



**Dipartimento di Meccanica e Aeronautica  
Università di Roma “La Sapienza”**

**Dottorato di Ricerca in “Meccanica Teorica e Applicata”  
XVIII Ciclo  
*Anno 2004/2005***

**MODELLISTICA DELLA COMBUSTIONE  
IN REGIME SUPERSONICO**

**Dottoranda: Antonella Ingenito**

**Docente Guida: Prof. Claudio Bruno**

*Dedicata alla mia piccola Chiara,  
la cui esistenza riempie e sostiene tutto il mio essere*

*“Il mistero della vita è ciò che si vede e non l’invisibile”  
(Oscar Wilde)*

# SINTESI

Obiettivo del lavoro di questo dottorato è lo sviluppo di un modello di combustione per flussi supersonici reattivi con particolare attenzione agli effetti della comprimibilità sulla cinetica chimica, sul mescolamento e sull'accoppiamento tra la turbolenza e la combustione. Gli attuali modelli di sottogriglia sviluppati per simulazioni LES di flussi subsonici reattivi e adattati a combustione supersonica, infatti, non sono in grado di predire i risultati sperimentali, come ad es. l'ancoraggio di fiamma. Ciò è dovuto principalmente ad una scarsa conoscenza della fisica della fiamma in regime supersonico. Nonostante i primi studi sulla combustione supersonica iniziarono più di quaranta anni fa, ancora ben poco c'è in letteratura. Dal presente lavoro sono emersi aspetti fondamentali e fino ad ora totalmente ignoti circa l'effetto della comprimibilità sia sulla cinetica chimica che sul mescolamento e la cui assenza nei modelli di sottogriglia attualmente in uso spiega, in parte, la discordanza dei risultati ottenuti dalle simulazioni numeriche e quelli sperimentali. Nel modello di combustione sviluppato nel corso del lavoro di dottorato (ISCM) sono considerati tutti questi effetti. I risultati ottenuti dalle simulazioni sperimentali con il presente modello, nonostante una griglia non molto fine, hanno confermato i risultati teorici circa la fisica della fiamma e il mescolamento e validato il modello. A differenza sia del modello di Smagorinsky-Lilly che del Fractal Model, infatti, si osservano sia la presenza di strutture vorticosi di tipo streamwise che l'ancoraggio della fiamma.

Gli argomenti svolti sono così riassumibili:

analisi della comprimibilità a livello molecolare: dalla teoria cinetica dei gas all'osservazione degli effetti delle velocità supersoniche sul moto molecolare (Cap. II);

analisi della comprimibilità a livello macroscopico: effetti della comprimibilità sul mescolamento e sulla combustione tramite lo studio delle equazioni di Navier Stokes adimensionalizzate (Cap III);

considerazioni sulla turbolenza in regime supersonico: generazione e trasporto della vorticità, elicità del flusso e intensità della turbolenza (Cap. III);

analisi del regime di fiamma in flussi supersonici attraverso una valutazione dell'accoppiamento tra tempi caratteristici (Cap.V);

formulazione di un modello di sottogriglia per gli sforzi di Reynolds e per il rateo di reazione chimica per combustione supersonica (Cap. VI);

simulazioni RANS e LES tramite codice CFD e analisi dei risultati confrontando i diversi modelli di sottogriglia con i risultati sperimentali (Cap. VII);

analisi della cinetica chimica dell'idrogeno, degli idrocarburi (metanolo, cherosene e metano) e dei prodotti di reforming degli idrocarburi, e confronto delle prestazioni ottenibili con tali combustibili (Cap. VIII);

conclusioni e sviluppi successivi (Cap IX).

## RINGRAZIAMENTI

Un sentito ringraziamento per il prezioso supporto scientifico e tutta la mia stima vanno al mio advisor, il Prof. Claudio Bruno, dal cui sconfinato sapere ho attinto per lo sviluppo delle mie ricerche.

Un grazie va anche al CIRA (Centro Italiano Ricerca Aerospaziale) nella persona dell'Ing. Giuliano Ranuzzi per lo scambio di informazioni e interessamento mostrato a questo lavoro.

La mia profonda riconoscenza, inoltre, va al Dr. Eugenio Giacomazzi per il suo prezioso contributo nell'avermi fornito gran parte del materiale bibliografico da me utilizzato, per i suoi preziosi consigli e suggerimenti di carattere scientifico e per avermi svelato, anche con l'aiuto dei miei colleghi Alessio Del Rossi e Giusy De Flora tutti i segreti del Fluent. Ringrazio inoltre la mia compagna di scrivania, Giusy De Flora, per il suo grande e paziente aiuto nell'impaginazione dell'intera tesi; il mio collega Domenico Simone per aver provveduto a risolvere tutti i problemi con il computer. Un sincero ringraziamento va inoltre al Dr. Sergio Pirozzoli per le interessanti chiacchierate sulla vorticità e sulla turbolenza.

Un caloroso grazie va anche a mio marito aver sempre creduto in me e per avermi incoraggiata ad andare avanti. Un ringraziamento speciale va ai miei genitori che mi hanno insegnato a perseguire sempre i miei obiettivi, e ai miei fratelli, Anna, Francesco e Stefano per essermi stati sempre vicini con il loro affetto. Ai miei suoceri e ai miei cognati Federica e Sergio va il mio sincero ringraziamento per aver sempre badato con amore e cura alla mia bambina.

Un grazie, inoltre, va alla mia inseparabile amica e compagna di studi Elisa per il suo pronto e prezioso supporto morale.

In ultimo, ma più grande di tutti va il mio grazie alla mia piccola scricciola, Chiara, che è stata un grande stimolo a lavorare arduamente senza arrendermi di fronte alle difficoltà e per la quale ho cercato di far fruttare al meglio ogni minuto del mio lavoro.

# INDICE

SINTESI.....	3
RINGRAZIAMENTI.....	4
INDICE.....	5
INDICE DELLE FIGURE.....	8
CAPITOLO I.....	11
I. SCRAMJET: PANORAMICA GENERALE.....	11
I. Legenda dei Simboli.....	11
<i>Simboli dell'alfabeto inglese</i> .....	11
<i>Simboli dell'alfabeto greco</i> .....	11
I.1 INTRODUZIONE.....	11
I.2 PROFILO STORICO DEL VOLO IPERSONICO.....	12
I.3 DESCRIZIONE E SCHEMATIZZAZIONE DEL MOTORE.....	19
CAPITOLO II.....	21
II. COMPRIMIBILITÀ DI UN FLUIDO.....	21
II. Legenda dei Simboli.....	21
<i>Simboli dell'alfabeto inglese</i> .....	21
<i>Simboli dell'alfabeto greco</i> .....	21
<i>Pedici</i> .....	22
II.1 INTRODUZIONE.....	22
II.2 CENNI SULLA TEORIA CINETICA DEI GAS.....	23
II.3 EFFETTI DELLA COMPRIMIBILITÀ SU SCALA MOLECOLARE E MACROSCOPICA.....	24
II.4 EFFETTI DELLA COMPRIMIBILITÀ SUL MESCOLOMENTO.....	25
II.5 EFFETTI DELLA COMPRIMIBILITÀ SULLA COMBUSTIONE.....	27
CAPITOLO III.....	33
III. ANALISI DELLE EQUAZIONI DI NAVIER STOKES.....	33
III. Legenda dei Simboli.....	33
<i>Simboli dell'alfabeto inglese</i> .....	33
<i>Simboli dell'alfabeto greco</i> .....	34
<i>Apici e Pedici</i> .....	34
III.1 EQUAZIONI DI NAVIER STOKES.....	35
III.1.1 Equazioni di conservazione della massa.....	35
III.1.2 Equazioni di bilancio della quantità di moto.....	35
III.1.3 Equazioni di conservazione delle specie.....	37
III.1.4 Equazione di conservazione dell'energia.....	37
III.2 ADIMENSIONALIZZAZIONE DELLE EQUAZIONI DI NAVIER STOKES.....	42
III.2.1 Equazione adimensionalizzata della conservazione della massa.....	42
III.2.2 Equazione adimensionalizzata del bilancio della quantità di moto.....	43
III.2.3 Equazione adimensionalizzata della conservazione dell'energia.....	43
III.2.4 Equazione adimensionalizzata della conservazione delle specie.....	44
III.2.5 Equazione di stato adimensionalizzata.....	44
CAPITOLO IV.....	46
IV. FLUSSI TURBOLENTI COMPRIMIBILI.....	46
IV. Legenda dei Simboli.....	46
<i>Simboli dell'alfabeto inglese</i> .....	46
<i>Simboli dell'alfabeto greco</i> .....	46
<i>Apici e Pedici</i> .....	47
IV.1 ASPETTI DELLA TURBOLENZA.....	48
IV.2 RELAZIONE TRA VORTICITÀ E TURBOLENZA.....	48
IV.3 EQUAZIONE DI TRASPORTO DELLA VORTICITÀ.....	50
IV.4 ADIMENSIONALIZZAZIONE DELL'EQUAZIONE DI TRASPORTO DELLA VORTICITÀ PER FLUSSI INCOMPRIMIBILI.....	52
IV.5 EFFETTI DEL $Ma$ SULLA TURBOLENZA.....	52
IV.5.1 Equazione di conservazione della massa.....	53
IV.5.2 Equazione della quantità di moto.....	54
IV.5.3 Equazione della vorticità.....	56
IV.5.4 Equazione dell'elicità.....	57
CAPITOLO V.....	60

V.	LA COMBUSTIONE SUPERSONICA .....	60
V.	Legenda dei Simboli .....	60
	<i>Simboli dell'alfabeto inglese</i> .....	60
	<i>Simboli dell'alfabeto greco</i> .....	60
	<i>Pedici</i> .....	61
V.1	INTRODUZIONE .....	62
V.2	FLUSSI SUPERSONICI: ANALISI MACROSCOPICA DELLA COMBUSTIONE.....	62
V.3	ANALISI DELLA COMBUSTIONE TRAMITE NAVIER STOKES .....	64
V.4	ANALISI DEI TEMPI CARATTERISTICI.....	68
V.4.1	Combustione ad accensione comandata .....	68
V.4.2	Combustione Diesel.....	69
V.4.3	Combustione Supersonica.....	70
	CAPITOLO VI.....	73
VI.	MODELLO DI SOTTOGRIGLIA ISCM .....	73
VI.	Legenda dei Simboli.....	73
	<i>Simboli dell'alfabeto inglese</i> .....	73
	<i>Simboli dell'alfabeto greco</i> .....	74
	<i>Apici e Pedici</i> .....	74
VI.1	INTRODUZIONE .....	74
VI.2	LARGE EDDY SIMULATION .....	76
VI.3	MODELLO DI SOTTOGRIGLIA PER IL MESCOLOMENTO TURBOLENTO .....	78
VI.4	MODELLIZZAZIONE DELL'ENERGIA CINETICA DI SOTTOGRIGLIA .....	80
VI.4.1	Modellizzazione del termine acustico.....	81
VI.4.2	Modellizzazione del termine di inerzia termica.....	81
VI.4.3	Modellizzazione del trasporto di calore per convezione .....	82
VI.4.4	Modellizzazione del trasporto di calore per conduzione.....	83
VI.4.5	Modellizzazione del trasporto di flusso di calore per diffusione.....	84
VI.4.6	Modellizzazione del trasporto di flusso di calore per effetto Dufour .....	85
VI.4.7	Modellizzazione del lavoro compiuto dalle forze esterne .....	85
VI.4.8	Modellizzazione del lavoro dei termini viscosi.....	86
VI.4.9	Modellizzazione del volume del reattore .....	89
VI.4.10	Modellizzazione delle velocità radiale e tangenziale .....	90
VI.4.11	Modellizzazione della temperatura, pressione e specie chimiche nel reattore di sottogriglia.....	92
VI.5	MODELLO PER LA CINETICA CHIMICA .....	94
VI.5.1	Modellizzazione del rateo di reazione in regime laminare .....	94
VI.5.2	Modellizzazione dell'accoppiamento tra combustione e turbolenza.....	99
VI.6	COMMENTI AL MODELLO DI SOTTOGRIGLIA .....	100
	CAPITOLO VII.....	104
VII.	SIMULAZIONI RANS E LES .....	104
VII.1	I CASO: COMBUSTIONE DI UN GETTO DI IDROGENO INIETTATO IN CROSS FLOW RISPETTO ALL'ARIA ENTRANTE.....	104
VII.1.1	Geometria della camera di combustione e condizioni esaminate .....	104
VII.1.2	Simulazioni RANS E LES con i modelli Smagorinsky-Lilly e Fractal Model .....	106
VII.1.3	Valutazione dell'effetto della variazione della viscosità turbolenta sul mescolamento.....	115
VII.2	CASO II: COMBUSTIONE DI UN GETTO DI IDROGENO INIETTATO A 30° RISPETTO ALL'ARIA ENTRANTE.....	123
VII.2.1	Geometria della camera di combustione e condizioni esaminate .....	123
VII.2.2	Simulazioni LES con il modello Smagorinsky-Lilly e il modello ISCM.....	125
	CAPITOLO VIII .....	137
VIII.	COMBUSTIONE DI COMBUSTIBILI ENDOTERMICI.....	137
	CAPITOLO IX .....	141
IX.	CONCLUSIONI.....	141
	APPENDICE A .....	143
A	ANALISI MACROSCOPICA DEL REGIME DI FIAMMA .....	143
	APPENDICE B .....	149
B	MODELLI DI CHIUSURA PER LA CHIMICA E I PROCESSI DI TRASPORTO .....	149
B.1	REYNOLDS AVERAGED NAVIER STOKES .....	150
B.1.1	Modello eddy viscosity .....	152
B.1.2	Modello a zero equazioni .....	153
B.1.3	Modello a due equazioni .....	153
B.1.4	Modelli per la chimica.....	154

<b>B.1.5</b>	<b>Conclusioni .....</b>	<b>156</b>
<b>B.2</b>	<b>LARGE EDDY SIMULATION .....</b>	<b>157</b>
<b>B.2.1</b>	<b>Modello eddy viscosity .....</b>	<b>158</b>
a)	Modello di Smagorinsky-Lilly .....	158
b)	Modello dinamico .....	159
<b>B.2.2</b>	<b>Modello di equilibrio.....</b>	<b>161</b>
<b>B.2.3</b>	<b>Modelli di combustione .....</b>	<b>162</b>
<b>BIBLIOGRAFIA</b>	<b>.....</b>	<b>165</b>

# INDICE DELLE FIGURE

Figura I.1 Riproduzione del disegno originale del primo brevetto di un aereo con motore a ramjet.....	12
Figura I.2 Leduc 010.....	13
Figura I.3 Griffon II.....	13
Figura I.4 Lockheed X7 .....	14
Figura I.5 X-15A-2 .....	14
Figura I.6 Particolare del Ramjet posizionato sull'X-15A-2 .....	15
Figura I.7 X-30 .....	16
Figura I.8 HyShot .....	17
Figura I.9 X43.....	17
Figura I.10 Fasi di decollo, distacco e volo dell'X43 .....	18
Figura I.11 Schizzo di un tipico motore scramjet.....	19
Figura II.1 Moto molecolare.....	24
Figura II.2 ASD-TDR-63-236 facility per studi di combustione supersonica .....	31
Figura II.3 Color Schlieren      Figura II.4 Fotografia a IR nella banda dell'H <sub>2</sub> O .....	32
Figura IV.1 Iniettori lobed plate mixers.....	55
Figura V.1 Ciclo Otto .....	69
Figura V.2 Ciclo Diesel.....	70
Figura V.3 Diagramma di Borghi .....	72
Figura VI.1 Schema del reattore .....	80
Figura VI.2 Andamento della costante all'indietro del meccanismo di Marinov.....	96
Figura VI.3 Ritardi d'accensione al variare di P      Figura VI.4 Ritardi d'accensione al variare di T.....	97
Figura VI.5 Temperature di fiamma al variare di P      Figura VI.6 Ritardi d'accensione al variare di f	98
Figura VI.7 Rapporto tra la dimensione caratteristica del combustore e quella della turbolenza.....	100
Figura VI.8 Rapporto tra la dimensione della cella e quella della turbolenza .....	101
Figura VI.9 Andamento del Re di cella e della velocità di fluttuazione al variare del Re di larga scala	101
Figura VI.10 Andamento della viscosità turbolenta di sottogriglia al variare del numero di Re .....	102
Figura VII.1 Sezioni XY e ZY dell'intero dominio computazionale.....	105
Figura VII.2 Campo medio di Y <sub>H2</sub> nel piano ZY centrale (RANS non reattiva) .....	107
Figura VII.3 Zoom del campo medio di temperature nel piano ZY all'altezza del gradino (RANS non reattiva) .....	107
Figura VII.4 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a X=015 m con i modelli Smagorinsky-Lilly e FM (caso non reattivo).....	108
Figura VII.5 Campo medio di Y <sub>H2</sub> all'uscita con il modello Smagorinsky Lilly (LES non reattiva).....	108
Figura VII.6 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a X=015 m con modello ISCM.....	109
Figura VII.7 Campo istantaneo di Y <sub>H2</sub> nel piano XY all'altezza del gradino con modello ISCM.....	109
Figura VII.8 Campo medio di Y <sub>H2</sub> all'uscita (LES reattiva).....	109
Figura VII.9 Campo istantaneo della Y <sub>H2</sub> nel piano XZ a Y = 0.1 m con modello ISCM.....	110
Figura VII.10 Vista tridimensionale di T nel piano XZ a Y = 0.1 m e Y = 0.38 m con modello ISCM.....	110
Figura VII.11 Campo medio di Temperatura sul piano XY all'altezza del gradino.....	111
Figura VII.12 Campo medio di Y <sub>H2O</sub> sul piano YZ a X=0.20 m .....	111
Figura VII.13 Campo istantaneo della T nel piano XY all'altezza del gradino con modello ISCM.....	111
Figura VII.14 Campo istantaneo della T nel piano XY all'altezza del gradino con modello ISCM.....	112
Figura VII.15 Campo istantaneo della P nel piano XY all'altezza del gradino con modello ISCM.....	112
Figura VII.16 Direct photo image in IC mode obtained by Takahashi .....	112
Figura VII.17 Zoom del campo medio di temperature nel piano ZY all'altezza del gradino	113
Figura VII.18 Post processing per la predizione di OH.....	113
Figura VII.19 Campo istantaneo della frazione massica di H <sub>2</sub> nel piano ZY a X=015 m con m <sub>t</sub> = 10 <sup>-4</sup> .....	115
Figura VII.20 Campo istantaneo di Y <sub>H2</sub> nel piano XY all'altezza del gradino con m <sub>t</sub> = 10 <sup>-4</sup> .....	115
Figura VII.21 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a X=015 m con m <sub>t</sub> = 10 <sup>-4</sup> .....	115



Figura VII.22 Campo istantaneo della Temperatura nel piano XY all'altezza del gradino con $m_t = 10^{-4}$ .....	116
Figura VII.23 Campo istantaneo della densità nel piano XY all'altezza del gradino con $m_t = 10^{-4}$ .....	116
Figura VII.24 Campo istantaneo della pressione nel piano ZY a $X=0.15$ m con $m_t = 10^{-4}$ .....	116
Figura VII.25 Vista tridimensionale di T nel piano XZ a $Y = 0.1$ m e $Y = 0.38$ m con $m_t = 10^{-4}$ .....	117
Figura VII.26 Vista della temperatura istantanea nel piano XZ a $Y = 0.1$ m e $Y = 0.38$ m con $m_t = 10^{-4}$ .....	117
Figura VII.27 Campo istantaneo della frazione massica di $H_2$ nel piano ZY a $X=0.15$ m con $m_t = 10^{-3}$ .....	118
Figura VII.28 Campo istantaneo di $Y_{H_2}$ nel piano XY all'altezza del gradino con $m_t = 10^{-3}$ .....	118
Figura VII.29 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a $X=0.15$ m con $m_t = 10^{-3}$ .....	118
Figura VII.30 Campo istantaneo della Temperatura nel piano XY all'altezza del gradino con $m_t = 10^{-3}$ .....	119
Figura VII.31 Campo istantaneo della temperatura nel piano XZ a $Y = 0.1$ m e $Y = 0.38$ m con $m_t = 10^{-3}$ .....	119
Figura VII.32 Vista tridimensionale di T e $Y_{H_2}$ nel piano XZ a $Y = 0.1$ m e $Y = 0.38$ m con $m_t = 10^{-3}$ .....	119
Figura VII.33 Campo istantaneo delle linee di corrente nel piano ZY a $X=0.15$ .....	120
Figura VII.34 Campo istantaneo delle linee di corrente nel piano XY all'altezza del gradino.....	120
Figura VII.35 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a $X=0.15$ m con $m_t = 10^{-2}$ .....	121
Figura VII.36 Campo istantaneo della Temperatura nel piano XY all'altezza del gradino con $m_t = 10^{-2}$ .....	121
Figura VII.37 Campo istantaneo di $Y_{H_2}$ nel piano XZ a $Y = 0.1$ m e $Y = 0.38$ m con $m_t = 10^{-2}$ .....	121
Figura VII.38 Vista tridimensionale di T nel piano XZ a $Y = 0.1$ m e $Y = 0.38$ m con $m_t = 10^{-2}$ .....	122
Figura VII.39 Sezioni XY dell'intero dominio computazionale .....	123
Figura VII.40 Vista tridimensionale del campo di temperatura per i casi di fiamma pilota e non.....	124
Figura VII.41 Flussi di calore alle pareti superiori e inferiori per unità di superficie.....	125
Figura VII.42 Campo medio di $Y_{H_2}$ nel piano mediano XY con il modello ISCM (LES non reattiva) .....	126
Figura VII.43 Campo medio di T nel piano mediano XY con il modello ISCM (LES non reattiva) .....	126
Figura VII.44 Campo medio di T nel piano XZ a $Y = 0.30$ m con il modello ISCM (LES non reattiva) .....	126
Figura VII.45 Campo medio di P nel piano XY mediano con il modello ISCM (LES non reattiva) .....	126
Figura VII.46 Campo medio della P nel piano XZ a $Y = 0.30$ m con il modello ISCM (LES non reattiva) .....	127
Figura VII.47 Campo medio della ? nel piano XZ a $Y = 0.30$ m con il modello ISCM (LES non reattiva) .....	127
Figura VII.48 Campo medio della viscosità turbolenta con il modello ISCM nel piano XY mediano .....	127
Figura VII.49 Campo medio della viscosità turbolenta con il modello ISCM nel piano XZ a $Y = 0.30$ m.....	127
Figura VII.50 Campo medio di T nel piano ZY a $X = 0.2$ e $X = 0.35$ con il modello ISCM (LES non reattiva).....	128
Figura VII.51 Campo medio di T nel piano ZY a $X = 0.7$ con il modello ISCM (LES non reattiva) .....	128
Figura VII.52 Vista tridimensionale di T nel piano ZY a $X = 0.2$ , $X = 0.35$ e $X = 0.7$ .....	128
Figura VII.53 Campo medio di $Y_{H_2}$ nel piano XY mediano con il modello Smagorinsky-Lilly .....	129
Figura VII.54 Campo medio di $Y_{H_2O}$ nel piano mediano XY con il modello Smagorinsky-Lilly.....	129
Figura VII.55 Campo medio di densità nel piano XZ a $Y = 0.30$ m con il modello Smagorinsky-Lilly.....	129
Figura VII.56 Campo medio della Pressione nel piano XY mediano con il modello Smagorinsky-Lilly.....	129
Figura VII.57 Campo medio di pressione nel piano XZ a $Y = 0.30$ m con il modello Smagorinsky-Lilly.....	129
Figura VII.58 Campo medio di Temperatura nel piano XY mediano con il modello Smagorinsky-Lilly.....	130
Figura VII.59 Campo medio di Temperatura nel piano XZ a $Y = 0.30$ m con il modello Smagorinsky-Lilly .....	130

Figura VII.60 Campo medio della viscosità turbolenta con il modello Smagorinsky Lilly nel piano XY.....	130
Figura VII.61 Campo medio della T a X = 0.2 e a X = 0.35 con il modello Smagorinsky Lilly .....	131
Figura VII.62 Campo medio della T nel piano ZY a X = 0.7 con il modello Smagorinsky Lilly.....	131
Figura VII.63 Vista 3D di T nel piano ZY a X = 0.2, X = 0.35 e X = 0.7 con il modello Smagorinsky Lilly.....	132
Figura VII.64 Campo medio di P nel piano XY mediano con il modello ISCM (LES non reattiva) .....	132
Figura VII.65 Campo medio della P nel piano XZ a Y = 0.30 m con il modello ISCM .....	133
Figura VII.66 Campo medio della ? nel piano XZ a Y = 0.30 m con il modello ISCM.....	133
Figura VII.67 Campo medio di T nel piano mediano XY con il modello ISCM.....	133
Figura VII.68 Campo medio di $Y_{H_2O}$ nel piano mediano XY con il modello ISCM.....	134
Figura VII.69 Zoom del campo medio di T nel piano mediano XY con il modello ISCM.....	134
Figura VII.70 Campo medio di $Y_{H_2}$ nel piano ZY a X = 0.2, X = 0.35 e X = 0.7 .....	134
Figura VII.71 Campo medio di $Y_{H_2}$ nel piano ZY a X = 0.7 con il modello ISCM.....	135
Figura VII.72 Vista tridimensionale di T nel piano ZY a X = 0.2, X = 0.35 e X = 0.7 .....	135
Figura VII.73 Campo medio della velocità turbolenta di sottogriglia con il modello ISCM nel piano XY mediano .....	135
Figura VII.74 Campo medio della viscosità turbolenta con il modello ISCM nel piano XY mediano .....	136
Figura VIII.1 Frazione molare dei prodotti di cracking al variare della pressione (T0=1200K)	137
Figura VIII.2 Frazione molare dei prodotti di cracking al variare della temperatura iniziale a P=5atm .....	138
Figura VIII.3 Confronto tra la temperature di inizio e fine cracking a P=5atm.....	138
Figura VIII.4 Isp ottenuto bruciando MPP, DPP GPP e H2 .....	139
Figura VIII.5 Riduzione del volume del serbatoio bruciando MPP, DPP GPP e H2 .....	139

# CAPITOLO I

## I. SCRAMJET: PANORAMICA GENERALE

### I. LEGENDA DEI SIMBOLI

#### *Simboli dell'alfabeto inglese*

$F$	spinta del motore [ML/ t <sup>2</sup> ]
$\dot{m}_a$	portata in massa dell'aria [M/t]
$\dot{m}_c$	portata in massa del combustibile [M/t]
$p_e$	pressione atmosferica [M/(L t <sup>2</sup> )]
$p_i$	pressione all'uscita dall'ugello [M/(L t <sup>2</sup> )]
$S$	sezione di uscita dell'ugello [L <sup>2</sup> ]
$T_{\text{cond}}$	temperatura di condensazione dell'idrogeno [T]
$v_u$	velocità all'uscita del motore [L/t]
$v_i$	velocità all'ingresso del motore [L/t]

#### *Simboli dell'alfabeto greco*

$\Delta H_{R(H_2)}$	entalpia di reazione dell'idrogeno [ML <sup>2</sup> /t <sup>2</sup> ]
$\rho_{H_2(\text{liquido})}$	densità dell'idrogeno liquido [M/L <sup>3</sup> ]
$\rho_{CH_4(\text{liquido})}$	densità del metano liquido [M/L <sup>3</sup> ]
$\rho(\text{cherosene})$	densità del metano liquido [M/L <sup>3</sup> ]

### I.1 INTRODUZIONE

Il presente lavoro segue parallelamente un progetto Europeo **Long-Term-Advanced-Propulsion-Concept-And-Technologies** (LAPCAT) il cui obiettivo è la definizione di un aereo ipersonico per il trasporto di circa 300 passeggeri in grado di coprire la distanza Brussels-Sidney in 3.8 h a Mach=5 (invece delle attuali 22 h).

L'interesse in veicoli airbreathing in grado di volare a velocità ipersoniche nacque agli inizi della seconda metà del secolo<sup>1</sup> scorso per lo più per applicazione belliche e si spostò su applicazioni commerciali (in particolare per nuovi tipi di trasporto e come lanciatori di satelliti di tipo innovativo) con la fine della guerra fredda. I vantaggi per applicazioni militari sono facilmente

deducibili se si pensa che la potenza generata dall'impatto di oggetti lanciati da tali veicoli con la superficie terrestre è direttamente proporzionale al quadrato della loro velocità: ad es., un oggetto di circa 2 ton a  $Ma=14$  ha un'energia cinetica circa quattro volte superiore a quella di una bomba a HE<sup>2</sup>. Per applicazioni civili, invece, i vantaggi sono legati principalmente al fatto che tali veicoli non richiedono il trasporto di ossigeno a bordo: il beneficio che si ottiene non trasportando il comburente è ovvio sia in termini di peso e dimensioni del veicolo che di spinta richiesta e quindi di combustibile necessario. Per citare un esempio, il peso del Saturno V a terra è di circa 2721 ton, di cui 1810 ton sono di ossigeno liquido e 113 ton di carico utile. Ciò significa che la quantità di ossigeno necessaria per portare un satellite in orbita costringe ad una riduzione di peso disponibile per il carico utile (per un rocket corrisponde a circa 1/25 del peso totale) e, quindi, a costi di lancio molto elevati. Attualmente, infatti, il trasporto del payload in orbita bassa ha un costo di 6000 - 20000 \$/kg; un veicolo ipersonico darebbe un vantaggio in termini di abbattimento dei costi di un ordine di grandezza<sup>3</sup>.

Al fine di aver un quadro generale del volo ipersonico, nei paragrafi successivi si sono riportati dei brevi cenni storici sull'evoluzione degli statorattori ed una rapida descrizione tecnica dello scramjet.

## I.2 PROFILO STORICO DEL VOLO IPERSONICO<sup>4,5,6</sup>

L'idea di sfruttare la sola compressione dinamica fornita dalla presa d'aria abolendo completamente l'utilizzo di parti in movimento (turbina e compressore) risale al 1913, quando Renè Lorin, seppure conscio che la spinta sviluppata non potesse sostenere l'avanzamento del veicolo, propose l'applicazione di un motore ramjet per veicoli subsonici. Circa venti anni dopo, il francese René Leduc brevettò il primo schizzo di un aereo pilotato propulso da un motore ramjet (vedi Figura I.1). In quegli anni si arrivò alla consapevolezza che il ramjet potesse essere impiegato con successo per applicazioni supersoniche ma ogni studio al riguardo, eccetto che in Germania, fu interrotto dalla seconda guerra mondiale.

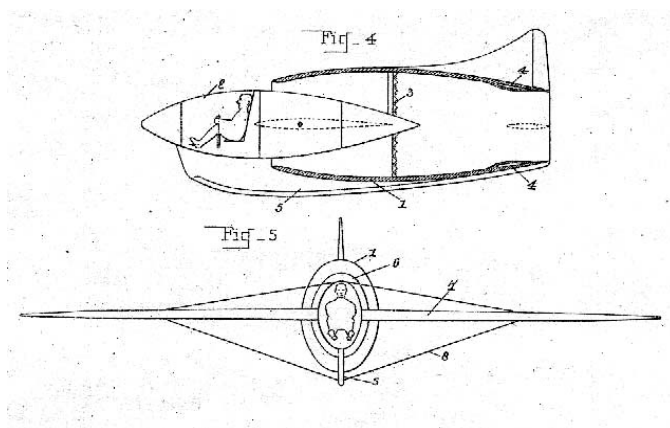
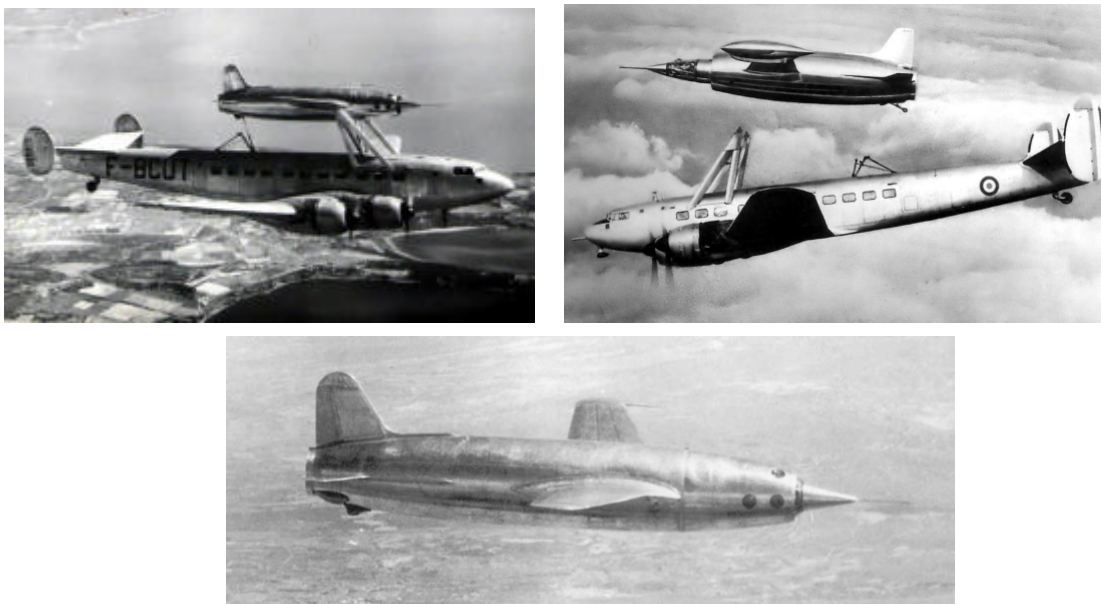


Figura I.1 Riproduzione del disegno originale del primo brevetto di un aereo con motore a ramjet

## I. SCRAMJET: PANORAMICA GENERALE

Cessato il conflitto mondiale, nel 1949, il ramjet Leduc 010 portato alla quota di 7.9 km dall'aereo da trasporto Languedoc, sorvolò i cieli della Francia raggiungendo Mach di volo di circa 0.86 (vedi Figura I.2). Successivi miglioramenti furono apportati alla versione iniziale arrivando all'ultima "il Leduc 021" in grado di raggiungere Ma 0.9.



**Figura I2 Leduc 010**

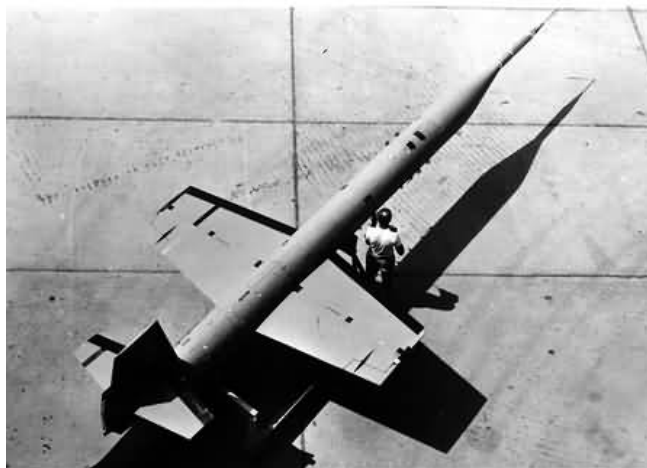
Ispirandosi ai risultati e al lavoro di Leduc, nel 1953, l'industria Nazionale francese (SNCAN) decise di realizzare un aereo che volasse a Ma superiori a 2: sei anni più tardi il Griffon II (vedi Figura I.3) registrò il record mondiale di velocità per gli aerei di allora, dimostrando in tal modo, le potenzialità del motore a ciclo combinato turbogas/ramjet.



**Figura I3 Griffon II**

Tali veicoli, portati in quota da un bombardiere modificato e quindi accelerati da un booster solido fino alle velocità di decollo dei ramjet, raggiunsero Mach di volo record di 4.31. Grazie alla loro semplicità realizzativa e alla loro economicità (dovuta al risparmio di comburente, assenza di parti

mobili...) si registrò in quegli anni una vastissima produzione di ramjet per applicazioni missilistiche: tra i più diffusi si annoverano i Bomarc B.



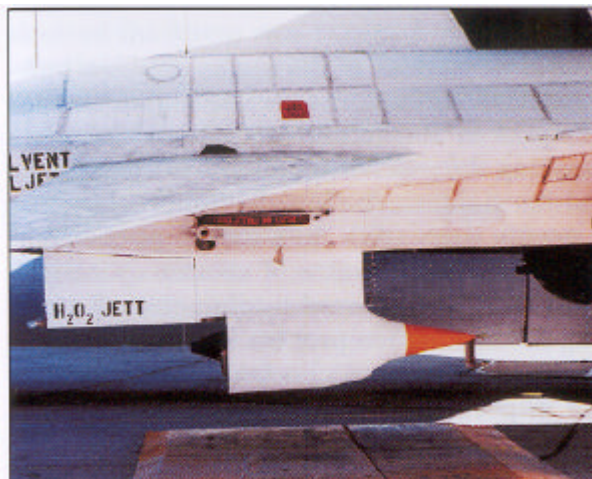
**Figura L4 Lockheed X7**

I ramjet presentano, tuttavia, un limite in termini di efficienza: la loro convenienza era ed è circoscritta a Mach di volo tra 3 e 6. Infatti, per bassi Mach, la compressione dinamica è insufficiente a garantire l'avanzamento del veicolo; oltre Ma 6, invece, il rallentamento del flusso fino a velocità subsoniche provoca un eccessivo carico termico e strutturale alle pareti, un peggioramento delle prestazioni dovute alle onde d'urto e una diminuzione dell'efficienza di combustione dovuta a fenomeni di dissociazione. Un numero di Mach dell'ordine di 6 può dunque considerarsi il valore di transizione tra un motore ramjet in cui la combustione avviene in regime subsonico e uno scramjet in cui la combustione è, invece, supersonica. Così, a partire dalla metà del secolo scorso, in molti centri di ricerca universitari americani come la Johns Hopkins University, alla Boeing, presso Grumman e Marquardt furono promossi programmi per lo sviluppo di motori scramjet. In particolare, nel 1964 la NASA finanziò il programma HRE (Hypersonic Research Engine) che prevedeva, tramite opportune modifiche, di estendere la velocità dell'X15 fino a Mach 8; dopo 40 settimane di lavoro venne rilasciata la nuova versione dell'X15, l'X-15A-2.



**Figura L5 X-15A-2**

Tale velivolo volò più volte raggiungendo, nel 1967, la sua velocità record di 7273 km/h; nonostante tale successo l'anno successivo, a causa dei costi proibitivi necessari per la riparazione dei danni che l'X-15A-2 (vedi Figura I.5 e Figura I.6) aveva riportato durante il volo record, il programma HRE fu terminato.



**Figura I6 Particolare del Ramjet posizionato sull'X-15A-2**

Solo molto più tardi, con la fine della Guerra fredda, gli scramjet<sup>7</sup> furono ripensati e reintrodotti per applicazioni civili (e.g., come lanciatori di satelliti commerciali o come aerei ipersonici per trasporto di passeggeri). In particolare, nel 1985, poco prima dell'incidente del Challenger, il presidente Reagan riaccese i vecchi entusiasmi per i veicoli scramjet descrivendoli pubblicamente con le seguenti parole: *“a new Orient Express that could, by the end of the next decade, take off from Dulles Airport and accelerate up to twenty-five times the speed of sound, attaining low earth orbit or flying to Tokyo within two hours”*. L'idea lanciata dal presidente degli Stati Uniti era quella di un veicolo transatmosferico (TAV) in grado di collegare ampie distanze in tempi record. Come risposta a tale appello, il governo, la Difesa Americana ed alcune industrie statunitensi investirono 400 milioni di dollari annui nel programma NASP (National Aerospace Plane) con lo scopo di dimostrare la fattibilità e quindi realizzare un veicolo spaziale airbreathing pilotato, l'X-30, in grado di decollare orizzontalmente, accelerare fino a velocità ipersoniche, raggiungere l'orbita con un SSTO<sup>8</sup> (Single Stage to Orbit), rilasciare il satellite e atterrare di nuovo orizzontalmente. Tuttavia, poiché per poter immettere satelliti in orbita bassa (LEO) la richiesta minima di incremento di velocità  $\Delta V$  è non inferiore a 7500 m/s (corrispondente a  $Ma=25$ ) e, quindi, al di fuori delle capacità di un qualsiasi motore airbreathing, ed essendo la fase finale della traiettoria nel vuoto, tale motore si presentava inadatto non solo per la parte iniziale della missione ma anche per la parte finale: era dunque necessario accoppiare un motore airbreathing ad un rocket. L'obiettivo principale era, comunque, quello di far coprire al veicolo airbreathing la maggior parte della traiettoria di lancio risparmiando così una cospicua quantità di ossigeno liquido (LOx) del primo stadio (main engine) dello shuttle a beneficio di un minor peso nella fase di decollo. Combinando, infatti, le alte velocità raggiungibili con uno scramjet con quelle di un convenzionale

rocket (ciclo combinato) era possibile ottenere un miglioramento dell'impulso specifico lungo la traiettoria di ascesa dando vita a lanciatori più efficienti e allo stesso tempo riutilizzabili.

Tale programma, però, fu terminato otto anni dopo, prima ancora di realizzare un prototipo, con la giustificazione dell'incapacità di modellare con buona approssimazione il flusso turbolento in camera di combustione. In realtà, la difficoltà di realizzare un unico veicolo in grado di decollare, volare a velocità subsoniche prima, quindi supersoniche e poi ipersoniche non era un compito affatto semplice: era necessario avere un turbogas (TG) o un rocket per le basse velocità, un ramjet per Ma compreso tra 2 e 5, ed infine uno scramjet per le velocità ipersoniche.



**Figura I7 X-30**

Ad ogni modo dal programma NASP si realizzarono e trovarono una serie di importanti tecnologie, come ad es. il raffreddamento rigenerativo delle pareti e soprattutto nuovi materiali.

In quegli stessi anni anche in altri paesi europei partirono programmi di ricerca per il volo ipersonico; in particolare, nel 1988, in Germania, si diede inizio ad un programma per la realizzazione di un lanciatore airbreathing autonomo a due stadi, riutilizzabile e a decollo orizzontale in grado di raggiungere Mach di volo dell'ordine di 6.8: il Sänger. Tale programma fu però terminato per ragioni finanziarie.

Nel 1993, l'istituto centrale dei motori d'Aviazione in Russia (CIAM) lanciò il primo modello di motore combinato ramjet-scramjet (dual mode). Il dispositivo (dal diametro di 22.6 cm e con una lunghezza di 120 cm) fu portato a Ma 3.5 da un rocket, venne quindi acceso il ramjet transizionando a Ma 5 a scramjet. Tale veicolo volò per 15 secondi raggiungendo, prima che venisse consumato l'idrogeno disponibile, Ma 5.5: questo importante risultato, dimostrò la fattibilità della transizione dual mode ramjet/scramjet.

Ritornando negli USA, subito dopo la fine del programma NASP un nuovo programma della NASA, l'Hyper-X fu messo in piedi con l'intento di realizzare veicoli ipersonici con un profilo molto aerodinamico e non pilotati.

Intanto, il 30 luglio 2002, l'Università del Queensland in Australia con un programma finanziato molto meno del corrispettivo americano ( 1.1 milioni di dollari rispetto ai 250 stanziati per



sviluppare l'X-43), l'HyShot (vedi Figura I.8), condusse con successo il primo test di accensione di una camera di combustione per scramjet a Ma 7.6 (tale veicolo però non era in grado di produrre spinta).



**Figura I8 HyShot**

Dopo circa 10 anni di ricerche la NASA presso i centri di Langley e Dryden realizzò il primo dei tre prototipi dell'X-43: l'X43-A. Il primo test fallì, ma nel marzo 2004, il secondo prototipo raggiunse con successo Ma 7. Nel novembre dello stesso anno, sganciato dall'ex bombardiere B-52 a 13 km di altezza e accelerato fino a Mach 6 dal razzo Pegasus (a 29 km di altezza), l'ultimo dei tre prototipi dell'X43 toccò per 10 s Mach ~ 10 (11300 km/h) cadendo dopo 6 minuti, a motori spenti, nell'Oceano Pacifico.



**Figura I9 X43**

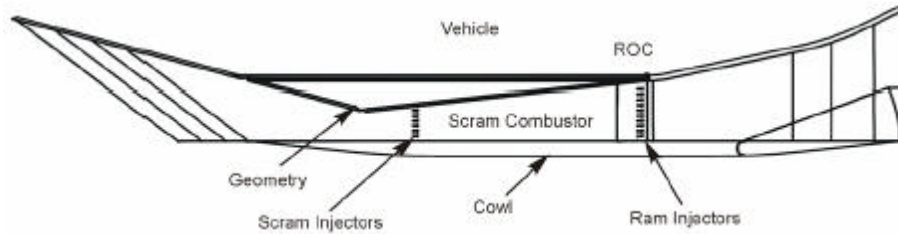


**Figura L10 Fasi di decollo, distacco e volo dell'X43**

Attualmente altri programmi sono in fase di sviluppo in Giappone<sup>9</sup>, in Cina e in Europa.<sup>10</sup>

### I.3 DESCRIZIONE E SCHEMATIZZAZIONE DEL MOTORE<sup>11</sup>

Essendo il motore SCRAMJET costituito sostanzialmente dal solo diffusore, dalla camera di combustione e dall'ugello, il suo principio di funzionamento è molto semplice (Figura I.11).



**Figura I.11** Schizzo di un tipico motore scramjet

Le elevate velocità di volo rendono, infatti, la compressione dinamica nel diffusore sufficiente a garantire delle buone prestazioni senza bisogno, quindi, dell'ausilio di parti mobili quali il compressore e la turbina (già a  $Ma \sim 8$ , l'aria entra nel combustore a pressioni e temperature di  $\sim 3$  atm e  $\sim 1600$  K). L'assenza di parti mobili ha il vantaggio di:

un maggior rapporto spinta/peso,

un maggior rapporto spinta/area frontale,

una maggior affidabilità del veicolo,

un minor rapporto costo/potenza,

maggiori temperature di fine combustione (non avendo limiti imposti da parti mobili, ma solo da strutture fisse)

quindi, di un migliore rendimento termico del motore.

L'aria atmosferica catturata dal diffusore (inlet), passando attraverso un sistema di onde d'urto oblique generate dalla parte anteriore del veicolo, viene rallentata fino a  $\sim ?$  del Mach di volo, quindi entra in camera di combustione a velocità supersoniche e, in parte, in tempi molto brevi (dell'ordine del ms) si mescola e reagisce con il combustibile iniettato in camera di combustione. L'espansione del flusso caldo fino alla pressione atmosferica permette di ottenere la spinta utile per l'avanzamento, che per flusso ideale (1-D, isentropico) può essere scritta come:

$$F = (\dot{m}_a + \dot{m}_c)v_u - \dot{m}_a v_i + (p_i - p_e)S \quad (I.1)$$

dove  $\dot{m}_a$  e  $\dot{m}_c$  sono rispettivamente la portata in massa dell'aria e del combustibile,  $v_u$ ,  $v_i$ , sono le velocità all'ingresso e all'uscita del motore,  $p_e$  e  $p_i$  sono rispettivamente la pressione all'uscita dall'ugello e quella atmosferica.

Nonostante la semplicità di tali motori, la scarsità di informazioni sull'ancoraggio della fiamma e la difficoltà di comprendere e controllare la molteplicità di fenomeni fisici (turbolenza,

mescolamento, combustione e comprimibilità del fluido) che interagiscono nel combustore in tempi così brevi rendono lo SCRAMJET un sistema di trasporto ancora in fase di studio.

Un altro punto critico, inoltre, è la scelta del combustibile: al fine di garantire una buona combustione, infatti, occorre adoperare un combustibile che abbia bassi ritardi all'accensione, elevata esotermicità, buone capacità di raffreddamento e che allo stesso tempo abbia bassi volumi specifici. L'idrogeno, pur rispondendo a parte dei requisiti ( $\Delta H_{R(H_2)} = 121 \text{ MJ/kg}$ ), ha una densità ( $\rho_{H_2}(\text{liquido}) = 70.8 \text{ kg/m}^3$ ) e una temperatura di condensazione ( $T_{\text{cond}} = -253 \text{ }^\circ\text{C}$ ) troppo basse. Come alternativa all'utilizzo di serbatoi enormi, pesanti e criogenici, una soluzione molto vantaggiosa, proposta ed esplorata in questa tesi, è quella di produrre idrogeno ed altre specie chimiche leggere a bordo tramite cracking di idrocarburi. Il metano e il kerosene infatti, pur avendo il vantaggio di densità molto maggiori dell'idrogeno ( $\rho_{CH_4}(\text{liquido})=415 \text{ kg/m}^3$ ,  $\rho(\text{kerosene})=820 \text{ kg/m}^3$ ), e di non avere bisogno di raggiungere eccessive temperature criogeniche (la temperatura di condensazione del metano è  $\sim -164 \text{ }^\circ\text{C}$  e il kerosene è liquido a temperatura ambiente), hanno lo svantaggio di avere tempi di accensioni troppo lunghi per ancorare una fiamma supersonica. Confrontando, infatti, i tempi di ritardo all'accensione dell'idrogeno, del metanolo, del kerosene e del metano si deduce che, passando dall'idrogeno al metano, i ritardi all'accensione aumentano di più di tre ordini di grandezza: tale comportamento è da attribuirsi all'elevato numero di reazioni che devono avvenire per estrarre gli atomi di idrogeno dalla catena degli idrocarburi prima dar luogo alla combustione.

Sfruttando il carico termico cui sono soggette le pareti del naso o della camera di spinta dello scramjet è possibile, invece, avviare il processo di decomposizione degli idrocarburi (cracking) prima dell'ingresso in camera di combustione e nel contempo raffreddare contemporaneamente le pareti stesse: dunque il cracking di idrocarburi ha anche un'azione rigenerativa<sup>12</sup>.

## CAPITOLO II

---

### II. COMPRIMIBILITÀ DI UN FLUIDO

#### II. LEGENDA DEI SIMBOLI

##### *Simboli dell'alfabeto inglese*

$A$	sezione parete del recipiente [ $L^2$ ]
$A$	costante di Arrhenius [ $(\text{mol}/L^3)^{m-n}/t$ ]
$c$	velocità diffusiva delle molecole [ $L/t$ ]
$E_A$	energia di attivazione [ $L^2/t^2$ ]
$F$	Forza [ $M L/t^2$ ]
$k$	costante di Boltzmann [ $ML^2/t^2 T$ ]
$l$	libero cammino medio [ $L$ ]
$m$	massa molecolare [ $M$ ]
$M$	massa molare delle molecole [ $\text{mol}$ ]
$Ma$	numero di Mach
$n$	numero di moli
$N$	numero di molecole
$N_A$	numero di Avogadro [ $\text{mol}^{-1}$ ]
$p$	pressione [ $M/(Lt^2)$ ]
$q.d.m.$	quantità di moto [ $M L/t$ ]
$\mathfrak{R}$	costante universale dei gas [ $L^2/(t^2 T)$ ]
$T$	temperatura [ $T$ ]
$\vec{u}$	vettore velocità [ $L/t$ ]
$v$	velocità [ $L/t$ ]
$V$	volume del recipiente [ $L^3$ ]
$z$	frequenza collisionale [ $t^{-1}$ ]

##### *Simboli dell'alfabeto greco*

$g$	rapporto dei calori specifici
$m$	viscosità molecolare dinamica [ $M L^2/t$ ]
$r$	densità [ $M/L^3$ ]
$\sigma$	sezione d'urto delle molecole [ $L^2$ ]
$\dot{W}$	velocità di reazione [ $(\text{mol}/L^3)/t$ ]
$D[]$	variazione della grandezza

**Pedici**

$[\ ]_0$	valore di equilibrio o di riferimento della grandezza
$[\ ]_1$	valore iniziale della grandezza
$[\ ]_2$	valore finale della grandezza
$[\ ]_X$	grandezza relativa alle $X$ molecole generiche
$[\ ]_Y$	grandezza relativa alle $Y$ molecole generiche

## II.1 INTRODUZIONE

Indipendentemente dalle condizioni del flusso, il moto di un continuo gassoso e le sue interazioni con la chimica sono fenomeni interamente descritti a livello macroscopico dalle equazioni di Navier Stokes. Tuttavia, tali equazioni sono spesso suscettibili di numerose ipotesi semplificative che, a seconda del caso in esame, vengono di volta in volta introdotte per snellire i calcoli: ad esempio, l'ipotesi di gas ideale valida a pressioni moderate cade in regime supercritico; l'ipotesi di incomprimibilità del flusso adottabile in regime subsonico, non è più altrettanto vera ad alti Mach. Per avere un'idea della variazione di densità con la pressione, ad esempio, si può far ricorso alla legge di Bernoulli (valida per flussi non viscosi):

$$\frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 v_2^2 - \mathbf{r}_1 v_1^2) = (p_2 - p_1) \quad (\text{II.1})$$

Da tale equazione si evince che, a bassi Mach, ad un  $\Delta v$  di 100 m/s corrisponde un  $\Delta p$  di circa 0.02 atm (ottenuta assumendo  $v_1 \sim 0$  ed una altitudine di circa 10000 m si ha  $\mathbf{r}_2 = 0.4 \text{ kg/m}^3$ ,  $T \sim 223 \text{ K}$ ).

Assumendo quindi una trasformazione isentropica del flusso  $\left(\frac{p}{\mathbf{r}^\gamma} = \text{cost}, \text{ ang} = 1.4\right)$ , si ha una variazione

di densità di soli  $0.03 \text{ kg/m}^3$ : in flussi subsonici è dunque lecito assumere che la densità sia costante rispetto al campo di pressione; tale assunzione va invece rimossa in flussi supersonici (si precisa che in un flusso incomprimibile la densità può comunque variare a causa di variazioni di temperature e concentrazione delle specie chimiche). Inoltre, come sarà ampiamente discusso in seguito, poiché a tutt'oggi non è tecnologicamente fattibile risolvere le equazioni di Navier Stokes tramite DNS (Direct Numerical Simulation) per applicazioni ingegneristiche, la risoluzione del sistema di tali equazioni richiede l'introduzione di modelli di sottogriglia che riproducano con più rispondenza possibile quei fenomeni che avvengono alle scale non risolte.

La scelta di tali ipotesi e del modello di sottogriglia deve essere dunque avallata da un'analisi dettagliata di tutti i fenomeni che intervengono in flussi supersonici reattivi: in questo capitolo sono stati analizzati i fenomeni che avvengono su scala molecolare riportando quindi gli effetti su larga scala.

## II.2 CENNI SULLA TEORIA CINETICA DEI GAS

La teoria cinetica dei gas di J.C. Maxwell e L. Boltzmann<sup>13</sup> stabilisce una correlazione tra il moto caotico delle singole molecole e le grandezze termodinamiche delle molecole nel loro insieme. In particolare, sotto le ipotesi di molecole puntiformi aventi uguale velocità scalare e i cui urti con le pareti e con le altre molecole siano perfettamente elastici, assumendo che il recipiente entro il quale sono contenute sia ideale, perfettamente adiabatico ed impermeabile, è possibile definire le grandezze termodinamiche macroscopiche pressione e temperatura.

Infatti, a causa degli urti con le pareti del recipiente, le molecole sono soggette ad una variazione di quantità di moto (vedi eq (II.2)) che a livello macroscopico si manifesta come una pressione esercitata sulle pareti stesse:

$$p = \frac{F}{A} = \frac{\Delta q \cdot d \cdot m}{A \Delta t} = \frac{1}{3} \frac{nmN_A c^2}{V} \quad (\text{II.2})$$

dove  $c$  è la velocità molecolare .

Sostituendo nell'equazione precedente l'equazione termica di stato si ottiene:

$$c = \sqrt{\frac{3\mathcal{R}T}{mN_A}} = \sqrt{\frac{3\mathcal{R}T}{M}} \quad (\text{II.3})$$

dove  $M$  è la massa molare e  $c$  è la velocità diffusiva delle molecole ( $\sim$  la velocità del suono).

Dalla precedente equazione si evince che la velocità molecolare è proporzionale alla temperatura ed inversamente proporzionale alla massa molare. All'aumentare della temperatura del flusso, infatti, la velocità delle molecole aumenta e di conseguenza la variazione di quantità di moto cui sono soggette le molecole urtando elasticamente con le pareti del recipiente ideale è maggiore: ciò determina un aumento di pressione.

In un recipiente in cui il gas è in equilibrio, ovvero in cui la distribuzione statistica delle molecole e delle loro velocità è costante da punto a punto, è possibile esprimere, quindi, le grandezze termodinamiche macroscopiche in funzione del moto molecolare. In caso di non equilibrio, invece, la distribuzione delle molecole e delle velocità non è più uniforme ma varia da punto a punto e istante per istante.

Scomponendo la velocità media delle molecole di ogni specie in quella del baricentro dell'insieme delle molecole e quella relativa al baricentro, è possibile identificare la prima con la velocità convettiva del flusso che si ritrova nelle equazioni di Navier Stokes.

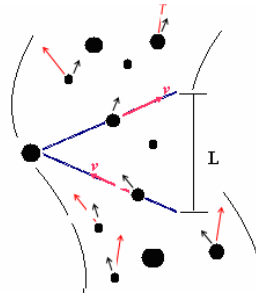


Figura II.1 Moto molecolare

La velocità relativa individua, invece, il moto caotico delle molecole rispetto al baricentro, il cui valore quadratico medio è proporzionale alla temperatura del flusso. In flussi subsonici, la velocità del baricentro delle molecole risulta essere minore di quella diffusiva: l'energia termica del flusso è quindi maggiore di quella cinetica, il contrario avviene in regime supersonico. Sarebbe interessante mostrare come partendo dalla teoria cinetica dei gas, manipolando opportunamente l'equazione di Boltzmann si derivano le equazioni di Navier Stokes (per tali approfondimenti, comunque si rimanda a testi specialistici<sup>14</sup>). A completamento del quadro delle grandezze caratteristiche del moto molecolare, si riporta anche l'espressione del libero cammino medio delle molecole, ovvero:

$$l = \frac{kT}{\sqrt{2} p \sigma^2} \quad (\text{II.4})$$

Tale espressione mostra che, all'aumentare della temperatura e al diminuire della pressione, la distanza percorsa dalle molecole tra una collisione e l'altra, ovvero, il libero cammino medio, aumenta.

Al fine di poter costruire un modello in grado di riprodurre il comportamento di un flusso supersonico reattivo occorre procedere, quindi, con un'analisi dettagliata dell'effetto della velocità del baricentro sulla distribuzione delle molecole e quindi sul libero cammino medio e sulla frequenza collisionale.

### II.3 EFFETTI DELLA COMPRIMIBILITÀ SU SCALA MOLECOLARE E MACROSCOPICA

Il precedente paragrafo ha mostrato per sommi capi la corrispondenza tra i fenomeni che si manifestano nel continuo e quelli che avvengono su scala molecolare; in questo paragrafo si focalizzerà l'attenzione sull'effetto che la velocità del baricentro dell'insieme delle molecole ha sulla distribuzione e sulla velocità delle molecole stesse. Come già accennato, infatti, in uno stato di equilibrio le molecole e la loro distribuzione di velocità sono uniformi; soggette a gradienti di pressione, invece, queste si ridistribuiscono nel campo in modo non uniforme. Se si considera, ad esempio, l'urto delle molecole con una parete in moto (ad es. la presa d'aria, palette di un compressore, pistone...) si intuisce che a tali collisioni corrisponde una variazione di velocità delle



molecole stesse che a loro volta, urtando quelle circostanti, imprimeranno loro un  $\Delta v$ . Se la velocità di avanzamento della parete è minore della velocità  $c$  con cui le molecole si muovono  $\left( c = \sqrt{\frac{8kT}{pm}} \right)$ , queste ultime collidendo tra loro trasferiscono la propria quantità di moto alle molecole circostanti mantenendo così inalterata la loro mutua distanza  $\left( \text{libero cammino medio } l = \frac{kT}{pps^2} \right)$ . Parlando in termini di rapporti tra tempi caratteristici, se il tempo necessario affinché una molecola, attraverso urti successivi, percorra una distanza  $L$  è minore di quello che il baricentro dell'insieme di molecole, dotato di velocità convettiva impiega, le molecole nel loro moto individuale raggiungono un punto ancor prima del baricentro delle molecole.

Se la velocità del suono è maggiore della velocità del baricentro delle molecole, un disturbo si propaga più velocemente della causa che lo ha generato. Se invece il baricentro ha una velocità maggiore di quella delle molecole, il tempo da questi impiegato per percorrere la stessa distanza  $L$  è minore di quello impiegato dalle singole molecole: ciò significa che prima che le molecole percorrano tale distanza, il baricentro l'ha già raggiunta. Le molecole, quindi, sono sospinte dal moto medio e, non avendo il tempo necessario ad equidanzarsi, si avvicinano. L'alta velocità del flusso ha dunque l'effetto di indurre una variazione del libero cammino medio e quindi della densità del flusso: a livello macroscopico ciò corrisponde alla presenza di compressioni locali dovute ad un  $\Delta v$ .

È pertanto interessante esaminare l'influenza della compressione sul mescolamento e sulla combustione individuandone i principali aspetti di cui occorre tener conto nella successiva fase di modellistica.

## II.4 EFFETTI DELLA COMPRIMIBILITÀ SUL MESCOLAMENTO

Una corrente supersonica è caratterizzata da un'energia cinetica molto superiore rispetto a quella interna (il numero di Mach esprime proprio tale rapporto); a causa di ciò, il flusso è così rigido da renderne critico il mescolamento. Inoltre, poiché un qualsiasi disturbo si propaga più lentamente della causa che lo ha generato, in presenza di discontinuità (causate ad esempio da iniettori) le molecole tendono ad addensarsi: a livello macroscopico tale effetto corrisponde alla generazione di urti. Tale fenomeno si verifica ad esempio in una corrente secondaria di idrogeno iniettata in cross-flow in una corrente principale d'aria: le molecole di idrogeno investite dalla corrente principale a Mach superiori all'unità e a loro volta le molecole della corrente d'aria soggette ad un ostacolo lungo il loro percorso, avendo una velocità del moto caotico minore di quella convettiva (perché  $\text{Mach} > 1$ ) non hanno il tempo di ridistribuirsi e tendono quindi a compattarsi ulteriormente generando urti. In uno spazio di pochi liberi cammini medi le molecole sono soggette ad un repentino rallentamento e quindi ad elevati gradienti di velocità, pressione e temperatura. A causa di tale variazione di velocità le particelle di fluido sono soggette ad un momento angolare che si

## *II. COMPRIMIBILITÀ DI UN FLUIDO*

traduce a livello macroscopico nella generazione di vorticità. Le velocità supersoniche inducono dunque due effetti contrapposti: una minore intensità di turbolenza dovuta alla rigidità del flusso e, nel contempo, una produzione locale di vorticità e dunque di turbolenza dovuta alla sua comprimibilità. Per stabilire quali dei due effetti prevalga e il peso di ciascuno sull'evoluzione del flusso è opportuno richiamare le equazioni di Navier Stokes mettendone in rilievo questi due effetti; per tale analisi si rimanda al capitolo successivo.

## II.5 EFFETTI DELLA COMPRIMIBILITÀ SULLA COMBUSTIONE

A livello microscopico la minore distanza tra le molecole favorisce gli urti tra queste: il libero cammino medio misura proprio la distanza che intercorre tra due urti successivi. In condizioni di equilibrio statistico, la frequenza collisionale<sup>15</sup> per unità di volume tra tutte le molecole X e Y è:

$$\frac{z_{XY}}{V} = \sqrt{p} \frac{N_X}{V} \frac{N_Y}{V} s^2 \sqrt{8 \frac{\mathfrak{R}T}{mM}} \quad (\text{II.5})$$

che riscritta in modo da far comparire la densità assume la forma:

$$\frac{z}{V} = \sqrt{p} s^2 \left( \frac{n_X N_A}{m_X} r_X \right) \left( \frac{n_Y N_A}{m_Y} r_Y \right) \sqrt{8 \frac{\mathfrak{R}T}{mM}} \left[ \frac{1}{cm^3 \text{ sec}} \right] \quad (\text{II.6})$$

con n numero di moli e M peso molecolare. Tale espressione mostra che la frequenza collisionale, in condizioni di equilibrio per il gas, dipende dalla densità e dalla temperatura.

Per flussi reattivi, poiché la combustione altri non è che una serie di collisioni tra molecole, se ad ogni collisione corrispondesse una reazione la frequenza collisionale e la velocità di reazione coinciderebbero. In realtà non tutte le collisioni sono efficaci: le sole molecole che reagiscono sono quelle aventi un'energia maggiore dell'energia di attivazione. Per la legge di Boltzmann tale distribuzione è proporzionale al fattore  $e^{-\frac{E_A}{RT}}$ <sup>16</sup>. Ne segue dunque che il rateo di comparsa e scomparsa delle specie chimiche è:

$$\dot{w} = \frac{1}{N_A} \frac{z}{V} e^{-\frac{E_A}{\mathfrak{R}T}} \quad (\text{II.7})$$

Poiché l'espressione tipica che si utilizza per la velocità di reazione è la seguente:

$$\dot{w} = AT^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_A}{RT}} [X][Y] \left[ \frac{mol}{cm^3 \text{ sec}} \right] \quad (\text{II.8})$$

sostituendo la (II.6) nell'equazione precedente si ottiene:

$$\dot{w} = \frac{\sqrt{p}}{N_A} s^2 \left( \frac{n_X N_A}{m_X} r_X \right) \left( \frac{n_Y N_A}{m_Y} r_Y \right) \sqrt{8 \frac{\mathfrak{R}T}{mM}} e^{-\frac{E_A}{\mathfrak{R}T}} \quad (\text{II.9})$$

dove introducendo la concentrazione di una specie X definibile come:  $[X] = \frac{n_x N_A}{m_x} \mathbf{r}_x$ , si arriva

a:

$$\dot{w} = \frac{\sqrt{p}}{N_A} \mathbf{s}^2 \sqrt{8 \frac{\mathfrak{R}T}{mM}} e^{-\frac{E_A}{\mathfrak{R}T}} [X][Y]. \quad (\text{II.10})$$

Confrontando le equazioni (II.8) e (II.10) ne discende che il pre-esponenziale della costante di

Arrhenius è dunque pari ad  $A = 2 \sqrt{p \frac{\mathfrak{R}}{M}} \mathbf{s}^2$ .

L'equazione (II.8) mostra che il rateo di reazione varia con la densità (per il tramite delle concentrazioni) e la temperatura. Tale dipendenza è stata ottenuta dalla teoria cinetica dei gas per stati di equilibrio statistico termodinamico: ciò significa che l'espressione suddetta potrebbe non essere vera in flussi in non equilibrio<sup>17</sup>. In caso di flussi supersonici, il tempo ( $t_a$ ) necessario affinché le molecole, in certe condizioni di temperatura e pressione, si ridistribuiscono in modo da conservare il libero cammino medio è superiore a quello convettivo ( $t_c$ ): dunque si hanno delle compressioni locali che non dipendono dalle condizioni termodinamiche cui si trova il flusso ma da condizioni cinematiche. A tale variazione di densità non è possibile associare una temperatura termodinamica, in quanto i tempi di compressione sono stati talmente rapidi da non dare il tempo alle molecole di raggiungere l'equilibrio traslazionale: un esempio tipico è ciò che accade appunto attraverso un'onda d'urto. L'espressione (II.8) quindi non contempla tale effetto che potrebbe invece contribuire a velocizzare la reazione: a parità di numero di molecole e velocità molecolare, infatti, il libero cammino medio è diminuito e di conseguenza la frequenza collisionale e dunque la pressione locale sono aumentate. Occorre quindi indagare se effettivamente ci sia un effetto dovuto alla comprimibilità del flusso e quale sia l'ordine di grandezza.

Una risposta rigorosa può essere fornita derivando l'espressione della velocità di reazione direttamente dalle Equazioni di Boltzmann. Diversi studiosi, come ad esempio V. Boffi, hanno già affrontato tale "impresa" senza successo: le difficoltà per uno studio del genere sono, infatti, tali e tanti da rendere tale strada difficilmente percorribile.

Un'alternativa più pratica anche se non rigorosa è quella di partire dall'espressione della velocità di reazione in condizioni di equilibrio locale, ed analizzare quanto la soluzione cambi a causa di una piccola variazione dallo stato di equilibrio. Espandendo tramite uno sviluppo in serie di Taylor, la funzione  $z(t, \mathbf{r}, T, M)$  nell'intorno dell'istante di equilibrio considerato  $t=t_0$  si ottiene:

$$\frac{z}{V}(t, \mathbf{r}, T, M) = \frac{z}{V} \Big|_{t=t_0} + \frac{1}{1!} \frac{Dz}{Dt} \Big|_{t=t_0} (t-t_0) + \frac{1}{2!} \frac{D^2z}{Dt^2} \Big|_{t=t_0} (t-t_0)^2 + \frac{1}{3!} \frac{D^3z}{Dt^3} \Big|_{t=t_0} (t-t_0)^3 + \dots \quad (\text{II.11})$$

Fermandosi al primo ordine:

$$\frac{z}{V}(t, \mathbf{r}, T, M) = \frac{z}{V} \Big|_{t=t_0} + \frac{Dz}{Dt} \Big|_{t=t_0} (t - t_0) + o(2) \quad (\text{II.12})$$

derivando la frequenza collisionale rispetto al tempo:

$$\frac{D\left(\frac{z}{V}\right)}{Dt} = 2\sqrt{\frac{\rho \mathfrak{K}}{M}} (n N_A \mathbf{s})^2 \frac{D\left(\mathbf{r}^2 \sqrt{\frac{T}{M}}\right)}{Dt} = 2\sqrt{\frac{\rho \mathfrak{K}}{M}} (N_A \mathbf{s})^2 \left( n^2 \sqrt{T} \frac{D(\mathbf{r}^2)}{Dt} + n^2 \mathbf{r}^2 \frac{D(\sqrt{T})}{Dt} + \mathbf{r}^2 \sqrt{T} \frac{D(n^2)}{Dt} \right) \quad (\text{II.13})$$

svolgendo i calcoli:

$$\frac{D\left(\frac{z}{V}\right)}{Dt} = 2\sqrt{\frac{\rho \mathfrak{K}}{M}} (n N_A \mathbf{s})^2 \mathbf{r}^2 \sqrt{T} \left( 2 \frac{D\mathbf{r}}{Dt} + \frac{1}{2} \frac{DT}{Dt} + 2 \frac{Dn}{Dt} \right) \quad (\text{II.14})$$

e sostituendo la precedente equazione nella (II.12) si arriva alla:

$$\frac{z}{V}(t, \mathbf{r}, T, M) = \frac{z_0}{V} + \left[ 2\sqrt{\frac{\rho \mathfrak{K}}{M}} (n_0 N_A \mathbf{s})^2 \mathbf{r}_0^2 \sqrt{T_0} \left( 2 \frac{D\mathbf{r}}{Dt} + \frac{1}{2} \frac{DT}{Dt} + 2 \frac{Dn}{Dt} \right) \right]_{t=t_0} (t - t_0) + o(2) \quad (\text{II.15})$$

Poiché:

$$\frac{z_0}{V} = 2\sqrt{\frac{\rho \mathfrak{K}}{M}} (n_0 N_A \mathbf{s})^2 \mathbf{r}_0^2 \sqrt{T_0} \quad (\text{II.16})$$

la (II.15) può essere riscritta come:

$$\frac{z}{V}(t, \mathbf{r}, T, M) = \frac{z_0}{V} \left[ 1 + \left( \frac{2}{\mathbf{r}} \frac{D\mathbf{r}}{Dt} + \frac{1}{2} \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} + \frac{2}{n} \frac{Dn}{Dt} \right)_{t=t_0} (t - t_0) \right] + o(2) \quad (\text{II.17})$$

Da tale equazione si evince che la frequenza collisionale varia nello spazio e nel tempo per effetto combinato della variazione della densità, della temperatura e del numero di moli. Nel caso qui in esame (combustione supersonica) l'effetto dominante è quello legato alla comprimibilità del flusso

e quindi  $\frac{D?}{Dt}$ ; il termine  $\frac{DT}{Dt}$  potrebbe invece essere importante nel caso di condizioni di rientro in

cui, a causa delle elevate temperature cui il flusso è soggetto, i gradi traslazionali, rotazionali e vibrazionali delle molecole non hanno il tempo di raggiungere l'equilibrio. In flussi supersonici

dunque non si può associare al flusso un'unica temperatura di equilibrio e la frequenza collisionale deve tener quindi conto dell'effetto dovuto alla non stazionarietà di tale fenomeno.

Riprendendo l'equazione (II.17) e trascurando l'effetto della variazioni di temperatura e del peso molecolare si ottiene:

$$\frac{z}{V}(t, \mathbf{r}, T, M) = \frac{z_0}{V} \left[ 1 + \left( \frac{2}{\mathbf{r}} \frac{D\mathbf{r}}{Dt} \right)_{t=t_0} (t-t_0) \right] \quad (\text{II.18})$$

Richiamando l'equazione di conservazione della massa (vedi Cap III):

$$\frac{D\mathbf{r}}{Dt} + \mathbf{r}(\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) = 0 \quad (\text{II.19})$$

e sostituendola nell'equazione (II.18), si ottiene:

$$\frac{z}{V}(t, \mathbf{r}, T, M) = \frac{z_0}{V} \left[ 1 - 2\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}} \Big|_{t=t_0} (t-t_0) \right] \quad (\text{II.20})$$

L'eq. (II.20) mostra chiaramente che in flussi subsonici, essendo la divergenza del vettore velocità generalmente molto piccola, tale effetto è trascurabile, mentre non lo è in flussi supersonici.

Ciò significa che: nella combustione supersonica c'è un effetto sulla velocità di reazione dovuto alla comprimibilità del flusso.

Per poter stimare (anche se solo approssimativamente) l'ordine di grandezza di tale effetto, anticipando gli argomenti del capitolo successivo e rimandando ad essi per delle chiarificazioni, si è sostituita l'equazione (III.36) nella (II.20), che, riscritta in forma adimensionale e trascurando gli effetti dovuti alla variazione di temperatura assume così la forma:

$$\frac{z}{V}(t, \mathbf{r}, T, M) = \frac{z_0}{V} \left[ 1 \pm 2gMa^2 \right] \quad (\text{II.21})$$

Tale relazione mostra che in flussi comprimibili la frequenza di collisione non è costante nel campo ma varia a seconda del Mach locale, ed in particolare aumenta nelle zone in cui si ha compressione locale e diminuisce nelle zone di espansione. L'importante conseguenza che ne discende è che poiché la combustione altri non è che una serie di collisioni efficaci tra molecole di specie differenti, nelle zone di compressione ( $\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}} < 0$ ), il rateo di comparsa e scomparsa delle specie chimiche ne risulta accelerato favorendone la combustione stessa. A tal riguardo, un'ulteriore conferma e supporto alle ipotesi esposte e ai risultati ottenuti è stato dato dal confronto con il dott. D. Giordano<sup>18, 19</sup>, secondo cui il problema dell'influenza della comprimibilità sulle velocità di

## II. COMPRIMIBILITÀ DI UN FLUIDO

reazione sia ben noto ai fluidodinamici interessati alla materia in questione, ma che ancora si sappia e si sia fatto ben poco per capirlo e risolverlo. La frequenza collisionale fornita dalla teoria cinetica per un gas all'equilibrio corrisponde, infatti, alla soluzione di ordine zero (velocità=0) col metodo Chapman-Enskog; la situazione fluidodinamica, invece, corrisponde alla soluzione di ordine 1, in cui compare nell'espressione della frequenza collisionale l'effetto (dinamico) della comprimibilità tramite la divergenza del vettore velocità.

Diversi modelli sono stati costruiti per capire come tale effetto influisca sul modello della frequenza collisionale: secondo studi condotti da ricercatori russi<sup>20,21,22</sup>, tale effetto potrebbe influire sull'esponentiale dell'espressione della velocità di reazione, ma tale modello non soddisfa ancora appieno la fisica e le sue leggi in quanto predice una produzione negativa di entropia.

Il risultato ottenuto spiega, in principio, il motivo per cui le simulazioni CFD non riescono a riprodurre l'ancoraggio di fiamma riportato sperimentalmente. Nel 1961, a NASA Dryden, infatti, furono condotte prove sperimentali per lo studio della combustione di un veicolo scramjet ad idrogeno in grado di volare a Mach=8.

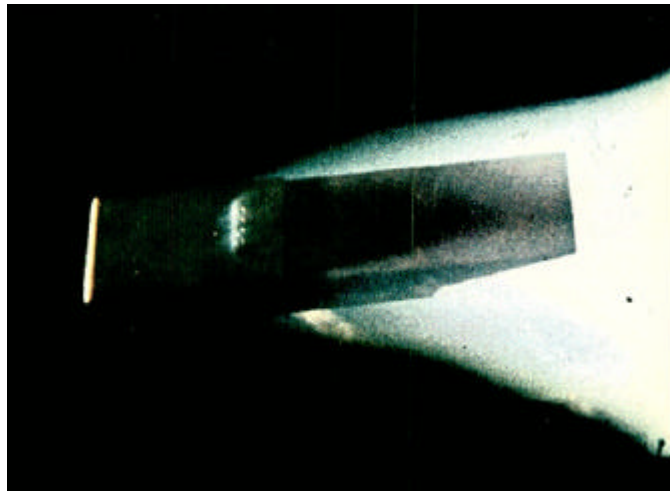
Le condizioni operative della corrente principale d'aria in camera di combustione erano:

Mach = 3.5 cui corrisponde una  $v = 1988$  m/sec;

$T_0 = 2390$  K (temperatura di ristagno all'ingresso);

$P_0 = 0.29$  atm (pressione all'ingresso).

L'idrogeno era iniettato da più iniettori allineati perpendicolarmente all'aria entrante. I risultati sperimentali (vedi la Figura II.2, la Figura II.3 e la Figura II.3) mostrano una rapida accensione insieme ad un buon ancoraggio della fiamma: ciò fa pensare effettivamente che la velocità di reazione sia molto maggiore di quella trovata sperimentalmente per flussi subsonici.



**Figura II.2 ASD-TDR-63-236 facility per studi di combustione supersonica**

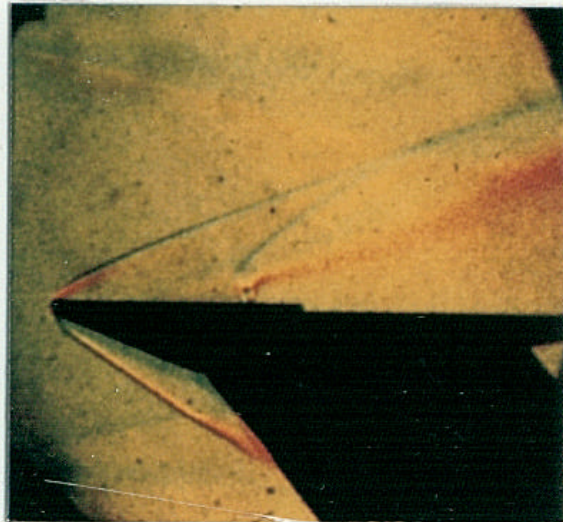


Figura II.3 Color Schlieren



Figura II.4 Fotografia a IR nella banda dell'H<sub>2</sub>O

Anche recentissimi studi condotti in Giappone rivelano l'ancoraggio della fiamma all'interno di una camera di combustione supersonica in cui il combustibile è iniettato parallelamente all'aria entrante<sup>9</sup>. *I risultati sperimentali confermano dunque le conclusioni ottenute dall'analisi precedente e cioè che a  $Ma > 1$  la comprimibilità influenza la velocità di reazione  $\dot{W}$ : si deve tener conto di tale effetto nel modellare il termine sorgente delle specie chimiche.*



## CAPITOLO III

### III. ANALISI DELLE EQUAZIONI DI NAVIER STOKES

#### III. LEGENDA DEI SIMBOLI

*Simboli dell'alfabeto inglese*

$A$	costante pre-esponenziale nella formula di Arrhenius $[(\text{mol}/\text{L}^3)^{m-n}/t]$
$a$	velocità del suono $[\text{L}/t]$
$c_p$	calore specifico a pressione costante medio $[\text{L}^2 t^{-2} T^{-1}]$
$D$	coefficiente di diffusione di specie chimiche $[\text{L}^2/t]$
$Da$	numero di Damkoehler
$e$	energia interna $[\text{L}^2 t^{-2}]$
$E_T$	energia totale del sistema $[M \text{L}^2 t^{-2}]$
$E$	energia totale del sistema per unità di massa $[\text{L}^2 t^{-2}]$
$\bar{\bar{E}}$	tensore di deformazione $[t^{-1}]$
$E_A$	energia di attivazione $[\text{L}^2 t^{-2}]$
$f_k$	forza di volume esterna esercitata sulla $k$ -esima specie
$\bar{F}_e$	risultante delle forze esterne $[M \text{L} t^{-2}]$
$h$	entalpia per unità di area e tempo $[\text{L}^2 t^{-2}]$
$h_f$	entalpia di formazione per unità di area e tempo $[\text{L}^2 t^{-2}]$
$h_s$	entalpia sensibile per unità di area e tempo $[\text{L}^2 t^{-2}]$
$\bar{\bar{I}}$	matrice identità
$k$	coefficiente di conduzione termica $[M \text{L} T^{-1} t^{-3}]$
$L$	lavoro compiuto sul sistema $[M \text{L}^2 t^{-2}]$
$m$	massa del volumetto fluido preso in esame $[M]$
$NS$	numero di specie chimiche
$p$	pressione $[M \text{L}^{-1} t^{-2}]$
$q$	flusso di calore $[M t^{-2}]$
$Q$	calore scambiato con l'esterno $[M \text{L}^2 t^{-2}]$
$R$	costante dei gas $[\text{L}^2 t^{-2} T^{-1}]$
$\mathfrak{R}$	costante universale dei gas $[\text{L}^2 t^{-2} T^{-1}]$
$S$	superficie del volumetto fluido $[\text{L}^2]$
$T$	temperatura $[T]$
$\bar{\bar{T}}$	tensore degli sforzi $[M \text{L}^{-1} t^{-2}]$
$\bar{u}$	vettore velocità di componenti $(u, v, w)$ $[\text{L}/t]$
$V$	volumetto di fluido in esame $[\text{L}^3]$

### III. ANALISI DELLE EQUAZIONI DI NAVIER STOKES

$\bar{V}_k$	velocità di diffusione della $k$ -esima specie [L/t]
$W_k$	peso molare della $k$ -esima specie [M/mol]
$\bar{x}$	variabile nello spazio di componenti (x, y, z) [L]
$X_k$	concentrazione della $k$ -esima specie
$Y_k$	frazione massica della $k$ -esima specie

#### Simboli dell'alfabeto greco

<b>a</b>	diffusività termica [L <sup>2</sup> /t]
<b>F</b>	funzione di dissipazione dell'energia [M L <sup>-1</sup> t <sup>-3</sup> ] e grandezza generica
<b>g</b>	rapporto dei calori specifici
<b>l</b>	secondo coefficiente di viscosità od autovalore
<b>m</b>	viscosità molecolare dinamica [M L <sup>-1</sup> t <sup>-1</sup> ]
<b>m<sub>B</sub></b>	bulk viscosity [M L <sup>-1</sup> t <sup>-1</sup> ]
<b>n</b>	viscosità molecolare cinematica [L <sup>2</sup> /t]
<b>r</b>	densità [M/ L <sup>3</sup> ]
<b><math>\bar{S}</math></b>	tensore degli sforzi [M L <sup>-1</sup> t <sup>-2</sup> ]
<b><math>\dot{w}</math></b>	velocità di reazione [molL <sup>-3</sup> t <sup>-1</sup> ]

#### Apici e Pedici

$[]_0$	valore di equilibrio o di riferimento della grandezza
$[]_i$	componente $i$ -esima del vettore
$[]_j$	componente $j$ -esima del vettore
$[]_k$	indice della specie $k$ -esima
$[]_l$	indice della specie $l$ -esima
$[]^*$	valore adimensionale della grandezza

### III.1 EQUAZIONI DI NAVIER STOKES<sup>23, 24</sup>

L'analisi del moto molecolare ha introdotto e spiegato alcuni comportamenti che si manifestano a livello macroscopico (come ad esempio la comprimibilità); per poterne conoscere l'evoluzione su larga scala si sono richiamate in questo capitolo le equazioni di conservazione della massa, dell'energia, delle specie chimiche, del bilancio della quantità di moto e di stato per un volume continuo di gas, ovvero, per un volume in cui il numero di molecole in esso contenute è tale che la media statistica delle grandezze abbia significato.

#### III.1.1 Equazioni di conservazione della massa

Dall'equazione di conservazione della massa:

$$\frac{Dm}{Dt} = \frac{D}{Dt} \int_V \rho dV = 0 \quad (\text{III.1})$$

( $m$  è la massa della particella di fluido,  $V$  il volume e  $\rho$  la densità) applicando all'equazione (III.1) il teorema del trasporto di Reynolds, si ottiene:

$$\int_{V(t)} \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \bar{u} \right) dV = 0 \Rightarrow \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \bar{u} = 0 \quad (\text{III.2})$$

Riscrivendo l'equazione (III.2) in coordinate cartesiane ortogonali ed usando la notazione indiciale si ottiene:

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{III.3})$$

dove  $u_i$  è la componente  $i$ -esima del vettore  $\bar{u}$ . Da tale equazione si evince che per flussi in cui la densità varia nello spazio e nel tempo, la divergenza della velocità assume valori non nulli, ovvero, il volume della particella fluida del campo si deforma con una velocità pari alla sommatoria delle variazioni delle componenti  $i$ -esime della velocità lungo le rispettive direzioni.

#### III.1.2 Equazioni di bilancio della quantità di moto

Partendo dalla II legge di Newton e specializzandola ad un volumetto fluido si arriva alla seguente equazione di bilancio della quantità di moto:

$$m\bar{a} = \frac{D}{Dt} \int_V \mathbf{r}\bar{u}dV = \bar{F}_e = \sum_{k=1}^{NS} \int_V Y_k \bar{f}_k dV + \oint_S \bar{\bar{T}} \cdot \bar{n}dS \quad (\text{III.4})$$

dove  $\bar{F}_e$  è la risultante delle forze esterne,  $Y_k$  è la frazione massica della specie k-esima,  $\bar{f}_k$  la forza esterna di volume che agisce sulla specie k-esima (ad esempio la forza gravitazionale) e  $\bar{\bar{T}}$  è l'insieme delle forze che agiscono sulla superficie. Applicando all'integrale di superficie il teorema di Green  $\left( \oint_S \bar{\bar{T}}dS = \int_V \bar{\nabla} \cdot \bar{\bar{T}}dV \right)$  si ottiene:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \bar{\nabla})\bar{u} = \frac{1}{\mathbf{r}} \bar{\nabla} \cdot \bar{\bar{T}} + \sum_k Y_k \bar{f}_k \quad (\text{III.5})$$

Per l'ipotesi di flussi newtoniani, le componenti del tensore degli sforzi sono espresse come funzione lineare delle componenti del tensore deformazione ovvero:

$$\bar{\bar{T}} = (-p + \mathbf{I} \bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \bar{\bar{I}} + 2\mathbf{m} \bar{\bar{E}} = -p \bar{\bar{I}} + \mathbf{I} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \bar{\bar{I}} + \mathbf{m} (\underline{\underline{\nabla u}} + \underline{\underline{\nabla u}}) \quad (\text{III.6})$$

dove il termine  $2\mathbf{m} \bar{\bar{E}}$  rappresenta la deformazione di volume e di forma dovuta agli scorrimenti viscosi, mentre il termine  $(-p + \mathbf{I} \bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \bar{\bar{I}}$  rappresenta la deformazione di volume dovuta alla parte sferica del tensore degli sforzi;  $\mathbf{I}$  e  $\mathbf{m}$  sono coefficienti di viscosità con  $\mathbf{I} = -\frac{2}{3} \mathbf{m} + \mathbf{m}_b$ . Assumendo inoltre valida l'ipotesi di Stokes di bulk viscosity trascurabile, l'equazione (III.5) assume la forma:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \bar{\nabla})\bar{u} = -\frac{\bar{\nabla} p}{\mathbf{r}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \bar{\nabla} \cdot \left( \mathbf{m} (\underline{\underline{\nabla u}} + \underline{\underline{\nabla u}}) - \frac{2}{3} \mathbf{m} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \right) + \sum_i Y_i \bar{f}_i = -\frac{\bar{\nabla} p}{\mathbf{r}} + \frac{\bar{\nabla} \mathbf{m}}{\mathbf{r}} \cdot \left[ (\underline{\underline{\nabla u}} + \underline{\underline{\nabla u}}) - \frac{2}{3} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \right] + \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{r}} \left[ \bar{\nabla}^2 \bar{u} - \frac{1}{3} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \right] + \sum_k Y_k \bar{f}_k \quad (\text{III.7})$$

che scritta in forma tensoriale diventa:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x_i} \cdot \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] + \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] + \sum_{k=1}^N (Y_k f_k)_i \quad (\text{III.8})$$

Nella (III.8), il primo termine a destra del segno di eguaglianza rappresenta la "driving force" dell'equazione della quantità di moto, in assenza della quale l'energia cinetica del campo verrebbe solo dissipata; gli altri termini rappresentano gli effetti sul campo di moto dovuti alla dissipazione viscosa.

### III.1.3 Equazioni di conservazione delle specie

L'equazione di conservazione della specie k-esima è:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \mathbf{r} Y_k dV = \int_V \dot{\mathbf{w}}_k dV \quad (\text{III.9})$$

ove  $\dot{\mathbf{w}}_k$  è la velocità di produzione o scomparsa dell'k-esima specie chimica. Sulla scia del procedimento seguito precedentemente, l'equazione (III.9) diventa:

$$\frac{D \mathbf{r} Y_k}{Dt} + \mathbf{r} Y_k (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}_k) = \dot{\mathbf{w}}_k \quad (\text{III.10})$$

dove  $\bar{\mathbf{u}}_k$  è la velocità della specie k-esima data dalla somma della velocità del baricentro d'insieme e quella relativa rispetto al baricentro:

$$\frac{\partial (\mathbf{r} Y_k)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot [\mathbf{r} Y_k (\bar{\mathbf{u}} + \bar{\mathbf{V}}_k)] = \dot{\mathbf{w}}_k \quad (\text{III.11})$$

Riscritta in forma tensoriale, l'equazione precedente assume la forma:

$$\mathbf{r} \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \mathbf{r} u_j \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = - \frac{\partial (\mathbf{r} Y_k \bar{V}_k)}{\partial x_j} + \dot{\mathbf{w}}_k \quad (\text{III.12})$$

### III.1.4 Equazione di conservazione dell'energia

L'equazione dell'energia da inserire nel sistema di equazioni è stata ricavata a partire dal primo principio della termodinamica:

$$\Delta E_T = L - Q \quad (\text{III.13})$$

dove  $E_T$  è l'energia totale del sistema, L il lavoro compiuto sul sistema e Q il calore scambiato con l'esterno (si assume che il calore ceduto abbia segno positivo mentre quello fornito abbia segno negativo). Indicando con E l'energia totale per unità di massa, la  $E_T$  può essere riscritta come:

$$E_T = \int_V \mathbf{r} E dV \quad (\text{III.14})$$

Moltiplicando scalarmente l'equazione del bilancio della quantità di moto per la velocità si ottiene la seguente espressione per il lavoro L:

$$L = \sum_{k=1}^{NS} \int_V Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{u}_k dV + \oint_S \bar{T} \cdot \bar{u} dS \quad (\text{III.15})$$

Assumendo che lo scambio di calore Q con l'esterno sia solo superficiale, l'equazione (III.13) può essere riscritta come:

$$\int_V \mathbf{r} E dV = \sum_{k=1}^{NS} \int_V Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{u}_k dV + \oint_S \bar{T} \cdot \bar{u} dS + \oint_S \bar{q} \cdot \bar{n} dS \quad (\text{III.16})$$

dove:

$$\bar{q} = -k \bar{\nabla} T + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \Re T \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\mathbf{a}_k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \quad (\text{III.17})$$

Nell'equazione (III.17) i termini a destra del segno di uguaglianza sono rispettivamente: il flusso di calore trasportato per conduzione (legge di Fourier), il flusso di calore dovuto al processo di interdiffusione  $\mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k$  e quello dovuto alla presenza di gradienti di concentrazione

$\Re T \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\mathbf{a}_k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l)$ . Il processo di interdiffusione (presente nei sistemi multicomponenti) è

dovuto al flusso di entalpia di tutte le specie che nell'unità di area e di tempo fluiscono attraverso una superficie che si muove alla velocità media della miscela del gas. Il flusso di calore legato ai gradienti di concentrazione, ovvero l'effetto Dufour, trova una sua spiegazione nel principio di reciprocità di Onsager: "se un gradiente di temperatura è responsabile di un flusso di massa (effetto Soret), allora allo stesso modo un gradiente di concentrazione deve produrre un flusso di calore (effetto Dufour)".

Accoppiando l'equazione (III.16) con l'equazione (III.17) si perviene alla forma dell'equazione di conservazione dell'energia scritta in termini di energia totale:

$$\mathbf{r} \frac{\partial E}{\partial t} + \mathbf{r} \bar{u} \cdot \bar{\nabla} E = \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{u}_k + \bar{\nabla} \cdot (\bar{T} \cdot \bar{u}) - \bar{\nabla} \cdot \left( -k \bar{\nabla} T + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \Re T \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\mathbf{a}_k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right) \quad (\text{III.18})$$

Esplicitando tale equazione rispetto all'energia interna, essendo  $E = e + \frac{u^2}{2}$  si ottiene:

$$\mathbf{r} \frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{r} \bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla} e = \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{\mathbf{u}}_k + \bar{T} : \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} - \bar{\nabla} \cdot \left( -k \bar{\nabla} T + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \mathfrak{RT} \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\mathbf{a}_k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right) \quad (\text{III.19})$$

Riscrivendo inoltre il tensore degli sforzi esplicitandolo rispetto alla pressione e al tensore di deformazione si ottiene:

$$\mathbf{r} \frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{r} \bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla} e = -p (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{\mathbf{u}}_k + \Phi - \bar{\nabla} \cdot \left( -k \bar{\nabla} T + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \mathfrak{RT} \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\mathbf{a}_k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right) \quad (\text{III.20})$$

dove

$$\Phi = \bar{\mathbf{s}} : \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} = \left[ -\frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} + \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = \frac{1}{2} \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \quad (\text{III.21})$$

è la funzione di dissipazione. L'equazione (III.21) mostra che tale termine è sempre positivo: ciò significa che il lavoro compiuto dagli sforzi viscosi va sempre ad incrementare l'energia interna a discapito dell'energia cinetica del flusso.

Riscrivendo l'equazione dell'energia interna in forma entalpica  $\left( e = h - \frac{p}{\mathbf{r}} \right)$ , l'equazione dell'energia assume la forma:

$$\mathbf{r} \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{\mathbf{u}}_k + \Phi - \bar{\nabla} \cdot \left( -k \bar{\nabla} T + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \mathfrak{RT} \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\mathbf{a}_k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right) \quad (\text{III.22})$$

che riscritta in forma tensoriale diventa:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + u_j \frac{\partial h}{\partial x_j} &= \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{\mathbf{r}} u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^N Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{\mathbf{u}}_k + \mathbf{u} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{u} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{u}_j}{\partial x_j} \right) + \\ & - \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ -\mathbf{I} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \mathfrak{RT} \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \left( \frac{X_l \mathbf{a}_k}{W_k D_{kl}} \right) (\bar{V}_l - \bar{V}_k) \right] \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

Tale equazione permette di arrivare alla formulazione finale dell'energia scritta in forma termica. Infatti, esplicitando l'entalpia in funzione delle variabili da cui dipende:

$$h = \sum_{k=1}^{NS} Y_k h_k(T) = \sum_{k=1}^{NS} (Y_k h_{fk}(T) + Y_k h_{sk}(T)) = \sum_{k=1}^{NS} \left( \int_{T_0}^T c_{pk} Y_k dT + Y_k h_{fk} \right) \quad (III.24)$$

e differenziando tale equazione, si ottiene:

$$\frac{Dh}{Dt} = \frac{Dh}{DT} \frac{DT}{Dt} + \frac{Dh}{DY_k} \frac{DY_k}{Dt} = \frac{D}{DT} \left( \sum_{k=1}^{NS} Y_k h_k(T) \right) \cdot \frac{DT}{Dt} + \frac{D}{DY_k} \left( \sum_{k=1}^{NS} Y_k h_k(T) \right) \cdot \frac{DY_k}{Dt} \quad (III.25)$$

svolvendo le derivate:

$$\frac{D}{DT} \left( \sum_{k=1}^{NS} Y_k h_k(T) \right) \cdot \frac{DT}{Dt} = \sum_{k=1}^{NS} \left( c_{pk} Y_k + Y_k \frac{\partial h_{fk}}{\partial T} \right) \frac{DT}{Dt} = c_p \frac{DT}{Dt} + \sum_{k=1}^{NS} Y_k \frac{\partial h_{fk}}{\partial T} \frac{DT}{Dt}$$

$$\frac{D}{DY_k} \left( \sum_{k=1}^{NS} Y_k h_k(T) \right) \cdot \frac{DY_k}{Dt} = \left( \sum_{k=1}^{NS} h_k(T) \right) \cdot \frac{DY_k}{Dt}$$

e si ottiene:

$$\frac{Dh}{DT} = c_p \frac{DT}{Dt} + \sum_{k=1}^{NS} Y_k \frac{\partial h_{fk}}{\partial T} \frac{DT}{Dt} + \sum_{k=1}^{NS} h_k(T) \cdot \frac{DY_k}{Dt} \quad (III.26)$$

Sostituendo l'equazione (III.11) nell'equazione precedente si ottiene:

$$\mathbf{r} \frac{Dh}{DT} = \mathbf{r} c_p \frac{DT}{Dt} + \sum_{k=1}^{NS} \mathbf{r} Y_k \frac{\partial h_{fk}}{\partial T} \frac{DT}{Dt} + \sum_{k=1}^{NS} h_k(T) \cdot \left( -\bar{\nabla} \cdot (\mathbf{r} Y_k \bar{V}_k) + \dot{\mathbf{w}}_k \right) \quad (III.27)$$

che sostituita nell'equazione (III.22) conduce a<sup>25</sup>:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} c_p \frac{DT}{Dt} &= \frac{Dp}{Dt} - \bar{\nabla} \cdot (k \bar{\nabla} T) - \bar{\nabla} \cdot \left( \mathfrak{R} T \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\mathbf{a}_k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right) + \Phi + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{\mathbf{u}}_k + \\ &- \sum_{k=1}^{NS} \mathbf{r} Y_k c_{pk} \bar{V}_k \cdot \bar{\nabla} T - \sum_{k=1}^{NS} h_k(T) \dot{\mathbf{w}}_k - \sum_{k=1}^{NS} \mathbf{r} Y_k \frac{\partial h_{fk}}{\partial T} \left( \frac{DT}{Dt} + \bar{V}_k \cdot \bar{\nabla} T \right) \end{aligned} \quad (III.28)$$

Moltiplicando scalarmente l'equazione (III.8) per la velocità:

$$\bar{\mathbf{u}} \cdot \left( \frac{d\bar{\mathbf{u}}}{dt} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla}) \bar{\mathbf{u}} = -\frac{\bar{\nabla} p}{\mathbf{r}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \nabla \left( \mathbf{m} \left( \overline{\nabla \mathbf{u}} + \overline{\nabla \mathbf{u}} \right) \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \right) \quad (III.29)$$



si ottiene l'espressione dell'energia meccanica:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} \bar{u}^2 + \frac{1}{2} (\bar{u} \cdot \bar{\nabla}) \bar{u}^2 = -\bar{u} \cdot \frac{\bar{\nabla} p}{\mathbf{r}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \bar{u} \cdot \nabla \left( \mathbf{m} \left( \bar{\nabla} u + \bar{\nabla} u' \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \bar{u}^2 \quad (\text{III.30})$$

Sommando i termini dell'equazione dell'energia meccanica e termica si ottiene la seguente espressione per l'energia totale:

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u} \cdot \bar{\nabla} k &= \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial t} - c_p \frac{\partial T}{\partial t} - c_p \bar{u} \cdot \bar{\nabla} T + \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \cdot (\bar{u} + \bar{V}_k) + \frac{\Phi}{\mathbf{r}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \bar{u} \cdot \bar{\nabla} \mathbf{t} + \sum_{k=1}^{NS} \dot{w}_k h_k + \\ &+ \frac{1}{\mathbf{r}} \bar{\nabla} \cdot \mathbf{I} \bar{\nabla} T - \bar{\nabla} \cdot \left[ \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k \right] - \frac{1}{\mathbf{r}} \bar{\nabla} \cdot \left[ \mathfrak{R} T \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \left( \frac{X_l \mathbf{a}_k}{w_k D_{lk}} \right) (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right] \end{aligned} \quad (\text{III.31})$$

Dopo aver dato un quadro generale delle equazioni di conservazione nelle loro diverse forme, occorre notare che il sistema di NS+6 (3 componenti della velocità, la pressione, la densità, la temperatura e NS specie chimiche) non è chiuso: per poter chiudere il sistema di equazioni occorre introdurre l'equazione di stato.

$$p = \mathbf{r} \mathfrak{R} T \sum_{k=1}^{NS} \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{III.32})$$

Riepilogando, le equazioni di Navier Stokes sono le seguenti:

Equazione di conservazione della massa:

$$\frac{1}{\mathbf{r}} \frac{D \mathbf{r}}{D t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{III.33})$$

Equazione di bilancio della quantità di moto:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x_i} \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] + \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] + \sum_{k=1}^{NS} (Y_k f_k)_i \quad (\text{III.34})$$

Equazione di conservazione dell'energia:

$$\mathbf{r} \frac{D h}{D t} = \frac{D p}{D t} + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{u}_k + \Phi - \bar{\nabla} \cdot \left( -k \bar{\nabla} T + \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \mathfrak{R} T \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l \mathbf{a}_k}{W_k D_{lk}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right) \quad (\text{III.35})$$

Equazione di conservazione delle specie:

$$\mathbf{r} \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \mathbf{r} u_j \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial (\mathbf{r} Y_i V_i)}{\partial x_i} + w_i \quad (\text{III.36})$$

Equazione di stato:

$$p = \mathbf{r} \mathfrak{R} T \sum_{k=1}^{NS} \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{III.37})$$

### III.2 ADIMENSIONALIZZAZIONE DELLE EQUAZIONI DI NAVIER STOKES

Per valutare il peso di ciascun termine delle equazioni (III.33) - (III.37) nelle equazioni stesse, si è proceduto alla loro adimensionalizzazione. L'analisi dimensionale permette, combinando le variabili presenti nel problema in gruppi caratteristici adimensionali, di dare immediato risalto ai fenomeni che contano di più rispetto ad altri. Una scelta adeguata delle grandezze di riferimento è dunque fondamentale per ottenere utili informazioni dalle equazioni stesse. Nel caso di flussi comprimibili, di interesse in questo lavoro, si sono assunte le seguenti grandezze di riferimento che riflettono le alte velocità del flusso:

- $l_0$  lunghezza caratteristica del vortice di larga scala
- $t_0$  tempo convettivo caratteristico del campo fluidodinamico
- $u_0$  velocità all'ingresso della camera di combustione
- $\rho_0$  densità all'ingresso della camera di combustione
- $T_0$  temperatura di inizio combustione
- $R_0 = \frac{\mathfrak{R}}{M_0}$  costante del gas calcolata assumendo come peso molare di riferimento quello di inizio combustione
- $p_0 = \rho_0 u_0^2$  pressione dinamica
- $h_0 = 1/2 u_0^2$  entalpia di ristagno

Nell'analisi adimensionale si sono considerati inoltre trascurabili le forze di massa, il flusso di calore dovuto all'interdiffusione, l'effetto Dufour e gli effetti dovuti alle eventuali non stazionarietà imposte dall'esterno.

Data una generica grandezza  $\Phi$ , la corrispondente grandezza adimensionale  $\Phi^*$  sarà data da:

$$\Phi^* = \frac{\Phi}{\Phi_0} \text{ dove } \Phi_0 \text{ è il rispettivo valore di riferimento.}$$

Considerando dunque le grandezze di riferimento nelle equazioni di Navier Stokes, si sono ottenute le rispettive equazioni adimensionali.

#### III.2.1 Equazione adimensionalizzata della conservazione della massa

Adimensionalizzando l'equazione (III.33) rispetto alle grandezze di riferimento indicate precedentemente si giunge alla:

$$\mathbf{r}_0 \frac{u_0}{l_0} \mathbf{r}^* \frac{\partial u_i^*}{\partial x_i^*} = -\frac{1}{R_0 T_0} \frac{p_0}{t_0} \frac{1}{R T^*} \left( \frac{\partial p^*}{\partial t^*} + u_i^* \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} \right) + \frac{p_0}{R_0 T_0^2} \frac{T_0}{t_0} \frac{p^*}{R^* T^{*2}} \left( \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + u_i^* \frac{\partial T^*}{\partial x_i^*} \right) + \frac{p_0}{R_0^2 T_0} \frac{R_0}{t_0} \frac{p^*}{R^* T^*} \left( \frac{\partial R^*}{\partial t^*} + u_i^* \frac{\partial R^*}{\partial x_i^*} \right) \quad (III.38)$$

che con alcuni passaggi algebrici diviene:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = -g Ma^2 \frac{1}{p} \left( \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + g Ma^2 \frac{1}{T} \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + g Ma^2 \frac{1}{R} \left( \frac{\partial R}{\partial t} + u_i \frac{\partial R}{\partial x_i} \right) \quad (\text{III.39})$$

dove  $Ma = \frac{u_0}{a_0} = \frac{u_0}{\sqrt{g R_0 T_0}}$ .

Per semplicità di scrittura, d'ora in avanti si ometterà l'asterisco in quanto ci si riferirà sempre a grandezze adimensionalizzate.

L'equazione (III.39) mostra che il termine dilatazionale  $\frac{\partial u_i}{\partial x_i}$ , a differenza del caso di flussi

incomprimibili non reattivi, non è nullo. In assenza di combustione tale variazione è dovuta oltre ai gradienti di temperatura dovuti agli sforzi viscosi, anche alle compressioni ed espansioni locali dovute alle variazioni di pressione. Il suddetto termine, infatti, rappresenta il rapporto tra il tempo acustico (tempo impiegato dalle singole molecole a percorrere uno spazio),  $t_a$ , e quello convettivo (tempo impiegato dal baricentro delle molecole),  $t_c$ . Essendo, nel caso in esame, il primo molto maggiore dell'altro si ha una diminuzione del libero cammino medio e dunque una variazione di volume degli elementi fluidi. In caso di combustione si ha anche il contributo dei gradienti di temperatura dovuti alla combustione stessa.

### III.2.2 Equazione adimensionalizzata del bilancio della quantità di moto

Adimensionalizzando l'equazione della quantità di moto si ottiene:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ m \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} m \frac{\partial u_k}{\partial x_k} d_{ij} \right] \quad (\text{III.40})$$

Tale equazione evidenzia che per flussi molto veloci, i termini inerziale e convettivo  $\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$  hanno lo stesso ordine di grandezza del termine sorgente  $-\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial x_i}$ : da ciò si evince che

per flussi supersonici, indipendentemente dalla scala, i gradienti di pressione a differenza dei termini viscosi non sono trascurabili e vengono direttamente tradotti in gradienti di velocità. Questi a loro volta favoriscono moti vorticosi promuovendo così un miglior mescolamento.

### III.2.3 Equazione adimensionalizzata della conservazione dell'energia

L'equazione dell'energia scritta in forma adimensionale assume la forma:

$$r \frac{\partial h}{\partial t} + r u_j \frac{\partial h}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{I}{(g-1) Ma^2 \text{RePr}} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{1}{\text{Re}} \Phi + Da \dot{w} h \quad (\text{III.41})$$

$$\text{con } \Phi = \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{2}{3} \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right)^2.$$

Dall'equazione dell'energia si evince che ad alti numeri di Mach il lavoro compiuto dalle forze di pressione non è più trascurabile: l'ordine di grandezza è lo stesso dei termini inerziale e convettivo dell'energia. Una piccola variazione di tali termini, dunque, viene direttamente risentita nel campo. L'influenza della chimica sull'energia totale dipende dal numero di Damkoehler, ovvero, dal rapporto tra il tempo convettivo e chimico. L'equazione mostra inoltre che per flussi ad alte velocità, in cui i numeri di Reynolds e di Mach sono entrambi molto grandi, gli scambi di calore per conduzione sono lenti ed il flusso macroscopicamente tende a conservare la propria energia totale. Nella zona di reazione e in tutte le zone in cui ci sono alti gradienti di temperatura (es. vicino alle pareti), tali gradienti però non possono essere trascurati.

### III.2.4 Equazione adimensionalizzata della conservazione delle specie

L'equazione adimensionalizzata della conservazione delle specie è:

$$\mathbf{r} \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \mathbf{r} u_j \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} = - \frac{1}{\text{ReSc}} \frac{\partial (\mathbf{r} Y_i V_i)}{\partial x_i} + Da w_i \quad (\text{III.42})$$

La produzione o scomparsa delle specie dipende, ovviamente, dal numero di Damkoehler. Come già accennato precedentemente, tale numero è dato dal rapporto tra i tempi convettivi che in flussi supersonici sono molto piccoli e i tempi chimici. Poiché i tempi chimici, per quanto esposto precedentemente subiscono una forte riduzione in quelle zone del campo dove gli effetti della comprimibilità non sono trascurabili, ci si aspetta che il numero di Damkoehler, a differenza di quanto generalmente si prevedrebbe sia maggiore dell'unità: la combustione supersonica è quindi possibile.

### III.2.5 Equazione di stato adimensionalizzata

L'equazione adimensionalizzata di stato è:

$$p = \mathbf{r} \mathfrak{R} T \sum_{k=1}^{NS} \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{III.43})$$

In conclusione, l'analisi adimensionale ha messo in risalto alcuni aspetti fondamentali che avvengono a grandi scale: la presenza del termine dilatazionale dipendente dal quadrato del numero di Mach e l'effetto del lavoro compiuto ad opera dei gradienti di pressione che in flussi supersonici è presente a tutte le scale. Al fine di poter comprendere, però, l'effetto delle alte velocità sul

### *III. ANALISI DELLE EQUAZIONI DI NAVIER STOKES*

mescolamento e per poter definire come avvenga la combustione e come la fiamma si accendi e si evolva in regime supersonico è necessario richiamare alcuni aspetti fondamentali della turbolenza e mostrare il suo legame con la vorticità.

## CAPITOLO IV

### IV. FLUSSI TURBOLENTI COMPRIMIBILI

#### IV. LEGENDA DEI SIMBOLI

##### *Simboli dell'alfabeto inglese*

$a$	<i>velocità del suono</i>
$c_p$	<i>calore specifico a pressione costante medio</i>
$D$	<i>coefficiente di diffusione di specie chimiche</i>
$Da$	<i>numero di Damkoehler</i>
$f_k$	<i>forza di volume esterna esercitata sulla <math>k</math>-esima specie</i>
$h$	<i>entalpia per unità di area e tempo</i>
$H$	<i>elicità</i>
$k$	<i>coefficiente di conduzione termica</i>
$Ma$	<i>numero di Mach</i>
$NS$	<i>numero di specie chimiche</i>
$p$	<i>pressione</i>
$R$	<i>costante dei gas</i>
$Re$	<i>numero di Reynolds</i>
$\mathfrak{R}$	<i>costante universale dei gas</i>
$T$	<i>temperatura</i>
$\bar{u}$	<i>vettore velocità di componenti (<math>u, v, w</math>)</i>
$\bar{V}_k$	<i>velocità di diffusione della <math>k</math>-esima specie</i>
$W_k$	<i>peso molare della <math>k</math>-esima specie</i>
$\bar{x}$	<i>variabile nello spazio di componenti (<math>x, y, z</math>)</i>
$X_k$	<i>concentrazione della <math>k</math>-esima specie</i>
$Y_k$	<i>frazione massica della <math>k</math>-esima specie</i>

##### *Simboli dell'alfabeto greco*

$\mathbf{a}$	<i>diffusività termica</i>
$\mathbf{F}$	<i>funzione di dissipazione dell'energia e grandezza generica</i>
$\mathbf{g}$	<i>rapporto dei calori specifici</i>
$\mathbf{l}$	<i>secondo coefficiente di viscosità od autovalore</i>
$\mathbf{m}$	<i>viscosità molecolare dinamica</i>
$\mathbf{m}_b$	<i>bulk viscosity</i>
$\mathbf{n}$	<i>viscosità molecolare cinematica</i>

$\rho$	densità
$\bar{\mathbf{S}}$	tensore degli sforzi
$\mathbf{W}$	vettore della vorticità di componenti $(\omega_x, \omega_y, \omega_z)$
$\dot{\mathbf{W}}$	velocità di reazione

**Apici e Pedici**

$[\ ]_0$	valore di equilibrio o di riferimento della grandezza
$[\ ]_i$	componente $i$ -esima del vettore
$[\ ]_j$	componente $j$ -esima del vettore
$[\ ]_k$	indice della specie $k$ -esima
$[\ ]_l$	indice della specie $l$ -esima
$[\ ]^*$	valore adimensionale della grandezza

## IV.1 ASPETTI DELLA TURBOLENZA

Sebbene il concetto di turbolenza sia ben noto, a tutt'oggi ancora non ne esiste una definizione rigorosa. Nel 1937, Taylor e Von Kàrmàn la definirono come: *“un moto irregolare, che in generale, si verifica nei fluidi, gassosi o liquidi, quando essi superano una superficie solida od anche quando correnti dello stesso fluido si incontrano scorrendo l'una sull'altra”*. Tale aspetto della turbolenza era però legato all'osservazione di una delle sue tante manifestazioni (fluido su lastra o scorrimento tra fluidi). L'osservazione quotidiana dei fenomeni turbolenti, come ad esempio il moto del fumo di una sigaretta e il miscelamento tra latte e caffè, permette di coglierne aspetti differenti, senza riuscire però a racchiuderli tutti in una definizione matematica rigorosa. I flussi turbolenti, come accennato nel capitolo precedente, sono caratterizzati da alti numeri di Reynolds e ciò significa che i termini dissipativi delle equazioni di Navier Stokes sono trascurabili rispetto agli altri (vedi Cap. III). Riscrivendo l'equazione di trasporto della quantità di moto trascurando i termini dissipativi si giunge all'equazione di Eulero che mostra chiaramente che una piccola perturbazione, non venendo dissipata, viene amplificata a causa della non linearità delle equazioni del moto: l'evoluzione del flusso turbolento è quindi *“instabile ed imprevedibile”*. L'energia presente alle grandi scale non viene dissipata ma viene trasmessa alle piccole scale promuovendo la generazione di strutture che rendono il trasporto di massa, di quantità di moto e di energia molto più rapido del caso laminare. Alle piccole scale i termini diffusivi tornano a valori confrontabili con gli altri favorendo quindi la dissipazione di energia. Questo apparente aumento di diffusività è legato ad un maggior trasporto convettivo dovuto alla presenza di uno spettro di scale.

## IV.2 RELAZIONE TRA VORTICITÀ E TURBOLENZA

Un primo approccio per stabilire se ci sia una relazione biunivoca tra vorticità<sup>26</sup> e turbolenza è quello di cercare, nelle equazioni di Navier Stokes, una relazione tra queste due grandezze. Considerando per semplicità l'equazione della vorticità per flussi incomprimibili:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \bar{\nabla} \times (\bar{\mathbf{w}} \times \bar{\mathbf{u}}) = \mathbf{n} \overline{\nabla^2 \mathbf{w}} \quad (\text{IV.1})$$

e trascurando in prima analisi gli sforzi viscosi (essendo la turbolenza un fenomeno che si manifesta ad alti numeri di Reynolds), la (IV.1) si riduce a :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \bar{\nabla} \times (\bar{\mathbf{w}} \times \bar{\mathbf{u}}) = 0 \quad (\text{IV.2})$$



In un flusso tridimensionale essendo  $\bar{\nabla} \times (\bar{\mathbf{w}} \times \bar{\mathbf{u}}) \neq 0$  ne discende che l'accelerazione angolare  $\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t}$  debba necessariamente essere non nulla. La presenza di vorticità nel campo indica quindi che

il flusso è non stazionario: in assenza di sforzi viscosi la vorticità introduce una non stazionarietà nel flusso; tale non stazionarietà del flusso<sup>27</sup>, in realtà, non implica direttamente la presenza di turbolenza. Avendo però assunto che gli sforzi viscosi possono essere trascurati (alti Reynolds), l'energia associata ai vortici di larga scala, non potendo essere dissipata, viene trasferita nel campo creando tante più scale quanto più è alta l'energia iniziale e limitate solo dalla dimensione del campo. Il termine che esprime la relazione tra moto medio e vorticità è il termine di vortex stretching  $\bar{\nabla} \times (\bar{\mathbf{w}} \times \bar{\mathbf{u}})$ : attraverso il moto medio i grandi vortici (le cui dimensioni sono dettate dalla geometria e dalle condizioni al contorno) vengono stirati innescando un meccanismo di generazione dei piccoli vortici. In assenza di tale termine la turbolenza non potrebbe sostenersi: dunque un flusso turbolento è necessariamente tridimensionale.

La presenza di tante scale e della non stazionarietà sono entrambe caratteristiche specifiche della turbolenza: flussi ad alti Re con vorticità non nulla sono necessariamente turbolenti.

Al fine dunque di comprendere l'evoluzione del flusso in regime comprimibile e valutarne caratteristiche quali ad esempio il mescolamento si è richiamata l'equazione di trasporto della vorticità.

### IV.3 EQUAZIONE DI TRASPORTO DELLA VORTICITÀ

La vorticità esprime la rotazionalità del flusso dovuta alla presenza di gradienti di velocità, è quindi definibile dalla relazione:

$$\bar{\mathbf{w}} = \bar{\nabla} \times \bar{\mathbf{u}} \quad (\text{IV.3})$$

L'equazione di trasporto della vorticità si ricava dunque dal rotore dell'equazione di trasporto della quantità di moto:

$$\bar{\nabla} \times \left[ \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla}) \bar{\mathbf{u}} = -\frac{\bar{\nabla} p}{\mathbf{r}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \nabla \left( \bar{\mathbf{m}} (\bar{\nabla} \mathbf{u} + \bar{\nabla} u) \right) - \frac{2}{3} \bar{\mathbf{m}} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) \right] + \sum_i^{NS} \bar{\chi}_i \bar{f}_i = -\frac{\bar{\nabla} p}{\mathbf{r}} + \frac{\bar{\nabla} \bar{\mathbf{m}}}{\mathbf{r}} \cdot \left[ (\bar{\nabla} \mathbf{u} + \bar{\nabla} u) \right] - \frac{2}{3} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \frac{\bar{\mathbf{m}}}{\mathbf{r}} \left[ \bar{\nabla}^2 u - \frac{1}{3} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) \right] + \sum_k^{NS} \bar{\chi}_{kj} \bar{f}_k \quad (\text{IV.4})$$

Attraverso semplici passaggi matematici si è arrivati alla:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla}) \bar{\mathbf{w}} = \bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} - \bar{\mathbf{w}} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \frac{\bar{\nabla} \mathbf{r} \times \bar{\nabla} p}{\mathbf{r}^2} + \mathbf{n} \bar{\nabla}^2 \bar{\mathbf{w}} + \left( -\frac{1}{\mathbf{r}^2} \bar{\nabla} \mathbf{r} \times (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{s}}) + \frac{1}{\mathbf{r}} \left\{ \bar{\nabla} \mathbf{m} \times \left[ \bar{\nabla}^2 u + \bar{\nabla} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) \right] + 2 \bar{\nabla} \times (\bar{\mathbf{E}} \bar{\nabla} \bar{\mathbf{m}}) \right\} \right) \quad (\text{IV.5})$$

L'equazione della vorticità, a meno del termine baroclinico e degli effetti dovuti alla variazione delle proprietà molecolari (a causa ad esempio della combustione) è una equazione omogenea in  $\omega$ . Il primo termine dell'equazione rappresenta la variazione di vorticità dovuta alla non stazionarietà del campo, mentre il secondo termine ne rappresenta il trasporto convettivo.

Il termine di vortex stretching rappresenta l'effetto del moto medio sulla turbolenza. Inoltre, scomponendo il tensore degli sforzi nella sua parte simmetrica e antisimmetrica si ottiene:

$$\bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{w}} \cdot \text{Sym} \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} + \bar{\mathbf{w}} \cdot \text{Skw} \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} \quad (\text{IV.6})$$

essendo  $\bar{\mathbf{w}} \cdot \text{Skw} \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} = 0$ , si ottiene:

$$\bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{w}} \cdot \text{Sym} \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} \quad (\text{IV.7})$$

Dall'equazione (IV.7) si evince che il termine di vortex stretching rappresenta la velocità con cui un volume viene deformato per effetto dei gradienti di velocità e non tiene conto della sua rotazione. Considerando ad esempio dei tubi vorticosi, si ha che per effetto del vortex stretching questi vengono stirati innescando un processo di generazione di vortici sempre più piccoli. Per la conservazione del momento angolare, al diminuire delle dimensioni dei vortici si ha un aumento

della loro velocità di rotazione e quindi un aumento delle fluttuazioni osservate nel campo. Il termine  $\overline{\mathbf{w}(\nabla \cdot \mathbf{u})}$  è presente solo in flussi comprimibili: tale termine ha l'effetto di concentrare o disperdere la vorticità presente nel campo a secondo che si abbiano compressioni o dilatazioni locali. Il termine baroclinico  $\frac{\nabla \mathbf{r} \times \nabla p}{\rho^2}$  indica la creazione di vorticità dovuta alla presenza di gradienti di pressione e densità. La presenza di un campo di pressione e di disomogeneità di densità (causata ad esempio dalle differenti densità delle due correnti), infatti, conferisce un'accelerazione maggiore a zone a densità minore: questo effetto (baroclinico) può essere sorgente o pozzo per la vorticità. Gli altri termini mostrano l'effetto della dissipazione viscosa che è principalmente quello di dissipare l'energia dei vortici distruggendo le strutture vorticosi; si deve però tener presente che, in taluni casi, tali termini possono essere sorgenti per la vorticità.

## IV.4 ADIMENSIONALIZZAZIONE DELL'EQUAZIONE DELLA VORTICITÀ PER FLUSSI INCOMPRESSIBILI

Al fine di mostrare i termini dominanti dell'equazione della vorticità per flussi supersonici si è proceduto con l'analisi adimensionale:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{w}} = \bar{\mathbf{w}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} - \bar{\mathbf{w}} (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \frac{\nabla \bar{\mathbf{r}} \times \nabla \bar{p}}{r^2} + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \bar{\mathbf{w}} + \frac{1}{\text{Re}} \left( -\frac{1}{r^2} \nabla \bar{\mathbf{r}} \times (\nabla \cdot \bar{\mathbf{s}}) + \frac{1}{r} \left\{ \nabla \bar{\mathbf{m}} \times [\nabla^2 \bar{\mathbf{u}} + \nabla (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}})] + 2 \nabla \times (\bar{\mathbf{E}} \nabla \bar{\mathbf{m}}) \right\} \right) \quad (\text{IV.8})$$

Le grandezze di riferimento sono le stesse utilizzate nel capitolo precedente.

Dalla (IV.8) si evince che in flussi supersonici il termine convettivo, quello di vortex stretching (il 3°), quello di compressione (il 4°) e quello baroclinico (il 5°) hanno lo stesso ordine di grandezza e quindi la stessa influenza sul flusso sia a grandi che a piccole scale. I termini viscosi sono moltiplicati per l'inverso del numero di Reynolds e quindi a larga scala sono trascurabili.

La presenza di vorticità nel flusso permette un mescolamento efficace e quindi una combustione più efficiente. L'aumento di temperatura dovuto alla combustione ha però l'effetto di espandere il flusso e quindi tende a rilaminarizzarlo. Allo stesso tempo però, poiché a  $Ma > 1$  le fluttuazioni di velocità dovute alla combustione danno luogo a compressioni locali e quindi ad un aumento della vorticità nel flusso, la temperatura gioca due opposti ruoli sulla vorticità. Inoltre, poiché nella sua equazione non compare il numero di Mach, se c'è vorticità nel flusso il suo trasporto è indipendente dalla velocità assoluta anche se la sua presenza è legata più che alla velocità in sé, ai gradienti della velocità (ad alti Mach avere dei gradienti non è semplice). Al fine di ottenere informazioni sul trasporto di vorticità in regime supersonico è opportuno adimensionalizzarne l'equazione mettendo in risalto la scarsa intensità della turbolenza in flussi a  $Ma > 1$ .

## IV.5 EFFETTI DEL MA SULLA TURBOLENZA

Un flusso supersonico è caratterizzato dall'aver la velocità lungo la direzione del moto (ad es. x) molto superiore a quella nelle altre due direzioni (y e z). Al fine di evidenziare l'effetto di tale comportamento peculiare dei flussi supersonici si è proceduto alla adimensionalizzazione delle equazioni di Navier Stokes adottando come velocità di riferimento u e w, con:

$$u > a \gg v \approx w \text{ e quindi } u \gg v \text{ e } u \gg w \text{ (} a \text{ è la velocità del suono del flusso),}$$

Indicando dunque con:

$$k_s = \frac{Ma^{sub}}{Ma^{sup}} = \frac{v^*}{u^*} \quad (\text{IV.9})$$

il rapporto tra il Mach della corrente principale ( $Ma^{\text{sup}} = u/a$ ) e quello relativo alle velocità nelle altre due direzioni ( $Ma^{\text{sub}} = v/a$ ), si ha che in flussi supersonici  $k_s \ll 1$ .

Al fine di poter mettere in risalto le anisotropie del flusso le equazioni sono state riscritte in coordinate cartesiane.

### IV.5.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione di conservazione della massa riscritta in coordinate cartesiane diventa:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x} u + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial y} v + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial z} w + \mathbf{r} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = 0 \quad (\text{IV.10})$$

Adimensionalizzata rispetto alle seguenti grandezze di riferimento  $\mathbf{r}^*$ ,  $l^*$ ,  $u^*$ ,  $v^*$ ,  $t^* = \frac{l^*}{v^*}$  e

$p^* = \mathbf{r}^* u^{*2}$ , si è arrivati alla:

$$\frac{\mathbf{r}^*}{l^*} \frac{\partial \mathbf{r}_0}{\partial t_0} + \frac{\mathbf{r}^*}{l^*} u^* \frac{\partial \mathbf{r}_0}{\partial x_0} u_0 + \frac{\mathbf{r}^*}{l^*} v^* \frac{\partial \mathbf{r}_0}{\partial y_0} v_0 + \frac{\mathbf{r}^*}{l^*} v^* \frac{\partial \mathbf{r}_0}{\partial z_0} w_0 + \frac{\mathbf{r}^*}{l^*} u^* \mathbf{r}_0 \frac{\partial u_0}{\partial x_0} + \frac{\mathbf{r}^*}{l^*} v^* \mathbf{r}_0 \frac{\partial v_0}{\partial y_0} + \frac{\mathbf{r}^*}{l^*} v^* \mathbf{r}_0 \frac{\partial w_0}{\partial z_0} = 0 \quad (\text{IV.11})$$

Dividendo l'equazione (IV.11) per  $\frac{\mathbf{r}^*}{l^*} u^*$ , facendo comparire  $k_s$  e omettendo l'apice 0 alle variabili adimensionalizzate si ottiene l'espressione:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x} u + \mathbf{r} \frac{\partial u}{\partial x} + k_s \left[ \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial y} v + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial z} w + \mathbf{r} \left( \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] = 0 \quad (\text{IV.12})$$

Poiché  $k_s \ll 1$ , il termine moltiplicativo di  $k_s$  può essere, in prima approssimazione, trascurato giungendo quindi alla:

$$\frac{\partial \mathbf{r} u}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV.13})$$

Dall'equazione (IV.13) si evince che in flussi ad alto Ma, la variazione di  $u$  lungo la direzione del moto è compensata (*in prima approssimazione*) da una variazione di densità lungo la stessa direzione e non dalla nascita di gradienti di velocità lungo le altre direzioni.

IV.5.2 Equazione della quantità di moto

$$\mathbf{r} \left[ \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right] = -\nabla p + \nabla : \underline{\underline{t}} \quad (\text{IV.14})$$

Riscrivendo la (IV.14) in coordinate cartesiane e trascurando gli sforzi viscosi si ha:

$$\begin{cases} \mathbf{r} \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} \\ \mathbf{r} \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} \\ \mathbf{r} \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} \end{cases} \quad (\text{IV.15})$$

Adimensionalizzando le (IV.15), si ottiene:

$$\begin{cases} u \frac{\partial u}{\partial x} + k_s \left( \frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial x} \\ u \frac{\partial v}{\partial x} + k_s \left( \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{1}{k_s} \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial y} \\ u \frac{\partial w}{\partial x} + k_s \left( \frac{\partial w}{\partial t} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{1}{k_s} \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial z} \end{cases} \quad (\text{IV.16})$$

da cui, trascurando di nuovo il termine moltiplicato per  $k_s$ , si arriva a:

$$\begin{cases} u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial x} \\ u \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{1}{k_s} \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial y} \\ u \frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{1}{k_s} \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial p}{\partial z} \end{cases} \quad (\text{IV.17})$$

Dalla prima delle tre equazioni si ottiene una soluzione “banale”, ovvero il teorema di Bernoulli secondo il quale a variazioni di pressione lungo una linea di corrente corrispondono variazioni di

velocità nella stessa direzione se il flusso è stazionario. Le altre due equazioni invece mostrano che, in flussi supersonici, essendo  $k_s \ll 1$  anche piccoli gradienti di pressione lungo  $y$  e  $z$  possono far nascere gradienti di  $v$  e  $w$  lungo la direzione del flusso. Riscrivendo l'equazione della vorticità sottoforma di gradienti di velocità:

$$\begin{cases} w_x = \frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} \\ w_y = \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} \\ w_z = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \end{cases} \quad (IV.18)$$

si osserva che la generazione dei gradienti di velocità  $\frac{\partial v}{\partial x}$  e  $\frac{\partial w}{\partial x}$  potrebbe dar luogo ad una produzione locale di vorticità lungo  $y$  e  $z$ . Ciò significa che **gradienti di pressione trasversali, anche piccoli, possono indurre una generazione locale di vorticità nel flusso**: ciò spiega, inoltre, il miglior mescolamento ottenibile con iniettori lobed plate mixers (hypermixers).

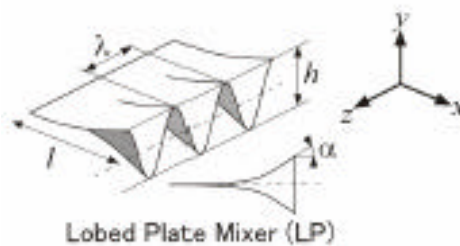


Figura IV.1 Iniettori lobed plate mixers

Indurre gradienti di pressione è dunque favorevole ai fini di una maggiore efficienza di combustione anche se a scapito di maggiori perdite di pressione e dunque della spinta prodotta dal motore. Analisi sperimentali hanno mostrato, infatti, che aumentando il rapporto tra le pressioni tra getto di combustibile e aria, l'ancoraggio di fiamma è facilitato. Gradienti di pressione si hanno anche all'interfaccia tra aria e combustibile, possono essere causati localmente dalla combustione o indotti da una particolare geometria della camera di combustione.

In flussi supersonici si hanno forti variazioni di pressione in prossimità di un'onda d'urto: presumibilmente dunque, in tale zona si potrebbe avere un mescolamento efficiente e l'ancoraggio di fiamma.

Per verificare l'effetto dei gradienti di pressione sulla vorticità è opportuno, a rigori, fare un'analisi dell'equazione della vorticità. In tal caso, infatti, essendo nullo il rotore del gradiente di una

qualsiasi grandezza, è possibile stabilire con più correttezza il contributo dato dalle variazioni locali di ciascun termine dell'equazione alla vorticità.

### IV.5.3 Equazione della vorticità

Riprendendo l'equazione completa del trasporto di vorticità:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{w}} = \bar{\mathbf{w}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} - \bar{\mathbf{w}} (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \frac{\nabla \bar{\mathbf{r}} \times \nabla \bar{p}}{r^2} + \mathbf{n} \nabla^2 \bar{\mathbf{w}} + \\ + \left( -\frac{1}{r^2} \nabla \bar{\mathbf{r}} \times (\nabla \cdot \bar{\mathbf{S}}) + \frac{1}{r} \left\{ \nabla \bar{\mathbf{m}} \times [\nabla^2 \bar{\mathbf{u}} + \nabla (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}})] + 2 \nabla \times (\bar{\mathbf{E}} \nabla \bar{\mathbf{m}}) \right\} \right) \end{aligned} \quad (IV.19)$$

trascurando i termini viscosi e riscrivendola in coordinate cartesiane si ottiene:

$$\begin{cases} \frac{\partial w_x}{\partial t} + u \frac{\partial w_x}{\partial x} + v \frac{\partial w_x}{\partial y} + w \frac{\partial w_x}{\partial z} = w_x \frac{\partial u}{\partial x} + w_y \frac{\partial v}{\partial x} + w_z \frac{\partial w}{\partial x} - w_x \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial p}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} + u \frac{\partial w_y}{\partial x} + v \frac{\partial w_y}{\partial y} + w \frac{\partial w_y}{\partial z} = w_x \frac{\partial u}{\partial y} + w_y \frac{\partial v}{\partial y} + w_z \frac{\partial w}{\partial y} - w_y \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial w_z}{\partial t} + u \frac{\partial w_z}{\partial x} + v \frac{\partial w_z}{\partial y} + w \frac{\partial w_z}{\partial z} = w_x \frac{\partial u}{\partial z} + w_y \frac{\partial v}{\partial z} + w_z \frac{\partial w}{\partial z} - w_z \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \end{cases} \quad (IV.20)$$

Combinando la (IV.20) con la (IV.18) ed adimensionalizzando si è ottenuto per la componente della vorticità lungo x:

$$u \frac{\partial w_x}{\partial x} = w_y \frac{\partial v}{\partial x} + w_z \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{1}{k_s} \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial p}{\partial y} \right) \quad (IV.21)$$

Dalla (IV.21) si evince che, essendo  $1/k_s \gg 1$ , variazioni di pressione e densità lungo le due direzioni ortogonali al moto hanno una forte influenza sul trasporto di vorticità lungo il moto. Tali variazioni sono, inoltre, accompagnate anche dalla nascita di gradienti di  $v$  e  $w$  lungo la direzione del flusso  $\frac{\partial v}{\partial x}$  e  $\frac{\partial w}{\partial x}$ , quindi, per la (IV.18) dalla generazione delle componenti trasversali della vorticità  $w_y$  e  $w_z$ .

Dalla (IV.17) si evince, inoltre, che in assenza di gradienti di pressione  $\frac{\partial p}{\partial z}$  e  $\frac{\partial p}{\partial y}$  anche i gradienti

di velocità  $\frac{\partial v}{\partial x}$  e  $\frac{\partial w}{\partial x}$  sono nulli e quindi la (IV.21) si riduce a  $u \frac{\partial w_x}{\partial x} = 0$ : **in assenza di gradienti**

**di pressione trasversali al moto la vorticità resta circa costante lungo il moto stesso.**



#### IV.5.4 Equazione dell'elicità

È utile derivare anche l'equazione per l'elicità,  $H$ : tale grandezza, infatti, rappresenta l'accelerazione angolare, ovvero, la velocità con cui la vorticità cambia nel tempo.

$$H = \bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\mathbf{u}} \quad (IV.22)$$

Dalla sua definizione si deduce che l'elicità è massima in flussi in cui la vorticità e la velocità sono allineati e quindi in correnti streamwise. Dall'equazione della vorticità riscritta trascurando il termine baroclinico e i gradienti della viscosità molecolare:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \bar{\nabla} \times (\bar{\mathbf{w}} \times \bar{\mathbf{u}}) = \mathbf{n} \bar{\nabla}^2 \bar{\mathbf{w}} \quad (IV.23)$$

si deduce che in un flusso ad elicità massima, il termine  $\bar{\nabla} \times (\bar{\mathbf{w}} \times \bar{\mathbf{u}})$  è molto piccolo e quindi la turbolenza è debole. Trascurando, in prima approssimazione i termini viscosi, infatti, e poiché il termine di vortex stretching è quasi nullo, il termine inerziale  $\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} \sim 0$ : la vorticità resta circa costante. Poiché il termine responsabile del trasferimento di energia associata ai vortici di larga scala è debole, il processo di cascata<sup>28</sup> di energia verso le piccole scale è sfavorito e quindi il mescolamento è meno intenso. L'elicità dà dunque indicazioni sul mescolamento: in correnti ad elicità massima il mescolamento è debole.

Riscrivendo, dunque, l'equazione dell'elicità in coordinate cartesiane si ottiene:

$$H = \mathbf{w}_x u + \mathbf{w}_y v + \mathbf{w}_z w = \left( \frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} \right) u + \left( \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} \right) v + \left( \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) w \quad (IV.24)$$

Adimensionalizzando la (IV.24), si arriva alla:

$$H = \mathbf{w}_x u + \frac{\partial u}{\partial z} v - \frac{\partial u}{\partial y} w + k_s \left( \frac{\partial v}{\partial x} w - \frac{\partial w}{\partial x} v \right) \quad (IV.25)$$

Essendo  $k_s \ll 1$  la (IV.25) diventa:

$$H = \mathbf{w}_x u + \frac{\partial u}{\partial z} v - \frac{\partial u}{\partial y} w \quad (IV.26)$$

Poiché in un flusso supersonico  $\frac{\partial u}{\partial z}$ ,  $\frac{\partial u}{\partial y}$ ,  $v$  e  $w$  sono piccoli, dalla (IV.26) si evince che **l'elicità è**

**principalmente streamwise: quindi, in un flusso supersonico, essendo velocità e vorticità allineati, l'elicità è massima.** Da ciò si evince che, in prima approssimazione, essendo  $\bar{\nabla} \times (\bar{\mathbf{w}} \times \bar{\mathbf{u}}) \sim 0$  **un flusso supersonico è un di flusso Beltrami**<sup>29</sup>. Da quanto detto precedentemente, ne consegue che in un flusso supersonico l'intensità della turbolenza è debole, il trasferimento di energia è lento e le scale presenti nel flusso sono poche. Da ciò si evince che la pendenza della curva del trasferimento di energia in funzione del numero d'onda è al massimo  $-5/3$ , ma sarà probabilmente più bassa rispetto al caso subsonico.

Recenti studi<sup>30</sup>, basati su risultati ottenuti tramite DNS confermano i risultati ottenuti dall'analisi adimensionale. Per flussi incompressibili, infatti, Vincent e Meneguzzi<sup>31</sup> hanno mostrato che la turbolenza non ha una direzione preferenziale e può considerarsi quindi omogenea: i vortici sono omogeneamente distribuiti lungo le tre dimensioni; dalla stessa analisi, inoltre, è stato evidenziato che, in flussi subsonici, la vorticità è organizzata in filamenti tubolari e che il termine responsabile del trasferimento di energia dalle grandi alle piccole scale è il termine di vortex stretching. Per flussi compressibili, invece, gli shocks presenti nel flusso rappresentano un meccanismo addizionale di dissipazione dell'energia cinetica. In particolare, Kida e Orszag<sup>32</sup> hanno osservato, dalle loro simulazioni numeriche dirette, che in corrispondenza degli shocks si ha una generazione di vorticità dovuta principalmente al termine baroclinico ed un'amplificazione da attribuirsi principalmente al termine di compressibilità, mentre, nelle regioni lontane dagli shocks il trasporto di vorticità è dovuto, come nel caso subsonico, principalmente al termine di vortex stretching. In particolare, in regime supersonico le strutture dissipative sono bidimensionali, quindi, invece dei tubi vorticosi caratteristici delle strutture fini in regime subsonico, si hanno superfici dissipative. Simulazioni numeriche dirette hanno, inoltre, evidenziato che la turbolenza è principalmente streamwise: si ha, infatti, una maggiore probabilità che i vettori della vorticità e la velocità formino un angolo di  $0^\circ$  o  $180^\circ$  gradi<sup>33</sup>.

Ciò conferma che la pendenza della curva del trasferimento di energia nel range inerziale sarà probabilmente differente dal classico valore  $-5/3$  e quindi l'ipotesi di Kolmogorov<sup>34</sup> è valida solo sotto certe ipotesi. Dall'equazione della vorticità, riscritta trascurando il termine baroclinico e i gradienti di viscosità molecolare:

$$\frac{D\bar{\mathbf{w}}}{Dt} = \bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} + \bar{\mathbf{n}} \bar{\nabla}^2 \bar{\mathbf{w}} - \bar{\mathbf{w}} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) \quad (IV.27)$$

si evince, infatti, che per flussi incompressibili essendo  $\bar{\mathbf{w}} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) = 0$  e poiché a larghe scale è possibile trascurare i termini viscosi tale equazione assume la forma:

$$\frac{D\bar{\mathbf{w}}}{Dt} = \bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} \quad (IV.28)$$

La vorticità, dunque, attraverso il termine di vortex stretching, viene trasportata dalle grandi alle piccole scale e l'energia prodotta dai grandi vortici viene trasferita interamente ai piccoli vortici dove viene dissipata:

$$\frac{u^3}{L} = \mathbf{n} \mathbf{w}_k^2 \quad (IV.29)$$

In flussi supersonici, invece, trascurando i termini viscosi l'equazione della vorticità (IV.27) assume la forma:

$$\frac{D\bar{\mathbf{w}}}{Dt} = \bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} - \bar{\mathbf{w}} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) \quad (IV.30)$$

Tale equazione mostra che la vorticità oltre ad essere trasportata dalle grandi alle piccole scale, per effetto della comprimibilità può essere anche ridotta o intensificata secondo che si abbia una compressione o una espansione locale. A tal proposito va ricordato che l'equazione adimensionalizzata della vorticità mostrava che i tempi caratteristici del fenomeno di vortex stretching e dell'espansione/compressione locale fossero dello stesso ordine di grandezza, quindi, lì dove si verificano compressioni locali si ha un aumento del trasporto di vorticità, viceversa nelle zone di espansione. **A causa degli effetti di comprimibilità del flusso** il termine  $\bar{\mathbf{w}} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) \neq 0$  e quindi **l'ipotesi di Kolmogorov di range inerziale non è più generalmente valida**: l'energia trasferita dai grandi vortici a quelli più piccoli non può più considerarsi costante. Inoltre, dall'equazione della vorticità scritta in forma completa (eq.ne (IV.8)), si evince che **anche la combustione, per il tramite dei gradienti delle della viscosità, del calore specifico e del coefficiente di conduttività termica e del termine dilatazionale rende debole l'ipotesi di Kolmogorov**. Per ricavare una legge fisica che leghi la generazione dei vortici piccoli a partire da quelli di grande scala in modo più rigoroso occorrerebbe tener conto anche degli effetti della comprimibilità del flusso e della combustione.

A conferma di ciò, simulazioni DNS di mixing layer 2D<sup>35</sup>. mostrano che la pendenza è  $k^{-4}$ .

Ritornando alla (IV.26), poiché in prossimità delle onde d'urto i termini  $\frac{\partial v}{\partial x}$  e  $\frac{\partial w}{\partial x}$  non sono più trascurabili, vi possono essere zone di ancoraggio di fiamma; inoltre, generando per mezzo della combustione gradienti di pressioni locali, la fiamma può autosostenersi, quindi, nonostante in tutto il campo l'intensità della turbolenza sia bassa è plausibile prevedere zone di combustione in prossimità di urti, o zone sottili di fiamma in prossimità dell'interfaccia tra combustibile e ossidante dove, i gradienti di pressione, temperatura e specie chimiche sono notevolmente alti.

A valle dell'analisi della comprimibilità sulla turbolenza è dunque ora importante stabilire quale sia l'effetto della comprimibilità sul regime di combustione, sull'ancoraggio della fiamma e sulla sua evoluzione, e stabilire se in regime supersonico sia possibile garantire l'ancoraggio della fiamma.

## CAPITOLO V

---

### V. LA COMBUSTIONE SUPERSONICA

#### V. LEGENDA DEI SIMBOLI

##### *Simboli dell'alfabeto inglese*

$a$	<i>velocità del suono</i>
$c_p$	<i>calore specifico a pressione costante medio</i>
$D$	<i>coefficiente di diffusione di specie chimiche</i>
$Da$	<i>numero di Damkoehler</i>
$f_k$	<i>forza di volume esterna esercitata sulla k-esima specie</i>
$k$	<i>coefficiente di conduzione termica</i>
$Ma$	<i>numero di Mach</i>
$NS$	<i>numero di specie chimiche</i>
$p$	<i>pressione</i>
$R$	<i>costante dei gas</i>
$Re$	<i>numero di Reynolds</i>
$\mathfrak{R}$	<i>costante universale dei gas</i>
$t_{acust}$	<i>tempo acustico</i>
$t_{chem}$	<i>tempo chimico</i>
$t_{conv}$	<i>tempo convettivo</i>
$T$	<i>temperatura</i>
$T_a$	<i>temperatura di attivazione</i>
$\bar{u}$	<i>vettore velocità di componenti (u, v, w)</i>
$\bar{V}_k$	<i>velocità di diffusione della k-esima specie</i>
$W_k$	<i>peso molare della k-esima specie</i>
$\bar{x}$	<i>variabile nello spazio di componenti (x, y, z)</i>
$X_k$	<i>concentrazione della k-esima specie</i>
$Y_k$	<i>frazione massica della k-esima specie</i>
$Z$	<i>numero di Zel'dovich</i>

##### *Simboli dell'alfabeto greco*

$\alpha$	<i>diffusività termica</i>
$F$	<i>funzione di dissipazione dell'energia e grandezza generica</i>
$g$	<i>rapporto dei calori specifici</i>
$I$	<i>secondo coefficiente di viscosità od autovalore</i>

<b><math>m</math></b>	<i>viscosità molecolare dinamica</i>
<b><math>n</math></b>	<i>viscosità molecolare cinematica</i>
<b><math>r</math></b>	<i>densità</i>
<b><math>\dot{W}</math></b>	<i>velocità di reazione</i>

***Pedici***

$[\ ]_0$	<i>valore di equilibrio o di riferimento della grandezza</i>
$[\ ]_c$	<i>valore di fine combustione della grandezza</i>
$[\ ]_i$	<i>componente i-esima del vettore</i>
$[\ ]_j$	<i>componente j-esima del vettore</i>
$[\ ]_k$	<i>indice della specie k-esima</i>
$[\ ]_l$	<i>indice della specie l-esima</i>

## V.1 INTRODUZIONE

La combustione, così come la turbolenza, è un fenomeno di cui si fa quotidianamente esperienza: l'accensione di un fiammifero, di una candela, un incendio sono tutti fenomeni ben noti.

Negli anni, visto il suo ampio campo di applicazione e di interesse, la combustione è stata oggetto di numerosi studi, analisi numeriche e prove sperimentali; la sempre più stringente necessità di spingersi verso bassi consumi specifici, basse emissioni e un buon rendimento del motore ha indotto, infatti, allo studio e all'analisi di fenomeni quali l'accensione, l'ancoraggio della fiamma e il regime di combustione. Mentre, dunque, della combustione in regime subsonico si hanno molte informazioni, non si può dire lo stesso della combustione supersonica.

In flussi supersonici le alte velocità del flusso rendono la combustione critica a causa dei bassi tempi di residenza nel combustore; a loro volta però, come si è mostrato nel capitolo II, proprio le alte velocità del flusso inducono compressioni locali che hanno l'effetto di accelerare la cinetica chimica: è dunque presumibile un ancoraggio di fiamma. Soggette a compressione locale, inoltre, le zone di combustione potrebbero essere tanto sottili da rendere lo spessore della fiamma più piccolo della grandezza caratteristica del vortice più piccolo: ciò fa dunque intuire possibili regimi di fiamme corrugate. È inoltre interessante capire se sia possibile stabilire qualche correlazione con le tipologie di combustione note, cioè se il diagramma di Borghi<sup>36</sup> che identifica differenti regimi di fiamma al variare dei numeri caratteristici  $Re$ - $Da$  sia valido anche per combustione supersonica. Da un'analisi condotta per fronte di fiamma piano (vedi appendice A), si è dedotto che in regime supersonico la fiamma laminare si comporta, in prima approssimazione, esattamente allo stesso modo del regime subsonico. Poiché però è molto improbabile che la fiamma non transiti a turbolenta, è necessario esaminare in dettaglio l'evoluzione del fronte di fiamma supersonico in regime turbolento, mettendo in risalto gli effetti della comprimibilità sia sul mescolamento che sulla cinetica chimica. Scopo del presente capitolo è dunque far luce sulle suddette questioni.

## V.2 FLUSSI SUPERSONICI: ANALISI MACROSCOPICA DELLA COMBUSTIONE

A causa dell'elevato contributo dato dall'energia cinetica all'intero contenuto energetico del flusso, una corrente supersonica è estremamente "rigida": ciò significa che le linee di corrente sono difficilmente deviabili e quindi che il mescolamento e la combustione sono due fenomeni estremamente critici. Affinché la combustione possa aver luogo è necessario, infatti, che combustibile ed ossidante siano mescolati a livello molecolare. La mutua interazione tra la combustione e le strutture fini, la modalità con cui i processi di combustione si esplicano e gli effetti prodotti a larga scala sono dunque aspetti che verranno indagati in questo capitolo.

Per poter stimare gli effetti della comprimibilità sulla combustione è stato introdotto il parametro  $S$  definito come rapporto tra il contributo dato all'energia totale dall'energia cinetica  $\Delta T_s$  e quella chimica  $\Delta T_c$ :

$$S = \frac{\Delta T_s}{\Delta T_c} \quad (V.1)$$

Dall'equazione (V.1) si evince che per  $S \ll 1$ , la variazione di temperatura  $\Delta T$  associata all'energia cinetica è trascurabile rispetto a quella dovuta alla chimica, per  $S=1$  sono uguali e per  $S \gg 1$  prevale il  $\Delta T$  associato all'energia cinetica.

Richiamando il numero di Zel'dovich:

$$Z = \frac{\Delta T_c}{T_0} \frac{T_a}{T_0} \quad (V.2)$$

che misura la sensibilità della cinetica di combustione alla temperatura<sup>37</sup> (dove  $T_a$  è la temperatura di attivazione e  $\Delta T_c$  è l'innalzamento di temperatura in combustione adiabatica), si ha che, in regime subsonico, per valori di  $Z > 1$ , la combustione avviene in regime di fiamme a fogli (reaction sheet). *Tale caratteristica persiste nei flussi ad alta velocità fino a che il contributo dato all'aumento di temperatura dalla combustione ( $\Delta T_c$ ) diventa trascurabile rispetto a quello dato dall'energia cinetica del flusso stesso ( $\Delta T_s$ ).* A questo punto è opportuno cercare di stimare quale sia il Mach critico oltre il quale gli effetti della comprimibilità non possano più essere trascurati. Riprendendo l'equazione (V.1), ed esplicitando  $\Delta T_s$  (aumento della temperatura associato all'energia cinetica) in funzione del numero di Mach, nell'ipotesi di gas ideale si ottiene:

$$S = \frac{1}{2}(g-1)Ma^2 \frac{T_0}{\Delta T_c} \quad (V.3)$$

Poiché generalmente  $\Delta T_c/T_0 \sim 1-10$  (con  $T_0$  temperatura iniziale dei reagenti),  $S$  è maggiore dell'unità per  $Ma$  maggiori di 2: l'accoppiamento tra comprimibilità e cinetica chimica diventa importante al di sopra di un Mach critico che dipende da questo rapporto di temperature. Dunque il piano Da-Re dei regimi di fiamma premiscelata (ben noto per flussi incomprimibili), in combustione supersonica deve essere esteso ad una terza dimensione avente  $S$  come parametro.

### V.3 ANALISI DELLA COMBUSTIONE TRAMITE NAVIER STOKES

Per comprendere in che modo la comprimibilità agisca sulla combustione ed eventualmente definire i regimi di fiamma della combustione stessa si è proceduto all'analisi delle equazioni di Navier Stokes ((V.4) - (V.7)), adimensionalizzate in modo tale da mettere in risalto l'effetto dovuto alla combustione.

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = -gMa_c^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right) \frac{1}{p} \frac{Dp}{Dt} + gMa_c^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right) \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} + gMa_c^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right) \frac{1}{R} \frac{DR}{Dt} \quad (V.4)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] \quad (V.5)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \frac{\partial k}{\partial t} + \mathbf{m} u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{(g-1)Mi^2 RePr} \frac{\partial T}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{1}{(g-1)Mi^2} \left( \mathbf{r} c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{r} c_p u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{1}{(g-1)Mi^2 ReSc} \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} Y_k V_k + \frac{1}{gMi^2 RePr} \mathfrak{M} \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \left( \frac{X_l \mathbf{a}_k}{w_k D_{kl}} \right) (V_k - V_l) \right] + \frac{\Phi}{Re} + \frac{1}{Re} u_j \frac{\partial t_{ij}}{\partial x_j} + \frac{Da}{(g-1)Mi^2} \mathbf{w} \cdot \mathbf{i} \end{aligned} \quad (V.6)$$

$$\mathbf{r} \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \mathbf{r} u_j \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{ReSc_i} \frac{\partial (\mathbf{r} Y_i V_i)}{\partial x_i} + Da \mathbf{w}_i \quad (V.7)$$

Nell'eq. (V.4):

- $Z = \frac{\Delta T_c}{T_0} \frac{T_a}{T_0}$  è il numero di Zel'dovich proporzionale all'energia termica sviluppata nel reattore;
- $Ma_c \cong \frac{u}{\sqrt{gRT_c}} = \frac{u}{\sqrt{gRT_0}} \sqrt{\frac{T_0}{T_c}} \cong Ma_0 \sqrt{\frac{T_0}{T_c}}$  è il numero di Mach calcolato alla temperatura di combustione; a seconda che ci sia o meno combustione nel flusso,  $Ma_c$  assume valori che vanno da 1 a 5 per Mach di volo pari a 6÷15;
- $Ma_0$  è il numero di Mach calcolato alla temperatura di ingresso in camera di combustione che è circa ? del Mach di volo.

L'equazione (V.4) mostra che la divergenza della velocità assume valori diversi da zero  $\left( \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \neq 0 \right)$

sia per alti  $Ma_c$  locali (ovvero per effetto della sola comprimibilità) che in flussi in cui  $Z > 0$ , ovvero in cui c'è combustione. In assenza di combustione ( $Z = 0$ ), o comunque dove gli effetti



della combustione possono essere trascurati ( $Z \ll 1$ ), essendo  $\Delta T_c \sim 0$  si ha che  $Ma_0 = Ma_c$ , e quindi l'equazione (V.4) diventa:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = -gMa_0^2 \frac{1}{p} \frac{Dp}{Dt} + gMa_0^2 \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} + gMa_0^2 \frac{1}{R} \frac{DR}{Dt} \quad (V.8)$$

Poiché in prima approssimazione, in assenza di combustione si può assumere che  $\frac{DT}{Dt} = 0$  e

$$\frac{DR}{Dt} = 0, \text{ si ha che:}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = -gMa_0^2 \frac{1}{p} \frac{Dp}{Dt} \quad (V.9)$$

quindi: per  $Ma_0 > 1$  il flusso è comprimibile e la divergenza della velocità è non nulla, mentre per  $Ma_0 < 1$  il termine  $\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \approx 0$ . In caso di combustione, invece, le derivate temporali della temperatura e

del peso molecolare non sono più nulle: in questo caso dunque i "termini sorgente"  $\frac{DT}{Dt}$  e  $\frac{DR}{Dt}$  non

sono più nulli. Riprendendo la (V.4), e separando i due termini dagli altri si ottiene l'espressione:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + gMa_c^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right) \frac{1}{p} \frac{Dp}{Dt} = gMa_c^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right) \left( \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} + \frac{1}{R} \frac{DR}{Dt} \right) \quad (V.10)$$

L'equazione (V.10) mostra che, in caso di combustione, anche se  $Ma_c^2 \ll 1$ , essendo i gradienti locali di temperatura e di concentrazione molto elevati, i termini a destra non possono essere trascurati. In particolare, l'aumento di temperatura associato alla combustione può causare due effetti: o un aumento di volume (primo termine dell'equazione) o di pressione (secondo termine dell'equazione). Per poter stabilire quale prevalga, si richiama l'equazione dell'energia espressa in funzione dell'energia cinetica (Vedi Cap. III):

$$\underbrace{(g-1)Ma_c^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right)}_A \left( \mathbf{r} \frac{\partial k}{\partial t} + \mathbf{r} u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) = \underbrace{(g-1)Ma_c^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right)}_B \frac{\partial p}{\partial t} + \underbrace{\frac{(g-1)Ma_c^2}{\text{Re}} \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right)}_C \left( \Phi + \mu_i \frac{\partial t_y}{\partial x_j} \right) \quad (V.11)$$

$$+ \underbrace{\left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right)}_D \left[ \mathbf{r} c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{r} c_p \mu_j \frac{\partial T}{\partial x_j} + \frac{1}{\text{RePr}} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} + D\omega h + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{1}{\text{ReSc}} \mathbf{r} \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k V_k \right] \right]$$

L'espressione (V.11) indica che, in flussi subsonici, essendo i termini A, B e C moltiplicati per il quadrato del numero di Mach possono essere trascurati rispetto al termine D.

In prima approssimazione, si può dire dunque che in flussi subsonici in cui  $Ma \ll 1$  la combustione non causa né una variazione di energia cinetica (nello spazio e nel tempo) né di pressione (nel

tempo), ovvero il termine  $\frac{Dk}{Dt}$  può considerarsi circa nullo in caso di combustione subsonica ( $Ma \ll 1$ ). Per stabilire se ci sia una variazione di pressione nello spazio, occorre richiamare l'equazione dell'energia meccanica ottenibile moltiplicando scalarmene l'equazione della quantità di moto e la velocità:

$$\frac{Dk}{Dt} = -\frac{u_i}{r} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{1}{r} u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] \quad (\text{V.12})$$

Per quanto esposto in precedenza, essendo il termine  $\frac{Dk}{Dt} \sim 0$ , nella (V.12) i termini a sinistra dell'uguaglianza sono nulli, quindi il gradiente di pressione  $\frac{\partial p}{\partial x_i} = 0$ : il campo di pressione rimane uniforme. Sostituendo  $\frac{Dp}{Dt} = 0$  nell'equazione (V.10), si ottiene:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = gMa^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right) \left( \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} + \frac{1}{R} \frac{DR}{Dt} \right) \quad (\text{V.13})$$

In regime supersonico ( $Ma \gg 1$ ) invece, i termini A e B dell'equazione (V.11) non sono più trascurabili (il termine C è comunque generalmente trascurabile essendo moltiplicato per l'inverso del numero di Reynolds). La combustione è responsabile quindi di un aumento di energia cinetica e, di conseguenza, di pressione: il termine  $\frac{Dp}{Dt}$  è dunque non nullo. Richiamando dunque la (V.10),

si evince che, ad alti Ma, il termine di pressione  $\frac{Dp}{Dt}$  essendo moltiplicato per  $gMa^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right)$  ha un peso maggiore rispetto al termine dilatazionale  $\frac{\partial u_i}{\partial x_i}$  che, dunque, può essere trascurato: **in regime**

**supersonico la combustione avviene a volume circa costante.**

In regime subsonico, un classico esempio di combustione a volume costante è ciò che si verifica nei motori ad accensione comandata ovvero nei motori Otto. È inoltre importante osservare che essendo:

$$S = \frac{1}{2} \frac{(g-1)Ma^2}{Z} \frac{T_0}{T_a} \quad (\text{V.14})$$

il termine  $gMa^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right)$  può essere riscritto come:

$$SZ \approx gMa^2 \left( Z \frac{T_0}{T_a} + 1 \right) \quad (\text{V.15})$$

Ricollegandosi a quanto ottenuto in precedenza, si conclude quindi che in flussi supersonici, per valori del Mach tali per cui  $SZ > 1$ , l'accoppiamento tra comprimibilità e cinetica chimica diventa importante e bisogna ridefinire i regimi di fiamma estendendo il diagramma Re-Da in un terza direzione con Ma o SZ come parametro.

I risultati ottenuti aprono dunque una serie di punti da esaminare:

si può in qualche modo ricavare qualche informazione sulla combustione supersonica basandosi sulla fenomenologia della combustione Otto?

L'aumento di pressione locale può favorire il mescolamento e quindi la combustione?

C'è interazione tra le onde acustiche dovute alla combustione e gli urti?

A tal fine, è di enorme utilità rapportarsi a tipologie di combustione subsonica ben note e passare, quindi, per analogia, all'analisi della combustione in regime supersonico.

Un'analisi dei tempi caratteristici può chiarire la modalità con cui la combustione si esplica.

## V.4 ANALISI DEI TEMPI CARATTERISTICI

Nel presente capitolo, partendo dall'analisi dei fenomeni e dei tempi caratteristici di tipologie di combustioni ben note, si è definita la tipologia di fiamma in combustione supersonica.

Per semplicità della trattazione, si è assunto che le reazioni chimiche avvengano all'interno di un reattore fluido elementare di forma tubolare e raggio di dimensioni della scala della turbolenza (scala di Kolmogorov) e lunghezza pari alla dimensione della cella.

A seguito del rilascio di calore dovuto alla combustione, a seconda del rapporto tra i tempi caratteristici che entrano in gioco (tempo chimico, acustico e fluidodinamico), il reattore chimico è soggetto o ad un aumento locale di volume o di pressione. In flussi subsonici, la combustione avviene approssimativamente a pressione costante: il reattore a causa del rilascio di calore si espande. Le forze interne al reattore, infatti, (proporzionali al calore sviluppato dalla combustione) sono maggiori di quelle inerziali contrapposte dal flusso esterno: a bassi  $Ma$  il reattore espandendosi distorce le linee di corrente che quindi tendono a stiparsi generando gradienti di pressione locali molto alti a vantaggio di un incremento di vorticità nel flusso e quindi di un mescolamento più efficiente.

In flussi supersonici, invece, il reattore è "costretto" a conservare in gran parte il proprio volume: ad alti  $Ma$ , essendo la pressione dinamica del flusso esterno al reattore molto alta, l'energia rilasciata dalla combustione sviluppata nel reattore non è sufficiente a distorcere significativamente le linee di corrente ad esso adiacenti. Detto altrimenti la forza esercitata dalla pressione esterna alla zona di reazione è maggiore di quella esercitata dall'interno: tale zona, quindi, non si espande. Effettivamente, il rapporto tra l'energia cinetica e quella termica non è altri che il parametro  $S$  che, a seconda del numero di Mach e del calore di combustione è maggiore dell'unità. Tale analisi conferma i risultati ottenuti nel capitolo precedente ovvero che in regime supersonico la combustione avviene localmente a volume circa costante con un aumento locale di pressione.

La comprensione della fisica di combustione in regime supersonico, il perché la combustione avvenga a volume o pressione costante sono aspetti che devono essere investigati: in particolare, l'analisi è stata ricondotta allo studio dei tempi caratteristici della combustione supersonica rispetto a quelli tipici della combustione subsonica.

Come modelli di combustione subsonica si sono scelti:

la combustione del ciclo Otto che avviene a volume costante;

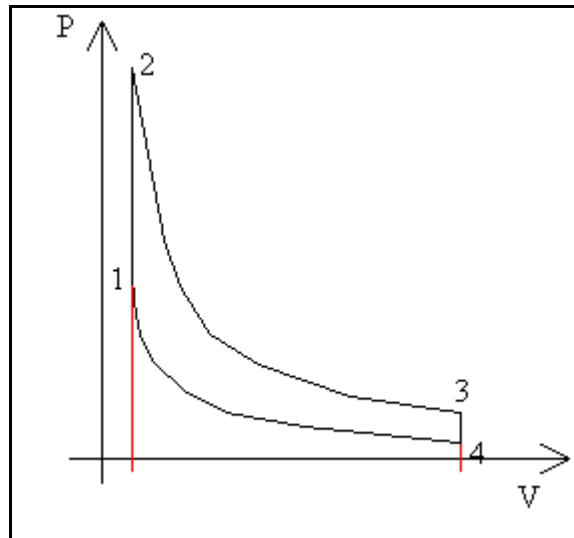
la combustione del motore ideale Diesel che (una volta che il combustibile è in fase gassosa) avviene a pressione costante.

E' utile dunque vedere in qualche dettaglio questi due modelli.

### V.4.1 Combustione ad accensione comandata

Il Ciclo Otto, detto anche ciclo Beau de Rochas, è impiegato nei motori alternativi a combustione interna, e in particolare nei motori a benzina.

Il ciclo Otto ideale riportato nella figura sottostante:



**Figura V.1 Ciclo Otto**

- si compone di quattro fasi:
- 4-1 compressione adiabatica (senza scambio di calore)
- 1-2 combustione isocora (a volume costante)
- 2-3 espansione adiabatica
- 3-4 raffreddamento isocoro

La combustione Otto, che avviene per accensione comandata una volta che la miscela è stata compressa adiabaticamente, è molto più rapida di quella del motore Diesel: l'accensione, infatti, segue immediatamente lo scoccare della scintilla.

I tempi tipici di ritardo all'accensione della combustione di un motore ad accensione comandata sono molto brevi, dell'ordine di 0.05-0.5 ms e i numeri di Damkohler caratteristici sono dell'ordine di 2-500.

I valori tipici di temperature e pressioni della miscela al momento della scintilla sono:

- $T = 300 \text{ K}$
- $P = 0.1 \text{ MPa}$ :

a cui corrispondono velocità del suono di 346 m/s.

## V.4.2 Combustione Diesel

A differenza del motore Otto, la combustione diesel avviene più gradualmente e a pressione circa costante (isobara). La combustione Diesel, avviene per accensione spontanea una volta che si sono raggiunte pressioni e temperature di autoaccensione.

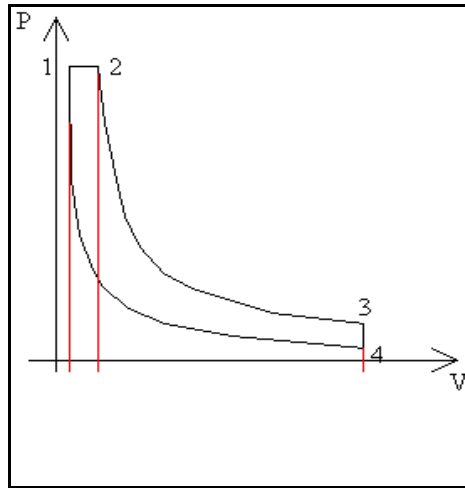


Figura V.2 Ciclo Diesel

I valori tipici di inizio combustione sono:

- $T=750-850$  K;
- $P=3-4$  MPa;

A tali valori di pressione e temperatura corrispondono velocità del suono di circa 550-600 m/s e  $Ma \sim 0.003-0.0008$ .

### V.4.3 Combustione Supersonica

Da questi pochi dettagli dati sui due regimi di combustione Diesel e Otto si evince che i tempi di ritardo all'accensione di un motore Diesel  $t_{chem_{diesel}}$  sono maggiori di quelli di un motore Otto  $t_{chem_{otto}}$ , ovvero:

$$t_{chem_{otto}} < t_{chem_{diesel}} \quad (V.16)$$

I tempi acustici del Diesel, invece, essendo inversamente proporzionali alla velocità del suono  $a = \sqrt{gRT_c}$ , ed essendo  $T_{c_{diesel}} > T_{c_{otto}}$ , sono più brevi di quelli del ciclo Otto:

$$t_{acus_{otto}} > t_{acus_{diesel}} \quad (V.17)$$

Al fine di valutare se la combustione avvenga a volume o pressione costante è utile definire un nuovo parametro che esprime il rapporto tra il tempo chimico ed il tempo acustico:

$$\frac{t_{chem}}{t_{acus}} = \frac{\frac{t_{chem}}{t_{conv}}}{\frac{t_{acus}}{t_{conv}}} = \frac{1}{DaMa} \quad (V.18)$$

Se i tempi di rilascio di calore sono minori dei tempi dilatazionali, la velocità di agitazione delle molecole dovuta all'energia chimica sprigionata dalla rottura dei legami interatomici è maggiore

della velocità con cui le molecole urtandosi si ridistribuiscono (in modo tale da distanziarsi l'una dall'altra di una distanza pari al libero cammino medio  $l = \frac{kT}{p\sigma}$ ), quindi prima che venga raggiunto

l'equilibrio e che la zona di reazione si espanda si ha un aumento di pressione: la velocità di collisione delle molecole sulla pareti del reattore è aumentata. **La combustione, dunque, avviene a volume costante:** questo è ciò che accade nel ciclo Otto dove i tempi di rilascio del calore sono più brevi dei tempi acustici.

La condizione che deve verificarsi affinché la combustione avvenga a volume costante è quindi che il tempo chimico sia minore di quello acustico:

$$\frac{t_{chem}}{t_{acus}} = \frac{1}{DaMa} < 1 \quad (V.19)$$

e cioè che sia verificata la seguente relazione:

$$Da > \frac{1}{Ma} \quad (V.20)$$

Poiché in camere di combustione di motori Otto si hanno<sup>38</sup>:  $Da \sim 20-500$  e  $Ma = 0.05-0.5$  tale condizione è verificata.

La condizione per combustione a pressione costante è:

$$\frac{t_{chem}}{t_{acus}} = \frac{1}{DaMa} > 1 \quad (V.21)$$

dunque:

$$Da < \frac{1}{Ma} \quad (V.22)$$

Nel ciclo Diesel, poiché la combustione avviene a pressione costante, deve verificarsi la (V.22).

Effettivamente, a causa delle elevate temperature e pressioni raggiunte in camera di combustione, il ciclo Diesel è caratterizzato da bassi valori del numero di Ma (0.0025) e bassi valori del numero di Damkoehler, per cui è verificato che il rapporto  $\frac{1}{DaMa}$  sia minore di 1.

Passando dunque all'analisi della combustione in regime supersonico, si ha che:

in flussi supersonici, essendo  $Ma > 1$  la condizione  $Da < \frac{1}{Ma}$  non può mai essere verificata in quanto

per  $Da < 1$  non si ha combustione. In flussi supersonici quindi il numero caratteristico  $\frac{1}{DaMa}$  è

sempre maggiore dell'unità, quindi: **la combustione in regime supersonico avviene localmente a**

**volume circa costante:** ciò fa presupporre una fiamma molto sottile in cui i vortici più piccoli, essendo bassa l'intensità di turbolenza, siano più grandi dello spessore della fiamma.

Il regime presunto di fiamma supersonica è quello di fiamme a fogli sottili (reaction sheet), quindi estendendo il diagramma di Borghi in Figura V.3 in una terza direzione il regime di fiamma probabile per combustione turbolenta è quello indicato nella figura sottostante con il tratteggio.

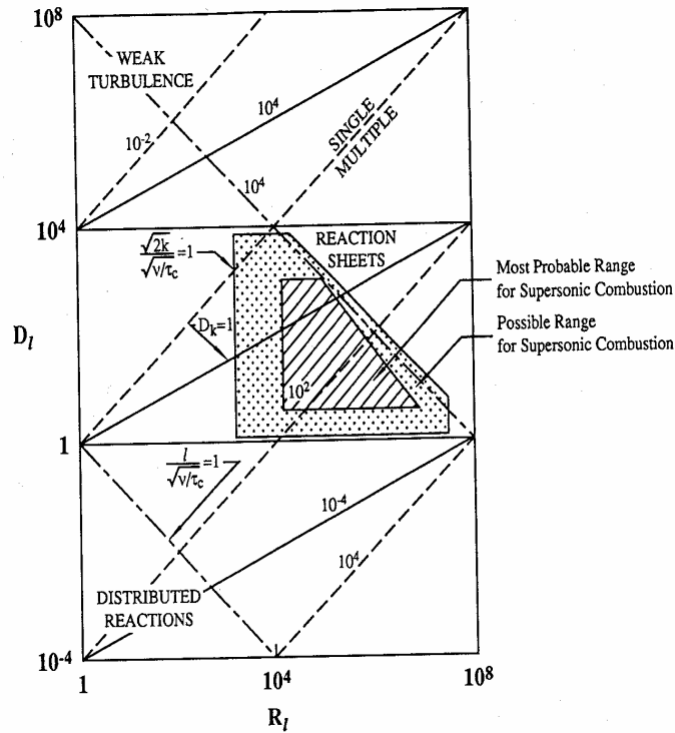


Figura V.3 Diagramma di Borghi

Alla combustione, è presumibile che a causa della pressione interna segua una fase di espansione del reattore: dunque il reattore inizialmente reagisce a volume costante e poi si espande. Se la camera di combustione è divergente, ci sarà una espansione a valle della combustione se il rapporto tra i tempi caratteristici di dilatazione e di residenza è sufficientemente piccolo. Poiché tale rapporto è proporzionale al numero di Mach, si prevede a valle della fase di combustione a volume costante una fase di espansione.

Ulteriori informazioni sull'evoluzione della fiamma possono essere ricavate dalle simulazioni numeriche. Nel prossimo capitolo, alla luce di tutti i risultati ottenuti, verrà proposto un modello per il termine sorgente delle specie chimiche, per il tensore degli sforzi di Reynolds e per l'accoppiamento combustione-turbolenza.



## CAPITOLO VI

### VI. MODELLO DI SOTTOGRIGLIA ISCM

#### VI. LEGENDA DEI SIMBOLI

*Simboli dell'alfabeto inglese*

$A$	<i>costante pre-esponenziale nella formula di Arrhenius <math>[(\text{mol}/\text{L}^3)^{m-n}/t]</math></i>
$a$	<i>velocità del suono <math>[\text{L}/t]</math></i>
$c_p$	<i>calore specifico a pressione costante medio <math>[\text{L}^2 t^{-2} \text{K}^{-1}]</math></i>
$D$	<i>coefficiente di diffusione di specie chimiche</i>
$E_A$	<i>energia di attivazione <math>[\text{L}^2 t^{-2}]</math></i>
$f$	<i>generica funzione</i>
$f_k$	<i>forza di volume esterna esercitata sulla <math>k</math>-esima specie</i>
$G$	<i>operazione di filtro</i>
$k$	<i>coefficiente di conduzione termica, numero d'onda, energia cinetica o costante di Arrhenius</i>
$l_m$	<i>lunghezza caratteristica della combustione</i>
$L$	<i>dimensione longitudinale del reattore</i>
<i>Ma numero di Mach</i>	
$NS$	<i>numero di specie chimiche</i>
$p$	<i>pressione <math>[\text{ML}^{-1}t^{-2}]</math></i>
$R$	<i>costante dei gas</i>
$\mathfrak{R}$	<i>costante universale dei gas</i>
$Re$	<i>numero di Reynolds</i>
$S$	<i>superficie del reattore</i>
$S_{ij}$	<i>parte sferica del tensore di deformazione</i>
$T$	<i>temperatura</i>
$\bar{u}$	<i>vettore velocità di componenti <math>(u_r, u_q, u_z)</math></i>
$V$	<i>volume del reattore</i>
$\bar{V}_k$	<i>velocità di diffusione della <math>k</math>-esima specie</i>
$W_k$	<i>peso molare della <math>k</math>-esima specie</i>
$\bar{x}$	<i>variabile nello spazio di componenti <math>(r, \mathbf{q}, z)</math></i>
$X_k$	<i>concentrazione della <math>k</math>-esima specie</i>
$Y_k$	<i>frazione massica della <math>k</math>-esima specie</i>

**Simboli dell'alfabeto greco**

<b><math>\alpha</math></b>	<i>diffusività termica</i>
<b><math>D</math></b>	<i>dimensione del filtro o dimensione della cella di calcolo</i>
<b><math>h</math></b>	<i>dimensione caratteristica del vortice dissipativo</i>
<b><math>F</math></b>	<i>funzione di dissipazione dell'energia e grandezza generica</i>
<b><math>g</math></b>	<i>rapporto dei calori specifici o frazione di volume reattiva all'interno della cella di calcolo</i>
<b><math>l</math></b>	<i>secondo coefficiente di viscosità od autovalore</i>
<b><math>m</math></b>	<i>viscosità molecolare dinamica</i>
<b><math>m</math></b>	<i>viscosità turbolenta</i>
<b><math>n</math></b>	<i>viscosità molecolare cinematica</i>
<b><math>r</math></b>	<i>densità</i>
<b><math>Y</math></b>	<i>generica grandezza</i>
<b><math>W</math></b>	<i>velocità di reazione</i>

**Apici e Pedici**

$[]_i$	<i>componente i-esima del vettore</i>
$[]_j$	<i>componente j-esima del vettore</i>
$[]_k$	<i>indice della specie k-esima</i>
$[]_l$	<i>indice della specie l-esima</i>
$[]^0$	<i>valore della grandezza nel surrounding fluid</i>
$[]^*$	<i>grandezze all'interno del reattore</i>
$[]_{SGS}$	<i>valore di sottogriglia della grandezza</i>
$[]_D$	<i>valore della grandezza alla scala della cella</i>
$[\bar{\quad}]$	<i>parte risolta della generica grandezza</i>
$[]'$	<i>parte residua o di piccola scala della generica grandezza</i>

**VI.1 INTRODUZIONE**

I precedenti capitoli hanno evidenziato alcuni aspetti fondamentali e ancora pochissimo noti della combustione supersonica:

la velocità di produzione e scomparsa delle specie chimiche dipende dal numero di Mach

la vorticità è principalmente streamwise e l'intensità della turbolenza è debole

gradienti di pressione locali favoriscono un miglior mescolamento

la combustione avviene a volume circa costante

La comprensione di tali fenomeni è di aiuto nello sviluppo di un nuovo modello di sottogriglia che tenga conto di tutti gli effetti sopraelencati.

Risolvere direttamente le equazioni di Navier Stokes risolvendo cioè tutte le scale spaziali e temporali richiederebbe nonostante i grandi sviluppi dei calcolatori, costi numerici e problemi

proibitivi. La griglia di calcolo dovrebbe, infatti, avere maglie le cui dimensioni siano inferiori a quelle della più piccola scala della turbolenza (scala di Kolmogorov) che è inversamente proporzionale a  $Re^{3/4}$ . Ciò significa che, il numero di punti necessario a descrivere adeguatamente il moto del fluido nelle tre direzioni deve essere proporzionale a  $Re^{2.25}$ . Poiché il valore tipico di Reynolds per flussi supersonici è dell'ordine di  $10^5$ - $10^6$  è chiaro che tale strada non è percorribile. Per quanto concerne la discretizzazione temporale, inoltre, il tempo caratteristico è inversamente proporzionale a  $Re^{1/2}$  dunque, il numero di nodi richiesto per risolvere tali flussi è almeno  $Re^{2.75}$ . Nel caso in esame, inoltre, si devono considerare anche le scale dei tempi delle reazioni chimiche, che possono generalmente essere anche di parecchi ordini di grandezza più piccole delle precedenti.

Si stima, dunque, che in un fenomeno di combustione turbolenta il rapporto tra la più grande e la più piccola scala spaziale sia di  $10^9$ ; dunque, per discretizzare adeguatamente il flusso nelle tre dimensioni sono necessari circa  $10^{27}$  nodi di calcolo, mentre a tutt'oggi le griglie più fini utilizzate dai supercalcolatori non superano i  $10^7$  nodi.

Tale limitazione tecnologica costringe ad abbandonare il tentativo di risolvere le equazioni di Navier-Stokes per i valori istantanei delle grandezze (DNS) e, ad orientarsi alla risoluzione di tali equazioni per il moto medio come nel caso RANS in cui si tutte le scale sono modellate allo stesso modo, o istantaneamente per le strutture più grandi e modellando le scale più piccole come nel caso LES. Sia l'approccio RANS che LES permettono di alleggerire enormemente il peso computazionale rispetto alla DNS, ma necessitano l'introduzione di modelli sia per il trasporto turbolento che per la chimica. Tali modelli devono cercare di rappresentare al meglio la fisica delle scale fini, la modalità di combustione, il mescolamento e l'interazione tra chimica e turbolenza.

Alla luce dunque dei precedenti risultati, in questo capitolo si proporrà un nuovo modello, l'ISCM, che tenga conto degli effetti della comprimibilità sia per la velocità di comparsa e scomparsa delle specie chimiche, un modello per il reattore elementare ove avviene la combustione, un modello per l'accoppiamento cinetica chimica /turbolenza ed uno per il mescolamento.

## VI.2 LARGE EDDY SIMULATION

Come si è mostrato nel capitolo IV, la turbolenza è un fenomeno non stazionario: risolvere quindi le equazioni di Navier Stokes tramite un approccio di tipo RANS non è sufficiente a fornire risultati utili per applicazioni di tipo realistico.

In LES, le più larghe strutture del campo di flussi sono risolte come in DNS, mentre il comportamento delle piccole scale è modellato: questo tipo di approccio si pone dunque ad un livello intermedio tra la DNS in cui tutte le strutture del campo sono risolte e la RANS, in cui tutte le strutture sono modellate.

Per separare le grandi scale dalle piccole si introduce un'operazione di filtro: tale operazione separa gli eddies la cui scala è superiore alle dimensioni della cella da quelli di dimensione inferiore.

L'operazione di filtro è espressa da un integrale di convoluzione:

$$\bar{f}(x) = \int_D f(x') G(x, x'; \Delta) dx' \quad (\text{VI.1})$$

dove D è l'intero dominio e G è la funzione di filtro che determina le scale degli eddies risolte e  $\Delta$  è la dimensione del filtro. Le funzioni di filtro possono essere di due tipi: definite nello spazio o come numero d'onda.

Il miglior filtro definito nello spettro è lo sharp Fourier cutoff:

$$G(k) = \begin{cases} 1 & \text{se } k \leq \frac{p}{\Delta} \\ 0 & \text{se } k > \frac{p}{\Delta} \end{cases} \quad (\text{VI.2})$$

Quelli definiti nello spazio sono:

1. filtro gaussiano:

$$G(x) = \sqrt{\frac{6}{p\Delta^2}} \exp\left(-\frac{6x^2}{\Delta^2}\right) \quad (\text{VI.3})$$

2. filtro top-hat:

$$G(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{se } |x| < \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{se } |x| > \frac{\Delta}{2} \end{cases} \quad (\text{VI.4})$$

La generica variabile f viene decomposta come:

$$f = \bar{f} + f' \quad (\text{VI.5})$$

dove  $\bar{f}$  è la parte risolta mentre  $f'$  è la grandezza relativa alle strutture fini.

Ipotizzando che l'operazione di derivata e di filtro siano commutabili e applicando l'operazione di filtro alle equazioni di Navier-Stokes incomprimibili si ottiene la seguente equazione per il trasporto della quantità di moto:

$$\frac{\overline{\rho u_i}}{\overline{\rho}} + \frac{\overline{\rho (u_i u_j)}}{\overline{\rho}} = -\frac{\overline{\rho p}}{\overline{\rho}} + \nu \frac{\overline{\rho^2 u_i}}{\overline{\rho}} - \overline{\rho t_{ij}} \quad (\text{VI.6})$$

La presenza dei termini non lineari, infatti, dà luogo alla nascita di un termine aggiuntivo,  $\mathbf{t}_{ij}$ , detto sforzo di sottogriglia o tensore degli sforzi di Reynolds:

$$\mathbf{t}_{ij} = \overline{(u_i u_j)} - \overline{u_i} \overline{u_j} \quad (\text{VI.7})$$

Tali sforzi di Reynolds possono essere valutati come sforzi apparenti che permettono di considerare il moto medio come il moto reale di un fluido sottoposto ai gradienti di una densità media, sforzi molecolari e turbolenti medi.

A causa di tali termini, le equazioni del campo non filtrato non sono chiuse: gli sforzi di Reynolds devono dunque essere modellati in funzione di grandezze risolte. Si rimanda all'appendice B per una breve descrizione dei più noti modelli di sottogriglia attualmente adottati sia in ambito RANS che LES.

La maggior parte dei modelli di sottogriglia, così come quello proposto, si basano sull'idea di eddy-viscosity in cui il tensore degli sforzi di sottogriglia è messo in relazione alle grandezze di larga scala per mezzo di una legge di trasporto di tipo gradiente:

$$\mathbf{t}_{ij} - \frac{d_{ij}}{3} \mathbf{t}_{kk} = -2\mathbf{n}_t \bar{S}_{ij} \quad (\text{VI.8})$$

L'idea di eddy viscosity si basa sull'ipotesi che gli eddies si comportano come le molecole, trasportando massa, quantità di moto e energia (analogia di Boussinesq). A valle di tale assunzione è possibile considerare una  $\mathbf{m}$  che tenga conto dell'aumentata diffusività e modellare gli sforzi di Reynolds con una legge di trasporto di tipo gradiente che leghi i termini fluttuanti con le grandezze risolte del campo.

L'ipotesi di eddy viscosity introduce una nuova incognita che necessita dunque di essere modellata: la viscosità turbolenta  $\mathbf{m}$ . Una delle più semplici ipotesi di chiusura per la  $\mathbf{m}$  è quella proposta da Prandtl, secondo cui, la viscosità turbolenta è proporzionale al prodotto della densità del fluido per una lunghezza caratteristica del problema in esame chiamata lunghezza caratteristica della turbolenza, ed una velocità di fluttuazione  $u'$ :

$$\mathbf{m} = \bar{\mathbf{r}} u' l_m \quad (\text{VI.9})$$

Per chiudere il problema è necessario ora ottenere una chiusura sia per la velocità di fluttuazione che per la lunghezza di mescolamento.

La chiusura è stata sviluppata integrando un modello semplificato di tipo algebrico (a zero equazioni differenziali di trasporto).

### VI.3 MODELLO DI SOTTOGRIGLIA PER IL MESCOLAMENTO TURBOLENTO

La necessità di introdurre un modello per il tensore degli sforzi di Reynolds e per il termine sorgente delle specie chimiche da introdurre come chiusura nelle equazioni di Navier Stokes filtrate deriva dal fatto che la dissipazione e le reazioni chimiche avvengono a livello delle strutture fini, ovvero lì dove il mescolamento è vicino a scale molecolari. L'approccio LES, infatti, pur consentendo di risolvere le grandi scale nello spazio e nel tempo, non tiene conto di ciò che avviene al di sotto del filtro: occorre introdurre dunque un modello che tenga conto dei fenomeni che avvengono alle scale fini.

Il modello di chiusura introdotto è un modello a zero equazioni in cui, cioè, le grandezze caratteristiche della turbolenza (velocità di fluttuazione e lunghezza di mescolamento) sono determinate senza l'introduzione di ulteriori equazioni differenziali di trasporto. Come lunghezza caratteristica della turbolenza  $l_m$  si è scelta la dimensione della cella di calcolo; gli effetti delle fluttuazioni di velocità sono stati modellati introducendo un'espressione per la viscosità turbolenta  $\mu_t$  del tipo<sup>39</sup>:

$$\mathbf{m} = \bar{\mathbf{r}} u' l_m = \bar{\mathbf{r}} u_\Delta l_m \quad (\text{VI.10})$$

in cui come velocità di fluttuazione turbolenta alla scala  $\Delta$  si è scelta la velocità di sottogriglia  $u_{SGS}$  espressa in funzione dell'energia cinetica di sottogriglia tramite la relazione  $u_{SGS} = \sqrt{k_{SGS}}$ .

Dunque, riassumendo si è arrivati all'espressione:

$$\mathbf{m} = \bar{\mathbf{r}} l_m u' = \bar{\mathbf{r}} \Delta \sqrt{k_{SGS}} \quad (\text{VI.11})$$

L'energia cinetica turbolenta di sottogriglia  $k_{SGS}$  deve tener conto dei fenomeni fisici che avvengono al di sotto della scala del filtro e che non vengono quindi risolti dal campo. Infatti, all'interno della cella di calcolo, le simulazioni numeriche mostrano un campo omogeneo, mentre

fisicamente vi sono strutture che reagiscono e dissipano energia proveniente dai vortici di larga scala.

È lecito pensare, infatti, che le reazioni avvengano in un volume la cui grandezza caratteristica (in due direzioni principali) sia quella di Kolmogorov ovvero lì dove il mescolamento avviene a livello molecolare: non tutta la cella di calcolo è interessata ai fenomeni di dissipazione e combustione ma solo una frazione  $\gamma^*$  dell'intero volume della cella stessa. L'energia cinetica  $k^*$  sviluppata all'interno di tali strutture genera dunque delle fluttuazioni nel campo che sono le maggiori responsabili della dissipazione turbolenta e del mescolamento che consente la combustione.

Per stimare l'energia cinetica  $k^*$  che compete al reattore si è introdotta l'equazione dell'energia cinetica scritta in forma completa (vedi Cap. III):

$$\begin{aligned} \frac{\partial k^*}{\partial t} + \bar{u}^* \cdot \bar{\nabla} k^* = & \underbrace{\frac{1}{\mathbf{r}^*} \frac{\partial p^*}{\partial t}}_I - \underbrace{C_p^* \frac{\partial T^*}{\partial t}}_{II} - \underbrace{C_p^* \bar{u}^* \cdot \bar{\nabla} T^*}_{III} + \underbrace{\frac{1}{\mathbf{r}^*} \bar{\nabla} \cdot \mathbf{I} \bar{\nabla} T^*}_{IV} - \underbrace{\bar{\nabla} \cdot \left[ \sum_{i=1}^N h_i^* Y_i^* V_i^* \right]}_V - \underbrace{\frac{1}{\mathbf{r}^*} \bar{\nabla} \cdot \left[ \mathfrak{R}_u T^* \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \frac{X_j^* \mathbf{a}_i^*}{w_i^* D_{ij}^*} \right) (V_i^* - V_j^*) \right]}_VI + \\ & + \underbrace{\sum_{i=1}^N Y_i^* f_i^* (\bar{u}^* + V_i^*)}_{VII} + \underbrace{\frac{\Phi^*}{\mathbf{r}^*}}_{VIII} + \underbrace{\frac{1}{\mathbf{r}^*} \bar{u}^* \cdot \bar{\nabla} t^*}_{IX} + \underbrace{\sum_{i=1}^N \dot{w}_i^* h_i^*}_{X} \end{aligned} \quad (VI.12)$$

Per il calcolo di tale energia cinetica di sottogriglia  $k^*$  è stato necessario modellare ogni termine della (VI.12).

A causa dell'energia cinetica  $k^*$  prodotta nel reattore elementare, l'energia cinetica alla scala  $\Delta$  non corrisponde a quella filtrata  $\bar{k}$  e va quindi corretta.

Partendo dalle assunzioni precedenti:

- l'energia cinetica  $k^*$  compete alla sola frazione di volume  $\mathbf{g}^*$
- il restante volume del reattore  $1 - \mathbf{g}^*$  non è interessato dalle reazioni chimiche né dalla dissipazione

è possibile definire un'energia cinetica di cella corretta  $\bar{k}_N$  che tenga conto anche degli effetti di sottogriglia:

$$\bar{k}_N = \mathbf{g}^* k^* + (1 - \mathbf{g}^*) \bar{k} \quad (VI.13)$$

La differenza tra l'energia cinetica di cella filtrata  $\bar{k}$  calcolata tramite le equazioni di Navier Stokes filtrate e  $\bar{k}_N$  calcolata tenendo conto degli effetti di sottogriglia dà proprio una stima delle fluttuazioni nel campo, ovvero dell'energia cinetica di sottogriglia:

$$k_{SGS} = \bar{k}_N - \bar{k} = \mathbf{g}^* (k^* - \bar{k}) \quad (VI.14)$$

Per chiudere dunque il sistema di equazioni filtrate si è modellata la  $k_{SGS}$  e quindi  $\gamma^*$  e  $k^*$ .

## VI.4 MODELLIZZAZIONE DELL'ENERGIA CINETICA DI SOTTOGRIGLIA

Le assunzioni su cui ci si è basati per modellizzare  $\gamma^*$  e  $k^*$  ricalcano quelle del modello EDC<sup>40</sup> secondo cui, come già accennato nel precedente paragrafo all'interno del volume di una cella di calcolo solo una piccola frazione di essa  $\gamma^*$  reagisce e che sia internamente che esternamente al reattore le grandezze siano omogenee. Si considera dunque che tale reattore abbia una forma tubolare sottile e allungata, in cui il raggio abbia come dimensione caratteristica la scala di Kolmogorov  $h$  e l'altezza abbia invece una dimensione  $L \gg h$  (vedi Figura VI.1).

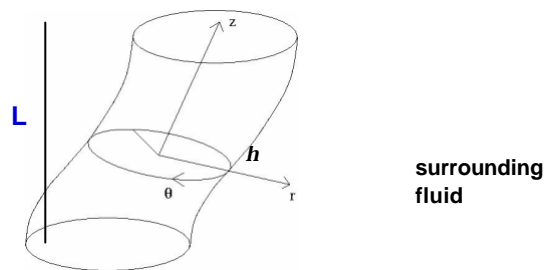


Figura VI.1 Schema del reattore

Sulla scia di tale ipotesi è lecito assumere che la variazione spaziale di ciascuna grandezza all'interno della cella di calcolo sia dovuta principalmente alla contemporanea presenza di zone dove avvengono le reazioni chimiche e di zone in cui il fluido non reagisce. Poiché ogni grandezza può variare solo radialmente, solo i gradienti lungo il raggio danno un contributo all'energia cinetica turbolenta, infatti, i gradienti lungo l'asse e lungo la circonferenza sono circa nulli.

Il gradiente di ciascuna grandezza è stato dunque modellato come segue:

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} = \frac{d\mathbf{y}}{dr} = \frac{\mathbf{y}^* - \mathbf{y}^0}{h} \quad (\text{VI.15})$$

dove  $\mathbf{y}^*$  e  $\mathbf{y}^0$  sono rispettivamente il valore assunto da ciascuna grandezza nel reattore e nel "surrounding fluid" e  $h$  è la dimensione radiale del tubo vorticoso.

Le derivate temporali sono state modellate inizializzando le grandezze all'interno della cella di calcolo, sia nel surrounding fluid che nel reattore con quelle filtrate, per cui all'istante iniziale  $t$  si

ha:  $\mathbf{y}^t = \bar{\mathbf{y}}$  mentre al tempo  $t+\Delta t$  si avrà  $\mathbf{y}^{t+\Delta t} = \mathbf{y}^*$ , dunque:

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \frac{\mathbf{y}^{t+\Delta t} - \mathbf{y}^t}{\Delta t} = \frac{\mathbf{y}^* - \bar{\mathbf{y}}}{\Delta t} \quad (\text{VI.16})$$



A valle dunque delle ipotesi e delle assunzioni semplificative fatte, si riporta la modellizzazione di ciascun termine dell'equazione (VI.12).

#### VI.4.1 Modellizzazione del termine acustico

Come concluso nel capitolo precedente, in combustione supersonica il termine acustico:

$$I: \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (VI.17)$$

non può essere trascurato. Infatti, avendo assunto che la combustione avviene a volume costante, a seguito della combustione si ha un aumento di pressione locale. Si è assunto quindi che la pressione al tempo  $t+\Delta t$  sia quella corrispondente all'aumento di temperatura dovuto alla combustione ( $p^*$ ) mentre quella al tempo  $t$  sia la grandezza filtrata  $\bar{p}$ . Assumendo come intervallo di tempo  $\Delta t = t - t_0$  l'intervallo di integrazione numerica, il termine (I) può essere riscritto come:

$$\frac{p_{t+\Delta t} - p_t}{\Delta t} \approx \frac{p^* - \bar{p}}{\Delta t} \quad (VI.18)$$

Il termine (I) dell'equazione (VI.10) è dunque:

$$I: \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{\bar{r}} \frac{p^* - \bar{p}}{\Delta t} \quad (VI.19)$$

#### VI.4.2 Modellizzazione del termine di inerzia termica

Per la modellizzazione del termine di inerzia termica

$$II: c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (VI.20)$$

si è seguito lo stesso procedimento del termine precedente, per cui:

$$\bar{c}_p \frac{T_{t+\Delta t} - T_t}{\Delta t} = \bar{c}_p \frac{T^* - \bar{T}}{\Delta t} \quad (VI.21)$$

dove  $\bar{c}_{pm}$  è il calore specifico medio di cella calcolato come media aritmetica del calore specifico al tempo iniziale  $t = 0$  e quello al tempo  $t+\Delta t$ ;  $T^*$  è la temperatura di combustione nel reattore al tempo  $t+\Delta t$  e  $\bar{T}$  è la temperatura filtrata di cella al tempo  $t$ , dunque:

$$\text{II: } c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \bar{c}_p \frac{T^* - \bar{T}}{\Delta t} \quad (\text{VI.22})$$

### VI.4.3 Modellizzazione del trasporto di calore per convezione

Per modellare il termine del trasporto di calore per convezione:

$$\text{III: } C_p u \cdot \nabla T \quad (\text{VI.23})$$

si è ritenuto opportuno riscrivere il prodotto scalare tra il vettore velocità e il gradiente della temperatura in coordinate cilindriche

$$(u_r, u_q, u_z) \cdot \left( \frac{\partial T}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial q}, \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (\text{VI.24})$$

Per l'ipotesi che i gradienti trasversali e angolari sono nulli si ha  $\frac{\partial T}{\partial q} \approx \frac{\partial T}{\partial z} \approx 0$ , quindi:

$$u \cdot \nabla T = (u_r, u_q, u_z) \cdot \left( \frac{\partial T}{\partial r}, 0, 0 \right) = u_r \frac{\partial T}{\partial r} \quad (\text{VI.25})$$

che discretizzato assume la forma:

$$u_r \frac{\partial T}{\partial r} = u_r \frac{T^* - T^0}{h} = u_r \frac{T^* - \bar{T}}{h} \quad (\text{VI.26})$$

La velocità  $u_r$  è la proiezione della velocità caratteristica delle scale “fini” della turbolenza sulla direzione radiale del reattore, che quindi è la velocità di dilatazione della scala turbolenta  $\eta$ . Come già spiegato nel capitolo precedente a causa della variazione di pressione tra l'interno e l'esterno del reattore, a valle della combustione il reattore tenderà a dilatarsi con una velocità radiale  $u_r$  che verrà modellata successivamente.

Il termine III, assume dunque la forma:

$$\text{III: } c_p u \cdot \nabla T = \bar{c}_p u_r \frac{T^* - \bar{T}}{h} \quad (\text{VI.27})$$

## VI.4.4 Modellizzazione del trasporto di calore per conduzione

Il termine:

$$\frac{1}{r} \nabla \cdot \mathbf{I} \nabla T \quad (\text{IV}):$$

è stato modellato applicando il teorema di Green:

$$\int \bar{\nabla} \cdot \bar{A} dV = \oint_S \bar{A} dS \quad (\text{VI.28})$$

che lega l'integrale di volume della divergenza di un generico vettore  $\bar{A}$  all'integrale di superficie al vettore  $\mathbf{I} \nabla T$ , per cui:

$$\int \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} \bar{\nabla} T) dV = \oint_S (\mathbf{I} \bar{\nabla} T) dS$$

L'integrale di volume  $\int \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} \bar{\nabla} T) dV$  è stato calcolato considerando il valor medio del flusso di calore all'interno del volumetto cilindrico:

$$\int_V \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} \bar{\nabla} T) dV = \overline{\bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} \bar{\nabla} T)} V^* = \overline{\bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} \bar{\nabla} T)} \mathbf{p} h^2 L \quad (\text{VI.29})$$

Poiché il reattore è perfettamente mescolato, il termine  $\mathbf{I} \bar{\nabla} T$  è costante sulla superficie, quindi la risoluzione dell'integrale di superficie  $\oint_S (\mathbf{I} \bar{\nabla} T) dS$  si riduce a:

$$\oint_S (\mathbf{I} \bar{\nabla} T) dS = \mathbf{I} \bar{\nabla} T S^*$$

Modellando dunque il gradiente di temperatura seguendo il procedimento dei termini precedentemente trattati si ottiene:

$$\oint_S (\mathbf{I} \bar{\nabla} T) dS = \bar{I} \frac{T^* - T^0}{h} 2\mathbf{p} h L \quad (\text{VI.30})$$

Riprendendo le, (VI.28), (VI.29) si ha:

$$\overline{\bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} \bar{\nabla} T)} \mathbf{p} h^2 L = \bar{I} \frac{T^* - T^0}{h} 2\mathbf{p} h L$$

da cui:

$$\overline{\bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} \bar{\nabla} T)} = 2\bar{I} \frac{T^* - T^0}{h^2}$$

In conclusione, il termine  $\frac{1}{r} \nabla \cdot \mathbf{I} \nabla T$  può essere modellato come:

$$\frac{1}{r} \nabla \cdot \mathbf{I} \nabla T = \frac{2\bar{I}}{\bar{r}} \frac{T^* - \bar{T}}{h^2} \quad (\text{IV})$$

#### VI.4.5 Modellizzazione del trasporto di flusso di calore per diffusione

Introducendo per semplificare il modello la legge di Fick, nel termine di flusso di calore per diffusione:

$$\mathbf{V}: \nabla \cdot \left[ \sum_{i=1}^N h_i Y_i \mathbf{V}_i \right] \quad (\text{VI.31})$$

la velocità di diffusione  $\mathbf{V}_i$  può essere riscritta come:

$$\mathbf{V}_i = -D_{i,eff} \frac{\nabla Y_i}{Y_i} \quad (\text{VI.32})$$

$$\text{da cui } \nabla \cdot \left[ \sum_{i=1}^N c_{pi} T_i Y_i \mathbf{V}_i \right] = \nabla \cdot \left[ \sum_{i=1}^N -D_{i,eff} c_{pi} T_i \nabla Y_i \right] \quad (\text{VI.33})$$

Applicando alla (VI.33) il teorema di Green si ha che:

$$\int_{V^*} \nabla \cdot \left[ \sum_{i=1}^N -D_{i,eff} c_{pi} T_i \nabla Y_i \right] dV = \oint_{S^*} \sum_{i=1}^N -D_{i,eff} c_{pi} T_i \nabla Y_i dS \quad (\text{VI.34})$$

Svolgendo l'integrale di volume  $\int_{V^*} \nabla \cdot \left[ \sum_{i=1}^N -D_{i,eff} c_{pi} T_i \nabla Y_i \right] dV$  considerando il valor medio del

flusso di specie all'interno del volumetto cilindrico si ha:

$$\int_{V^*} \nabla \cdot \left[ \sum_{i=1}^N -D_{i,eff} c_{pi} T_i \nabla Y_i \right] dV = \overline{\left( \sum_{i=1}^N -D_{i,eff} c_{pi} T_i \nabla Y_i \right)}_{V^*} = \overline{\left( \sum_{i=1}^N -D_{i,eff} c_{pi} T_i \nabla Y_i \right)} \mathbf{ph}^2 L \quad (\text{VI.35})$$

Poiché il reattore è perfettamente mescolato, anche il termine  $\sum_{i=1}^N -D_{ieff} c_{pi} T_i \nabla Y_i$  è costante sulla superficie, quindi la risoluzione dell'integrale di superficie  $\oint_{S^*} \sum_{i=1}^N -D_{ieff} c_{pi} T_i \nabla Y_i dS$  si riduce a:

$$\oint_{S^*} \sum_{i=1}^N -D_{ieff} c_{pi} T_i \nabla Y_i dS = \sum_{i=1}^N -\bar{D}_{ieff} \bar{c}_{pi} \bar{T}_i \bar{\nabla} Y_i S^* \quad (VI.36)$$

Modellando il gradiente di temperatura attraverso il procedimento già descritto precedentemente si ottiene:

$$\oint_{S^*} \sum_{i=1}^N -D_{ieff} c_{pi} T_i \nabla Y_i dS = 2\mathbf{p}L \sum_{i=1}^N -\bar{D}_{ieff} \bar{c}_{pi} \bar{T}_i (Y^* - Y^0) \quad (VI.37)$$

Tramite passaggi algebrici si ottiene che il termine  $\nabla \cdot \left[ \sum_{i=1}^N h_i Y_i V_i \right]$  può essere quindi modellato come:

$$\mathbf{v} : \nabla \cdot \left[ \sum_{i=1}^N h_i Y_i V_i \right] = -2 \sum_{i=1}^N \bar{D}_{ieff} \bar{c}_{pi} \bar{T}_i \frac{Y^* - \bar{Y}}{h^2} \quad (VI.38)$$

#### VI.4.6 Modellizzazione del trasporto di flusso di calore per effetto Dufour

Il termine del trasporto di calore dovuto al processo di interdiffusione è stato trascurato.

$$\text{VI: } \frac{1}{\mathbf{r}} \nabla \cdot \left[ \mathfrak{R}_u T \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \frac{X_j \mathbf{a}_i}{w_i D_{ij}} \right) (V_i - V_j) \right] \simeq 0$$

#### VI.4.7 Modellizzazione del lavoro compiuto dalle forze esterne

$$\text{VII: } \sum_{k=1}^N Y_k f_k \cdot (u + V_k) \simeq 0$$

Il termine dovuto alle forze di massa a piccole scale può essere trascurato.

### VI.4.8 Modellizzazione del lavoro dei termini viscosi

Il lavoro compiuto e l'energia dissipata dai termini viscosi sono molto importanti in quanto individuano gli effetti dovuti al mescolamento su scala molecolare, e in assenza di combustione, sono gli unici presenti.

$$\text{VIII: } \frac{1}{\mathbf{r}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{t}$$

$$\text{IX: } \frac{\Phi}{\mathbf{r}}$$

La viscosità molecolare interviene nella variazione di energia cinetica attraverso i termini in cui sono presenti gradienti o divergenza del vettore velocità:

$$\mathbf{t}_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial \mathbf{t}_{ij}}{\partial x_j} = \left[ \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \mathbf{d}_{ij} \right] \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \mathbf{d}_{ij} \right] \quad (\text{VI.39})$$

e in forma vettoriale:

$$\bar{\bar{\mathbf{t}}} : \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\bar{\mathbf{t}}} \cdot \bar{\mathbf{u}}) = \left\{ \left[ \mathbf{m} \left( \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} + \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}}^t \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) \right] \cdot \bar{\nabla} \right\} \bar{\mathbf{u}} + \bar{\nabla} \cdot \left\{ \left[ \mathbf{m} \left( \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}} + \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}}^t \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}}) \right] \cdot \bar{\mathbf{u}} \right\} \quad (\text{VI.40})$$

Avendo assunto che all'interno della cella di calcolo ogni grandezza varia solo radialmente, l'operatore  $\bar{\nabla} = \left( \frac{\partial}{\partial r} \bar{\mathbf{r}}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}, \frac{\partial}{\partial z} \bar{\mathbf{z}} \right)$  ha soltanto la componente radiale, quindi la divergenza della velocità si riduce a:

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r)$$

Inoltre, ponendo nulla la velocità tangenziale al tubo di flusso lungo l'asse  $z$ , ( $u_z \sim 0$ ) il tensore  $\bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}}$  e  $\bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}}^t$  assumono la forma:

$$\overline{\nabla u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) & \frac{\partial u_z}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial J} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_J}{\partial J} + \frac{u_r}{r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial J} \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} & \frac{\partial u_J}{\partial z} & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & r \frac{\partial}{\partial r} \frac{u_J}{r} & 0 \\ 0 & \frac{u_r}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\overline{\nabla u'} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & 0 & 0 \\ r \frac{\partial}{\partial r} \frac{u_J}{r} & \frac{u_r}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

quindi il termine  $\left( \overline{\nabla u} + \overline{\nabla u'} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \left( \overline{\nabla} \cdot \overline{u} \right)$  diventa:

$$\left( \overline{\nabla u} + \overline{\nabla u'} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \left( \overline{\nabla} \cdot \overline{u} \right) = \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) & r \frac{\partial}{\partial r} \frac{u_J}{r} & 0 \\ r \frac{\partial}{\partial r} \frac{u_J}{r} & -\frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) + \frac{u_r}{r} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) \end{pmatrix}$$

Moltiplicando il termine precedente per il tensore  $\overline{\nabla u}$  si ha:

$$\begin{aligned} \overline{\bar{\tau}} : \overline{\nabla u} &= \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) & r \frac{\partial}{\partial r} \frac{u_J}{r} & 0 \\ r \frac{\partial}{\partial r} \frac{u_J}{r} & -\frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) + \frac{u_r}{r} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & r \frac{\partial}{\partial r} \frac{u_J}{r} & 0 \\ 0 & \frac{u_r}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= 2 \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) \cdot \frac{\partial u_r}{\partial r} + \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) \right]^2 - \frac{2}{3} \frac{u_r}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) + \left( \frac{u_r}{r} \right)^2 = \frac{4}{3} \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \frac{u_r^2}{r^2} + \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) \right]^2 \end{aligned}$$

dove si è assunto in prima approssimazione che all'interno degli eddies di scala  $\mathbf{h}$  la viscosità  $\mathbf{m}$  sia proprio quella molecolare e che possa essere assunta approssimativamente costante.

Riepilogando, il termine IX è dunque:

$$\overline{\bar{\tau}} : \overline{\nabla u} = 2\mathbf{m} \left[ \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \frac{u_r^2}{r^2} \right] + \mathbf{m} \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) \right]^2 + \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_z}{\partial r} \right)^2 - \frac{2}{3} \mathbf{m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) \right]^2 = \frac{4}{3} \mathbf{m} \left[ \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \frac{u_r^2}{r^2} \right] + \mathbf{m} \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) \right]^2 - \frac{2}{3} \mathbf{m} \left[ \frac{u_r}{r} \right]^2$$

Sommando i termini viscosi si ottiene:

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{t}} : \overline{\nabla \mathbf{u}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot (\overline{\nabla \mathbf{t}}) &= \frac{4}{3} \mathbf{m} \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \mathbf{m} \frac{u_r^2}{r^2} + \mathbf{m} \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) \right]^2 + \frac{4}{3} \frac{\mathbf{m} u_r}{r} \left[ r \frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r} \right] + \mathbf{m} u_J \left[ r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left( \frac{u_J}{r} \right) + 3 \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) \right] \\ &= \frac{4}{3} \mathbf{m} \left[ \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + u_r \frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{u_r}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r} \right] - \mathbf{m} \frac{u_r^2}{r^2} + \mathbf{m} \left\{ u_J r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left( \frac{u_J}{r} \right) + 3 u_J \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) + \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) \right]^2 \right\}\end{aligned}$$

Ovvero:

$$\frac{\Phi}{\mathbf{r}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{t} = \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{r}} \left\{ \frac{4}{3} \left[ \underbrace{\left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2}_{\text{I}} + \underbrace{u_r \frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2}}_{\text{II}} + \underbrace{\frac{u_r}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r}}_{\text{III}} \right] - \underbrace{\frac{u_r^2}{r^2}}_{\text{IV}} + \underbrace{u_J r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left( \frac{u_J}{r} \right)}_{\text{V}} + \underbrace{3 u_J \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right)}_{\text{VI}} + \underbrace{\left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_J}{r} \right) \right]^2}_{\text{VII}} \right\} \quad (\text{VI.41})$$

Avendo assunto un sistema di riferimento cartesiano centrato sull'asse del tubo vorticoso e solidale ad esso, è lecito assumere che al centro della struttura vorticoso la velocità sia nulla mentre quella a distanza  $\eta$  dal centro sia diversa da zero e abbia componenti  $u_\theta$  lungo la direzione tangenziale e  $u_r$  lungo quella radiale.

Per la derivazione di tali grandezze si rimanda alle espressioni successive.

Le derivate seconde presenti nella (VI.41) possono essere modellate come:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial h^2} = \frac{u}{h^2} \quad (\text{VI.42})$$

da cui si si ottiene per i termini viscosi:

$$\frac{\Phi}{\mathbf{r}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{t} = \frac{\mathbf{m}}{\bar{\mathbf{r}}} \left( 3 \frac{u_r^2}{h^2} + 5 \frac{u_J^2}{h^2} \right) \quad (\text{VI.43})$$

Avendo modellato tutti i termini a destra del segno di uguaglianza della, si passa alla modellizzazione dei termini a destra dell'uguaglianza:

$$\mathbf{r} \frac{\partial k}{\partial t} + m_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \bar{\mathbf{r}} (k^* - \bar{k}) \left( \frac{1}{\Delta} + \frac{u_r}{h} \right) \quad (\text{VI.44})$$

da cui combinando insieme agli altri termini si ottiene:



$$\bar{\mathbf{r}}(k^* - \bar{k}) \left( \frac{1}{\Delta t} + \frac{u_r}{(1 - \mathbf{g}^*)\mathbf{h}} \right) = \frac{1}{\bar{\mathbf{r}}} \frac{p^* - \bar{p}}{\Delta t} - \bar{c}_p \frac{T^* - \bar{T}}{\Delta t} - \bar{c}_p u_r \frac{T^* - \bar{T}}{\mathbf{h}} + \frac{2\bar{I}}{\bar{\mathbf{r}}} \frac{T^* - \bar{T}}{\mathbf{h}^2} + 2 \sum_{i=1}^N \bar{D}_{ieff} \bar{C}_p \bar{T}_i \frac{Y^* - \bar{Y}}{\mathbf{h}^2} + \frac{\mathbf{m}_m}{\bar{\mathbf{r}}} \left( 3 \frac{u_r^2}{\mathbf{h}^2} + 5 \frac{u_j^2}{\mathbf{h}^2} \right) + \sum_{i=1}^N \mathbf{w}^* \Delta h_{f_i}^* \quad (\text{VI.45})$$

Poiché l'energia cinetica di sottogriglia è esprimibile con la:

$$k_{SGS} = \mathbf{g}^* (k^* - \bar{k}) \quad (\text{VI.46})$$

ne deriva che:

$$k_{SGS} = \mathbf{g}^* \frac{\frac{1}{\bar{\mathbf{r}}} \frac{p^* - \bar{p}}{\Delta t} - \bar{c}_p \frac{T^* - \bar{T}}{\Delta t} - \bar{c}_p u_r \frac{T^* - \bar{T}}{\mathbf{h}} + \frac{2\bar{I}}{\bar{\mathbf{r}}} \frac{T^* - \bar{T}}{\mathbf{h}^2} + 2 \sum_{i=1}^N \bar{D}_{ieff} \bar{C}_p \bar{T}_i \frac{Y^* - \bar{Y}}{\mathbf{h}^2} + \frac{\mathbf{m}_m}{\bar{\mathbf{r}}} \left( 3 \frac{u_r^2}{\mathbf{h}^2} + 5 \frac{u_j^2}{\mathbf{h}^2} \right) + \sum_{i=1}^N \mathbf{w}^* \Delta h_{f_i}^*}{\left( \frac{1}{\Delta t} + \frac{u_r}{\mathbf{h}} \right)} \quad (\text{VI.47})$$

Richiamando alla mente l'espressione per la viscosità turbolenta (vedi (VI.11)), ne discende che tale espressione è alla base del modello di sottogriglia.

Per chiudere il problema, però, occorre ancora definire le grandezze:  $\gamma^*$ ,  $\eta$ ,  $T^*$ ,  $Y^*$ ,  $p^*$ ,  $u_r$ ,  $u_\theta$ .

### VI.4.9 Modellizzazione del volume del reattore

Sia la combustione che la diffusione sono fenomeni che avvengono alle scale fini ovvero ove la dimensione caratteristica dei vortici è dell'ordine della scala di Kolmogorov e quindi il mescolamento è anche molecolare.

Non tutto il volume della cella di calcolo è quindi occupato da tali strutture ma solo una frazione  $\gamma^*$  dato dal rapporto tra il volume occupato dalle strutture fini e quello della cella (?<sup>3</sup>):  $\mathbf{g}^* = \frac{V^*}{V}$

Considerando tali strutture vorticosi di forma tubolare e di lunghezza pari a ? (dimensione della cella) e raggio pari a  $\mathbf{h}$  (lunghezza di Kolmogorov) è plausibile descrivere il volume di ciascuna struttura approssimativamente pari a  $\mathbf{p}\mathbf{h}^2\Delta$ .

Ipotizzando, inoltre, che nel range inerziale un vortice grande metta in moto N vortici più piccoli si ha che la frazione di volume occupata dalle strutture è:

$$\mathbf{g}^* = \frac{V^*}{V} = N \frac{\mathbf{p}\mathbf{h}^2\Delta}{\Delta^3} = \mathbf{p}N \frac{\mathbf{h}^2}{\Delta^2} \quad (\text{VI.48})$$

La dimensione della scala caratteristica della turbolenza,  $\eta$ , è stata calcolata a partire dall'ipotesi, seppure molto semplificativa, di range inerziale della turbolenza per cui l'energia prodotta dai vortici più grandi viene interamente trasferita a quelli più piccoli fino alla scala di Kolmogorov ove viene dissipata. A differenza dell'ipotesi di Kolmogorov, si è assunto che un vortice di larga scala generi non uno ma  $N$  vortici più piccoli. Partendo dunque dalla dimensione caratteristica della cella, per l'ipotesi di range inerziale si ha:

$$\frac{u_{SGS}^3}{\Delta} = N \frac{u_h^3}{h} \quad (VI.49)$$

dove  $u_h$  è la velocità di rotazione del vortice di scala  $h$  e  $u_{SGS}$  è la velocità di rotazione delle strutture alla scala del filtro. Poiché alla scala  $h$  i tempi convettivi e diffusivi sono dello stesso ordine di grandezza si ha che  $Re_\eta \sim 1$  e dunque:

$$\frac{h}{\Delta} = N \frac{p}{Re_\Delta^{\frac{3}{2}}} \quad (VI.50)$$

con:

$$Re_\Delta = \frac{\tilde{r} u_{SGS} \Delta}{m_m} \quad (VI.51)$$

Combinando la (VI.50) e la (VI.51), si ottiene una espressione per la dimensione caratteristica della turbolenza:

$$h = N \Delta \frac{p}{Re_\Delta^{\frac{3}{2}}} \quad (VI.52)$$

Il numero di vortici  $N$  che si formano è stato ricavato dalla teoria frattale<sup>41</sup> e dipende dal numero di Reynolds:

$$N = p Re^{\frac{1}{2}} \quad (VI.53)$$

#### VI.4.10 Modellizzazione delle velocità radiale e tangenziale

Sebbene nel precedente capitolo si sia giunti alla conclusione che la combustione supersonica avvenga a volume circa costante, a causa dell'aumento tendenziale (e locale) di pressione dovuto alla combustione, a valle di questa si potrebbe avere una lieve espansione del reattore stesso.

Questo avverrà o meno in funzione della geometria e iniezione del combustibile a livello macroscopico, e in funzione dei tempi caratteristici a livello microscopico.

Se si considera il tempo di residenza del flusso in una cella di calcolo, a seconda della variazione locale di pressione prodotta dalla combustione, ci sarà o meno un effetto sul campo filtrato. Fisicamente, ciò che accade è che tanto maggiore è la forza esercitata dal reattore per espandersi e tanto minore è il tempo di espansione. Confrontando dunque questo tempo con quello convettivo si può dedurre se tale effetto peserà o meno. In particolare, per il secondo principio di Newton:

$$\bar{F} = m \bar{a} \quad (VI.54)$$

essendo al tempo  $t+\Delta t$  la pressione interna al reattore pari a  $p^*$ , si ha:

$$F = 2ph\Delta(p^* - \bar{p}) \quad (VI.55)$$

e quindi, specializzandola ad un reattore tubolare:

$$2ph\Delta(p^* - \bar{p}) = \bar{r}ph^2\Delta \frac{du_r}{dt} \quad (VI.56)$$

Da tale equazione si ottiene una espressione per la velocità di espansione del vortice:

$$u_r = \frac{2(p^* - \bar{p})\Delta t}{\bar{r}h} \quad (VI.57)$$

dove  $\Delta t$  è il tempo di integrazione e la velocità radiale al tempo  $t = 0$  (ovvero al tempo iniziale per ogni passo temporale) è nulla. Per avere una stima di tale termine, adimensionalizzandolo si ha:

$$u_r = \frac{1}{Ma^2} \frac{2(p^* - \bar{p})\Delta t}{\bar{r}h} \quad (VI.58)$$

Da ciò si evince che all'aumentare del Mach locale tale effetto è sempre più trascurabile. Come già accennato nel capitolo precedente, se si avesse una reazione molto veloce, con aumento repentino di pressione, il Mach locale assumerebbe valori sempre più piccoli e tale effetto sarebbe sempre più grande: dopo la combustione si avrebbe una leggera fase di espansione. Localmente infatti, a causa del calore rilasciato durante la combustione, l'energia interna del reattore risulterebbe maggiore di quella esterna, quindi localmente si avrebbe una espansione. Se dunque il flusso è fortemente reattivo, al punto che  $SZ \gg 1$  l'ipotesi di combustione a volume costante è parzialmente valida e l'effetto dovuto al repentino rilascio di calore non può essere trascurato.

Per dare validità più generale al modello, si tiene conto di tale effetto per il tramite della  $u_r$ : il peso di tale termine dipende principalmente dal gradiente di pressione.

Nel caso in cui tale effetto non fosse trascurabile, si avrebbe un trasporto convettivo di entalpia, di specie chimiche e di entropia dovuto a questa dilatazione radiale.

La velocità  $u_\theta$  calcolata con l'ipotesi di esistenza di un range inerziale:

$$u_h = u_{SGS} \text{Re}_\Delta^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{VI.59})$$

è la velocità tangenziale di rotazione del vortice di scala minima presente nel campo: tale velocità contribuisce fisicamente alla dissipazione molecolare.

In assenza di combustione, l'energia cinetica turbolenta (vedi (VI.12)) ha come unico contributo quello dovuto alla dissipazione viscosa molecolare; tutti gli altri termini compaiono solo in caso di reazioni chimiche. La velocità di dilatazione delle scale "fini", inoltre, si ha soltanto in presenza di reazioni chimiche fortemente reattive che causano elevate e repentine variazioni di temperatura e pressioni locali.

#### VI.4.11 Modellizzazione della temperatura, pressione e specie chimiche nel reattore di sottogriglia

Le conclusioni del capitolo precedente hanno mostrato che la combustione in regime supersonico avviene a volume circa costante. Per poter quindi calcolare la temperatura, la pressione e le specie chimiche a valle del processo di combustione, occorre richiamare l'equazione dell'energia interna (vedi Cap. III), e riscriverla in termini di  $C_v$ :

$$rC_v \frac{dT}{dt} = -p(\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) + r \sum_{k=1}^{NS} Y_k \bar{f}_k \cdot \bar{u}_i + \Phi - \bar{\nabla} \cdot \left( -k \bar{\nabla} T + r \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \mathfrak{RT} \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\mathbf{a}_k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right) \quad (\text{VI.60})$$

Avendo assunto che all'interno del reattore fluido di combustione le grandezze fisiche siano uniformemente distribuite, si arriva alla forma semplificata:

$$rC_v \frac{dT}{dt} = r \mathfrak{RT} \sum_{i=1}^{NS} \dot{w}_i - r \sum_{i=1}^{NS} h_i \dot{w}_i \quad (\text{VI.61})$$

Integrando l'equazione precedente assumendo che all'istante iniziale la temperatura sia la stessa in tutto il volume della cella e quindi sia internamente che esternamente al reattore fluido ove avviene la combustione ( $T(t=0) = \bar{T}$ ) ne discende che l'innalzamento di temperatura dovuto alla combustione a volume costante è:

$$T^* = \bar{T} + \frac{\Re \bar{T} \sum_{i=1}^{NS} \dot{w}_i^0 - \sum_{i=1}^N \dot{w}_i^0 h_i}{\bar{C}_v \bar{r}} \Delta t \quad (\text{VI.62})$$

dove  $\dot{w}_i^0$  è il rateo di comparsa o scomparsa della specie  $i$ -esima calcolata tramite Arrhenius (vedi paragrafo successivo).

L'espressione per la frazione massica delle specie chimiche a valle della combustione è:

$$Y_i^* = \bar{Y}_i + \dot{w}_i \frac{W_i}{r} \Delta t \quad (\text{VI.63})$$

dove  $W_i$  è il peso molecolare della specie  $i$ -esima espresso in kg/kmol.

Il valore della  $p^*$  a valle della combustione è stato calcolato a partire dall'equazione di stato per i gas perfetti:

$$p^* = \bar{r} R^* T^* \quad (\text{VI.64})$$

dove  $R^*$  è stata calcolata richiamando la relazione:

$$R^* = \Re \sum_{k=1}^{NS} \frac{Y_k^*}{W_k} \quad (\text{VI.65})$$

Si è giunti dunque alla definizione e modellizzazione di tutte le grandezze presenti nell'equazione dell'energia cinetica turbolenta di sottogriglia (VI.12).

## VI.5 MODELLO PER LA CINETICA CHIMICA

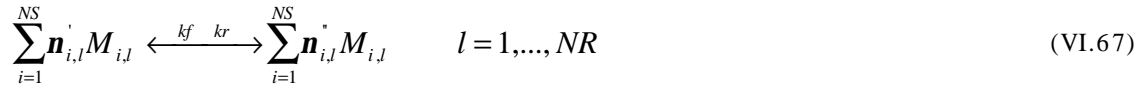
### VI.5.1 Modellizzazione del rateo di reazione in regime laminare

Introdotta il modello per il trasporto turbolento, nel caso di flussi reattivi è necessario introdurre un modello per l'accoppiamento tra cinetica chimica e turbolenza. Il problema della chiusura termochimica nasce dalla non linearità della dipendenza della densità e del termine di produzione delle specie chimiche  $w_i$  con la temperatura, la pressione e le frazioni molari. È quindi errato considerare:

$$w_i \left( T, p, \sum_{l=1}^n Y_l \right) = w_i \left( \bar{T}, \bar{p}, \sum_{l=1}^n \bar{Y}_l \right) \quad (\text{VI.66})$$

tale assunzione infatti porterebbe ad errori fino a tre ordini di grandezza e a risultati privi di significato.

Per uno schema di NR reazioni e NS specie chimiche, descritto dalla seguente espressione:



il rateo di comparsa e scomparsa  $\omega_i$  dell'i-esima specie chimica è:

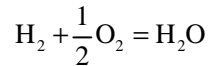
$$w_i = \sum_{l=1}^{NR} (n''_{i,l} - n'_{i,l}) w_l = \sum_{l=1}^{NR} (n''_{i,l} - n'_{i,l}) \left\{ k_{f_l} \prod_{i=1}^{NS} [M_{i,l}]^{n'_{i,l}} - k_{b_l} \prod_{i=1}^{NS} [M_{i,l}]^{n''_{i,l}} \right\} \quad (\text{VI.68})$$

dove  $\omega_i$  è la velocità della i-esima reazione, e  $k_f$  e  $k_b$  sono le costanti di reazione in avanti e all'indietro esprimibili dalla relazione di Arrhenius:

$$k_{i,l} = A_{i,l} T^{b_{i,l}} e^{-E_{a,i,l}/RT} \quad i = f, b \quad (\text{VI.69})$$

Come si evince dalla sua stessa espressione, il rateo di comparsa e scomparsa delle specie chimiche è fortemente non lineare, l'operazione di filtro dunque dà luogo alla nascita di termini di correlazione incogniti. Il problema della chiusura termochimica richiede dunque l'introduzione di modelli di combustione per il termine sorgente di sottogriglia. Tali modelli avranno validità limitata al caso di combustione supersonica.

La cinetica chimica della reazione  $H_2/O_2$  è stata modellata drasticamente tramite un meccanismo globale 1-step<sup>42</sup>: (con tre specie reagenti e 2 inerti, OH e N<sub>2</sub>):



Il meccanismo 1-step ha il vantaggio di essere più semplice e avere solo tre specie ma i risultati sono poco realistici, sovrastimando il rateo di conversione del combustibile, il ritardo di accensione e la temperatura finale.

La costante di reazione in avanti del meccanismo 1-step è:

$$k_f = 1.8 \times 10^{13} e^{\frac{17614K}{T}} \quad (\text{VI.70})$$

Per rendere i risultati più realistici, nel meccanismo globale 1-step è stata inclusa anche la reazione inversa. In realtà, fisicamente ha poco senso parlare di reazione inversa per un meccanismo 1-step idrogeno-aria, in quanto la costante di equilibrio ( $K_p$ ) della reazione  $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$  (di scomparsa dell'acqua e formazione di idrogeno e aria) è maggiore dell'unità solo per temperature dei reagenti oltre i 4500 K. Poiché, però, il meccanismo adottato non è dettagliato ma globale, la reazione all'indietro ha un valore puramente matematico: la reazione inversa è stata inclusa esclusivamente per riprodurre più fedelmente possibile la curva della temperatura in funzione del tempo.

Temp K	$\text{H}_2\text{O} \hat{U} \text{H}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2$
298	-92.208
500	-52.691
1000	-23.163
1200	-18.182
1400	-14.609
1600	-11.921
1800	-9.826
2000	-8.145
2200	-6.768
2400	-5.619
2600	-4.648
2800	-3.812
3000	-3.086
3200	-2.451
3400	-1.891
3600	-1.392
3800	-0.945
4000	-0.542
4500	0.312
5000	0.996
5500	1.560
6000	2.032

**Tabella VI.1 Andamento della costante di equilibrio in funzione della temperatura**

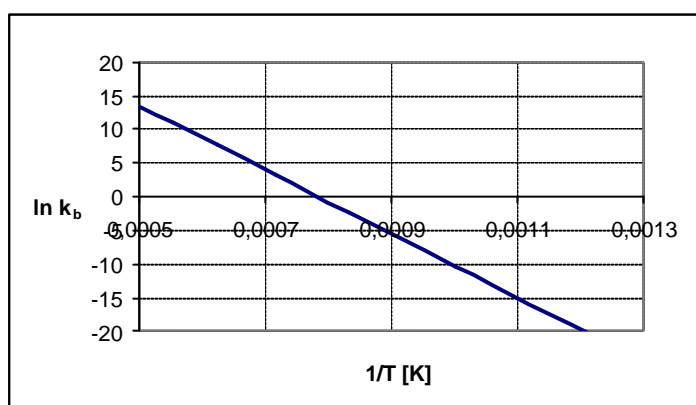
La costante di reazione all'indietro  $k_r$  è stata calcolata alla pressione di 1 atm per diverse temperature a partire dalla relazione<sup>43</sup>:

$$K_p(T) = \frac{k_f(T)}{k_b(T)} \quad (\text{VI.71})$$

dove  $K_p$  è la costante di equilibrio della relazione esprimibile con la relazione:

$$K_p = \exp\left(\frac{-\Delta G_r^0}{\mathfrak{R}T}\right) \quad (\text{VI.72})$$

I valori di  $k_b$  calcolati per diverse temperature iniziali dei reagenti sono:



**Figura VI.2** Andamento della costante all'indietro del meccanismo di Marinov



Da tale curva, essendo la costante di Arrhenius  $k_f$  esprimibile con la relazione

$$k_f = A_f e^{-\frac{Ea_f}{\Re T}} \quad (\text{VI.73})$$

si ha che:

$$\ln k_f = -\frac{Ea_f}{\Re} \frac{1}{T} + \ln A_f \quad (\text{VI.74})$$

Ovvero l'andamento del logaritmo della costante inversa in funzione dell'inverso della temperatura è una retta traslata rispetto all'origine del logaritmo della costante  $A_f$  e avente per coefficiente angolare l'energia di attivazione. L'espressione della costante inversa di reazione è:

$$k_f = 1.6 \times 10^{16} e^{-\frac{39419 K}{T}} \quad (\text{VI.75})$$

Aggiungendo la reazione inversa si ottengono tempi e temperature più vicine a quelle del meccanismo H<sub>2</sub>/Aria dettagliato. Il rateo di comparsa e scomparsa delle specie chimiche fornito da Marinov, quindi è:

$$\dot{w} = 1.8 \times 10^{13} e^{-\frac{17614 K}{T}} [H_2][O_2]^{\frac{1}{2}} - 1.6 \times 10^{16} e^{-\frac{39419 K}{T}} [H_2O] \quad (\text{VI.76})$$

dove le unità di misura sono in mol<sup>0.5</sup> cm<sup>1.5</sup> s<sup>-1</sup>.

Le figure sottostanti mostrano i ritardi all'accensione per il suddetto meccanismo globale di reazione. I calcoli sono stati condotti assumendo l'aria a temperatura 1000 K e l'idrogeno a differenti temperature iniziali.

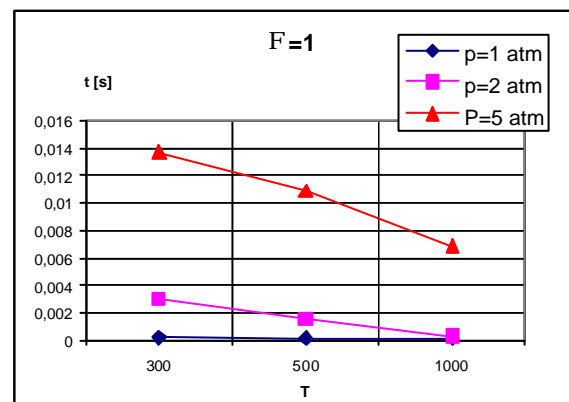
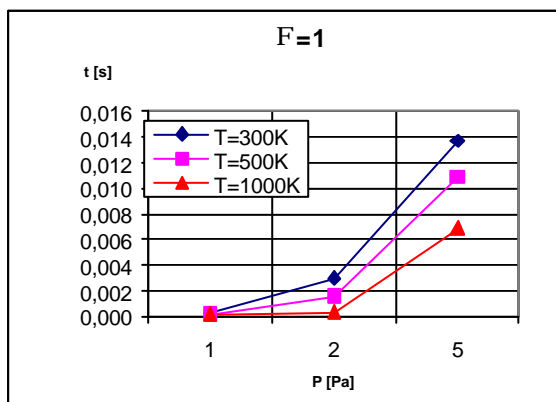


Figura VI.3 Ritardi d'accensione al variare di P

Figura VI.4 Ritardi d'accensione al variare di T

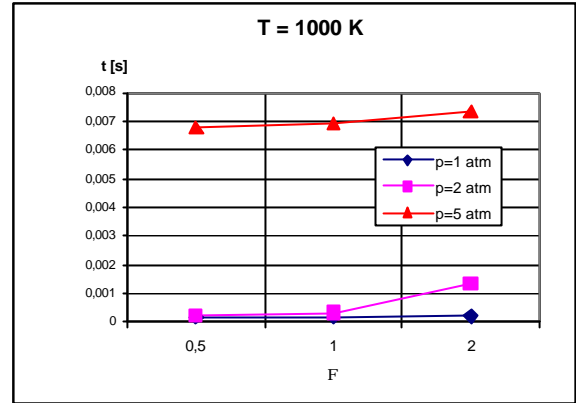
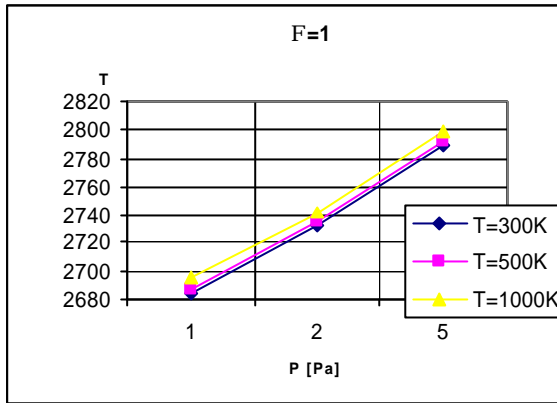


Figura VI.5 Temperature di fiamma al variare di P

Figura VI.6 Ritardi d'accensione al variare di F

Come ben noto, e come si evince anche dalle figure sovrastanti, per tali valori della temperatura iniziale dei reagenti, la reazione tra idrogeno e aria presenta alti ritardi d'accensione mentre per temperature superiori a 1400 K, invece, i tempi si riducono notevolmente (di circa due ordini di grandezza).

La reazione (VI.76) non è completa, infatti, poiché la frequenza collisionale deve tener conto degli effetti di comprimibilità di cui si è parlato nel capitolo II, è stato introdotto il termine correttivo riportato nell'equazione II.23. L'espressione per la velocità di reazione è stata dunque riscritta come:

$$w(t, r, T, M) = w_0 \left[ 1 \pm 2gMa^2 \right] \quad (\text{VI.77})$$

Da tale equazione si evince che la velocità di reazione è fortemente influenzata dal Mach locale e che per flussi a  $Ma \ll 1$  si ritorna all'espressione valida in regime subsonico.

### VI.5.2 Modellizzazione dell'accoppiamento tra combustione e turbolenza

L'ipotesi di partenza per l'accoppiamento cinetica chimica-turbolenza riprende quelle del modello Eddy Dissipation Concept, secondo cui non tutto il volume di cella reagisce, ma solo parte di esso. La velocità di reazione da inserire come chiusura delle equazioni di Navier Stokes non è dunque quella descritta nel paragrafo precedente. È presumibile che la velocità di "reazione filtrata" possa assumersi pari a:

$$\bar{w} = g^* w \quad (\text{VI.78})$$

A causa del fatto che all'interno della cella il fluido non è perfettamente mescolato, la velocità di reazione sarà tanto più piccola quanto minore è la frazione di volume mescolata.

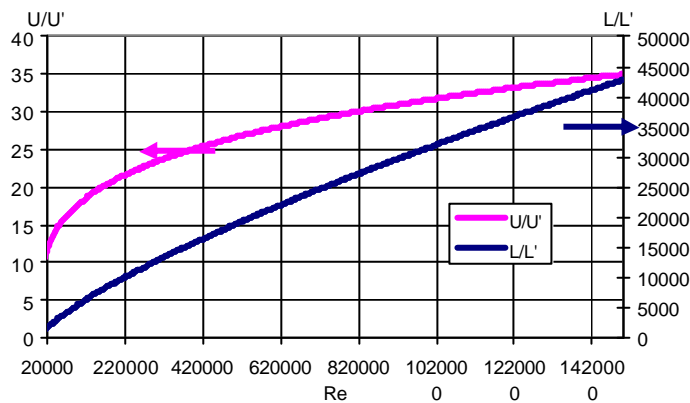
Avendo modellato tutti i termini necessari per la chiusura delle equazioni di Navier Stokes filtrate, è opportuno validare la bontà del modello tramite simulazioni numeriche.

## VI.6 COMMENTI AL MODELLO DI SOTTOGRIGLIA

L'equazione (VI.11), che è alla base del modello di sottogriglia per la modellizzazione degli sforzi di Reynolds, mostra che la viscosità turbolenta,  $\mu_t$ , è fortemente influenzata dalle dimensioni della griglia  $\Delta$ . Nel modello di Kolmogorov, infatti, essendo  $\left( e = \frac{u^3}{L} = \frac{u_\Delta^3}{l_\Delta} = \frac{u_k^3}{l_k} = \text{cost} \right)$ , si ottiene una espressione per  $k_{SGS}$  in funzione della velocità, della lunghezza di larga scala e delle dimensioni della cella:  $k_{SGS} \sim u^2 \left( \frac{\Delta}{L} \right)^{\frac{2}{3}}$ , da cui:

$$\mathbf{m} \sim \bar{\mathbf{r}} u \left( \frac{\Delta^4}{L} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{VI.79})$$

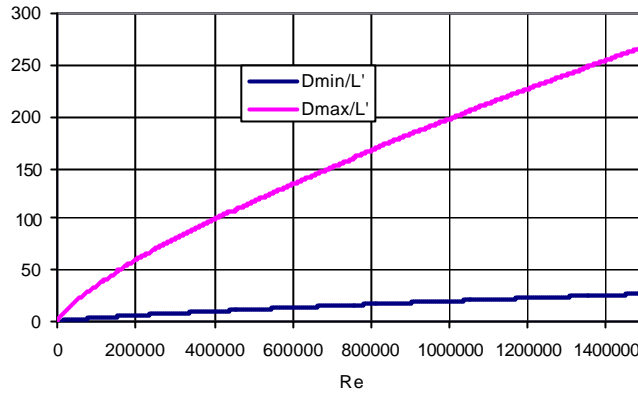
All'aumentare delle dimensioni della cella il modello comporta un corrispondente aumento della viscosità turbolenta di cella. La Figura VI.7. mostra che il divario tra la dimensione di larga scala e quella caratteristica della turbolenza è tanto maggiore quanto più alto è il numero di Re di larga scala (valori tipici del numero di Re in motori scramjet sono dell'ordine di 200000÷1500000).



**Figura VI.7 Rapporto tra la dimensione caratteristica del combustore e quella della turbolenza**

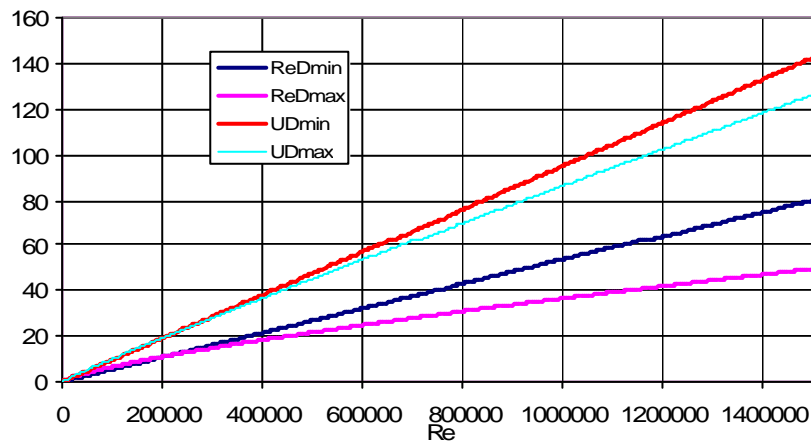
Assumendo come dimensioni caratteristiche della cella  $\Delta_{\min}= 0.5$  mm e  $\Delta_{\max}= 5$  mm, i rapporti tra la dimensione della cella e la lunghezza di Kolmogorov sono riportati in

Figura VI.8:



**Figura VI.8 Rapporto tra la dimensione della cella e quella della turbolenza**

Alla scala di Kolmogorov  $l_k$ , essendo i tempi diffusivi e convettivi dello stesso ordine di grandezza, il numero di Re corrispondente è unitario. Il Reynolds di cella, invece, si discosta tanto più dal valore unitario quanto più la dimensione della cella è grande rispetto alla lunghezza caratteristica della turbolenza. La Figura VI.9 riporta il valore del Re di cella e della velocità di fluttuazione per celle delle dimensioni riportate precedentemente, in funzione del Re di larga scala. Da tale figura si evince che, all'aumentare del Re di larga scala, il numero di  $Re_{\Delta}$  si discosta sempre più dall'unità.



**Figura VI.9 Andamento del Re di cella e della velocità di fluttuazione al variare del Re di larga scala**

Il  $Re_{\Delta}$  mostrato in Figura VI.9, è stato calcolato assumendo come viscosità quella molecolare e non quella turbolenta. Non si tengono dunque in considerazioni gli effetti della turbolenza sul

mescolamento. All'aumentare del Re di grande scala, si ha un aumento del  $Re_{\Delta}$  che dunque differisce sempre più dal valore unitario.

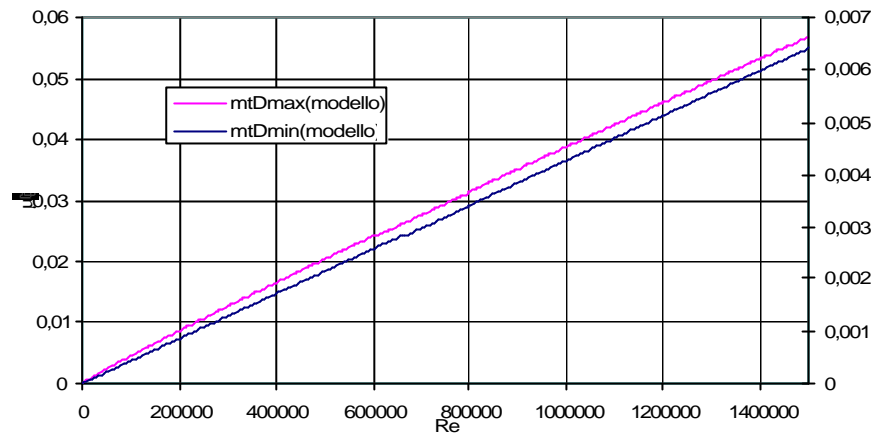


Figura VI.10 Andamento della viscosità turbolenta di sottogriglia al variare del numero di Re

Sempre nel modello di Kolmogorov, considerando un flusso in camera di combustione avente le seguenti proprietà fisiche:

$$\rho = 0.1 \text{ kg/m}^3$$

$$\mu_{\text{mol}} = 8 \times 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}.$$

la viscosità turbolenta va da  $10^{-3}$  a  $6 \times 10^{-2}$  a seconda della dimensione della cella: tali valori mostrano che il modello di Kolmogorov sovrastima gli sforzi viscosi e non tiene conto né degli effetti di cascata inversa di energia né degli effetti dovuti alla comprimibilità e alla combustione. Il modello proposto, invece, calcola la velocità di fluttuazione modellando tutti i termini dell'equazione dell'energia cinetica di sottogriglia; in tal modo gli effetti della comprimibilità e della combustione sono presi in considerazione e contribuiscono ad intensificare o attenuare le fluttuazioni.

La Figura VI.10 mostra, inoltre che, il modello di Kolmogorov predice un aumento della viscosità turbolenta all'aumentare delle dimensioni della cella. Dall'analisi dei tempi caratteristici della

diffusione turbolenta,  $t_{diff_{\Delta}} = \frac{\Delta^2}{n_t}$ , e della convezione,  $t_{conv_{\Delta}} = \frac{\Delta}{u_{\Delta}}$ , essendo per la (VI.11)

$t_{diff_{\Delta}} \approx \frac{\Delta^2}{\Delta u_{\Delta}}$ , il rapporto tra i tempi caratteristici turbolenti è:

$$\frac{t_{diff_{\Delta}}}{t_{conv_{\Delta}}} \approx 1.$$

Da tale espressione si evince che il modello di Kolmogorov predice viscosità turbolente eccessivamente alte e quindi un mescolamento diffusivo intenso: i tempi sono confrontabili indipendentemente dalla dimensione della griglia. Il modello proposto, invece, calcola l'energia

cinetica di sottogriglia a partire dalla sua stessa equazione. In tal modo, inoltre, tiene conto di tutti gli effetti che entrano in gioco a livello di sottogriglia: la combustione, la comprimibilità locale e i termini diffusivi. La limitazione del modello, però, sta nell'ipotesi di eddy viscosity, che impone al campo filtrato una proprietà fisica. L'introduzione della  $\mu_t$  nelle equazioni di Navier-Stokes è equivalente, infatti, a considerare un fluido "diverso" da quello reale e cioè con una dissipazione viscosa molto più alta. In questo modo, nonostante nel modello si siano presi in considerazione gli effetti dovuti alla combustione e alla comprimibilità, tali effetti intervengono nel campo solo indirettamente attraverso una maggiore o minore viscosità locale. Un possibile sviluppo successivo potrebbe essere quello di considerare un modello in cui gli effetti delle fluttuazioni vengono tenute in considerazione attraverso l'introduzione di un termine sorgente<sup>44</sup> da inserire direttamente nelle equazioni filtrate di Navier Stokes.

## CAPITOLO VII

### VII. SIMULAZIONI RANS E LES

Le analisi e le valutazioni condotte nel corso della presente tesi hanno evidenziato aspetti importanti dell'accoppiamento tra combustione e turbolenza e dell'ancoraggio di fiamma. Un ulteriore aiuto alla comprensione dei fenomeni che avvengono in regime supersonico oltre che un valido strumento per analizzare la validità del modello è fornito dalle simulazioni numeriche.

Al fine di validare il presente modello di sottogriglia (ISCM) sono state condotte simulazioni numeriche sia con modelli noti e ampiamente utilizzati che con il modello sviluppato e proposto in questa tesi. Sono stati presi in esame due casi sperimentali: il primo condotto presso l'Università di Tokyo dal Prof. Takahashi sulla combustione di un getto di idrogeno iniettato in cross-flow rispetto all'aria entrante, l'altro condotto al centro di ricerca della NASA Langley da P. Drummond circa la combustione di un getto di idrogeno iniettato obliquamente rispetto all'aria entrante.

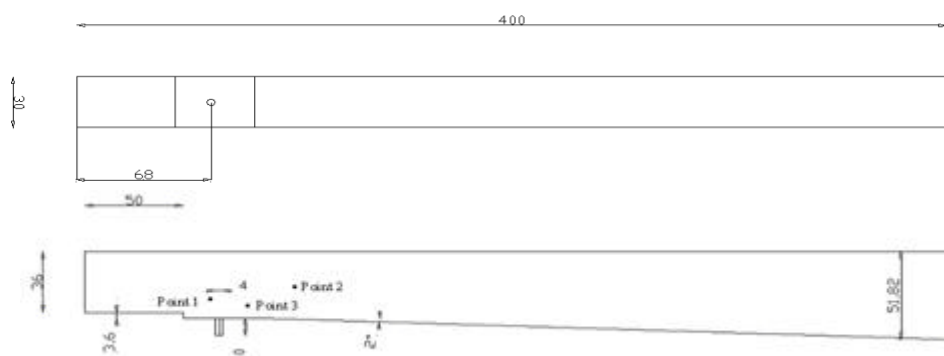
Sono stati dunque confrontati sia i vari modelli tra loro, che i risultati ottenuti dalle simulazioni con quelli sperimentali.

#### VII.1 I CASO: COMBUSTIONE DI UN GETTO DI IDROGENO INIETTATO IN CROSS FLOW RISPETTO ALL'ARIA ENTRANTE

##### VII.1.1 Geometria della camera di combustione e condizioni esaminate

Il primo caso preso in esame è la combustione di un getto d'idrogeno iniettato in cross-flow in una corrente d'aria viziata.

La geometria della camera di combustione è schematizzata nella figura sottostante.





**Figura VII.1 Sezioni XY e ZY dell'intero dominio computazionale**

Prendendo a riferimento la camera di combustione costruita all'università di Tokyo dal Prof. Takahashi, sono state effettuate delle simulazioni 3-D sia RANS (non reattive) che LES (reattive e non) utilizzando il codice FLUENT 6.2™.

Le simulazioni sono state effettuate sia per il test-case eseguito a U. Tokyo<sup>45</sup> (caso 1) che per altri due casi in cui il combustibile è stato iniettato a temperature maggiori (600 K e 1200 K) in modo da poter valutare l'effetto del preriscaldamento del combustibile sulla combustione.

Le condizioni esaminate sono riportate nella tabella sottostante:

	Caso 1		Caso 2		Caso 3	
	Aria	H2	Aria	H2	Aria	H2
Temp. Stat. (K)	1145	248	1145	600	1145	1200
Press. Stat. (kPa)	49.7	171	49.7	259.8	49.7	366.3
Mach	2	1	2	1	2	1
$Y_{O_2}$	0.21	0	0.21	0	0.21	0
$Y_{N_2}$	0.572	0	0.572	0	0.572	0
$Y_{H_2O}$	0.271	0	0.271	0	0.271	0
$Y_{H_2}$	1.3e-5	1	1.3e-5	1	1.3e-5	1
$Y_{OH}$	7.1e-4	0	7.1e-4	0	7.1e-4	0
$\phi$	0.4		0.4		0.4	

**Tabella VII.1 Condizioni nominali esaminate**

Il combustore è stato discretizzato da una griglia strutturata 3-D, la cui spaziatura nel caso delle simulazioni RANS e LES con Smagorisky-Lilly è pari ad 1 mm ovunque tranne nella zona di iniezione dove è infittita (0.5 mm) e nel divergente dove è diradata. Per le simulazioni LES con il modello di sottogriglia FM (Fractal Model) e il modello ISCM si sono utilizzati una griglia più fitta nella zona di iniezione a valle dello scalino (0.2 mm) in modo tale da analizzare in modo più dettagliato la zona di miscelamento.

### VII.1.2 Simulazioni RANS E LES con i modelli Smagorinsky-Lilly e Fractal Model

Il modello turbolento utilizzato per le RANS è quello k- $\epsilon$ , per le LES è stato utilizzato sia quello di Smagorinsky-Lilly che il FM. Nelle LES reattive, l'accoppiamento dei fenomeni chimici e turbolenti è stato rappresentato con il modello "Finite Rate/ Eddy Dissipation", ovvero, si è calcolato sia il tempo chimico che il tempo di mescolamento e si è scelto il più piccolo dei due.

Per le simulazioni LES reattive con il modello ISCM si è adottando lo stesso tipo di griglia delle simulazioni LES reattive con i modelli Smagorinsky e Fractal Model. Il modello è stato introdotto tramite una user defined function in cui sono stati definiti sia il termine sorgente delle specie chimiche filtrato che il modello della viscosità turbolenta.

Per tener conto dell'effetto del termine dilatazionale (vedi capitolo II) sulla velocità di reazione, il termine sorgente filtrato è stato moltiplicato per il fattore di comprimibilità  $(1 \pm 2\gamma Ma^2)$ , ovvero:

$$\tilde{\mathbf{w}} = (1 + 2\gamma Ma^2) \mathbf{g}^* \left\{ A_f e^{-\frac{Ea_f}{\Re T}} [H_2][O_2]^{\frac{1}{2}} - A_r e^{-\frac{Ea_r}{\Re T}} [H_2O] \right\} \quad (\text{VII.1})$$

Per non appesantire il calcolo (allungando ulteriormente i tempi computazionale), si è considerato per il fattore di comprimibilità solo il segno positivo. In tal caso, si avrà a differenza di ciò che avviene fisicamente, un aumento della velocità di reazione anche nelle zone di espansione, dove invece tale termine diminuisce. Tale approssimazione viene in parte giustificata dal fatto che durante un'espansione si ha un abbassamento di temperatura locale che impedisce fenomeni di accensione.

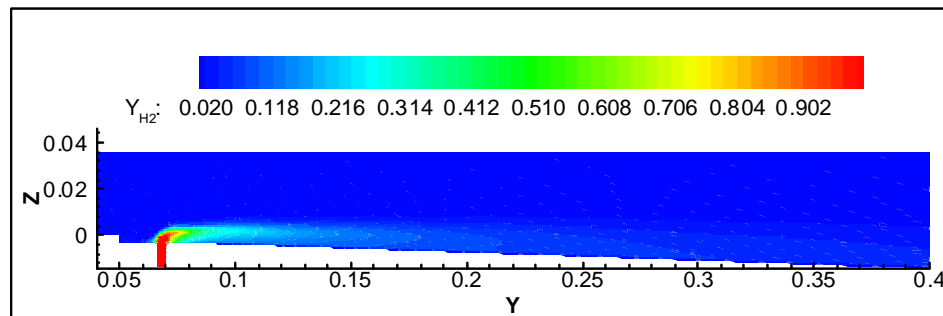
Nell'eq. (VII.1)  $\gamma^*$  è la frazione di volume della cella di calcolo in cui il mescolamento è su scala molecolare e quindi che reagisce.

Come accennato nel capitolo precedente, la viscosità turbolenta, invece è stata calcolata introducendo una espressione algebrica per il calcolo dell'energia cinetica turbolenta di sottogriglia,  $k_{SGS}$ .

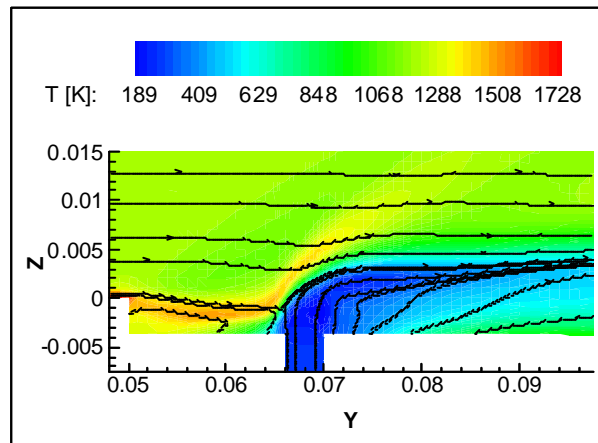
La cinetica chimica della reazione  $H_2/O_2$  è stata simulata per semplicità tramite un meccanismo globale 1-step<sup>42</sup> con tre specie reagenti (Cap VI.5).

Il meccanismo 1-step ha il vantaggio di essere più semplice e avere solo tre specie ma i risultati sono poco realistici, sovrastimando il rateo di conversione del combustibile, il ritardo di accensione e la temperatura finale.

Le simulazioni RANS, effettuate solo per il primo caso e assumendo che il flusso non sia reattivo, hanno mostrato che il getto di idrogeno penetra nella corrente d'aria per 1.5 diametri causando un'onda d'urto curva (vedi Figura VII.2); successivamente viene spinto verso la parete inferiore e portato a valle. Il mescolamento è debole, infatti nella sezione di uscita il getto di idrogeno è ancora identificabile. La temperatura massima raggiunta nella zona di ricircolo, a valle dello scalino, è pari a circa 1700 K (vedi Figura VII.3).



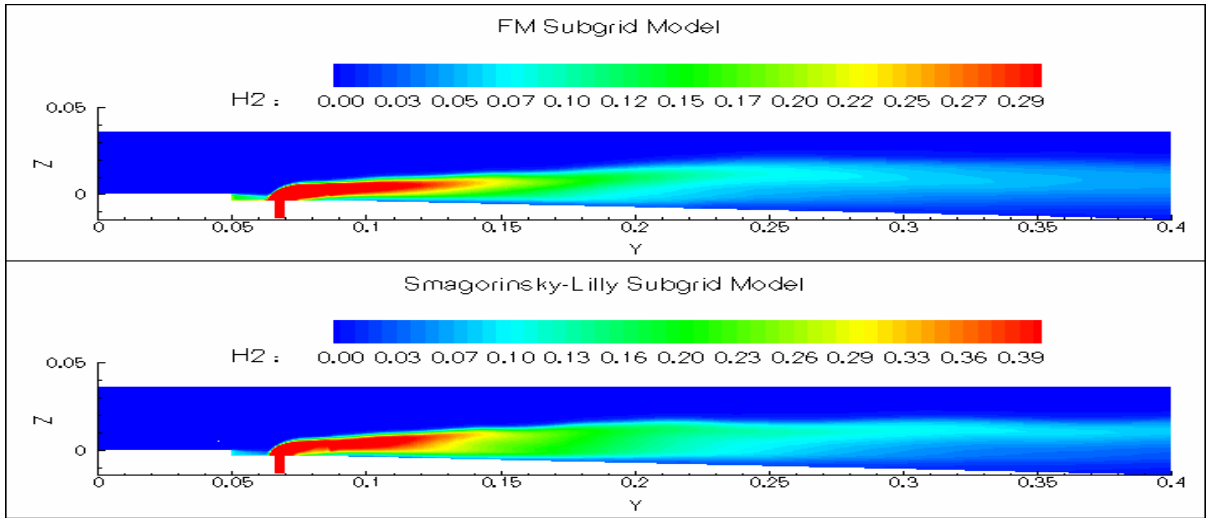
**Figura VII.2 Campo medio di  $Y_{H_2}$  nel piano ZY centrale (RANS non reattiva)**



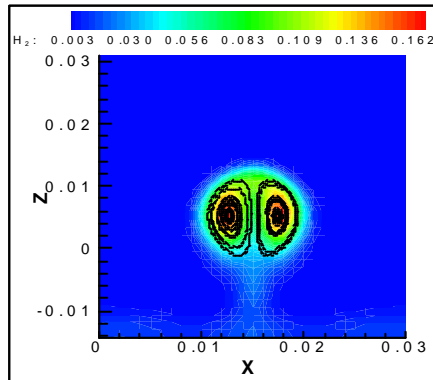
**Figura VII.3 Zoom del campo medio di temperature nel piano ZY all'altezza del gradino (RANS non reattiva)**

Come per la RANS, nella LES non reattiva (caso 1) il getto di idrogeno penetra per 1.5 diametri, ma non viene schiacciato verso la parete inferiore (vedi fig. Figura VII.4). Le simulazioni LES mostrano che il getto forma due vortici controrotanti che migliorano il mescolamento: infatti vi è solo un piccolo strato di idrogeno residuo lungo la parete inferiore. A causa della maggiore penetrazione, il punto di ristagno si trova ad una quota maggiore rispetto alle simulazioni RANS, e

la temperatura massima raggiunta in quel punto è 1270 K. L'onda d'urto predetta è più forte che nelle RANS: raggiunge la parete superiore e si riflette attraverso diversi urti successivi.



**Figura VII.4 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a X=0.15 m con i modelli Smagorinsky-Lilly e FM (caso non reattivo)**



**Figura VII.5 Campo medio di  $Y_{H_2}$  all'uscita con il modello Smagorinsky Lilly (LES non reattiva)**

Si è dunque passati, sempre per il caso 1, all'analisi del comportamento del flusso reattivo utilizzando il meccanismo 1-step. Nel caso 1-step, si sono considerati sia il modello Smagorinsky che FM ed ISCM. La griglia utilizzata è stata infittita nella zona di iniezione dell'idrogeno e nelle zone vicino alle pareti. Si è inoltre tenuto in considerazione l'effetto della presenza di uno strato limite di 3 mm (come suggerito dai dati sperimentali), e si è imposto un profilo della velocità dell'aria in ingresso di tipo trapezoidale.

La tipologia del flusso del getto di idrogeno nel caso reattivo è simile alla LES non reattiva (vedi Figura VII.6).

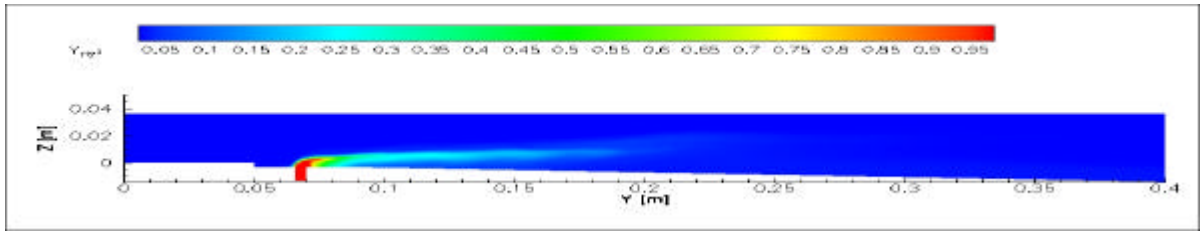


Figura VII.6 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a  $X=0.15$  m con modello ISCM

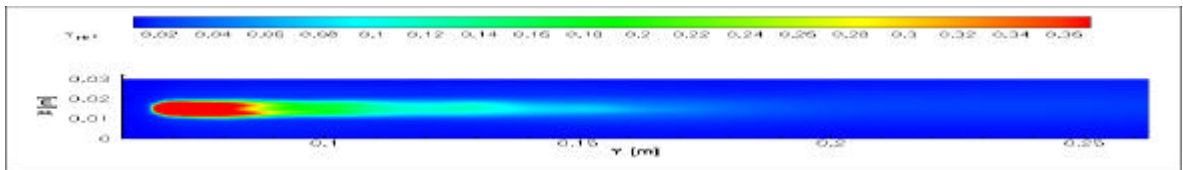


Figura VII.7 Campo istantaneo di  $Y_{H_2}$  nel piano XY all'altezza del gradino con modello ISCM

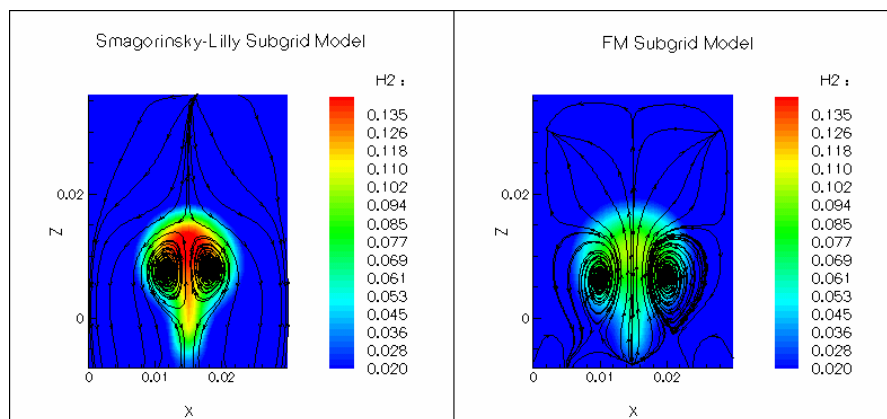


Figura VII.8 Campo medio di  $Y_{H_2}$  all'uscita (LES reattiva)

Con i modelli Smagorinsky Lilly e FM si osserva che, nel caso reattivo, i due vortici controrotanti sono più grandi e catturano l'idrogeno presente sulla parete inferiore formando una sorta di gambo tra essi (vedi Figura VII.8). Nel caso Smagorinsky, la fiamma (Figura VII.4), la cui  $T_{max}=2630$  K, si sviluppa orizzontalmente, verso le pareti laterali, fino a 8 cm a valle dell'iniettore. Successivamente, si sviluppa verticalmente seguendo l'andamento del "gambo" di idrogeno. La quantità di idrogeno bruciato è pari al 25% di quello iniettato. Nel caso ISCM, invece, all'uscita il getto di idrogeno non è più ben identificabile, in quanto la quantità di idrogeno bruciato è superiore al 50%. La Figura VII.9 mostra infatti che all'uscita dal combustore la fiamma occupa gran parte della sezione trasversale. La Figura VII.10 mostra che a  $Y=0.1$  il modello ISCM predice la presenza di vortici di forma cicloidale. Tali vortici a differenza di quelli predetti dagli altri modelli sono aperti: ciò favorisce un mescolamento più efficiente e quindi una migliore combustione.

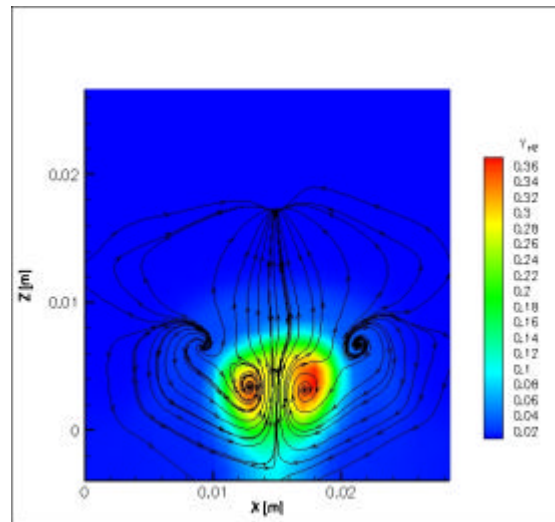


Figura VII.9 Campo istantaneo della  $Y_{H_2}$  nel piano XZ a  $Y = 0.1$  m con modello ISCM

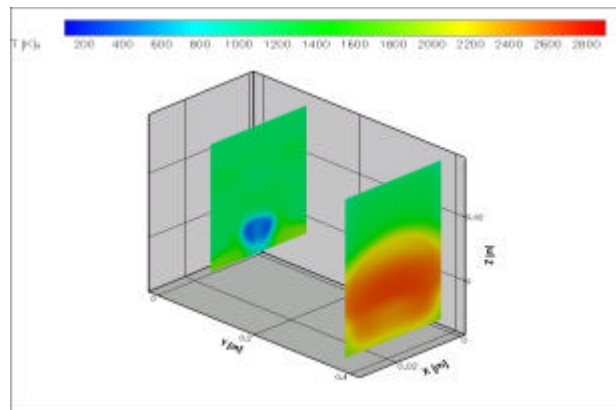


Figura VII.10 Vista tridimensionale di  $T$  nel piano XZ a  $Y = 0.1$  m e  $Y = 0.38$  m con modello ISCM

A differenza di Smagorinsky, che predice la presenza di reazioni chimiche nella zona a valle dello scalino e l'ancoraggio della fiamma vicino alla zona di iniezione dell'idrogeno per mezzo dei due vortici controrotanti, in FM la zona di reazione inizia verso la seconda metà del combustore, dopo di che i due vortici controrotanti collassano.

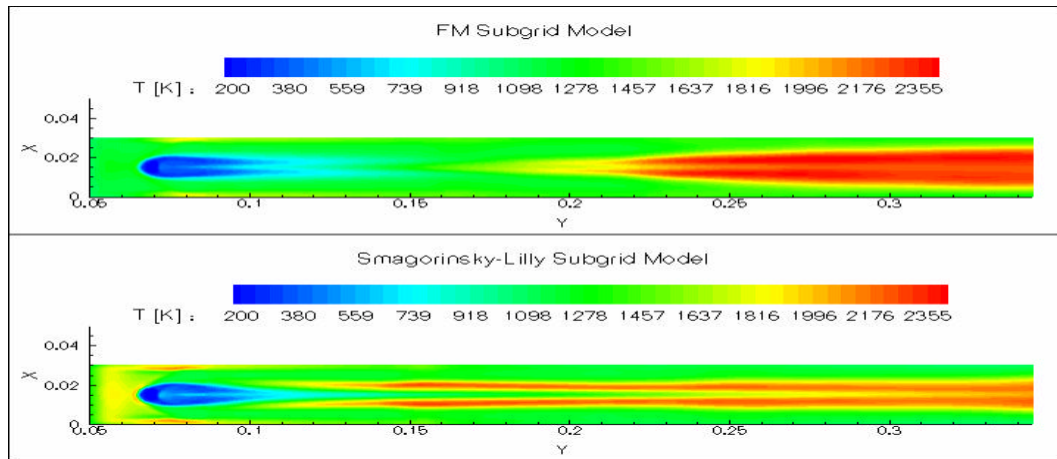


Figura VII.11 Campo medio di Temperatura sul piano XY all'altezza del gradino

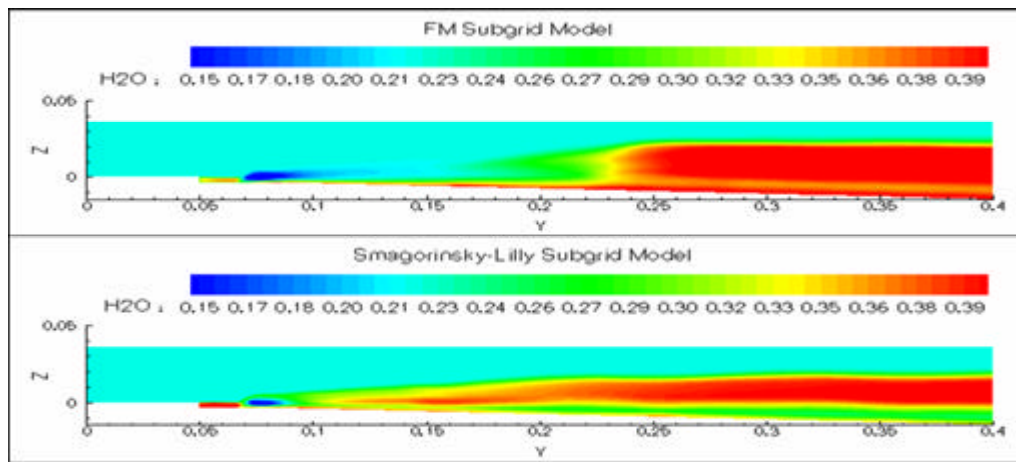


Figura VII.12 Campo medio di  $Y_{H_2O}$  sul piano YZ a  $X=0.20$  m

Il modello ISCM predice temperature massime più alte degli altri due casi, (circa 2800 K) che si registrano in prossimità delle pareti laterali. La Figura VII.13 mostra che l'ancoraggio della fiamma inizia a circa 3 cm dall'iniettore. La fiamma si sviluppa orizzontalmente, fino a circa 10 cm dall'iniettore e prosegue poi verticalmente.

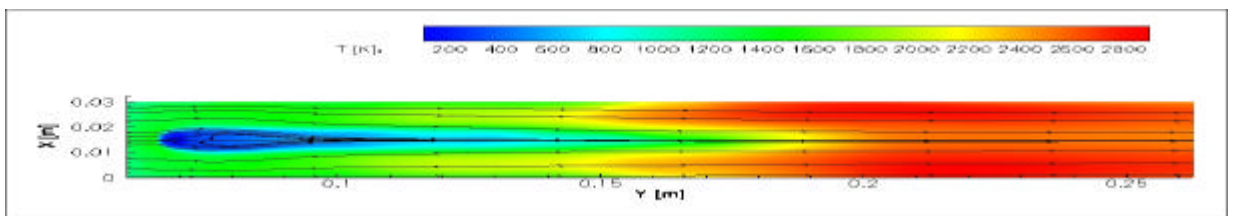
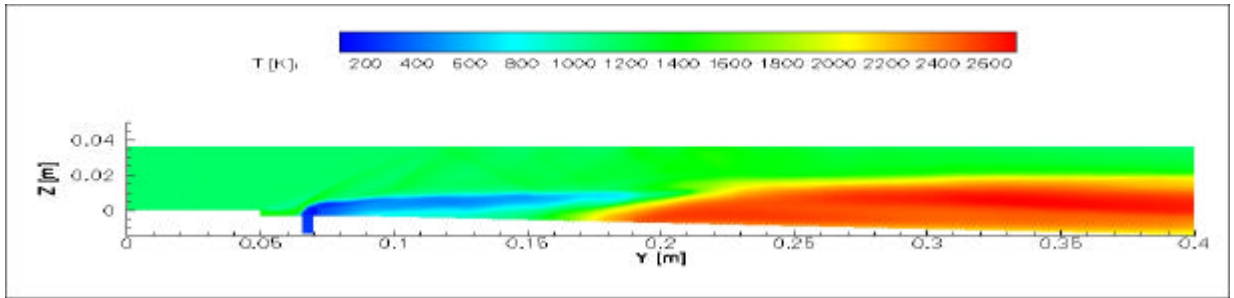
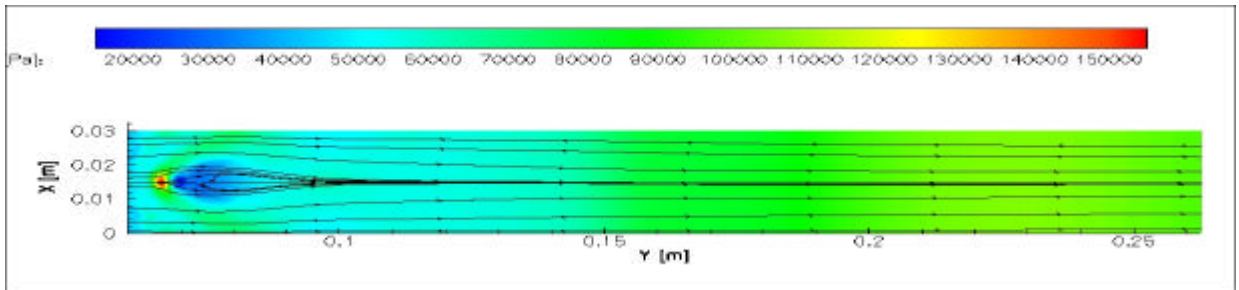


Figura VII.13 Campo istantaneo della T nel piano XY all'altezza del gradino con modello ISCM



**Figura VII.14 Campo istantaneo della T nel piano XY all'altezza dei gradini con modello ISCM**

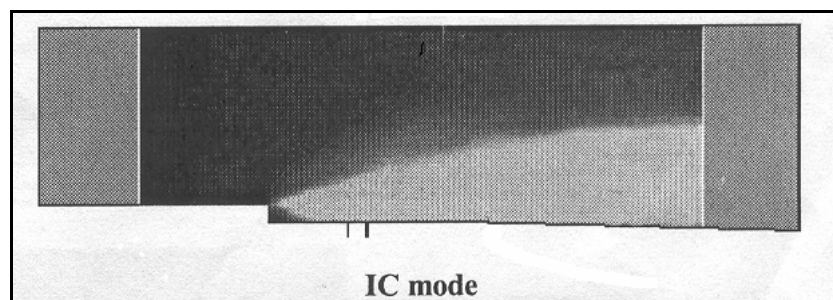
La Figura VII.15 mostra che in corrispondenza della zona di fiamma si ha un aumento di pressione: ciò conferma che la combustione in regime supersonico avviene a volume circa costante.



**Figura VII.15 Campo istantaneo della P nel piano XY all'altezza dei gradini con modello ISCM**

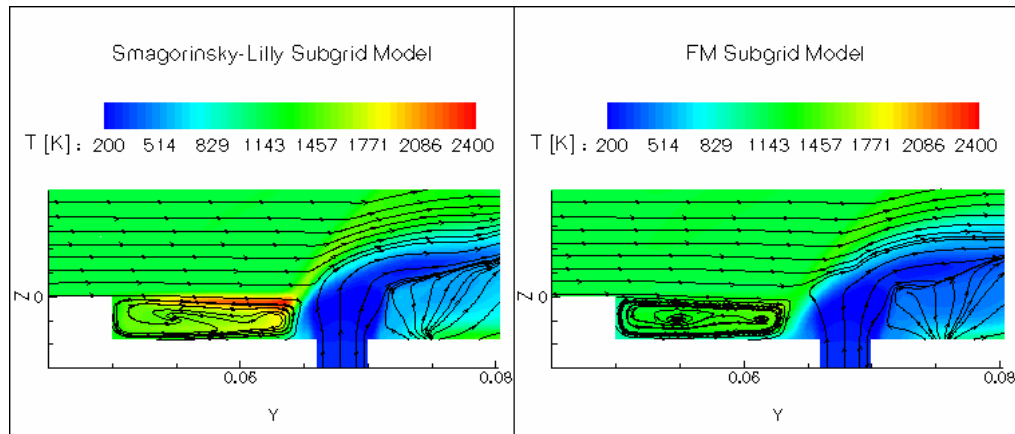
Il modello ISCM predice dunque la presenza di una fiamma più intensa di quella predetta con gli altri due modelli. Inoltre, a conferma di quanto esposto nel capitolo V, la combustione in regime supersonico avviene effettivamente con un aumento di pressione e a volume circa costante. Il modello ha inoltre identificato la presenza di vortici cicloidali grazie ai quali la fiamma si sviluppa seguendo l'andamento dei vortici stesso. La fiamma si ancora nel piano orizzontale alla stessa distanza predetta dal modello di Smagorinsky Lilly e più a monte rispetto a quella predetta nel FM.

Nonostante il modello ISCM dia risultati molto più soddisfacenti di quelli ottenuti con gli altri modelli, non è comunque in grado di riprodurre la combustione nella zona a valle dell'iniettore indicata nell'esperimento dell'università di Tokyo come una zona di intensa luminosità.



**Figura VII.16 Direct photo image in IC mode obtained by Takahashi**

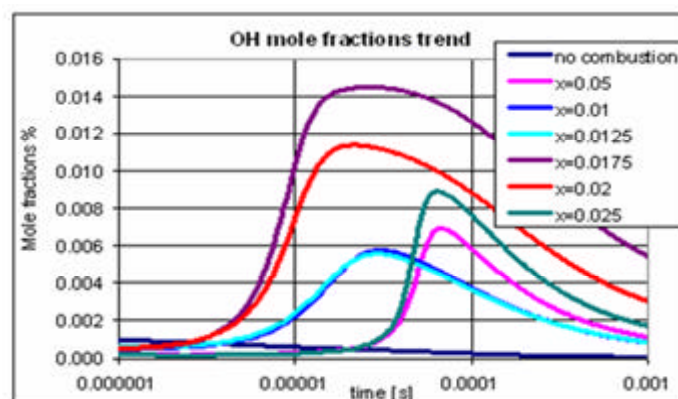




**Figura VII.17 Zoom del campo medio di temperature nel piano ZY all'altezza del gradino**

Questa incongruenza potrebbe essere dovuta all'assenza di predizione di onde d'urto oblique a valle dello scalino, o anche alla maggiore sensibilità delle CCD camera alla presenza di OH che emette nel vicino ultravioletto: non è detto che la luminosità indichi anche alte temperature. La luminosità presente nella Figura VII.16, infatti, potrebbe essere indice di basse temperature ma elevata presenza di OH e quindi di inizio di combustione.

Poiché il meccanismo adottato non è in grado di predire la produzione di OH (infatti ha solo tre specie, l'H<sub>2</sub>, l'O<sub>2</sub> e l'H<sub>2</sub>O) per valutare se le condizioni di temperatura, pressione e rapporti di miscela nella zona a valle dello scalino siano tali da favorire l'inizio della combustione e quindi la produzione di radicali ed in particolare di OH, tramite un calcolo post processing si è calcolata la frazione di OH che si sarebbe prodotta se si fosse considerato il meccanismo dettagliato. I calcoli sono stati effettuati con il codice di cinetica chimica CHEMKIN 3.7 in 7 punti di cui 6 presi all'interno della zona di ricircolo ed uno all'esterno.



**Figura VII.18 Post processing per la predizione di OH**

Come si evince dalla figura precedente, in tutti i punti tranne quello esterno alla zona luminosa c'è predizione della presenza di OH, il che concorda con i risultati sperimentali.

Per poter verificare la presenza di OH nella zona a valle dello scalino, si sono condotte delle simulazioni con il modello di Smagorinsky Lilly utilizzando un meccanismo 5-step. Con tale modello e con il meccanismo a 5 passi, però, la quantità di idrogeno bruciato è circa nulla e il rilascio di calore è debole e localizzato nel punto di ristagno. La temperatura massima raggiunta è 1513 K. Un'analisi analoga sarà condotta in lavori successivi con il nuovo modello di mescolamento e di combustione.

Poiché usando il meccanismo 5-step il tasso di conversione dell'idrogeno per il meccanismo Smagorinsky Lilly è quasi nullo, si è deciso di analizzare l'effetto dell'aumento della temperatura di iniezione del combustibile sulla cinetica assumendo  $T_i=600$  K e  $T_i=1200$  K. Ciò che si è potuto osservare dai risultati ottenuti è che il tasso di conversione dell'idrogeno aumenta (rispetto al caso 1), pur rimanendo comunque basso: 11% per il caso 2 e 17% per il caso 3. Tutti i casi presi in esame hanno dimostrato che, indipendentemente da quanto sia veloce la chimica, il rateo di conversione dell'idrogeno per i modelli attualmente utilizzati non è significativo senza un mescolamento migliore.

Considerando il caso 1 con il modello Smagorinsky e il meccanismo 5-step e aumentando artificialmente il mescolamento imponendo la costante di Smagorinsky  $C_S=1$  e  $C_S=10$  (in tutti gli altri casi era stato posto uguale a 0.1), il tasso di conversione aumenta rispettivamente al 36% e 78%. Ciò conferma che la mancata riproduzione del fenomeno fisico nelle simulazioni che utilizzano gli stessi modelli di sottogriglia del regime subsonico è dovuta al fatto che tali modelli non contemplano gli effetti della comprimibilità sia sul mescolamento che sulla chimica. Nonostante il modello ISCM predica una combustione più intensa, ulteriori miglioramenti al modello potrebbero essere apportati introducendo una opportuna costante di calibrazione. Inoltre, in accordo con tempi di calcolo accettabili, occorrerebbe utilizzare una griglia più fine.

### VII.1.3 Valutazione dell'effetto della variazione della viscosità turbolenta sul mescolamento

Al fine di una maggiore comprensione dell'effetto del modello di sottogriglia e quindi della viscosità turbolenta sul mescolamento, in modo tale da poter ulteriormente migliorare il modello, si sono fatte delle analisi qualitative in cui si sono imposti valori costanti della viscosità turbolenta in tutto il campo e pari a  $10^{-4}$ ,  $10^{-3}$  e  $10^{-2}$  kg/ms.

La Figura VII.19 mostra che la penetrazione del getto di idrogeno è superiore a quella predetta con il modello Smagorinsky Lilly.

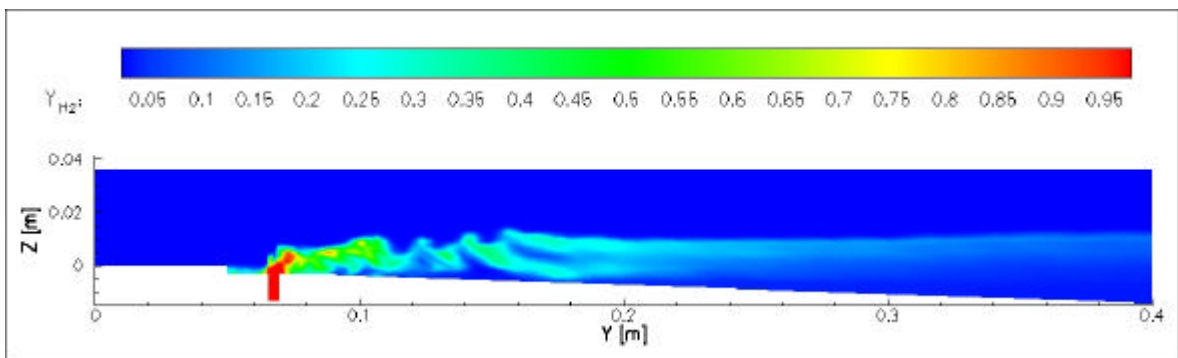


Figura VII.19 Campo istantaneo della frazione massica di  $H_2$  nel piano ZY a  $X=0.15$  m con  $m_t = 10^{-4}$

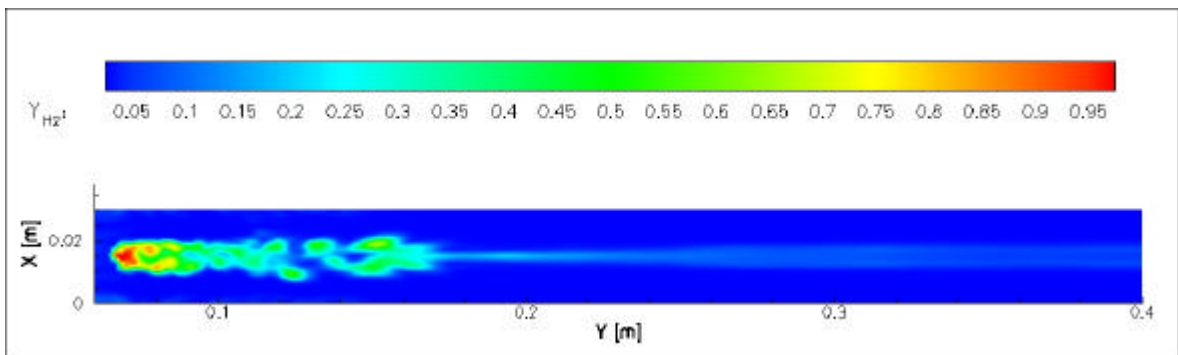


Figura VII.20 Campo istantaneo di  $Y_{H_2}$  nel piano XY all'altezza del gradino con  $m_t = 10^{-4}$

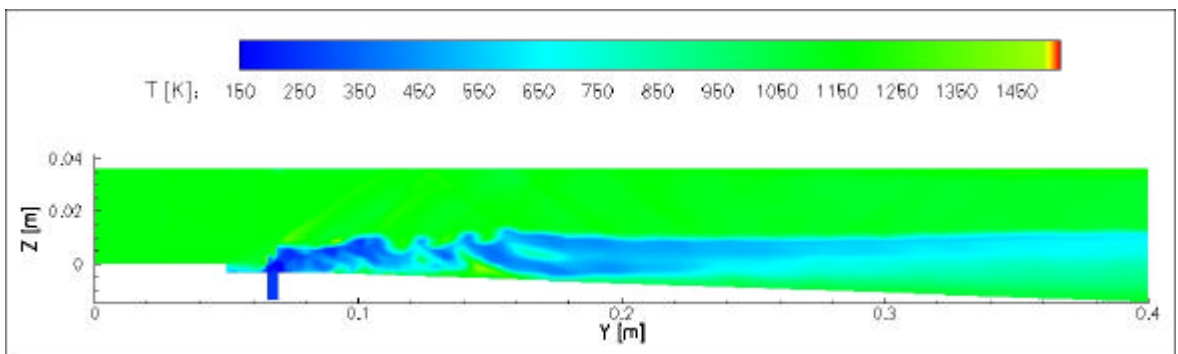


Figura VII.21 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a  $X=0.15$  m con  $m_t = 10^{-4}$

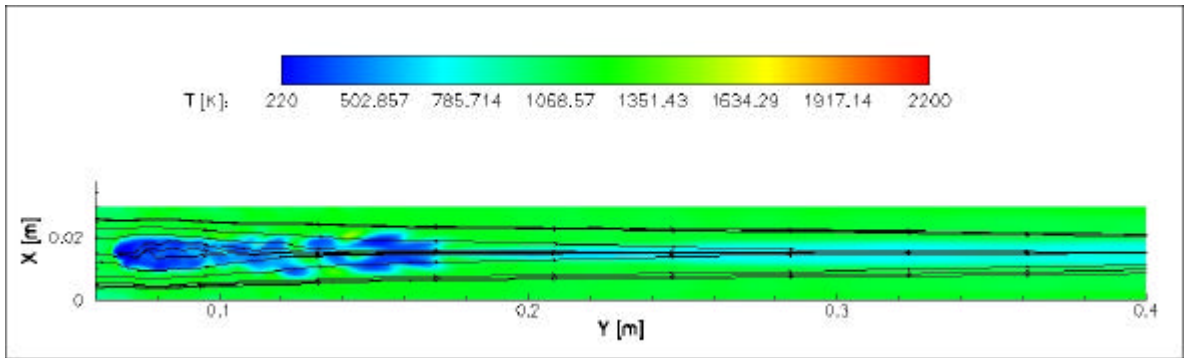


Figura VII.22 Campo istantaneo della Temperatura nel piano XY all'altezza del gradino con  $m_t = 10^{-4}$

Il getto penetra per 2 diametri causando un'onda d'urto curva ( vedi Figura VII.23) da cui partono una serie di urti obliqui (vedi Figura VII.24) che interagiscono con il getto di idrogeno e che si riflettono dalla parete superiore a quella inferiore .

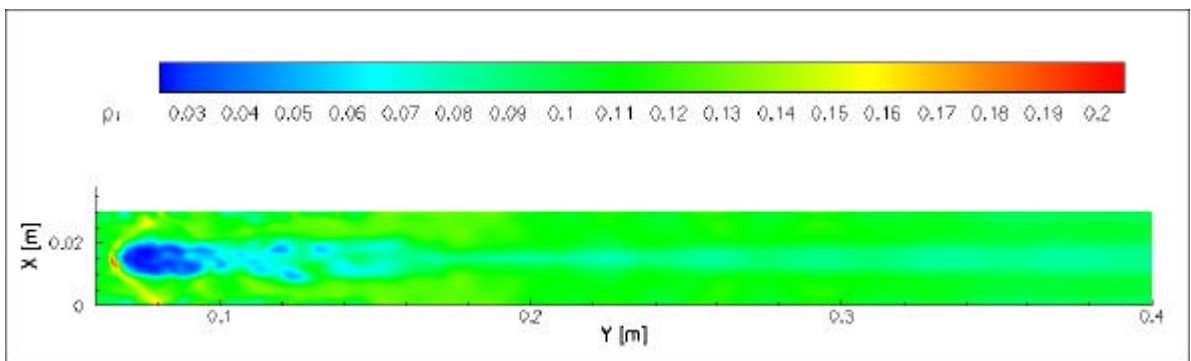


Figura VII.23 Campo istantaneo della densità nel piano XY all'altezza del gradino con  $m_t = 10^{-4}$

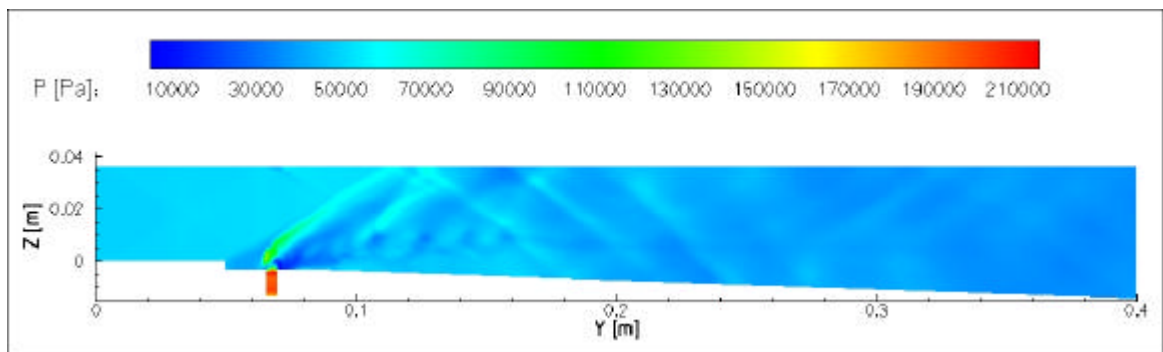


Figura VII.24 Campo istantaneo della pressione nel piano ZY a  $X=0.15$  m con  $m_t = 10^{-4}$

Le figure sottostanti mostrano che all'interno del getto di idrogeno vi sono due vortici controrotanti che mentre vengono trasportati vengono anche deformati.

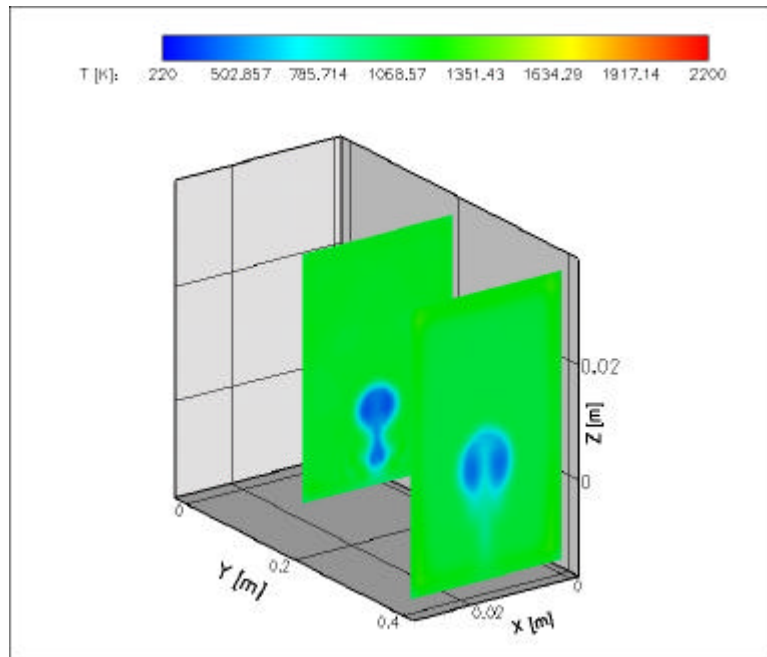


Figura VII25 Vista tridimensionale di T nel piano XZ a  $Y = 0.1$  m e  $Y = 0.38$  m con  $m_t = 10^{-4}$

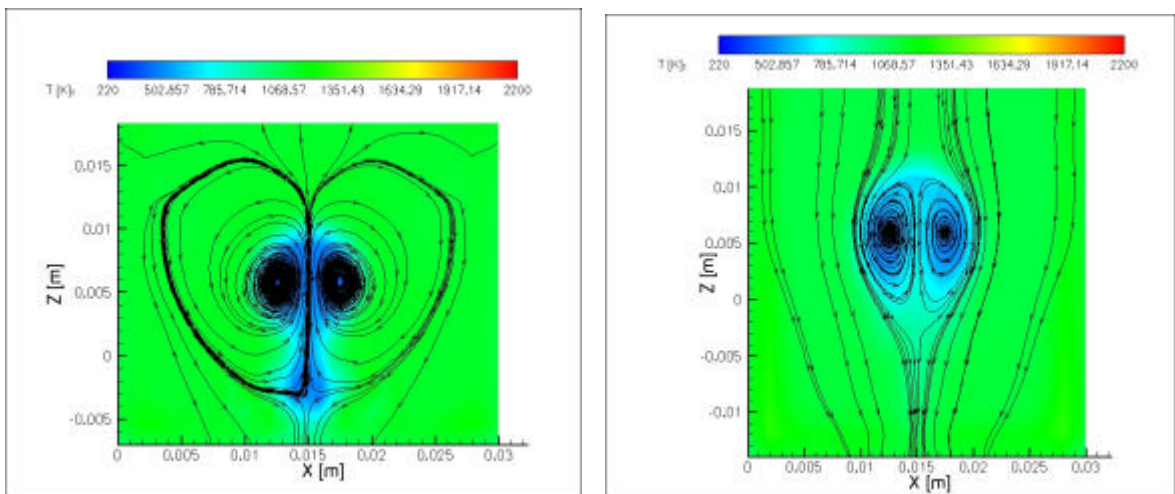


Figura VII26 Vista della temperatura istantanea nel piano XZ a  $Y = 0.1$  m e  $Y = 0.38$  m con  $m_t = 10^{-4}$

Le simulazioni condotte con una viscosità costante in tutto il campo e dell'ordine di  $10^{-3}$  hanno mostrato un appiattimento delle fluttuazioni rispetto al caso precedente.

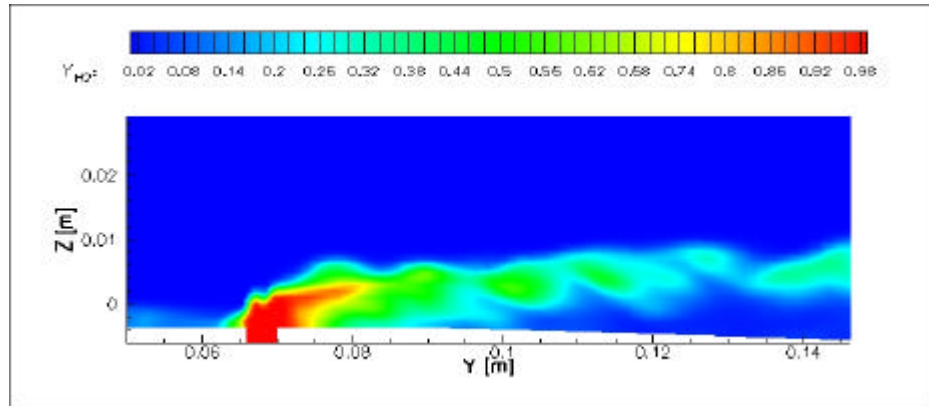


Figura VII.27 Campo istantaneo della frazione massica di  $H_2$  nel piano ZY a  $X=0.15$  m con  $m_t = 10^{-3}$

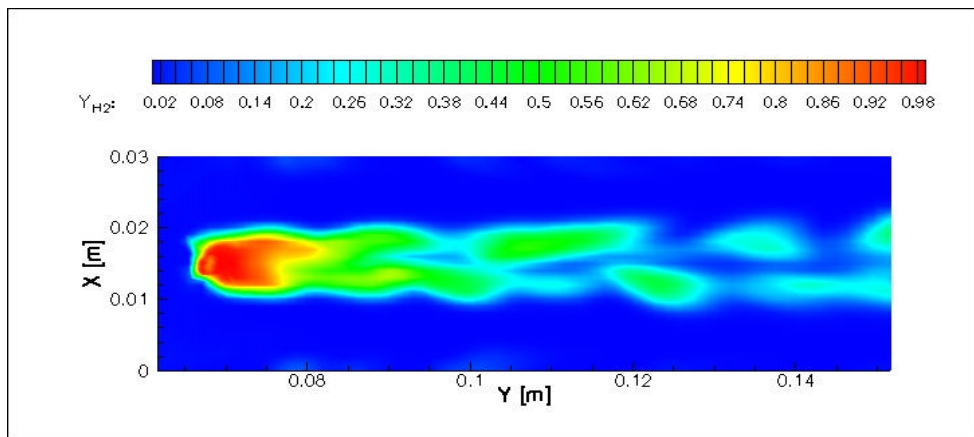


Figura VII.28 Campo istantaneo di  $Y_{H_2}$  nel piano XY all'altezza del gradino con  $m_t = 10^{-3}$

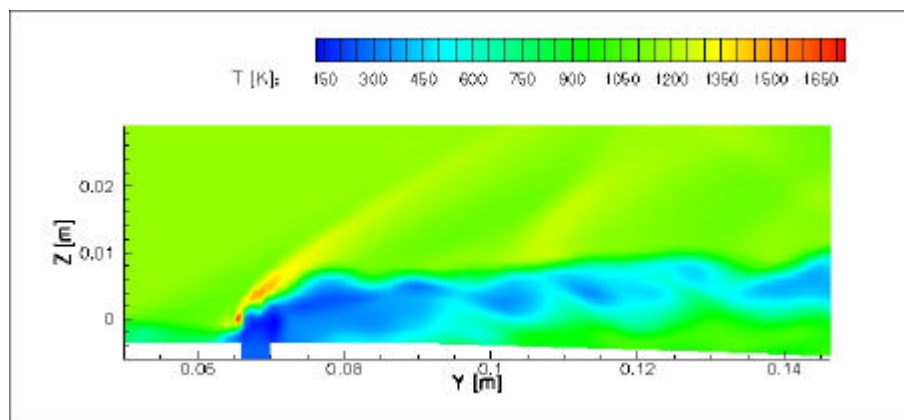


Figura VII.29 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a  $X=0.15$  m con  $m_t = 10^{-3}$

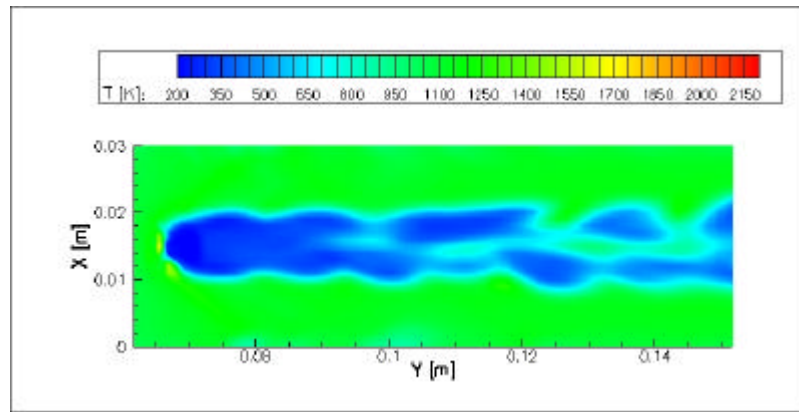


Figura VII.30 Campo istantaneo della Temperatura nel piano XY all'altezza del gradino con  $m_t = 10^{-3}$

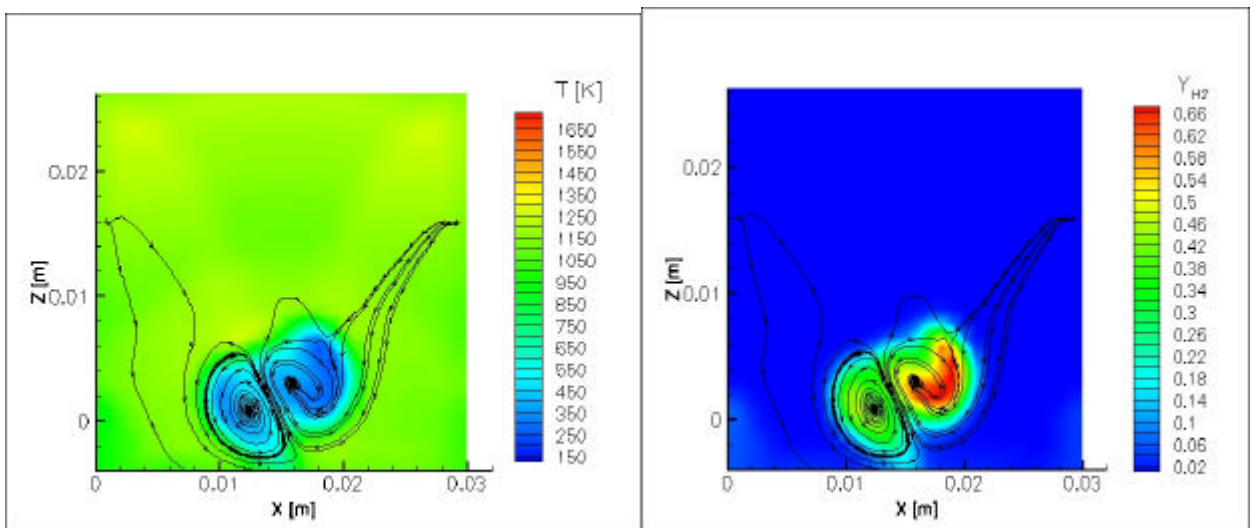


Figura VII.31 Campo istantaneo della temperatura nel piano XZ a  $Y = 0.1$  m e  $Y = 0.38$  m con  $m_t = 10^{-3}$

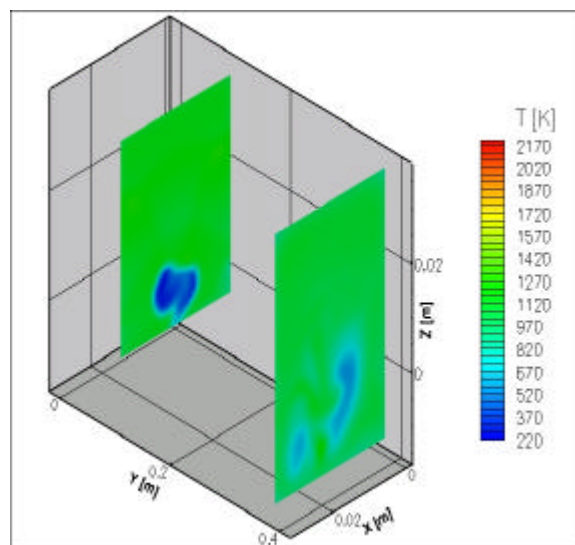


Figura VII.32 Vista tridimensionale di T e  $Y_{H_2}$  nel piano XZ a  $Y = 0.1$  m e  $Y = 0.38$  m con  $m_t = 10^{-3}$

Per una viscosità turbolenta dell'ordine di  $10^{-3}$ , nonostante le fluttuazioni siano meno intense del caso precedente, si osserva comunque un forte mescolamento all'interfaccia tra idrogeno e aria. A causa dei forti gradienti di velocità, pressione, temperatura e densità presenti all'interfaccia si ha generazione e rilascio locale di strutture vorticosi. La Figura VII.20 e la Figura VII.27 mettono in evidenza tale fenomeno noto come shedding. Per visualizzare le strutture presenti nel campo è conveniente tracciare le linee di corrente nel piano YZ e XY; poiché però la velocità del flusso e quindi la velocità con cui le strutture presenti sui piani XY e YZ vengono trasportate è molto elevata, per poter visualizzare i vortici occorre scegliere un sistema di riferimento mobile solidale alla corrente. Ponendosi in tale riferimento, si osserva effettivamente il rilascio di vortici all'interfaccia tra le due correnti.

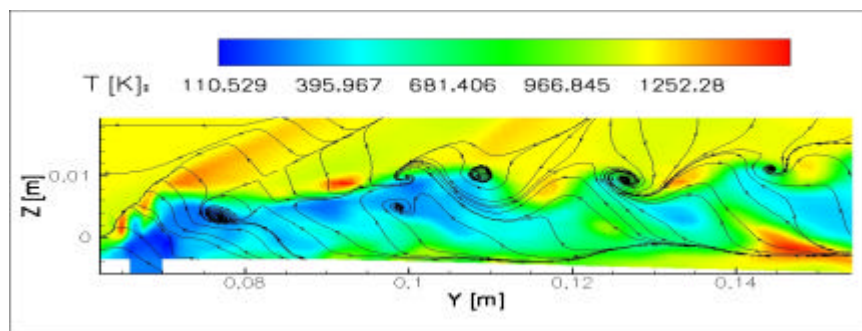


Figura VII.33 Campo istantaneo delle linee di corrente nel piano ZY a X=0.15

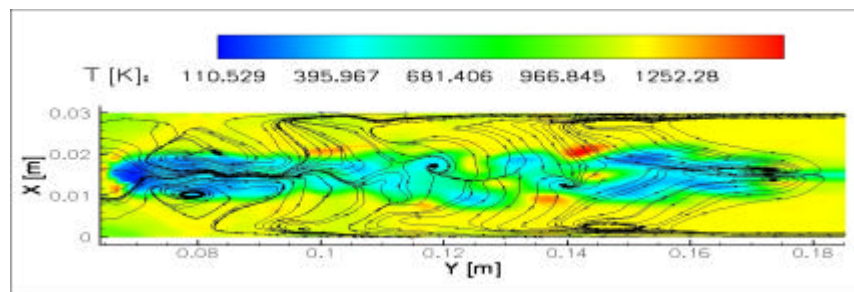


Figura VII.34 Campo istantaneo delle linee di corrente nel piano XY all'altezza del gradino



Le precedenti figure mostrano che si ha un rilascio di vortici all'interfaccia tra la corrente di idrogeno e aria.

Aumentando la viscosità a  $10^{-2}$  si osserva un flusso estremamente rigido, le cui fluttuazioni sono completamente assenti.

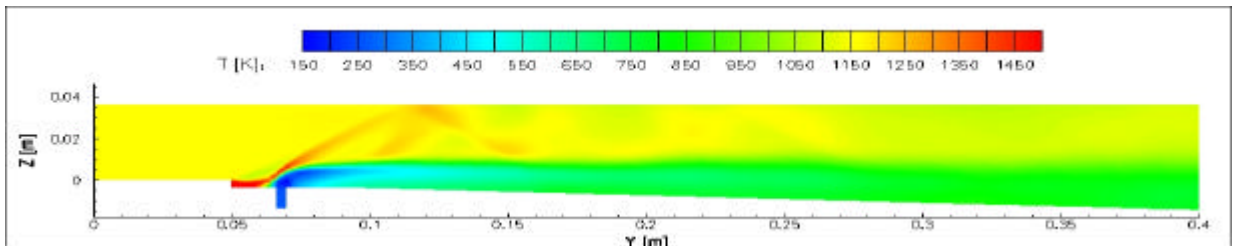


Figura VII.35 Campo istantaneo della Temperatura nel piano ZY a  $X=0.15$  m con  $m_t = 10^{-2}$

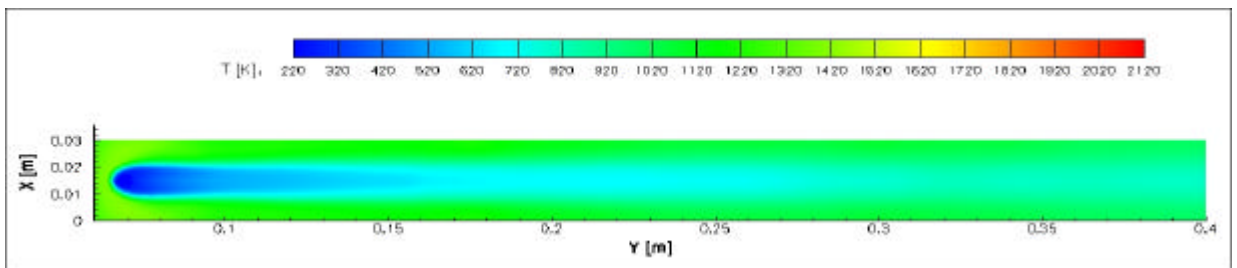


Figura VII.36 Campo istantaneo della Temperatura nel piano XY all'altezza del gradino con  $m_t = 10^{-2}$

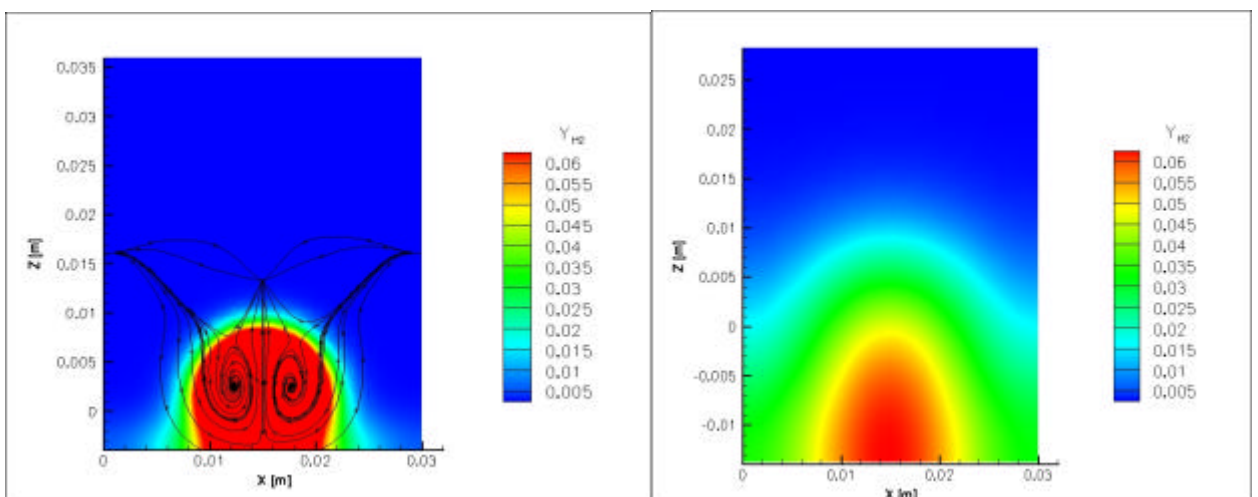
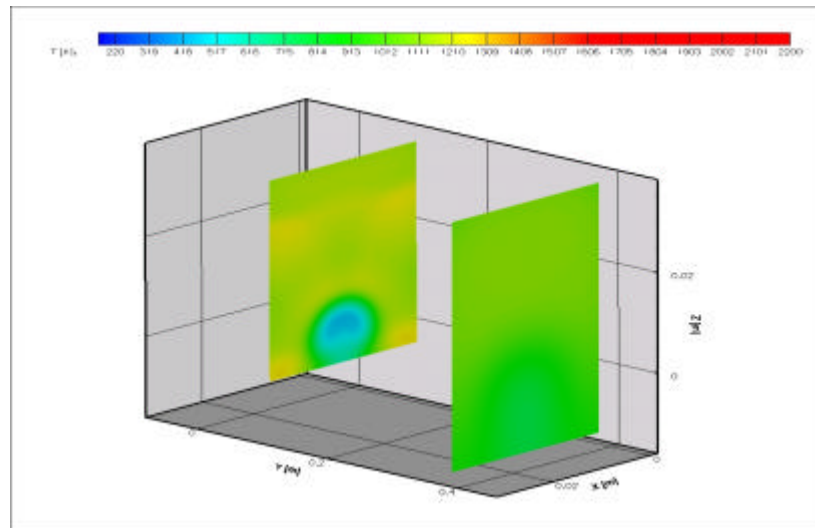


Figura VII.37 Campo istantaneo di  $Y_{H_2}$  nel piano XZ a  $Y = 0.1$  m e  $Y = 0.38$  m con  $m_t = 10^{-2}$



**Figura VII.38** Vista tridimensionale di  $T$  nel piano  $XZ$  a  $Y = 0.1$  m e  $Y = 0.38$  m con  $\mu_t = 10^{-2}$

All'aumentare della viscosità turbolenta, infatti, se da un lato migliora il mescolamento turbolento, dall'altro, a causa del maggior peso dei termini diffusivi si ha un effetto di smorzamento dei gradienti e quindi delle fluttuazioni nel campo. Col crescere della  $\mu_t$  si ha un miglior mescolamento turbolento diffusivo dovuto ai termini viscosi, ma allo stesso tempo il mescolamento di tipo convettivo dovuto alle fluttuazioni del campo ne risulta penalizzato: occorrerebbe dunque cercare di bilanciare i due effetti. Si precisa, però, che scegliendo una viscosità turbolenta troppo bassa si va incontro a problemi di instabilità numerica. Ponendo infatti una viscosità turbolenta dell'ordine di  $10^{-5}$  ovunque, si riscontrano valori non fisici nel campo.

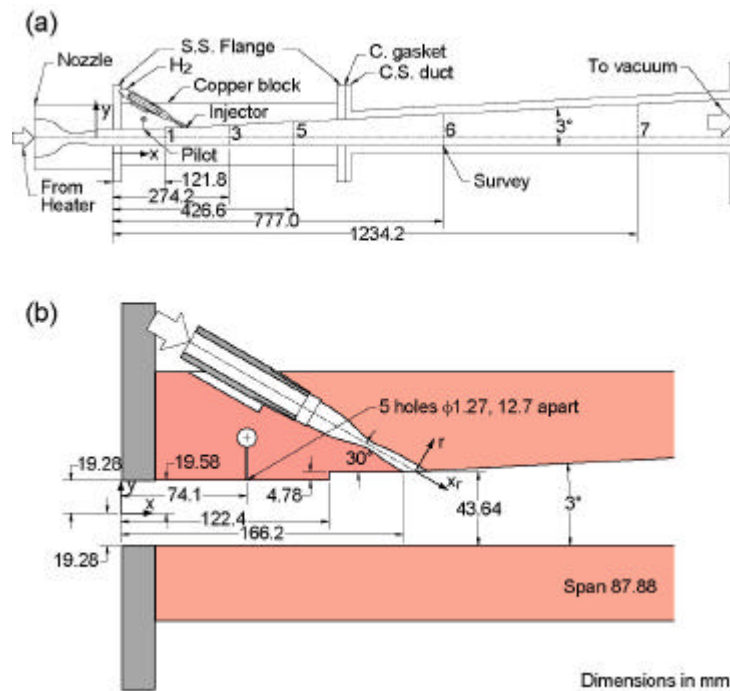
Seppure abbia poco significato fisico imporre una viscosità turbolenta costante in tutto il campo, tale indagine è servita a mettere in evidenza l'ordine di grandezza della  $\mu_t$  che destabilizza il campo filtrato. Già a partire da una viscosità turbolenta di  $10^{-2}$  l'effetto delle fluttuazioni presenti nel campo viene completamente smorzato dai termini viscosi.

Un possibile sviluppo del modello ISCM potrebbe essere quello di valutare l'effetto di una costante di calibrazione sul mescolamento e sulla combustione, confrontando il campo fluidodinamico ottenuto con i risultati sperimentali.

## VII.2 CASO II: COMBUSTIONE DI UN GETTO DI IDROGENO INIETTATO A 30° RISPETTO ALL'ARIA ENTRANTE

### VII.2.1 Geometria della camera di combustione e condizioni esaminate<sup>46</sup>

Il secondo caso preso in esame è molto simile, come geometria, al caso precedente:



**Figura VII.39** Sezioni XY dell'intero dominio computazionale

Il combustore, costruito a NASA Langley Research Center, consiste di un condotto a sezione variabile con un unico iniettore posizionato a 43.8 mm di distanza dallo scalino e inclinato di 30° rispetto all'aria entrante. Il condotto è suddiviso in due sezioni ad area costante posizionate a valle e a monte dello scalino seguiti da un condotto divergente con un angolo di apertura di 3°. Il combustore è inoltre realizzato in due blocchi, uno di rame e l'altro di acciaio.

Al fine di riprodurre numericamente il campo fluidodinamico sono state effettuate delle simulazioni LES 3-D (reattive e non) utilizzando il codice FLUENT 6.2™.

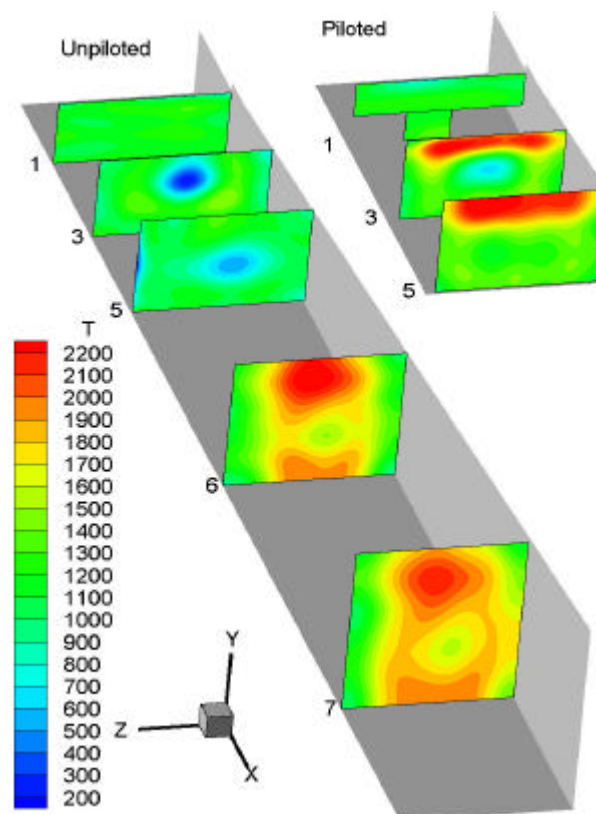
Le condizioni esaminate sono riportate nella tabella sottostante:

Flow at Air Entrance		GH2 Injection	
Mach	2.0	Mach	2.5
Temperature	1204 K	Temperature	133 K
Pressure	101325 Pa	Pressure	202650 Pa

**Tabella VII.2** Condizioni iniziali esaminate

Il combustore è stato riprodotto da una griglia strutturata 3-D, la cui spaziatura nel caso delle simulazioni LES sia con il modello Smagorisky -Lilly che con il modello ISCM è pari ad 1 mm ovunque tranne nella zona di iniezione a valle dello scalino (0.2 mm) e nel divergente dove è diradata lungo l'asse X di un fattore di stretching di 1.01. Il numero di celle esaedrali è 303792 e il numero totale di nodi è 324864.

Si è utilizzato un solutore accoppiato esplicito sia nello spazio che nel tempo e lo schema adottato è del secondo ordine a bassa diffusione. Il passo temporale di integrazione è di circa  $10^{-8}$  secondi: ciò significa che i tempi di calcolo necessari ad avere variazioni apprezzabili delle grandezze fisiche del campo sono stati notevolmente lunghi. Se si considera che, con un biprocessore il tempo di calcolo per un solo passo temporale di integrazione è di circa 120 secondi, per simulare un millesimo di secondo (circa il tempo di residenza in camera di combustione), ovvero per 100000 iterazioni, occorrono circa 4 mesi: questo spiega il modesto numero di celle adottato. Utilizzando un cluster di dieci processori si è riusciti a ridurre i tempi di 15 volte riuscendo a simulare il tempo totale di residenza in circa 9 giorni. A causa degli elevati tempi di calcolo, non si sono riusciti a svolgere altri casi. Attualmente, infatti si sta valutando l'effetto di una costante di calibrazione nel modello, ma per tale analisi si rimanda a possibili sviluppi futuri.



**Figura VII.40 Vista tridimensionale del campo di temperatura per i casi di fiamma pilota e non**

La Figura VII.40 mostra i risultati ottenuti dalle prove sperimentali per due differenti casi: con e senza fiamma pilota. Per le simulazioni LES, sia con il modello Smagorinsky Lilly che con il modello ISCM si è considerato solo il caso senza la fiamma pilota. I risultati sperimentali mostrano

che la fiamma si ancora prima della sezione di controllo 6 che si trova a 77 cm dalla sezione di ingresso in camera di combustione; le massime temperature si registrano in prossimità della parete superiore e sono di circa 2200 K.

Le pareti del combustore non sono adiabatiche, e prove sperimentali hanno infatti rilevato la presenza di un flusso di calore che varia da  $0.7 \text{ MW/m}^2$  a  $1.8 \text{ MW/m}^2$ , ovvero circa il 10% di quello prodotto dalla combustione. Nel caso preso in esame nelle simulazioni, il flusso di calore aumenta notevolmente dopo 50 cm dalla sezione d'ingresso. A tale distanza, infatti, si verifica l'inizio della combustione vicino alla parete superiore e un corrispondente incremento della pressione.

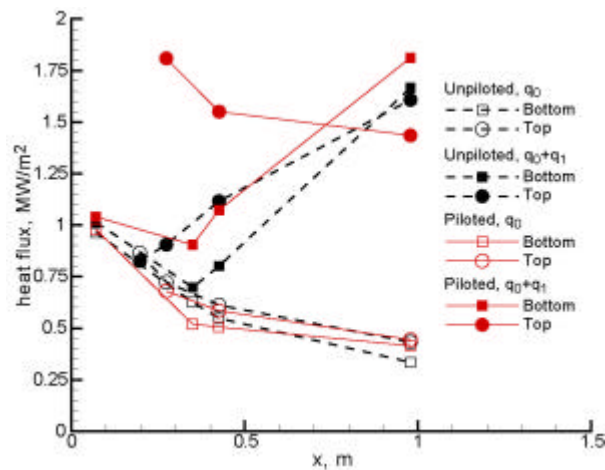


Figura VII.41 Flussi di calore alle pareti superiori e inferiori per unità di superficie

## VII.2.2 Simulazioni LES con il modello Smagorinsky-Lilly e il modello ISCM

Per le simulazioni LES con il modello Smagorinsky Lilly l'accoppiamento dei fenomeni chimici e turbolenti è stato rappresentato, come nel caso precedente, con il modello "Finite Rate/ Eddy Dissipation".

Come descritto già nel paragrafo precedente, il modello ISCM è stato introdotto tramite una subroutine in cui sono stati definiti sia la velocità di reazione filtrata delle specie chimiche che il modello della viscosità turbolenta. La cinetica chimica della reazione  $\text{H}_2/\text{O}_2$  è stata simulata, per entrambi i modelli, tramite il meccanismo globale 1-step di Marinov (Cap VI.5).

Le simulazioni condotte col modello ISCM assumendo che il flusso non sia reattivo mostrano che il getto penetra per circa 0.5 diametri e viene poi schiacciato lungo la parete inferiore.

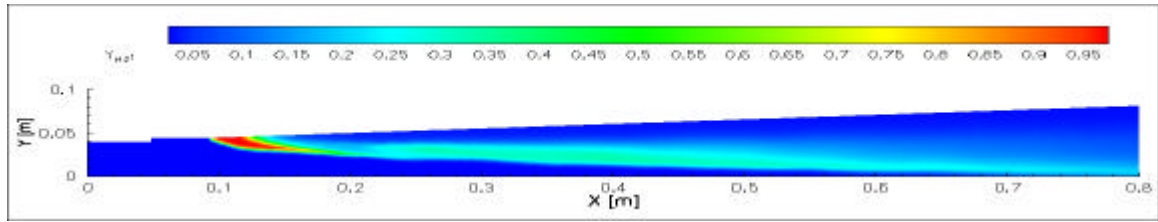


Figura VII.42 Campo medio di  $Y_{H_2}$  nel piano mediano XY con il modello ISCM (LES non reattiva)

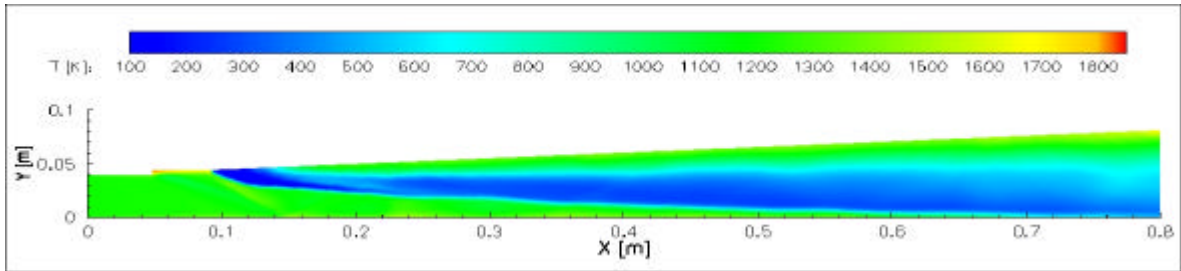


Figura VII.43 Campo medio di T nel piano mediano XY con il modello ISCM (LES non reattiva)

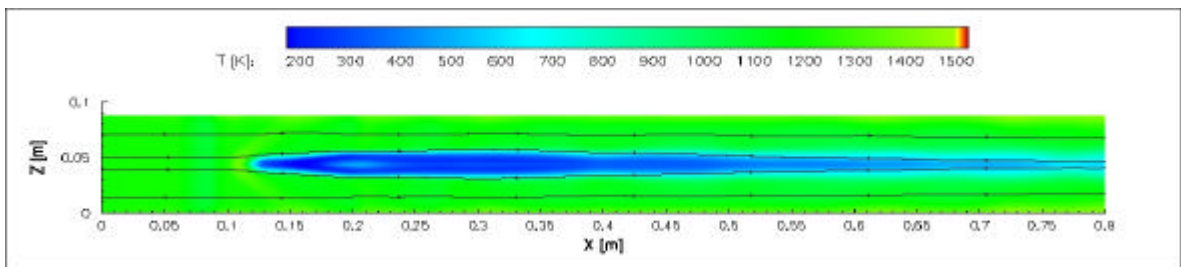


Figura VII.44 Campo medio di T nel piano XZ a  $Y = 0.30$  m con il modello ISCM (LES non reattiva)

La Figura VII.46 mostra la presenza di un'onda d'urto curva posizionata immediatamente a monte dell'iniettore. Le figure sottostanti mostrano inoltre un'intensa riflessione delle onde dando luogo a molteplici urti obliqui.

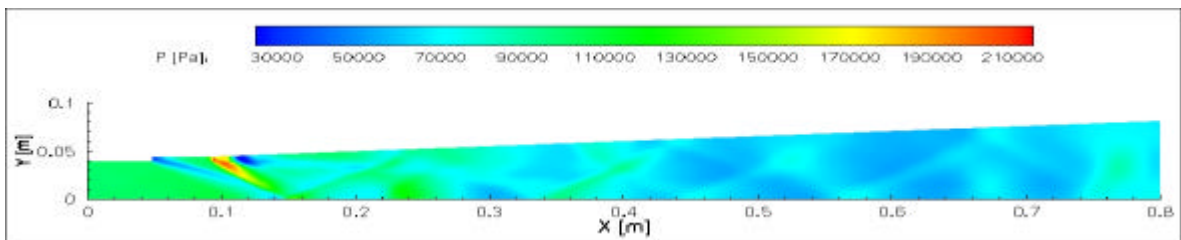


Figura VII.45 Campo medio di P nel piano XY mediano con il modello ISCM (LES non reattiva)

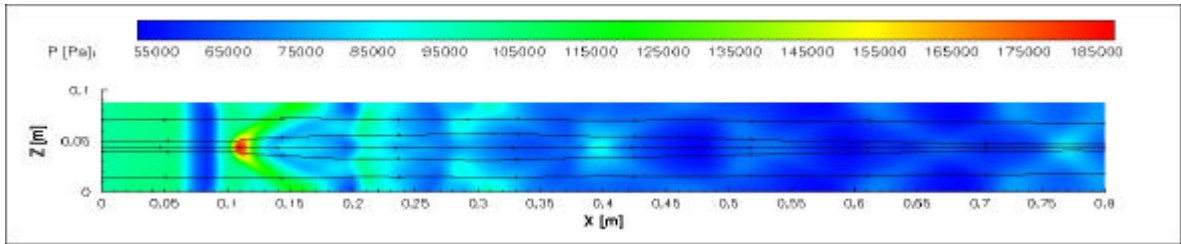


Figura VII46 Campo medio della P nel piano XZ a Y = 0.30 m con il modello ISCM (LES non reattiva)

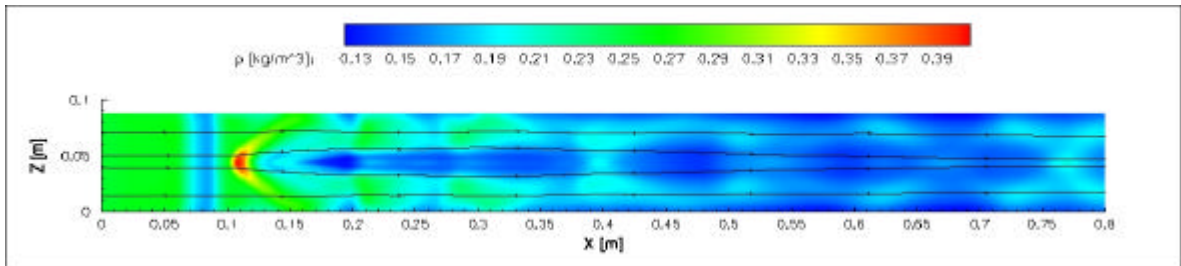


Figura VII47 Campo medio della ρ nel piano XZ a Y = 0.30 m con il modello ISCM (LES non reattiva)

La Figura VII.48 e la Figura VII.49 mostrano che la viscosità turbolenta è dell'ordine di  $10^{-3}$ - $10^{-2}$  kg/ms. Tali valori dovrebbero garantire la conservazione delle strutture presenti nel campo, comunque attualmente si sta conducendo un'indagine per valutare l'effetto dell'aggiunta di una costante di calibrazione pari a 0.1 e a 0.5.

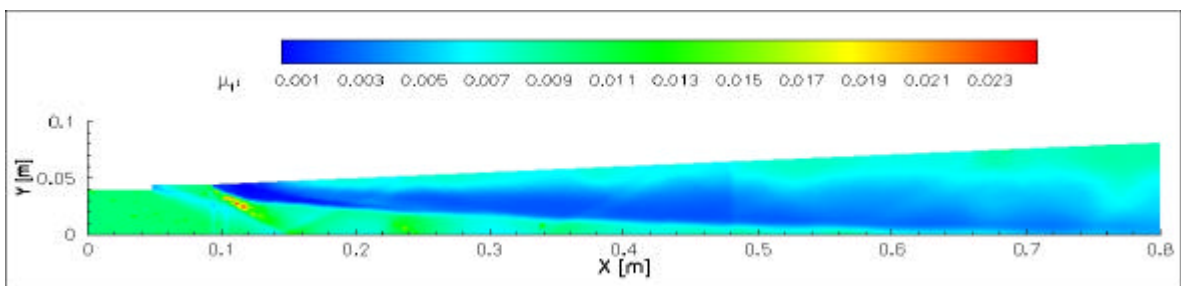


Figura VII48 Campo medio della viscosità turbolenta con il modello ISCM nel piano XY mediano

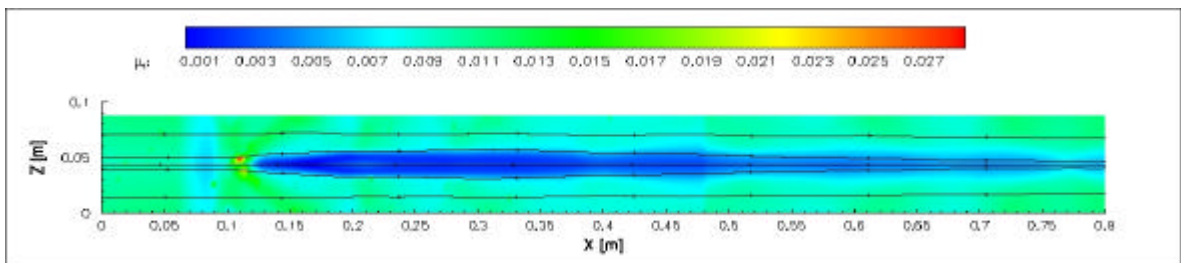


Figura VII49 Campo medio della viscosità turbolenta con il modello ISCM nel piano XZ a Y = 0.30 m

La Figura VII.50 e la Figura VII.51 mostrano la presenza di due vortici controrotanti che crescono lungo la direzione del moto deformando e allungando il getto di idrogeno.

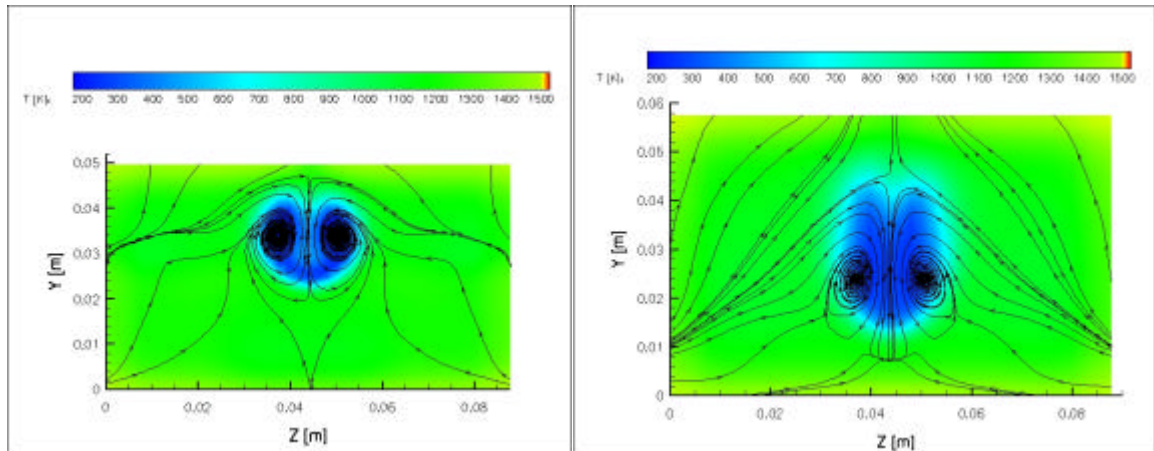


Figura VII.50 Campo medio di T nel piano ZY a  $X = 0.2$  e  $X = 0.35$  con il modello ISCM (LES non reattiva)

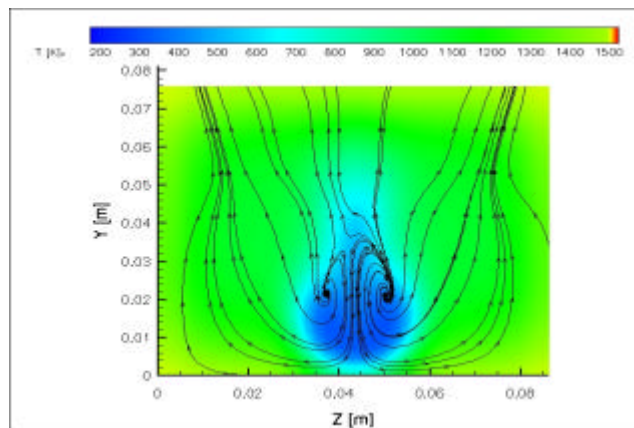


Figura VII.51 Campo medio di T nel piano ZY a  $X = 0.7$  con il modello ISCM (LES non reattiva)

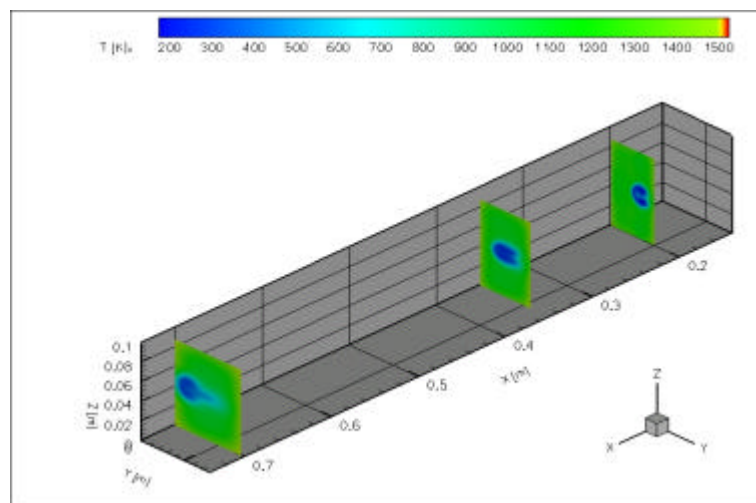


Figura VII.52 Vista tridimensionale di T nel piano ZY a  $X = 0.2$ ,  $X = 0.35$  e  $X = 0.7$



Le simulazioni condotte con il modello Smagorinsky Lilly, per il caso reattivo, predicono la presenza di urti più deboli e diffusi del caso precedente con il modello ISCM.

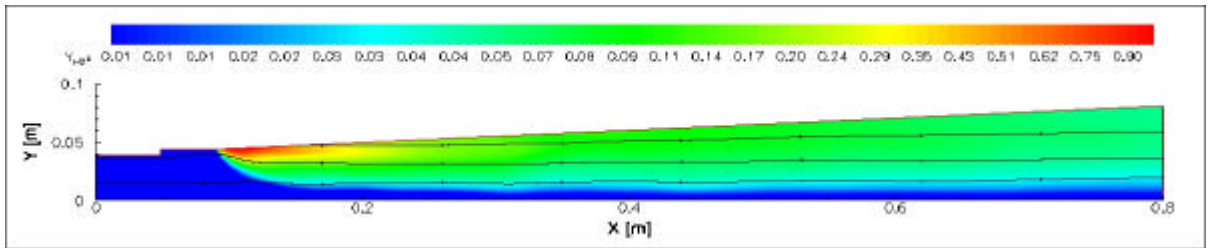


Figura VII.53 Campo medio di  $Y_{H_2}$  nel piano XY mediano con il modello Smagorinsky-Lilly

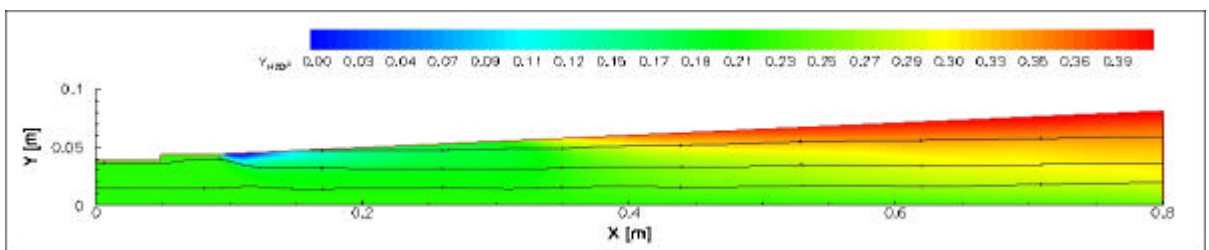


Figura VII.54 Campo medio di  $Y_{H_2O}$  nel piano mediano XY con il modello Smagorinsky-Lilly

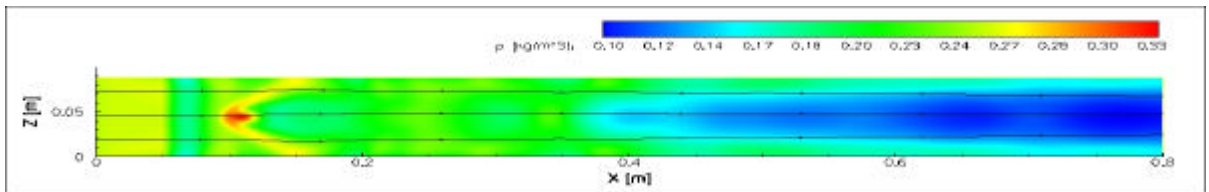


Figura VII.55 Campo medio di densità nel piano XZ a  $Y = 0.30$  m con il modello Smagorinsky-Lilly

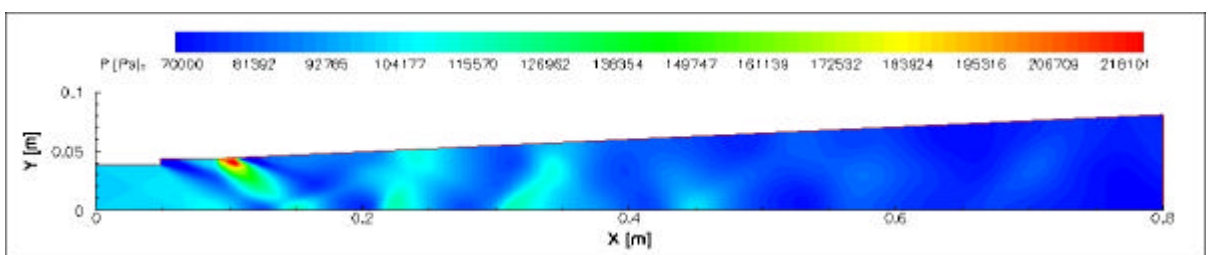


Figura VII.56 Campo medio della Pressione nel piano XY mediano con il modello Smagorinsky-Lilly

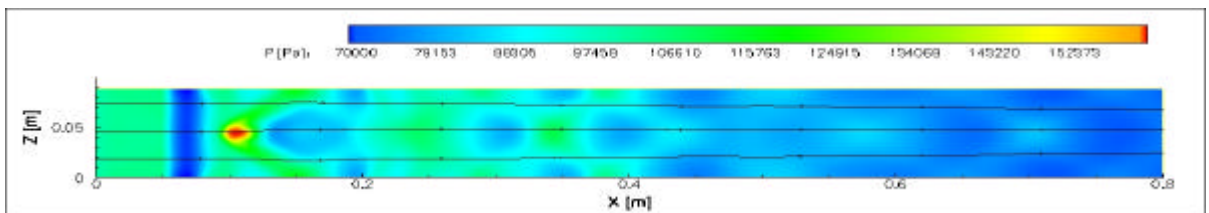


Figura VII.57 Campo medio di pressione nel piano XZ a  $Y = 0.30$  m con il modello Smagorinsky-Lilly

La Figura VII.58 mostra che le massime temperature ( $\sim 2000$  K) vengono raggiunte solo nelle strette vicinanze della parete superiore.

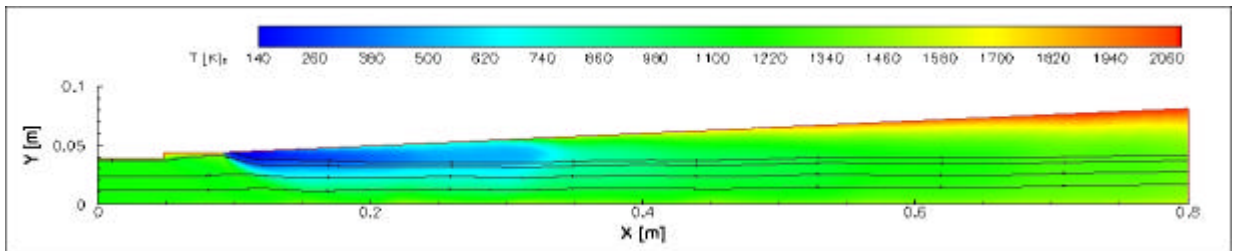


Figura VII.58 Campo medio di Temperatura nel piano XY mediano con il modello Smagorinsky-Lilly

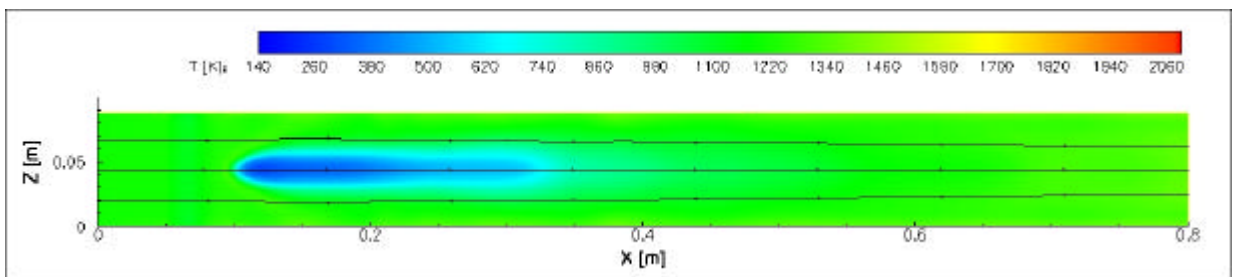


Figura VII.59 Campo medio di Temperatura nel piano XZ a  $Y = 0.30$  m con il modello Smagorinsky-Lilly

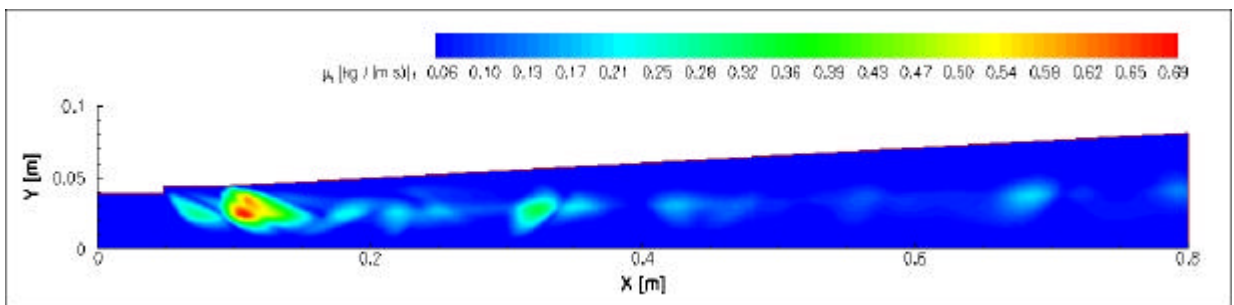


Figura VII.60 Campo medio della viscosità turbolenta con il modello Smagorinsky Lilly nel piano XY

Con il modello Smagorinsky-Lilly, essendo la viscosità turbolenta (vedi Figura VII.60) molto alta in tutto il campo ( $\sim 0.06-0.69$ ), il mescolamento è debole e dunque la fiamma non riesce ad ancorarsi. Le linee di corrente nel piano XY e XZ mostrano che il flusso è estremamente rigido; visualizzando, inoltre, le linee di corrente a  $X = 0.2$ ,  $X = 0.35$  e  $X = 0.7$  si è osservata anche nel piano ZY la completa assenza di vortici: ciò è dovuto proprio all'eccessiva viscosità turbolenta predetta dal modello Smagorinsky-Lilly. All'aumentare della viscosità, infatti, come è stato già discusso precedentemente, se da un lato si ha un miglior mescolamento diffusivo dall'altro si ha un effetto di smorzamento del mescolamento convettivo: tanto più il modello è viscoso, tanto più gli effetti delle fluttuazioni vengono persi. Mentre nella RANS, infatti, l'aumento della  $\mu_t$  conduce

sempre ad un aumento della diffusione turbolenta e quindi del mescolamento, nella LES ciò potrebbe condurre alla distruzione delle strutture presenti nel campo.

A causa del cattivo mescolamento, dunque, nonostante le prove sperimentali predicano l'ancoraggio di fiamma, le simulazioni con il modello Smagorinsky Lilly predicono l'assenza di combustione.

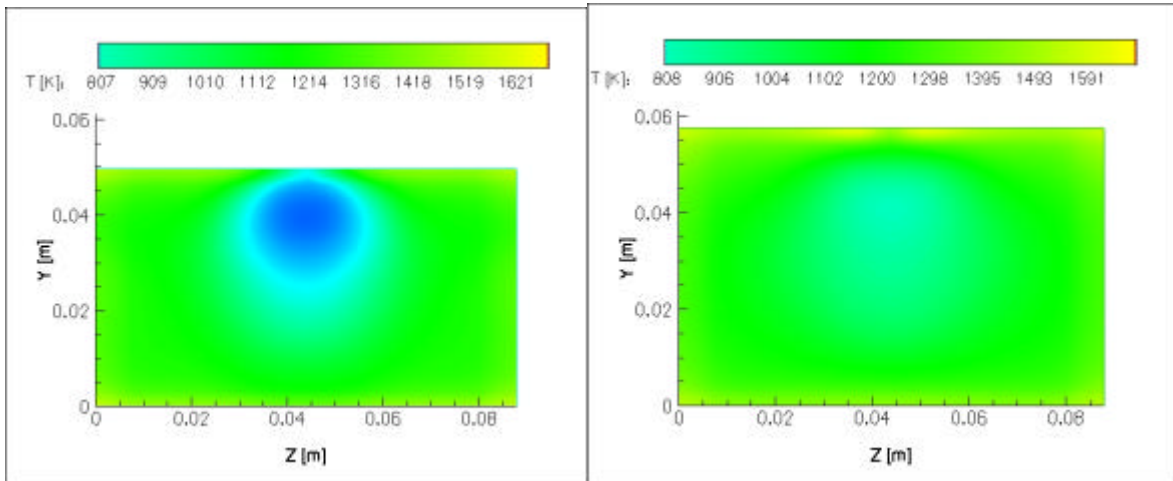


Figura VII.61 Campo medio della T a  $X = 0.2$  e a  $X = 0.35$  con il modello Smagorinsky Lilly

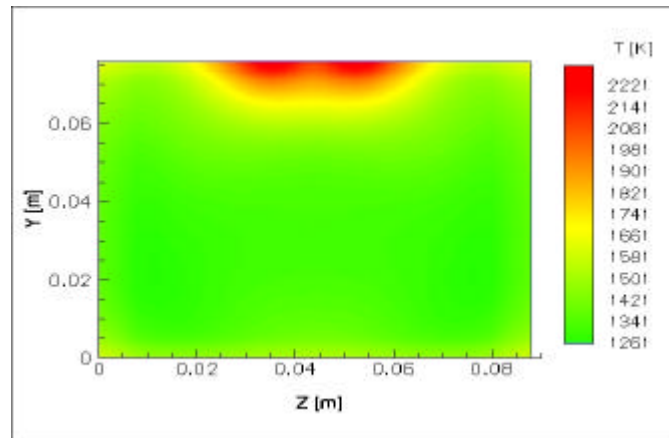
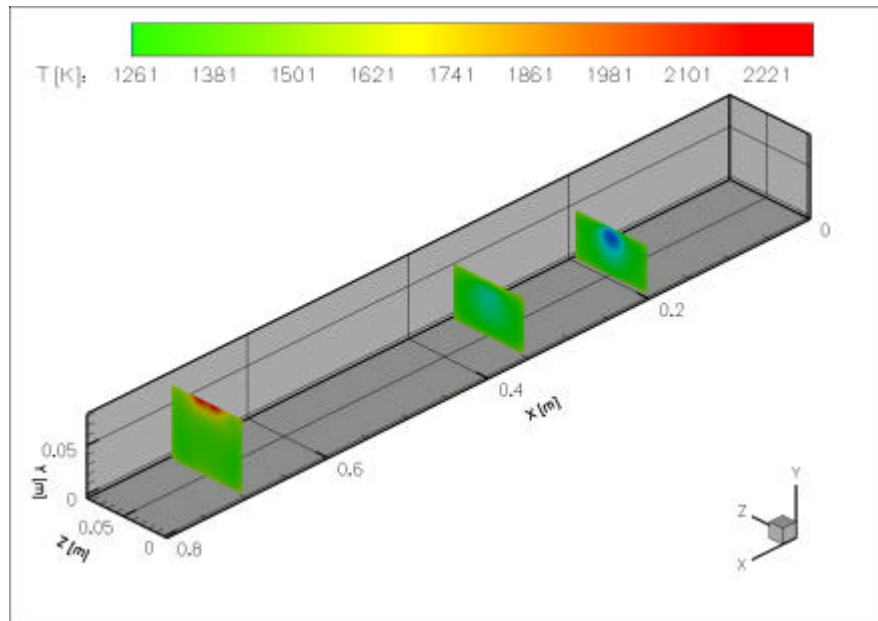


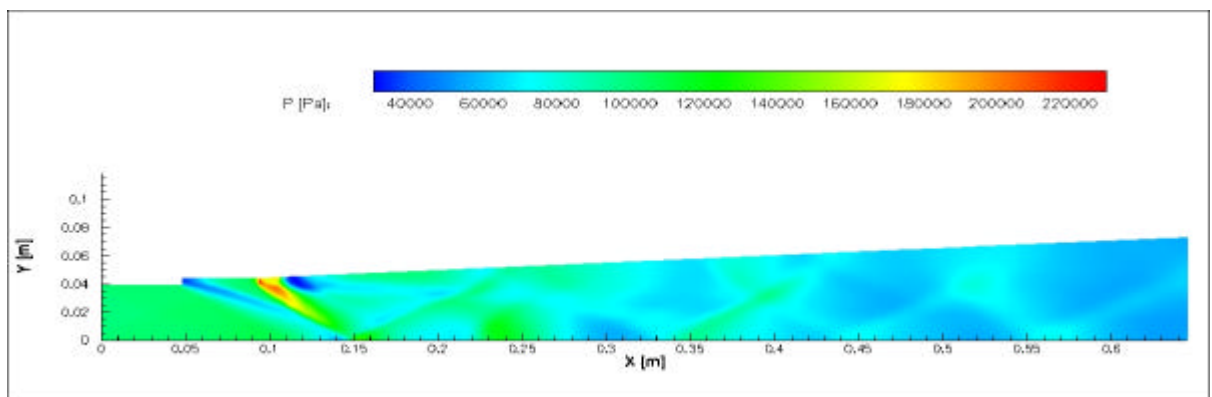
Figura VII.62 Campo medio della T nel piano ZY a  $X = 0.7$  con il modello Smagorinsky Lilly



**Figura VII.63 Vista 3D di T nel piano ZY a  $X = 0.2$ ,  $X = 0.35$  e  $X = 0.7$  con il modello Smagorinsky Lilly**

Al fine di valutare l'effetto della costante  $C_s$  sul mescolamento, si sono fatte delle simulazioni variando tale valore da 1 a 100: non si sono però osservati cambiamenti significativi nel campo. Per poter stabilire se ciò fosse dovuto oltre al modello di mescolamento anche o principalmente al cattivo modello di combustione sono state fatte simulazioni con il modello Smagorinsky-Lilly e Fast Chemistry. Anche tali simulazioni hanno evidenziato una scarsa combustione: oltre al modello di combustione anche il modello di mescolamento non è adatto a riprodurre la fisica di flussi supersonici.

Le simulazioni con la LES reattiva e il modello ISCM mostrano che la tipologia del flusso è simile al caso non reattivo. Il getto di idrogeno penetra per circa 0.5 diametri e viene schiacciato verso la parete inferiore. Si osservano, inoltre, una serie di urti obliqui che vengono più volte riflessi.



**Figura VII.64 Campo medio di P nel piano XY mediano con il modello ISCM (LES non reattiva)**

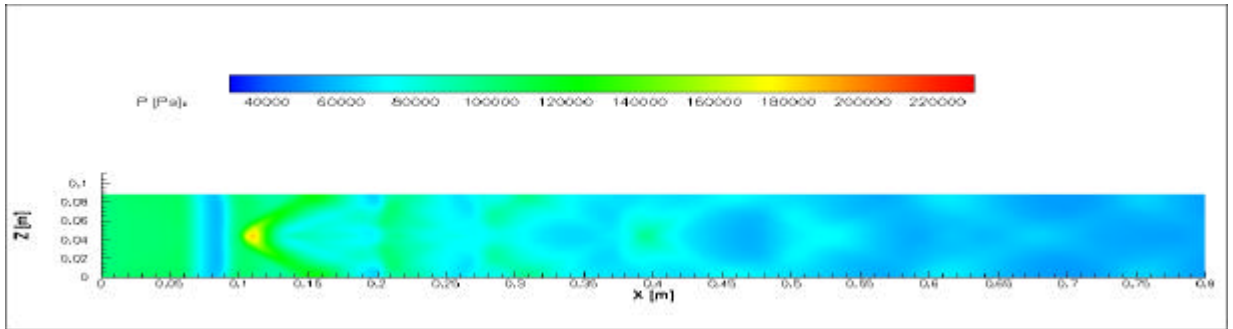


Figura VII.65 Campo medio della P nel piano XZ a  $Y = 0.30$  m con il modello ISCM

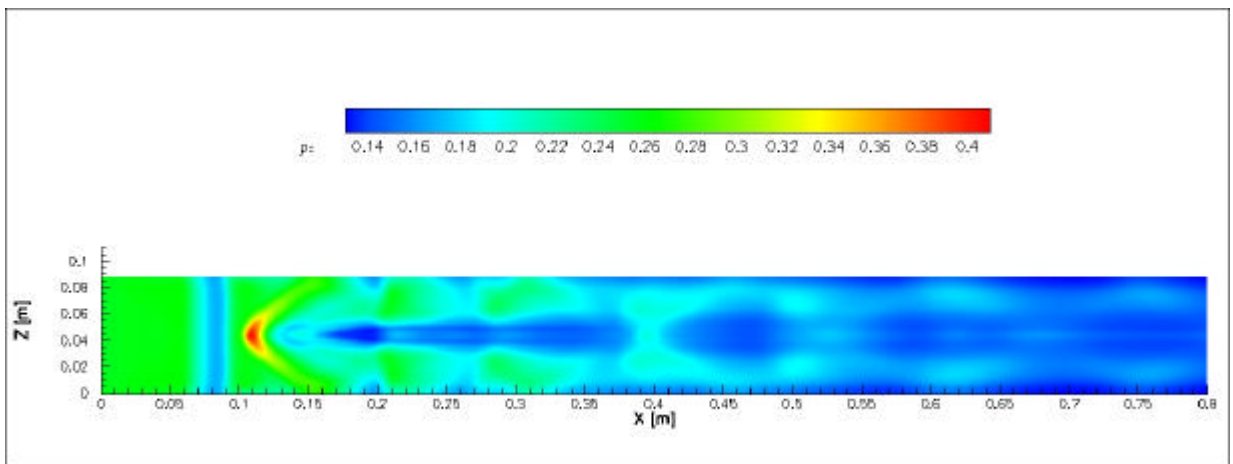


Figura VII.66 Campo medio della  $\rho$  nel piano XZ a  $Y = 0.30$  m con il modello ISCM

A differenza delle simulazioni con il modello di Smagorinsky Lilly, il modello ISCM predice la presenza di reazioni a circa 10 cm dall'iniettore. La temperatura massima predetta dal modello, di circa 2200 K, concorda con quella riportata nei dati sperimentali. La Figura VII.67 mostra che la fiamma si sviluppa principalmente in prossimità della parete superiore.

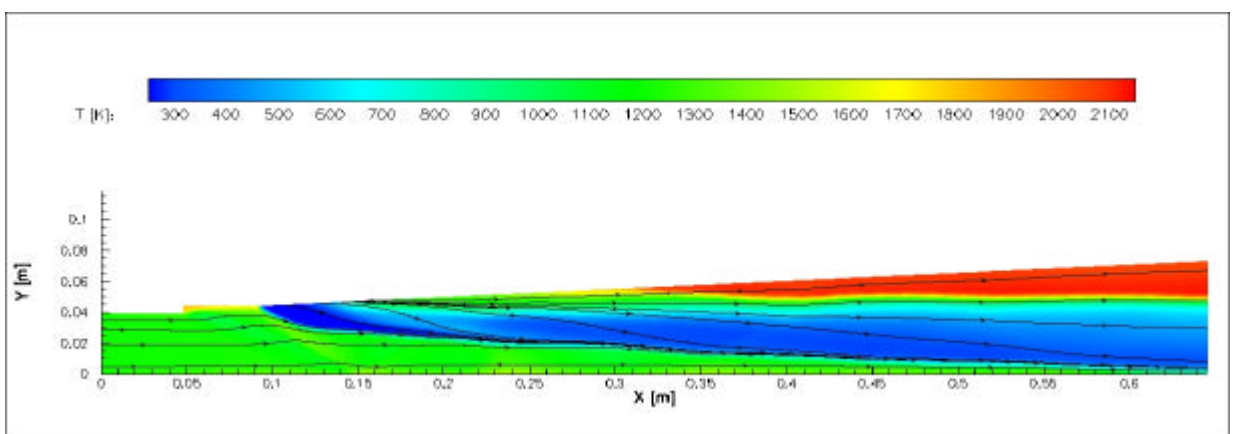
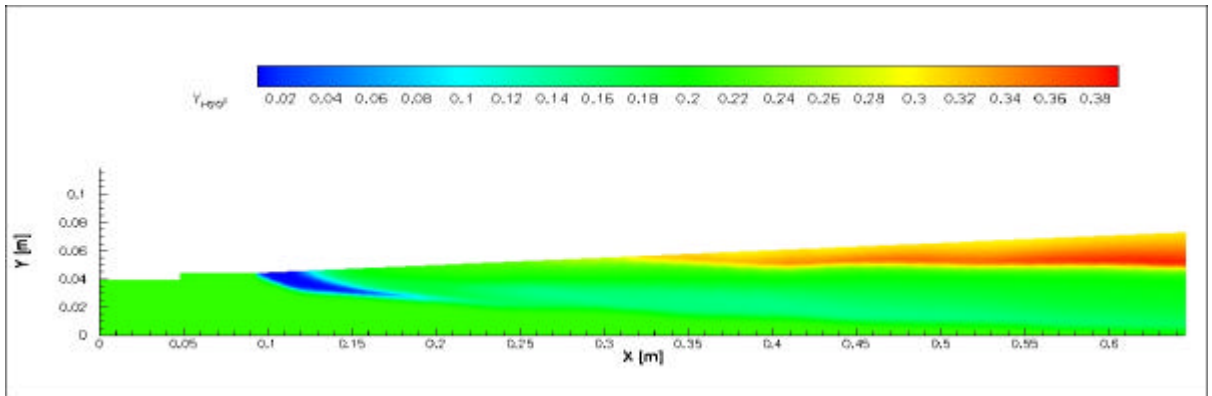
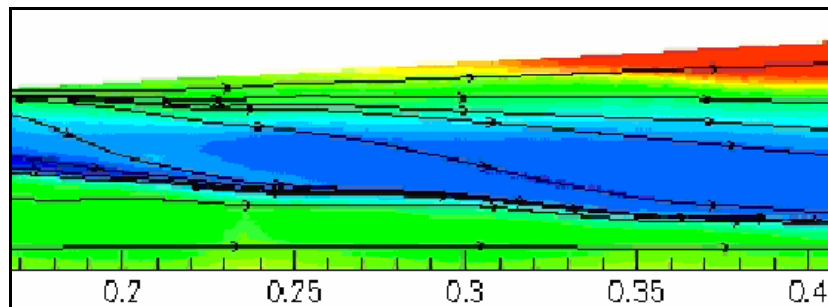


Figura VII.67 Campo medio di T nel piano mediano XY con il modello ISCM



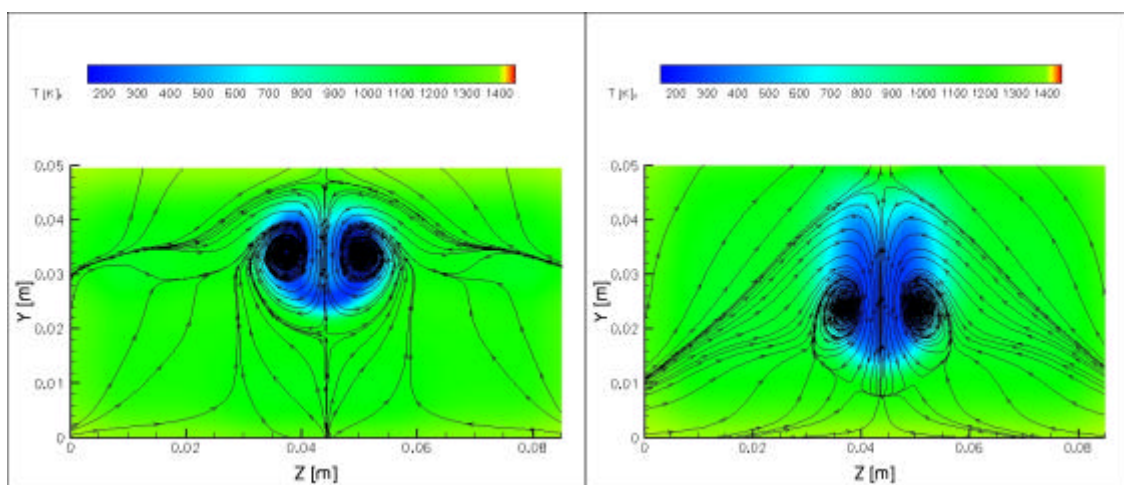
**Figura VII.68 Campo medio di  $Y_{H_2O}$  nel piano mediano XY con il modello ISCM**

A conferma e supporto delle analisi condotte nel capitolo IV la Figura VII.69 mostra che la vorticità è principalmente streamwise.



**Figura VII.69 Zoom del campo medio di T nel piano mediano XY con il modello ISCM**

Il modello ISCM a differenza dei modelli Smagorinsky -Lilly e FM in cui non si osservavano strutture nel flusso, predice la presenza di due vortici controrotanti che permettono il mescolamento del getto di idrogeno con l'aria favorendone la combustione.



**Figura VII.70 Campo medio di  $Y_{H_2}$  nel piano ZY a  $X = 0.2$ ,  $X = 0.35$  e  $X = 0.7$**

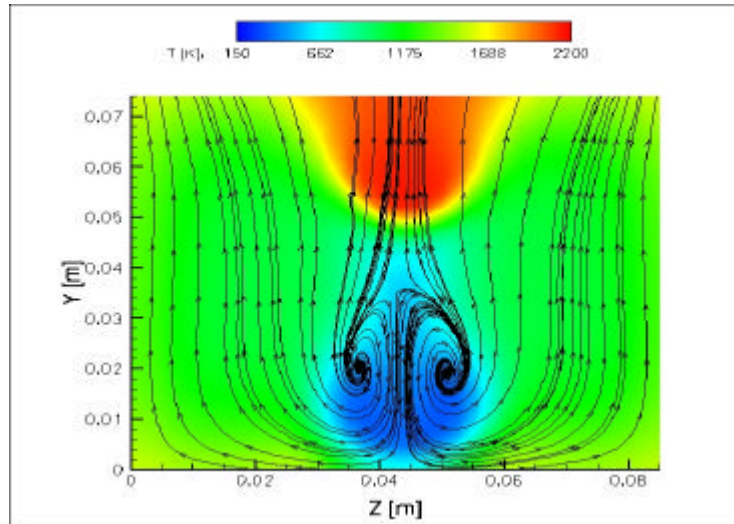


Figura VII.71 Campo medio di  $Y_{H_2}$  nel piano ZY a  $X = 0.7$  con il modello ISCM

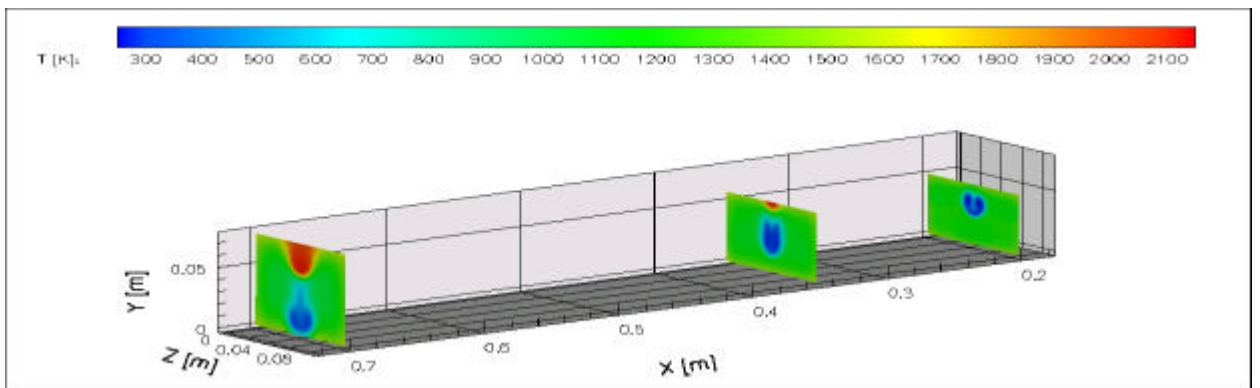


Figura VII.72 Vista tridimensionale di T nel piano ZY a  $X = 0.2$ ,  $X = 0.35$  e  $X = 0.7$

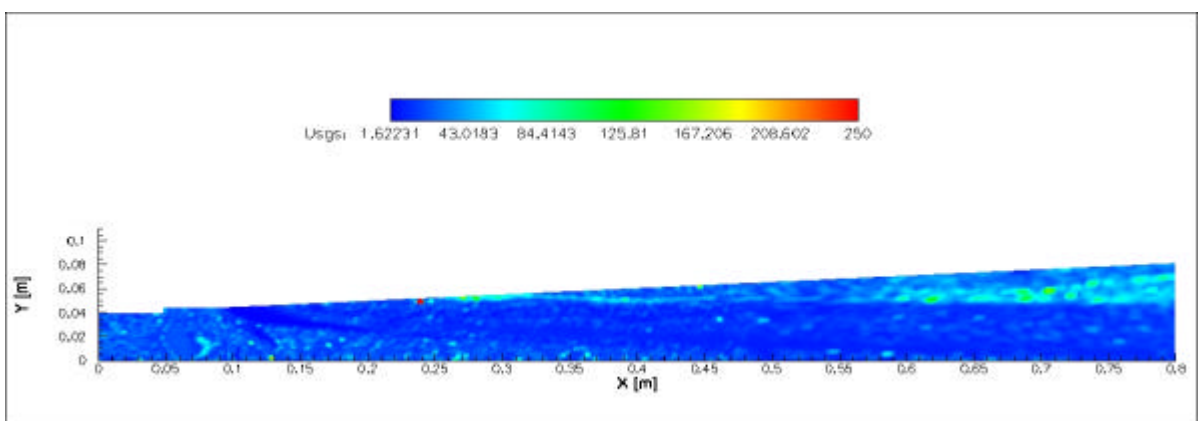
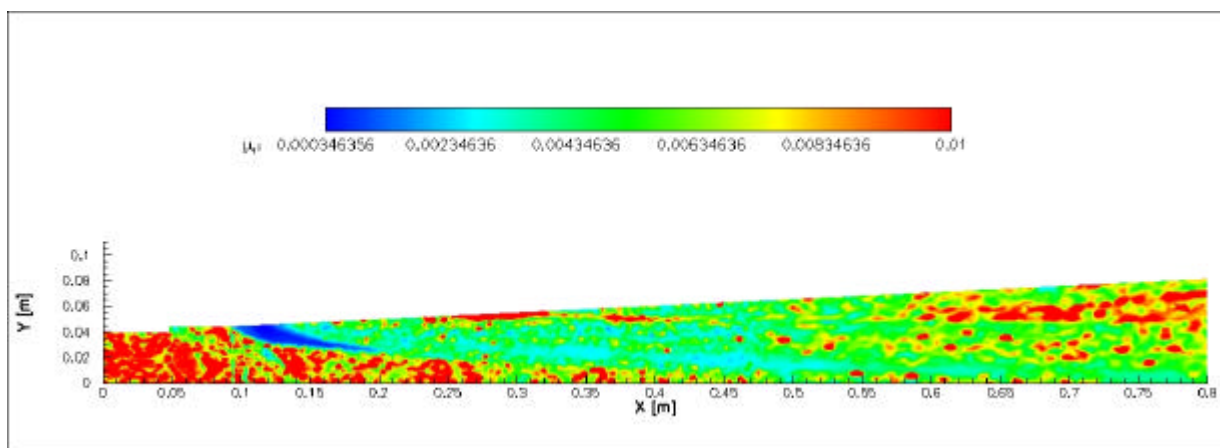


Figura VII.73 Campo medio della velocità turbolenta di sottogriglia con il modello ISCM nel piano XY mediano

Il modello ISCM, quindi, a differenza del modello Smagorinsky Lilly presenta un miglior accordo con i dati sperimentali e conferma, almeno preliminarmente, le analisi condotte nei capitoli precedenti.

La Figura VII.64, in realtà, mostra che la pressione resta circa costante anche nella zona di combustione. Questo potrebbe essere dovuto all'elevato angolo di apertura del divergente che rende quindi possibile una rapida espansione del flusso. La Figura VII.73 mostra che le fluttuazioni più intense del campo di velocità generalmente non superano i 100 m/s ovvero circa il 9-10% della velocità del flusso e che in media sono più piccole. Ciò conferma che nonostante le fluttuazioni siano notevoli l'intensità della turbolenza è debole.

La Figura VII.74 mostra che i valori della viscosità turbolenta vanno da  $10^{-4}$  a  $10^{-1}$  e che la loro distribuzione è di tipo intermittente. Si hanno degli "spot" di alta viscosità principalmente all'interfaccia tra getto di idrogeno e aria, e nella zona di fiamma.



**Figura VII.74 Campo medio della viscosità turbolenta con il modello ISCM nel piano XY mediano**

Nonostante il modello ISCM abbia predetto, a differenza degli altri modelli, sia un miglior mescolamento che un miglior ancoraggio di fiamma, questa, a differenza di quanto riportato dalle prove sperimentali non si sviluppa lungo la parete inferiore. Tale incongruenza potrebbe essere dovuta o al modello di mescolamento ancora non completamente sufficiente a riprodurre con esattezza il campo fluidodinamico, o più probabilmente al fatto che si è riuscito a simulare per quest'ultimo caso solo un millesimo di secondo. In effetti, sulla parete inferiore si osservano delle zone leggermente più calde ma in cui non c'è la fiamma, e che quindi potrebbero richiedere più tempo per svilupparsi e determinare alla fine il suo ancoraggio. In ultima analisi, ciò potrebbe essere dovuto anche ad una griglia troppo grossolana.



## CAPITOLO VIII

### VIII. COMBUSTIONE DI COMBUSTIBILI ENDOTERMICI

I capitoli precedenti hanno evidenziato le difficoltà di mescolare correnti supersoniche e ancorarne la fiamma. I brevi tempi di residenza in camera di combustione, infatti, rendono il suo ancoraggio un fenomeno critico. Per tale ragione, una delle principali richieste di uno SCRJ è quella di utilizzare combustibili aventi tempi chimici molto brevi, basso volume specifico, buona maneggevolezza e temperature di condensazione non criogeniche. Nonostante le buone caratteristiche termiche e reattive, l'idrogeno ha volumi specifici estremamente alti: una soluzione a tale problema potrebbe essere l'utilizzo di combustibili endotermici. Un idrocarburo riscaldato, infatti, si rompe formando specie più leggere, a temperatura maggiore di quella ambiente e che quindi brucia più efficientemente. Tale processo ha dunque molteplici vantaggi: riduzione del volume del serbatoio di combustibile e dunque del peso, produzione di specie più leggere e calde da iniettare nel combustore, cinetica chimica più veloce di quella degli idrocarburi e raffreddamento di parti strutturali con recupero chimico delle perdite di calore<sup>47</sup>.

Al fine di avere un ordine di grandezza delle specie prodotte e delle prestazioni ottenibili bruciando prodotti di cracking si è condotta un'analisi all'equilibrio utilizzando il codice "NASA CEA 600".

I risultati hanno mostrato che, riscaldando idrocarburi e alcoli, le principali specie prodotte sono:

Nel caso di METANOLO ( $\text{CH}_3\text{OH}$ )  $\rightarrow$   $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$ , grafite... (vedi Figura VIII.1e Figura VIII.2)

Nel caso di CHEROSENE  $\rightarrow$   $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ , grafite...

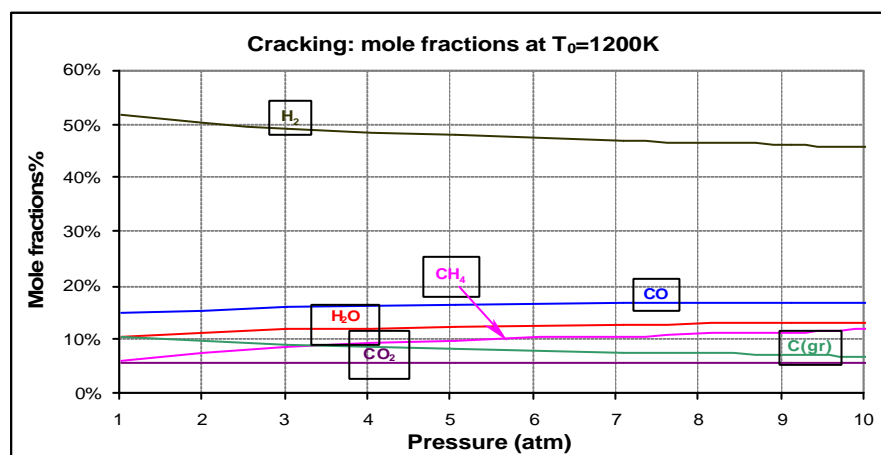
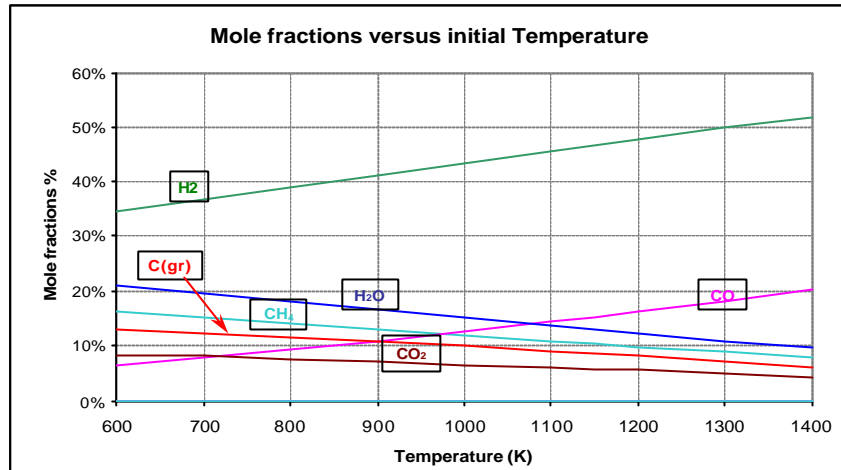
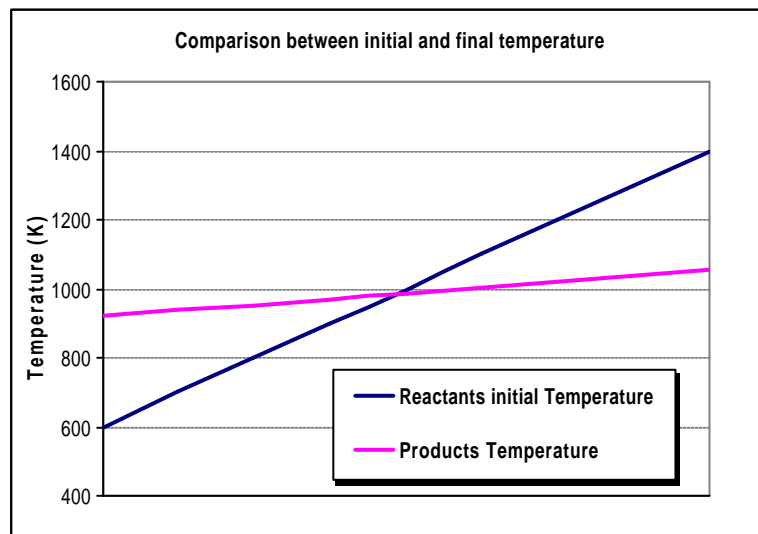


Figura VIII.1 Frazione molare dei prodotti di cracking al variare della pressione (T<sub>0</sub>=1200K)



**Figura VIII.2** Frazione molare dei prodotti di cracking al variare della temperatura iniziale a **P=5atm**

Dalle precedenti figure si osserva che la produzione di specie leggere è favorita a basse pressioni e alte temperature. L'analisi effettuata ha inoltre evidenziato che il processo è endotermico solamente al di sopra di certe temperature iniziali, e, che tali temperature minime aumentano con la pressione del reattore di cracking.



**Figura VIII.3** Confronto tra la temperature di inizio e fine cracking a **P=5atm**

Confrontando l'impulso specifico ottenibile dall'idrogeno con quello dei prodotti del cracking del metanolo (MPP sta per Methanol Pyrolysis Products), del Dimethyl Glycol Ether (DPP) e dell'Ethylene Glycol (GPP) si è osservato che il maggiore è quello ottenibile bruciando idrogeno e aria.

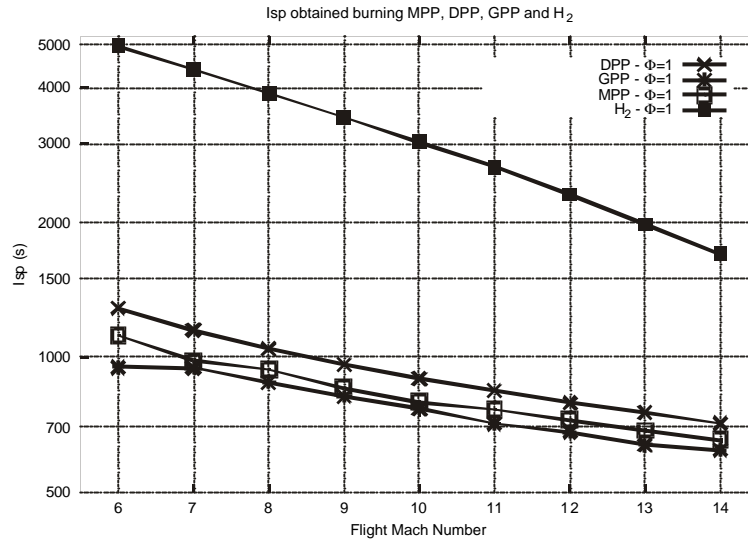


Figura VIII.4 Isp ottenuto bruciando MPP, DPP GPP e H2

Per poter stimare, però, l'effettivo vantaggio che si ottiene dal cracking, bisogna valutare se a parità di impulso totale:

$$I_{TOT} = F \cdot t_{flight} = I_{SP} \cdot m_{FUEL} \cdot g \cdot t_{flight} = I_{SP} \cdot r_{FUEL} V_{FUEL} g \cdot t_{flight} \quad (VIII.1)$$

si abbia o meno una riduzione del volume del serbatoio.

Ponendo

$$R = \frac{Vol_{LHC}}{Vol_{LH_2}} = \frac{I_{SP_{LH_2}}}{I_{SP_{cracking}}} \cdot \frac{r_{LH_2}}{r_{cracking}} \quad (VIII.2)$$

si deduce che si ha un effettivo vantaggio solo per  $R < 1$ .

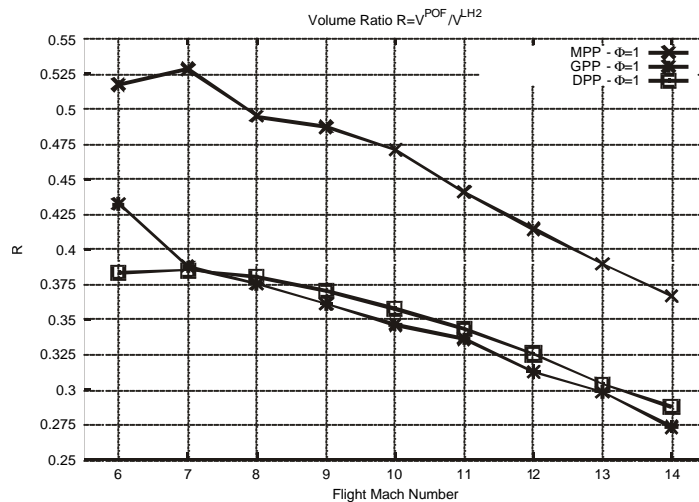


Figura VIII.5 Riduzione del volume del serbatoio bruciando MPP, DPP GPP e H2

## *VIII COMBUSTIONE DI COMBUSTIBILI ENDOTERMICI*

Dai calcoli effettuati si deduce che il cracking del combustibile ha un effettivo vantaggio e che tale vantaggio è sempre più marcato all'aumentare del Mach di volo (vedi Figura VIII.5).

## CAPITOLO IX

### IX. CONCLUSIONI

L'analisi della combustione in regime supersonico ha evidenziato aspetti precedentemente sconosciuti del comportamento del flusso ad alti Mach. C'è prova sperimentale che per condizioni di pressione e temperatura adeguate la combustione è molto rapida e la zona di ancoraggio della fiamma è molto prossima alla zona di iniezione. Ciò significa, dunque, che nonostante la rigidità del flusso gli effetti della comprimibilità sono tali da compensare, in parte, sia il cattivo mescolamento dovuto ai bassi tempi di residenza del flusso nel combustore che la scarsa intensità di turbolenza dovuta alla rigidità stessa del flusso. I modelli di combustione attualmente in uso, come ad es. Smagorisky-Lilly e il Fractal Model, seppur siano in grado di riprodurre con buona approssimazione fiamme subsoniche, non predicono altrettanto fedelmente la combustione in regime supersonico. Ciò è dovuto al fatto che tali modelli non tengono in conto fenomeni fisici che sono trascurabili in regime subsonico ma che sono determinanti per il mescolamento e l'ancoraggio della fiamma in regime supersonico. Il presente studio è stato dunque necessario per poter comprendere la fisica della fiamma e poter costruire un modello più adatto a simulare flussi ad alti Mach. Dal capitolo IV si è evidenziato che la turbolenza nel flusso è principalmente streamwise e quindi il processo di generazione di piccole scale è limitato, dunque, l'intensità della turbolenza in regime supersonico è debole. La presenza però di urti è responsabile della produzione locale di vorticità e quindi di un mescolamento di tipo convettivo che può condurre all'ancoraggio della fiamma. Il II capitolo, inoltre, ha mostrato che la comprimibilità influenza il rateo di comparsa e scomparsa delle specie chimiche non solo per il tramite delle concentrazioni ma anche per effetto di un aumento della frequenza collisionale. Nonostante lo scarso mescolamento e i bassi tempi di residenza in camera di combustione, il flusso manifesta una maggiore reattività e quindi un subitaneo ancoraggio della fiamma. Dall'analisi dei tempi caratteristici mostrata nel capitolo V, si è arrivati all'importante conclusione che la combustione avviene a volume circa costante, raggiungendo dunque temperature più alte. Il regime di fiamma supersonico non è descrivibile dunque solo con i numeri caratteristici del mescolamento e della combustione  $Re$  e  $Da$ , come avviene per flussi subsonici reattivi, ma occorre estendere il piano anche in una terza direzione: il numero di  $Ma$ . L'analisi condotta nel capitolo V ha mostrato che un plausibile regime di combustione potrebbe essere un regime di fiamme a fogli. Al fine di avere un buon riscontro con i dati sperimentali si è elaborato un modello nuovo (vedi cap. VI) in grado di considerare almeno in parte tutti questi aspetti. Il modello è stato validato da simulazioni LES di due casi sperimentali: il primo condotto presso l'Università di Tokyo dal Prof. Takahashi sulla combustione di un getto di idrogeno iniettato in cross-flow rispetto all'aria entrante, l'altro condotto al centro di ricerca della NASA Langley da P. Drummond circa la combustione di un getto di idrogeno iniettato

obliquamente rispetto all'aria entrante. I risultati ottenuti dalle simulazioni sono stati dunque confrontati sia con i modelli attualmente in uso che con i risultati sperimentali.

Il modello ISCM a differenza del modello Smagorinsky Lilly ha presentato un miglior accordo con i dati sperimentali e ha confermato, almeno preliminarmente, le analisi condotte nei capitoli precedenti.

Le simulazioni hanno mostrato infatti che il modello ISCM è in grado di catturare le strutture presenti nel campo predicendo quindi un miglior mescolamento di quello predetto dai codici attuali.

Miglioramenti possono essere apportati al modello tramite l'introduzione di una costante di calibrazione che possa agire sulla tipologia del flusso e sul mescolamento.

## APPENDICE A

### A ANALISI MACROSCOPICA DEL REGIME DI FIAMMA

Per comprendere il regime di fiamma per flussi comprimibile, si è proceduto facendo prima un'analisi a "livello macroscopico". Al fine di ricavare delle relazioni semplici e facilmente interpretabili tra la velocità del fronte di fiamma e le altre grandezze fisiche (come nel caso subsonico), ci si è posti in un sistema di riferimento solidale alla fiamma stessa. Tale scelta del sistema di riferimento dà risultati fisicamente accettabili solo se il nuovo sistema è di tipo Galileiano, ovvero se le nuove coordinate del sistema preso a riferimento non variano nel tempo. Questo è verificato a regime, cioè quando la fiamma occupa, nel laboratorio, una posizione fissa nel tempo ovvero è ben ancorata in una zona specifica. In questo nuovo sistema di riferimento, i termini inerziali sono nulli. Si è inoltre assunto che il fronte di fiamma sia piano e il mezzo uniforme in modo tale da ridurre lo studio al caso monodimensionale. In realtà, nelle applicazioni SCRJ, i reagenti non sono premiscelati, quindi la fiamma è diffusiva. Poiché comunque la combustione richiede mescolamento e quindi un certo tempo prima di poter avvenire, si può assumere che i reagenti abbiano il tempo di mescolarsi e che quindi la fiamma localmente si comporti come una fiamma premiscelata. Inoltre, poiché siamo in regime turbolento e non laminare il fronte di fiamma non è piano (la turbolenza ha l'effetto di corrugare la fiamma). Applicando l'equazione (A.1) a monte e a valle della fiamma, essendo  $Re \gg 1$  i termini viscosi possono essere trascurati. Assumendo che in tali zone i gradienti di velocità siano trascurabili, si evince che la pressione non varia molto lungo x.

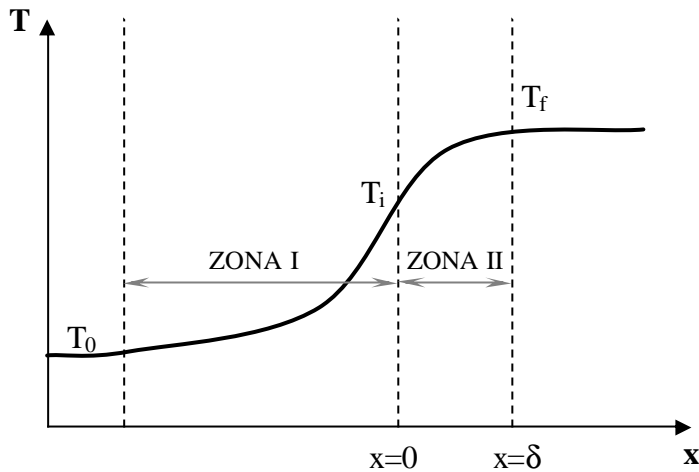
$$u \frac{du}{dx} = -\frac{1}{r} \frac{dp}{dx} + \frac{4}{3} \frac{1}{Re} \frac{1}{r} \frac{d}{dx} \left( m \frac{du}{dx} \right) \quad (A.1)$$

Riscrivendo l'equazione dell'energia lungo la direzione x, si ha:

$$\frac{1}{(g-1)Ma^2} r C_p u \frac{dT}{dx} + r u^2 \frac{du}{dx} = \frac{1}{(g-1)Ma^2} \frac{d^2T}{dx^2} + \frac{1}{Re} \Phi + \frac{Da}{S} w_i h_i \quad \text{con } h_i = C_p T + \frac{1}{2} u^2 \quad (A.2)$$

Poiché immediatamente a monte e a valle della fiamma, i gradienti di velocità non sono molto alti rispetto a quelli di temperatura ed essendo  $Re \gg 1$ , gli effetti dissipativi possono essere trascurati. Il termine conduttivo invece non può essere trascurato perché compaiono i gradienti di temperatura che nella zona di propagazione del fronte di fiamma sono molto alti.

A questo punto, seguendo la teoria adottata da Mallard e Le Chatelier nel caso di fiamme laminari a bassi Mach, si è proceduto suddividendo la fiamma in due zone:



Andamento della temperature attraverso la zona di fiamma

Nella zona I, i reagenti, assorbendo il calore ceduto dalla zona di reazione, si riscaldano fino alla temperatura di accensione; nella zona II, invece, i reagenti, giunti alla temperatura di accensione, reagiscono raggiungendo la temperatura adiabatica di fiamma. In questa zona inoltre, non essendoci reazioni chimiche, il termine sorgente è nullo.

Nella zona I, l'equazione (A.2) diventa:

$$\text{ZONA I: } rC_p u \frac{\partial T}{\partial x} = I \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{A.3})$$

Nella zona II, oltre ai termini dissipativi, si è trascurato anche il termine convettivo, in quanto i tempi diffusivi sono molto più brevi; è presente, invece, il termine sorgente. Si è inoltre considerato per semplicità di calcolo che si abbia una sola reazione, per cui l'equazione dell'energia in questa zona può essere riscritta come:

$$\text{ZONA II: } wh = I \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{A.4})$$

Le equazioni ottenute sono:

$$\left\{ \begin{array}{ll} rC_p u \frac{\partial T}{\partial x} = I \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} & \text{ZONA I} \\ wh = I \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} & \text{ZONA II} \end{array} \right. \quad (\text{A.3})$$

Tali equazioni sono esattamente le stesse del caso subsonico. Questo significa che, in assenza di gradienti trasversali (stretching), il comportamento della fiamma a livello macroscopico è lo stesso



sia in regime incomprimibile che comprimibile: per poter dunque ricavare maggiori informazioni, è necessario fare un'analisi a livello microscopico.

Per risolvere le equazioni (A.3) e (A.4) occorre imporre le seguenti condizioni al contorno:

$$1) \text{ ZONA I: } \begin{cases} x = -\infty & T=T_0 \\ x = 0 & T=T_{in} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

$$2) \text{ ZONA II: } \begin{cases} x = 0 & T=T_{in} \\ x = \delta & T=T_f \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

3) il flusso di calore entrante nella zona I attra verso la sezione  $x=0$ , deve essere pari a quello uscente dalla zona II attraverso la stessa sezione, quindi:

$$\left. \frac{dT}{dx} \right|_{0^-} = \left. \frac{dT}{dx} \right|_{0^+} \quad (\text{A.7})$$

4) il flusso di calore nelle sezioni  $x=-\infty$  e  $x=\delta$  deve essere nullo.

Integrando la (A.3)rispetto a  $x$  si ottiene:

$$I \left. \frac{dT}{dx} \right|_{0^-} = \mathbf{r} C_p u (T_{in} - T_0) \quad (\text{A.8})$$

dove la  $u$  è la velocità dei reagenti, la  $\rho$  e il  $C_p$  sono rispettivamente la densità ed il calore specifico medi calcolati nell'intervallo  $T_0-T_{in}$ .

Poiché l'equazione (A.8) non è omogenea, moltiplicando tale equazione per  $2 \frac{dT}{dx}$  ed integrando l'equazione si ottiene:

$$I \left( \left. \frac{dT}{dx} \right|_{0^+} \right)^2 = 2h \int_{T_m}^{T_f} w dT \quad (\text{A.9})$$

Dalla (A.7), eguagliando le (A.8) e (A.9) si ottiene:

$$\frac{(\mathbf{r}u)^2 C_p^2 (T_{in} - T_0)^2}{I} = 2h \int_{T_m}^{T_f} w dT \quad (\text{A.10})$$

Il termine  $\rho u$  è la portata per unità d'aria dei reagenti freschi attraverso il fronte di fiamma. Pur cambiando sistema di riferimento, la portata dei reagenti aventi velocità  $u$  deve essere la stessa dei prodotti aventi velocità pari a  $V_F$ . Assumendo inoltre che l'energia chimica venga interamente trasformata in energia termica, può scriversi:

$$h = C_p (T_f - T_0) \quad (\text{A.11})$$

sostituendo la (A.11) nella (A.10) ed esplicitando rispetto a  $V_F$ , si ottiene:

$$V_F = \sqrt{\frac{2I}{r^2 C_p (T_f - T_0)} \int_{T_{in}}^{T_f} w dT} \quad (\text{A.12})$$

Per una reazione di ordine  $n$ , l'espressione della velocità di reazione  $w$  è:

$$w = A e^{-\frac{Ea}{RT}} C^n \quad (\text{A.13})$$

dove  $A$  è il coefficiente pre-esponenziale di Arrhenius e  $C^n$  rappresenta globalmente l'effetto delle concentrazioni delle specie che compaiono nella reazione, a cui per semplicità di calcolo si assegna un valore costante rispetto alla temperatura.

L'integrale  $I = \int_{T_{in}}^{T_f} A e^{-\frac{Ea}{RT}} C^n dT$  non è facilmente risolvibile, è dunque necessario riportarlo nella

forma nota:  $\int e^{-B} dB$ .

Operando un cambiamento di variabili:

$$T = T_f - z \rightarrow dT = -dz$$

cui corrisponde l'intervallo di integrazione:

$$T = T_f \rightarrow z = 0$$

$$T = T_{in} \rightarrow z = T_f - T_{in}$$

$$\text{si ha: } I = - \int_{T_f - T_{in}}^0 A e^{-\frac{Ea}{RT_f - z}} C^n dz \quad (\text{A.14})$$

Poiché per gli idrocarburi e tanto più per l'idrogeno (combustibili utilizzati per applicazioni

scramjet)  $\frac{Ea}{RT_f} = \frac{30 - 40000 \text{ cal/mol}}{1.987 \text{ cal/molK} \cdot 2000 \text{ K}} \sim 10 \gg 1$ , è utile riscrivere la (A.14) come:

$$I = -AC^n \int_{T_f-T_{in}}^0 e^{\frac{-Ea}{RT_f} \left(1+\frac{z}{T_f}\right) \left(1+\frac{z}{T_f}\right)} dz = -AC^n \int_{T_f-T_{in}}^0 e^{\frac{-Ea}{RT_f} \left(1+\frac{z^2}{T_f^2}\right)} dz = AC^n \frac{Ea}{RT_f} \int_{T_f-T_{in}}^0 e^{-Ea \frac{z}{RT_f^2}} dz \quad (A.15)$$

Il rapporto  $z^2/T_f^2$  è stato trascurato in quanto in regime supersonico, tale termine è molto inferiore rispetto all'unità (essendo le temperature in ingresso molto alte).

La soluzione della (A.15) è:

$$\int_{T_i}^{T_f} w dT = \frac{RT_f^2}{Ea} AC^n e^{-\frac{Ea}{RT_f} \left(1+\frac{Ea}{RT_f}(T_f-T_i)\right)} \cong \frac{RT_f^2}{Ea} AC^n e^{-\frac{Ea}{RT_f}} \quad (A.16)$$

essendo  $1 - e^{-\frac{Ea}{RT_f}(T_f-T_i)} \cong 1$  (infatti  $\frac{Ea}{RT_f} \gg 1$ ).

Sostituendo la (A.16) nella (A.12) si ottiene l'espressione per la velocità del fronte di fiamma:

$$V_F = \sqrt{\frac{2I}{\mathbf{r}^2 C_p (T_f - T_0)} \frac{RT_f^2}{Ea} A e^{-\frac{Ea}{RT_f}} C^n} = \sqrt{\frac{2I}{\mathbf{r}^2 C_p} \frac{A e^{-\frac{Ea}{RT_f}} C^n}{Z}} \quad (A.17)$$

da cui si evince che la velocità del fronte di fiamma laminare è proporzionale a  $\sqrt{p^{n-2}}$ : *la fiamma in regime supersonico si comporta esattamente allo stesso modo del regime subsonico*. Per reazioni del primo ordine la velocità del fronte di fiamma laminare diminuisce all'aumentare della pressione.

Tutte queste considerazioni sono state ottenute nell'ipotesi di fiamma supersonica laminare. In realtà è molto improbabile che in regime supersonico la fiamma si mantenga laminare e non transiti a turbolenta. Ciò che potrebbe verificarsi è che la presenza di un'onda d'urto nel flusso favorisca una combustione talmente rapida da dar luogo ad un fronte di fiamma detonativo. Infatti, le alte temperature dei reagenti, causate dalla presenza di un'onda d'urto, potrebbero essere tali da rendere la cinetica chimica estremamente veloce: non c'è quindi il tempo di trasportare molecolarmente. Nel caso di detonazione, i tempi diffusivi sono troppo lunghi rispetto a quelli convettivi e possono essere trascurati. Riprendendo l'equazione (A.2) e trascurando dunque anche il termine conduttivo, si ottiene un'equazione del tipo:

$$\mathbf{r} C_p u \frac{dT}{dx} = w_i h_i \quad (A.18)$$

a cui corrisponde una soluzione a gradino (dovuta all'assenza di derivate seconde nell'equazione (A.18)). Dal punto di vista fisico, questo significa che lo spessore della fiamma è collassato. La velocità della fiamma nel caso di detonazione è pari alla velocità cui si propagano i gas bruciati. Si

ha un'onda d'urto, che si propaga nel campo, che sostiene la combustione e che è a sua volta sostenuta dalla combustione stessa: infatti, i prodotti della combustione tendono ad espandersi generando un aumento locale di pressione, sostenendo dunque il propagarsi dell'onda.

## APPENDICE B

### B MODELLI DI CHIUSURA PER LA CHIMICA E I PROCESSI DI TRASPORTO

Con tale appendice si vuole fornire un'utile descrizione dei vari modelli di chiusura attualmente in uso sia per il trasporto che per la chimica.

Infatti, per risolvere le equazioni di Navier Stokes tramite simulazione numerica diretta bisognerebbe scegliere passi temporali e spaziali tali da essere rappresentativi della scala dei fenomeni che avvengono nel flusso. Da ciò si evince che mentre nei flussi laminari si avrebbero dei buoni risultati in tempi ragionevoli anche per forme geometriche complesse, nel caso di flussi turbolenti una simulazione diretta richiederebbe tempi di calcolo e spazi di memoria eccessivi.

La griglia di calcolo dovrebbe, infatti, avere maglie le cui dimensioni siano inferiori a quelle della più piccola scala della turbolenza (scala di Kolmogorov) che è inversamente proporzionale a  $Re^{3/4}$ . Ciò significa che, il numero di punti necessario a descrivere adeguatamente il moto del fluido nella direzione  $x$ , deve essere proporzionale a  $Re^{3/4}$ . Un numero di punti dello stesso ordine di grandezza è richiesto per le altre due dimensioni spaziali: è necessario un numero di punti pari a  $Re^{2.25}$ . Poiché per camere di combustione per applicazioni motoristiche, il valore tipico di Reynolds è dell'ordine di centinaia di migliaia, è chiaro che tale strada non è percorribile. Per quanto concerne la discretizzazione temporale, il tempo caratteristico è inversamente proporzionale a  $Re^{1/2}$  dunque, il numero di nodi richiesto per risolvere tali flussi è almeno  $Re^{2.75}$ .

In flussi reagenti inoltre, si devono considerare anche le scale dei tempi delle reazioni chimiche che sono generalmente di parecchi ordini di grandezza più piccole delle precedenti.

Si stima che, in un fenomeno di combustione turbolenta il rapporto tra la più grande e la più piccola scala spaziale sia di  $10^9$ , dunque, per discretizzare adeguatamente il flusso nelle tre dimensioni, sono necessari circa  $10^{27}$  nodi di calcolo, mentre a tutt'oggi, le griglie più fini utilizzate dai supercalcolatori non superano i  $10^{10}$  nodi.

Nel caso di flussi turbolenti, tale limitazione, in termini computazionali, costringe ad abbandonare il tentativo di risolvere le equazioni di Navier-Stokes per i valori istantanei delle grandezze (DNS) e, ad orientarsi alla risoluzione di tali equazioni per il moto medio come nel caso RANS in cui si tutte le scale sono modellate allo stesso modo, o istantaneamente per le strutture più grandi e modellando le scale più piccole come nel caso LES.

Sia l'approccio RANS che LES permettono di alleggerire enormemente il peso computazionale rispetto alla DNS, ma necessitano l'introduzione di modelli sia per il trasporto turbolento che per la chimica. E' da tener presente però, che l'introduzione di tali modelli fa perdere di generalità alla soluzione: a seconda delle ipotesi su cui si basano sono adattabili ad alcuni casi specifici invece che ad altri. I modelli che verranno illustrati successivamente non sono adatti a simulare flussi

supersonici in cui gli effetti della comprimibilità e la bassa intensità di turbolenza rendono alcune assunzioni adottate nei seguenti modelli non del tutto valide.

## B.1 REYNOLDS AVERAGED NAVIER STOKES

L'approccio RANS è attualmente l'unico adatto a simulare casi di configurazioni pratiche, ma la sua accuratezza è limitata e non può essere utilizzato in maniera predittiva, ma solo orientativamente per identificare le caratteristiche principali della camera di combustione o come primo step per ottenere un campo iniziale da implementare in simulazioni di tipo LES.

In RANS, anche se fisicamente le grandi scale sono condizionate sia dalle condizioni iniziali che dalle condizioni al contorno mentre le piccole scale hanno un comportamento abbastanza omogeneo ed isotropo, tutte le scale della turbolenza sono modellate allo stesso modo. Tale approccio presenta dunque un'assunzione molto forte: introdurre un modello per il trasporto turbolento valido per tutte le scale significa allontanarsi già dalla soluzione esatta. Nell'approccio RANS, la turbolenza viene descritta decomponendo il valore istantaneo di ogni grandezza in una componente media ed una fluttuante. In particolare, ogni grandezza generica  $\Psi$  viene decomposta nel seguente modo:

$$\Psi = \overline{\Psi} + \Psi' \quad (\text{B.1})$$

dove  $\overline{\Psi}$  è il valor medio definito come:

$$\overline{\Psi}(x) = \frac{1}{\Delta t} \int_{-\Delta t/2}^{\Delta t/2} \Psi(x, t + \mathbf{t}) d\mathbf{t} \quad (\text{B.2})$$

e  $\Psi'$  è la componente fluttuante definita come:  $\Psi' = \Psi - \overline{\Psi}$ .

Riscrivendo le equazioni di Navier-Stokes decomponendo ogni grandezza come indicato e mediando le equazioni nel tempo, si ottengono dei termini aggiuntivi: il sistema non è più chiuso.

In problemi a densità variabile, tale decomposizione applicata ai termini convettivi non lineari conduce alla nascita di numerosi termini aggiuntivi; per evitare tale inconveniente si può introdurre l'operazione di media pesata con la densità (media di Favre) in cui ogni grandezza viene

decomposta in una parte mediata con la densità  $\tilde{\Psi} = \frac{\overline{\mathbf{r}\Psi}}{\overline{\mathbf{r}}}$  ed una fluttuazione  $\Psi'' = \Psi - \tilde{\Psi}$  rispetto al

valor medio.

Con tale decomposizione il termine convettivo diventa:

$$\mathbf{r}u_i u_j = \mathbf{r}(\tilde{u}_i + u_i'')(\tilde{u}_j + u_j'') = \mathbf{r}\tilde{u}_i \tilde{u}_j + \mathbf{r}u_i'' \tilde{u}_j + \mathbf{r}\tilde{u}_i u_j'' + \mathbf{r}u_i'' u_j'' \quad (\text{B.3})$$

ed una volta mediato diventa:

$$\overline{\mathbf{r}u_i u_j} = \overline{\mathbf{r}}\tilde{u}_i \tilde{u}_j + \overline{\mathbf{r}}\widetilde{u_i'' u_j''} \quad (\text{B.4})$$

Il termine  $\overline{\mathbf{r}}\widetilde{u_i'' u_j''}$ , detto sforzo di Reynolds, è un termine aggiuntivo che compare nelle equazioni mediate a causa della presenza di termini fluttuanti. Questo termine è responsabile di un trasporto turbolento di quantità di moto il cui unico effetto è quello di promuovere una redistribuzione spaziale della quantità di moto senza né produrne né distruggerne. Anche nell'equazione dell'energia compaiono i termini  $\overline{\mathbf{r}}\widetilde{h_0'' u_j''}$  e  $\overline{\mathbf{r}}\widetilde{Y_k'' u_j''}$  che sono chiamati flussi di Reynolds. Questi termini sono circa 100 volte superiori ai termini responsabili del trasporto molecolare: questo spiega l'aumentata diffusività in flussi turbolenti.

Il sistema di equazioni mediate è:

$$\frac{\partial(\overline{\mathbf{r}}\tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{\partial(\overline{\mathbf{r}}\tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mathbf{m} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{m} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] - \frac{\partial(\overline{\mathbf{r}}\widetilde{u_i'' u_j''})}{\partial x_j} + \overline{\mathbf{r}}g_i \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{\partial(\overline{\mathbf{r}}\tilde{u}_j \tilde{h}_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ -\frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\mathbf{r}}\widetilde{u_i'' u_j''}) + \overline{\Phi} \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{r}}\tilde{u}_j \tilde{Y}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) + \overline{w}_i \quad (\text{B.8})$$

Da tali equazioni si evince che mentre l'equazione di continuità conserva una forma analoga alla sua controparte non mediata, nelle altre equazioni i termini convettivi non lineari conducono alla nascita di termini addizionali (gli sforzi e i flussi di Reynolds) che rappresentano incognite aggiuntive del problema.

Per un flusso reagente, anche i ratei di comparsa e scomparsa delle specie chimiche costituiscono incognite aggiuntive.

Il sistema di equazioni mediate non è più chiuso e il problema della chiusura è il problema fondamentale della turbolenza.

Per risolvere un tale sistema è necessario avvalersi di un modello, cioè di una descrizione semplificata del comportamento del flusso che possa descrivere l'effetto della turbolenza sul campo medio. I principali modelli attualmente sviluppati si basano sull'idea di eddy viscosità, con lo svantaggio che la  $\mu_t$  diventa una quantità scalare isotropa (il che non è strettamente vero). Un'alternativa a tali modelli è il modello Reynolds Stress Model, nel quale la chiusura delle equazioni avviene introducendo un'equazione di trasporto per gli stress di Reynolds e modellando ogni termine delle nuove equazioni. Questo metodo è migliore di quello basato sull'ipotesi di

Boussinesq in particolare in flussi in cui l'anisotropia di turbolenza ha un effetto dominante sul flusso medio.

### B.1.1 Modello eddy viscosity

Come già accennato, gli sforzi di Reynolds possono essere valutati come sforzi apparenti che permettono di considerare il moto medio come il moto reale di un fluido sottoposto ai gradienti di una densità media, sforzi molecolari e turbolenti medi.

L'idea di eddy viscosity si basa sull'ipotesi che gli eddies si comportano come le molecole, trasportando massa, quantità di moto e energia (analogia di Boussinesq). A valle di tale assunzione è possibile considerare una  $\mu_t$  che tenga conto dell'aumentata diffusività e modellare gli sforzi di Reynolds con una legge di trasporto di tipo gradiente che leghi i termini fluttuanti con le grandezze medie del campo:

$$\bar{r} \widetilde{u_i u_j} = \mathbf{m} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \bar{r} \tilde{k} + \mathbf{m}_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \mathbf{d}_{ij} \quad (\text{B.9})$$

Sostituendo tale espressione nell'equazione della quantità di moto si ha:

$$\frac{\partial (\bar{r} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mathbf{m} + \mathbf{m}_t) \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} (\mathbf{m} + \mathbf{m}_t) \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} - \frac{2}{3} \bar{r} \tilde{k} \mathbf{d}_{ij} \right] + \bar{r} f_i \quad (\text{B.10})$$

Dalla 15 si evince che l'ipotesi di eddy viscosity ha introdotto due nuove incognite che necessitano dunque di essere modellate: l'energia cinetica turbolenta  $k$  e la viscosità turbolenta  $\mu_t$ .

Una delle più semplici ipotesi di chiusura per la  $\mu_t$  è quella proposta da Prandtl, secondo cui, la viscosità turbolenta è proporzionale al prodotto della densità del fluido per una lunghezza caratteristica del problema in esame chiamata lunghezza di mescolamento, ed una velocità di fluttuazione  $u''$ :

$$\mathbf{m}_t = \bar{r} u'' l_m \quad (\text{B.11})$$

Per chiudere il problema è necessario ottenere una chiusura sia per la velocità di fluttuazione che per la lunghezza di mescolamento.



La chiusura può essere sviluppata sia integrando modelli semplici a zero equazione, che modelli più complessi del tipo k-ε, k-ω...

### B.1.2 Modello a zero equazioni

I modelli di chiusura più semplici sono quelli a zero equazioni in cui le grandezze caratteristiche della turbolenza (velocità di fluttuazione e lunghezza di mescolamento) sono determinate senza introdurre ulteriori equazioni. In flussi semplici (flusso piano, assialsimmetrico, etc.) la lunghezza di mescolamento  $l_m$  può essere espressa in funzione delle grandezze di grande scala. In particolare, partendo dalla considerazione fisica che i vortici di grande scala sono i maggiori responsabili del trasporto, si può assumere  $l_m$  circa pari alle dimensioni del combustore.

La velocità caratteristica della turbolenza viene presa proporzionale al prodotto della lunghezza di mescolamento per il gradiente della velocità:

$$\tilde{u}'' = l_m \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right| \quad (\text{B.12})$$

La viscosità turbolenta può dunque essere definita come:

$$\mathbf{m} = \bar{\nu} l_m^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right| \quad (\text{B.13})$$

In tal modo si è giunti alla chiusura del sistema di equazioni mediate.

Tale modello non è adatto a descrivere geometrie complesse in quanto non è possibile definire una lunghezza di mescolamento. Un miglioramento ai modelli di turbolenza a zero equazioni può essere ottenuto introducendo equazioni di conservazione per le grandezze che descrivono la turbolenza.

### B.1.3 Modello a due equazioni

Nel modello a due equazioni la velocità caratteristica della turbolenza e la lunghezza di mescolamento sono calcolate aggiungendo un'equazione per l'energia cinetica turbolenta  $\tilde{k}$  e una per il rateo di dissipazione viscosa dell'energia cinetica turbolenta  $\tilde{\epsilon}$ .

La velocità caratteristica della turbolenza è infatti esprimibile in funzione dell'energia cinetica turbolenta per mezzo della relazione:  $\tilde{u}'' = \sqrt{\tilde{k}}$ .

La lunghezza caratteristica può essere calcolata come:  $l_m = \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{\tilde{\epsilon}}$ .

Ritornando all'ipotesi di Prandl, sostituendo i valori ottenuti e introducendo una opportuna costante (ottenuta sperimentalmente) si ottiene la seguente espressione per la viscosità turbolenta:

$$\mathbf{m}_t = C_m \bar{\mathbf{r}} l_m^2 \tilde{u}'' = C_m \bar{\mathbf{r}} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (\text{B.14})$$

Solitamente  $C_\mu$  si assume essere pari a 0.09.

Tale espressione è alla base del modello k-ε per flussi turbolenti.

L'energia cinetica turbolenta k e il suo tasso di dissipazione viscosa ε sono determinati risolvendo le seguenti equazioni di conservazione:

$$\frac{\partial(\bar{\mathbf{r}} \tilde{u} \tilde{k})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}} + \frac{\mathbf{m}_t}{\mathbf{s}_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k} \right] + \bar{\mathbf{r}} P - \mathbf{r} \tilde{\epsilon} \quad (\text{B.15})$$

$$\frac{\partial(\bar{\mathbf{r}} \tilde{u} \tilde{\epsilon})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}} + \frac{\mathbf{m}_t}{\mathbf{s}_e} \right) \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial x_k} \right] + C_1 \bar{\mathbf{r}} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} P - C_2 \bar{\mathbf{r}} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \quad (\text{B.16})$$

In queste equazioni  $\sigma_k$  e  $\sigma_\epsilon$  sono i numeri di Prandtl turbolenti,  $C_1$  e  $C_2$  sono costanti di calibrazione del sistema .

Il termine  $\bar{\mathbf{r}} P$  risulta esprimibile con:

$$\bar{\mathbf{r}} P = \mathbf{m}_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \left( \mathbf{m}_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \bar{\mathbf{r}} \tilde{k} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (\text{B.17})$$

Con tale modello il numero di equazioni da risolvere è incrementato di due.

Un'alternativa al modello k-ε è il modello k-ω sviluppato da Wilcox (1993). Tale modello si basa sulla considerazione che l'evoluzione di ω è legata direttamente al trasporto turbolento nel flusso in quanto ω rappresenta direttamente la frequenza caratteristica degli eddies.

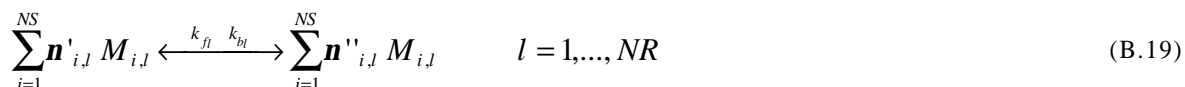
### B.1.4 Modelli per la chimica

Introdotta il modello per il trasporto turbolento, nel caso di flussi reattivi è necessario introdurre un modello per l'accoppiamento tra cinetica chimica e turbolenza. Il problema della chiusura termochimica nasce dalla non linearità della dipendenza della densità e del termine di produzione delle specie chimiche  $w_i$  con la temperatura, la pressione e le frazioni molari. È quindi errato considerare:

$$\bar{\mathbf{r}}\left(T, p, \sum_{i=1}^n Y_i\right) = \mathbf{r}\left(\bar{T}, \bar{p}, \sum_{i=1}^n \bar{Y}_i\right) \quad \text{e} \quad \bar{w}_i\left(T, p, \sum_{i=1}^n Y_i\right) = w_i\left(\bar{T}, \bar{p}, \sum_{i=1}^n \bar{Y}_i\right) \quad (\text{B.18})$$

tale assunzione infatti porterebbe ad errori fino a tre ordini di grandezza e a risultati privi di significato.

Per uno schema di NR reazioni e NS specie chimiche, descritto dalla seguente espressione:



il rateo di comparsa e scomparsa  $w_i$  dell' $i$ -esima specie chimica è:

$$w_i = \sum_{l=1}^{NR} (\mathbf{n}''_{i,l} - \mathbf{n}'_{i,l}) w_l = \sum_{l=1}^{NR} (\mathbf{n}''_{i,l} - \mathbf{n}'_{i,l}) \left\{ k_{fl} \prod_{i=1}^{NS} [M_{i,l}]^{\mathbf{n}'_{i,l}} - k_{bl} \prod_{i=1}^{NS} [M_{i,l}]^{\mathbf{n}''_{i,l}} \right\} \quad (\text{B.20})$$

dove  $w_l$  è la velocità della  $l$ -esima reazione, e  $k_f$  e  $k_b$  sono le costanti di reazione in avanti e all'indietro esprimibili dalla relazione di Arrhenius:

$$k_{i,l} = A_{i,l} T^{b_{i,l}} e^{-E_{a,i,l}/RT} \quad i = f, b \quad (\text{B.21})$$

Come si evince dalla sua stessa espressione, il rateo di comparsa e scomparsa delle specie chimiche è fortemente non lineare, l'operazione di media dunque dà luogo alla nascita di termini di correlazione incogniti. Il problema della chiusura termochimica richiede dunque l'introduzione di modelli di combustione sia per la densità che per il termine sorgente della chimica medi. Tali modelli avranno validità limitata al caso preso in esame.

In RANS, uno dei metodi più adottati è quello di introdurre una variabile di progresso  $c$  che esprime il rapporto tra miscela fresca e bruciata, ed esprimere densità e temperatura in funzione di tale variabile. Questa nuova variabile deve essere risolta introducendo un'ulteriore equazione di conservazione mediata:

$$\frac{\partial(\bar{\mathbf{r}} \tilde{u} \tilde{c})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}} + \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}_c} \right) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_k} \right] + \bar{w} \quad (\text{B.22})$$

dove  $\sigma_c$  il numero di Schmidt turbolento.

Anche il termine  $\bar{w}$  va modellato. Assumendo, ad esempio, che le reazioni chimiche avvengano in lamine sottili, e quindi che la camera di combustione sia occupata prevalentemente da sacche di miscela fresca e da sacche di miscela completamente bruciata, e che il volume occupato dalla

miscela reagente sia molto sottile, è ragionevole ipotizzare che il termine di produzione  $w$  sia proporzionale alla probabilità di interazione tra pacchetti freschi e completamente bruciati moltiplicata la frequenza di tali interazioni, ovvero che la combustione sia controllata dal mescolamento (tale ipotesi porta a previsioni modeste per le specie la cui produzione e distruzione è relativamente lenta).

Possiamo dunque scrivere  $w$  nella forma:

$$\bar{w} = C \bar{r} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \frac{\tilde{e}}{k} \quad (\text{B.23})$$

dove  $\tilde{c}$  e  $(1 - \tilde{c})$  indicano rispettivamente la frazione di miscela completamente bruciata e di miscela fresca, per cui il prodotto rappresenta la probabilità di interazione e la frequenza di tali interazioni e data dal rapporto  $\frac{\tilde{e}}{k}$ .

Si è giunti quindi ad una chiusura termochimica delle equazioni di conservazione mediate, attraverso le quali, per un fenomeno in cui le assunzioni fatte non inducano ad errori troppo grossolani, è possibile ottenere previsioni accettabili del campo di moto e della concentrazione delle principali specie chimiche di fiamme premiscelate in regime turbolento.

Si è parlato di un solo scalare conservato; ma si possono definire altri scalari: occorre individuarli, scrivere equazioni di conservazione e chiuderle.

### B.1.5 Conclusioni

Nonostante il livello di accuratezza del modello adottato, l'approccio RANS ha comunque delle serie limitazioni dovute al fatto che tutte le strutture del campo sono modellate allo stesso modo: non considera il diverso comportamento delle grandi scale dalle scale fini.

Inoltre, in RANS le equazioni sono mediate nel tempo: non è dunque possibile né catturare eventuali instabilità nel flusso né la produzione di specie intermedie o di fuliggine. Per avere una migliore descrizione, più conforme alla realtà è necessario fare simulazioni di tipo LES. Tali simulazioni presentano però lo svantaggio di essere molto più onerose di quelle RANS, sia dal punto di vista del tempo di calcolo che della memoria richiesta.

## B.2 LARGE EDDY SIMULATION

In LES, le più larghe strutture del campo di flussi sono risolte come in DNS, mentre il comportamento delle piccole scale è modellato: questo tipo di approccio si pone dunque ad un livello intermedio tra la DNS in cui tutte le strutture del campo sono risolte e la RANS, in cui tutte le strutture sono modellate.

Per separare le grandi scale dalle piccole si introduce un'operazione di filtro: tale operazione separa gli eddies la cui scala è superiore alle dimensioni della cella da quelli di dimensione inferiore.

L'operazione di filtro è espressa da un integrale di convoluzione:

$$\bar{f}(x) = \int_D f(x')G(x, x')dx' \quad (\text{B.24})$$

dove D è l'intero dominio e G è la funzione filtro che determina le scale degli eddies risolte. Le funzioni di filtro possono essere di due tipi: definite nello spazio o come numero d'onda.

Il miglior filtro definito nello spettro è lo sharp Fourier cutoff:

$$G(k) = \begin{cases} 1 & \text{se } k \leq \frac{p}{\Delta} \\ 0 & \text{se } k > \frac{p}{\Delta} \end{cases} \quad (\text{B.25})$$

Quelli definiti nello spazio sono:

1. filtro gaussiano:

$$G(x) = \sqrt{\frac{6}{p\Delta^2}} \exp\left(-\frac{6x^2}{\Delta^2}\right) \quad (\text{B.26})$$

2. filtro top-hat:

$$G(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{se } |x| < \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{se } |x| > \frac{\Delta}{2} \end{cases} \quad (\text{B.27})$$

La generica variabile f viene decomposta come:

$$f = \bar{f} + f' \quad (\text{B.28})$$

dove  $\bar{f}$  è la parte risolta mentre  $f'$  è la grandezza relativa alle strutture fini.

Ipotizzando che l'operazione di derivata e di filtro siano commutabili e applicando l'operazione di filtro alle equazioni di Navier-Stokes incomprimibili si ottiene la seguente equazione per il trasporto della quantità di moto:

$$\frac{\mathcal{F}\overline{u_i}}{\mathcal{F}t} + \frac{\mathcal{F}(\overline{u_i u_j})}{\mathcal{F}x_j} = -\frac{\mathcal{F}\overline{p}}{\mathcal{F}x_i} + \mathbf{n} \frac{\mathcal{F}^2 \overline{u_i}}{\mathcal{F}x_j^2} - \frac{\mathcal{F}\mathbf{t}_{ij}}{\mathcal{F}x_j} \quad (\text{B.29})$$

Come in RANS, anche in LES la presenza dei termini non lineari dà luogo alla nascita di un termine aggiuntivo detto sforzo di sottogriglia  $\mathbf{t}_{ij} = (\overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j})$ .

Le equazioni per il campo di larga scala non sono chiuse a causa del termine incognito  $\mathbf{t}_{ij}$ , che deve essere quindi espresso in funzione di grandezze risolte.

Attualmente si sono sviluppati sia modelli di tipo eddy viscosity che modelli basati su velocità di riferimento in cui i prodotti di velocità presenti in  $\mathbf{t}_{ij}$  vengono espressi in funzione di opportune velocità di riferimento.

### B.2.1 Modello eddy viscosity

La maggior parte dei modelli di sottogriglia si basano, come in RANS, sull'idea di eddy-viscosity in cui il tensore degli sforzi di sottogriglia è messo in relazione alle grandezze di larga scala per mezzo di una legge di trasporto di tipo gradiente:

$$\mathbf{t}_{ij} - \frac{d_{ij}}{3} \mathbf{t}_{kk} = -2\mathbf{n}_t \overline{S}_{ij} \quad (\text{B.30})$$

Il problema della chiusura è ora spostato alla viscosità turbolenta, che deve essere opportunamente modellata.

#### a) Modello di Smagorinsky-Lilly

Il modello Smagorinsky-Lilly è il progenitore della maggior parte dei modelli di sottogriglia.

Tale modello si basa, come verrà spiegato successivamente, sull'ipotesi di equilibrio.

Dalla (35) si evince che l'incognita da modellare è la viscosità turbolenta che dimensionalmente è il prodotto tra una lunghezza e una velocità caratteristica:

$$\mathbf{n}_t = C_1 u' l' \quad (\text{B.31})$$

In tale modello la lunghezza di riferimento è proporzionale alla lunghezza caratteristica del filtro  $\bar{\Delta}$ ; la velocità di riferimento è invece ottenuta assumendo l'ipotesi di equilibrio che si basa sulla considerazione che le scale non risolte siano in equilibrio e che la produzione di energia  $P = 2\mathbf{n}_t \overline{S_{ij}} \overline{S_{ij}}$  e la dissipazione  $\epsilon_{SGS}$  siano in equilibrio: tale assunzione implica la presenza di un range inerziale in cui l'energia è generata a larga scala e trasmessa a scale sempre più piccole fino ad arrivare alle scale dove l'energia viene dissipata.

Esprimendo la dissipazione viscosa  $\epsilon_{SGS}$  come  $\frac{u'^3}{\Delta}$ , si ha:

$$2C_1 u' \Delta \overline{S_{ij}} \overline{S_{ij}} = \frac{u'^3}{\Delta} \quad (\text{B.32})$$

Dalla (35) si ricava un'espressione per la velocità caratteristica che sostituita nell'espressione per la viscosità turbolenta  $\mathbf{n}_t$  dà:

$$\mathbf{n}_t = (C_s \bar{\Delta})^2 |\overline{S}| \quad (\text{B.33})$$

Nel caso in comprimibile si ha dunque:

$$\mathbf{t}_{ij} - \frac{1}{3} \mathbf{t}_{kk} \mathbf{d}_{ij} = -2\mathbf{n}_t \left( \overline{S_{ij}} - \frac{1}{3} \overline{S_{kk}} \right) \mathbf{d}_{ij} \quad (\text{B.34})$$

Tale relazione chiude il sistema di equazioni di Navier Stokes filtrate.

La debolezza del modello Smagorinsky-Lilly risiede nel fatto che, per le ipotesi adottate, tale modello è estremamente dissipativo. Inoltre, l'energia dissipata  $\mathbf{e}_S = \mathbf{t}_{ij} \overline{S_{ij}} = -2\mathbf{n}_t \overline{S_{ij}} \overline{S_{ij}} = -\mathbf{n}_t |\overline{S}|^2$  è sempre minore di zero, il che significa che il trasferimento di energia avviene solo dalle grandi scale alle strutture fini. Sebbene questo comportamento sia generalmente verificato, si può avere localmente un fenomeno di cascata inversa, in cui si ha un trasferimento di energia dalle piccole alle grandi scale che questo modello non può predire.

La costante di Smagorinsky, inoltre è scelta a priori e non si adatta a quelle zone del campo in cui i gradienti sono molto alti, in cui si ha transizione tra flusso laminare e turbolento, in cui si hanno localmente bassi Reynolds. In tali zone, il modello Smagorinsky è troppo dissipativo, è necessario dunque introdurre delle funzioni che contemplino tutti questi effetti.

Modelli alternativi a Smagorinsky sono riportati di seguito.

### ***b) Modello dinamico.***

L'introduzione del modello dinamico ha apportato significativi progressi nei modelli di sottogriglia di flussi non stazionari. In tale modello, infatti, i coefficienti vengono calcolati dinamicamente e non scelti a priori come nel modello di Smagorinsky. Tale modello si basa sull'introduzione nelle equazioni di Navier-Stokes di un ulteriore filtro  $\hat{G}$ , detto filtro test, di ampiezza  $\hat{\Delta} > \bar{\Delta}$ , ottenendo:

$$\frac{\mathcal{I} \bar{u}_i}{\mathcal{I} t} + \frac{\mathcal{I} (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\mathcal{I} x_j} = -\frac{\mathcal{I} \bar{p}}{\mathcal{I} x_i} + \mathbf{n} \frac{\mathcal{I}^2 \bar{u}_i}{\mathcal{I} x_j^2} - \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I} x_j} (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (\text{B.35})$$

dove  $T_{ij}$  è il tensore degli sforzi di test espresso come:  $T_{ij} = \widehat{u_i u_j} - \widehat{u}_i \widehat{u}_j$ .

Il calcolo dinamico dei coefficienti si basa sull'identità  $\hat{L}_{ij} = T_{ij} - \hat{\mathbf{t}}_{ij}$ , nota come identità di Germano, che relazione le scale degli stress turbolenti  $L_{ij} = \widehat{u_i u_j} - \widehat{u}_i \widehat{u}_j$  con il tensore degli sforzi di sottogriglia e il tensore test.

Per modellare sia  $\hat{\mathbf{t}}_{ij}$  che  $T_{ij}$  viene adottato un modello di tipo eddy viscosity:

$$\hat{\mathbf{t}}_{ij} - \frac{1}{3} \mathbf{d}_{ij} \hat{\mathbf{t}}_{kk} = -2 \mathbf{n}_i \overline{S_{ij}} = -2C \bar{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}} \quad (\text{B.36})$$

$$T_{ij} - \frac{1}{3} \mathbf{d}_{ij} T_{kk} = -2 \mathbf{n}_i \overline{S_{ij}} = -2C \bar{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}}$$

Inserendo queste espressioni nell'identità di Germano, si ottiene per  $L_{ij}$  una espressione del tipo:

$$\hat{L}_{ij} = T_{ij} - \hat{\mathbf{t}}_{ij} = -2C \bar{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}} + 2C \bar{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}} = -2C \left( \bar{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}} - \bar{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}} \right) \quad (\text{B.37})$$

Questo procedimento ha portato ad ottenere un sistema di n equazioni ed una sola incognita C: il sistema ottenuto è quindi sovra determinato e per essere risolto deve essere contratto.

Tra i diversi metodi di contrazione, Lilly ha proposto l'uso di una tecnica di minimi quadrati ottenendo una espressione del tipo:

$$C(y, t) = -\frac{1}{2} \frac{\langle \hat{L}_{ij} M_{ij} \rangle}{\langle M_{ij} M_{ij} \rangle} \quad (\text{B.38})$$

dove  $M_{ij} = \bar{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}} - \bar{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}}$



In questo modo si è ottenuta una chiusura per il modello dinamico.

Il vantaggio di questo modello rispetto al modello di Smagorinsky è che, poiché le costanti sono calcolate di volta in volta, si ha una predizione migliore della soluzione nelle zone a bassi Reynolds, in particolare lì dove il fluido tende a rilaminizzarsi (es. vicino alle pareti).

In tale modello la costante  $C$  può assumere anche valori negativi: il modello dinamico quindi può predire situazioni di cascata inversa di energia.

### B.2.2 Modello di equilibrio

Il modello di equilibrio proposto da Moin e Jimenez si basa sull'ipotesi che la dissipazione

$\mathbf{e} = \mathbf{t}_{ij} \frac{\overline{u_i}}{\overline{x_j}}$  sia costante. Ciò significa che è possibile scrivere una relazione che legghi la

dissipazione di sottogriglia con quella del filtro test, ottenendo:

$$T_{ij} \frac{\overline{u_i}}{\overline{x_j}} = \mathbf{t}_{ij} \frac{\overline{u_i}}{\overline{x_j}} \quad (\text{B.39})$$

Sfruttando nuovamente l'identità di Germano e introducendo l'ipotesi di eddy viscosity si ottiene per il tensore degli sforzi di sottogriglia una espressione del tipo:

$$\mathbf{t}_{ij} - \frac{1}{3} \mathbf{d}_{ij} u^2 = -2\mathbf{n}_i \overline{S_{ij}} = -2C\overline{\Delta}^2 \left| \overline{S} \right| \overline{S_{ij}} \quad (\text{B.40})$$

Ipotizzando che la costante  $C$  possa essere portata fuori dall'operazione di filtro, si ottiene:

$$2C\overline{\Delta}^2 = \frac{L_{ij} \overline{S_{ij}}}{\left| \overline{S} \right| \overline{S_{ij}} - \left| \overline{S} \right| \overline{S_{ij}}} \quad (\text{B.41})$$

Il vantaggio del modello di equilibrio rispetto a quello dinamico è che pur calcolandosi di volta in volta la costante  $C$ , questa viene calcolata da un'equazione scalare e non tensoriale come nel modello precedente. Si ha dunque una sola incognita da risolvere: il problema della contrazione viene aggirato.

Tutti i modelli esposti si basano sull'ipotesi di eddy viscosity, cioè assumendo l'analogia tra il comportamento dei vortici e quello delle molecole (che trasportano quantità di moto, energia e specie) modellizzano il tensore degli sforzi di Reynolds con una legge di tipo trasporto. La viscosità turbolenta diventa dunque una proprietà del flusso turbolento.

### B.2.3 Modelli di combustione

La necessità di introdurre un modello per il termine sorgente delle specie chimiche da introdurre come chiusura nell'equazione dell'energia filtrata deriva dal fatto che le reazioni chimiche avvengono a livello delle strutture fini. Anche se l'approccio LES consente di risolvere le grandi scale occorre introdurre un modello che tenga conto che il volume reagente ha dimensioni molto minori del volume della cella di filtro. È lecito pensare, infatti, che le reazioni avvengano in un volume la cui grandezza caratteristica (in due direzioni) sia quella di Kolmogorov ovvero lì dove il mescolamento avviene a livello molecolare.

Il modello Eddy Dissipation Concept (EDC) sviluppato da Magnussen e Lilljeveie consente di trattare l'interazione tra turbolenza e combustione.

Partendo dalla considerazione che le reazioni chimiche abbiano luogo in zone in cui si ha mescolamento a livello molecolare, l'EDC ipotizza che le reazioni avvengano all'interno di un reattore perfettamente miscelato (Perfectly Stirred Reactor). Si considera che tale reattore abbia una forma tubolare sottile e allungata, in cui il raggio abbia come dimensione caratteristica la scala di Kolmogorov  $h$  e l'altezza abbia invece una dimensione  $L \gg h$ .

All'interno di tale reattore si fanno le seguenti assunzioni:

condizioni stazionarie

reattore omogeneo

reattore adiabatico

i reagenti si trovano a temperatura sufficientemente alta da poter reagire

pressione interna ed esterna al reattore circa uguali

Queste ipotesi sono accettabili solo nel caso di Fast-Chemistry o di equilibrio chimico, ma conducono a risultati inaccettabili nel caso in cui l'inerzia chimica non possa essere trascurata.

In particolare, con tale assunzione sia la dinamica delle strutture fini caratterizzata da tempi corti che l'espansione delle scale reattive dovuta alla combustione, non sono presi in considerazione.

Tali ipotesi sono, inoltre, molto limitative anche nel caso di flusso comprimibili, in cui l'assunzione che la pressione interna ed esterna al reattore siano uguali deve essere adeguatamente giustificata.

Sulla scia delle assunzioni fatte, l'EDC stima sia la frazione di volume  $\gamma^*$  delle strutture fini che il loro tempo di vita  $\tau^*$ .

La frazione di volume viene calcolata sfruttando l'assunzione che il volume di ciascuna struttura è approssimativamente pari a  $h^2L$ , mentre il volume della cella che la contiene è  $hL^2$ , da cui si ricava (a meno di opportune costanti di proporzionalità):

$$g^* \approx \frac{h^2L}{hL^2} = \frac{h}{L} = \left( \frac{ne}{k^2} \right)^{3/4} \quad (\text{B.42})$$

in cui  $\varepsilon$  è la dissipazione turbolenta di energia, e  $k$  è l'energia cinetica turbolenta.

Il tempo di vita  $\tau^*$  del reattore ( a meno di opportune costanti di proporzionalità) si assume essere proprio il tempo caratteristico della scala di Kolmogorov, ovvero il tempo di mescolamento, quindi:

$$t^* \approx \frac{t_L}{\text{Re}_L^{1/2}} = \left( \frac{n}{e} \right)^{1/2} \quad (\text{B.43})$$

Si osservi che tale valore è l'inverso della  $\dot{m}^*$  che rappresenta il trasferimento di massa tra strutture fini e il flusso esterno.

A meno di opportune costanti di calibrazione del modello, il trasferimento di massa tra fine structures e surrounding, diviso per la massa totale è:

$$\dot{m} = \dot{m}^* g^* \approx \left( \frac{ne}{k^2} \right)^{1/4} \frac{e}{k} \quad (\text{B.44})$$

Poiché il rateo di reazione è una funzione lineare di  $\dot{m}$ , si è ottenuta in questo modo una chiusura del problema dell'accoppiamento tra chimica e turbolenza.

Per calcolare le grandezze medie delle celle  $\tilde{\Psi}$ , Magnussen e Lilleheie assumono che tali grandezze siano legate a quelle interne  $\Psi^*$  ed esterne  $\Psi^0$  al reattore attraverso un'operazione di media pesata con la frazione di volume occupata dalle strutture fini:

$$\tilde{\Psi} = c g^* \Psi^* + (1 - c g^*) \Psi^0 \quad (\text{B.45})$$

dove  $c$  è la frazione di volume delle strutture a temperatura sufficientemente elevata da poter reagire.

Sulla base delle precedenti ipotesi, è possibile ottenere un'espressione per la frazione in massa e la temperatura all'interno e all'esterno del reattore:

$$Y_i^* = \tilde{Y}_i + \frac{(1 - c g^*) t^*}{r^*} w_i^* \quad (\text{B.46})$$

$$Y_i^0 = \tilde{Y}_i - \frac{c g^* t^*}{r^*} w_i^* \quad (\text{B.47})$$

$$T^* = \tilde{T} + \frac{(1 - c g^*) t^*}{r^* C_p^* V^*} \dot{Q}^* \quad (\text{B.48})$$

$$T^0 = \tilde{T} - \frac{\mathbf{c} \mathbf{g}^* \mathbf{t}^*}{\mathbf{r}^* V^* C_p^*} \dot{Q}^* \quad (\text{B.49})$$

dove  $Q^*$  è il calore di reazione definito dalla:

$$\dot{Q}^* = V^* \sum_{i=1}^{NS} w_i^* \Delta h_{fi}^0 \quad (\text{B.50})$$

Avendo adottato l'ipotesi di chimica infinitamente veloce, si può assumere che la velocità di comparsa delle specie chimiche sia controllata dalla velocità del trasferimento di massa tra le strutture fini ed il surrounding fluid.

Si ottiene dunque per il termine sorgente da inserire come chiusura nelle equazioni di Navier Stokes la seguente espressione:

$$\bar{w} = \frac{\bar{\mathbf{r}} \mathbf{c} \mathbf{g}^*}{\mathbf{t}^* (1 - \mathbf{g}^*)} Y_{F \min} \quad (\text{B.51})$$

dove  $Y_{F \min}$  è la minima quantità di combustibile in grado di reagire stechiometricamente (dipende dalla specie in difetto).

La (56) permette di ottenere una chiusura per l'accoppiamento tra la cinetica chimica e la turbolenza.

Il modello EDC presenta alcune limitazioni:

si basa sull'assunzione di FAST CHEMISTRY, ovvero assume che i tempi della cinetica chimica siano molto più veloci di quelli del mescolamento. L'ipotesi di FAST CHEMISTRY comporta che, dati i reagenti, i prodotti sono ottenuti solo sulla base della stechiometria: non vengono predette le specie intermedie. Molti codici commerciali di CFD (FLUENT™) danno la possibilità di confrontare il tempo di mescolamento calcolato con EDC con i tempi chimici calcolati con Arrhenius e passare dall'uno all'altro a seconda di quale sia il fenomeno che controlla il processo fisico.

Il modello EDC, inoltre, stima la frazione di volume reagente all'interno della cella di calcolo ed il tempo di vita del reattore, quindi calcola temperatura e specie chimiche all'interno della cella. In questo modo non viene contemplato l'effetto diretto del reattore sul campo fluidodinamico, l'effetto della combustione viene risentito solo attraverso l'incremento di temperatura e la variazione di specie chimiche.

In flussi comprimibili tali approssimazioni sono troppo limitative: è necessario, dunque, introdurre un modello in cui gli effetti della comprimibilità possano direttamente influenzare il campo fluidodinamico.

## BIBLIOGRAFIA

---

- 1 E. T. Curran, *Scramjet Engines: The First Forty Years*, Journal of Propulsion and Power Vol. 17, No 6, Ohio, November –December 2001;
- 2 Q. Watrin, *Study of a two steps reaction process of pyrolysis/reforming for methane and kerosene*, Training course Italy, 2004;
- 3 E. T. Curran, W.H. Heiser and D.T. Pratt, *Fluid Phenomena in Scramjet Combustion System*, Annual Reviews Fluid Mechanics, Vol. 28, pagg. 323 -360, 1996 , [www.annualreviews.org/aronline](http://www.annualreviews.org/aronline);
- 4 Heiser and D. T. Pratt, *Hypersonic Airbreathing Propulsion*, AIAA Education Series, III series, ISBN 1-56347-035-7, Washington, DC, 1994;
- 5 H. Wittenberg, *Some Fundamentals on the Performance of Ramjet with Subsonic and Supersonic Combustion*, TNO PrinsMaurits laboratory, ISBN 90-407-2024-X, The Netherlands, 2000;
- 6 J. L. Hunt, R. J. Pegg, D. H. Petley, *Airbreathing Hypersonic Vision: Operational - Vehicles Design Matrix*, NASA Langley Research Center, ISBN 1999-01-5515, Hampton, VA, 1999;
- 7 L. H. Townend, *Domain of the Scramjet*, Journal Of Propulsion And Power Vol 17, No 6 November – December, 2001;
- 8 U. B. Mehta and J.V. Boweles, *Two-Stage-to Orbit Spaceplane Concept with Growth Potential*, Journal of Propulsion and Power, Vol 17, No 6, November –December 2001;
- 9 T. Kanda, S. Tomioka, S. Ueda, K. Tani, Y. Wakamatsu, *Design of Sub-Scale Rocket-Ramjet Combined Cycle Engine Model*, 56<sup>th</sup> IAC, paper IAC-05-C4.5.03, Fukuoka, Japan, 2005;
- 10 J. W. Hicks, *Flight testing of Airbreathing Hypersonic Vehicles*, NASA Technical Memorandum 4524, Dryden Flight Research Facility, Edwards, California, Ottobre 1993;
- 11 H. Wittenberg, *Some Fundamentals on the performance of Ramjets with Subsonic and Supersonic Combustion*, TNO Prints Maurits Laboratory, Netherlands, 2000;
- 12 L. S. Yanovskiy, and others, *Endothermic fuels - Some aspects of fuel decomposition and combustion at air flows*, ISABE Paper: 99-7067, 14th International Symposium on Air Breathing Engines, Florence, Italy, Sept. 5-10, 1999;
- 13 J. D. Anderson, *Hypersonic and high temperature gas dynamics*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1989
- 14 E. A. Moelwyn-Hughes, *Physical Chemistry*, Second revised edition, Cambridge, 1961;
- 15 E. A. Moelwyn-Hughes, *Physical Chemistry, Ch. 2 Pag 49*, Second revised edition, Cambridge, 1961;
- 16 E. A. Moelwyn-Hughes, *Physical Chemistry, Ch. 2 pag 30*, Second revised edition, Cambridge, 1961;
- 17 C. Park, *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*, John Wiley & Sons, New York ,1989;
- 18 D. Giordano, *The Influence of Medium Comprimibility on Chemical-Reaction Rates, Part I: Theoretical Considerations*, AIAA 2003-4057, 36th AIAA Thermophysics Conference, Orlando, Florida, 23 - 26 June 2003;

- 
- 19 D. D'Ambrosio, D. Giordano, A. Viviani, *The Influence of Medium Comprimibility on Chemical-Reaction Rates; Part II: Numerical Experiments*, AIAA 2003 -4058, 36th AIAA Thermophysics Conference, Orlando, Florida, 23 - 26 June 2003;
- 20 G. Y. Gerasimov and G. Kolesnichenko, *Transport Phenomena in a nonequilibrium dissociative gas, fluid dynamics*, Plenum Publishing Corporation, pp 794-800, Moscow, 1984;
- 21 N. K. Makashev, *The effect of Gas Motion on the reaction Kinetics of the vibrationally excited molecules, fluid dynamics*, Plenum Publishing Corporation, pp 943-949, Moscow, 1985;
- 22 N. K. Makashev, *nonequilibrium dissociation of diatomic molecules in flows with convective and diffusive particle transport, fluid dynamics*, Plenum Publishing Corporation, vol 19, pp. 957-963, Moscow, 1985;
- 23 R. B. Warren, E. Stewart and E. N Lightfoot, *Trasport Phenomena*, Second Edition, John Wiley & Sons, New York, 2002;
- 24 K. K. Kuo - *Principles of Combustion*, John Wiley & Sons, New York, 1986;
- 25 E. Giacomazzi, *Manuale HEART*, in via di pubblicazione;
- 26 H. J. Lugt, *Introduction to Vortex Theory*, Vortex Flow Press, Potomac, Maryland, 1996;
- 27 J. Jimenez, *Intermittency and cascades*, *Journal. Fluid Mechanics*, 1999;
- 28 J. Jimenez, *Coherence in the turbulent cascade*, *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs*, 1999;
- 29 H. J. Lugt, *Introduction to Vortex Theory*, Vortex Flow Press, Potomac, Maryland, 1996;
- 30 S. Pirozzoli and F. Grasso, *Direct numerical simulations of isotropic compressible turbulence: Influence of compressibility on dynamics and structures*, *Phys. Fluids* 16, pag 4386 (2004);
- 31 A. Vincent and M. Meneguzzi, "The spatial structure and statistical properties of homogeneous turbulence" *J. Fluid Mech.* 225, 1 1991;
- 32 Kida and S. A. Orszag, "Entropy budget in decaying compressible turbulence" *J. Sci. Comput.* 5,1 1990;
- 33 S. Pirozzoli, F. Grasso and T. B. Gatski, *Direct numerical simulation and analysis of a spatially evolving supersonic turbulent boundary layer at  $M = 2.25$* , *Phys. Fluids* 16, 530 (2004);
- 34 U. Frisch, *Turbulence- The Legacy of A. N. Kolmogorov*, Chapters 48, Cambridge University Press, Cambridge, 1995;
- 35 M. Lesieur, *Turbulence in fluids*, Martinus Nijhoff Publishers, France, 1987;
- 36 F. A. Williams, *Combustion theory*, 2nd ed., Addison-Wesley, 1985;
- 37 R. W. Bilger, K. N. C. Bray, E. E. O'Brien, C. R. Ferguson, P. A. Libby, A. M. Mellor and F. A. Williams, *Turbulent Reacting Flows*, Springer- Verlag Berlin Heidelberg, New York, 2000;
- 38 Ferrari, *Motori a Combustione Interna, edizioni Capitello, Torino, 2003*;
- 39 S. Turns, *An Introduction to Combustion*, 2000;
- 40 B. F. Magnussen, *The Eddy Dissipation Concept for Turbulent Combustion Modelling, Its Physical and Practical Implications*, Division of Thermodynamics, Norwegian Institute of Technology, N-7034, Trondheim, Norway, October 17, 1989;
- 41 E. Giacomazzi, *Modellistica e Simulazione della combustione turbolenta*, Dottorato di Ricerca in "Meccanica Teorica ed Applicata", XII Ciclo, Dipartimento di Meccanica ed Aeronautica, Università degli Studi di Roma "La

Sapienza”;

42 N. M. Marinov, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, *Transport Phenomena in Combustion*, Vol. 1, Taylor and Francis, Washington, DC, 1996;

43 S. R. Turns, *An Introduction to Combustion, Concepts and Applications*, McGraw Hill International Editions, Singapore, 1996;

44 V. Parisi, *Analisi dell'interazione tra turbolenza e combustione*, Laurea in Ingegneria Aerospaziale, Università degli Studi di Roma “La Sapienza”, 2004;

45 S. Takahashi, S. O. M. Demise, T. Ikeda, *Correlation between Heat Flux Distribution and Combustion Mode in a Scramjet Combustor*, paper ISABE 2001-1191, Bangalore, India, 2001;

46 J. P. Drummond, G. S. Diskin, A. D. Cutler, *Fuel-Air Mixing and Combustion in Scramjets*, Technologies for Propelled Hypersonic Flight, NATO Research and Technology Organization, Working Group 10, RTO Report AVT 10, January 2001.