenute principalmente intervenendo sulla portata del fuel mantenendone invariata la composizione relativa, con conseguente aggiornamento di composizione complessiva, velocità di ingresso e Laminar Flame Speed.

La valutazione del modello è basata sul confronto con le grandezze sperimentali disponibili: concentrazioni di O_2, CO_2, CO e ossidi di azoto nei prodotti della combustione, temperature misurate dalle termocoppie e profili di temperatura della superficie esterna del bruciatore. La metodologia sviluppata mantiene distinti gli aggiornamenti dei dati sperimentali, le verifiche di sensibilità numerica e le modifiche effettivamente introdotte nella calibrazione, con l'obiettivo di costruire un modello fisicamente interpretabile e sufficientemente robusto per l'analisi delle differenti condizioni operative del sistema.

Introduzione

La progressiva decarbonizzazione dei sistemi energetici richiede l'integrazione di tecnologie in grado di valorizzare risorse rinnovabili e, in questo quadro, la biomassa rappresenta una risorsa peculiare: l'energia chimica accumulata nella materia organica può essere sfruttata rendendola, attraverso processi termochimici, disponibile sotto forma di combustibili solidi, liquidi o gassosi. La gassificazione consente di trasformare un feedstock solido in una miscela combustibile composta principalmente da idrogeno, monossido di carbonio, metano e quantità variabili di specie diluenti e contaminanti. [1], [5]

L'utilizzo energetico del syngas derivato da biomassa presenta tuttavia problematiche sensibilmente differenti da quelle tipiche dei combustibili commerciali. La natura del feedstock, il tipo di gassificatore, la temperatura del processo, il rapporto di equivalenza e l'efficacia dei sistemi di trattamento determinano variazioni anche rilevanti del rapporto H_2/CO, del potere calorifico e della concentrazione di specie secondarie. Di conseguenza, la velocità laminare di fiamma, la diffusività, la temperatura adiabatica e i meccanismi di formazione delle emissioni possono cambiare in modo significativo tra differenti condizioni di prova. La capacità di un bruciatore di operare con syngas non può quindi essere valutata assumendo una composizione rappresentativa unica, ma deve essere studiata tenendo conto della fuel flexibility richiesta dal sistema reale. [5], [7], [9]

La sperimentazione costituisce il riferimento indispensabile per questa caratterizzazione. Le portate e la composizione del syngas permettono di ricostruire il punto operativo, mentre le temperature e le concentrazioni delle specie nei prodotti della combustione forniscono grandezze direttamente confrontabili tra le configurazioni differenti. Il dato sperimentale, tuttavia, descrive necessariamente il sistema attraverso un numero finito di punti e di grandezze misurate. Campi di velocità, temperatura, composizione e velocità di reazione all'interno del bruciatore risultano molto più difficili da determinare con continuità nello spazio. La Computational Fluid Dynamics rappresenta pertanto uno strumento complementare, capace di collegare le misure accessibili ai fenomeni termo-fluidodinamici e chimici che le producono.

La costruzione di un modello numerico CFD affidabile per la combustione del syngas rimane comunque un problema complesso. La previsione della fiamma dipende contemporaneamente

dal campo turbolento, dalla cinetica chimica, dalla velocità di propagazione della miscela, dal trasferimento di calore e dalle condizioni al contorno. Inoltre, grandezze emissive quali CO e NOx possono risultare particolarmente sensibili a differenze relativamente piccole di temperatura, tempo di residenza, composizione del combustibile o concentrazione di specie azotate quali NH_3. Ne deriva la necessità di distinguere con attenzione gli errori o le revisioni delle condizioni sperimentali dalle scelte numeriche e dai parametri effettivamente sottoposti a calibrazione. [9], [11], [12]

Il lavoro sviluppato in questa tesi affronta la caratterizzazione numerico-sperimentale di un bruciatore alimentato con il syngas prodotto dal Femto Gasifier mediante una metodologia CFD articolata in due domini. La sezione di mixing viene descritta attraverso un modello tridimensionale non reagente, sviluppato nel precedente lavoro di G. Trupia [6] e ripreso nel presente studio, utilizzato per verificare l'omogeneità della miscela aria-syngas prima dell'ingresso nel bruciatore. La regione di combustione viene invece rappresentata mediante un dominio bidimensionale assialsimmetrico, soluzione che consente di concentrare le risorse computazionali sulla descrizione della fiamma, dello scambio termico e delle specie prodotte.

L'obiettivo principale del presente lavoro è stato quello di sviluppare un modello capace di rappresentare congiuntamente la propagazione della fiamma e il comportamento termico dell'apparato. Il dominio del bruciatore include esplicitamente le pareti solide, l'ambiente esterno e le termocoppie. La posizione della strumentazione è ricostruita sulla base delle verifiche sperimentali, includendo anche gli scostamenti radiali dei sensori non perfettamente allineati con l'asse. La configurazione ottenuta permette quindi di confrontare il modello con le misure sperimentali non soltanto in termini di emissioni e temperature interne, ma anche mediante i profili termici rilevati sulla superficie esterna del bruciatore.

Dal punto di vista della combustione, la chimica dettagliata è descritta mediante GRI-Mech 2.11, mentre l'interazione tra turbolenza e propagazione della fiamma viene trattata mediante Turbulent Flame Speed Closure. Questa impostazione rende centrale la determinazione della Laminar Flame Speed della specifica miscela, calcolata mediante il Table Generator per i differenti punti operativi. Il trasferimento radiativo viene inoltre trattato con una strategia progressiva: durante la messa a punto viene impiegato un modello Gray meno oneroso dal punto di vista computazionale, mentre le simulazioni finali utilizzano una formulazione basata sul

K-Distribution. La sensibilità della soluzione alla discretizzazione viene verificata attraverso un confronto sistematico tra differenti affinamenti di mesh, mantenendo separate da tale analisi alcune prove esplorative eseguite a risoluzioni molto più elevate. [13], [16], [19]

Un ulteriore elemento metodologico riguarda la costruzione delle condizioni di ingresso. Poiché il modello assialsimmetrico possiede un unico inlet premiscelato, le portate sperimentali delle singole specie di aria e syngas vengono elaborate per ottenere la composizione massica complessiva. Per ogni caso vengono calcolati il rapporto aria-combustibile, λ, il rapporto di equivalenza, la densità e la velocità uniforme all'ingresso. Quando il punto operativo viene modificato intervenendo sulla portata del fuel, l'intera catena di grandezze viene aggiornata mantenendo invariata la composizione relativa del combustibile. Questo approccio permette di conservare la tracciabilità tra dato sperimentale, elaborazione e condizione numerica effettivamente simulata.

La tesi è organizzata in modo da seguire la stessa progressione logica. Il Capitolo 1 introduce il contesto della gassificazione della biomassa, le caratteristiche del syngas, le principali problematiche di combustione e le emissioni di interesse. Il Capitolo 2 descrive l'apparato sperimentale, dalla produzione e pulizia del gas alla miscelazione, alla strumentazione e alle grandezze utilizzate per il confronto con il modello. Il Capitolo 3 raccoglie i fondamenti di fluidodinamica computazionale, turbolenza e combustione necessari a motivare le scelte modellistiche, con particolare attenzione ai regimi di combustione turbolenta, alla Complex Chemistry e al TFC. Il Capitolo 4 presenta il set-up numerico sviluppato, la struttura multi-dominio, la discretizzazione, i modelli fisici, la preparazione dei casi e la strategia di verifica e calibrazione. Il Capitolo 5, infine, presenta un’analisi dei risultati sui vari casi operativi, seguito da un breve capitolo 6 dedicato alle conclusioni.

Le successive sezioni del lavoro saranno dedicate alla presentazione dei casi simulati, al confronto con i dati sperimentali e alla discussione dei risultati.

Capitolo 1 - Contesto e motivazioni dello studio

1.1 Valorizzazione energetica della biomassa mediante gassificazione

La progressiva transizione verso sistemi energetici caratterizzati da un minore impiego di combustibili fossili ha determinato un crescente interesse verso tecnologie capaci di valorizzare fonti energetiche rinnovabili. In questo contesto, la biomassa presenta la peculiarità di poter essere immagazzinata e convertita in energia quando necessario e, nel caso di residui agricoli, forestali o agroindustriali, il suo utilizzo consente contemporaneamente di valorizzare materiali altrimenti destinati allo smaltimento.

Tra i processi termochimici applicabili alla biomassa, la gassificazione consente di convertire una materia prima solida carboniosa in un combustibile gassoso attraverso un processo condotto in condizioni sub-stechiometriche. Il prodotto contiene specie combustibili, principalmente H_2, CO e CH_4, insieme a una quota generalmente rilevante di specie non combustibili quali N_2 e CO_2. Il gas ottenuto può successivamente essere impiegato per la produzione di energia elettrica e termica. [5]

La gassificazione risulta particolarmente interessante quando applicata a sistemi di piccola scala, nei quali la conversione può avvenire in prossimità della disponibilità della biomassa. La letteratura individua, infatti, nei sistemi inferiori a circa 200 kW una possibile soluzione per sfruttare risorse locali senza sostenere i costi logistici associati alla concentrazione di grandi quantità di biomassa in impianti centralizzati. La possibilità di estendere il numero di biomasse utilizzabili rappresenta inoltre un elemento importante per aumentare la flessibilità di questi impianti e favorirne l'impiego per generazione distribuita di energia termica ed elettrica. [1], [4]

1.1.1 Configurazioni dei gassificatori a letto fisso

Nei gassificatori a letto fisso la disposizione relativa dei flussi di biomassa, aria e gas, prodotti determina configurazioni geometriche differenti. A titolo di confronto, la Figura 1.1 riporta gli schemi di principio di una configurazione updraft, nella quale il gas prodotto risale in direzione opposta al moto della biomassa, e di una configurazione crossdraft, caratterizzata da immissione laterale dell'aria e uscita trasversale del gas. Il sistema sperimentale utilizzato

nel presente lavoro adotta invece una configurazione downdraft, descritta nel dettaglio nel Capitolo 2. [1]

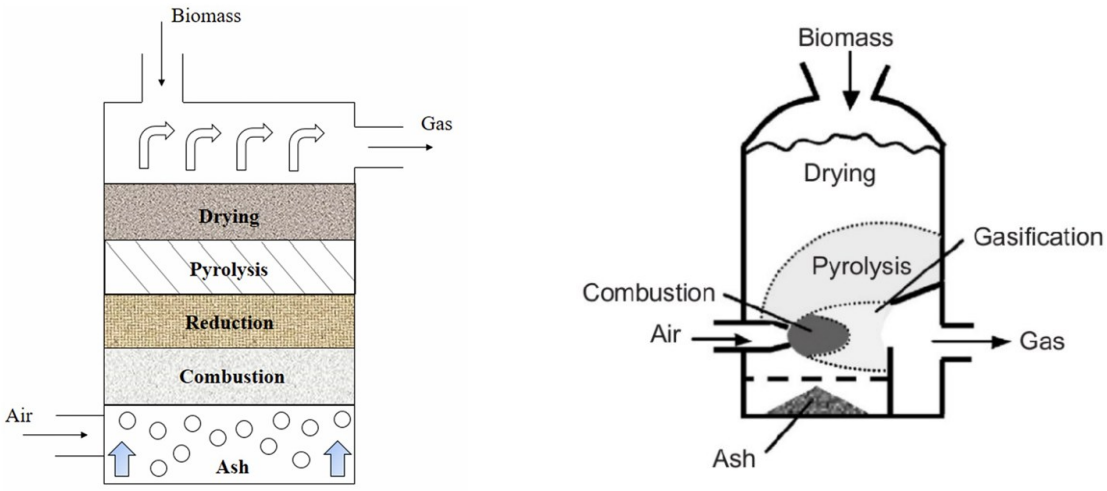


Figura 1.1 - Schemi di principio di gassificatori a letto fisso: (a) configurazione updraft; (b) configurazione crossdraft. [6]

Nel sistema oggetto del presente studio la produzione del combustibile è affidata al Femto Gasifier, un prototipo da laboratorio progettato per operare con quantità contenute di biomassa e per consentire campagne sperimentali su differenti feedstock. La configurazione specifica del reattore e la relativa strumentazione vengono descritte nel Capitolo 2.

1.2 Caratteristiche del syngas derivato da biomassa

Nel seguito del presente lavoro il termine syngas viene utilizzato, coerentemente con la letteratura di riferimento del progetto, per indicare il gas combustibile prodotto mediante gassificazione della biomassa. È tuttavia opportuno osservare che, in senso strettamente tecnico, il termine syngas indica prevalentemente una miscela costituita da H_2 e CO, mentre nella pratica viene frequentemente impiegato in senso più ampio anche per il producer gas ottenuto mediante gassificazione con aria. [5]

Una delle principali peculiarità di questo combustibile è l'assenza di una composizione univocamente definita. Essa dipende dalla natura del feedstock, dal processo di gassificazione e dalle relative condizioni operative. Oltre a H_2 e CO possono essere presenti CH_4 e quantità rilevanti di N_2, CO_2 e H_2O, nonché specie minoritarie quali NH_3 e H_2S. [5]

La variabilità non costituisce un elemento secondario, ma uno dei principali problemi ingegneristici nell'impiego del syngas. In letteratura sono riportati intervalli molto ampi sia per il rapporto H_2/CO sia per la quantità di diluenti presenti nel combustibile; di conseguenza possono variare in maniera sostanziale il potere calorifico, i tempi chimici e le proprietà di propagazione della fiamma. [5], [9]

Rispetto al gas naturale, i syngas caratterizzati da basso o medio potere calorifico possono inoltre presentare proprietà fisiche e chimiche sensibilmente differenti, tra cui velocità di fiamma, densità, diffusività di massa e numero di Lewis. Tali differenze modificano l'interazione tra chimica e turbolenza e rendono non immediatamente trasferibili a questi combustibili le strategie sviluppate per sistemi alimentati a metano. [7], [9]

Il syngas non rappresenta soltanto un combustibile destinato alla conversione diretta in energia. La presenza combinata di CO e H_2 lo rende anche un possibile intermedio per differenti processi di sintesi chimica. La Figura 1.2 riassume alcuni dei principali percorsi di valorizzazione, comprendenti la produzione di idrogeno, metanolo, combustibili Fischer-Tropsch, alcoli e ulteriori prodotti di sintesi. Nel presente lavoro l'interesse è rivolto all'impiego diretto del gas in combustione, ma tale quadro evidenzia la versatilità del vettore gassoso ottenuto dalla gassificazione.

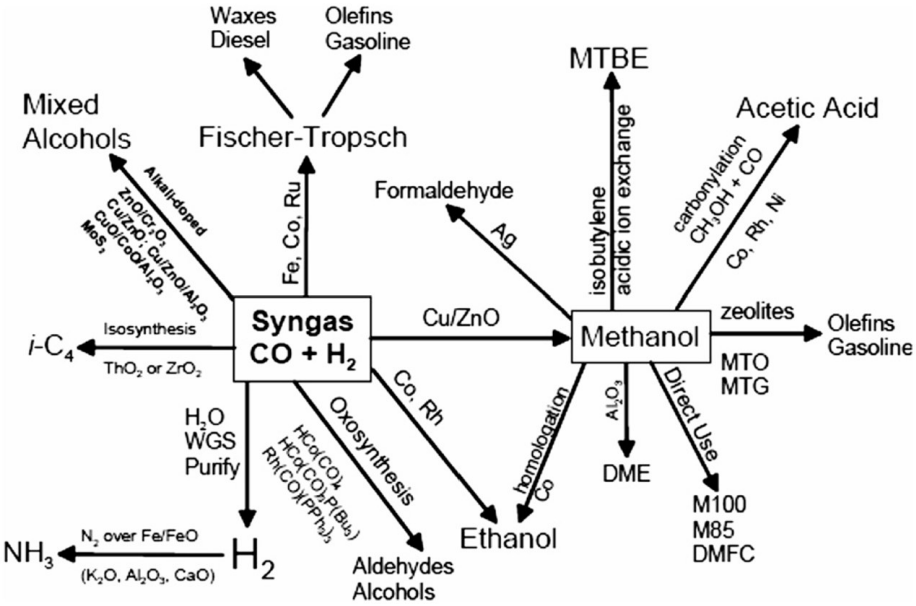


Figura 1.2 - Esempi di possibili percorsi di valorizzazione chimica del syngas.[6]

1.3 Contaminanti e trattamento del gas

Il gas prodotto dal gassificatore contiene, oltre alle specie permanenti, una serie di contaminanti che possono interferire con i componenti posti a valle. Tra i principali si trovano particolato, tar e composti contenenti zolfo, azoto e cloro. Parte del particolato deriva dal trascinamento di char e ceneri, mentre una gassificazione incompleta può portare alla presenza di composti organici condensabili comunemente indicati come tar. [2]

La quantità e la natura di tali contaminanti dipendono sia dalla biomassa sia dal funzionamento del reattore. Prove effettuate proprio sul Femto Gasifier con differenti biomasse residuali hanno mostrato variazioni della composizione del gas, del contenuto di contaminanti e dell'efficienza di gassificazione; è stata inoltre osservata una relazione tra contenuto di tar e potere calorifico del gas, evidenziando come parte dell'energia chimica possa rimanere associata ai composti condensabili anziché alle specie combustibili non condensabili. [3]

Prima dell'utilizzo finale è quindi necessario sottoporre il gas a un opportuno trattamento. Per la rimozione del particolato, il ciclone costituisce una soluzione ampiamente utilizzata: il moto vorticoso della corrente determina una separazione inerziale delle particelle più pesanti dalla fase gassosa. [2]

Il grado di pulizia richiesto dipende infine dall'applicazione. Nel caso oggetto del presente lavoro il gas viene destinato alla combustione in un bruciatore sperimentale; risultano quindi particolarmente importanti sia la presenza di depositi che possono alterare le condizioni fluidodinamiche del sistema sia quella di specie minoritarie capaci di partecipare direttamente alle reazioni di formazione degli inquinanti.

1.4 Combustione premiscelata e influenza della composizione

Il sistema analizzato opera con una miscela di aria e syngas formata a monte della regione di combustione. In una combustione premiscelata combustibile e ossidante vengono miscelati prima di raggiungere il fronte di fiamma, consentendo un maggiore controllo della distribuzione locale del rapporto aria-combustibile rispetto a una configurazione puramente diffusiva.

La premiscelazione non elimina tuttavia la forte dipendenza del comportamento della fiamma dalla composizione del syngas. Particolare importanza assume il rapporto H_2/CO.

Misure sperimentali mostrano che l'incremento della frazione di idrogeno determina un aumento della velocità laminare di fiamma in un ampio intervallo di rapporti di equivalenza. Anche in regime turbolento è stata osservata una marcata dipendenza della velocità di propagazione dal contenuto di H_2, attribuita anche agli effetti diffusivo-termici preferenziali. [7]

L'aumento della reattività può favorire la stabilizzazione della combustione, ma contemporaneamente aumenta il rischio di flashback, che si verifica quando la velocità locale di propagazione della fiamma supera quella della miscela in ingresso e il fronte di reazione può propagarsi verso monte. All'estremo opposto, una riduzione eccessiva della reattività o del rapporto di equivalenza può portare al blow-out, rendendo il campo di stabilità della fiamma un elemento centrale nella progettazione di combustori fuel-flexible. La letteratura mostra infatti una forte dipendenza dei limiti di blow-out dalla composizione del combustibile e, in particolare, dal contenuto di idrogeno. [8]

Il monossido di carbonio presenta invece tempi chimici maggiori rispetto all'idrogeno. Miscele a maggiore contenuto di CO possono quindi richiedere tempi di residenza più lunghi per ottenere un'ossidazione completa, con conseguenti effetti sulle emissioni di CO allo scarico. [9]

Ne deriva che il syngas non può essere trattato come un semplice sostituto del gas naturale: la fuel flexibility del sistema richiede che il bruciatore mantenga condizioni di combustione soddisfacenti anche in presenza di variazioni della composizione del combustibile.

1.5 Emissioni di CO e NOx

Tra le specie di maggiore interesse ai fini della caratterizzazione del bruciatore figurano il monossido di carbonio e gli ossidi di azoto.

Il CO è strettamente associato al grado di completamento del processo di combustione. La sua concentrazione dipende dalla cinetica di ossidazione, dal campo di temperatura e dal tempo di residenza disponibile. Questa dipendenza assume particolare rilevanza per miscele ricche di CO, per le quali la cinetica relativamente lenta può favorire la presenza di combustibile parzialmente ossidato allo scarico. [9]

La formazione degli NOx è più complessa e dipende dal campo termico, dal rapporto di equivalenza e dalla composizione della miscela. Studi su syngas premiscelato mostrano una

forte correlazione tra comportamento degli NOx, temperatura e struttura della fiamma; l'operazione in condizioni più povere tende generalmente a ridurre la formazione di NOx attraverso la diminuzione della temperatura e del rilascio termico. [10], [11]

Nel caso del syngas derivato da biomassa è inoltre necessario considerare l'azoto già presente nel combustibile sotto forma di specie quali NH_3. Questo aspetto è particolarmente importante per il sistema in esame, poiché il trattamento del gas non comprende un dispositivo specifico per la rimozione dell'ammoniaca.

L'importanza di questa specie è confermata da studi sperimentali e numerici: anche l'aggiunta di una piccola quantità di NH_3 al syngas è in grado di aumentare significativamente le emissioni di NOx, modificandone inoltre la dipendenza dalle condizioni operative.

La corretta definizione della composizione del combustibile diventa pertanto essenziale non soltanto per la previsione del campo termico e della stabilità della fiamma, ma anche per la riproduzione numerica delle emissioni.

1.6 Motivazione dell'approccio numerico-sperimentale

La complessità appena descritta rende l'analisi del bruciatore un problema intrinsecamente multidisciplinare, nel quale interagiscono fluidodinamica, turbolenza, cinetica chimica e trasferimento termico.

La sperimentazione permette di conoscere le grandezze direttamente accessibili alla misura, quali portate, composizione del combustibile, distribuzione di temperatura ed emissioni allo scarico. Non consente tuttavia di ricostruire con la stessa completezza i campi tridimensionali di velocità, temperatura e composizione all'interno del sistema.

La CFD costituisce quindi uno strumento complementare alla sperimentazione, purché il modello venga verificato rispetto a dati reali. Il confronto sperimentale risulta particolarmente importante per la combustione del syngas, poiché anche la scelta della cinetica chimica può produrre differenze significative nelle grandezze fondamentali: ad esempio, confronti tra misure e differenti meccanismi cinetici mostrano discrepanze nella previsione della velocità laminare di fiamma, soprattutto al crescere della temperatura di preriscaldamento. [7], [9]

Analogamente, nella modellazione termo-fluidodinamica l'inclusione di fenomeni quali lo scambio radiativo può influenzare sensibilmente la previsione della temperatura e delle emissioni. [19], [20]

Il presente lavoro nasce quindi dall'integrazione tra caratterizzazione sperimentale e modellazione CFD del bruciatore alimentato dal syngas prodotto dal Femto Gasifier. I dati sperimentali costituiscono il riferimento per la costruzione delle condizioni operative, la calibrazione e la valutazione del modello numerico; quest'ultimo permette invece di investigare in maniera più approfondita i fenomeni responsabili dello sviluppo della fiamma, del trasferimento termico e della formazione delle emissioni. L'obiettivo è, quindi, utilizzare i due strumenti in modo complementare per ottenere una descrizione fisicamente interpretabile del sistema.

Capitolo 2 - Apparato sperimentale

2.1 Architettura generale dell'impianto

L'apparato sperimentale è situato presso il laboratorio di Fisica Tecnica dell'Università di Modena e Reggio Emilia, nell'edificio PETERMAR di Fossoli (Carpi) [3] ed è costituito da una catena di dispositivi che permette di partire dalla biomassa solida e arrivare alla caratterizzazione della combustione del gas prodotto. Possono essere individuate quattro sezioni funzionali principali: produzione del syngas, trattamento e caratterizzazione del gas, miscelazione con aria e combustione, e acquisizione delle grandezze sperimentali. Una vista complessiva del banco prova è riportata in Figura 2.1.

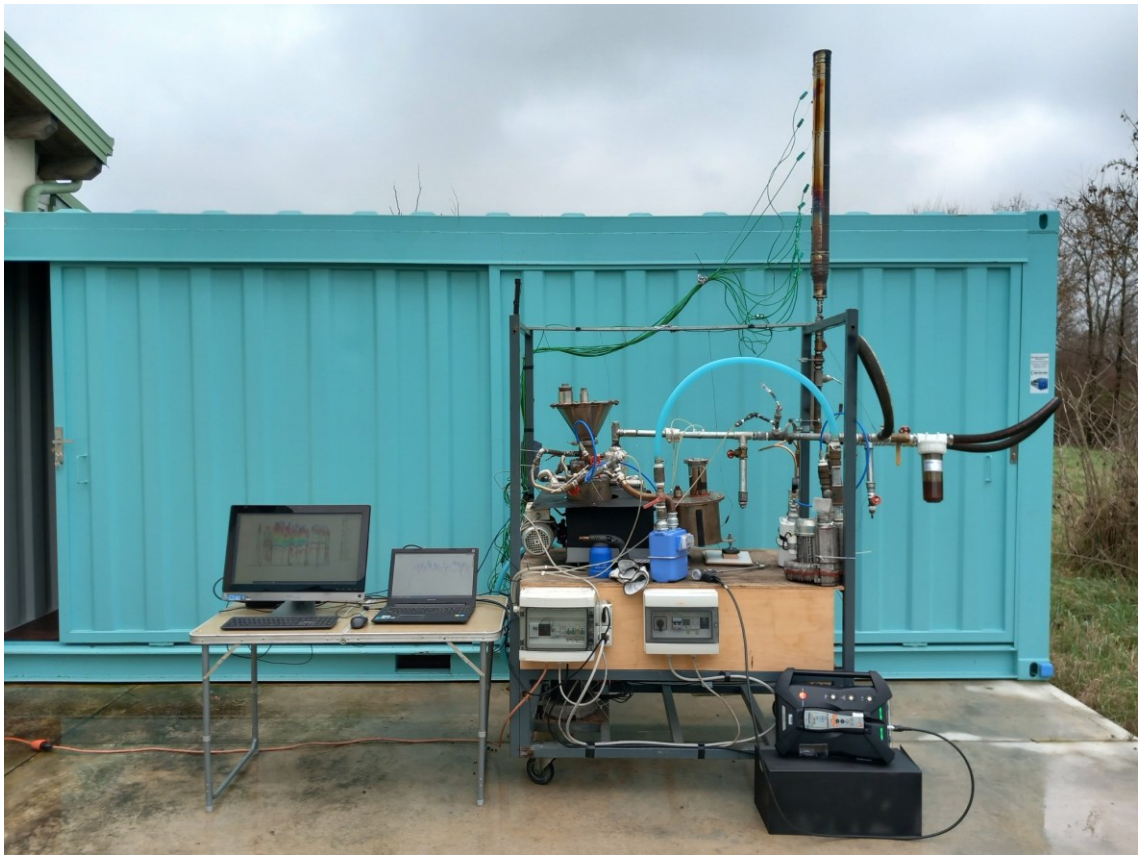


Figura 2.1 - Vista complessiva del set-up sperimentale utilizzato per la produzione, il trattamento e la combustione del syngas. [6]

Il cuore della sezione di produzione è il Femto Gasifier, prototipo sviluppato dai ricercatori dell'UNIMORE per condurre prove di gassificazione su scala di laboratorio con differenti feedstock. Il gas prodotto attraversa successivamente sistemi dedicati alla riduzione di

particolato e tar, viene caratterizzato dal punto di vista chimico e infine inviato al sistema di miscelazione aria-syngas e al bruciatore. [3]

La campagna sperimentale associata allo sviluppo del modello numerico ha inoltre previsto la misura delle portate, della composizione del syngas, del profilo assiale di temperatura nel bruciatore e delle concentrazioni delle principali specie allo scarico.

2.2 Femto Gasifier

Il Femto Gasifier è un gassificatore a letto fisso di tipo downdraft Imbert, sviluppato per utilizzare quantità relativamente contenute di combustibile e consentire prove preliminari con differenti biomasse. La regione di gola, o throat, è ricavata da un blocco pieno di acciaio inossidabile, mentre il reattore viene rivestito esternamente con materiale isolante per ridurre le dispersioni termiche. Un dettaglio dell'unità sperimentale è mostrato in Figura 2.2. [3]



Figura 2.2 - Dettaglio del Femto Gasifier installato sul banco sperimentale. [6]

Il sistema opera in pressione positiva, con la soffiante posizionata a monte del reattore. Tale configurazione impedisce al gas grezzo, contenente tar e particolato, di attraversare la soffiante e facilita contemporaneamente le operazioni di campionamento a valle del gassificatore. [3]

Il prototipo viene normalmente alimentato attraverso un hopper. La sua configurazione consente tuttavia di rimuoverlo nel caso di biomasse caratterizzate da scarsa scorrevolezza, riducendo così il rischio di fenomeni di bridging all'interno del sistema di alimentazione.

Le prove relative al lavoro di caratterizzazione del bruciatore sono state svolte utilizzando biomassa legnosa pellettizzata.

La ridotta scala del reattore comporta una limitata inerzia termica; di conseguenza, essendo le prove effettuate all'aperto, la temperatura ambiente può esercitare un'influenza non trascurabile sulle prestazioni del processo nonostante l'isolamento termico del gassificatore.

2.3 Strumentazione associata al gassificatore

La pubblicazione relativa allo sviluppo e alla caratterizzazione del Femto consente di descrivere con maggiore dettaglio la strumentazione associata al prototipo. [3]

La portata volumetrica dell'aria introdotta nel gassificatore viene misurata mediante un orifizio calibrato associato a un sensore di pressione differenziale MPXV5004DP, mentre la regolazione del flusso viene effettuata attraverso due valvole a saracinesca. La portata del gas prodotto può essere ricavata conoscendo la portata d'aria e la concentrazione di azoto nell'aria e nel gas. [3]

Un ulteriore sensore differenziale viene utilizzato per monitorare la caduta di pressione attraverso il reattore, grandezza utile per caratterizzarne il comportamento fluidodinamico. La temperatura nella zona di riduzione, in corrispondenza della griglia, viene misurata mediante una termocoppia di tipo K TC-Direct con guaina in acciaio inossidabile; una seconda termocoppia è utilizzata per monitorare la temperatura ambiente. [3]

Nelle campagne di caratterizzazione del Femto la quantità di biomassa alimentata è stata inoltre monitorata mediante una bilancia di precisione. [3]

Questi strumenti appartengono alla caratterizzazione generale del prototipo Femto; nel seguito del lavoro verranno invece evidenziate in particolare le grandezze direttamente utilizzate per la definizione e validazione del modello del bruciatore.

2.4 Pulizia del syngas

A valle del reattore sono presenti due principali dispositivi dedicati al trattamento del syngas.

Il primo è un separatore ciclonico, posto immediatamente dopo il gassificatore e destinato alla rimozione della maggior parte del particolato trascinato dalla corrente gassosa; un dettaglio del componente installato sul banco è riportato in Figura 2.3. Il secondo è un sistema di filtrazione finalizzato alla condensazione e alla rimozione di una parte dei tar.



Figura 2.3 - Dettaglio del ciclone impiegato per la separazione del particolato dalla corrente di syngas.[6]

La presenza di tali dispositivi è coerente con la necessità generale di ridurre particolato e composti condensabili prima dell'utilizzo del gas in sistemi posti a valle. Il ciclone sfrutta la

separazione inerziale delle particelle all'interno di un campo di moto vorticoso, rappresentando una delle tecnologie più consolidate per il trattamento del gas prodotto da gassificazione. [2]

Non è invece presente un sistema specifico per la rimozione dell'NH_3. Pertanto, una frazione dell'ammoniaca generata durante la gassificazione può permanere nel combustibile inviato al bruciatore.

Quest'ultimo aspetto è particolarmente importante perché la composizione misurata dal micro-gascromatografo non permette di quantificare direttamente l'ammoniaca e la sua concentrazione rappresenta quindi una delle fonti di incertezza nella successiva modellazione degli NOx.

2.5 Campionamento e analisi della composizione del gas

Il campione di syngas destinato all'analisi viene prelevato mediante un apposito punto di campionamento posto a valle del ciclone. La procedura di prelievo e la linea di campionamento sono illustrate in Figura 2.4.



Figura 2.4 - Operazione di campionamento del syngas dalla linea sperimentale.[6]

La composizione viene determinata attraverso un GCX Micro GC-TCD. Lo strumento separa le differenti specie presenti nel campione mediante colonne cromatografiche e ne consente la successiva identificazione e quantificazione a partire dal segnale dei rilevatori.

La configurazione utilizzata comprende un modulo CP-Molsieve 5A, che impiega argon come carrier gas, e un modulo Rt-U Bond, che impiega elio. I moduli permettono di determinare le concentrazioni delle principali specie non condensabili considerate nel lavoro: H_2, O_2, N_2, CH_4, CO e CO_2.

Il sistema non dispone invece del sensore necessario alla determinazione diretta dell'NH_3. La concentrazione di ammoniaca costituisce quindi una grandezza caratterizzata da maggiore incertezza rispetto alle specie misurate direttamente e, nel corso del progetto, alcune condizioni sono state aggiornate sulla base di successive verifiche sperimentali. Tali revisioni vengono trattate come aggiornamenti degli input e mantenute distinte dalle modifiche introdotte durante la calibrazione CFD.

La misura della composizione del syngas rappresenta uno dei passaggi fondamentali dell'intera procedura, poiché le frazioni delle specie misurate costituiscono direttamente uno degli input del successivo modello di combustione.

2.6 Miscelazione aria-syngas e ingresso nel bruciatore

Prima della combustione il syngas viene miscelato con aria. Le portate volumetriche dei due flussi vengono monitorate separatamente mediante misuratori di portata.

La geometria a monte del bruciatore presenta una condotta centrale alimentata con syngas dal basso e un ingresso laterale attraverso il quale viene introdotta l’aria. I due flussi si mescolano prima di raggiungere la regione di combustione. In prossimità dell’ingresso del bruciatore è inoltre presente una rete metallica in acciaio, impiegata per favorire la stabilizzazione della fiamma. Un dettaglio della rete e della relativa maglia è riportato in Figura 2.5. [3]

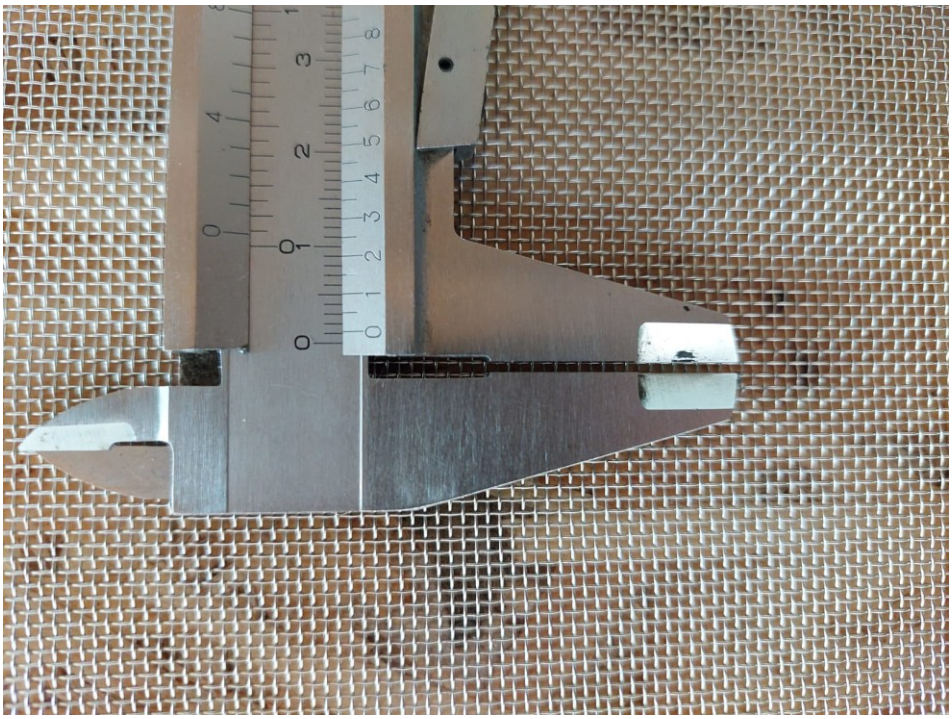


Figura 2.5 - Dettaglio della rete metallica installata in prossimità dell'ingresso del bruciatore. [6]

La qualità della premiscelazione rappresenta una grandezza fondamentale. Variazioni spaziali del rapporto tra aria e combustibile si tradurrebbero infatti in differenti condizioni locali di reattività e temperatura. Per verificare questo aspetto viene utilizzato un modello CFD tridimensionale della sezione di miscelazione, descritto nel Capitolo 4.

L'analisi del campo di composizione nella sezione posta a monte del dominio reagente mostra una bassa variabilità delle frazioni massiche. Tale risultato consente di assumere la miscela sufficientemente omogenea all'ingresso del bruciatore e giustifica l'impiego di un dominio bidimensionale assialsimmetrico per la successiva simulazione della combustione.

2.7 Misura delle temperature nel bruciatore e sulla parete esterna

Per caratterizzare il comportamento termico del bruciatore vengono utilizzate undici termocoppie di tipo K, distribuite lungo il sistema secondo la configurazione effettivamente ricostruita nel corso della campagna sperimentale. La disposizione dei sensori sul bruciatore è visibile in Figura 2.6.



Figura 2.6 - Bruciatore sperimentale e disposizione delle termocoppie lungo la parete. [6]

La distribuzione assiale dei sensori non è uniforme. Nella regione più vicina all'ingresso, dove si sviluppa la fiamma e sono attesi gradienti termici più elevati, le termocoppie sono maggiormente ravvicinate; procedendo verso lo scarico la distanza tra i punti di misura aumenta. Le coordinate utilizzate nel modello numerico seguono la ricostruzione sperimentale aggiornata dell'apparato.

Due sensori presentano inoltre un significativo scostamento radiale rispetto all'asse: TC1 è collocata a 10 mm dall'asse, mentre TC3 è collocata a 23 mm. Tale informazione è stata recepita nella ricostruzione CAD del modello finale, in modo da mantenere il punto numerico di misura coerente con la reale posizione della strumentazione.

La campagna sperimentale comprende inoltre profili di temperatura della superficie esterna del bruciatore lungo la quota assiale. Questi dati costituiscono un ulteriore riferimento per la validazione del trasferimento termico e assumono particolare importanza nel nuovo modello, nel quale le pareti solide e l'ambiente esterno sono rappresentati esplicitamente.

2.7.1 Osservazione qualitativa della fiamma e acquisizioni termografiche

Nel corso di una delle giornate di prova, condotta nel mese di giugno 2026, è stata effettuata anche una configurazione sperimentale di prova nella quale il syngas è stato deviato verso un secondo tubo in vetro. La miscela impiegata presentava una composizione del syngas prossima a quella che successivamente assoceremo al caso di gennaio. La configurazione non coincide integralmente con il bruciatore riprodotto nel modello numerico finale e non viene pertanto utilizzata per un confronto quantitativo con la CFD; il tratto trasparente ha tuttavia consentito di osservare direttamente la presenza e la localizzazione della regione luminosa della fiamma, fornendo un riscontro qualitativo utile alla comprensione del processo di stabilizzazione.



Figura 2.7 - Visualizzazione della Fiamma.

La caratterizzazione termica dell'apparato è stata inoltre affiancata da acquisizioni mediante camera termografica. L'impiego della termografia consente di osservare la distribuzione della

temperatura sulla superficie esterna del bruciatore e costituisce un riferimento complementare alle misure puntuali delle termocoppie. Tali acquisizioni sono particolarmente utili nel presente lavoro, poiché il modello finale rappresenta esplicitamente le pareti solide e l'ambiente esterno e permette quindi di confrontare anche il trasferimento di calore verso l'esterno.



Figura 2.8 - Acquisizione termografica della superficie esterna del bruciatore.

2.8 Analisi dei prodotti della combustione

La composizione dei gas combusti viene misurata mediante un analizzatore portatile Testo Model 350, equipaggiato con una sonda per il prelievo del campione. Lo strumento, mostrato in Figura 2.9, permette di valutare le concentrazioni delle specie di interesse, tra cui CO, NOx, O_2 e CO_2.



Figura 2.9 - Analizzatore portatile Testo 350 e sonda impiegati per la caratterizzazione dei prodotti della combustione. [6]

Le acquisizioni vengono effettuate dopo il raggiungimento di una condizione di funzionamento stabile del bruciatore, in modo da ridurre l'effetto delle fluttuazioni transitorie. La sonda viene inserita nel circuito di scarico attraverso il punto di campionamento dedicato, permettendo il prelievo dei gas nella posizione scelta per il confronto con il modello numerico. I risultati vengono espressi in ppm per CO e NOx e in frazione volumetrica per CO_2 e O_2.

Questo dettaglio è importante anche dal punto di vista numerico: la misura delle emissioni non rappresenta infatti una media indiscriminata sull'intera sezione di uscita, ma è associata alla posizione effettiva della sonda. Nel post-processing numerico le concentrazioni vengono pertanto estratte in modo coerente con la posizione sperimentale di campionamento, così da rendere il confronto il più possibile omogeneo.

2.9 Grandezze sperimentali utilizzate per la modellazione

La campagna sperimentale mette a disposizione cinque gruppi principali di informazioni utili alla modellazione: composizione chimica del syngas; portate di aria e combustibile; temperature rilevate dalle termocoppie nel bruciatore; profili di temperatura della superficie esterna; concentrazioni delle principali specie nei prodotti della combustione.

Le prime due categorie permettono di definire le condizioni operative e le condizioni al contorno del modello, mentre le temperature interne, le temperature di parete e le emissioni costituiscono i principali riferimenti utilizzati per valutarne la capacità predittiva.

Questa relazione diretta tra misura e simulazione è un elemento centrale della metodologia del progetto: il modello numerico non viene sviluppato come rappresentazione indipendente dell'apparato, ma come strumento costruito e progressivamente calibrato sulla base di grandezze sperimentali effettivamente misurate sul sistema reale. Il confronto numerico-sperimentale costituisce quindi il passaggio fondamentale per stabilire l'affidabilità del modello prima del suo utilizzo per l'analisi di condizioni non direttamente caratterizzate sperimentalmente.

Capitolo 3 - Fondamenti di fluidodinamica computazionale e modellazione della combustione

3.1 Introduzione alla fluidodinamica computazionale

La Computational Fluid Dynamics (CFD) comprende l'insieme delle metodologie numeriche utilizzate per analizzare fenomeni fluidodinamici mediante la soluzione discretizzata delle equazioni che descrivono il moto dei fluidi. Rispetto alla sola caratterizzazione sperimentale, la CFD permette di ottenere informazioni spaziali e temporali relative alle principali grandezze del campo di moto, quali velocità, pressione, temperatura e composizione, anche in regioni difficilmente accessibili mediante strumenti di misura. [18]

Alla base della descrizione matematica del problema vi è l'ipotesi del continuo, secondo la quale il fluido può essere trattato come un mezzo continuo e le sue proprietà possono essere descritte attraverso grandezze macroscopiche. Tale ipotesi consente di trascurare la struttura molecolare della materia e di formulare le equazioni di conservazione in termini di campi continui di densità, velocità, pressione e temperatura.

Le equazioni fondamentali derivano dai principi di conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. Per un fluido comprimibile, la conservazione della massa può essere espressa nella forma:

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

dove ρ rappresenta la densità e u il vettore velocità.

Il bilancio della quantità di moto assume invece, in forma generale:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}$$

dove p è la pressione, τ il tensore degli sforzi viscosi e f rappresenta l'insieme delle eventuali forze di volume.

A queste si aggiunge l'equazione di conservazione dell'energia, necessaria per determinare l'evoluzione del campo termico. Nel caso di un flusso reagente, l'energia assume un ruolo particolarmente importante poiché le reazioni chimiche introducono termini sorgente associati al rilascio o assorbimento di energia.

Il sistema così ottenuto è costituito da equazioni differenziali non lineari alle derivate parziali per le quali, salvo casi fortemente semplificati, non è disponibile una soluzione analitica in forma chiusa. È pertanto necessario ricorrere a metodologie numeriche per determinarne una soluzione approssimata.

3.2 Metodo dei volumi finiti

Una delle tecniche di discretizzazione maggiormente utilizzate nei software CFD è il metodo dei volumi finiti (Finite Volume Method, FVM). [18]

Il dominio fisico viene suddiviso mediante una mesh in un numero finito di volumi di controllo non sovrapposti. Le equazioni di conservazione vengono integrate su ciascun volume e, applicando il teorema della divergenza, gli integrali dei termini divergenti vengono trasformati in flussi attraverso le superfici che delimitano il volume stesso.

Questa formulazione presenta il vantaggio fondamentale di essere intrinsecamente conservativa: il flusso che lascia una determinata cella attraverso una faccia coincide con quello che entra nella cella adiacente attraverso la medesima superficie.

La discretizzazione conduce quindi alla trasformazione del sistema originario di equazioni differenziali in un sistema di equazioni algebriche. I valori delle variabili sulle facce delle celle devono essere ricostruiti a partire dai valori disponibili nei centroidi delle celle stesse, mediante opportuni schemi di interpolazione. Tra quelli maggiormente impiegati rientrano gli schemi upwind del primo e del secondo ordine e gli schemi alle differenze centrali.

La scelta della dimensione della mesh e degli schemi numerici costituisce un compromesso tra accuratezza e costo computazionale. Una discretizzazione insufficiente può infatti introdurre fenomeni di diffusione numerica e impedire la corretta rappresentazione dei gradienti caratteristici del problema. Questo aspetto diventa particolarmente rilevante nelle simulazioni di combustione, nelle quali la zona di reazione può essere caratterizzata da forti gradienti spaziali di temperatura e concentrazione.

3.3 Modellazione della turbolenza

La maggior parte dei flussi di interesse ingegneristico, e in particolare quelli che si sviluppano all'interno di bruciatori e camere di combustione, presenta un comportamento turbolento. La turbolenza è caratterizzata da fluttuazioni tridimensionali, caotiche e non stazionarie delle grandezze fluidodinamiche, che si manifestano su un ampio spettro di scale spaziali e temporali. Essa influenza profondamente i processi di trasporto di quantità di moto, energia e specie chimiche, modificando in modo diretto sia il grado di miscelazione tra i reagenti sia la struttura e la propagazione della fiamma. [17]

Dal punto di vista fisico, la turbolenza può essere interpretata come un moto vorticoso composto da strutture di dimensioni molto diverse. Le strutture di scala maggiore, dette grandi eddies, ricevono energia dal flusso medio e la trasferiscono progressivamente a vortici di dimensioni inferiori attraverso il cosiddetto energy cascade. Il processo prosegue fino a raggiungere le più piccole strutture turbolente, nelle quali gli effetti viscosi diventano predominanti e l'energia cinetica turbolenta viene dissipata in energia interna. Questa distribuzione multiscala costituisce uno dei motivi principali per cui la simulazione diretta della turbolenza risulta estremamente onerosa dal punto di vista computazionale.

Nel caso specifico dei flussi reagenti, la turbolenza assume un ruolo ancora più centrale rispetto ai flussi non reagenti. Infatti, oltre a controllare il trasporto turbolento, essa interagisce con i meccanismi di diffusione e con la cinetica chimica, determinando la velocità con cui i reagenti vengono portati a contatto e le modalità con cui il fronte di fiamma si sviluppa nel dominio. La modellazione della turbolenza costituisce quindi uno degli aspetti fondamentali nella costruzione di un modello CFD di combustione.

3.3.1 Approcci alla simulazione della turbolenza

Dal punto di vista numerico, la simulazione della turbolenza può essere affrontata con diversi livelli di dettaglio. L'approccio più completo è la Direct Numerical Simulation (DNS), nella quale vengono risolte direttamente tutte le scale del moto, dalle strutture energeticamente dominanti fino alle scale dissipative di Kolmogorov. Tale approccio non richiede modelli di chiusura per la turbolenza, ma presenta un costo computazionale estremamente elevato, che lo

rende impraticabile per geometrie reali e problemi ingegneristici complessi come quelli dei combustori. [17]

Un secondo approccio è costituito dalla Large Eddy Simulation (LES). In questo caso vengono risolte direttamente le strutture turbolente di scala maggiore, mentre l'effetto delle strutture inferiori alla dimensione locale di filtro viene modellato tramite un modello di sottogriglia (sub-grid scale model). La LES garantisce una descrizione fisicamente più accurata dei fenomeni transitori e delle strutture vorticali rispetto ai metodi mediati, ma richiede comunque risorse computazionali significativamente superiori rispetto agli approcci RANS.

L'approccio più diffuso nelle applicazioni industriali rimane tuttavia quello Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS). In questo caso il moto turbolento non viene risolto istante per istante, ma viene descritto attraverso le grandezze medie del flusso. Le fluttuazioni turbolente non vengono quindi calcolate esplicitamente, bensì rappresentate in modo indiretto attraverso opportuni modelli di chiusura. Il vantaggio principale dell'approccio RANS è il ridotto costo computazionale, che lo rende particolarmente adatto a problemi di combustione reattiva in geometrie realistiche e a studi parametrici.

Per il presente lavoro, nel quale l'obiettivo non è l'analisi dettagliata delle strutture istantanee del moto ma la riproduzione affidabile delle grandezze medie di temperatura, composizione ed emissioni, l'approccio RANS risulta il compromesso più appropriato tra accuratezza e costo computazionale.

3.3.2 Media di Reynolds e problema della chiusura

L'approccio RANS si basa sulla decomposizione di Reynolds, secondo la quale una generica grandezza istantanea φ viene espressa come somma di una componente media e di una componente fluttuante: [17]

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \overline{\phi}(\mathbf{x}) + \phi'(\mathbf{x}, t), \qquad \overline{\phi'} = 0$$

Applicando tale decomposizione alle equazioni di Navier-Stokes e mediando nel tempo, si ottengono le equazioni RANS. In esse compaiono però nuovi termini associati alle correlazioni delle fluttuazioni di velocità, noti come sforzi di Reynolds. Questi termini rappresentano l'effetto macroscopico della turbolenza sul trasporto di quantità di moto.

Il problema fondamentale è che gli sforzi di Reynolds introducono nuove incognite, rendendo il sistema non chiuso. Questo è il cosiddetto closure problem della turbolenza. Per risolverlo è necessario introdurre un modello di turbolenza capace di esprimere tali termini in funzione delle grandezze medie del flusso.

Nel caso dei flussi comprimibili o reagenti, nei quali le variazioni di densità sono rilevanti, è spesso preferibile utilizzare la media di Favre, che pesa la media temporale sulla densità:

$$\tilde{v}_x(x_i,) = \frac{\overline{\rho v}}{\rho} = \frac{\frac{1}{\Delta t}\int_{t_1}^{t_2} \rho(x_i,t) v_x(x_i,t) dt}{\frac{1}{\Delta t}\int_{t_1}^{t_2} \rho(x_i,t) dt}$$

Questa formulazione consente di trattare in maniera più naturale le equazioni mediate di energia e di trasporto delle specie, ed è pertanto largamente impiegata nelle simulazioni CFD di combustione.

3.3.3 Ipotesi di Boussinesq e viscosità turbolenta

La maggior parte dei modelli RANS di uso industriale si basa sull'ipotesi di Boussinesq, secondo la quale gli sforzi di Reynolds possono essere messi in relazione con i gradienti di velocità media in modo analogo a quanto accade per gli sforzi viscosi molecolari. In pratica, l'effetto della turbolenza viene rappresentato introducendo una viscosità turbolenta μt, che si somma alla viscosità molecolare. [17]

Questa assunzione implica che il trasporto turbolento di quantità di moto sia proporzionale alla deformazione media del fluido. L'ipotesi di Boussinesq costituisce una semplificazione importante, poiché presuppone una relazione lineare tra sforzi turbolenti e gradiente di velocità e introduce una viscosità turbolenta scalare, assumendo una relazione lineare tra la parte anisotropa degli sforzi di Reynolds e il tensore medio di deformazione. Nonostante ciò, essa si è dimostrata sufficientemente accurata in un grande numero di applicazioni industriali, grazie soprattutto alla sua robustezza e al basso costo computazionale.

La viscosità turbolenta non è una proprietà fisica del fluido, ma una grandezza modellistica che deve essere determinata tramite ulteriori equazioni di trasporto. Proprio da questa esigenza nasce la famiglia dei modelli a una, due o più equazioni.

3.3.4 Modelli a due equazioni: il modello k-ε

Tra i modelli RANS più diffusi vi è il modello a due equazioni k-ε, che introduce due nuove variabili dipendenti: l'energia cinetica turbolenta k e il relativo tasso di dissipazione ε. [17], [18]

L'energia cinetica turbolenta k rappresenta l'intensità media delle fluttuazioni di velocità, mentre ε misura la velocità con cui tale energia viene dissipata a livello delle scale più piccole del moto. Il modello risolve quindi due equazioni di trasporto supplementari: una per k e una per ε.

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

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

La viscosità turbolenta viene poi ricavata mediante una relazione del tipo:

$$\mu_t = \rho C_\mu \sqrt{k} L = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

La popolarità del modello k-ε deriva da diversi fattori: semplicità implementativa, robustezza numerica, costo computazionale moderato e buona capacità di riprodurre i campi medi in numerose applicazioni pratiche. In particolare, esso risulta adeguato quando l'interesse è rivolto alle grandezze medie del flusso, più che alla dinamica dettagliata delle strutture turbolente istantanee.

Tuttavia, il modello presenta anche limiti ben noti. L'assunzione di isotropia della viscosità turbolenta può risultare poco accurata in presenza di forti anisotropie, elevata curvatura delle linee di flusso, swirl intenso, separazione marcata o interazioni particolarmente complesse tra

turbolenza e geometria. Inoltre, le prestazioni del modello possono dipendere sensibilmente dal trattamento delle regioni prossime alla parete.

Nonostante tali limiti, il modello k-ε rimane una scelta molto diffusa nei combustori industriali e nei problemi di combustione mediata, soprattutto quando si desidera mantenere il costo computazionale entro limiti compatibili con analisi iterative e studi di calibrazione. Per tale motivo esso costituisce una scelta coerente anche nel presente lavoro.

3.3.5 Trattamento della regione di parete

La corretta rappresentazione della turbolenza in prossimità delle pareti è un aspetto particolarmente importante, poiché in tali regioni si sviluppano forti gradienti di velocità, temperatura e concentrazione.

La turbulent boundary layer può essere suddivisa, in prima approssimazione, in tre regioni: una sottile sublayer viscosa a diretto contatto con la parete, una regione di transizione detta buffer layer e una log-law region, nella quale prevale il bilancio tra produzione e dissipazione turbolenta. La risoluzione diretta dell'intera regione di parete richiederebbe una mesh molto raffinata e, di conseguenza, un costo computazionale elevato. [17], [18]

Per questo motivo, nelle simulazioni RANS vengono spesso impiegate le wall functions, che permettono di evitare una risoluzione completa della sottoregione viscosa e di collegare la soluzione nel primo punto di griglia ai profili teorici medi di velocità e temperatura. In alternativa, in presenza di mesh più raffinate, è possibile utilizzare formulazioni low-Reynolds o trattamenti all-y+, in grado di adattarsi a differenti livelli di risoluzione vicino alla parete.

Nel caso di un bruciatore, il trattamento corretto della parete è importante non soltanto per il campo di velocità, ma anche per il calcolo dello scambio termico convettivo e radiativo, che a sua volta influenza la temperatura della miscela e la cinetica delle reazioni.

3.3.6 Importanza modello di combustione

In un flusso reagente turbolento, il modello di turbolenza non controlla soltanto il trasporto di quantità di moto, ma interviene anche in modo indiretto e diretto sulla combustione.

In modo indiretto, la turbolenza modifica la distribuzione della velocità, il rimescolamento della miscela, il tempo di residenza locale e il trasporto termico e diffusivo. In modo diretto,

essa entra nei modelli di combustione attraverso grandezze quali k, ε, l'intensità di turbolenza e le scale caratteristiche del moto, che vengono utilizzate per chiudere l'interazione turbolenza-chimica.

In altre parole, un modello di combustione come EDC o TFC non è mai veramente indipendente dal modello di turbolenza: la qualità della previsione del rilascio termico, del campo di temperatura e delle emissioni dipende anche dalla qualità con cui vengono rappresentate le scale turbolente del moto. Per questo motivo la modellazione della turbolenza e quella della combustione devono essere considerate come due parti strettamente accoppiate di un unico problema.

3.4 Combustione turbolenta

Una combustione reale coinvolge fenomeni caratterizzati da scale spaziali e temporali molto differenti. Alla cinetica delle reazioni chimiche si sovrappongono infatti convezione, diffusione molecolare e turbolenta, scambio termico e moto delle strutture vorticose. [16], [17]

La combustione richiede che combustibile e ossidante raggiungano un sufficiente grado di miscelazione a scala molecolare. In un campo turbolento, l'interazione tra vortici di dimensioni differenti aumenta i gradienti locali di concentrazione e favorisce la diffusione tra reagenti. Le reazioni chimiche, a loro volta, modificano temperatura, densità e composizione, influenzando quindi il campo fluidodinamico che le ha generate. Turbolenza e chimica costituiscono pertanto due fenomeni fortemente accoppiati.

Nel caso di una miscela premiscelata, il processo può essere rappresentato come la propagazione di una zona di reazione attraverso la miscela fresca. In condizioni laminari, una delle proprietà fondamentali del sistema è la velocità laminare di fiamma S_L, definita come la velocità con cui la miscela incombusta entra nel fronte di reazione in un sistema di riferimento solidale con la fiamma. Essa dipende dalle proprietà termo-chimiche della miscela, dalla sua composizione, dalla pressione e dalla temperatura.

In condizioni turbolente viene invece definita una velocità di fiamma S_T. A differenza di S_L, essa non è una proprietà esclusivamente chimico-fisica del combustibile ma dipende anche dalle caratteristiche del campo di moto, e in particolare dall'intensità e dalle scale della turbolenza.

La turbolenza può modificare la combustione principalmente attraverso due meccanismi. A scala macroscopica provoca la corrugazione e l'allungamento del fronte di fiamma, incrementando la superficie attraverso la quale vengono consumati i reagenti; a scale più piccole può invece penetrare all'interno della struttura della fiamma e modificarne direttamente lo spessore e i fenomeni di trasporto.

Questa distinzione costituisce la base della classificazione dei differenti regimi di combustione turbolenta.

3.5 Scale caratteristiche della combustione: numeri di Damköhler e Karlovitz

L'interazione tra turbolenza e chimica può essere analizzata confrontando le rispettive scale temporali.

Il numero di Damköhler è definito come il rapporto tra una scala temporale caratteristica della turbolenza e quella della chimica: [16]

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{L_T/u'}{\delta_L/S_L} = \frac{L_T S_L}{u' \delta_L}$$

Per Da≫1, il tempo caratteristico delle reazioni è molto inferiore a quello delle grandi strutture turbolente: la chimica risulta quindi molto rapida rispetto alla turbolenza. Per Da≪1, al contrario, i moti turbolenti evolvono più rapidamente delle reazioni e la velocità globale del processo tende a essere maggiormente controllata dalla cinetica chimica.

Un secondo parametro è rappresentato dal numero di Karlovitz, che confronta la scala temporale chimica con quella associata alle più piccole strutture turbolente:

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\delta_L/S_L}{(\nu/\varepsilon)^{1/2}}, \qquad \tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2}$$

dove τ_η indica la scala temporale di Kolmogorov, pari a (ν/ε)^(1/2), con ν viscosità cinematica ed ε dissipazione dell'energia cinetica turbolenta. Damköhler e Karlovitz permettono

quindi di valutare sia il rapporto tra chimica e grandi strutture turbolente, sia l'interazione delle scale dissipative con la struttura interna della fiamma.

3.5.1 Diagramma di Borghi-Peters e regime flamelet

Il comportamento di una fiamma premiscelata turbolenta dipende dal rapporto tra le scale caratteristiche della turbolenza e quelle proprie della combustione. I numeri di Damköhler e Karlovitz introdotti precedentemente permettono di quantificare tale interazione e costituiscono la base del diagramma di Borghi-Peters, uno degli strumenti più utilizzati per classificare i regimi di combustione premiscelata turbolenta. [16]

Il diagramma può essere rappresentato utilizzando come coordinate due rapporti adimensionali: il rapporto tra l'intensità delle fluttuazioni turbolente e la velocità laminare di fiamma, u′/S_L, e il rapporto tra la scala integrale della turbolenza e lo spessore della fiamma laminare, L_T/δ_L. Tali rapporti mettono rispettivamente a confronto le scale di velocità e di lunghezza caratteristiche del moto turbolento con quelle del processo di combustione. Attraverso di essi è possibile ricondurre il problema al confronto tra i tempi caratteristici della chimica, delle grandi strutture turbolente e delle strutture dissipative di Kolmogorov.

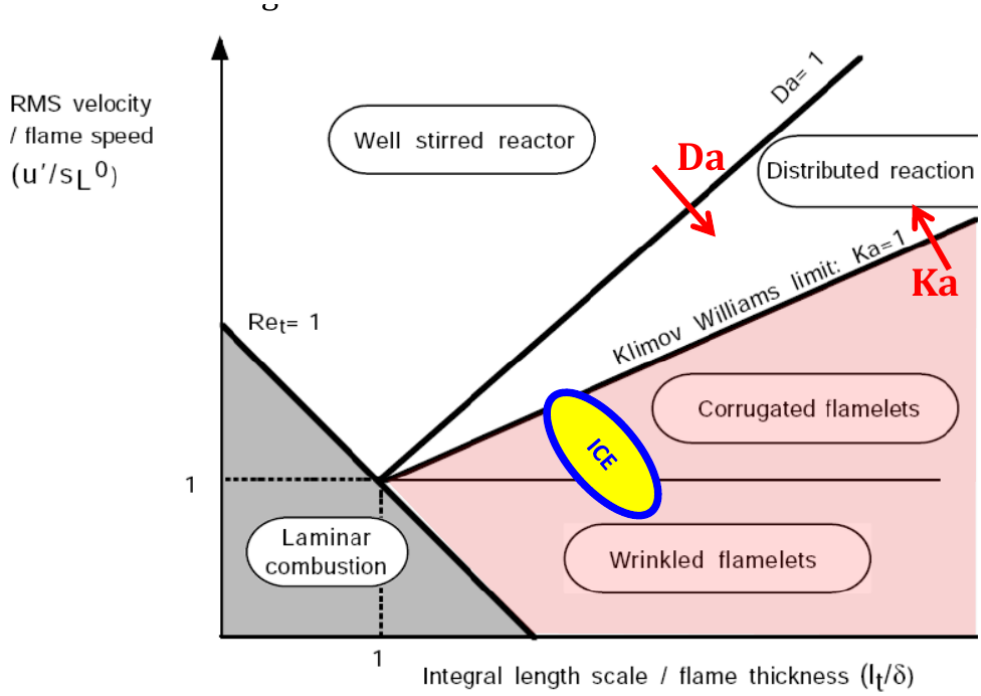


Diagramma di Borghi-Peters e principali regimi di combustione premiscelata turbolenta.

Regime flamelet

Il flamelet regime si verifica quando il tempo caratteristico delle reazioni chimiche è inferiore alle scale temporali caratteristiche della turbolenza. In particolare, il regime viene individuato dalla condizione Da>1 e Ka<1. La prima condizione indica che il tempo chimico è inferiore alla scala temporale associata alle strutture turbolente integrali. La seconda indica che le reazioni risultano rapide anche rispetto alle più piccole strutture turbolente, caratterizzate dalla scala di Kolmogorov. In tali condizioni i vortici non riescono a penetrare all'interno della zona di reazione e a modificarne in maniera sostanziale la struttura interna. [16]

La fiamma può quindi essere interpretata localmente come una successione di piccole fiamme laminari, o flamelets, immerse nel campo turbolento. Ciascun elemento del fronte conserva una struttura interna assimilabile a quella di una fiamma laminare, mentre il campo turbolento ne modifica principalmente la geometria.

Questa è una distinzione fondamentale. La turbolenza non aumenta la velocità di combustione principalmente rendendo più veloci le reazioni chimiche locali, ma corrugando, deformando e stirando la superficie della fiamma. A parità di velocità laminare, una superficie di reazione più estesa permette infatti di consumare una maggiore quantità di miscela nell'unità di tempo.

È proprio su questa interpretazione che si basano numerosi modelli di combustione premiscelata. Le informazioni ottenute dallo studio della fiamma laminare - in particolare la laminar flame speed S_L e lo spessore caratteristico δ_L - possono essere conservate, mentre l'effetto del moto turbolento viene introdotto attraverso un modello che descrive l'aumento della superficie di fiamma o della velocità apparente di propagazione.

Wrinkled e corrugated flamelets

All'interno della regione flamelet è possibile distinguere differenti livelli di interazione con la turbolenza. Per livelli relativamente bassi di intensità turbolenta, il fronte viene soltanto debolmente deformato: si parla generalmente di wrinkled flamelets. All'aumentare di u′/S_L, il fronte viene invece corrugato in maniera sempre più intensa dalle strutture turbolente e si entra nella regione dei corrugated flamelets. [16]

In entrambi i casi la caratteristica fondamentale rimane invariata: le strutture turbolente possono modificare la posizione e la geometria del fronte, ma non penetrano significativamente nella zona di reazione interna. La combustione continua quindi ad avere una struttura localmente laminare.

L'aumento di superficie può essere interpretato mettendo in relazione la velocità laminare S_L con la velocità turbolenta S_T: quest'ultima rappresenta l'effetto macroscopico della maggiore superficie disponibile alla reazione. Tale concetto costituisce uno dei fondamenti dei modelli basati sulla propagazione del fronte, incluso il Turbulent Flame Closure.

Transizione verso le thin reaction zones

Aumentando ulteriormente l'intensità della turbolenza si raggiunge una condizione nella quale le più piccole strutture turbolente diventano sufficientemente rapide e piccole da interagire con la struttura della fiamma. La transizione è comunemente associata al raggiungimento di valori di Karlovitz dell'ordine dell'unità. [16]

Per Ka>1 i piccoli vortici possono modificare la regione di preriscaldamento della fiamma: si entra nel regime delle thin reaction zones. Il trasporto di calore e specie nella zona di preriscaldamento viene alterato, mentre la zona di reazione può conservare una struttura sottile.

È tuttavia importante osservare che il superamento di Ka=1 non implica necessariamente la completa distruzione della zona di reazione. Nelle thin reaction zones la regione di preriscaldamento viene modificata dalla turbolenza, mentre la parte più intensamente reattiva può ancora conservare una struttura relativamente sottile.

Questo aspetto è particolarmente interessante per la combustione del syngas. Misure sperimentali effettuate su fiamme premiscelate di syngas in condizioni rilevanti per turbine a gas sono state condotte prevalentemente proprio nel regime delle thin reaction zones. È stato inoltre osservato che, almeno per quanto riguarda la velocità turbolenta di fiamma, non emerge una separazione sperimentale netta tra il comportamento delle corrugated flamelets e quello delle thin reaction zones. [7]

A intensità turbolente ancora superiori e per Da<1, le scale caratteristiche del moto diventano più rapide della chimica. La struttura del fronte viene progressivamente persa e si raggiunge il

distributed reaction regime, nel quale il mixing è estremamente rapido e il processo globale viene prevalentemente controllato dalla cinetica chimica. [16]

Il diagramma di Borghi-Peters consente pertanto di visualizzare una transizione progressiva tra wrinkled flamelets, corrugated flamelets, thin reaction zones e distributed reaction regime. Più che identificare categorie completamente separate, tale rappresentazione permette di comprendere quanto profondamente la turbolenza sia in grado di interagire con la struttura della fiamma.

Collocazione del caso oggetto di studio

La collocazione del sistema nel diagramma di Borghi–Peters è stata valutata utilizzando, per quanto possibile, grandezze ricavate direttamente dalle simulazioni e dal software ausiliare DARS. Come riferimento preliminare si assume una scala integrale della turbolenza dell'ordine di 8 mm e uno spessore di fiamma dell'ordine di 2 mm, da cui risulta $L_T/\delta_L \approx 4$. Per la velocità laminare di fiamma si considera invece un valore rappresentativo dell'insieme dei cinque casi operativi che verranno presentati nei capitoli successivi ottenendo un valore di riferimento medio di circa 0,203 m/s.

L'intensità turbolenta viene stimata a partire dalla turbulent kinetic energy nella regione interessata dalla fiamma. Dalla distribuzione di k si osservano valori dell'ordine dell'unità di J/kg; assumendo come valore rappresentativo $k \approx 1$ J/kg e adottando la relazione isotropa $u' = \sqrt{(2k/3)}$, si ottiene $u' \approx 0{,}816$ m/s. Ne consegue $u'/S_L \approx 4{,}02$. Combinando tale valore con $L_T/\delta_L \approx 4$, il numero di Damköhler può essere stimato come $Da = (L_T/\delta_L)(S_L/u') \approx 0{,}995$, ovvero dell'ordine dell'unità.

La stima ottenuta colloca quindi il sistema in prossimità della transizione tra regimi di combustione premiscelata e risulta compatibile, in prima approssimazione, con l'impiego di una formulazione di tipo flamelet, quale il Turbulent Flame Speed Closure adottato nel presente lavoro. Tale collocazione deve tuttavia essere interpretata come indicativa: la LFS varia sensibilmente tra i diversi casi operativi e la TKE non è uniforme lungo il fronte di fiamma. Una caratterizzazione più rigorosa richiederebbe pertanto l'analisi locale di k e della dissipazione turbolenta, nonché la valutazione del numero di Karlovitz. Alla luce dei valori disponibili, l'ipotesi flamelet può essere considerata fisicamente plausibile, ma non dimostrata in modo univoco sull'intero dominio.

3.6 Equazioni di trasporto delle specie

L'introduzione della combustione richiede di estendere il sistema fluidodinamico con un'equazione di trasporto per ciascuna specie chimica considerata. [18]

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i + \dot{\omega}_i$$

dove Yi rappresenta la frazione massica della specie i, Ji il relativo flusso diffusivo e ωi il termine sorgente dovuto alle reazioni chimiche.

La determinazione di quest'ultimo termine rappresenta uno degli aspetti fondamentali della modellazione della combustione: esso stabilisce infatti la velocità con cui ciascuna specie viene prodotta o consumata all'interno del dominio.

Le differenti famiglie di modelli di combustione si distinguono principalmente per le ipotesi utilizzate per determinare tale termine e per il modo nel quale viene rappresentata l'interazione tra cinetica chimica e turbolenza.

3.7 Principali famiglie di modelli di combustione

La combustione turbolenta costituisce uno dei problemi più complessi della fluidodinamica applicata, poiché coinvolge fenomeni di trasporto, mixing e reazione chimica che interagiscono su scale molto differenti. Non esiste pertanto un modello universalmente valido per ogni configurazione: la scelta della formulazione più appropriata dipende dal regime di combustione, dal grado di premiscelazione, dalle grandezze che si desidera predire e dal livello di dettaglio chimico richiesto.

Nel caso di interesse del presente lavoro, dedicato a un bruciatore alimentato a syngas e focalizzato sulla previsione di temperatura ed emissioni, i modelli di combustione assumono un ruolo centrale e meritano quindi una trattazione più approfondita.

3.7.1 Classificazione generale dei modelli di combustione

I modelli di combustione adottati in CFD possono essere classificati, in prima approssimazione, secondo il fenomeno fisico che si assume controlli la velocità del processo. Si distinguono modelli controllati dalla cinetica, nei quali il tasso di reazione dipende principalmente dalla chimica; modelli controllati dal mixing turbolento, nei quali la velocità di combustione è limitata dal rimescolamento dei reagenti; modelli ibridi, che combinano effetti di cinetica e mixing; e modelli flamelet o front-tracking, nei quali la fiamma viene trattata come una superficie o una zona sottile che si propaga nella miscela fresca. [16]

Questa classificazione non è puramente formale: riflette infatti diverse ipotesi fisiche sul processo di combustione e diverse scelte modellistiche per il termine sorgente delle specie e dell'energia.

3.7.2 Modelli a cinetica finita

Nei modelli a cinetica finita la velocità di reazione viene determinata direttamente mediante leggi cinetiche, tipicamente di tipo Arrhenius, ricavate da meccanismi globali o dettagliati. In questo approccio il termine sorgente di ciascuna specie è funzione della temperatura, della pressione e delle concentrazioni locali dei reagenti e degli intermedi. [9]

$$r = A\,T^{\beta}\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)\prod_j C_j^{\alpha_j}$$

Il vantaggio principale di questo approccio è il forte legame con la fisica e la chimica del processo: il modello è in grado, almeno in linea di principio, di rappresentare gli effetti della composizione del combustibile, delle reazioni intermedie e della formazione degli inquinanti. Questo aspetto risulta particolarmente importante quando l'obiettivo della simulazione comprende la previsione di specie minoritarie, come NOx, CO e radicali.

Il limite principale è che la sola cinetica non basta, nella maggior parte dei casi, a descrivere correttamente la combustione turbolenta in una simulazione RANS. Le fluttuazioni turbolente, infatti, non vengono risolte esplicitamente e pertanto il tasso di reazione non può essere ottenuto semplicemente applicando la cinetica alle grandezze medie. Occorre introdurre un modello capace di rappresentare l'interazione tra turbolenza e chimica.

3.7.3 Modelli controllati dal mixing: Eddy Break-Up ed Eddy Dissipation

Nei modelli della famiglia Eddy Break-Up (EBU) o Eddy Dissipation Model (EDM) si assume che, in un flusso turbolento, la velocità globale di combustione sia governata principalmente dal tempo caratteristico di mixing. Le reazioni chimiche sono considerate sufficientemente rapide, per cui il processo complessivo viene controllato dalla velocità con cui la turbolenza mette in contatto i reagenti a scala molecolare. [14]

In tali modelli il tasso di consumo del combustibile è espresso in funzione di quantità turbolente come k ed ε, che forniscono una stima della scala temporale del mixing.

$$\dot{\omega}_F = -\rho A \frac{\varepsilon}{k} \min\left(Y_F, \frac{Y_O}{s}\right), \qquad s = \frac{\nu_O M_O}{\nu_F M_F}$$

Il punto di forza di questi modelli è la semplicità e la robustezza. Essi sono spesso in grado di riprodurre ragionevolmente bene il rilascio termico globale in problemi nei quali la chimica è molto rapida rispetto al mixing. Tuttavia, proprio perché attribuiscono un ruolo dominante al mixing, essi risultano poco adatti quando la composizione del combustibile, la presenza di diluenti, le reazioni lente o la formazione di inquinanti esercitano un'influenza significativa sul comportamento della fiamma.

Nel caso del syngas, caratterizzato da elevata variabilità composizionale e dalla possibile presenza di specie che influenzano NOx e CO, un approccio esclusivamente controllato dal mixing rischia quindi di risultare troppo semplificato.

3.7.4 Modelli ibridi

Per superare i limiti dei due approcci estremi - pura cinetica e puro mixing - sono stati sviluppati numerosi modelli ibridi, nei quali il tasso di reazione viene determinato combinando un contributo cinetico e uno turbolento.

Una formulazione concettualmente semplice consiste nell'assumere che il processo globale sia controllato dal meccanismo più lento:

$$|\dot{\omega}_F| = \min(|\dot{\omega}_{F,\mathrm{kin}}|, |\dot{\omega}_{F,\mathrm{mix}}|)$$

Questa impostazione risulta utile perché riflette un principio fisico intuitivo: se le reazioni sono molto rapide ma il mixing è lento, sarà il mixing a controllare la combustione; viceversa, se il mixing è efficace ma la chimica è lenta, sarà la cinetica a costituire il collo di bottiglia del processo.

Molti modelli moderni possono essere ricondotti, in senso lato, a questa filosofia, pur con formulazioni più articolate. L'EDC, ad esempio, appartiene a questa categoria concettuale, pur avendo una struttura molto più avanzata. [15]

3.7.5 Modelli flamelet

I modelli flamelet costituiscono una delle più importanti famiglie di modelli per la combustione turbolenta e derivano direttamente dall'interpretazione fisica descritta mediante il diagramma di Borghi-Peters. [16]

L'ipotesi fondamentale è che, quando il tempo caratteristico delle reazioni è sufficientemente inferiore a quello della turbolenza, la struttura interna della fiamma possa essere considerata localmente assimilabile a quella di una fiamma laminare. Il campo turbolento modifica quindi principalmente la geometria della zona di reazione, corrugandola e aumentando la superficie disponibile alla combustione.

La fiamma turbolenta viene di conseguenza interpretata come un insieme di laminar flamelets, ciascuna caratterizzata localmente dalle proprietà termo-chimiche della miscela fresca. La descrizione dettagliata delle scale più piccole del fronte non viene effettuata direttamente sulla mesh CFD; il loro effetto viene invece introdotto mediante opportune grandezze modellistiche.

Una delle quantità utilizzabili è la Flame Surface Density, Σ, definita come superficie di fiamma per unità di volume. Il tasso medio di consumo del combustibile può quindi essere collegato alla quantità di superficie di reazione presente nel volume, alla densità della miscela fresca e alla velocità laminare di fiamma.

$$-\dot{\omega}_F = \rho_u Y_{F,u} S_L \Sigma$$

Nei modelli flamelet la chiusura del problema richiede la modellazione della superficie di fiamma e della sua evoluzione. La turbolenza genera nuova superficie attraverso stretching e wrinkling, mentre curvatura e quenching ne determinano la distruzione.

Questa impostazione presenta un vantaggio fondamentale: permette di separare concettualmente il problema della chimica locale da quello della propagazione turbolenta globale. Le proprietà della fiamma laminare possono essere ottenute sperimentalmente, tramite correlazioni o mediante calcoli chimico-cinetici monodimensionali; il modello CFD deve quindi determinare come la turbolenza modifica la superficie e la velocità globale di propagazione.

Tale approccio è particolarmente interessante nel caso del syngas, per il quale la velocità laminare di fiamma può variare fortemente con la composizione del combustibile. La quantità di H_2, in particolare, influenza significativamente sia la propagazione laminare sia quella turbolenta. Per questo motivo un modello flamelet può preservare una dipendenza fisicamente significativa tra composizione del combustibile e comportamento della fiamma. [7], [16]

È proprio da questa famiglia concettuale che derivano modelli quali CFM, ECFM, ECFM-3Z e, pur utilizzando una formulazione differente, approcci basati sulla propagazione del fronte come il TFC.

3.7.6 Extended Coherent Flame Model e ECFM-3Z

L'Extended Coherent Flame Model (ECFM) appartiene alla famiglia dei modelli flamelet ed è stato sviluppato principalmente per descrivere la combustione premiscelata turbolenta nei motori ad accensione comandata. Come negli altri modelli della famiglia CFM, la fiamma viene rappresentata come una superficie che separa i gas freschi da quelli combusti, mentre la turbolenza ne modifica l'estensione attraverso fenomeni di corrugamento e stiramento.

La versione ECFM-3Z, Extended Coherent Flame Model - Three Zones, estende ulteriormente tale impostazione allo scopo di rappresentare condizioni nelle quali combustibile e ossidante non risultano perfettamente premiscelati. Il modello mantiene l'impostazione flamelet, ma introduce una rappresentazione più sofisticata del processo di mixing.

La caratteristica distintiva dell'ECFM-3Z è la suddivisione concettuale di ciascuna cella computazionale in tre zone di miscelazione: una contenente combustibile non miscelato, una contenente aria ed eventuali gas residui e una contenente la miscela di combustibile e ossidante.

Questa suddivisione permette al modello di distinguere il processo di mixing dalla successiva combustione della frazione premiscelata, ampliando il campo di applicabilità rispetto all'ECFM originario. Per tale ragione ECFM-3Z può essere applicato non soltanto a combustioni premiscelate, ma anche a configurazioni parzialmente premiscelate e con contributi diffusivi.

Dal punto di vista fisico, il modello mantiene comunque il concetto fondamentale della famiglia flamelet: una volta formata la miscela reagente, la combustione viene descritta attraverso la propagazione di una superficie di fiamma caratterizzata da proprietà locali riconducibili a quelle della fiamma laminare. [16]

Nel presente lavoro l'ECFM-3Z è utile soprattutto come riferimento teorico intermedio: mostra come l'ipotesi flamelet possa essere estesa oltre il caso ideale di miscela perfettamente omogenea e costituisce un collegamento concettuale tra i modelli basati sulla Flame Surface Density e quelli basati direttamente sulla velocità di propagazione del fronte, come il TFC.

3.8 Complex Chemistry

Quando la simulazione deve descrivere non soltanto il rilascio termico complessivo, ma anche l'evoluzione dettagliata delle specie chimiche, è necessario introdurre una rappresentazione più completa della cinetica.

Nel software STAR-CCM+, il modello Complex Chemistry (CC) consente di risolvere un meccanismo cinetico costituito da specie multiple e reazioni elementari o globali. In pratica, per ciascuna specie viene risolta un'equazione di trasporto, mentre il termine sorgente chimico viene determinato integrando il sistema di reazioni previste dal meccanismo selezionato.

Questo approccio risulta particolarmente importante nello studio della combustione del syngas. La presenza combinata di H_2, CO, CH_4, CO_2, N_2, H_2O e, potenzialmente, specie azotate come NH_3 rende infatti insufficiente una descrizione chimica troppo semplificata, soprattutto se tra gli obiettivi della simulazione rientra la stima delle emissioni.

Il vantaggio principale del modello CC è quindi la possibilità di rappresentare in modo molto più realistico i percorsi di formazione e distruzione di specie intermedie e inquinanti. Il suo principale svantaggio è invece il maggior costo computazionale, dovuto al numero elevato di equazioni di trasporto e alla necessità di risolvere sistemi cinetici rigidi.

Nel presente studio l'impiego di GRI-Mech 2.11 consente di rappresentare con maggiore dettaglio la chimica del sistema, mantenendo espliciti i percorsi di formazione e distruzione delle principali specie di interesse, tra cui CO e composti azotati. [13]

3.9 Eddy Dissipation Concept

L'Eddy Dissipation Concept (EDC) è uno dei modelli più importanti per la simulazione di combustione turbolenta con cinetica dettagliata, poiché fornisce un collegamento tra le scale turbolente del moto e le reazioni chimiche. [15]

Il presupposto fisico del modello è che le reazioni avvengano prevalentemente nelle fine structures, cioè nelle strutture turbolente di scala molto piccola, dove il mixing molecolare tra reagenti ha raggiunto un livello sufficiente da permettere l'innesco e lo sviluppo della reazione. Il resto del fluido funge invece da zona di scambio con tali strutture reattive.

Dal punto di vista concettuale, l'EDC non sostituisce la cinetica chimica con una legge puramente turbolenta, ma la fa agire in una porzione di volume e su una scala temporale determinate a partire dalle grandezze turbolente locali. Proprio qui risiede il pregio principale del modello: esso permette di accoppiare detailed chemistry e turbulence-chemistry interaction in modo relativamente robusto.

Nel modello, due grandezze fondamentali sono la frazione caratteristica delle fine structures e il loro tempo caratteristico. Nelle formulazioni EDC classiche tali grandezze dipendono da k, ε e viscosità cinematica ν, oltre che dai coefficienti del modello. La relazione riportata per γ_λ rappresenta una scala caratteristica delle fine structures; la sua conversione in frazione reattiva dipende dalla specifica formulazione EDC.

$$\gamma_\lambda = C_\gamma \left(\frac{\nu\varepsilon}{k^2}\right)^{1/4}$$

$$\tau_\lambda = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2}$$

La combustione viene quindi descritta calcolando la cinetica chimica all'interno delle fine structures, mentre il termine sorgente medio delle specie deriva dallo scambio tra queste strutture e il resto del fluido. Questo fa sì che l'EDC sia particolarmente adatto ai casi in cui si vogliono mantenere meccanismi cinetici dettagliati, il mixing turbolento gioca un ruolo importante e l'interesse è rivolto anche a inquinanti e specie intermedie.

Tuttavia, il modello non è esente da limiti. La qualità della previsione dipende fortemente dalla correttezza con cui il modello di turbolenza descrive le scale locali del moto, e può essere sensibile alla scelta dei coefficienti empirici. Inoltre, in fiamme chiaramente premiscelate e fortemente governate dalla propagazione del fronte, l'EDC può non essere sempre la rappresentazione più naturale del fenomeno.

Nel presente lavoro l'EDC viene mantenuto come riferimento teorico per il confronto con approcci basati sulla propagazione del fronte; la configurazione finale del bruciatore utilizza invece il Turbulent Flame Closure, ritenuto più coerente con la natura premiscelata del problema e con il ruolo centrale assunto dalla Laminar Flame Speed. [15], [16]

3.10 Modelli basati sulla propagazione della fiamma: Turbulent Flame Closure

Per fiamme premiscelate sviluppate in regimi coerenti con l'ipotesi flamelet, una strategia differente consiste nel descrivere la combustione non come il risultato del mixing in microstrutture reattive, ma come la propagazione di un fronte di fiamma turbolento. [16]

Il modello Turbulent Flame Closure (TFC) appartiene a questa famiglia. Il suo cuore è la variabile di progresso c, grandezza scalare che identifica lo stato locale della miscela: c assume valore nullo per miscela completamente fresca e unitario per miscela completamente combusta. [16], [21]

La variabile di progresso evolve nel dominio secondo un'equazione di trasporto di tipo convettivo-diffusivo-reattivo.

$$\frac{\partial(\rho\tilde{c})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \nabla \cdot (\rho D_T \nabla\tilde{c}) + \overline{\dot{\omega}_c}$$

Nella formulazione TFC classica, la propagazione della fiamma è descritta mediante un'equazione per una variabile di progresso il cui termine sorgente è collegato alla turbulent flame speed.

$$\overline{\dot{\omega}_c} = \rho_u S_T |\nabla \tilde{c}|$$

dove ρ_u è la densità della miscela incombusta, S_T la velocità turbolenta di fiamma e il gradiente della variabile di progresso fornisce una misura della superficie locale del fronte.

Nel presente lavoro il TFC è tuttavia impiegato in combinazione con Complex Chemistry: il meccanismo cinetico dettagliato rimane pertanto attivo per il calcolo dell'evoluzione delle specie, mentre il TFC fornisce la chiusura dell'interazione turbolenza-combustione necessaria a riprodurre correttamente la propagazione della fiamma premiscelata.

Il modello si basa dunque sull'idea che la combustione turbolenta possa essere interpretata come una fiamma laminare deformata dalla turbolenza. La grandezza decisiva diventa pertanto la velocità turbolenta di fiamma S_T, che deve essere espressa in funzione della velocità laminare di fiamma S_L, dell'intensità di turbolenza, della scala di lunghezza turbolenta e delle proprietà termodiffusive della miscela. [16], [21]

Poiché S_L dipende fortemente dalla composizione del combustibile, la formulazione TFC risulta particolarmente sensibile ai cambiamenti nel contenuto di H_2, CO, CH_4 e diluenti. Questo è un aspetto molto rilevante nel caso del syngas, la cui composizione può variare sensibilmente da una condizione all'altra.

Tra le formulazioni più note vi è quella di Zimont, nella quale la velocità turbolenta di fiamma viene espressa in funzione delle scale caratteristiche del moto e delle proprietà della fiamma laminare.

$$S_T = A(u')^{3/4} S_L^{1/2} \alpha_u^{-1/4} l_t^{1/4}$$

Il TFC presenta diversi vantaggi: è fisicamente coerente con una combustione premiscelata flamelet, collega direttamente il modello alla velocità laminare di fiamma e permette di descrivere in modo naturale la propagazione del fronte. D'altro canto, la sua accuratezza dipende

fortemente dalla qualità della correlazione adottata per S_T, dalla correttezza della stima di S_L e dalla coerenza tra il regime di combustione reale e l'ipotesi flamelet implicita nel modello.

3.11 Inquadramento concettuale di EDC e TFC

EDC e TFC rappresentano due differenti filosofie di descrizione della combustione turbolenta e il loro inquadramento concettuale è utile per motivare la scelta del modello più coerente con il caso di studio. [15], [16]

L'EDC descrive la combustione a partire dalla chimica delle specie, considerando che le reazioni avvengano in microstrutture turbolente nelle quali il mixing molecolare è sufficientemente intenso. Esso è quindi particolarmente indicato quando si vuole utilizzare chimica dettagliata, si desidera prevedere con maggiore accuratezza la composizione dei prodotti e le emissioni costituiscono una delle grandezze di interesse principali.

Il TFC, al contrario, descrive la combustione come propagazione di una fiamma premiscelata. Il processo non viene interpretato come reazione localizzata in fine structures, ma come avanzamento di un fronte governato dalla velocità turbolenta di fiamma. Questo modello è quindi più naturale quando la combustione è prevalentemente premiscelata, il regime di combustione è coerente con l'ipotesi flamelet e la struttura globale della fiamma è meglio descrivibile come superficie propagante.

In termini sintetici, l'EDC può essere interpretato come un approccio maggiormente orientato alla chimica e al mixing alle piccole scale, mentre il TFC è maggiormente orientato alla propagazione del fronte. Dal punto di vista applicativo, nessuno dei due modelli può essere definito universalmente migliore: la loro appropriatezza dipende dal caso specifico.

Nel caso del bruciatore a syngas oggetto del presente lavoro, la natura premiscelata del sistema, la forte dipendenza della velocità di fiamma dalla composizione e la collocazione del regime vicino alla zona flamelet/thin reaction zones rendono particolarmente naturale una formulazione basata sulla propagazione del fronte. L'EDC rimane un utile riferimento teorico per comprendere un approccio maggiormente orientato all'interazione tra mixing alle piccole scale e chimica dettagliata. [16], [21]

3.12 Trasferimento termico radiativo

Sebbene il presente capitolo sia principalmente dedicato alla modellazione della combustione, un'ulteriore componente rilevante nella previsione del campo termico di un bruciatore è rappresentata dallo scambio termico radiativo.

Nei gas combusti specie quali CO_2 e H_2O partecipano all'assorbimento e all'emissione della radiazione. Trascurare tale contributo può quindi determinare una sovrastima delle temperature e modificare indirettamente anche la cinetica chimica e le emissioni previste. [19], [20]

Nella modellazione CFD di gas combusti partecipanti, una possibile formulazione consiste nell'accoppiare il Discrete Ordinates Method a modelli spettrali o semi-empirici per il coefficiente di assorbimento. Tra le opzioni disponibili rientrano il Gray Thermal Radiation con Weighted Sum of Gray Gases Method (WSGGM) e formulazioni più articolate, come il K-Distribution, capaci di descrivere in modo più dettagliato la dipendenza spettrale dell'assorbimento. [19]

L'inclusione della radiazione è quindi necessaria quando si vuole ricostruire in modo coerente il bilancio energetico del bruciatore e l'interazione termica tra gas caldi, pareti e ambiente esterno. Il trasferimento radiativo costituisce quindi un ulteriore elemento dell'accoppiamento tra fluidodinamica, chimica e scambio termico che deve essere considerato nella costruzione di un modello CFD capace di riprodurre quantitativamente il comportamento del sistema sperimentale.

Capitolo 4 - Set-up numerico

4.1 Metodologia generale

L'attività numerica è articolata in due fasi complementari: una simulazione tridimensionale e non reagente della sezione di miscelazione aria-syngas e una simulazione bidimensionale assialsimmetrica del bruciatore, nella quale viene risolto il processo di combustione. La separazione dei due problemi consente di verificare la premiscelazione con il modello tridimensionale e, sulla base di tale verifica, di trattare la combustione come totalmente premiscelata nel successivo modello assialsimmetrico, nel quale viene adottato il Turbulent Flame Closure (TFC).

Il modello tridimensionale lavora quindi prima dell'ingresso nel bruciatore. Si può di conseguenza assumere una sufficiente omogeneità della miscela, il che costituisce il presupposto fisico per l'adozione di un unico inlet premiscelato e di una formulazione assialsimmetrica.

Con l'ausilio di un modello Excel, i dati sperimentali vengono trattati e per ciascun caso operativo le condizioni di ingresso vengono quindi ridefinite, come per esempio, la velocità all'inlet che viene imposta come valore uniforme calcolato a partire dalla portata massica complessiva della miscela, dalla densità alle condizioni di ingresso e dalla sezione di passaggio. Il modello tridimensionale svolge quindi la funzione di verifica del mixing, mentre la caratterizzazione quantitativa dell'inlet del dominio 2D viene definita caso per caso.

Il modello numerico del bruciatore è costruito come sistema multi-dominio comprendente il fluido reagente, quattro corpi solidi costituenti le pareti del bruciatore, un dominio fluido esterno e undici corpi solidi rappresentativi delle termocoppie. La combustione viene descritta mediante Complex Chemistry e Turbulent Flame Speed Closure, mentre il trasferimento termico include conduzione nei solidi, convezione nell'ambiente esterno e scambio radiativo. Questa architettura permette di confrontare il calcolo non soltanto con le specie allo scarico, ma anche con le temperature misurate internamente e sulla superficie esterna del bruciatore.

L'obiettivo non consiste quindi soltanto nel rincorrere le concentrazioni delle specie allo scarico sperimentali, ma nel costruire una rappresentazione più completa del sistema, capace di descrivere in modo coerente combustione, trasporto termico, conduzione nelle pareti, scambio

con l'ambiente e risposta termica degli elementi di misura. La definizione delle specifiche boundary conditions, dei monitor e delle grandezze di post-processing viene completata per ciascun caso operativo in funzione dei dati sperimentali disponibili.

4.2 Modello tridimensionale di mixing

Il modello tridimensionale utilizzato per descrivere la miscelazione tra aria e syngas nella sezione dell'impianto posta a monte del bruciatore *non costituisce un'attività di sviluppo originale del presente lavoro di tesi*. Tale modello è stato sviluppato nell'ambito del precedente lavoro di tesi di Gabriele Trupia [6] e viene qui ripreso senza modifiche nella sua configurazione geometrica, numerica e fisica. Nel presente studio esso viene utilizzato come elemento preliminare della metodologia, principalmente allo scopo di documentare il grado di omogeneizzazione raggiunto dalla miscela prima dell'ingresso nel dominio reagente.

Per tale motivo il modello verrà *semplicemente descritto* nelle sue caratteristiche.

Nel lavoro originario il modello tridimensionale era stato introdotto come prima fase di una metodologia articolata in un modello 3D dedicato al mixing e in un successivo modello assialsimmetrico destinato alla combustione. La simulazione tridimensionale aveva inoltre la funzione di ricavare i profili di velocità, temperatura, Turbulent Kinetic Energy (TKE) e Turbulent Dissipation Rate (TDR) da trasferire all'ingresso del successivo dominio bidimensionale [6]. Nel presente lavoro viene mantenuta la verifica dell'omogeneità della miscela fornita dal modello 3D, mentre la definizione quantitativa della Velocity Inlet del modello reagente viene effettuata separatamente per ciascun caso operativo sulla base delle portate e delle proprietà della miscela ricostruite dai dati sperimentali.

4.2.1 Geometria e funzione del dominio

La geometria sviluppata riproduce la porzione dell'apparato nella quale le correnti di syngas e aria comburente, introdotte attraverso condotti distinti, vengono progressivamente miscelate prima dell'ingresso nel bruciatore. Il dominio comprende il condotto principale, gli inlet dedicati alle due correnti, i raccordi e le variazioni di sezione che precedono il bruciatore, nonché la zona di alloggiamento della rete metallica. Quest'ultima viene rappresentata esplicitamente nel modello geometrico mediante un'operazione di sottrazione tra il corpo della rete e il dominio

fluido, in modo da mantenere nel dominio le effettive sezioni di passaggio attraverso le maglie [6].

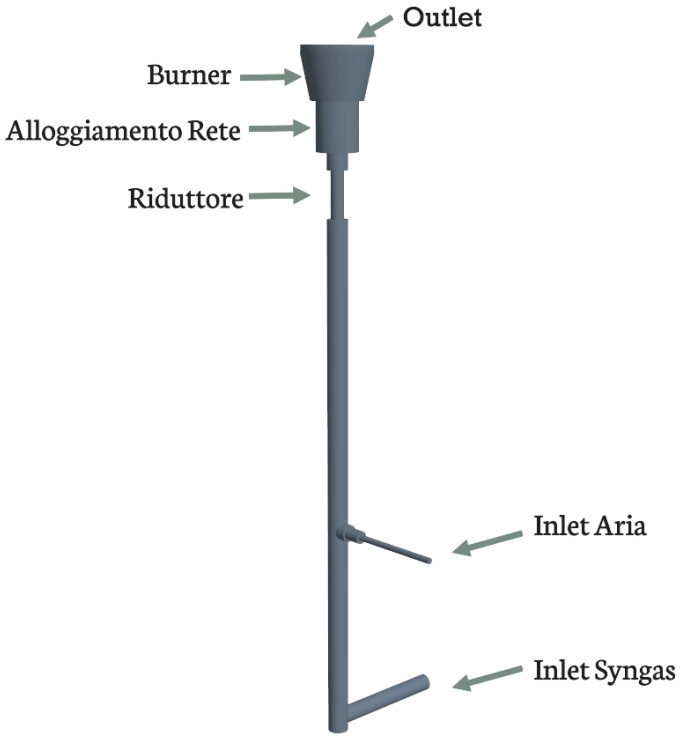


Figura 4.1 - Modello tridimensionale della sezione di miscelazione aria-syngas [6].

La necessità di una descrizione tridimensionale deriva dalla disposizione non assialsimmetrica degli ingressi di aria e combustibile nella parte a monte dell'apparato. Lo scopo principale del modello è verificare se, dopo il tratto disponibile per il mixing, le frazioni massiche delle diverse specie presentino una variabilità sufficientemente contenuta sulla sezione trasversale. Tale condizione costituisce il presupposto per rappresentare la corrente in ingresso al successivo modello assialsimmetrico come una miscela premiscelata.

4.2.2 Discretizzazione

La mesh è ottenuta mediante Surface Remesher, Trimmed Cell Mesher e Prism Layer Mesher. La dimensione di base, la Target Surface Size e la Minimum Surface Size sono pari a 1 mm, mentre la Maximum Surface Size è pari a 2 mm. Il dominio così discretizzato comprende complessivamente 2 969 405 celle [6].

In prossimità delle pareti vengono utilizzati sei prism layer, con spessore del primo strato pari a 0,04 mm e spessore totale pari a 1,2 mm. La risoluzione della zona prossima alla parete era stata definita secondo un approccio Low-Reynolds, verificando valori di y+ inferiori all'unità. La presenza della rete metallica richiede inoltre una risoluzione spaziale maggiore rispetto al resto del dominio; nella regione circostante la rete viene quindi applicato un raffinamento locale con dimensione caratteristica pari a 0,125 mm [6].

Parametro	Valore
Dimensione di base	1 mm
Target Surface Size	1 mm
Minimum Surface Size	1 mm
Maximum Surface Size	2 mm
Numero di celle	2 969 405
Prism layer	6
Primo prism layer	0,04 mm
Spessore totale prism layer	1,2 mm
Raffinamento locale in prossimità della rete	0,125 mm
Trattamento a parete	Low-Reynolds, y+ < 1

Tabella 4.1 - Principali parametri della mesh del modello tridimensionale di mixing [6].

4.2.3 Modelli fisici e verifica del mixing

La simulazione tridimensionale è configurata come flussaggio stazionario, turbolento e non reagente. Il fluido viene rappresentato come gas ideale multicomponente, mentre il campo di moto è risolto mediante formulazione Reynolds-Averaged Navier-Stokes con modello di turbolenza k-epsilon. Le specie considerate nel dominio sono Ar, CH4, CO, CO2, H2, N2, NH3 e O2 [6].

Gli ingressi di aria e syngas sono definiti come Mass Flow Inlet, mentre la sezione terminale è trattata come Pressure Outlet; le pareti del dominio di mixing sono considerate adiabatiche. Le condizioni di portata, composizione e temperatura impiegate nello sviluppo originario del modello derivavano dai corrispondenti dati sperimentali [6].

L'analisi del mixing era stata effettuata confrontando le distribuzioni delle frazioni massiche delle principali specie sia lungo il dominio sia su una sezione trasversale posta a z = 579 mm, scelta nel lavoro originario come sezione di collegamento con il successivo modello bidimensionale. I risultati ottenuti mostravano una ridotta variabilità delle frazioni massiche di CO, CH4, O2 e N2 sulla sezione considerata, permettendo di ritenere la miscela

sufficientemente omogenea e di adottare successivamente le ipotesi di combustione premiscelata e geometria assialsimmetrica [6].

Una visualizzazione rappresentativa dello stesso modello è riportata in Figura 4.2 utilizzando il CO come specie tracciante della corrente di syngas. La vista longitudinale permette di osservare la progressiva redistribuzione della specie a valle dell'immissione delle due correnti, mentre la sezione trasversale mostra il livello di uniformità raggiunto nella regione di interesse. Le due scale cromatiche sono riferite alle rispettive visualizzazioni e la figura viene pertanto utilizzata in senso qualitativo.

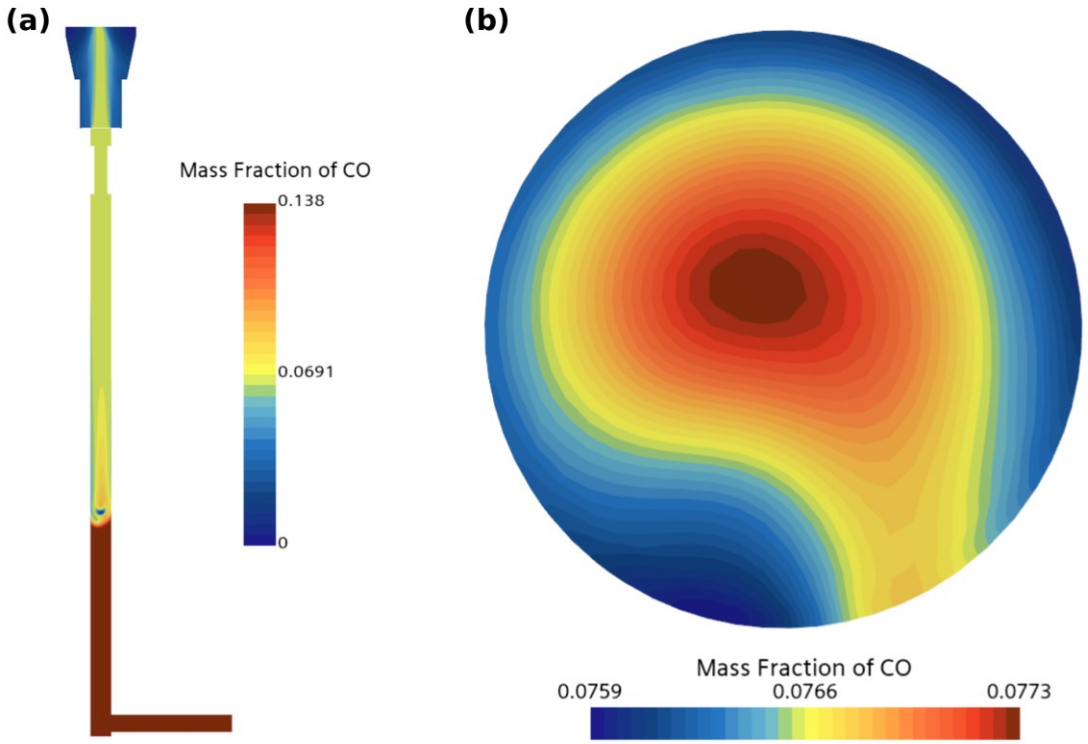


Figura 4.2 - Distribuzione della frazione massica di CO: (a) vista longitudinale; (b) sezione trasversale a valle [6].

Nel lavoro originario, oltre alla verifica delle frazioni massiche, i risultati del modello tridimensionale erano stati utilizzati per ricavare i profili di temperatura, velocità, Turbulent Kinetic Energy e Turbulent Dissipation Rate da trasferire all'inlet del modello bidimensionale [6]. Tale procedura non viene riprodotta integralmente nella configurazione finale adottata nel presente lavoro: la funzione del modello 3D rimane quella di fornire il fondamento per l'ipotesi

di miscela premiscelata, mentre le condizioni quantitative di ingresso del modello reagente vengono ricostruite caso per caso. In particolare, la velocità viene imposta come valore uniforme ottenuto dalla portata massica totale, dalla densità della miscela e dalla sezione di ingresso.

Il modello tridimensionale costituisce quindi un elemento metodologico ereditato e non modificato, utilizzato come collegamento tra l'effettiva configurazione tridimensionale dell'apparato di alimentazione e il modello assialsimmetrico sviluppato per la combustione. A partire dal paragrafo successivo viene invece descritta la configurazione numerica del bruciatore oggetto dello sviluppo svolto nel presente lavoro.

4.3 Architettura del modello del bruciatore

Il modello del bruciatore è costituito da un dominio bidimensionale assialsimmetrico reagente, risolto in condizioni stazionarie mediante approccio RANS. La chimica è descritta attraverso Complex Chemistry e il meccanismo GRI-Mech 2.11, mentre l'interazione tra turbolenza e propagazione della fiamma viene trattata mediante Turbulent Flame Speed Closure. Il trasferimento radiativo viene risolto mediante Participating Media Radiation e Discrete Ordinates Method. [13], [16]

La geometria comprende esplicitamente quattro corpi solidi per le pareti, undici domini solidi per le termocoppie e un secondo dominio fluido rappresentativo dell'aria circostante. In questo modo il trasferimento termico viene ricostruito attraverso la soluzione accoppiata dei campi termici nei fluidi e nei solidi, anziché essere ricondotto a una sola condizione termica equivalente applicata alla parete.

La descrizione della combustione turbolenta è basata sulla propagazione di una fiamma premiscelata attraverso il TFC. La formulazione rende esplicito il ruolo della Laminar Flame Speed e risulta coerente con l'omogeneità della miscela verificata da modello di mixing.

La geometria del bruciatore determina inoltre una marcata riorganizzazione del campo di moto a valle della rete e delle variazioni di sezione. Una scena rappresentativa delle linee di corrente e del modulo della velocità è riportata in Figura 4.3; la visualizzazione consente di evidenziare le zone di ricircolo generate dalle espansioni geometriche, rilevanti per il tempo di residenza e per la stabilizzazione della fiamma.

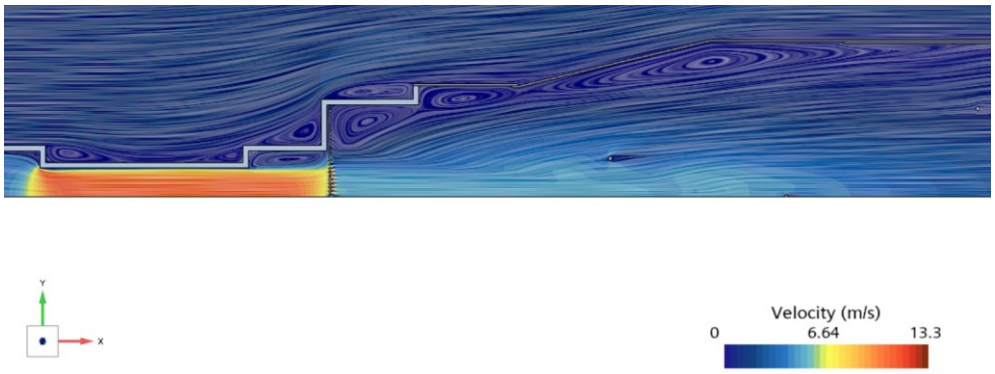


Figura 4.3 - Linee di corrente e modulo della velocità nel modello assialsimmetrico; caso di gennaio mostrato a titolo rappresentativo.

4.4 Geometria del modello assialsimmetrico

4.4.1 Geometria bruciatore e suddivisione dei domini

La geometria numerica è stata ricostruita a partire dal disegno tecnico dell'apparato. Il bruciatore presenta differenti diametri, raccordi, variazioni di sezione e discontinuità costruttive lungo l'asse, oltre a un tratto finale allungato corrispondente alla canna fumaria. Tali caratteristiche rendono opportuno evitare una rappresentazione della struttura metallica mediante un singolo bordo uniforme.

Il disegno costruttivo utilizzato come riferimento geometrico è riportato in Figura 4.4. Esso consente di identificare la successione dei cambi di sezione, le principali quote assiali e la distribuzione dei fori destinati alle termocoppie.

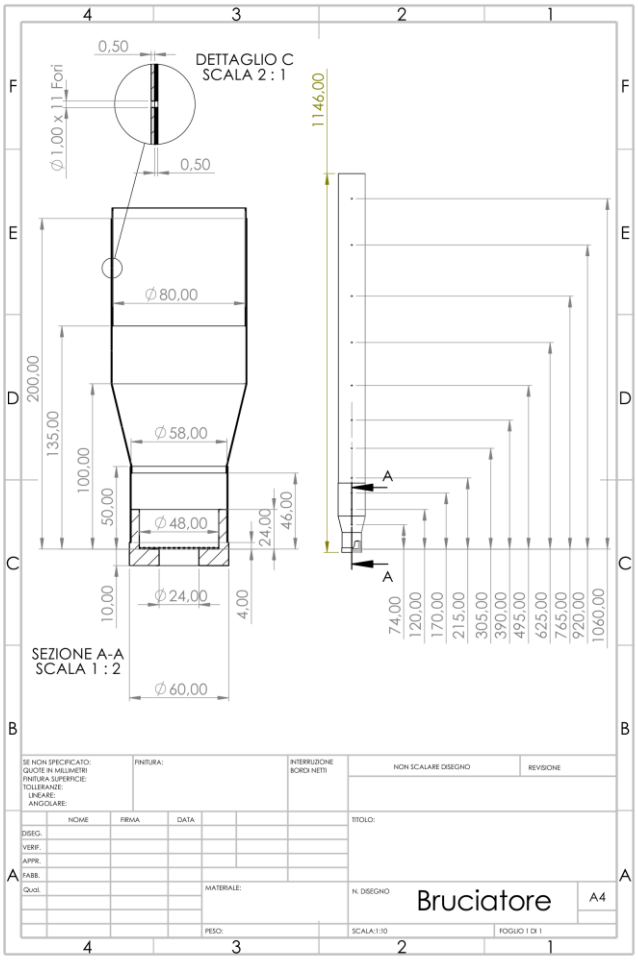


Figura 4.4 - Disegno tecnico del bruciatore utilizzato come riferimento per la ricostruzione geometrica del dominio numerico.

Sono stati pertanto definiti quattro distinti corpi solidi, denominati Bordo, Bordo2, Bordo3 e Bordo4. La suddivisione segue le reali intersezioni e discontinuità presenti nel sistema e permette di riprodurre in modo più fedele il percorso conduttivo lungo la struttura. Il quarto corpo comprende gran parte del tratto finale della canna fumaria, mentre i corpi precedenti rappresentano le regioni più vicine alla camera e ai cambi di sezione.

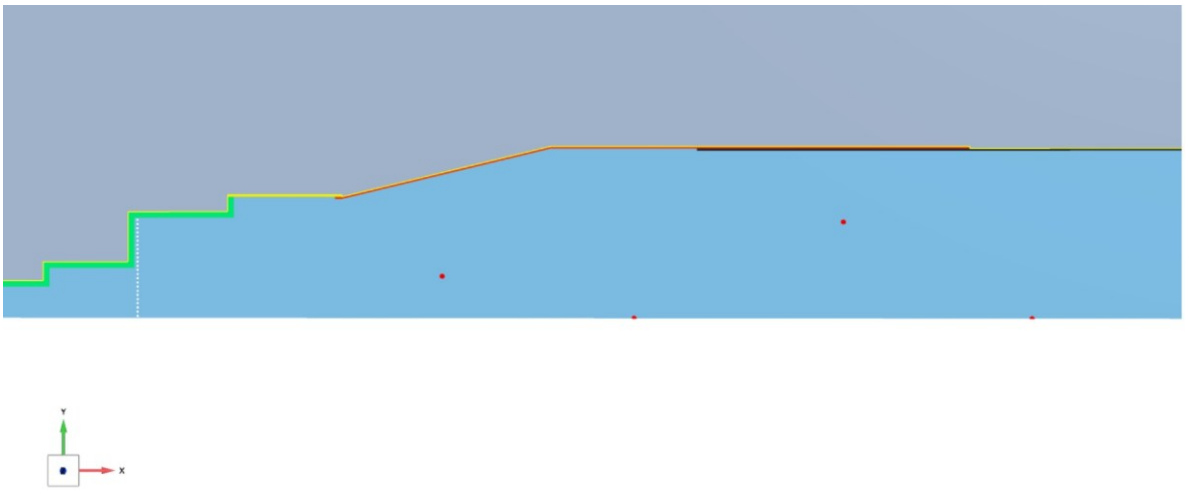


Figura 4.5 – Suddivisione dei domini distinti mediante colorazione diversa.

Alla struttura metallica sono associati il dominio fluido interno Burner, nel quale avviene la combustione, e il dominio fluido esterno Ambiente. Il modello complessivo comprende inoltre undici domini solidi, TC1-TC11, utilizzati per rappresentare gli elementi sensibili delle termocoppie. Questa scomposizione permette di assegnare *Physics Continua* differenti alle regioni reagenti, non reagenti e solide e costituisce la base della rappresentazione termo-fluidodinamica coniugata adottata nel modello finale.

4.4.2 Modellazione e posizionamento delle termocoppie

Le undici termocoppie della campagna sperimentale sono state introdotte come veri e propri corpi solidi, anziché come semplici probe point. La geometria dei sensori e la relativa posizione sono state aggiornate sulla base delle correzioni sperimentali comunicate durante lo sviluppo del progetto. La disposizione reale non risulta perfettamente coincidente con l'asse del bruciatore: in particolare, TC1 è posta a 10 mm dall'asse e TC3 a 23 mm dall'asse.

La correzione della posizione assume rilievo perché il campo di temperatura all'interno del bruciatore non deve essere considerato a priori uniforme lungo la direzione radiale. Un sensore fuori asse può quindi essere esposto a condizioni differenti da quelle presenti sulla linea centrale. La rappresentazione esplicita del corpo solido consente inoltre di distinguere la temperatura locale del gas dalla temperatura del sensore, che dipende dal bilancio termico dell'elemento metallico e dagli scambi con l'ambiente circostante.

La modellazione delle termocoppie costituisce quindi un miglioramento diretto della coerenza tra grandezza simulata e dato sperimentale: il confronto non viene effettuato assumendo che la misura coincida necessariamente con la temperatura del fluido in un punto ideale, ma utilizzando la risposta termica di un elemento geometrico posto nella posizione effettiva di misura.

4.5 Discretizzazione del nuovo dominio

4.5.1 Strategia di mesh

La presenza contemporanea di un dominio reagente, un volume ambiente di dimensioni maggiori, pareti sottili e termocoppie di piccola scala richiede una discretizzazione non uniforme. Una mesh omogeneamente raffinata sull'intero dominio esterno determinerebbe infatti un costo computazionale elevato senza apportare un beneficio proporzionato nelle regioni lontane dal bruciatore. Sono state pertanto definite operazioni di mesh separate per Burner, Ambiente, Bordi e Termocoppie.

Il dominio fluido principale viene discretizzato tramite Surface Remesher, Trimmed Cell Mesher e Prism Layer Mesher. La configurazione di riferimento utilizza Target Surface Size e Minimum Surface Size pari a 1 mm. Il trattamento di parete prevede due prism layer, con spessore del primo strato pari a 0,25 mm e spessore complessivo pari a 0,5 mm.

L'ambiente esterno viene discretizzato in maniera più grossolana, con Target Surface Size pari a 5 mm. Anche in questo caso vengono utilizzati due prism layer, con spessore del primo strato pari a 0,125 mm e spessore totale pari a 0,25 mm. I quattro corpi solidi delle pareti vengono invece discretizzati con Target Surface Size pari a 0,2 mm, mentre le termocoppie richiedono il raffinamento più spinto, con Target Surface Size pari a 0,05 mm.

Regione	Target size	Prism layer	Primo strato	Spessore totale
Burner	1,0 mm	2	0,25 mm	0,50 mm
Ambiente	5,0 mm	2	0,125 mm	0,25 mm
Bordi	0,20 mm	-	-	-
Termocoppie	0,05 mm	-	-	-

Tabella 4.2 - Parametri principali delle operazioni di mesh del modello finale.

La distribuzione risultante concentra le celle più piccole in prossimità delle pareti, delle variazioni geometriche, della zona di stabilizzazione della fiamma e dei sensori, mentre la dimensione aumenta progressivamente allontanandosi dal bruciatore nel dominio esterno. In tal modo il costo computazionale viene concentrato sulle regioni nelle quali sono attesi i gradienti maggiori o nelle quali è necessario ricostruire accuratamente lo scambio termico.

La Figura 4.6 mostra, a titolo esemplificativo, la distribuzione della griglia nella regione iniziale del bruciatore. Si osserva il raffinamento progressivo in prossimità delle pareti, della rete e delle discontinuità geometriche, mentre il dominio ambiente viene discretizzato con celle progressivamente più grandi allontanandosi dal sistema.

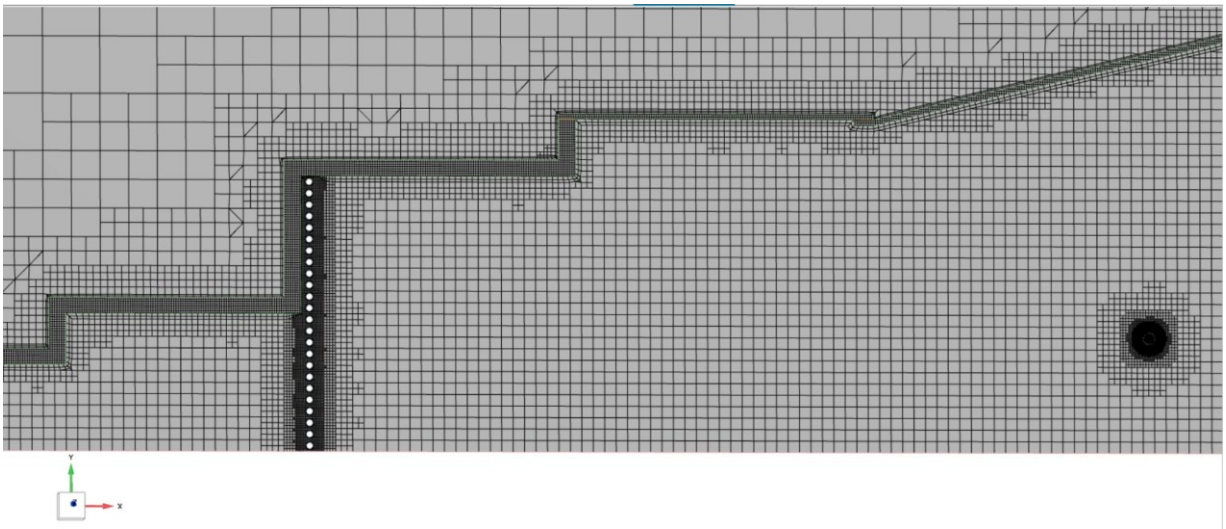


Figura 4.6 - Dettaglio della mesh nella regione iniziale del modello assialsimmetrico, con raffinamento in prossimità delle pareti, della rete e del dominio reagente.

Un raffinamento molto più spinto viene invece applicato localmente attorno ai corpi solidi rappresentativi delle termocoppie, in modo da risolverne la geometria e il relativo accoppiamento termico senza imporre lo stesso livello di discretizzazione all'intero dominio. Un esempio del raffinamento locale è riportato in Figura 4.7.

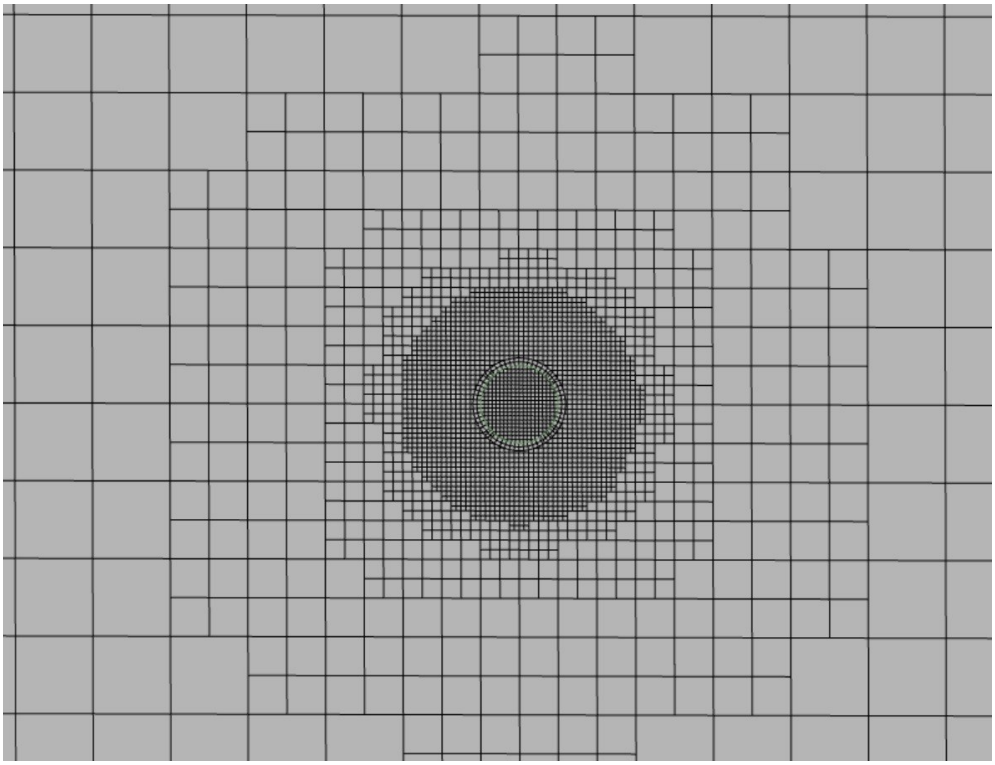


Figura 4.7 - Raffinamento locale della mesh attorno a una termocoppia modellata come corpo solido.

4.5.2 Analisi sistematica di sensibilità alla mesh

La scelta della griglia di riferimento è stata accompagnata da uno studio sistematico di sensibilità alla discretizzazione. Sono state considerate tre configurazioni principali: una mesh con dimensione caratteristica del bulk pari a 2 mm, una mesh di riferimento con bulk pari a 1 mm e una terza configurazione che mantiene il bulk a 1 mm introducendo un raffinamento a 0,5 mm nella prima metà del bruciatore.

Il raffinamento è stato concentrato nella parte iniziale poiché in questa regione hanno luogo l'innesco, la stabilizzazione e lo sviluppo principale del fronte di fiamma, con elevati gradienti di temperatura, composizione e velocità di reazione. Il confronto tra le configurazioni mostra

che le specie maggioritarie e il bilancio globale della combustione risultano relativamente poco sensibili alla discretizzazione, mentre il NO può presentare variazioni più marcate e dipendenti dal caso, soprattutto quando viene raffinata localmente la regione di fiamma. La risposta non è inoltre monotona per tutte le condizioni operative; l'analisi quantitativa di tali variazioni viene pertanto sviluppata nel Capitolo 5.

Configurazione	Bulk	Raffinamento locale	Ruolo
Mesh grossolana	2 mm	nessuno	Confronto sistematico
Mesh di riferimento	1 mm	nessuno	Configurazione principale
Mesh raffinata	1 mm	0,5 mm nella prima metà	Confronto sistematico

Tabella 4.3 - Configurazioni considerate nello studio sistematico di sensibilità alla mesh.

Nel corso dello sviluppo sono state eseguite anche simulazioni sporadiche a risoluzione molto più elevata, comprendenti raffinamenti fino a 0,25 mm e, in alcune prove, ulteriori riduzioni della dimensione caratteristica. Tali casi sono stati eseguiti su cluster di calcolo per investigare aspetti specifici della soluzione e non fanno parte dello studio sistematico di sensibilità della griglia. Per questo motivo non vengono utilizzati per definire l'indipendenza numerica del modello.

4.6 Organizzazione multiphysics

La struttura geometrica del modello richiede Physics Continua distinti per le differenti regioni.

Continuum	Tipo di dominio	Caratteristiche principali
Burner	Fluido reagente	Assialsimmetrico, RANS, Realizable k-epsilon, Complex Chemistry, TFC, radiazione
Ambiente	Fluido non reagente	Assialsimmetrico, RANS, gravità, convezione naturale, radiazione
Bordi	Solido	Conduzione termica stazionaria, acciaio UNSS30200
Termocoppie	Solido	Conduzione termica stazionaria, acciaio UNSS30200

Tabella 4.4 - Organizzazione dei principali Physics Continua.

4.7 Dominio fluido reagente

4.7.1 Formulazione fluidodinamica

Il dominio interno viene modellato come bidimensionale assialsimmetrico, stazionario, turbolento e reagente. La miscela è trattata mediante Ideal Gas e Multi-Component Gas. Le equazioni di quantità di moto vengono risolte con formulazione Segregated Flow, mentre il bilancio energetico è gestito mediante Segregated Fluid Enthalpy e il trasporto delle specie tramite Segregated Species.

La turbolenza è descritta in formulazione Reynolds-Averaged Navier-Stokes utilizzando il modello Realizable k-epsilon Two-Layer. In prossimità delle pareti viene adottato Two-Layer All y+ Wall Treatment, che consente di adattare il trattamento del flusso vicino alla parete alla risoluzione locale della mesh. La stessa configurazione viene mantenuta in tutte le condizioni operative considerate, così da evitare che differenze tra i casi siano introdotte da variazioni del modello di turbolenza.

4.7.2 Proprietà di trasporto

Le proprietà termofisiche della miscela reagente sono definite mediante modelli dipendenti dalla temperatura e dalla composizione. La viscosità dinamica è calcolata con la legge di Sutherland utilizzando un valore di riferimento pari a 1,716 x 10^-5 Pa s alla temperatura di 273,15 K e una costante di Sutherland pari a 111 K. La diffusività molecolare è determinata mediante Kinetic Theory.

Il peso molecolare della miscela viene calcolato in funzione della composizione locale e il calore specifico mediante Mass-Weighted Mixture. La conducibilità termica viene descritta tramite legge di Sutherland. Il coefficiente di scattering radiativo viene posto pari a zero, mentre per il trasporto turbolento sono adottati un Turbulent Prandtl Number e un Turbulent Schmidt Number entrambi pari a 0,9.

Proprietà	Modello / valore
Viscosità dinamica	Sutherland's Law
Valore di riferimento viscosità	1,716 x 10^-5 Pa s
Temperatura di riferimento	273,15 K
Costante di Sutherland	111 K
Diffusività molecolare	Kinetic Theory
Peso molecolare	Mixture
Calore specifico	Mass-Weighted Mixture
Conducibilità termica	Sutherland's Law
Scattering coefficient	0 m^-1
Turbulent Prandtl Number	0,9
Turbulent Schmidt Number	0,9

Tabella 4.5 - Principali proprietà di trasporto del continuum Burner

4.8 Modellazione della chimica

4.8.1 Complex Chemistry

La previsione delle specie prodotte dalla combustione, e in particolare delle specie minoritarie di interesse emissivo, richiede una rappresentazione della cinetica più articolata rispetto a una singola reazione globale. Nel continuum Burner viene quindi adottato il modello Complex Chemistry.

Il meccanismo chimico importato è GRI-Mech 2.11, costituito da 49 specie e 279 reazioni. La scelta consente di rappresentare mediante un unico schema cinetico le principali specie combustibili del syngas e le reazioni necessarie alla stima delle specie di interesse emissivo, mantenendo una descrizione coerente in tutti i punti operativi analizzati. [13]

La composizione del syngas viene ricostruita per ciascun caso a partire dai dati sperimentali disponibili.

4.9 Turbulent Flame Speed Closure

4.9.1 Formulazione del TFC

La descrizione dell'interazione tra turbolenza e combustione viene affidata al Turbulent Flame Speed Closure. La scelta è coerente con la natura premiscelata della miscela all'ingresso del dominio reagente e con l'interpretazione della combustione come propagazione di un fronte la cui velocità dipende dalle proprietà laminari della miscela e dal campo turbolento locale. [16], [21]

L'impiego del TFC è coerente con l'ipotesi di miscela premiscelata stabilita attraverso l'analisi del mixing. Infatti, la velocità di propagazione del fronte turbolento è descritta a partire dalla Laminar Flame Speed della miscela e dalle grandezze turbolente locali. Di conseguenza la corretta determinazione della LFS assume un ruolo centrale nella costruzione dei casi numerici.

4.9.2 Laminar Flame Speed e Table Generator

Nel modello non viene utilizzato un unico valore costante di Laminar Flame Speed e i valori di riferimento vengono ricavati mediante il Table Generator di STAR-CCM+ con il parametro Chemical Enthalpy attivo.

Il valore di LFS unico viene ricavato dalle specifiche condizioni di composizione, temperatura, pressione e rapporto di equivalenza. Questo aspetto è particolarmente rilevante per un combustibile come il syngas, nel quale variazioni delle frazioni di H2, CO, CH4 e delle specie diluenti possono determinare cambiamenti significativi della velocità di propagazione laminare. Per tale motivo, la Laminar Flame Speed viene ricalcolata per ogni valore di lambda ricalibrato.

4.9.3 Correlazione di Peters e parametri standard

La velocità turbolenta di fiamma viene determinata mediante la correlazione di Peters. I coefficienti della correlazione sono stati mantenuti ai valori standard del modello; non sono quindi stati utilizzati come parametri di calibrazione. La diffusività termica della miscela incombusta viene trattata mediante una Power Law. [16]

Parametro	Valore
Wall Effect Constant	1,0
A1	0,37
A4	0,78
B1	2,0
B3	1,0
Ewald's Corrector Constant	1,0

Tabella 4.6 - Coefficienti utilizzati nella correlazione di Peters.

Nella configurazione standard il moltiplicatore applicato alla Laminar Flame Speed è pari a 1. In alcuni casi caratterizzati da valori di LFS particolarmente bassi è stato tuttavia esplorato un multiplier maggiore di 1, con lo scopo di favorire il mantenimento della fiamma una volta terminata la fase di accensione. Tale intervento non viene assunto come modifica generale del TFC, ma viene documentato e discusso caso per caso insieme alla risposta della soluzione.

4.10 Innesco numerico della combustione

Per favorire l'instaurarsi iniziale della combustione è stato introdotto un Temperature Ignitor localizzato nella regione iniziale del bruciatore. La zona di accensione è orientata obliquamente rispetto all'asse del dominio in modo da interessare una porzione della miscela prossima alla zona di stabilizzazione della fiamma e da non ridurre l'innesco a una singola sezione trasversale.

Durante l'attivazione viene imposta una temperatura pari a 1200 K. Il funzionamento dell'ignitor è controllato da un Pulse basato sul numero di iterazioni: l'accensione viene attivata alla 200a iterazione e disattivata alla 3000a iterazione. Il suo utilizzo è quindi limitato alla fase iniziale della simulazione.

La posizione dell'ignitor nel dominio è mostrata in Figura 4.8. La disposizione obliqua interessa una regione estesa della miscela senza coincidere con una singola sezione normale all'asse, favorendo la formazione iniziale di un fronte che, una volta terminato il Pulse termico, deve essere mantenuto esclusivamente dai modelli di combustione attivi.

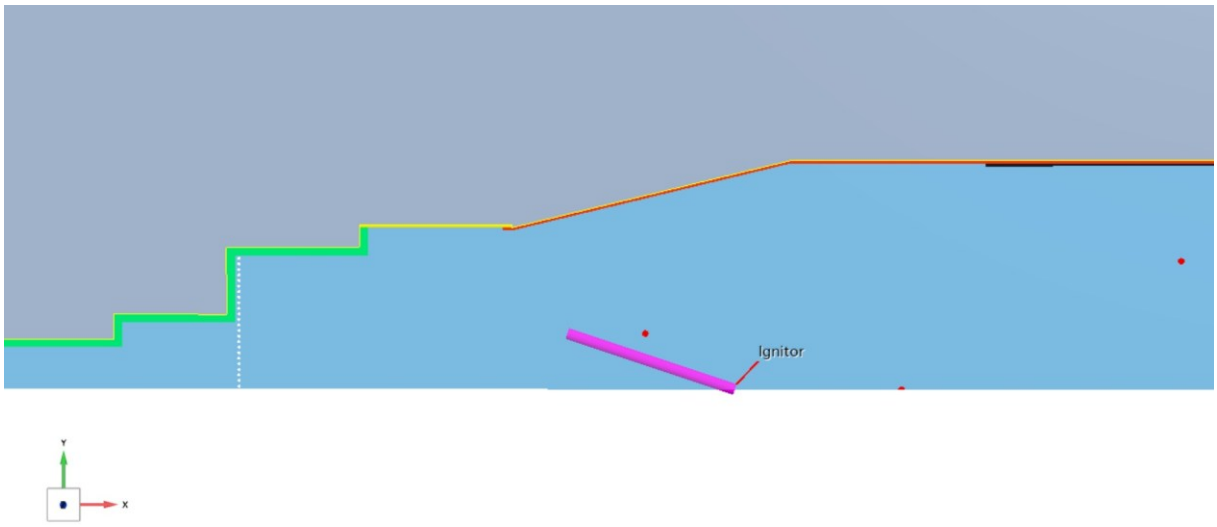


Figura 4.8 - Posizionamento obliquo del Temperature Ignitor nel dominio reagente del bruciatore.

Parametro	Valore
Temperatura imposta	1200 K
Iterazione di attivazione	200
Iterazione di disattivazione	3000
Posizione	Regione obliqua nella parte iniziale del bruciatore

Tabella 4.7 - Impostazioni del Temperature Ignitor

Dopo la disattivazione dell'ignitor, la combustione deve essere in grado di autosostenersi esclusivamente attraverso la soluzione dei modelli fisici e chimici attivi. Questo consente di distinguere la fase di innesco numerico dalla successiva stabilità della fiamma e permette di interpretare correttamente eventuali difficoltà osservate nei casi caratterizzati da Laminar Flame Speed ridotte.

4.11 Modellazione dello scambio radiativo

Lo scambio radiativo rappresenta una componente rilevante del bilancio energetico, in particolare per la presenza nei prodotti della combustione di specie radiativamente attive quali CO2 e H2O e per l'elevata temperatura raggiunta nella zona reagente. La soluzione radiativa viene effettuata mediante Participating Media Radiation e Discrete Ordinates Method. [19], [20]

Durante la fase di sviluppo è stato inizialmente utilizzato Gray Thermal Radiation, caratterizzato da un costo computazionale più contenuto e quindi adatto alle numerose

simulazioni necessarie per la messa a punto del modello. Nella configurazione Gray il coefficiente di assorbimento era valutato tramite Weighted Sum of Gray Gases e veniva utilizzato un Optical Path Length pari a 12,5 mm, valore ripreso dalla tesi di G. Trupia [6].

L'Optical Path Length è pertanto un parametro specifico della configurazione Gray/WSGGM utilizzata durante il tuning e non viene trasferito automaticamente al modello spettrale finale. Una volta raggiunta una configurazione numericamente stabile e soddisfacente, il Gray Thermal Radiation è stato sostituito con K-Distribution Thermal Radiation.

Il K-Distribution viene applicato nella configurazione finale sia al continuum Burner sia al continuum Ambiente, garantendo una descrizione coerente dello scambio radiativo nell'intero sistema fluido. La strategia adottata consente di utilizzare un modello relativamente economico nelle fasi iterative di sviluppo e di riservare il maggiore costo del trattamento spettrale alle simulazioni definitive.

Proprietà	**Valore / modello**
Emissività	0,8
Reflection Specularity	0
Reflectivity	Auto Calculate
Transmissivity	0

Tabella 4.8 - Proprietà radiative superficiali utilizzate nel modello

La trasmissività nulla implica superfici opache, mentre la specularità pari a zero corrisponde a una riflessione diffusa. Il coefficiente di scattering del mezzo gassoso viene posto pari a zero nei continui fluidi. Sono state fatte anche prove variando il parametro di emissività.

4.12 Domini solidi

4.12.1 Pareti del bruciatore

I quattro corpi solidi che costituiscono le pareti condividono il medesimo Physics Continuum. La conduzione termica viene risolta in condizioni stazionarie mediante Segregated Solid Energy. Il materiale assegnato è UNSS30200 e le proprietà termofisiche vengono considerate costanti nell'intervallo di funzionamento del modello.

Proprietà	Valore
Densità	8055 kg/m^3
Calore specifico	480 J/(kg K)
Conducibilità termica	15,1 W/(m K)

Tabella 4.9 - Proprietà termofisiche del materiale UNSS30200

La separazione in quattro domini non è associata all'uso di materiali differenti, ma alla ricostruzione delle reali discontinuità costruttive del bruciatore e alla necessità di rappresentare correttamente il percorso di conduzione lungo la struttura.

4.12.2 Termocoppie

Le undici termocoppie utilizzano lo stesso continuum solido e lo stesso materiale delle pareti. La scelta permette di calcolare la temperatura dei singoli corpi solidi e di estrarre separatamente la grandezza da confrontare con ciascuna misura sperimentale. La geometria dedicata dei sensori, insieme alla loro posizione aggiornata, consente di includere nel confronto gli effetti della collocazione radiale e dello scambio termico del corpo metallico.

4.13 Dominio dell'ambiente esterno

L'ambiente circostante il bruciatore viene rappresentato mediante un secondo dominio fluido, bidimensionale, stazionario e non reagente che presenta un inlet e un outlet per simulare il passaggio naturale di aria in direzione assiale. La miscela gassosa è costituita da N2 e O2 ed è trattata come gas ideale multicomponente. Il campo di moto viene risolto in formulazione RANS con modello Realizable k-epsilon Two-Layer e trattamento Two-Layer All y+.

Nel continuum Ambiente il bilancio energetico è risolto mediante Segregated Fluid Temperature.

La diffusività molecolare è descritta mediante un numero di Schmidt pari a 1,0. Peso molecolare e calore specifico sono determinati in funzione della miscela, mentre la conducibilità termica viene calcolata tramite legge di Sutherland con valore di riferimento pari a 0,02414 W/(m K), temperatura di riferimento pari a 273,15 K e costante di Sutherland pari a 194 K. Turbulent Prandtl Number e Turbulent Schmidt Number sono entrambi pari a 0,9.

Proprietà	**Modello / valore**
Composizione	N2 - O2
Diffusività molecolare	Schmidt Number
Schmidt Number	1,0
Conducibilità termica	Sutherland's Law
Valore di riferimento	0,02414 W/(m K)
Temperatura di riferimento	273,15 K
Costante di Sutherland	194 K
Scattering coefficient	0 m^-1
Turbulent Prandtl Number	0,9
Turbulent Schmidt Number	0,9
Radiazione finale	DOM + K-Distribution

Tabella 4.10 - Principali proprietà del continuum Ambiente

4.14 Preparazione delle condizioni di ingresso

4.14.1 Elaborazione delle due correnti sperimentali

La campagna sperimentale fornisce separatamente le portate massiche delle specie costituenti il syngas e dell'aria comburente. Il modello assialsimmetrico presenta invece un unico inlet, coerentemente con l'ipotesi di premiscelazione verificata tramite il modello tridimensionale. È quindi necessario trasformare i dati delle due correnti in una sola composizione massica da assegnare all'ingresso.

In una prima fase vengono calcolate separatamente le frazioni massiche del fuel e dell'aria, normalizzando la portata della singola specie rispetto alla portata totale della corrente di appartenenza. Nei fogli di lavoro questa elaborazione permette di mantenere esplicita la composizione relativa del combustibile anche quando viene modificata la sua portata complessiva.

Successivamente ciascuna portata di specie viene normalizzata rispetto alla somma delle portate di aria e combustibile. Si ottengono così le Species Mass Fractions della miscela complessiva, che costituiscono l'input effettivamente assegnato all'unico inlet di STAR-CCM+.

Per ciascuna composizione viene determinata la richiesta stechiometrica di ossigeno e, da questa, il rapporto aria-combustibile stechiometrico. Il valore di lambda è calcolato come rapporto tra l'aria effettivamente disponibile e quella richiesta in condizioni stechiometriche. Il rapporto di equivalenza è quindi ricavato come reciproco di lambda.

$$\lambda = (A/F)_{eff} / (A/F)_{st}$$

$$\phi = 1 / \lambda$$

Durante la fase di calibrazione alcuni valori di lambda sono stati modificati intervenendo sulla portata complessiva del fuel e mantenendo invariata la composizione relativa del combustibile per poter ottenere l’ossigeno residuo sperimentale. Questa procedura modifica la composizione della miscela totale senza alterare i rapporti interni tra le specie del syngas.

Per ogni nuova condizione vengono quindi ricalcolate le frazioni massiche complessive, la portata totale, la velocità di ingresso e la Laminar Flame Speed.

4.14.2 Calcolo della velocità uniforme all'inlet

A partire dalla composizione complessiva viene ricavato il peso molecolare medio della miscela e, utilizzando l'equazione dei gas ideali alla temperatura di ingresso, viene calcolata la densità. Nota la portata massica complessiva e l'area della sezione di ingresso, la velocità media viene determinata secondo la relazione:

$$u_{in} = \frac{\dot{m}_{tot}}{\rho_{in} A_{in}}$$

Il valore così ottenuto viene imposto come velocità uniforme sull'intera sezione di ingresso del modello assialsimmetrico. La boundary condition viene quindi ricostruita specificamente per ciascun caso e non corrisponde a un profilo spaziale trasferito dal modello tridimensionale.

Le temperature sperimentali vengono convertite da gradi Celsius a kelvin prima dell'introduzione nel modello. La stessa attenzione alla coerenza delle unità viene applicata alle grandezze utilizzate nel confronto allo scarico, convertendo le frazioni massiche numeriche in percentuali volumetriche o ppm quando necessario.

La Figura 4.9 riassume in forma schematica l’organizzazione del dominio e le principali condizioni al contorno comuni ai casi finali. La miscela entra attraverso un unico inlet, alla quale vengono assegnate velocità, temperatura e composizione ricostruite per lo specifico punto operativo. L’asse inferiore del dominio reagente costituisce l’asse di simmetria; attraverso le interfacce fluido-solido viene risolto lo scambio termico con le pareti e con i corpi delle termocoppie, mentre il dominio Ambiente permette di rappresentare gli scambi convettivi e radiativi con l’aria circostante. In uscita vengono monitorate le principali specie di interesse sperimentale, tra cui O2, CO2, CO, NO e NO2. Lo schema ha finalità riepilogativa e non deve essere interpretato come disegno dimensionale in scala.

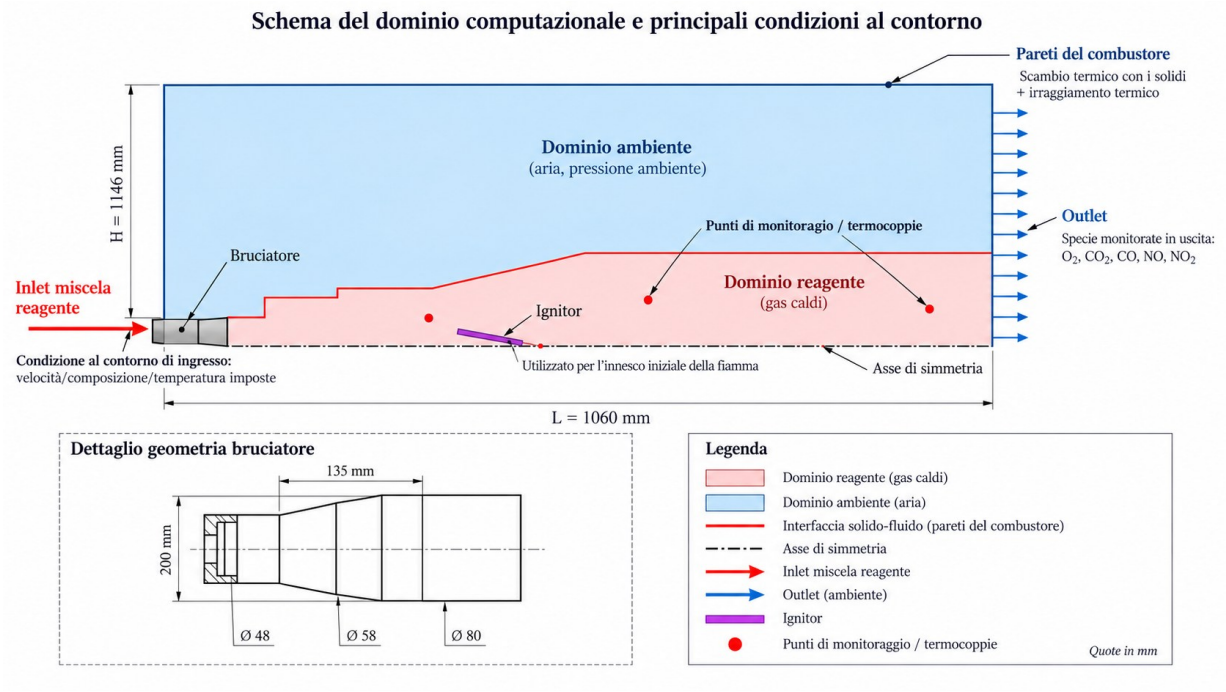


Figura 4.9 - Schema concettuale del dominio computazionale e delle principali condizioni al contorno e grandezze monitorate.

4.15 Tracciabilità dei casi e outputs di riferimento

La fase conclusiva dell'attività è organizzata nel foglio di elaborazione Excel. A ciascun punto operativo sono associate le informazioni sperimentali originarie, le eventuali correzioni successive comunicate durante il progetto e le elaborazioni necessarie per costruire le condizioni numeriche.

Per ciascun caso la Laminar Flame Speed viene ricalcolata mediante Table Generator con Chemical Enthalpy attivo. In questo modo la chiusura TFC rimane coerente con la composizione e con il rapporto di equivalenza effettivamente imposti all'inlet.

La successione delle simulazioni svolte durante il progetto comprende interventi di natura differente. La metodologia adottata distingue aggiornamenti sperimentali, modifiche geometriche, verifica della discretizzazione, strategie di riduzione del costo computazionale e parametri che agiscono direttamente sulla combustione.

La ricostruzione delle pareti, l'introduzione del dominio ambiente e la modellazione esplicita delle termocoppie costituiscono un'evoluzione della fedeltà geometrica e termica del modello.

La sensibilità alla mesh è trattata come verifica numerica distinta dalla calibrazione. Analogamente, l'utilizzo temporaneo del Gray Thermal Radiation durante il tuning rappresenta una scelta di efficienza computazionale e non una modifica finalizzata a cambiare il comportamento fisico della soluzione finale. Il passaggio a K-Distribution in entrambi i domini fluidi viene effettuato nella configurazione definitiva.

Le variazioni di lambda e, in specifici casi, del multiplier TFC agiscono invece direttamente sul comportamento della fiamma e devono essere valutate attraverso il confronto con le grandezze sperimentali. La loro interpretazione viene quindi affrontata nel capitolo dei risultati, mantenendo sempre la relazione tra parametro modificato, risposta numerica e dato di validazione.

La validazione del modello viene sviluppata utilizzando grandezze appartenenti a tre gruppi di parametri diversi. Il primo comprende le specie misurate allo scarico, tra cui O2, CO2, CO e gli ossidi di azoto. Per consentire il confronto diretto con la strumentazione sperimentale, gli output numerici vengono convertiti nelle unità utilizzate nei fogli di prova, distinguendo tra percentuali volumetriche e concentrazioni in ppm.

Il secondo gruppo è costituito dalle temperature misurate dalle undici termocoppie. La presenza dei relativi corpi solidi nel dominio permette di confrontare il risultato numerico con la temperatura del sensore e non esclusivamente con quella del gas in un punto ideale. La posizione aggiornata dei sensori, inclusi gli offset radiali di TC1 e TC3, viene mantenuta in tutte le configurazioni finali.

Il terzo gruppo di dati riguarda le temperature della superficie esterna del bruciatore. Le campagne sperimentali comprendono profili termici lungo la parete esterna, espressi in funzione della quota assiale e successivamente convertiti in kelvin. Queste misure risultano particolarmente utili per valutare il nuovo trattamento termico introdotto con i domini solidi e con l'ambiente esterno, poiché permettono di verificare non soltanto la combustione interna ma anche la capacità del modello di riprodurre il trasferimento di calore attraverso la struttura.

Monitor, plot e scene grafiche vengono quindi selezionati in funzione del caso analizzato e della specifica grandezza di confronto. La loro presentazione viene integrata direttamente

nell'analisi dei risultati, così da mantenere nello stesso contesto la condizione numerica, il dato sperimentale e l'interpretazione fisica delle eventuali differenze.

A titolo illustrativo, la Figura 4.10 riporta l'andamento iterativo di alcuni monitor di composizione per il caso di gennaio. Il grafico non viene utilizzato come risultato specifico di validazione, ma mostra il tipo di controllo adottato per verificare il raggiungimento di una soluzione stazionaria prima dell'estrazione delle grandezze da confrontare con le misure sperimentali.

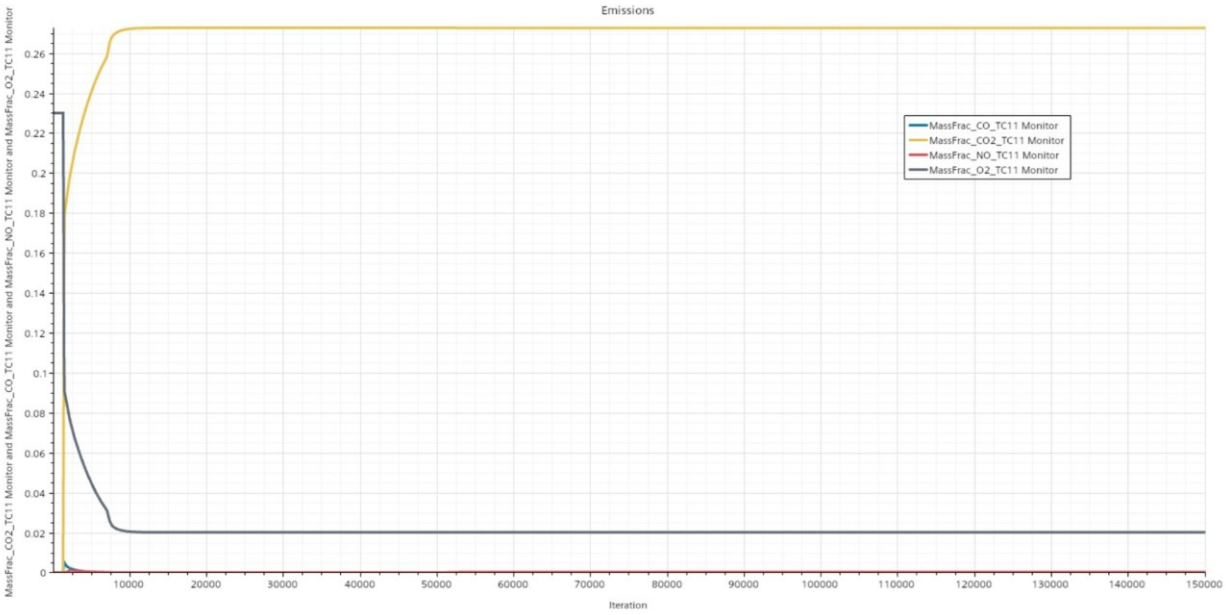


Figura 4.10 - Esempio di andamento dei monitor delle specie durante la convergenza della soluzione; caso di gennaio mostrato a titolo rappresentativo.

La configurazione descritta costituisce il riferimento comune delle simulazioni finali. La struttura multi-dominio, la modellazione TFC accoppiata alla Complex Chemistry, l'innesco temporaneo, il trattamento radiativo K-Distribution e la ricostruzione caso per caso delle condizioni di ingresso permettono di affrontare la successiva fase di validazione mantenendo una chiara separazione tra ipotesi numeriche, aggiornamenti sperimentali e parametri effettivamente oggetto di analisi.

Capitolo 5 - Analisi dei risultati

5.1 Obiettivi e strategia di analisi

La fase conclusiva dell'attività numerica è dedicata alla valutazione della capacità del modello sviluppato di riprodurre il comportamento del bruciatore nelle differenti condizioni operative investigate sperimentalmente. Una parte rilevante del lavoro ha riguardato la ricostruzione delle effettive condizioni di funzionamento dell'apparato, caratterizzate da incertezze associate alle portate, al rapporto aria-combustibile e, per alcune campagne, alla composizione delle specie minoritarie del syngas.

La strategia di analisi è stata quindi costruita distinguendo una fase di calibrazione del caso operativo da una successiva fase di confronto sulle grandezze non utilizzate direttamente per tale calibrazione. Questa distinzione è indispensabile per attribuire correttamente significato agli eventuali accordi o discrepanze tra CFD ed esperimento.

5.1.1 Ricostruzione del rapporto aria-combustibile

La principale incertezza nella definizione del punto operativo riguarda il rapporto effettivo tra la portata d'aria e quella di syngas. Le portate sperimentali costituiscono il punto di partenza della ricostruzione numerica ed è stata necessaria una ricalibrazione del rapporto Air/Fuel sulla base dell'ossigeno sperimentale emesso dal bruciatore.

Per ciascun caso la portata complessiva del combustibile è stata quindi modificata mantenendo invariata la composizione relativa delle specie costituenti il syngas. La variazione della portata del fuel determina un nuovo rapporto aria-combustibile e quindi un nuovo valore del coefficiente d'aria lambda, definito come rapporto tra il rapporto A/F effettivo e quello stechiometrico.

$$\lambda = \frac{(A/F)_{\text{eff}}}{(A/F)_{\text{st}}} \tag{5.1}$$

Il corrispondente rapporto di equivalenza viene espresso come reciproco di lambda:

$$\phi = \frac{1}{\lambda} \tag{5.2}$$

A ogni modifica del punto operativo sono state ricalcolate le frazioni massiche della miscela complessiva, le proprietà termofisiche, la velocità media uniforme assegnata all'inlet e la Laminar Flame Speed utilizzata dal Turbulent Flame Speed Closure. La calibrazione basata sul valore di ossigeno non è consistita pertanto solo nella modifica di un singolo parametro isolato, ma nella ricostruzione coerente di una nuova condizione di ingresso.

Il buon accordo ottenuto sull'ossigeno deve essere interpretato alla luce di questa procedura. L'O2 residuo viene quindi impiegato per identificare il valore di lambda più plausibile. La sua funzione è verificare che il punto operativo ricostruito riproduca il livello di eccesso d'aria osservato sperimentalmente.

Una volta vincolato il rapporto aria-combustibile attraverso l'ossigeno, le restanti grandezze acquistano maggiore significato predittivo. In particolare, il confronto viene sviluppato sulle temperature interne ed esterne, sulla CO2 e sulle specie azotate. Il monossido di carbonio viene invece interpretato con particolare cautela, poiché il sistema sperimentale comprende fenomeni associati a tar, particolato e depositi che non appartengono al perimetro fisico della simulazione della sola fase gassosa.

Per rendere omogeneo il confronto tra grandezze caratterizzate da ordini di grandezza differenti può essere utilizzato, quando significativo, l'errore relativo percentuale tra valore numerico e valore sperimentale. Il segno conserva l'informazione sulla direzione dello scarto: un valore negativo identifica una sottostima numerica, mentre un valore positivo indica una sovrastima.

$$\varepsilon_X = \frac{X_{\mathrm{CFD}} - X_{\mathrm{exp}}}{X_{\mathrm{exp}}} 100 \tag{5.3}$$

5.2 Quadro dei casi operativi

La matrice di simulazione comprende condizioni caratterizzate da composizioni del syngas e rapporti aria-combustibile sensibilmente differenti. Questa scelta permette di verificare il comportamento del modello al variare sia dell'eccesso d'aria sia della velocità laminare di fiamma, evitando una calibrazione limitata a un singolo punto.

Nello stato attuale del lavoro vengono considerati i casi relativi ai mesi di novembre e gennaio 2025 e tre differenti condizioni ottenute mediante alimentazione da bombola: Bombola 1, Bombola 2 e Bombola 0.1. Questi cinque casi costituiscono il set utilizzato per il confronto finale tra modello numerico e dati sperimentali.

Caso	lambda	phi	LFS [m/s]	V inlet [m/s]
Novembre	1,201	0,833	0,1596	2,581
Gennaio	1,201	0,833	0,1426	3,778
Bombola 1	1,977	0,506	0,1101	1,172
Bombola 2	1,100	0,909	0,3751	2,148
Bombola 0.1	1,500	0,667	0,2278	1,322

Tabella 5.1 - Principali condizioni operative attualmente considerate.

La variabilità della LFS è particolarmente significativa nell'ambito del TFC: tra Bombola 1 e Bombola 2 il valore passa da circa 0,110 m/s a circa 0,375 m/s, variando quindi di oltre un fattore tre. Il modello viene così sottoposto a condizioni caratterizzate da capacità di propagazione intrinseca della fiamma molto differenti.

5.3 Sensibilità alla discretizzazione spaziale

La valutazione della discretizzazione è necessaria per distinguere le discrepanze riconducibili alla fisica e agli input del modello da quelle generate dalla risoluzione numerica. Lo studio sistematico è stato condotto confrontando una mesh con bulk pari a 2 mm, la mesh di riferimento con bulk pari a 1 mm e una terza configurazione che mantiene il bulk a 1 mm introducendo un raffinamento locale a 0,5 mm nella prima metà del bruciatore.

Sono state inoltre eseguite prove sporadiche a risoluzione più elevata, con raffinamenti fino a 0,25 mm e 0,125 mm, sfruttando risorse di calcolo su cluster a 200 core.

Questi casi hanno carattere esplorativo e non sono stati utilizzati come ulteriori livelli dello studio sistematico di indipendenza dalla griglia.

Per quantificare l'effetto del raffinamento su una generica grandezza X può essere definita la variazione percentuale rispetto alla mesh di riferimento da 1 mm:

$$\Delta_{\text{mesh}} = \frac{X_{\text{ref}} - X_{1\,\text{mm}}}{X_{1\,\text{mm}}} 100 \qquad (5.5)$$

L'analisi dei risultati mostra che O2 e CO2 sono poco sensibili alla discretizzazione all'interno dell'intervallo sistematicamente esplorato. Nel caso di novembre, ad esempio, l'ossigeno previsto rimane nell'intorno di 1,69% passando dalla mesh da 2 mm a quella da 1 mm, mentre il raffinamento locale a 0,5 mm produce soltanto una variazione dell'ordine dei centesimi di punto percentuale. La CO2 rimane sostanzialmente invariata intorno al 15,8%.

Un comportamento analogo è osservato nel caso di gennaio. Il consumo globale dell'ossigeno e la produzione delle specie maggioritarie risultano quindi relativamente robusti rispetto alla dimensione della griglia. Questo risultato supporta l'impiego della mesh da 1 mm come configurazione di riferimento per il bilancio globale della combustione.

Il comportamento del NO è invece significativamente più sensibile alla discretizzazione. Nel caso di novembre, i risultati attualmente disponibili mostrano un incremento marcato quando viene raffinata la prima metà del bruciatore, mentre O2 e CO2 rimangono quasi invariati.

Mesh	**O2 [%vol]**	**CO2 [%vol]**	**NO [ppm]**
Bulk 2 mm	1,689	15,802	265
Bulk 1 mm	1,689	15,803	276
Bulk 1 mm + ref. 0,5 mm	1,678	15,803	471

Tabella 5.2 - Esempio della sensibilità alla mesh per il caso di novembre.

La risposta del NO al raffinamento non è uniforme né necessariamente monotona tra i diversi punti operativi. Novembre mostra un incremento marcato passando dalla mesh di riferimento alla configurazione localmente raffinata, mentre gennaio presenta un aumento nel passaggio da 2 mm a 1 mm seguito da una riduzione con il raffinamento locale. Nei casi Bombola, caratterizzati da livelli assoluti di NO molto bassi, variazioni di pochi ppm possono tradursi in scarti percentuali molto elevati. Ne consegue che non è corretto estendere il concetto di indipendenza dalla mesh indistintamente a tutte le grandezze.

Le specie maggioritarie e il bilancio globale della combustione risultano sostanzialmente stabili con la mesh da 1 mm, mentre le specie minoritarie, in particolare il NO, possono dipendere in modo più marcato dalla risoluzione della regione reagente. La formazione di NO è infatti fortemente legata alla distribuzione locale della temperatura, ai tempi di permanenza nelle zone ad alta temperatura e alle concentrazioni di radicali; piccole variazioni della struttura della fiamma possono quindi generare effetti molto maggiori sul NO rispetto a quelli osservati sull'O2.

La Figura 5.1 riassume il confronto per i cinque casi mantenuti nell'analisi finale. L'effetto del raffinamento risulta particolarmente evidente per novembre: il NO passa da circa 265 ppm con bulk da 2 mm a circa 276 ppm con la mesh di riferimento da 1 mm, raggiungendo circa 471 ppm con il raffinamento locale a 0,5 mm. Gennaio mostra invece una risposta non monotona, da circa 33 ppm a 47 ppm e quindi a 35 ppm. Per i casi Bombola, i livelli assoluti molto inferiori richiedono cautela nell'interpretazione delle variazioni percentuali.

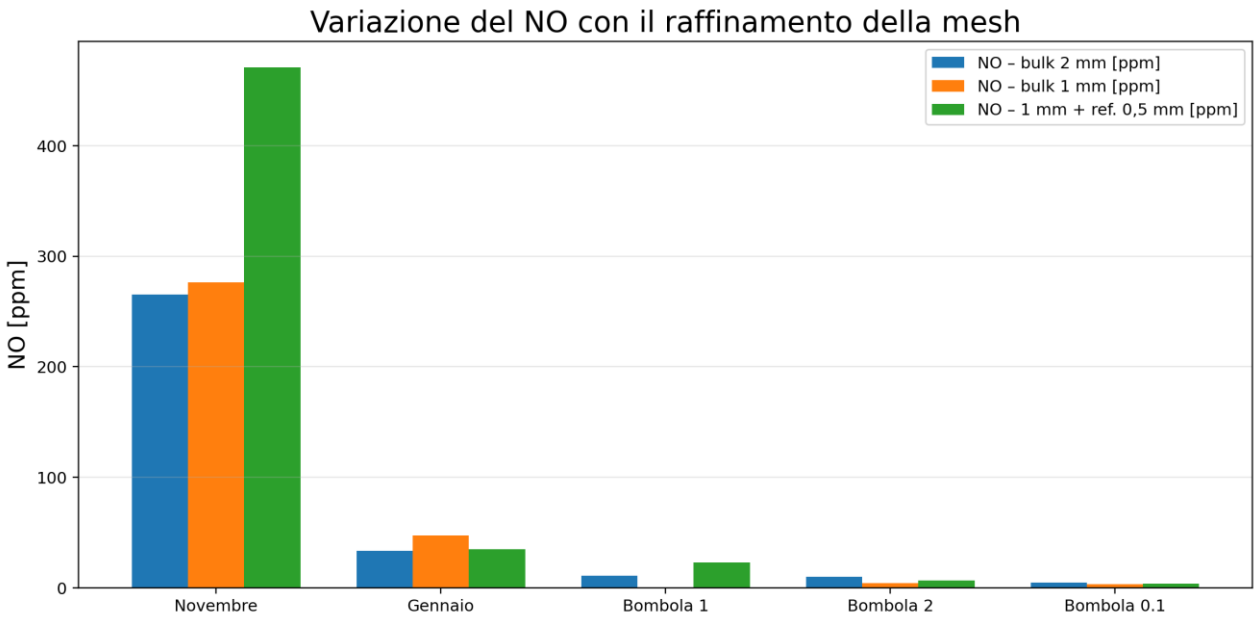


Figura 5.1 - Variazione della concentrazione di NO allo scarico al variare della discretizzazione: bulk 2 mm, bulk 1 mm e bulk 1 mm con raffinamento locale a 0,5 mm.

La mesh da 1 mm viene pertanto mantenuta come riferimento sulla base di un compromesso tra costo computazionale e stabilità della soluzione globale, senza attribuirle una completa indipendenza della previsione delle specie in tracce.

5.4 Analisi del campo termico

5.4.1 Temperature interne e termocoppie

La temperatura rappresenta una delle grandezze più rilevanti per la validazione del nuovo modello, poiché fornisce informazioni sulla posizione della fiamma, sull'intensità del rilascio termico, sullo sviluppo assiale dei prodotti caldi e sull'entità delle perdite verso la struttura.

Il confronto viene effettuato utilizzando le misure associate alle undici termocoppie e il corrispondente profilo numerico. La ricostruzione geometrica aggiornata assume particolare importanza nella prima regione del bruciatore: TC1 e TC3 non sono localizzate sull'asse, ma presentano rispettivamente uno scostamento radiale di 10 mm e 23 mm. In presenza di forti gradienti radiali, l'utilizzo della posizione reale del sensore evita di confrontare la misura con una temperatura assiale non rappresentativa.

Nei casi analizzati l'attuale soluzione riproduce qualitativamente la presenza della regione calda nella prima parte del bruciatore e il successivo decadimento assiale. In molte posizioni il valore numerico tende, tuttavia, a risultare inferiore alla misura sperimentale, soprattutto procedendo verso valle. L'entità dello scarto varia sensibilmente tra i differenti punti operativi e viene discussa nel dettaglio nel Paragrafo 5.7.

Gennaio mostra un accordo relativamente migliore nella regione iniziale, mentre più a valle la sottostima diventa più evidente. Bombola 2 e Bombola 0.1 presentano attualmente un comportamento prevalentemente analogo. Bombola 1 costituisce invece una condizione differente, poiché in una parte significativa del dominio la curva numerica tende a collocarsi al di sopra delle misure.

L'assenza di un errore sempre orientato nello stesso verso è un'informazione utile: la discrepanza termica non appare riconducibile a un semplice offset globale o a un unico coefficiente di scambio da correggere uniformemente, ma dipende dall'interazione tra punto operativo, sviluppo della fiamma e trasferimento termico.

5.4.2 Lettura del campo bidimensionale di temperatura

Le scene numeriche completano il confronto puntuale permettendo di osservare l'intera distribuzione della temperatura. Nelle differenti condizioni la fiamma si stabilizza nella zona iniziale del bruciatore e genera una regione ad alta temperatura che si sviluppa verso valle. Forma, estensione e intensità di tale regione dipendono sensibilmente da lambda e dalla LFS.

Bombola 2, caratterizzata da lambda prossimo a 1,10 e dalla LFS più elevata tra i casi attualmente considerati, presenta una regione ad alta temperatura particolarmente intensa. Bombola 1, con lambda prossimo a 2 e LFS relativamente bassa, mostra invece un campo termico globalmente meno intenso e un maggiore raffreddamento lungo il dominio.

La risposta differenziata alle condizioni operative costituisce un elemento positivo del modello: il campo termico non viene determinato da una parametrizzazione rigida, ma reagisce alle variazioni di composizione, rapporto di equivalenza e condizioni di ingresso.

5.4.3 Temperatura della parete esterna

La valutazione della temperatura della parete esterna è strettamente connessa alle principali modifiche introdotte nel presente lavoro. Il setup finale include infatti i corpi solidi del bruciatore, il dominio fluido esterno, la gravità e il trattamento radiativo K-Distribution in entrambi i continui fluidi; il modello è quindi già strutturato per calcolare la conduzione attraverso la parete e lo scambio convettivo e radiativo con l'ambiente.

La temperatura interna, considerata da sola, non è sufficiente a verificare in maniera univoca il bilancio energetico: combinazioni differenti di rilascio termico e dissipazione verso l'esterno potrebbero produrre profili interni simili. La temperatura della superficie esterna introduce quindi un secondo vincolo, direttamente sensibile alle proprietà dei solidi, alla rappresentazione delle discontinuità geometriche e alle condizioni di scambio termico con l'ambiente.

Una prima applicazione di questo confronto è mostrata in Figura 5.2 per il caso di gennaio. Il profilo numerico restituisce correttamente l'ordine di grandezza della temperatura di parete e il progressivo decadimento lungo il bruciatore, ma nella regione iniziale rimane una differenza quantitativa significativa rispetto alla misura sperimentale, che presenta un massimo più elevato. Il risultato conferma che il modello possiede già gli strumenti necessari per descrivere la temperatura delle pareti, ma evidenzia anche che questa parte richiede un ulteriore affinamento.

La modellazione della temperatura esterna deve pertanto essere considerata, allo stato attuale, una parte ancora in fase di sviluppo e non un elemento già completamente validato. Gli sviluppi successivi saranno rivolti soprattutto alla caratterizzazione delle condizioni ambientali e degli scambi convettivi e radiativi, così da consolidare il confronto quantitativo senza modificare la struttura multiphysics già introdotta nel modello.

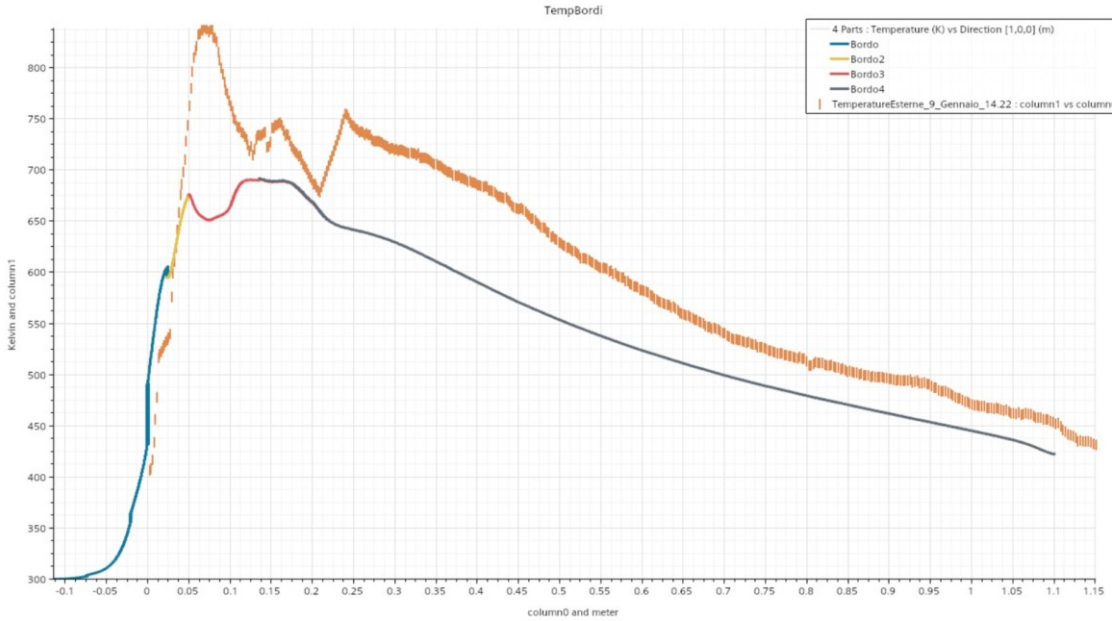


Figura 5.2 - Confronto preliminare tra temperatura numerica delle pareti e temperatura esterna sperimentale per il caso di gennaio.

5.5 Analisi delle specie allo scarico

Una volta identificato il rapporto aria-combustibile attraverso la concentrazione di ossigeno residuo, il confronto con le altre specie allo scarico permette di analizzare la risposta del modello nelle differenti condizioni operative. Non tutte le specie possiedono tuttavia lo stesso significato ai fini della validazione. CO2 e specie azotate possono essere confrontate più direttamente con la chimica gassosa rappresentata nel modello, mentre l'interpretazione del CO risulta maggiormente condizionata dalla presenza sperimentale di tar, particolato e depositi non inclusi nella simulazione.

5.5.1 Ossigeno residuo

L'O2 viene utilizzato, come già anticipato, come target per la ricostruzione di lambda. Il confronto mostra che, scegliendo valori plausibili del rapporto aria-combustibile, è possibile ottenere concentrazioni residue vicine a quelle sperimentali in un ampio intervallo di condizioni.

Caso	O2 exp [%]	O2 CFD [%]	lambda
Novembre	1,826	1,689	1,201
Gennaio	1,880	1,767	1,201
Bombola 1	8,036	7,112	1,977
Bombola 2	1,022	1,040	1,100
Bombola 0.1	4,314	4,280	1,500

Tabella 5.3 - Confronto attuale dell'ossigeno residuo con la mesh di riferimento da 1 mm.

Il risultato più importante consiste nell'avere ristretto l'incertezza sul rapporto A/F a condizioni coerenti con il comportamento globale della combustione.

5.5.2 Anidride carbonica

La CO2 non viene utilizzata direttamente come target per l'identificazione di lambda e rappresenta quindi una verifica più indipendente del bilancio delle specie carboniose. I risultati attualmente disponibili mostrano un comportamento variabile.

Caso	CO2 exp [%]	CO2 CFD [%]	Tendenza
Novembre	18,434	15,803	sottostima
Gennaio	18,479	17,431	sottostima contenuta
Bombola 1	12,531	10,402	sottostima
Bombola 2	11,131	15,051	sovrastima
Bombola 0.1	16,126	12,447	sottostima

Tabella 5.4 - Confronto attuale della CO2 con la mesh di riferimento da 1 mm.

La tendenza prevalente è una sottostima, ma Bombola 2 mostra un comportamento opposto e impedisce di descrivere la discrepanza mediante un unico bias costante. Il caso risulta particolarmente interessante perché l'O2 è quasi coincidente con il dato sperimentale, mentre la CO2 viene significativamente sovrastimata. Questo suggerisce che la differenza non possa essere ricondotta semplicemente a un eccesso d'aria errato.

Il confronto è sintetizzato graficamente in Figura 5.3. Nei casi di novembre, gennaio, Bombola 1 e Bombola 0.1 il valore numerico della CO_2 risulta inferiore alla misura sperimentale, con entità dello scarto differenti; Bombola 2 presenta invece una tendenza opposta, con una sovrastima numerica. L’assenza di un errore orientato nella stessa direzione per tutte le condizioni operative conferma che la discrepanza non può essere descritta mediante un semplice bias costante del modello.

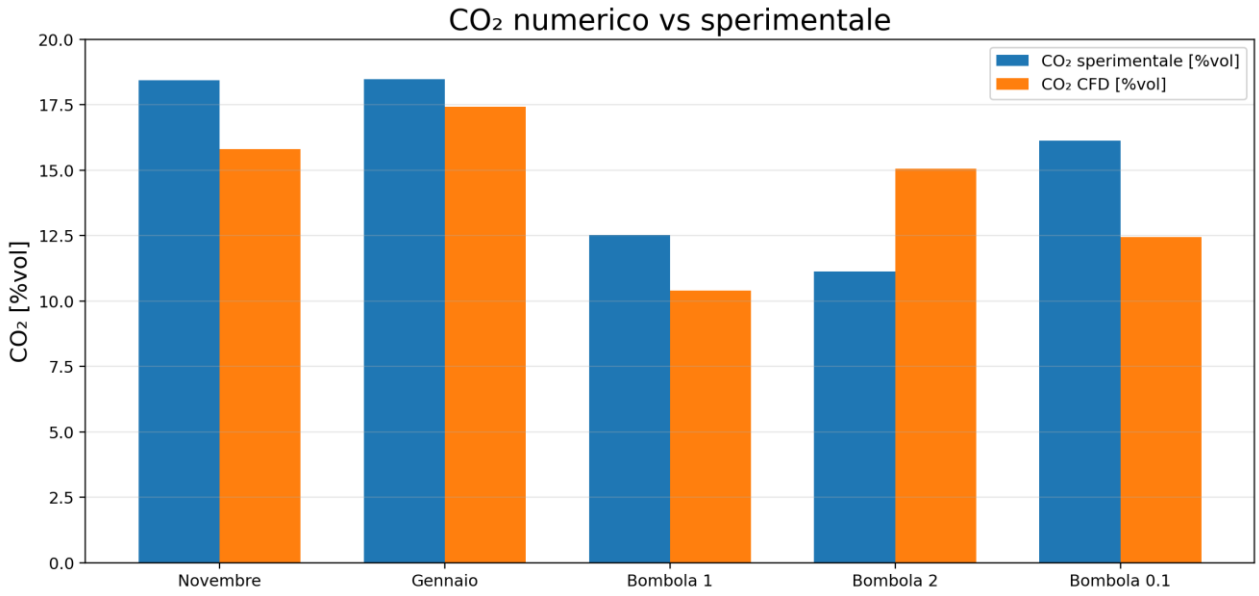


Figura 5.3 - Confronto tra concentrazione volumetrica di CO_2 sperimentale e numerica per i casi analizzati con mesh di riferimento da 1 mm.

5.5.3 Monossido di carbonio

Il confronto relativo al monossido di carbonio richiede considerazioni specifiche rispetto alle altre specie. Nelle simulazioni numeriche la concentrazione di CO allo scarico risulta generalmente molto bassa e, in numerosi casi, prossima allo zero. Le misure sperimentali mostrano invece quantità residue maggiori e, in alcune condizioni, significativamente superiori a quelle previste.

Tale discrepanza non è stata utilizzata come principale indicatore della qualità della calibrazione. Durante il funzionamento reale dell'apparato possono infatti essere presenti particolato, catrami e depositi derivanti dal processo di produzione e utilizzo del syngas, fenomeni che non sono rappresentati nel modello CFD adottato. [2]

La presenza e l'accumulo di tali componenti possono modificare localmente il processo di combustione e contribuire, direttamente o indirettamente, alla presenza di specie parzialmente ossidate nei gas analizzati sperimentalmente. Il modello numerico considera invece esclusivamente la fase gassosa definita dalle specie contenute nel meccanismo cinetico e non descrive formazione, trasporto, deposito o successiva interazione con la combustione di tar e particolato. Durante una prova qualitativa con tubo di vetro è stato inoltre possibile osservare

direttamente un deposito di particolato sulla rete metallica, come mostrato in Figura 5.4; tale osservazione non costituisce una quantificazione del fenomeno, ma rende estremamente plausibile il suo contributo alle discrepanze sperimentali sul CO.



Figura 5.4 - Deposito di particolato osservato sulla rete metallica durante una prova qualitativa con tubo di vetro.

Per questo motivo la concentrazione sperimentale di CO non costituisce, nel presente lavoro, una grandezza particolarmente adatta a una validazione quantitativa diretta della sola cinetica gassosa.

Caso	CO exp [ppm]	CO CFD [ppm]	Interpretazione
Novembre	1605,9	~0	forte influenza plausibile di fenomeni non modellati, come particolato o tar.
Gennaio	53,8	~0	dato complementare
Bombola 1	45,3	13,8	CO residuo presente anche numericamente
Bombola 2	~0	~0	accordo
Bombola 0.1	30,7	~0	dato complementare

Tabella 5.5 - Confronto indicativo del CO allo scarico.

Il caso di novembre è il più evidente, con una misura dell'ordine di 1600 ppm a fronte di una previsione numerica praticamente nulla. Una differenza analoga, sebbene di entità inferiore, compare in gennaio e Bombola 0.1. Bombola 1 rappresenta un'eccezione parziale, poiché il modello conserva una quantità residua di CO dell'ordine di 14 ppm, mentre Bombola 2 mostra valori prossimi a zero sia sperimentalmente sia numericamente.

Il risultato numerico indica che, all'interno della sola fase gassosa modellata, il CO formatosi durante la combustione viene sostanzialmente ossidato prima dell'uscita dal dominio. Non è tuttavia possibile concludere, sulla sola base del confronto con la misura, che questo comportamento rappresenti necessariamente una sovrastima della capacità reale di ossidazione, poiché una parte della concentrazione sperimentale può essere influenzata da fenomeni che non appartengono al modello.

Il CO viene quindi mantenuto principalmente come informazione complementare. La sua discrepanza evidenzia soprattutto il limite intrinseco di un confronto diretto tra un modello della sola fase gassosa e un apparato reale nel quale sono presenti anche prodotti condensabili, particolato e fenomeni di deposito.

5.6 Analisi degli ossidi di azoto

5.6.1 Confronto generale

Gli ossidi di azoto costituiscono una delle grandezze più complesse della validazione. Nei dati sperimentali disponibili il NO rappresenta generalmente la parte largamente dominante degli NOx, mentre il contributo di NO2 risulta molto più contenuto. L'analisi viene quindi concentrata principalmente sul NO. [10], [11]

Caso	NO exp [ppm]	NO CFD [ppm]
Novembre	574,0	276,2
Gennaio	225,6	47,4
Bombola 1	7,0	0,39
Bombola 2	15,0	3,97
Bombola 0.1	19,84	3,19

Tabella 5.6 - Confronto attuale del NO nella configurazione di riferimento da 1 mm.

Nelle simulazioni prive di un contributo esplicito di NO nel combustibile emerge una tendenza generale alla sottostima. L'entità dello scarto varia fortemente da un caso all'altro e deve essere interpretata alla luce sia della sensibilità alla mesh sia dell'incertezza sulle specie azotate presenti nel syngas.

Oltre al valore estratto nella posizione di campionamento, la CFD consente di osservare la distribuzione spaziale della specie all'interno del bruciatore. In Figura 5.5 è riportato, a titolo esemplificativo, il campo di frazione molare di NO per il caso di gennaio. Tale rappresentazione permette di individuare le regioni nelle quali la specie viene formata e trasportata, fornendo un'informazione complementare al solo confronto puntuale allo scarico.



Figura 5.5 - Distribuzione della frazione molare di NO nel dominio reagente; caso di gennaio mostrato a titolo rappresentativo.

5.6.2 Specie azotate in ingresso e definizione dei casi finali

Una delle analisi più significative del progetto ha riguardato il ruolo delle specie azotate presenti direttamente nel syngas. La forte sottostima inizialmente osservata per il NO ha suggerito di approfondire la caratterizzazione sperimentale del combustibile. La revisione della concentrazione di NH_3 nel caso di gennaio costituisce un esempio concreto di tale incertezza sperimentale. [12]

Dall'indagine sperimentale è emersa inoltre l'ipotesi che una parte del monossido di azoto fosse già presente all'uscita del gassificatore. È stata quindi eseguita una misurazione dedicata sul gas prodotto, dalla quale sono emersi contributi non trascurabili di NO già a monte del bruciatore.

Sulla base di questa evidenza, per i casi finali di novembre e gennaio è stato incluso nella composizione di ingresso del bruciatore anche il contributo di NO proveniente dal gassificatore, rispettivamente pari a 450 ppm e 350 ppm. Nel primo caso la concentrazione numerica allo scarico raggiunge circa 464 ppm rispetto ai circa 574 ppm sperimentali; nel secondo caso il risultato raggiunge circa 211 ppm rispetto ai circa 226 ppm misurati.

Caso	NO all'inlet [ppm]	NO exp [ppm]	NO CFD [ppm]
Novembre	450	574,0	463,6
Gennaio	350	225,6	211,4

Tabella 5.7 - Confronto tra NO sperimentale e numerico per le configurazioni finali di novembre e gennaio, con contributo di NO già presente nel syngas.

La presenza di una quantità relativamente piccola di NO già nel syngas modifica in modo sostanziale la previsione del NO allo scarico senza alterare in maniera comparabile O_2 e CO_2. Questo risultato evidenzia che la concentrazione allo scarico non può essere interpretata esclusivamente come prodotto dei meccanismi di formazione interni alla camera, ma dipende anche dalla corretta caratterizzazione delle specie azotate già presenti nel combustibile.

Nel seguito del Capitolo 5.7 i casi di novembre e gennaio vengono quindi discussi direttamente nelle loro configurazioni finali, includendo il contributo di NO misurato all'uscita del gassificatore. I casi privi di NO in ingresso rimangono utili come passaggio interpretativo per mostrare l'origine della discrepanza iniziale.

5.6.3 Interazione tra mesh e composizione azotata

La lettura del NO richiede inoltre di tenere separati due effetti. Nel caso di novembre, il raffinamento locale della mesh porta il NO da circa 276 ppm a circa 471 ppm anche senza includere il contributo di NO già presente nel syngas. Il valore ottenuto è quindi dello stesso ordine di grandezza di quello restituito dalla configurazione finale da 1 mm, nella quale tale contributo viene invece considerato.

Gennaio fornisce però un'indicazione complementare: il raffinamento locale non produce un incremento analogo del NO, mentre l'inclusione del contributo di 350 ppm già presente nel syngas determina un aumento molto marcato. Ciò conferma che la sensibilità alla composizione in ingresso costituisce un fenomeno reale del modello e non può essere ricondotta esclusivamente alla discretizzazione.

5.6.4 Significato fisico dell'inclusione di NO nel syngas

L'inclusione di NO nel syngas non deve essere interpretata come una semplice calibrazione arbitraria finalizzata a far coincidere il risultato CFD con il dato sperimentale. Essa rappresenta invece la traduzione numerica di un'informazione sperimentale aggiuntiva ottenuta a valle del gassificatore.

Il fatto che l'output risponda in maniera così marcata dimostra che una validazione quantitativa degli NOx richiede una caratterizzazione affidabile delle specie azotate in ingresso. Il risultato scientificamente rilevante non è quindi soltanto il miglioramento dell'accordo numerico, ma soprattutto la dimostrazione della forte dipendenza della previsione dalla qualità della caratterizzazione del syngas.

5.7 Analisi integrata dei principali casi

La lettura caso per caso viene completata affiancando ai dati di composizione allo scarico il confronto tra le temperature misurate dalle termocoppie e quelle previste dal modello. Viene inoltre riportato il campo di temperatura nel dominio reagente, separatamente dal grafico delle termocoppie, così da distinguere il confronto quantitativo con la misura dalla lettura qualitativa della struttura della fiamma. Le differenze tra i campi termici non possono essere ricondotte a un solo parametro: la composizione del syngas influenza direttamente la Laminar Flame Speed e il rilascio termico, mentre il rapporto aria-combustibile e la Velocity Inlet concorrono a determinare intensità della combustione, stabilizzazione e sviluppo assiale della zona calda.

Caso	**φ [-]**	**Velocity Inlet [m/s]**	**LFS [m/s]**	**T amb [°C]**
Novembre	0,833	2,581	0,1596	10
Gennaio	0,833	3,778	0,1426	8
Bombola 1	0,506	1,172	0,1101	10
Bombola 2	0,909	2,148	0,3751	10
Bombola 0.1	0,667	1,322	0,2278	10

Tabella 5.8 – Principali parametri dei casi analizzati

Per rendere più esplicito il legame tra composizione del combustibile e risposta termo-fluidodinamica, nei sottoparagrafi seguenti viene riportata per ciascun caso anche la composizione massica del solo syngas. Le tabelle includono inoltre la portata massica totale della miscela aria-syngas assegnata all'inlet e la corrispondente Velocity Inlet. A completamento dell'analisi, per ciascun caso viene anche riportata una tabella riassuntiva del confronto tra emissioni sperimentali e numeriche (O_2, CO_2, CO e NO). In questo modo la lettura delle scene di temperatura può essere ricondotta non soltanto a λ e alla LFS, ma anche alle differenze effettive nella composizione del combustibile e alla loro traduzione emissiva. Per novembre e gennaio le composizioni riportate corrispondono alle configurazioni finali che includono il contributo di NO stimato sperimentalmente all'uscita del gassificatore.

5.7.1 Novembre

Il caso di novembre rappresenta uno dei punti più significativi del set a disposizione. Il valore di λ prossimo a 1,20 consente di ottenere un livello di ossigeno vicino a quello sperimentale. Il confronto termico mostra che il modello riproduce la struttura generale del profilo, caratterizzata da un massimo nella zona iniziale e da un progressivo decadimento assiale, ma tende a sottostimare numerose temperature procedendo verso valle.

Specie	**Mass fraction**	**Specie**	**Mass fraction**
H_2	0,009394	N_2	0,527405
CH_4	0,008871	CO	0,160920
CO_2	0,242070	H_2O	0,040840
NH_3	0,000354	Ar	0,009634
NO	0,000511	O_2	0
Portata totale miscela [g/s]	1,387	Velocity Inlet [m/s]	2,581

Tabella 5.9 - Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Novembre. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet.

La Tabella 5.9 mostra un syngas fortemente diluito da N_2 e CO_2, con una frazione massica di CO pari a circa 0,161 e contenuti più ridotti di H_2 e CH_4. Il confronto con gennaio è particolarmente utile perché i due casi operano a φ quasi coincidente: novembre presenta una quota di CO_2 inferiore e una frazione di H_2 leggermente maggiore, condizioni complessivamente coerenti con la LFS più elevata restituita dal Table Generator. La frazione massica di NO già presente nel syngas, dell'ordine di 5×10^{-4}, è troppo piccola per modificare in modo apprezzabile il bilancio energetico globale, ma risulta invece determinante nella previsione delle emissioni azotate.

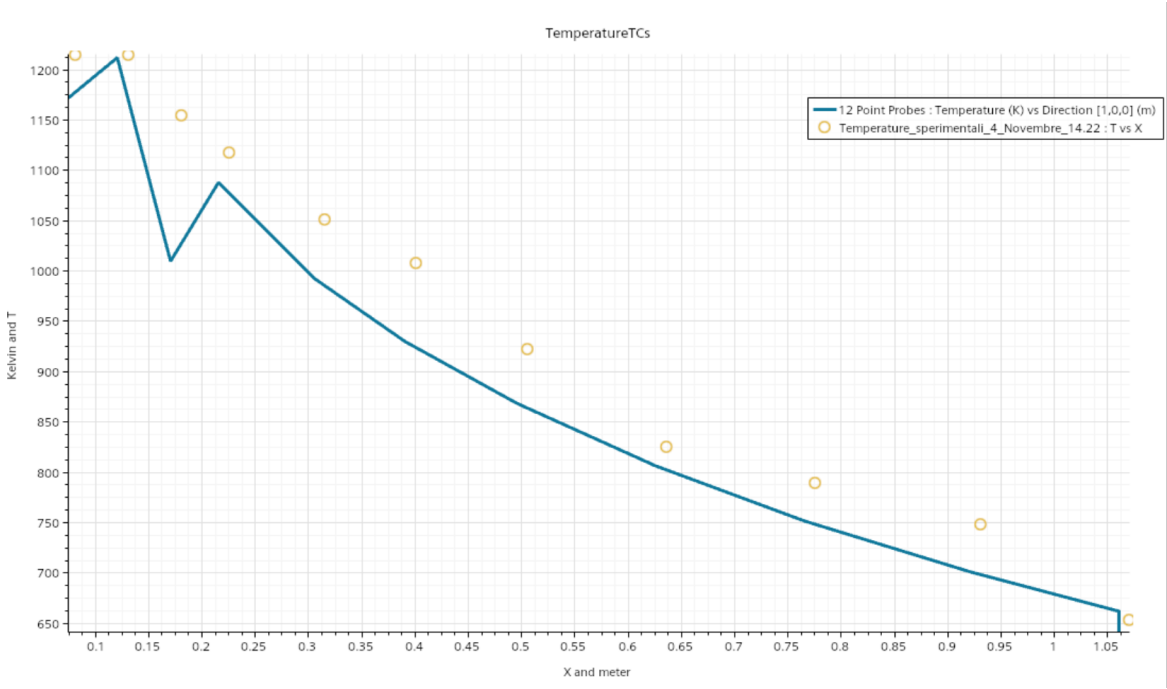


Figura 5.6 - Caso di novembre: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie.

Il confronto evidenzia quindi un accordo soprattutto qualitativo: la posizione del massimo e l'andamento decrescente sono correttamente rappresentati, mentre l'energia termica trasferita alle regioni più a valle risulta generalmente inferiore rispetto a quella misurata. Tale scarto deve essere letto insieme al campo di temperatura, che permette di osservare direttamente la forma della zona reagente.

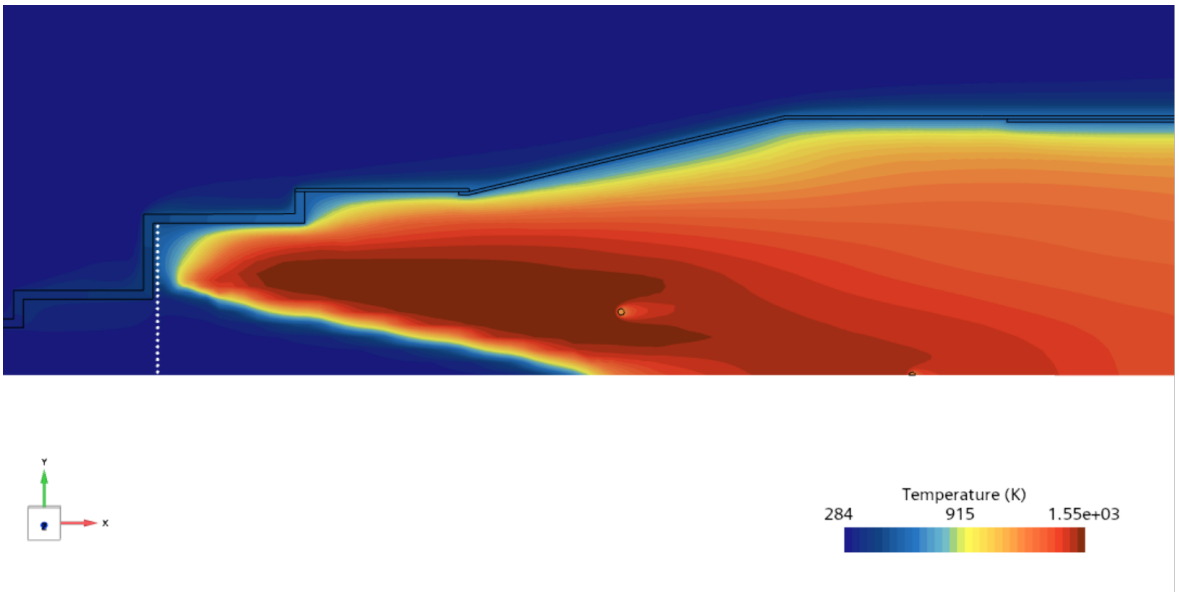


Figura 5.7 - Caso di novembre: campo di temperatura nel dominio reagente.

La fiamma (Figura 5.7) risulta stabilizzata immediatamente a valle della rete e presenta un nucleo caldo allungato lungo la parte inferiore del dominio. Il campo raggiunge valori dell'ordine di $1{,}55\times10^{3}$ K e mantiene temperature elevate anche nel tratto successivo all'espansione. La composizione del syngas determina per questo punto operativo una LFS dell'ordine di 0,16 m/s; tale reattività è sufficiente a mantenere l'ancoraggio della fiamma, mentre la Velocity Inlet, pari a circa 2,58 m/s, favorisce il trasporto della zona calda verso valle. La forma osservata è quindi coerente con il bilancio tra propagazione della fiamma e convezione della miscela.

Specie	**Sperimentale**	**CFD**	**Unità**
O_2	1,826	1,689	%vol
CO_2	18,434	15,803	%vol
CO	1605,9	≈0	ppm
NO	574,0	463,6	ppm

Tabella 5.10 - Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso novembre.

Come mostrato in Tabella 5.10, l'O_2 numerico risulta vicino al dato sperimentale, coerentemente con la ricostruzione del rapporto aria-combustibile. La CO_2 è invece

sottostimata. Il CO sperimentale rimane molto superiore alla previsione numerica; tale scarto viene interpretato come fortemente plausibile conseguenza della presenza di particolato, tar e depositi non rappresentati nella simulazione della sola fase gassosa. Per il NO, la considerazione dei 450 ppm già presenti nel syngas riporta la previsione numerica sul giusto ordine di grandezza e la avvicina sensibilmente al dato sperimentale.

5.7.2 Gennaio

Gennaio opera anch'esso intorno a λ=1,20, ma con una composizione differente e una LFS inferiore rispetto a novembre. Il profilo termico presenta un accordo relativamente migliore nella regione iniziale e una successiva sottostima verso valle.

Specie	Mass fraction	Specie	Mass fraction
H_2	0,007764	N_2	0,494362
CH_4	0,014795	CO	0,160063
CO_2	0,283652	H_2O	0,029889
NH_3	0,000031	Ar	0,009061
NO	0,000383	O_2	0
Portata totale miscela [g/s]	2,084	Velocity Inlet [m/s]	3,778

Tabella 5.11 - Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Gennaio. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet.

Come riportato in Tabella 5.11, il syngas di gennaio presenta una frazione di CO molto simile a quella di novembre, ma una maggiore presenza di CO_2 e una minore quota di H_2, mentre il CH_4 risulta più elevato. L'effetto combinato dell'intera composizione, e non di una singola specie isolata, porta a una LFS leggermente inferiore rispetto a novembre. A ciò si associa una portata totale della miscela più elevata e quindi una Velocity Inlet di circa 3,78 m/s: a parità quasi di φ, questo aumenta il peso del trasporto convettivo e contribuisce allo sviluppo più esteso della regione calda verso valle.

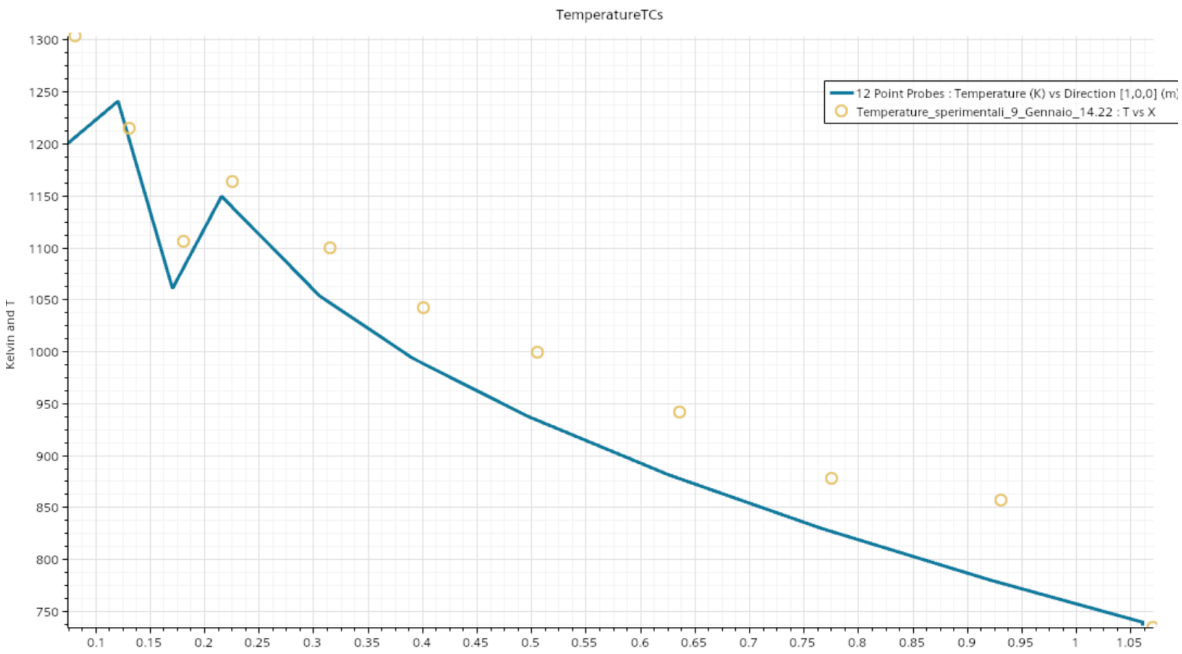


Figura 5.8 - Caso di gennaio: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie.

Anche in questo caso il modello riproduce il massimo iniziale e il successivo decadimento delle temperature. Lo scarto aumenta progressivamente nella parte centrale e finale del bruciatore, indicando che la distribuzione assiale del campo termico è descritta correttamente nella forma generale ma non ancora in modo perfettamente quantitativo.

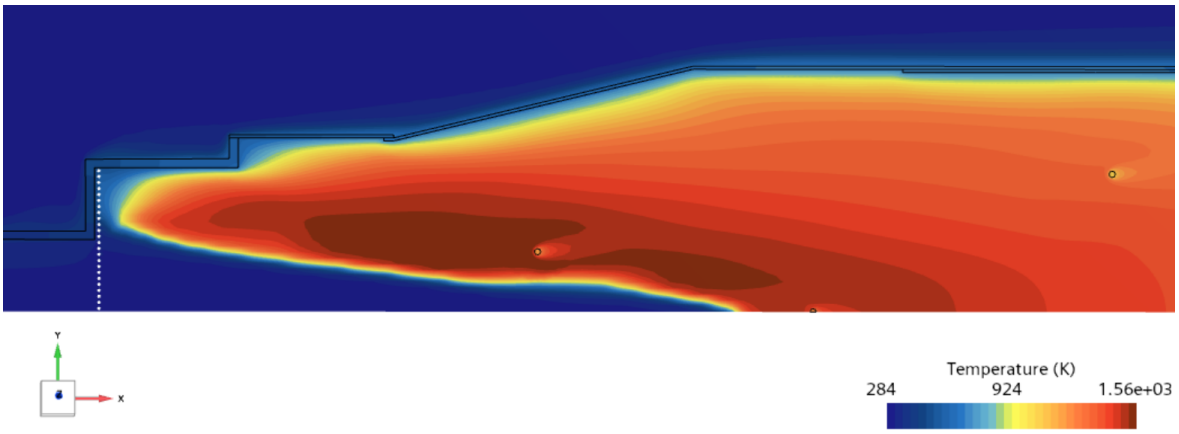


Figura 5.9 - Caso di gennaio: campo di temperatura nel dominio reagente.

La scena in Figura 5.9 mostra una fiamma ancorata alla rete con una regione calda piuttosto estesa lungo l'asse del bruciatore. Il massimo è ancora prossimo a $1{,}56\times10^{3}$ K, ma rispetto a novembre la combinazione tra una LFS leggermente inferiore, circa 0,143 m/s, e una Velocity Inlet più elevata, circa 3,78 m/s, tende ad aumentare il peso del trasporto convettivo rispetto alla propagazione della fiamma. Ne risulta una zona termicamente attiva che si sviluppa in maniera marcata verso valle. Il confronto tra novembre e gennaio, entrambi a $\lambda\approx1{,}20$, mostra quindi come il solo rapporto aria-combustibile non sia sufficiente a determinare la struttura della fiamma: la diversa composizione del syngas, riflessa nella LFS, e la differente velocità di ingresso modificano il campo termico anche a parità circa di λ.

Specie	**Sperimentale**	**CFD**	**Unità**
O_2	1,880	1,767	%vol
CO_2	18,479	17,431	%vol
CO	53,8	≈0	ppm
NO	225,6	211,4	ppm

Tabella 5.12 - Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso gennaio.

La Tabella 5.12 conferma per gennaio un buon accordo su O_2 e una sottostima relativamente contenuta della CO_2. Anche in questo caso il CO numerico risulta quasi nullo rispetto al dato sperimentale, che viene interpretato come informazione complementare e compatibile con la possibile presenza di fenomeni non modellati. L'aspetto più rilevante riguarda il NO: con NH_3 fissata al valore finale di 50 ppm e considerando i 350 ppm di NO già presenti in ingresso, la previsione numerica si colloca molto vicino alla misura sperimentale.

5.7.3 Bombola 1

Bombola 1 rappresenta la condizione più magra tra quelle attualmente considerate, con λ prossimo a 2 e una LFS relativamente bassa, pari a circa 0,11 m/s. Il campo termico è meno intenso rispetto alle condizioni prossime alla stechiometria e il confronto con le termocoppie mostra, dopo la regione iniziale, una tendenza della temperatura numerica a collocarsi sopra i valori sperimentali.

Specie	**Mass fraction**	**Specie**	**Mass fraction**
H_2	0,014570	N_2	0,540182
CH_4	0,014507	CO	0,234775
CO_2	0,195967	H_2O	0
NH_3	0	Ar	0
NO	0	O_2	0
Portata totale miscela [g/s]	0,631	Velocity Inlet [m/s]	1,172

Tabella 5.13 - Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Bombola 1. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet.

La composizione riportata in Tabella 5.13 è praticamente coincidente con quella utilizzata per Bombola 2 e Bombola 0.1: il syngas è dominato da N_2, mentre tra le specie combustibili prevale il CO con una frazione massica prossima a 0,235; H_2 e CH_4 sono entrambi dell'ordine di 0,0145. Questa quasi identità composizionale rende il confronto tra i tre casi Bombola

particolarmente significativo, perché le differenze di comportamento della fiamma possono essere ricondotte soprattutto al diverso rapporto aria-combustibile e alle conseguenti variazioni della LFS, più che a cambiamenti della chimica del fuel. Nel caso Bombola 1, il forte eccesso d'aria porta infatti a $\varphi \approx 0{,}506$ e alla LFS più bassa del gruppo Bombola.

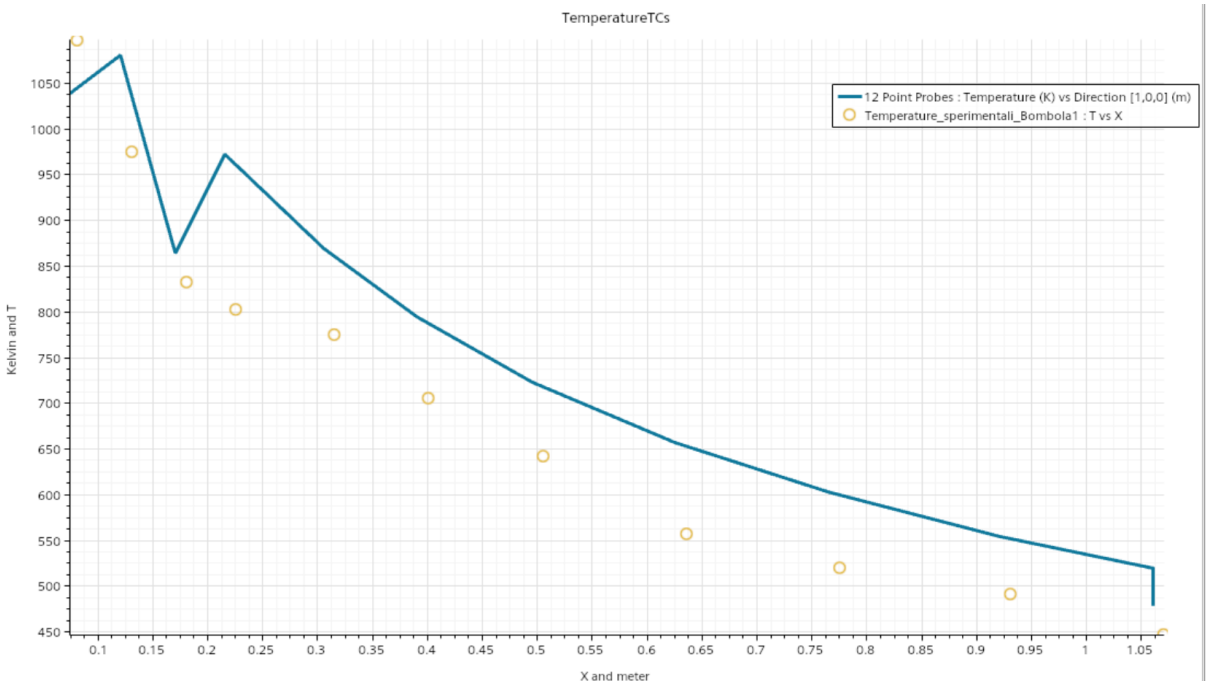


Figura 5.10 - Caso Bombola 1: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie.

La sovrastima non è uniforme lungo il dominio, ma diventa evidente soprattutto nella parte intermedia e finale. Il profilo numerico mantiene comunque lo stesso andamento globale della misura, con il massimo concentrato nella zona iniziale e una successiva riduzione della temperatura procedendo verso lo scarico.

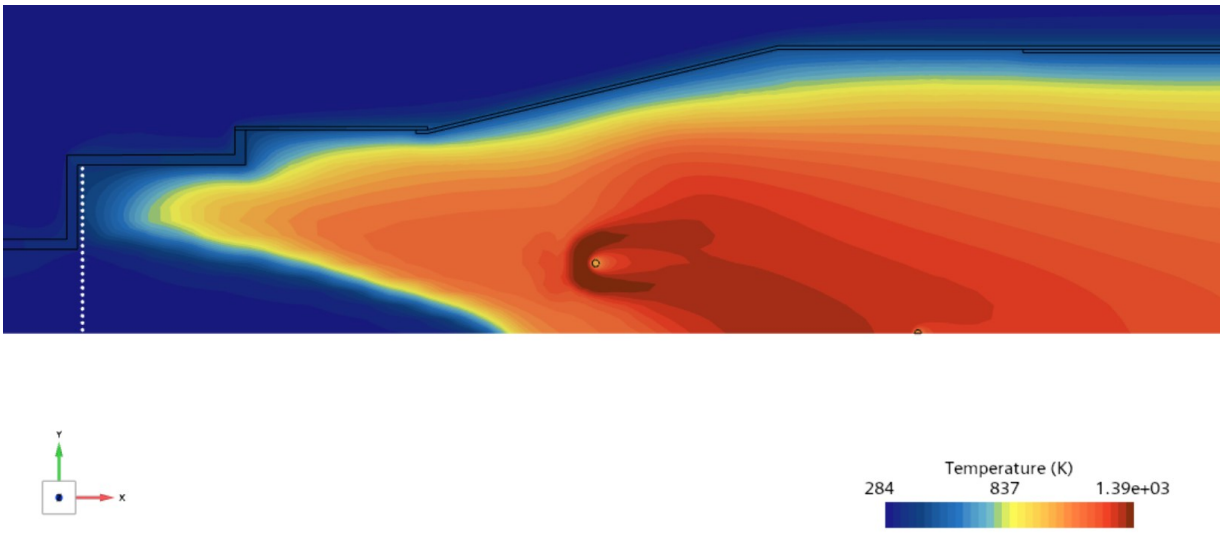


Figura 5.11 - Caso Bombola 1: campo di temperatura nel dominio reagente.

La scena in figura evidenzia una fiamma meno intensa, con un massimo di temperatura dell'ordine di $1{,}38\times10^{3}$ K e una regione calda più diffusa rispetto ai casi prossimi alla stechiometria. Il comportamento è coerente con l'elevato eccesso d'aria e con la minore LFS, che riducono la reattività complessiva della miscela. La composizione del syngas contribuisce a determinare tale LFS e quindi la capacità del fronte di propagarsi contro il flusso.

Specie	**Sperimentale**	**CFD**	**Unità**
O_2	8,036	7,112	%vol
CO_2	12,531	10,402	%vol
CO	45,3	13,8	ppm
NO	7,0	0,39	ppm

Tabella 5.14 - Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso Bombola 1.

La Tabella 5.14 mostra che, nel caso Bombola 1, l'O_2 presenta uno scarto più marcato rispetto agli altri punti operativi e la CO_2 rimane sottostimata. Il CO è uno dei pochi casi nei

quali la simulazione restituisce ancora una concentrazione numerica apprezzabile, pur inferiore al valore sperimentale. Anche il NO risulta fortemente sottostimato, confermando che in questa condizione molto magra la previsione delle specie minoritarie rimane particolarmente critica.

5.7.4 Bombola 2

Bombola 2 rappresenta la condizione più vicina alla stechiometria, con λ prossimo a 1,10, ed è caratterizzata dalla maggiore Laminar Flame Speed dell'insieme attualmente analizzato, circa 0,375 m/s. L'O_2 numerico risulta quasi coincidente con il dato sperimentale, coerentemente con la ricostruzione del punto operativo.

Specie	Mass fraction	Specie	Mass fraction
H_2	0,014564	N_2	0,539965
CH_4	0,014483	CO	0,234938
CO_2	0,196051	H_2O	0
NH_3	0	Ar	0
NO	0	O_2	0
Portata totale miscela [g/s]	1,133	Velocity Inlet [m/s]	2,148

Tabella 5.15 - Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Bombola 2. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet.

La Tabella 5.15 conferma che la composizione del syngas è sostanzialmente la stessa di Bombola 1 e Bombola 0.1. La differenza principale risiede quindi nel punto operativo: con φ≈0,909, molto più vicino alla stechiometria, la stessa miscela raggiunge una LFS di circa 0,375 m/s, la più elevata dell'intero set considerato. Il confronto mostra in modo particolarmente chiaro come, a composizione del combustibile pressoché invariata, il rapporto aria-combustibile possa modificare fortemente la reattività e quindi la compattezza e l'intensità della regione di fiamma.

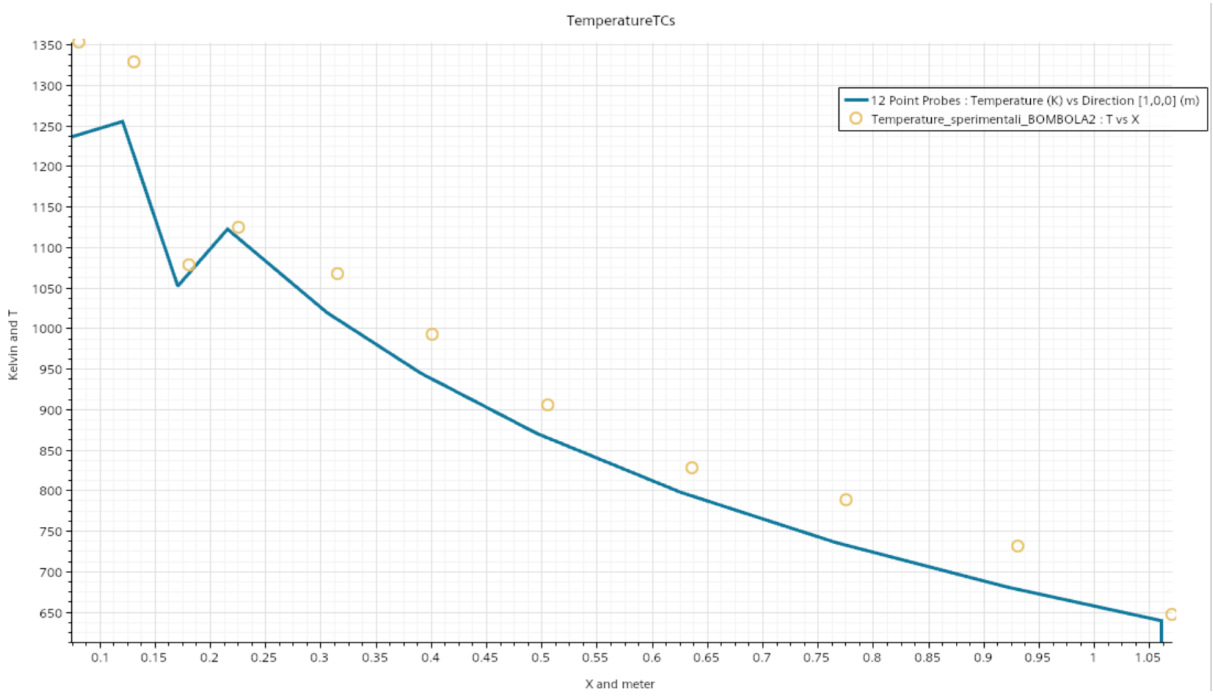


Figura 5.12 - Caso Bombola 2: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie.

Il profilo evidenzia una sottostima sistematica delle temperature sperimentali lungo gran parte del bruciatore, nonostante la corretta riproduzione del loro decadimento assiale. Tale risultato mostra che l'elevata reattività locale della miscela non si traduce automaticamente in un accordo quantitativo del profilo termico misurato dalle termocoppie.

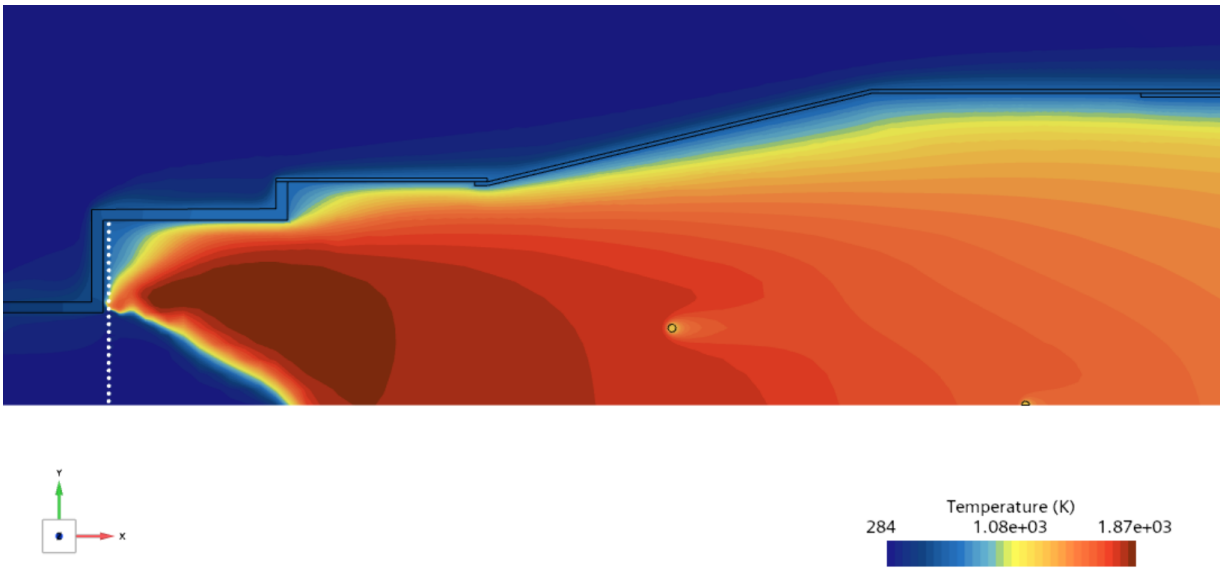


Figura 5.13 - Caso Bombola 2: campo di temperatura nel dominio reagente.

Il campo numerico presenta la regione reagente più intensa tra i casi qui confrontati, con temperature massime prossime a $1{,}87\times10^{3}$ K. La zona più calda si forma immediatamente a valle della rete ed è relativamente compatta nella regione iniziale. La combinazione tra λ vicino all'unità e la LFS elevata indica una miscela fortemente reattiva: il rilascio termico avviene quindi rapidamente dopo l'ingresso nel bruciatore e prevale localmente sull'effetto di trascinamento del flusso.

Specie	**Sperimentale**	**CFD**	**Unità**
O_2	1,022	1,040	%vol
CO_2	11,131	15,051	%vol
CO	≈0	≈0	ppm
NO	15,0	3,97	ppm

Tabella 5.16 - Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso Bombola 2.

Come sintetizzato in Tabella 5.16, Bombola 2 è il caso con l'accordo migliore sull'O_2, mentre la CO_2 costituisce l'anomalia principale poiché risulta sovrastimata. Il CO è

sostanzialmente nullo sia sperimentalmente sia numericamente. Il NO rimane invece inferiore alla misura, pur mantenendosi nello stesso ordine di grandezza. Il caso evidenzia quindi una buona ricostruzione del punto operativo globale, ma una ripartizione non perfetta tra rilascio termico e formazione delle specie minoritarie.

5.7.5 Bombola 0.1

Bombola 0.1 occupa una posizione intermedia, con λ prossimo a 1,50 e LFS di circa 0,228 m/s. L'accordo sull'ossigeno usato per la calibrazione è elevato, mentre il profilo termico mostra una prevalente sottostima e la CO_2 risulta inferiore alla misura.

Specie	**Mass fraction**	**Specie**	**Mass fraction**
H_2	0,014538	N_2	0,540563
CH_4	0,014453	CO	0,234577
CO_2	0,195869	H_2O	0
NH_3	0	Ar	0
NO	0	O_2	0
Portata totale miscela [g/s]	0,705	Velocity Inlet [m/s]	1,322

Tabella 5.17 - Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Bombola 0.1. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet.

Anche per Bombola 0.1 la composizione del syngas, riportata in Tabella 5.17, coincide sostanzialmente con quella degli altri casi Bombola. La condizione intermedia di $\varphi \approx 0{,}667$ determina però una LFS di circa 0,228 m/s, compresa tra i valori di Bombola 1 e Bombola 2. La minore portata totale e la Velocity Inlet di circa 1,32 m/s concorrono inoltre a definire un equilibrio tra propagazione e trasporto convettivo differente dagli altri due casi, coerente con un campo termico di intensità intermedia.

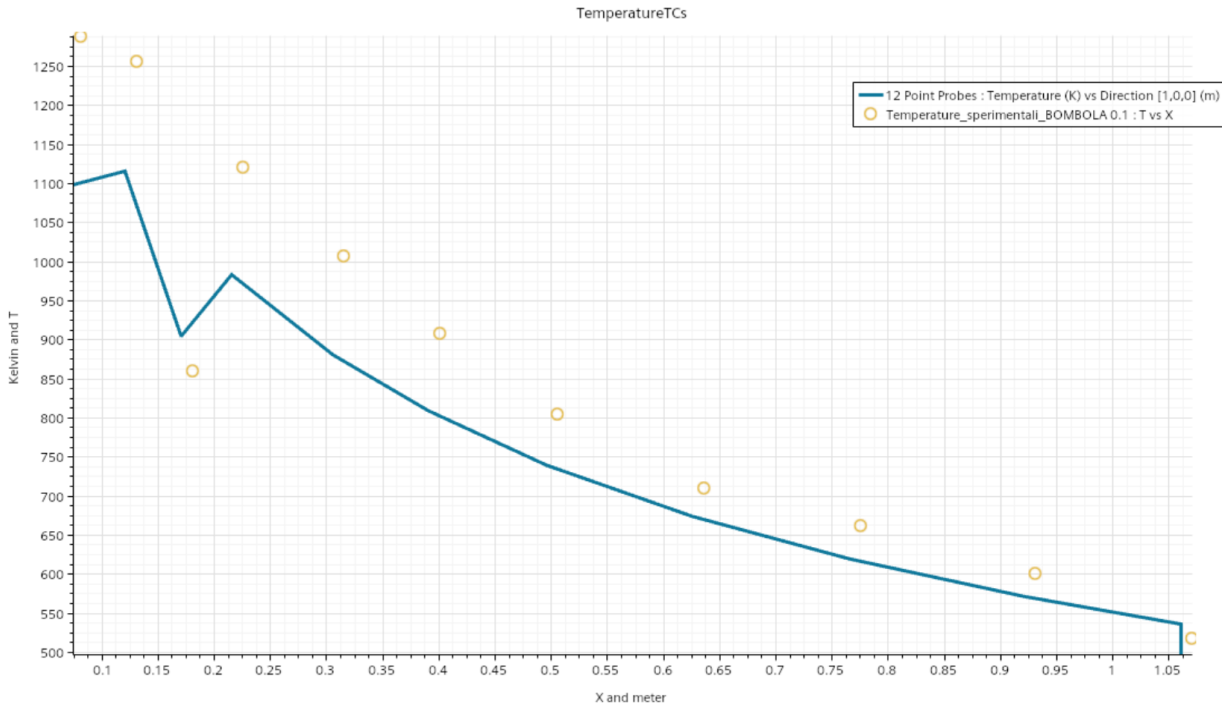


Figura 5.14 - Caso Bombola 0.1: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie.

La sottostima è particolarmente evidente nella prima parte del bruciatore e rimane presente lungo gran parte del profilo. Anche qui il modello riproduce comunque il carattere monotono del raffreddamento a valle della regione iniziale, mantenendo quindi una corretta descrizione qualitativa della distribuzione assiale.

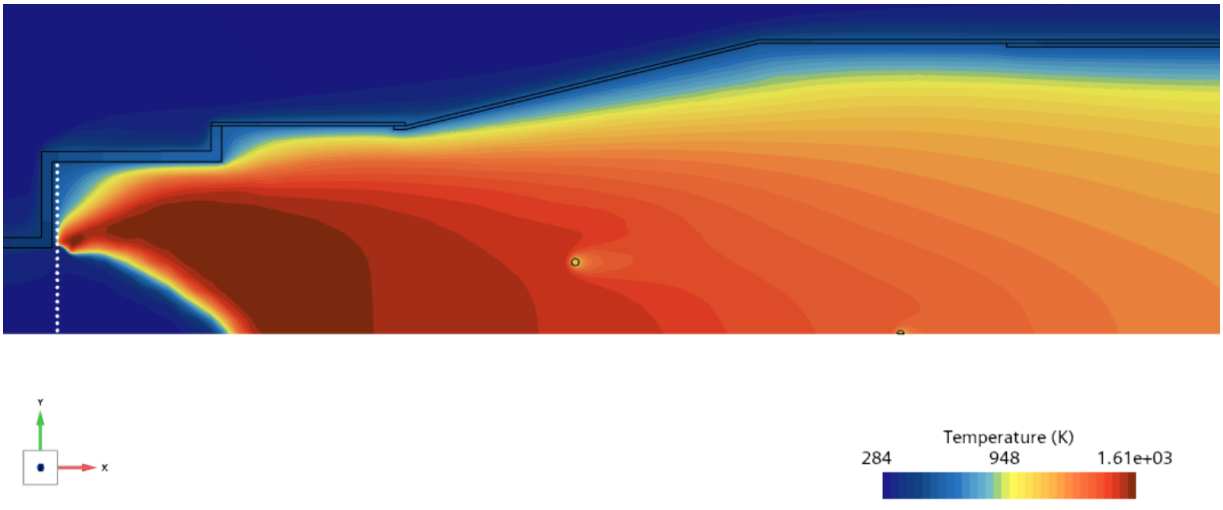


Figura 5.15 - Caso Bombola 0.1: campo di temperatura nel dominio reagente.

La scena mostra una fiamma stabilizzata immediatamente a valle della rete, con un nucleo caldo ben definito e un massimo di temperatura prossimo a $1{,}63\times10^{3}$ K. Il comportamento è intermedio tra Bombola 1 e Bombola 2 anche dal punto di vista della reattività: la LFS è maggiore rispetto alla condizione più magra, ma inferiore a quella del caso prossimo alla stechiometria. La composizione del syngas e il valore di λ concorrono quindi a produrre una fiamma più intensa di Bombola 1 ma meno estrema di Bombola 2.

Specie	**Sperimentale**	**CFD**	**Unità**
O_2	4,314	4,280	%vol
CO_2	16,126	12,447	%vol
CO	30,7	≈0	ppm
NO	19,84	3,19	ppm

Tabella 5.18 - Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso Bombola 0.1.

La Tabella 5.18 mostra che Bombola 0.1 presenta un ottimo accordo sull'O_2, coerente con la calibrazione del rapporto aria-combustibile, ma una chiara sottostima della CO_2. Il CO numerico è quasi nullo rispetto alla misura sperimentale e viene quindi considerato come dato complementare. Anche il NO risulta sottostimato, a conferma della difficoltà di riprodurre quantitativamente le specie azotate senza una caratterizzazione ancora più dettagliata del combustibile.

Capitolo 6 - Conclusioni

6.1 Valutazione complessiva del modello

L'analisi congiunta delle differenti condizioni permette di individuare con maggiore chiarezza sia i punti di forza sia le limitazioni residue del modello.

La ricostruzione del rapporto aria-combustibile attraverso l'ossigeno residuo consente di definire condizioni operative plausibili nonostante l'incertezza sperimentale sulle portate. L'O2 svolge quindi il ruolo di vincolo per il punto operativo, mentre la valutazione predittiva viene trasferita sulle altre grandezze.

La CO2 presenta un accordo variabile e una prevalente sottostima, ma non un bias universale: Bombola 2 mostra infatti una sovrastima significativa. La risposta dipende quindi dalla specifica condizione e non appare correggibile mediante una singola modifica globale.

La previsione del CO mostra differenze rilevanti rispetto alle misure, ma il confronto deve essere interpretato alla luce delle caratteristiche dell'apparato reale. Tar, particolato e depositi non sono rappresentati nella simulazione della fase gassosa e possono contribuire alla presenza di CO sperimentale o modificare localmente il completamento della combustione. Per questo motivo il CO non è stato utilizzato come principale grandezza di calibrazione o validazione quantitativa.

Il campo termico viene riprodotto qualitativamente in modo coerente, mostrando la formazione della regione calda nella prima parte del bruciatore e il successivo raffreddamento. Le differenze quantitative non sono però uniformi tra i casi e rendono fondamentale il completamento del confronto con la temperatura esterna di parete.

Il NO rappresenta la grandezza più sensibile all’interazione tra modellazione numerica e incertezza sperimentale. La previsione dipende dalla discretizzazione della regione di fiamma e dalla caratterizzazione delle specie azotate in ingresso. Il confronto tra le simulazioni preliminari e le configurazioni finali, che includono il contributo di NO rilevato a valle del gassificatore, mostra che una variazione limitata della composizione minoritaria del syngas può modificare

radicalmente il risultato senza alterare significativamente il bilancio globale della combustione. [11], [12]

Il valore metodologico risiede nella costruzione di un framework capace di mettere in relazione composizione del combustibile, rapporto aria-combustibile, propagazione turbolenta della fiamma, chimica dettagliata, campo termico interno, conduzione nella struttura, scambio con l'ambiente e formazione delle specie inquinanti.

La maggiore complessità consente inoltre di individuare con maggiore chiarezza l'origine delle diverse incertezze: il rapporto A/F viene vincolato attraverso l'O2; la CO2 verifica il bilancio delle specie carboniose; il CO evidenzia il limite del confronto tra fase gassosa numerica e apparato reale contenente tar e particolato; le temperature interne ed esterne verificano il bilancio energetico; il NO mette in evidenza la sensibilità alle condizioni locali della fiamma e alla composizione azotata del syngas.

6.2 Sintesi dei risultati e sviluppi della validazione

Il confronto svolto sulle differenti condizioni operative mostra che la validazione di un modello CFD di combustione di syngas richiede una chiara separazione tra calibrazione, verifica numerica e confronto con le misure. L'ossigeno residuo viene utilizzato per identificare valori plausibili di lambda e non rappresenta quindi una grandezza completamente indipendente di validazione; temperature, CO2 e specie azotate costituiscono invece i principali indicatori della capacità del modello di riprodurre fenomeni non direttamente imposti durante la ricostruzione del punto operativo.

La sensibilità alla mesh è limitata per le specie maggioritarie ma più pronunciata per il NO, mentre il confronto sul CO deve essere mantenuto su un piano complementare perché il modello non include tar, particolato e depositi presenti nel sistema reale. La forte risposta del NO all'introduzione di specie azotate in ingresso rappresenta una delle indicazioni più rilevanti emerse dall'attività e mostra che la capacità predittiva sugli NOx dipende sia dalla modellazione della fiamma sia dalla qualità della caratterizzazione sperimentale del syngas.

Il completamento della validazione della temperatura esterna permetterà di trasformare l’attuale analisi dei trend in un confronto quantitativo ancora più completo.

Elenco delle figure

1.1 Schemi di principio di gassificatori a letto fisso: (a) configurazione updraft; (b) configurazione crossdraft. 11
1.2 Esempi di possibili percorsi di valorizzazione chimica del syngas. 12
2.1 Vista complessiva del set-up sperimentale utilizzato per la produzione, il trattamento e la combustione del syngas.....17
2.2 Dettaglio del Femto Gasifier installato sul banco sperimentale.....18
2.3 Dettaglio del ciclone impiegato per la separazione del particolato dalla corrente di syngas. 20
2.4 Operazione di campionamento del syngas dalla linea sperimentale.....21
2.5 Dettaglio della rete metallica installata in prossimità dell'ingresso del bruciatore. 23
2.6 Bruciatore sperimentale e disposizione delle termocoppie lungo la parete. 24
2.7 Visualizzazione della Fiamma. 25
2.8 Acquisizione termografica della superficie esterna del bruciatore.....26
2.9 Analizzatore portatile Testo 350 e sonda impiegati per la caratterizzazione dei prodotti della combustione. 27
4.1 Modello tridimensionale della sezione di miscelazione aria-syngas 55
4.2 Distribuzione della frazione massica di CO: (a) vista longitudinale; (b) sezione trasversale a valle 57
4.3 Linee di corrente e modulo della velocità nel modello assialsimmetrico; caso di gennaio mostrato a titolo rappresentativo. 59
4.4 Disegno tecnico del bruciatore utilizzato come riferimento per la ricostruzione geometrica del dominio numerico. 60
4.5 Suddivisione dei domini distinti mediante colorazione diversa.....61
4.6 Dettaglio della mesh nella regione iniziale del modello assialsimmetrico, con raffinamento in prossimità delle pareti, della rete e del dominio reagente.....63
4.7 Raffinamento locale della mesh attorno a una termocoppia modellata come corpo solido. 64
4.8 Posizionamento obliquo del Temperature Ignitor nel dominio reagente del bruciatore. 70
4.9 Schema concettuale del dominio computazionale e delle principali condizioni al contorno e grandezze monitorate. 75
4.10 Esempio di andamento dei monitor delle specie durante la convergenza della soluzione; caso di gennaio mostrato a titolo rappresentativo. 78
5.1 Variazione della concentrazione di NO allo scarico al variare della discretizzazione: bulk 2 mm, bulk 1 mm e bulk 1 mm con raffinamento locale a 0,5 mm.....84
5.2 Confronto preliminare tra temperatura numerica delle pareti e temperatura esterna sperimentale per il caso di gennaio.....87
5.3 Confronto tra concentrazione volumetrica di CO_2 sperimentale e numerica per i casi analizzati con mesh di riferimento da 1 mm.....90
5.4 Deposito di particolato osservato sulla rete metallica durante una prova qualitativa con tubo di vetro. 91
5.5 Distribuzione della frazione molare di NO nel dominio reagente; caso di gennaio mostrato a titolo rappresentativo.....94
5.6 Caso di novembre: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie.....98
5.7 Caso di novembre: campo di temperatura nel dominio reagente. 99
5.8 Caso di gennaio: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie.....101
5.9 Caso di gennaio: campo di temperatura nel dominio reagente. 102
5.10 Caso Bombola 1: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie.....104
5.11 Caso Bombola 1: campo di temperatura nel dominio reagente. 105

5.12 Caso Bombola 2: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie. 107
5.13 Caso Bombola 2: campo di temperatura nel dominio reagente. 108
5.14 Caso Bombola 0.1: confronto tra temperature numeriche e sperimentali in corrispondenza delle termocoppie. 110
5.15 Caso Bombola 0.1: campo di temperatura nel dominio reagente 110

Elenco delle tabelle

4.1 Principali parametri della mesh del modello tridimensionale di mixing.....56
4.2 Parametri principali delle operazioni di mesh del modello finale.....63
4.3 Configurazioni considerate nello studio sistematico di sensibilità alla mesh.....65
4.4 Organizzazione dei principali Physics Continua.....65
4.5 Principali proprietà di trasporto del continuum Burner.....67
4.6 Coefficienti utilizzati nella correlazione di Peters.....69
4.7 Impostazioni del Temperature Ignitor.....70
4.8 Proprietà radiative superficiali utilizzate nel modello 71
4.9 Proprietà termofisiche del materiale UNSS30200 72
4.10 Principali proprietà del continuum Ambiente.....73
5.1 Principali condizioni operative attualmente considerate. 81
5.2 Esempio della sensibilità alla mesh per il caso di novembre. 82
5.3 Confronto attuale dell'ossigeno residuo con la mesh di riferimento da 1 mm.....88
5.4 Confronto attuale della CO2 con la mesh di riferimento da 1 mm.....89
5.5 Confronto indicativo del CO allo scarico. 91
5.6 Confronto attuale del NO nella configurazione di riferimento da 1 mm.....93
5.7 Confronto tra NO sperimentale e numerico per le configurazioni finali di novembre e gennaio, con contributo di NO già presente nel syngas. 95
5.8 Principali parametri dei casi analizzati.....96
5.9 Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Novembre. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet. 97
5.10 Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso novembre.....99
5.11 Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Gennaio. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet. 100
5.12 Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso gennaio.....102
5.13 Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Bombola 1. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet. 103
5.14 Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso Bombola 1.....105
5.15 Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Bombola 2. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet. 106
5.16 Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso Bombola 2.....108
5.17 Composizione massica del syngas e condizioni di ingresso per il caso Bombola 0.1. Le frazioni massiche si riferiscono al solo combustibile; la portata totale è quella della miscela aria-syngas premiscelata all'inlet. 109
5.18 Confronto tra emissioni sperimentali e numeriche per il caso Bombola 0.1.....111

Bibliografia

[1] Y. A. Situmorang, Z. Zhao, A. Yoshida, A. Abudula, and G. Guan, "Small-scale biomass gasification systems for power generation (<200 kW class): A review," Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 117, art. 109486, 2020. doi: 10.1016/j.rser.2019.109486.

[2] P. J. Woolcock and R. C. Brown, "A review of cleaning technologies for biomass-derived syngas," Biomass and Bioenergy, vol. 52, pp. 54-84, 2013. doi: 10.1016/j.biombioe.2013.02.036.

[3] M. Puglia, N. Morselli, F. Ottani, S. Pedrazzi, P. Tartarini, and G. Allesina, "A preliminary evaluation of different residual biomass potential for energy conversion in a micro-scale downdraft gasifier," Sustainable Energy Technologies and Assessments, vol. 57, art. 103224, 2023. doi: 10.1016/j.seta.2023.103224.

[4] F. Patuzzi et al., "State-of-the-art of small-scale biomass gasification systems: An extensive and unique monitoring review," Energy, vol. 223, art. 120039, 2021. doi: 10.1016/j.energy.2021.120039.

[5] Y. Gao et al., "Syngas Production from Biomass Gasification: Influences of Feedstock Properties, Reactor Type, and Reaction Parameters," ACS Omega, vol. 8, no. 35, pp. 31620-31631, 2023. doi: 10.1021/acsomega.3c03050.

[6] G. Trupia, "Analisi numerico-sperimentale delle emissioni di un bruciatore di syngas prodotto da biomassa," Tesi di Laurea Magistrale in Ingegneria del Veicolo, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia, Anno Accademico 2023-2024.

[7] S. Daniele, P. Jansohn, J. Mantzaras, and K. Boulouchos, "Turbulent flame speed for syngas at gas turbine relevant conditions," Proceedings of the Combustion Institute, vol. 33, pp. 2937-2944, 2011. doi: 10.1016/j.proci.2010.05.057.

[8] D. R. Noble, Q. Zhang, A. Shareef, J. Tootle, A. Meyers, and T. Lieuwen, "Syngas mixture composition effects upon flashback and blowout," in Proceedings of ASME Turbo Expo 2006: Power for Land, Sea and Air, Barcelona, Spain, 2006, paper GT2006-90470.

[9] M. Chaos and F. L. Dryer, "Syngas combustion kinetics and applications," Combustion Science and Technology, vol. 180, no. 6, pp. 1053-1096, 2008.

[10] H. Wang, F. Lei, W. Shao, Z. Zhang, Y. Liu, and Y. Xiao, "Experimental and numerical studies of pressure effects on syngas combustor emissions," Applied Thermal Engineering, vol. 102, pp. 318-328, 2016. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2016.03.026.

[11] N. Asgari, S. F. Ahmed, T. I. Farouk, and B. Padak, "NOx formation in post-flame gases from syngas/air combustion at atmospheric pressure," International Journal of Hydrogen Energy, vol. 42, pp. 24569-24579, 2017. doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.017.

[12] J. M. Joo, S. Lee, and O. C. Kwon, "Effects of ammonia substitution on combustion stability limits and NOx emissions of premixed hydrogen-air flames," International Journal of Hydrogen Energy, vol. 37, pp. 6933-6941, 2012. doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.01.059.

[13] M. Frenklach, G. P. Smith, D. M. Golden, M. Goldenberg, and C. T. Bowman, "GRI-Mech 2.11: A detailed chemical reaction mechanism for methane combustion," Gas Research Institute, 1995.

[14] B. F. Magnussen and B. H. Hjertager, "On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion," Symposium (International) on Combustion, vol. 16, no. 1, pp. 719-729, 1977. doi: 10.1016/S0082-0784(77)80366-4.

[15] B. F. Magnussen, "On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow," in 19th Aerospace Sciences Meeting, 1981, paper AIAA-81-0042. doi: 10.2514/6.1981-42.

[16] N. Peters, Turbulent Combustion. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000.

[17] S. B. Pope, Turbulent Flows. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000.

[18] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, 2nd ed. Harlow, UK: Pearson Education, 2007.

[19] M. F. Modest, Radiative Heat Transfer, 3rd ed. Oxford, UK: Academic Press, 2013.

[20] M. Bidi, R. Hosseini, and M. R. H. Nobari, "Numerical analysis of methane-air combustion considering radiation effect," Energy Conversion and Management, vol. 49, no. 12, pp. 3634-3647, 2008. doi: 10.1016/j.enconman.2008.07.010.

[21] Y. Halouane and A. Dehbi, "CFD simulations of premixed hydrogen combustion using the Eddy Dissipation and the Turbulent Flame Closure models," International Journal of Hydrogen Energy, vol. 42, no. 34, pp. 21990-22004, 2017. doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.07.075.