

POLITECNICO DI TORINO



IMPLEMENTAZIONE DI UNA RETE DI
REATTORI CHIMICI PER LA
VALUTAZIONE DELLE EMISSIONI DI UN
COMBUSTORE AERONAUTICO

MATTEO COMPIERCHIO

S219787

RELATORE: DARIO GIUSEPPE PASTRONE

LAUREA MAGISTRALE IN INGEGNERIA AEROSPAZIALE

DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA MECCANICA E AEROSPAZIALE

MARZO 2019

Waterloo, finally facing my Waterloo

— Abba

INDICE

1	INTRODUZIONE	1
2	EQUAZIONI FONDAMENTALI	7
2.1	Conservazione della massa	7
2.2	Conservazione della quantità di moto	8
2.3	Conservazione dell'energia	10
2.4	Leggi costitutive	11
2.4.1	Legge di Newton	11
2.4.2	Legge di Fick	12
2.4.3	Legge di Fourier	12
2.4.4	Equazione di stato	13
3	CHIMICA	15
3.1	Cinetica chimica	15
3.2	Legge di Arrhenius	17
3.3	La combustione turbolenta	18
3.3.1	Modello Eddy Dissipation (ED)	20
3.3.2	Modello Eddy Dissipation-Finite Rate (ED-FR)	22
3.3.3	Modello Eddy Dissipation Concept (EDC)	22
3.4	Meccanismi cinetici di combustione	25
3.4.1	Meccanismi cinetici dettagliati	25
3.4.2	Meccanismi cinetici globali	26
3.4.3	Meccanismi cinetici globali per il Jet Fuel	29
4	MOTORE REALE	31
4.1	Motore Turbo-gas	31
4.2	Compressore	32
4.3	Combustore	33
4.4	Turbina	40
4.5	Ugello	41
4.6	Descrizione geometrica del combustore reale	42
5	CANTERA	47
5.1	Introduzione	47
5.2	Oggetti	48
5.3	Struttura file mechanism	50
5.4	Reactor	52

5.5	Determinazione del volume dei reattori	54
5.6	Prova di validazione	55
6	REACTOR NETWORK	57
6.1	Introduzione al modello Reactor Network	57
6.2	Surrogati del Jet Fuel	61
6.3	Reactor network implementato	62
6.4	Legge del D^2	65
6.5	Risultati	69
7	CONCLUSIONI	73
I	APPENDICE	75
A	SENSORISTICA	77
B	SCRIPT PER LA RIDUZIONE DI UN MECCANISMO	79
	Bibliografia	80

ELENCO DELLE FIGURE

Figura 1	Crescita della popolazione mondiale	1
Figura 2	RPK passati e stima della crescita	2
Figura 3	Distribuzione della produzione di combustibile nel 2006	4
Figura 4	Variazione della concentrazione di $[A]$, $[C]$ nel tempo	16
Figura 5	Confronto valori sperimentali con legge di Arrhenius	17
Figura 6	Scale dei tempi della chimica e della fluidodinamica	19
Figura 7	Cammini reattivi possibili per la combustione di metano in aria	26
Figura 8	Schema di un ciclo Brayton	31
Figura 9	Derivazione della forma del combustore attuale [11]	33
Figura 10	Condizioni di combustione	34
Figura 11	Spaccato di una camera di combustione	35
Figura 12	Combustore anulare a flusso inverso	36
Figura 13	Esempio di vortice toroidale nella zona primaria	37
Figura 14	Suddivisione fra le zone primaria, secondaria e di diluizione	38
Figura 15	Geometria del turbogetto	42
Figura 16	Dettaglio della girante e del diffusore palettato	43
Figura 17	Flusso dei gas all'interno della camera di combustione	44
Figura 18	Sezione del liner	45
Figura 19	Posizionamento dei sensori	45
Figura 20	Posizione dei sensori per la misura delle T_2 e T_3	46
Figura 21	Reactor Network usato da Starik	57
Figura 22	Andamento della frazione in massa del NO su un piano longitudinale	57
Figura 23	Diagramma schematico del modello a reattore per il com- bustore del TJ SR30.	60
Figura 24	Reactor Network	64
Figura 25	Legge del D^2	66
Figura 26	Sauter Mean Diameter <i>SMD</i>	67
Figura 27	Equivalence ratio	68
Figura 28	Confronto EICO per i tre surrogati	71
Figura 29	Emissioni sperimentali EICO, [16]	71

Figura 30	Confronto EINO _x per i tre surrogati	72
Figura 31	Emissioni sperimentali EINO _x , [16]	72
Figura 32	Posizione dei sensori	77
Figura 33	MiniLab [13]	78

ELENCO DELLE TABELLE

Tabella 1	Elenco dei componenti di un motore turbo-gas con le relative funzioni	32
Tabella 2	Misure della camera di combustione (liner)	44
Tabella 3	Elenco delle variabili misurate dal sistema	46
Tabella 4	Dettaglio delle righe del file mechanism	51
Tabella 5	Proprietà serbatoio	55
Tabella 6	Proprietà reattore	56
Tabella 7	Soluzione stazionaria	56
Tabella 8	Risultati ottenuti da [20], reactor network a 5 reattori	60
Tabella 9	Proprietà termodinamiche dei combustibili usati	62
Tabella 10	Surrogati e meccanismi associati	62
Tabella 11	Risultati Emissioni per il C7H16 al variare dell'evaporato	69
Tabella 12	Risultati Emissioni per il nC10H22 al variare dell'evaporato	69
Tabella 13	Risultati Emissioni per il nC12H26 al variare dell'evaporato	70
Tabella 14	Caratteristiche sensori	78

INTRODUZIONE

Il numero di abitanti del nostro pianeta è cresciuto enormemente dalla metà del XX secolo a oggi: la popolazione mondiale, pari a quasi 8 miliardi di persone, è più che raddoppiata rispetto al 1960, quando la Terra contava circa 3 miliardi di abitanti e si prevede possa raggiungere i 9.6 miliardi entro la prima metà del 2050.

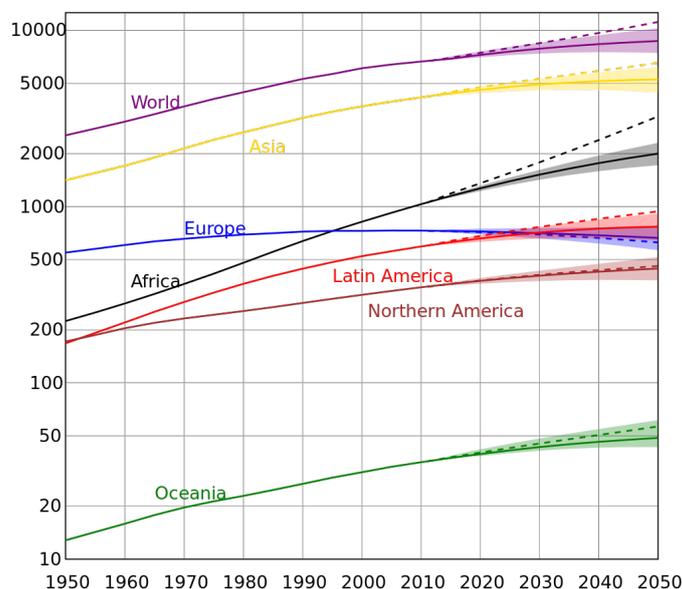


Figura 1: Crescita della popolazione mondiale

L'ordinata è in scala logaritmica ed è espressa in milioni di persone. A questo aumento demografico è corrisposto un intensificarsi delle attività antropiche, con conseguente aumento di emissioni nocive per l'ambiente. Le emissioni dei *gas serra* derivano principalmente dall'impiego di combustibili fossili ad oggi utilizzati in qualsiasi tipo di attività, dall'industria all'agricoltura. Per questo motivo sono state messe in atto una serie di provvedimenti atti a diminuire, o quantomeno prevenire, il sempre crescente aumento di agenti inquinanti e incentivare l'uso di tecnologie eco sostenibili. Un esempio è il *Protocollo di Kyoto*, in vigore a partire dal 16 febbraio 2005, questo trattato prevede l'obbligo di operare una riduzione delle emissioni di agenti inquinanti in misura non inferiore all'8.65% rispetto alle emissioni registrate nel 1985 nei paesi aderenti

(l'Italia è tra questi). Per quanto riguarda l'industria aeronautica è prevista una crescita annuale del 5%, con conseguente aumento dell'impiego di combustibili derivanti da petrolio, come descritto in [10].

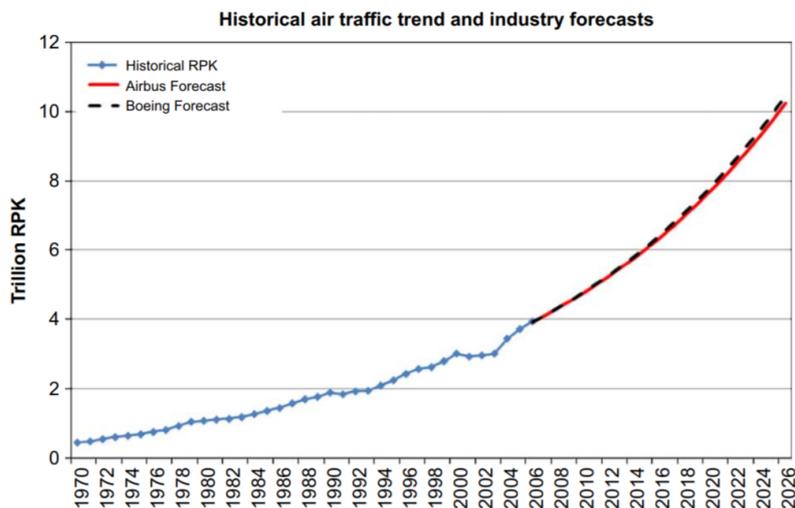


Figura 2: RPK passati e stima della crescita

La figura mostra i dati di RPK (revenue passenger kilometre) e la relativa crescita stimata da Boeing e Airbus fino al 2026. Il numero di passeggeri è aumentato in media del 4.9% all'anno dal 1970 e al 2006 più di due miliardi di persone hanno volato, che corrisponde ad una crescita del 6.1% all'anno misurata in RPK.

Lo studio del mercato aeronautico dimostra come questo è debolmente collegato alla crisi economica avvenuta nel corso degli ultimi anni; i dati sulla crescita economica di aree esterne all'Europa e all'America rassicurano sulla stabile crescita del mercato ed inducono a pensare a nuove categorie di velivoli in grado di sfruttare al meglio le caratteristiche dei paesi emergenti. Nell'ottica della riduzione delle emissioni inquinanti si sono seguite diverse strade, che spaziano dall'aumento dell'efficienza nella conversione energetica a specifiche soluzioni riguardo la chimica della combustione (vedere ad esempio la *water injection* nelle fasi di taxi e decollo per ridurre le emissioni di NO_x). Le emissioni principali dei motori aeronautici sono:

- Biossido di Carbonio (CO_2): intrappola le radiazioni infrarosse emesse dalla superficie terrestre verso l'esterno riflettendone una parte indietro;
- Monossido e Diossido di Azoto (NO e NO_2 , generalmente identificati con NO_x): influenzano l'ozono nelle diverse zone dell'atmosfera;

- Vapore acqueo (H₂O): responsabile delle scie di condensazione che portano ad un raffreddamento della superficie terrestre;
- Idrocarburi;
- Particolato Carbonioso;

Gli ossidi di carbonio sono composti generalmente piuttosto stabili tanto che le uniche reazioni, non interessanti le loro interazioni con le grandi biomasse ambientali (mari, vegetazione, inerti), avvengono a livello della troposfera e sono fondamentalmente volte alla conversione di CO in CO₂, grazie alla azione di radicali perossidrilici e idrossilici formati da reazioni fotochimiche. Elevate quantità di CO sembrano portare ad una riduzione della capacità di fissare l'azoto da parte dei batteri presenti sulle radici delle piante con conseguente ridotta capacità di sviluppo della vegetazione. L'organismo umano nella sua funzione respiratoria è largamente indipendente dalle variazioni rilevate del livello di CO₂ in atmosfera e quindi generalmente per questo motivo non viene analizzata sistematicamente. In ambienti chiusi, al contrario, la CO₂ potrebbe diventare un potenziale veleno, il suo accumulo porta a fenomeni di soffocamento progressivo e, già a concentrazione eccedenti il 6%, all'insorgere di danni acuti. Per la vegetazione quantitativi attorno all' 1% non sono dannosi, infatti portano ad incrementare l'assimilazione e quindi ad un aumento della crescita. Per quanto riguarda gli effetti del CO sulla salute umana è nota la sua pericolosità data dalla capacità di fissarsi a livello emoglobinico circa 200 volte maggiore di quella dell'ossigeno. Questo porta ad una immediata riduzione delle capacità vitali e di conseguenza, permanendo in zone in cui il CO sia presente in quantità elevate, la morte, motivo per cui il suo essere inodore lo rende un micidiale killer. Ciascuna di queste emissioni reagisce con le specie chimiche presenti in atmosfera e queste reazioni portano ad un aumento del forzante radiativo, generalmente espresso in [W/m²], che è un indicatore delle variazioni che subisce il bilancio energetico del sistema Terra-atmosfera influenzato da un determinato fattore (ad esempio l'aumento dell'anidride carbonica o di altri gas serra nell'atmosfera).

Gli ossidi di azoto, insieme al SO_x, sono il principale contribuente alle piogge acide in quanto il biossido di azoto NO₂ a contatto con l'umidità dell'aria genera acido nitrico; anche in concentrazioni basse, 1 ppb in aria non inquinata, causano irritazioni respiratorie, favoriscono la formazione di ozono al livello del suolo, ed essendo fortemente ossidante tende a danneggiare le mucose e generare infezioni, e di particolato secondario contribuendo all'impoverimento

dello strato di ozono stratosferico; inoltre il protossido di azoto N_2O è anche un potente gas serra.

Il consumo di combustibile risulta non strettamente collegato con la crescita della popolazione mondiale grazie all'aumento dell'efficienza nella tecnologia e nella gestione del trasporto. Dal 1960 i velivoli sono diventati il 75% più silenziosi e ridotto il *Thrust Specific Fuel Consumption* del 40%, [10]. L'Association of European Airlines afferma che il consumo medio di combustibile è inferiore al 51/100 RPK e che i moderni velivoli consumano circa 3.5 l/100 RPK.

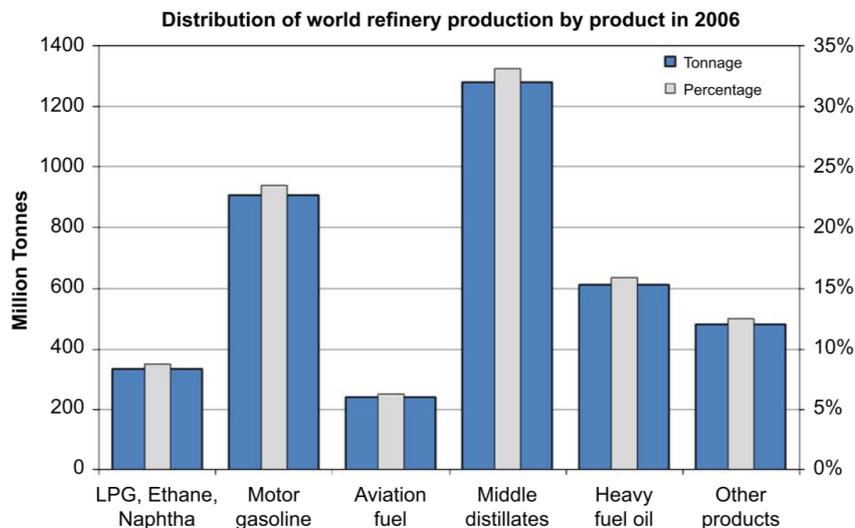


Figura 3: Distribuzione della produzione di combustibile nel 2006

La fig. 3 mostra il trend di consumo medio di combustibile per l'intera flotta aeronautica. Comunque l'industria e la politica europea si sono poste come obiettivo un aumento pari al 50% di efficienza prima del 2020, raggiungibile rimpiazzando i vecchi velivoli e migliorando la gestione del traffico, diminuendo sia le emissioni di CO che il consumo di combustibile.

Il combustibile di maggior uso in campo aeronautico è il *Jet Fuel*, originato come olio ed estratto da una frazione di kerosene. Si stima che nell'arco temporale 2006-2026 possano verificarsi tre diversi scenari:

- il traffico aereo continuerà a salire secondo i trend stimati e il consumo medio di combustibile resterà invariato;
- il consumo medio di combustibile per la flotta aerea mondiale nel 2020 sarà la metà di quello del 2005;

- il traffico aereo continuerà a crescere così come il consumo di combustibile ma seguendo una legge ottenuta estrapolando la media dei consumi negli anni 1987-2007.

Per cercare di soddisfare qualsiasi scenario presentato, l'industria aeronautica è in continua ricerca di combustibili surrogati che possano rimpiazzare il Jet Fuel convenzionale ad esempio usando bio combustibili. Generalmente i bio derivati del Jet Fuel, vengono ricavati da oli vegetali o grassi animali ma per evitare influenze sul prezzo, nel futuro verranno ricavati da oli non edibili come ad esempio *Jatropha Curcas* e oli di *Pongamia Pinnata* [12]. Il *Lower heating Value - LHV* - dei bio fuels è più basso di quello del jet fuel convenzionale ma questi hanno lo svantaggio di avere un *Freezing Point* molto alto e questo comporta problemi di operatività ad alte altitudini e temperature molto basse.

Ricerche hanno dimostrato che i bio combustibili hanno emissioni di CO ed NOx molto simili a quelle dei Jet Fuels, comunque l'uso di bio fuels porta ad una riduzione di idrocarburi incombusti (UHC) e di particolato (soot, particelle composte di carbonio con piccoli contributi di H ed O) a causa delle differenze nella densità, viscosità e tensione superficiale e le principali proprietà termodinamiche che influenzano il diametro della goccia.

EQUAZIONI FONDAMENTALI

Per studiare qualsiasi problema fluidodinamico è necessario definire quali sono le equazioni di governo del problema, cioè le equazioni di conservazione di massa, quantità di moto ed energia.

2.1 CONSERVAZIONE DELLA MASSA

Per poter definire la conservazione della massa ne andiamo a considerare la variazione nell'unità di tempo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_S \rho \bar{q} \cdot \bar{n} ds + S$$

Il termine sorgente è presente in caso di reazioni chimiche che generano nuova massa, in questo caso possiamo trascurarlo; l'integrale di superficie rappresenta il flusso netto di massa attraverso la superficie S. Posso quindi riscrivere la precedente come:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_S \rho \bar{q} \cdot \bar{n} dS = 0$$

Per definire il segno del vettore guardo la velocità \bar{q} : se \bar{q} e \bar{n} sono concordi allora il flusso è uscente, la massa diminuisce e quindi il segno è negativo.

Riscriviamo la relazione come:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_V \nabla (\rho \bar{q}) dV = 0$$

Posso raggruppare

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla (\rho \bar{q}) \right] dV = 0$$

Per essere verificata la relazione, la funzione integranda deve essere nulla:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla (\rho \bar{q}) = 0 \quad (1)$$

Questa scrittura è ottenuta indipendentemente dal sistema di riferimento; al variare del sistema di riferimento cambiano le componenti di ∇ :

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$$

In forma esplicita abbiamo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho w)}{\partial z} = 0$$

con $\vec{q} = u \vec{i} + v \vec{j} + w \vec{k}$. Per un problema 1D l'equazione precedente diventa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0$$

Adesso introduciamo un sistema di riferimento cartesiano e indico con $\vec{n} = n_x \vec{i} + n_y \vec{j} + n_z \vec{k}$ le componenti della normale di tale sistema di riferimento, possiamo adesso scrivere l'equazione di conservazione della massa in una forma non conservativa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{q} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \vec{q} = 0 \quad (2)$$

in cui il primo termine rappresenta la derivata locale, il secondo termine la derivata convettiva. Riscriviamo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial y} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

in cui i primi termini sono le derivate delle grandezze primitive che descrivono lo stato del sistema.

Introducendo la derivata totale

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{q} \cdot \nabla$$

possiamo riscrivere la conservazione della massa come:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \vec{q} = 0 \quad (3)$$

2.2 CONSERVAZIONE DELLA QUANTITÀ DI MOTO

Assumendo \vec{n} positivo verso l'esterno, ricaviamo la conservazione della quantità di moto a partire da

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \vec{q} dV = - \int_S (\rho \vec{q}) \vec{q} \cdot \vec{n} dS + \vec{F}$$

il vettore \bar{F} può essere scomposto considerandolo come somma di forze esterne (interagiscono con il volume V senza che ci sia contatto):

$$\bar{F}_e = \rho \bar{f}_e dV$$

e forze di superficie (interagiscono agendo sulla superficie):

$$\bar{F}_s$$

Adesso prendiamo un punto appartenente ad una superficie e consideriamo il piano passante per quel punto. Identifico la normale \bar{n} e di conseguenza $\bar{\sigma}_n$ e $\bar{\tau}_n$. Considerando un elemento di superficie ΔS posso definire la forza $\Delta \bar{F}$, cioè la forza che il fluido da un lato del piano esercita sul fluido dall'altra parte del piano attraverso la superficie ΔS :

$$\bar{\sigma}_n = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta \bar{F}}{\Delta S}$$

Variando l'orientamento del piano varia anche la σ ; introduciamo

$$\bar{\sigma} = -p_n \bar{n} + \bar{\tau}_n = -p \bar{n} + \bar{\tau}_n$$

in cui $\bar{\tau}_n$ è definito come lo sforzo di attrito viscoso, nasce dal contatto di particelle in moto relativo se il flusso è in quiete e in caso di fluido ideale (cioè non viscoso); $p_n \bar{n}$ è indipendentemente dall'orientamento del piano, è una forza di compressione.

L'insieme dei $\bar{\sigma}_n$ costituiscono lo stato di tensione del punto. Se conosciamo le tre tensioni dei tre piani cartesiani ortogonali tra di loro, allora conosco lo stato di tensione del punto. Lo stato di tensione del punto è allora definito tramite il tensore delle tensioni:

$$\bar{\bar{\sigma}} = (\bar{\sigma}_x, \bar{\sigma}_y, \bar{\sigma}_z) = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

in cui vediamo tre componenti vettoriali, cioè nove componenti scalari. In forma compatta lo indichiamo con σ_{ij} con $i = 1, 2, 3$ e $j = 1, 2, 3$. Dato che la matrice è simmetrica ci riduciamo a sei componenti indipendenti

$$\bar{\sigma}_n = \bar{\bar{\sigma}} \cdot \bar{n}$$

Possiamo scrivere in forma compatta la legge di conservazione della quantità di moto:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \bar{q} dV + \int_S (\rho \bar{q}) \bar{q} \cdot \bar{n} dS = \int_S \bar{\sigma}_n dS + \int \rho \bar{f}_e dV \quad (4)$$

Essendo il volume fisso nello spazio possiamo portare dentro la derivata nel tempo, scrivendo la forma differenziale della conservazione della quantità di moto:

$$\frac{\partial (\rho \bar{q})}{\partial t} + \nabla (\rho \bar{q} \bar{q}) = \nabla \bar{\sigma} + \rho \bar{f}_e \quad (5)$$

2.3 CONSERVAZIONE DELL'ENERGIA

Dal primo principio della termodinamica

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dQ}{dt} + \frac{dL}{dt}$$

con

$$E = e + \frac{q^2}{2}$$

consideriamo la particella per scrivere l'equazione di trasporto dell'energia per effetto del flusso del moto:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho E) dV = - \int_S (\rho E) \bar{q} \bar{n} dS - \int_S q_T \bar{n} ds$$

in cui q_T è il flusso termico. Definiamo dL come il lavoro fatto da tutte le forze che agiscono sul sistema, scrivendolo come:

$$dL = \int_S \bar{\sigma}_n \bar{q} dS + \int_V \rho \bar{f}_e \bar{q} dV$$

Possiamo allora scrivere la forma integrale della conservazione dell'energia:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho E) dV + \int_S (\rho E) \bar{q} \bar{n} dS = \int E \bar{q} \bar{n} dS + \int \rho \bar{f}_e \bar{q} dV - \int q_T \bar{n} ds \quad (6)$$

Passiamo alla forma differenziale:

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} dV + \nabla (\rho E \bar{q}) = \nabla (\bar{\sigma} \cdot \bar{q}) dV + \rho \bar{f}_e \bar{q} - \nabla q_T \quad (7)$$

Se la riscriviamo come

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} + E \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \rho \bar{q}) E + \rho \bar{q} \nabla E = \nabla (\bar{\sigma} \cdot \bar{q}) - \nabla \bar{q}_T + \rho \bar{f}_e \bar{q}$$

e applicando l'equazione delle continuità possiamo semplificare in:

$$\rho \left(\frac{\partial E}{\partial t} + \bar{q} \nabla E \right) = \nabla (\bar{q} \cdot \bar{q}) - \nabla \bar{q} + \rho \bar{f} \bar{q}$$

ed introducendo la derivata totale scriviamo:

$$\rho \frac{dE}{dt} = \nabla (\bar{\sigma} \cdot \bar{q}) - \nabla \bar{q}_T + \rho \bar{f}_e \bar{q} \quad (8)$$

2.4 LEGGI COSTITUTIVE

Le equazioni di conservazione rappresentano un sistema di equazioni differenziali, il cui numero è però inferiore al numero delle incognite rendendo il sistema indeterminato. Le incognite del problema sono la densità ρ , la velocità del fluido \bar{q} , la pressione p , l'energia E , le frazioni N_C e ω_k , il tensore degli sforzi $\bar{\sigma}$, il flusso diffusivo molecolare \bar{j}_k e il flusso termico \bar{q}_T . Le leggi costitutive sono delle relazioni necessarie per determinare le ultime tre incognite. È necessaria poi un'equazione di stato per determinare le variabili termodinamiche della miscela di gas.

2.4.1 Legge di Newton

Il tensore degli sforzi $\bar{\sigma}$ per i fluidi newtoniani è la velocità molecolare di trasporto della quantità di moto e può essere espresso usando la forma generalizzata della legge di Newton:

$$\bar{\sigma} = 2\mu \bar{D} - \left(p + \frac{2}{3}\mu \nabla \bar{q} \right) \bar{I} = \left(2\mu \bar{D} - \frac{2}{3}\mu \nabla \bar{q} \bar{I} \right) - p \bar{I} = \bar{\tau} - p \bar{I} \quad (9)$$

in cui si definisce con μ la viscosità dinamica, \bar{I} il tensore identità, p la pressione statica, \bar{D} il tensore delle deformazioni.

$$\bar{D} = \frac{1}{2} [\nabla \cdot \bar{q} + (\nabla \cdot \bar{q})^T] \quad (10)$$

Il tensore $\bar{\tau}$ rappresenta la parte viscosa del tensore degli sforzi $\bar{\sigma}$. Si può esprimere che:

$$\bar{\tau} = 2\mu\bar{D} - \frac{2}{3}\mu\nabla\bar{q}\bar{I} \quad (11)$$

In coordinate cartesiane risulta:

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} = \left(2\mu D_{ij} - \frac{2}{3}\mu\frac{\partial q_j}{\partial x_i}\delta_{ij}\right) - p\delta_{ij} \quad (12)$$

Invece il tensore delle deformazioni risulta:

$$D_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial q_i}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_i}\right) \quad (13)$$

in cui δ_{ij} è l'indice di Krönecker, pari all'unità quando $i = j$ e nullo altrimenti.

2.4.2 Legge di Fick

Il flusso diffusivo può essere determinato risolvendo il sistema seguente:

$$\nabla X_k = \sum_{p=1}^{N_C} \frac{X_k X_p}{\Gamma_{kp}} (V_p - V_k) + (\omega_k - X_k) \frac{\nabla p}{p} + \frac{\rho}{p} \sum_{p=1}^{N_C} \omega_k \omega_p (f_k - f_p) \quad (14)$$

in cui Γ_{kp} è definito come il coefficiente binario di diffusione della specie k -esima nella specie p , X_k è la frazione molare della specie k -esima. Per ragioni di costo computazionale si sfrutta la legge di Fick che permette il calcolo della velocità diffusiva, o flusso molecolare diffusivo, come:

$$\omega_k \bar{V}_k = -\Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k \quad (15)$$

$$\bar{j}_k = -\rho \cdot \Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k \quad (16)$$

in cui $\Gamma_{k,mix}$ è il coefficiente della specie k -esima contenuta nella miscela.

2.4.3 Legge di Fourier

Il flusso termico è determinato sommando il contributo dato da Fourier e il contributo associato alla diffusione delle specie con diversa entalpia:

$$\bar{q}_T = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k \omega_k \bar{V}_k \quad (17)$$

in cui si definisce con λ la conducibilità termica, \hat{H}_k l'entalpia della specie k-esima.

2.4.4 *Equazione di stato*

Con l'equazione di stato si esprime una variabile in funzione di altre due variabili del sistema, come ad esempio:

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

Si fa l'ipotesi che il comportamento della miscela sia approssimabile a quello del gas perfetto. Si introduce quindi l'equazione di stato:

$$p = \rho RT \quad \hat{U} = \hat{C}_V T \quad (18)$$

CHIMICA

3.1 CINETICA CHIMICA

La termodinamica chimica si occupa di studiare le variazioni di energia ed entropia che avvengono durante lo svolgimento della reazione chimica a partire dalle condizioni iniziali per arrivare alla condizione di equilibrio. Per studiare la velocità con cui una reazione si completa usiamo la cinetica chimica, che si occupa di studiare la velocità con cui avvengono le reazioni chimiche e dei meccanismi secondo i quali queste evolvono. Inoltre si occupa anche dei prodotti intermedi formati durante la reazione.

Affinché una reazione possa avvenire è necessario che i reagenti vengano in contatto, avviene un urto tra le particelle anche se questo può non sempre essere efficace e la probabilità che lo sia è inversamente proporzionale al numero di particelle: una reazione con alta probabilità può avvenire tra due particelle, con media probabilità tra tre particelle e così via. Quindi si capisce perché le reazioni devono avvenire secondo più stadi.

Oltre alla conoscenza delle grandezze termodinamiche, è di fondamentale importanza conoscere la velocità con cui la reazione ha luogo. Considerando la reazione generica:



man mano che la reazione avanza le quantità A e B diminuiscono mentre C e D aumentano sempre più.

La velocità di una reazione chimica fornisce una misura della rapidità con cui evolve la reazione dalle condizioni iniziali fino al raggiungimento delle condizioni di equilibrio.

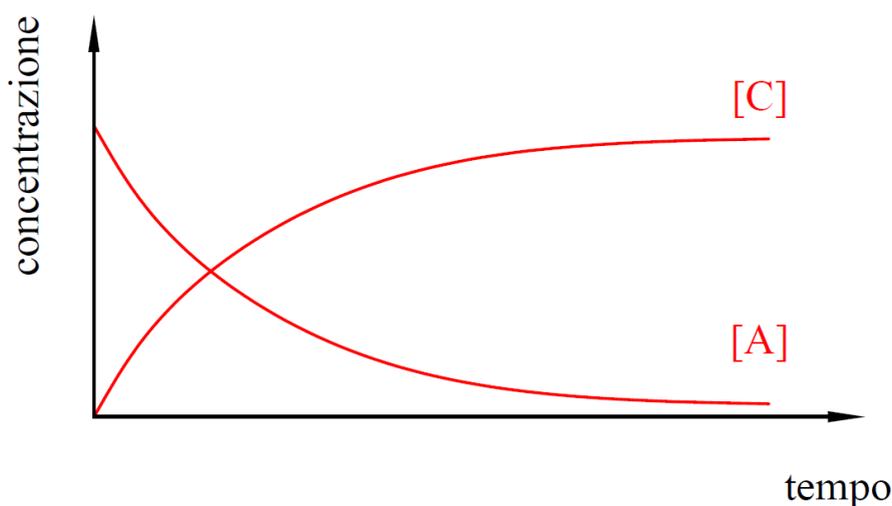


Figura 4: Variazione della concentrazione di [A], [C] nel tempo

Per come è definita è una quantità strettamente positiva. Una prima definizione della velocità per una generica reazione può essere espressa come la diminuzione del numero di moli A o B in un dato intervallo temporale ΔT oppure in maniera speculare come l'aumento del numero di moli C o D in un dato intervallo temporale ΔT .

$$v = \frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$

questa è la velocità media nell'intervallo di tempo, non fornisce alcuna informazione per il singolo istante nel corso del completamento della reazione. Per ottenere l'info istantanea si introduce la velocità istantanea, definita come:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = \frac{d[A]}{d t}$$

Da un punto di vista geometrico nel diagramma con cui si riporta l'andamento della concentrazione in funzione del tempo, questa velocità altro non è che la pendenza della retta tangente alla curva al tempo t . La velocità della reazione dipende anche dalla natura chimica dei legami molecolari poichè, durante lo svolgersi della reazione, alcuni si rompono mentre altri si formano. Per lo studio cinetico della reazione chimica andiamo a considerare la sua legge cinetica. Considerando sempre la generica reazione globale, definiamo la legge cinetica come:

$$v = k[A]^m[B]^n \quad (19)$$

in cui k è definita come costante di velocità specifica e rappresenta la velocità

iniziale della reazione quando i reagenti hanno concentrazione unitaria, mentre la somma degli esponenti m e n (non necessariamente sono pari ad a e b) rappresenta l'ordine globale della reazione. La legge cinetica espressa da questa equazione fornisce una quantità sempre positiva e indica la velocità di evoluzione del sistema. Sperimentalmente può essere ottenuta, nel caso in cui siano presenti più reagenti, determinando le velocità iniziali e mantenendo costanti le concentrazioni di tutte le specie reagenti ad eccezione della concentrazione di una di esse che di volta in volta viene cambiata.

3.2 LEGGE DI ARRHENIUS

Sperimentalmente si può osservare che all'aumentare della temperatura aumenta la velocità della reazione, da cui si trova il legame tra la costante di velocità k e l'esponentiale dell'inverso della temperatura assoluta T secondo la *Legge di Arrhenius*:

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (20)$$

in cui A è una costante caratteristica della reazione e serve a considerare il contributo dell'entropia, E_a è l'energia di attivazione e cioè l'energia minima per innescare la reazione chimica, R è la costante universale dei gas perfetti. È una dipendenza basata sulla distribuzione di Boltzmann, da qui viene il significato fisico di A cioè esprime sia la frequenza delle collisioni tra le molecole reagenti sia l'entropia dello stato attivato (entropia di attivazione).

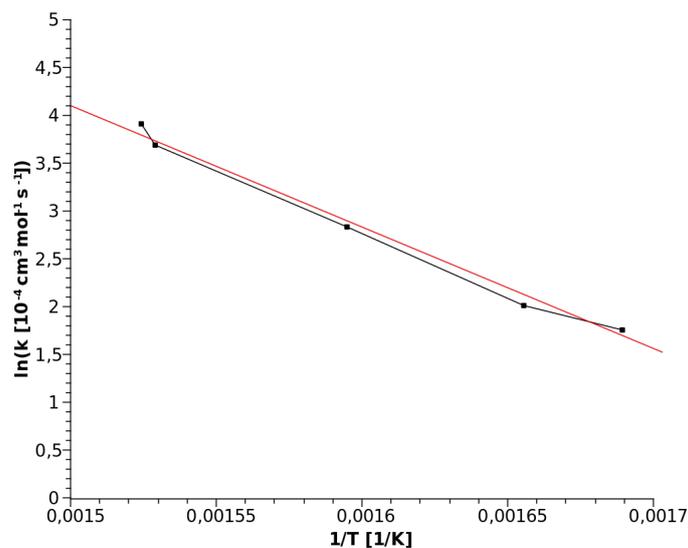
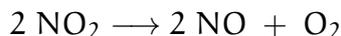


Figura 5: Confronto valori sperimentali con legge di Arrhenius

Considerando la reazione



possiamo diagrammare $\ln(k) = f(1/T)$ si trova una relazione quasi lineare con coefficiente angolare E_a/R . In nero sono rappresentati i punti sperimentali mentre in rosso è riportata la retta che interpola tali punti: in caso di confronto tra due reazioni, la retta dell'equazione favorita, per temperatura data, è quella con ordinata minore. La retta con l'ordinata minore è quella con la minore energia di attivazione. Variando la temperatura dell'ambiente di reazione siamo in grado di favorire l'avanzamento di una reazione rispetto un'altra competitiva, stiamo cioè aumentando la velocità di reazione.

3.3 LA COMBUSTIONE TURBOLENTA

I processi chimici e fisici alla base della combustione turbolenta sono molto complessi e tra loro interconnessi. L'ossidazione degli idrocarburi avviene mediante reazioni chimiche elementari a catena (in cui sono coinvolti anche radicali) la cui velocità è controllata essenzialmente dalla temperatura e dalla concentrazione di reagenti e prodotti (come descritto nel paragrafo sulla legge di Arrhenius). Tuttavia se il campo di moto in cui avviene il processo di combustione è turbolento allora la velocità con cui le reazioni hanno luogo varia fortemente in funzione delle fluttuazioni locali delle proprietà del campo di moto tipiche della turbolenza. Una accurata modellazione della combustione turbolenta deve quindi tener conto della forte interazione tra il flusso turbolento e le velocità di combustione.

Alla base di ogni modello di combustione c'è la formulazione delle equazioni di bilancio per l'energia e per le specie chimiche. Se consideriamo una miscela di n specie chimiche l'equazione di trasporto della frazione massica Y_i della specie i -esima si esprime come:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \bar{V} Y_i) = -\nabla \cdot \bar{j}_i + \omega_i \quad (21)$$

in cui definiamo con \bar{j}_i il flusso diffusivo (ovvero il processo di trasporto molecolare) e con ω_i il termine di produzione dovuto alle reazioni chimiche.

L'equazione di bilancio dell'energia per un flusso reattivo, nell'ipotesi di trascurare lo scambio termico radiativo mantenendo la pressione costante, può essere espresso in termini di temperatura:

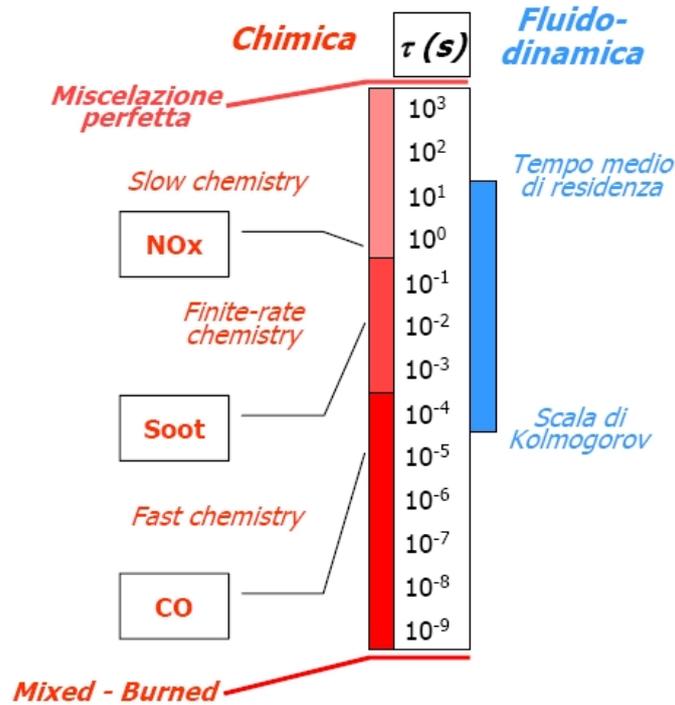


Figura 6: Scale dei tempi della chimica e della fluidodinamica

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \bar{V} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{i=1}^n c_{p_i} \bar{j}_i \cdot \nabla T - \sum_{i=1}^n h_i \omega_i \quad (22)$$

L'entalpia specifica della specie i -esima h_i è composta da due parti: l'entalpia di formazione, rappresentativa dell'energia di legame, e l'entalpia sensibile, che per un gas ideale dipende solo dalla temperatura:

$$h_i = h_{i,f}^{(0)} + \int_{T_0}^T c_{p_i}(T) dT \quad (23)$$

Nella modellazione di flussi reagenti in regime turbolento assume quindi un ruolo di primaria importanza il modo in cui la velocità (media) di produzione, o scomparsa della specie i -esima, viene valutata.

Nei processi di combustione, i tempi caratteristici della chimica possono oscillare da valori molto bassi (10^{-9} s) a valori elevati (10^2 s), con un Δ quindi di più di dieci ordini di grandezza. Tale scala di tempi è da confrontarsi con quella caratteristica della turbolenza: questa copre un intervallo che va dal valore del tempo caratteristico associato ai vortici di *Kolmogorov* fino al tempo di residenza associato alla macroscale, passando attraverso diverse condizioni di micromiscelazione turbolenta differenti. La scala della turbolenza quindi copre un intervallo da 10^2 s a 10^{-5} s come indicato in figura 6.

Dati questi intervalli della scala dei tempi chimici e turbolenti, possiamo individuare tre regimi differenti:

- chimica veloce (fast chemistry), quando il tempo chimico è minore del tempo caratteristico dei vortici di *Kolmogorov*;
- chimica lenta (slow chemistry), quando il tempo chimico è maggiore del tempo di miscelazione τ_{mix} ;
- finite rate chemistry tra i due comportamenti precedenti.

Solitamente è possibile discriminare tra le due situazioni differenti di chimica veloce e lenta, basandosi sul rapporto tra il tempo di micro-miscelazione e il tempo chimico della specie j -esima. Tale rapporto è definito come il numero adimensionale di *Damköhler* della specie j -esima:

$$Da_j = \frac{\tau_{\text{mix}}}{\tau_{C,j}} \quad (24)$$

Un modello di interazione cinetica-turbolenza nella valutazione del termine sorgente chimico deve necessariamente tenere in considerazione il rapporto tra i tempi della turbolenza e della chimica.

3.3.1 *Modello Eddy Dissipation (ED)*

Il modello *Eddy Dissipation (ED)* si basa sul lavoro di [2]. Sia nelle fiamme turbolente premiscelate che in quelle non premiscelate, le scale temporali con cui la turbolenza riesce a miscelare i reagenti (tra loro o con i gas combustibili caldi) sono molto maggiori dei tempi caratteristici con cui hanno luogo le reazioni di ossidazione: si parla quindi di combustione limitata dal mescolamento (mixing-limited) e la cinetica chimica può essere trascurata. La velocità di reazione può allora essere valutata in base alla velocità di miscelamento sulle scale molecolari dei vortici che trasportano il combustibile e l'ossidante (in genere l'ossigeno contenuto nell'aria) rispettivamente. Dal momento che le concentrazioni di ossigeno e combustibile, come tutte le proprietà di un campo di moto turbolento, sono quantità fluttuanti, ci sarà una correlazione tra il loro valore medio e tali fluttuazioni. Dunque possiamo esprimere la velocità di dissipazione dei vortici in funzione della concentrazione media delle specie reagenti.

La velocità netta di produzione della specie i -esima dovuta alla reazione r -esima, $\omega_{i,r}$, è data quindi da:

$$\omega_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right) \quad (25)$$

in cui si definiscono le seguenti quantità:

- $v'_{i,r}$ è il coefficiente stechiometrico per la specie reagente i -esima nella reazione r -esima
- $M_{w,i}$ è il peso molecolare della specie i -esima
- A è una costante empirica che dipende dalla struttura della fiamma
- k è l'energia cinetica turbolenta e ε la dissipation rate

Nelle fiamme turbolente premiscelate, combustibile e comburente coesistono negli stessi vortici. Questi ultimi sono separati dai vortici che contengono i gas combusti caldi (che trasferiscono alla carica fresca il calore necessario all'inizio della combustione). Per tener conto della possibilità che la concentrazione dei gas combusti sia bassa, si considera un'altra velocità di reazione (che rappresenta la velocità di dissipazione dei vortici caldi) con cui confrontare la precedente:

$$\omega_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v''_{j,r} M_{w,j}} \quad (26)$$

in cui:

- $v''_{j,r}$ è il coefficiente stechiometrico per il prodotto i -esimo nella reazione r -esima
- B è una costante

L'equazione che restituisce la velocità di reazione più bassa è quella che determina la velocità locale della combustione. Per tener conto che nelle fiamme premiscelate l'accensione della miscela avviene quando questa giunge nei pressi della fiamma, una variante di questo tale modello, il *Finite Rate Eddy Dissipation*, che confronta la velocità di reazione prima determinata con quella ottenibile considerando il meccanismo controllato esclusivamente dalla cinetica chimica, quindi dalla velocità di reazione di Arrhenius, e sceglie la più bassa: le velocità di Arrhenius agiscono come un "controllore" cinetico che previene l'accensione della miscela prima della fiamma. Quando questo modello viene applicato in simulazioni fluidodinamiche le costanti A e B devono essere scelte considerando il particolare problema.

3.3.2 Modello *Eddy Dissipation-Finite Rate* (ED-FR)

Il modello *Eddy Dissipation-Finite Rate* è basato sull'ipotesi che la velocità che governa il processo sia la minore tra la velocità di reazione secondo Arrhenius r_A e la velocità di miscelazione turbolenta (legata alla velocità di reazione dell'ossidante r_O , del combustibile r_F e alla velocità di propagazione della fiamma r_S). La velocità viene allora valutata come la minore tra le precedenti:

$$\dot{\Omega} = \min(\dot{\Omega}_A, \dot{\Omega}_O, \dot{\Omega}_F, \dot{\Omega}_S) \quad (27)$$

Secondo la relazione del precedente modello *Eddy Dissipation*, nel caso in cui ci sia turbolenza non c'è necessità di avere una fonte di accensione: è accettabile nei sistemi con fiamme non premiscelate, mentre nelle fiamme premiscelate combustibile e ossidante iniziano a bruciare non appena entrati nel dominio computazionale, in zone dove non è prevista la presenza di fiamma (ad esempio a monte dello stabilizzatore di fiamma).

Questo è quindi il motivo dell'esistenza di un modello di interazione cinetica-turbolenza come l'*Eddy Dissipation-Finite Rate* che, calcolando sia la velocità secondo Arrhenius che la velocità dovuta alla turbolenza e scegliendo il minimo tra questi due valori, evita anomalie nelle simulazioni. Sottolineiamo l'importanza della velocità di Arrhenius in questa formulazione in quanto essa regola la formazione della fiamma: a monte di uno stabilizzatore di fiamma essa è lo step limitante poi, una volta che la fiamma è accesa, è più veloce e il sistema è controllato dalla miscelazione.

In certe condizioni questo approccio può condurre a significative deviazioni, in particolare si rivela poco adatto ad essere impiegato con schemi cinetici di complessità elevata, in quanto mostra gli stessi limiti del modello *Eddy Dissipation*.

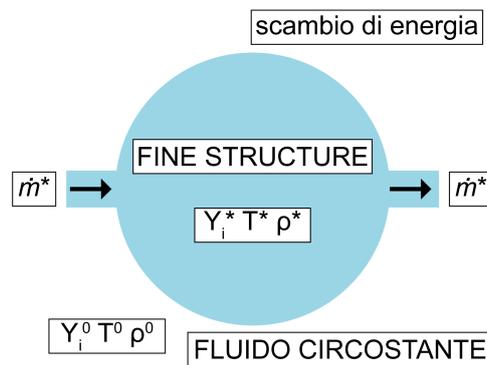
3.3.3 Modello *Eddy Dissipation Concept* (EDC)

Una derivazione del modello *Eddy Dissipation*, attribuibile a Magnussen, è chiamata modello *Eddy Dissipation Concept* (EDC): è un tentativo di incorporare la chimica finite rate nelle fiamme turbolente, [3],[6]. Questo metodo è basato su una descrizione accurata dei vortici turbolenti e della loro dissipazione.

In un sistema completamente turbolento la combustione avviene dove si ha miscelazione su scala molecolare, ovvero in zone chiamate *fine structures*. Tutte

le reazioni che coinvolgono le specie della fase gassosa hanno luogo in questa zona reattiva rappresentante la più piccola scala dei fenomeni turbolenti, in cui tutta l'energia turbolenta viene dissipata in calore. Come conseguenza, tutte le reazioni nel fluido circostante sono da considerarsi inibite venendo meno il contatto a livello molecolare tra i reagenti. Questa assunzione è una grande semplificazione, ma la sua validità è stata provata in molte applicazioni pratiche.

Le *fine structures* sono trattate come se fossero dei reattori perfettamente miscelati aventi tempo di residenza pari a τ^* e dove la frazione massiva della specie k-esima è ω_k^* .



Definendo con γ_λ la frazione volumetrica o massiva della fine structure, questa è funzione delle proprietà turbolente. All'interno della fine structure le reazioni avvengono secondo schemi cinetici dettagliati per un tempo pari al tempo di residenza τ^* e su un volume effettivo pari a V^* :

$$\tau^* = 0.41 \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (28)$$

$$\gamma_\lambda = 2.13 \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (29)$$

$$V^* = \gamma_\lambda V \quad (30)$$

in cui definiamo con ν la viscosità laminare cinematica.

Considerando lo scambio massivo esistente tra le fine structures e le zone circostanti, la velocità di trasferimento netta massiva della specie k-esima tra le fine structures e il fluido circostante può essere espressa come:

$$\bar{Q}_k = \frac{\rho \gamma_\lambda^2}{\tau^* (1 - \gamma_\lambda^3)} (\bar{\omega}_k^* - \bar{\omega}_k^0) \quad (31)$$

in cui si definisce con ρ la densità e con ω_k^0 la frazione massiva della specie k associata alla corrente entrante nel dominio di volume V .

Tra i principali aspetti vi è quello secondo cui tutte le reazioni chimiche, il cui tempo caratteristico per la specie limitante è maggiore del tempo di residenza nella fine structure τ^* , vengono sostanzialmente estinte.

Solo una parte delle fine structures può reagire ed è quella che riscaldata a sufficienza. Solitamente si usa un fattore correttivo χ per indicare questa frazione e tenere quindi conto degli effetti della chimica finite rate quando viene utilizzata l'assunzione della chimica veloce.

Trattando la fine structure reattiva come un reattore miscelato messo in condizione di scambiare massa ed energia con il fluido circostante, ogni meccanismo cinetico può essere utilizzato con il modello *EDC*. La velocità di reazione per ogni singola specie è valutata a partire da bilanci entalpici e massivi per la zona reattiva modellabile come un reattore. Il trasporto massivo e le reazioni chimiche possono essere descritte dalle seguenti equazioni per la conservazione dell'entalpia totale e delle specie:

$$\bar{Q}_k = \frac{\rho^*}{\tau^*(1-\gamma_\lambda^3)} (\tilde{\omega}_k^* - \tilde{\omega}_k^0) \quad (32)$$

$$\dot{Q}^* = \frac{\rho^*}{\tau^*(1-\gamma_\lambda^3)} \sum_{k=1}^{N_c} (\tilde{\omega}_k^* \hat{H}_k - \tilde{\omega}_k^0 \hat{H}_k^0) \quad (33)$$

in cui \dot{Q}^* è la potenza netta per unità di volume trasferita tra le fine structures e il fluido circostante mediante meccanismi differenti, ad esempio tramite l'irraggiamento. In funzione delle quantità note $\tilde{\omega}_k^0$ e \hat{H}_k^0 è possibile calcolare le frazioni massive $\tilde{\omega}_k^*$ e le entalpie \hat{H}_k^* nella fine structure. La velocità media di reazione di tutte le specie può essere ricavata equivalentemente utilizzando sia l'espressione precedente della velocità di trasporto massivo, sia la velocità di reazione nelle fine structures.

Il modello *EDC* permette l'implementazione di meccanismi cinetici dettagliati nei flussi reattivi in condizioni turbolente e può essere impiegato quando l'ipotesi di chimica veloce non può essere fatta in alcun modo.

Tuttavia una prima problematica è rappresentata dal fatto che i meccanismi cinetici dettagliati hanno delle caratteristiche intrinseche che rendono la loro integrazione numerica un problema *stiff* e quindi esoso dal punto di vista del costo computazionale. Fino a quando le velocità delle reazioni chimiche nelle fine structures sono funzione della temperatura e delle frazioni massive, la ri-

soluzione deve essere effettuata utilizzando un sistema accoppiato di equazioni algebriche.

3.4 MECCANISMI CINETICI DI COMBUSTIONE

I modelli cinetici che descrivono la combustione di idrocarburi sono generalmente molto complessi: sono composti da un'ampia gamma di reazioni radicali ramificate, con meccanismi chimici difficilmente individuabili, elevata velocità di reazione e numerose possibilità di reazione. In molti casi non è possibile procedere ad un'accurata descrizione dei fenomeni che avvengono nella realtà; per quanto possibile, la descrizione mediante l'uso di modelli cinetici può quindi essere effettuata seguendo due approcci differenti:

- è possibile cercare di modellare la chimica del sistema rappresentando dettagliatamente le reazioni che vi hanno luogo;
- è possibile utilizzare un meccanismo molecolare che considera le reazioni globali tra le molecole, utile per un'analisi dei fenomeni macroscopici che avvengono durante il processo.

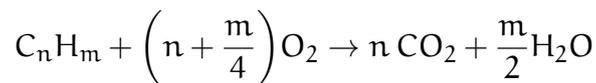
La motivazione principale che giustifica la necessità di ridurre i meccanismi di reazione è la possibilità di limitare i tempi di calcolo (e di conseguenza il costo computazionale) necessari alle simulazioni, operando una diminuzione delle dimensioni del sistema da risolvere. L'eliminazione di specie estremamente reattive quali i radicali, inoltre, può rendere il sistema meno stiff, avvicinando i tempi caratteristici delle specie che figurano nelle equazioni. I vantaggi nell'uso di uno schema ridotto sono controbilanciati dalle ridotte possibilità di estrapolabilità alle diverse condizioni operative, in quanto questi meccanismi sono adatti alla descrizione di un limitato numero di sistemi per i quali sono stati formulati.

3.4.1 *Meccanismi cinetici dettagliati*

Gli schemi di reazione esaminano in dettaglio le reazioni elementari che hanno luogo tra le molecole ed i radicali presenti nel sistema, per cercare di fornire una rappresentazione il più possibile accurata dei fenomeni che avvengono. Un modello meccanicistico è utilizzato nel caso in cui sia necessario interpretare con un elevato livello di dettaglio ciò che avviene nella realtà garantendo un'ampia estrapolabilità e flessibilità nelle diverse condizioni operative. La presenza di numerose specie chimiche intermedie permette lo studio del comportamento delle

3.4.2.1 Meccanismi cinetici 1 step

All'opposto del livello di dettaglio realizzato con uno schema meccanicistico, il grado massimo di semplificazione per la rappresentazione della combustione di un idrocarburo è l'utilizzo di un solo step reattivo di ossidazione del combustibile da parte del comburente, a formare direttamente i prodotti finali di reazione, ovvero CO_2 e H_2O . La formulazione generale di uno schema di combustione 1-step per un idrocarburo è del tipo:



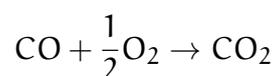
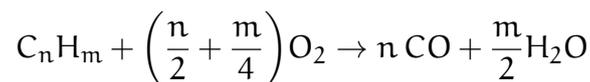
La cinetica della reazione di ossidazione del combustibile deve essere una media opportuna dei diversi passaggi reattivi che sono coinvolti nel processo, e viene espressa nella forma:

$$r = AT^n \exp\left(-\frac{T_{\text{att}}}{T}\right) [\text{C}_n\text{H}_m]^\alpha [\text{O}_2]^\beta$$

in cui i parametri A , T_{att} , n , α e β sono determinati sulla base di misure sperimentali, senza un reale significato fisico, essendo svincolati dai coefficienti stechiometrici della reazione a differenza delle reazioni elementari alla base di uno schema meccanicistico, e dipendenti dalle condizioni operative: pressione, temperatura, rapporto stechiometrico e dalle misure sperimentali utilizzate per determinarli.

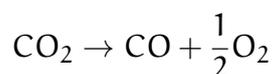
3.4.2.2 Meccanismi cinetici 2 step

Nella maggior parte dei sistemi di combustione una sola reazione chimica non è in grado di descrivere efficacemente i fenomeni che hanno luogo, quindi è opportuno ricorrere ad un meccanismo che preveda almeno il monossido di carbonio come intermedio di reazione. I meccanismi a due step per gli idrocarburi possono essere espressi come:



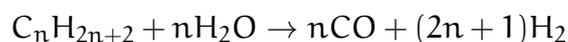
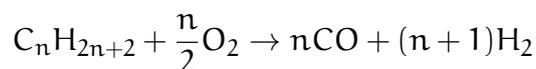
Questi tipi di schemi permettono di migliorare la predizione del campo di temperatura e delle concentrazioni finali delle specie chimiche rispetto ai model-

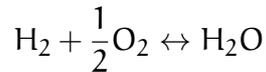
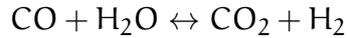
li 1-step. Consentono inoltre l'introduzione del monossido di carbonio, CO, che è una specie che riveste notevole importanza nei sistemi di combustione, anche per le sue caratteristiche di inquinante. Per migliorare la predizione dei valori finali di concentrazione, soprattutto per quanto riguarda il rapporto CO/CO₂, i meccanismi 2-step prevedono spesso l'introduzione della reazione inversa per quanto concerne l'ossidazione del monossido di carbonio. L'introduzione della reazione inversa assume maggiore importanza tanto è maggiore la temperatura del sistema. Per le alte temperature aumenta la quantità di CO₂ dissociata a causa dello spostamento dell'equilibrio verso la CO. I due meccanismi di questo tipo più noti ed utilizzati sono il meccanismo proposto da [1] e quello proposto da [4]. Entrambi presentano, in aggiunta allo schema generale dei meccanismi globali a 2-step, la reazione:



3.4.2.3 Meccanismi cinetici 4 step

I meccanismi di combustione a quattro step permettono la descrizione di ulteriori specie intermedie alla reazione, oltre al monossido di carbonio. Come prima il campo di utilizzo è limitato alle condizioni in cui i meccanismi sono stati sviluppati e la scelta degli intermedi rappresentati dipende in gran parte dai sistemi per cui i meccanismi sono stati formulati. I meccanismi 4-step presentati da Peters e Kee e da Bilger et al. sono stati sviluppati per descrivere fiamme diffuse metano-aria, pur presentando lacune nella descrizione di sistemi ricchi di combustibile a causa della mancanza di un cammino reattivo passante per la formazione di specie C₂ che vengano successivamente ossidate. Lo schema successivo a 4-step presentato da Mauss e Peters sopperisce a questa mancanza, mantenendo però un ristretto campo di applicabilità legato alle condizioni in cui il meccanismo è stato sviluppato. Il meccanismo sviluppato da [5] è stato derivato analizzando la struttura di fiamme premiscelate e diffuse ed è stato concepito in modo da poter essere usato per alcani con lunghezza di catena da C₁ a C₄, adattando i parametri cinetici delle reazioni in cui il combustibile compare direttamente. Lo schema semplificato proposto è il seguente:





per $n = 1 - 4$.

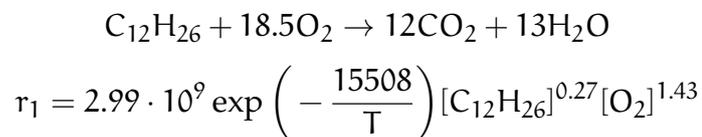
Lo schema cinetico è stato così formulato per poter descrivere adeguatamente due diverse zone reattive: la zona di reazione primaria e la zona di reazione secondaria, presenti nelle fiamme laminari, sia nel caso di fiamme premiscelate che diffusive. Nella porzione che si identifica come zona di reazione primaria il combustibile è trasformato in CO e H₂, mentre nella zona secondaria l'ossidazione è portata a termine fino ai prodotti finali, ovvero CO₂ e H₂O.

3.4.3 Meccanismi cinetici globali per il Jet Fuel

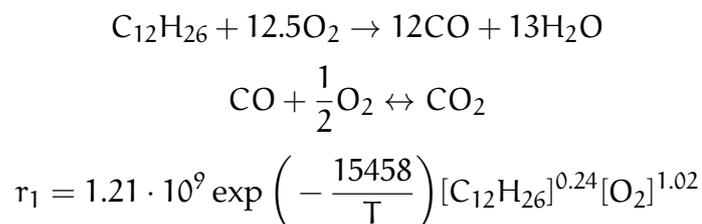
Con Jet Fuel si intende una miscela composta da frazioni petrolifere, costituita da C₈ – C₁₆ di aromatici, alifatici e paraffine, solitamente impiegata come combustibile per motori aeronautici.

In [9], usando l' n-dodecano (C₁₂H₂₆) come rappresentante di questo tipo di combustibile, hanno testato gli schemi cinetici globali citati precedentemente ([4], [1], [5]) formulando successivamente un meccanismo molecolare a 5-step. I parametri cinetici sono stati calcolati grazie ad un processo di ottimizzazione in modo da migliorare le predizioni dei profili di temperatura e di concentrazione delle specie. Gli schemi cinetici ottenuti sono:

- Meccanismo 1 step [4]:

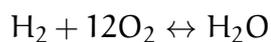
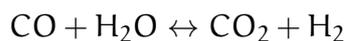
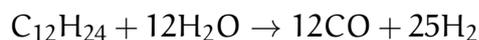
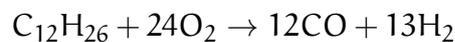


- Meccanismo 2 step [1]:



$$r_2 = 5.87 \cdot 10^{12} \exp\left(-\frac{20443}{T}\right) [\text{CO}]^{1.26} [\text{O}_2]^{0.28} [\text{H}_2\text{O}]^{0.58}$$

- Meccanismo 4 step [5]:



$$r_1 = 3.3 \cdot 10^{11} \exp\left(-\frac{15055}{T}\right) [\text{C}_{12}\text{H}_{26}]^{0.50} [\text{O}_2]^{1.20}$$

$$r_2 = 2.8 \cdot 10^9 \exp\left(-\frac{15206}{T}\right) [\text{C}_{12}\text{H}_{26}]^{0.89} [\text{H}_2\text{O}]^{1.12}$$

$$r_3 = 2.53 \cdot 10^9 \exp\left(-\frac{10121}{T}\right) [\text{CO}]^{0.97} [\text{H}_2\text{O}]^{1.03}$$

$$r_4 = 8.8 \cdot 10^{15} \text{T}^{-1} \exp\left(-\frac{19889}{T}\right) [\text{H}_2]^{0.24} [\text{O}_2]^{1.52}$$

MOTORE REALE

4.1 MOTORE TURBO-GAS

Il motore turbo-gas è stato inizialmente studiato negli anni 40 in Paesi come Gran Bretagna, Germania e Stati Uniti per poi diffondersi rapidamente nel settore aeronautico date le maggiori prestazioni dei motori a pistoncini usati sugli aerei da caccia. Successivamente questi motori sono stati impiegati nel settore industriale con lo scopo di generare potenza all'albero. A differenza dei motori alternativi che si basano sul ciclo Otto o Diesel, i motori turbo-gas si basano sul ciclo Brayton, vedi fig. 8, in cui si opera su un fluido in modo da estrarre lavoro e prevede 4 fasi fondamentali:

- compressione isoentropica;
- fornitura di calore a pressione costante;
- espansione isoentropica;
- sottrazione di calore a pressione costante.

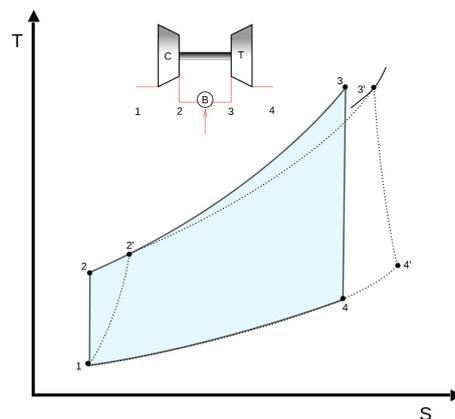


Figura 8: Schema di un ciclo Brayton

Possiamo individuare diversi componenti principali nel motore turbo-gas:

Componente	Funzione
Compressore	Comprimere l'aria in ingresso
Diffusore	Rallentare la velocità del flusso
Combustore	Far avvenire la combustione tra aria e combustibile
Turbina	Estrarre lavoro per azionare il compressore
Ugello	Espandere i gas combusti per produrre spinta

Tabella 1: Elenco dei componenti di un motore turbo-gas con le relative funzioni

4.2 COMPRESSORE

Il compressore montato sul nostro propulsore è di tipo centrifugo, monostadio con diffusore palettato. Il rapporto di compressione β è esprimibile come:

$$\beta = \frac{p_2^\circ}{p_1^\circ}$$

Si può allora stimare il lavoro per unità di massa eseguito dal compressore sul fluido facendo il primo principio della termodinamica per un sistema in funzionamento stazionario (forma Euleriana):

$$Q_c + L_c = C_p(T_2 - T_1) \quad (34)$$

in cui il C_p per l'aria è pari a 1005 J/kg/K (per temperature prossime a quelle ambiente), le temperature T_2 e T_1 sono ricavabili dalle misure sperimentali, mentre il Q_c , che rappresenta il calore ricevuto dal compressore, non è noto. Allo scopo di semplificare i calcoli si può introdurre un ulteriore parametro chiamato r_c e definito come:

$$r_c = \frac{Q_c}{C_p(T_2 - T_1)}$$

che rappresenta la quantità di calore scambiato dal compressore in riferimento al salto entalpico che esso elabora. Si può allora riscrivere la 34 come:

$$L_c = (1 - r_c)C_p(T_2 - T_1)$$

Grazie al parametro r_c si può tenere in conto anche di compressioni non perfet-

tamente adiabatiche (nel cui caso r_c sarebbe zero). Il rendimento adiabatico del compressore risulta allora:

$$\eta_c = \frac{L_{c, is}}{L_c}$$

dove il lavoro isentropico $L_{c, is}$ vale:

$$L_{c, is} = C_p T_1 \left(\beta_c^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right)$$

4.3 COMBUSTORE

Il compito del combustore è quindi quello di fornire calore al fluido, calore che viene fornito facendo bruciare del combustibile (presente in forma liquida o gassosa) che sprigiona così energia termica. Generalmente il combustibile impiegato nei combustori aeronautici è il kerosene. Inizialmente la camera di combustione era un condotto rettilineo in cui vi era un ingresso per l'aria, un iniettore per il combustibile e un'uscita per i gas combusti.

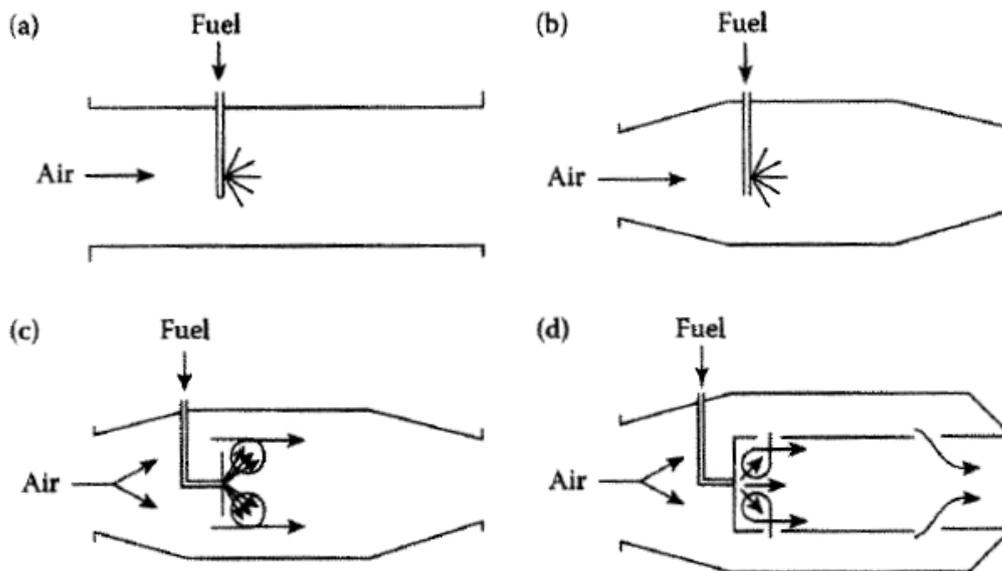


Figura 9: Derivazione della forma del combustore attuale [11]

Altro scopo della camera di combustione è fare in modo che la fiamma si possa instaurare e mantenere con facilità garantendo una bassa perdita di carico al suo interno. A causa delle alte velocità che si possono avere all'uscita dal compressore e considerando che le perdite di carico dovute alla combustione aumentano con il quadrato della velocità, è necessario rallentare il flusso aumentando la sezione in prossimità della zona con fornitura di calore, arrivando

alla configurazione in figura 9b. Si può introdurre un deflettore per fare in modo che la fiamma possa rimanere ancorata in prossimità dell'iniettore; questo deflettore serve a creare un ricircolo in modo che parte dei gas combusti servano da mezzo per l'ignizione del combustibile in arrivo (figura 9c). Per fare in modo che la temperatura di combustione sia la maggiore possibile, è necessario che il rapporto tra aria e combustibile sia di circa 30 o 40, cioè molto superiore del limite di accensione per i combustibili comunemente usati. È necessaria una zona, da cui poi la fiamma verrà accesa, caratterizzata da un rapporto aria-combustibile di circa 14,9, pari al rapporto stechiometrico. Questo problema può essere scavalcato (fig. 9d) introducendo un ulteriore condotto centrale chiamato liner, il quale presenta fori sulla superficie laterale che dividono l'ingresso dell'aria. Nella zona prossima all'iniettore entra solo parte dell'aria garantendo una miscela che possa essere accesa mentre la restante parte viene immessa più a valle per far completare la reazione (zona secondaria) e abbassare la temperatura dei gas che verranno immessi nella turbina (zona di diluizione).

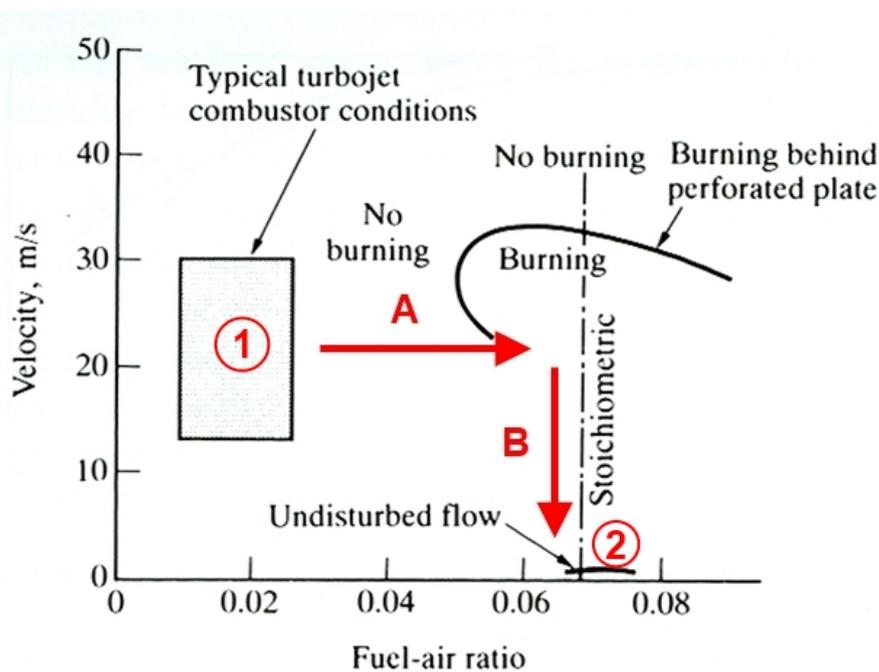


Figura 10: Condizioni di combustione

Le condizioni di ingresso del flusso di aria nel combustore (zona 1) devono essere tali da permettere alla fiamma di instaurarsi (zona 2): per questo motivo è necessario ripartire la portata di aria tramite i fori del liner e successivamente ridurre la velocità creando dei ricircoli.

I requisiti che un combustore deve soddisfare sono molteplici, i più importanti sono:

- alta efficienza nella combustione in cui il combustibile deve essere bruciato completamente liberando tutta la sua energia;
- l'accensione deve avvenire in modo affidabile e non brusco, sia a terra che ad alte quote (nel caso di spegnimento del motore in volo);
- ampi limiti di stabilità, cioè la fiamma deve mantenersi accesa per ampi intervalli di pressioni e rapporti fra aria e combustibile;
- basse perdite di carico;
- distribuzione delle temperature all'uscita adeguata per massimizzare la vita delle palette delle turbine;
- basse emissioni di agenti inquinanti;
- forma e dimensione compatibili con quelle dell'intero motore;
- bassi costi e facilità di costruzione;
- manutenibilità;
- durabilità;
- compatibilità con diverse tipologie di combustibili, fra cui derivati del petrolio, sintetici e derivati da biomasse;

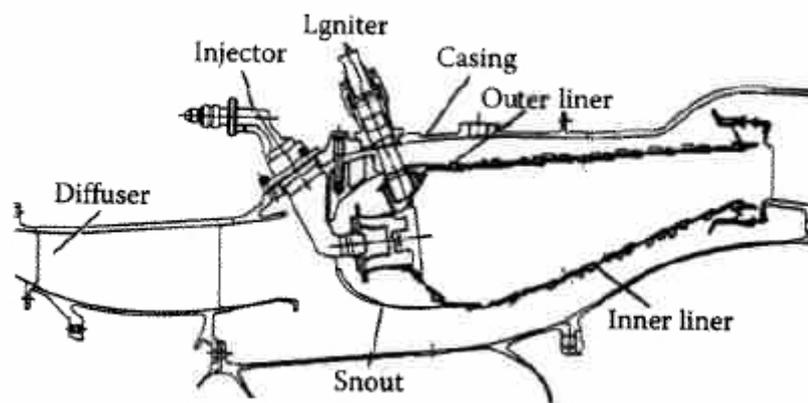


Figura 11: Spaccato di una camera di combustione

Guardando la fig. 11 possiamo individuare le parti fondamentali del combustore:

- diffusore, ha lo scopo di rallentare ed indirizzare il flusso in uscita dal compressore;
- iniettore, dal quale viene immesso il combustibile;
- ignitore, accende la miscela e quindi permette l'avvio il motore;
- rivestimento (casing), che contiene il fluido termovettore;
- liner, il cui scopo è frazionare l'ingresso dell'aria nella zona in cui avviene la combustione tramite dei fori che permettono anche il passaggio di aria per la refrigerazione delle pareti.

La configurazione standard del combustore è di tipo tubolare con il liner di forma cilindrica contenuto in un rivestimento esterno che lo separa dagli altri combustori vicini. Anche se facilmente costruibile, risulta pesante e inefficiente a causa delle elevate perdite di pressione. Si è pensato quindi di costruire un unico involucro esterno di forma anulare al cui interno prendono posto i liner di tipo tubolare. Questo accorgimento permette anche di unire le doti di robustezza delle camere tubolari con la compattezza propria delle anulari. Per ultimi i combustibili anulari in cui liner e suo involucro presentano questo tipo di forma, con il vantaggio della compattezza e di basse perdite di carico.

Possiamo individuare diverse configurazioni sia per il posizionamento che tipologia di flusso all'interno della camera di combustione. Ad esempio il combustore anulare a flusso inverso, studiato in questa tesi:

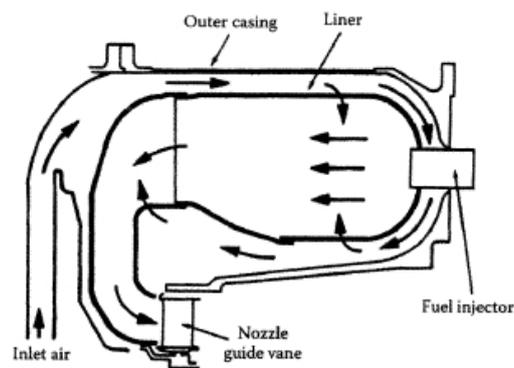


Figura 12: Combustore anulare a flusso inverso

Questa specifica configurazione viene adottata in caso di motori di piccole dimensioni e ad elevato numero di giri. Altri vantaggi riguardano un buon utilizzo dello spazio disponibile alla combustione e manutenzione facilitata perchè

è più facile accedere agli iniettori. Abbiamo però un elevato rapporto tra superficie e volume della camera, il che è uno svantaggio perchè è più difficoltoso il raffreddamento delle pareti. Nel combustore anulare a flusso inverso la direzione del flusso entrante dai fori del liner esterno è contraria rispetto quella entrante dai fori del liner interno. L'aria in ingresso dalla parte interna presenta una maggiore perdita di carico a causa del percorso seguito più lungo, rispetto all'aria entrante dalla parte esterna. A causa di quanto esposto nasce un sistema di vortici asimmetrico, o comunque diverso da quello ottenibile con le camere di combustione a flusso dritto, e di questo se ne deve tenere conto in fase di progetto.

Dal punto di vista termodinamico possiamo suddividere il combustore in tre diverse zone:

- zona primaria: è la zona a diretto contatto con l'iniettore in cui la fiamma deve restare accesa; bisogna garantire un tempo, una temperatura e una turbolenza sufficiente per garantire la reazione della miscela; è necessaria una zona con il ricircolo dei gas combusti per il mantenimento della fiamma, ottenuta creando dei vortici di forma toroidale sfruttando i fori del liner; il requisito fondamentale è la creazione di una zona in cui ci sia il ricircolo dei gas combusti che permettano il mantenimento della fiamma. Questa regione può essere ottenuta fondamentalmente creando dei vortici di forma toroidale sfruttando i fori posti sul liner (fig. 13).

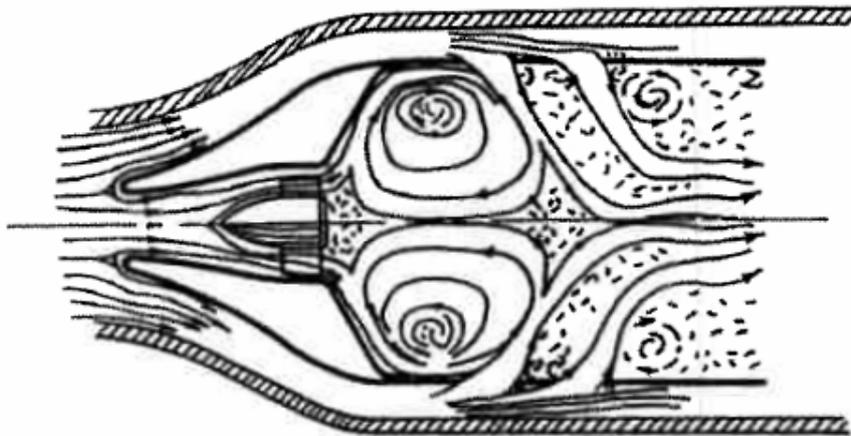


Figura 13: Esempio di vortice toroidale nella zona primaria

In questa zona si raggiungono temperature dell'ordine dei 2000 K e può esserci la dissociazione di sostanze come monossido di carbonio e ossidi

di azoto che se passassero direttamente alla zona di diluizione, in cui si abbassa la temperatura usando getti di aria fredda, rimarrebbero "congelati" rischiando di avere un basso rendimento di combustione: si usa una zona intermedia, zona secondaria, per facilitare il passaggio.

- zona secondaria: in questa zona si raggiungono temperature elevate permettendo la dissociazione delle varie specie e quindi si verifica la formazione di monossido di carbonio e ossido di azoto.
- zona di diluizione: in questa zona si introduce l'aria per creare un flusso con una distribuzione di temperatura adeguata per l'ingresso in turbina; quest'aria viene immessa nella zona di diluizione (20-40% del totale) attraverso i fori del liner la cui forma è progettata per ottimizzarne il mescolamento con il flusso principale.

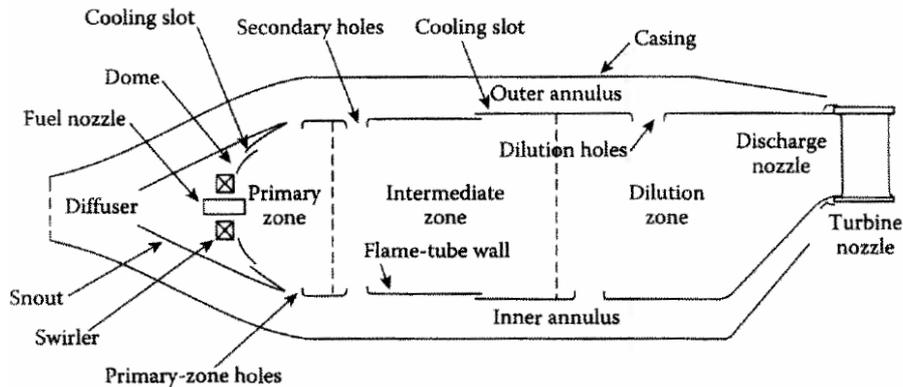


Figura 14: Suddivisione fra le zone primaria, secondaria e di diluizione

Facendo il bilancio delle potenze in gioco nella camera di combustione si ottiene:

$$\dot{m}_b H_i + \dot{m}_b h_b + \dot{m}_a h_2 = \dot{m}_f h_3 + \dot{m}_a Q_c + \dot{m}_f Q_p \quad (35)$$

in cui:

- \dot{m}_b , \dot{m}_a , \dot{m}_f rappresentano le portate in massa di combustibile, aria e fumi;
- h_b , h_2 e h_3 sono rispettivamente l'entalpia del combustibile, dell'aria in ingresso e dei fumi in uscita;
- H_i è il potere calorifico inferiore del combustibile;
- Q_c , Q_p rappresentano rispettivamente il calore ceduto al compressore e il restante calore di combustione perso per ragioni differenti (scambi di calore verso l'esterno, combustione incompleta, dissociazioni, ecc).

Si può elaborare la 35:

$$H_i + h_b + \alpha C_p T_2 = (\alpha + 1) C_p' T_3 + \alpha Q_c + (\alpha + 1) Q_p \quad (36)$$

in cui α è definita come:

$$\alpha = \frac{\dot{m}_a}{\dot{m}_b}$$

Con l'ipotesi che:

- $h_b \ll H_i$
- $C_p'' \approx (C_p' + C_p)/2$
- $\alpha \approx (\alpha + 1)$

e definendo il rendimento di combustione come:

$$\eta_b = \frac{H_i - \alpha Q_c - (\alpha + 1) Q_p}{H_i}$$

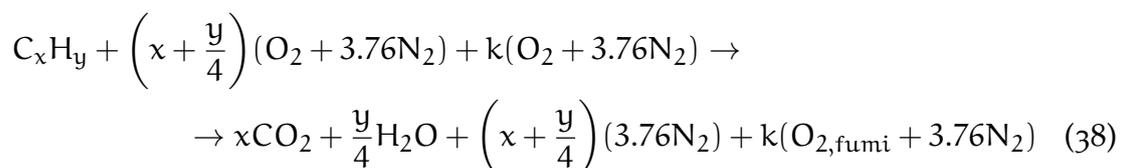
allora la 36 può essere riscritta come:

$$\eta_b H_i = (\alpha + 1) C_p'' (T_3 - T_2) \quad (37)$$

Di questa equazione possiamo determinare sperimentalmente T_2 e T_3 ; H_i è correlato al combustibile utilizzato, mentre del calore specifico C_p'' può essere eseguita una stima approssimata basandosi sulle due temperature T_2 e T_3 ; per una stima più precisa di tale coefficiente occorre considerare con elevata precisione la composizione chimica dei fumi di scarico.

Dato che quando sono state effettuate le prove non è stato possibile rilevare la portata d'aria perché non si disponeva dell'apparato di misura, l'equazione 37 non può essere risolta. L'unico modo per ovviare a questo inconveniente è quello di misurare l'ossigeno nei fumi allo scarico e stimare grossolanamente la dosatura α mediante il procedimento descritto di seguito.

Ipotizzando una composizione del combustibile del tipo $C_x H_y$, la reazione di combustione con aria può essere scritta come:



La costante k inserita nel bilancio stechiometrico della reazione di combustione può essere calcolata a partire dall'equazione precedente come funzione del tenore di ossigeno nei prodotti:

$$k = \frac{4.76\%O_{2,fumi}}{1 - \left[x + 3.76 \left(x + \frac{y}{4} \right) \right] \%O_{2,fumi}}$$

dunque la dosatura vale:

$$\alpha = \frac{m_a}{m_b} = \frac{\left(k + x + \frac{y}{4} \right) (PM_{O_2} + 3.76PM_{N_2})}{xPM_C + yPM_H}$$

4.4 TURBINA

La turbina installata sul nostro turbogetto è del tipo assiale monostadio. La potenza estratta dalla turbina perché il ciclo possa funzionare deve essere uguale a quella necessaria al compressore a meno delle perdite per attriti meccanici e si indica nel seguente modo:

$$\dot{m}_a L_c = \eta_m \dot{m}_f L_t$$

e mettendo in evidenza il valore di α si ottiene:

$$L_t = \frac{\alpha}{\eta(\alpha + 1)} L_c$$

Il lavoro isoentropico della turbina si ottiene mediante l'equazione 39, ipotizzando il rendimento della turbina η_t (tale rendimento è stato considerato costante e pari a 0.82):

$$L_{t,is} = \frac{L_t}{\eta_t} \quad (39)$$

Il legame tra lavoro isoentropico $L_{t,is}$ e rapporto di espansione β_t è invece indicato nell'equazione 40.

$$L_{t,is} = Cp'T_3 \left(1 - \frac{1}{\beta_t^{\frac{k'-1}{k'}}} \right) \quad (40)$$

4.5 UGELLO

Il rapporto di espansione dell'ugello può essere calcolato come:

$$\beta_u = \eta_\pi \frac{\beta_c}{\beta_t}$$

in cui il rendimento pneumatico η_π , che tiene conto delle perdite di pressione nel combustore, è definito come:

$$\eta_\pi = \frac{p_2^\circ}{p_3^\circ}$$

La temperatura di uscita dall'ugello può essere calcolata come:

$$T_5 = \frac{T_4}{\beta_u^{\frac{k'-1}{k'}}$$

in cui la temperatura T_4 è:

$$T_4 = T_3 - \frac{L_t}{C_{p'}}$$

Il calcolo della spinta e del consumo specifico sono subordinati alla stima della velocità in uscita dall'ugello, la quale può essere ricavata come:

$$c_u = \varphi \sqrt{2C_{p'}T_4 \left(1 - \frac{1}{\beta_u^{\frac{k'-1}{k'}}} \right)}$$

in cui il termine φ è definito come il coefficiente di perdita dell'ugello. La spinta ed il consumo specifico risultano allora:

$$T = (\dot{m}_a + \dot{m}_b)c_u$$

$$SFC = \frac{\dot{m}_b}{(\dot{m}_a + \dot{m}_b)c_u} = \frac{1}{(1 + \alpha)c_u}$$

4.6 DESCRIZIONE GEOMETRICA DEL COMBUSTORE REALE

Il progetto *GREAT 2020* (*Green Engine for Air Traffic in 2020*) è guidato da *Avio s.p.a.* in collaborazione con 5 dipartimenti del *Politecnico di Torino* e 24 piccole e medie imprese della regione Piemonte con lo scopo di partecipare alle attività di ricerca su scala europea riguardanti nuovi motori aeronautici eco-compatibili che entreranno in servizio nel 2020. L'attività svolta nel Dipartimento di Energetica del Politecnico di Torino si inserisce all'interno del *ZEC Lab* (*Zero Emission Combustion*), con lo scopo di sviluppare una tecnologia di combustori ad emissioni ridotte attraverso l'utilizzo di combustibili aeronautici alternativi e l'ottimizzazione dei sistemi di iniezione. La camera di combustione usata nel modello sperimentale è del tipo anulare a flusso inverso, si presenta come in fig. 15.

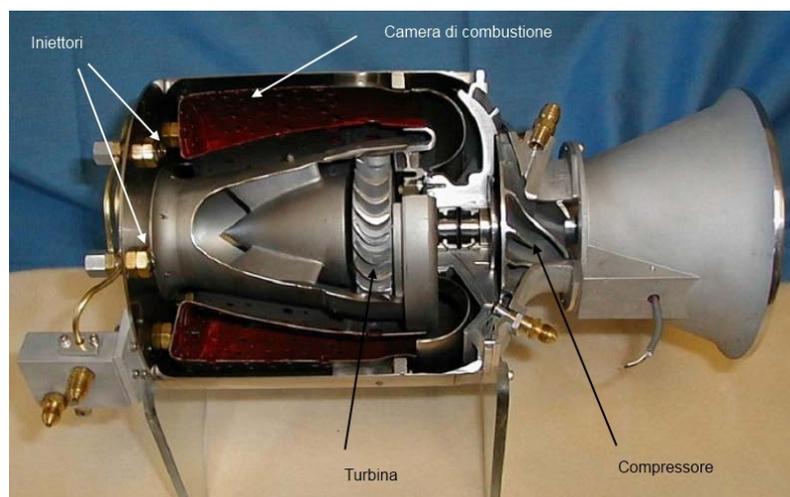


Figura 15: Geometria del turbogetto

Questo motore turbogetto è situato nel laboratorio del *Dipartimento di Energetica* del Politecnico di Torino, nello specifico si tratta del motore *SR-30* progettato dalla *Turbine Technologies*. Il motore è costituito da un compressore centrifugo a singolo stadio, una camera di combustione anulare a flusso inverso e infine da una turbina assiale a singolo stadio. Dallo spaccato si possono schematizzare gli organi interni al motore.

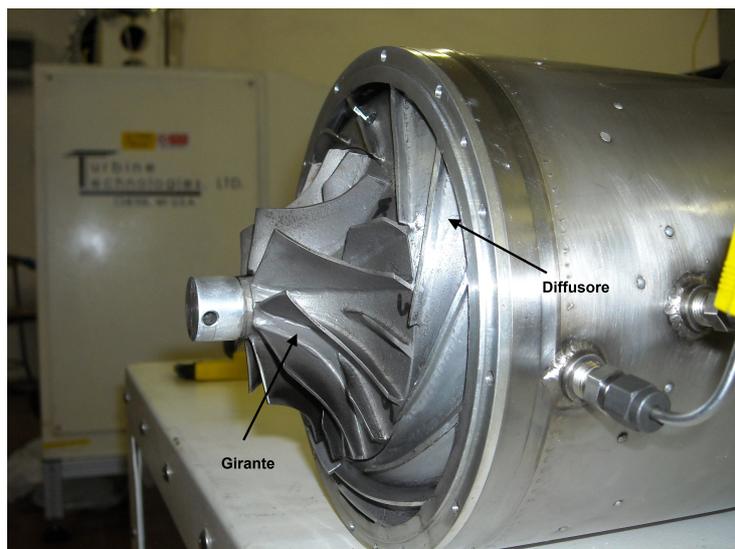


Figura 16: Dettaglio della girante e del diffusore palettato

Supponiamo di seguire ora una particella di aria che viene aspirata dal compressore: superata la girante essa passa attraverso un diffusore palettato (fig. 16) con lo scopo di rallentare il flusso, aumentando di conseguenza la pressione.

Successivamente l'aria è costretta a passare attraverso un raddrizzatore che ne annulla la componente di velocità tangenziale. A questo punto ci si trova nell'*annulus* esterno della camera di combustione (fra la cassa esterna ed il liner) ed attraverso i fori c'è un parziale ingresso di aria all'interno della camera di combustione vera e propria che si completa con l'ingresso dall'*annulus* interno. All'interno del liner c'è l'iniezione del combustibile attraverso 6 iniettori posti sul fondo e grazie ad un scintilla ed al ricircolo dei gas combusti, si instaura e si mantiene la fiamma. I prodotti di combustione vengono convogliati allo statore della turbina grazie ad un collettore curvo che ne inverte il flusso. A questo punto i gas muovono una turbina assiale monostadio ed una volta usciti vengono accelerati da un ugello convergente. In fig. 17 possiamo vedere la direzione del flusso all'interno della camera di combustione.

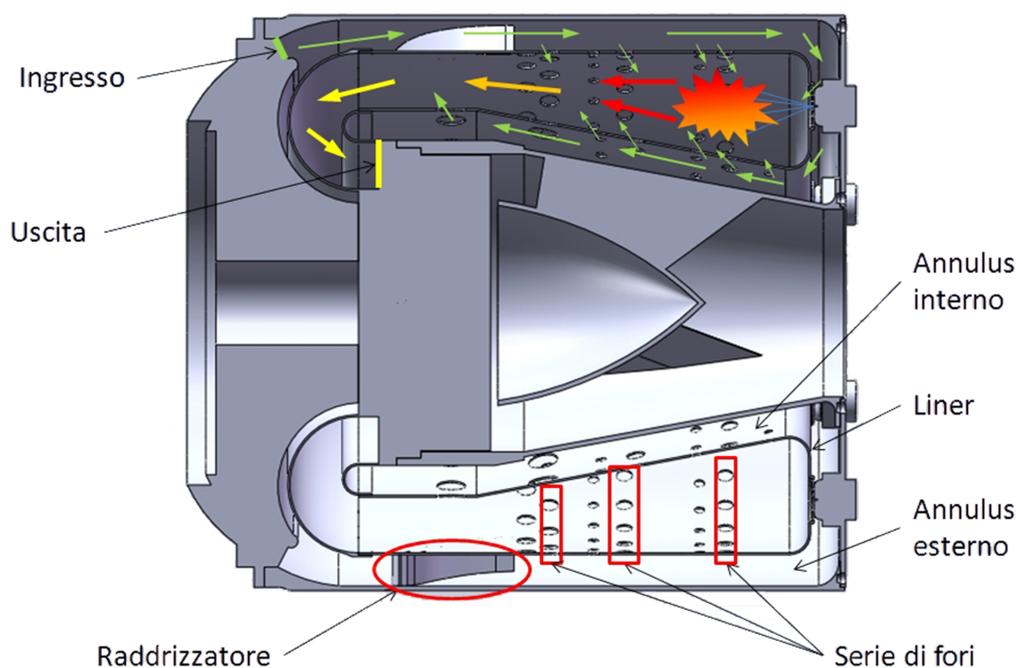


Figura 17: Flusso dei gas all'interno della camera di combustione

Per fare un'analisi approfondita dei fenomeni che si svolgono all'interno del liner, è necessario conoscere lunghezza, superficie e volume che caratterizzano il nostro combustore.

Misura	Valore
Raggio esterno	74.7 mm
Raggio interno minimo	40.5 mm
Raggio interno massimo	58.1 mm
Lunghezza totale	133.4 mm
Lunghezza parte conica	92.75 mm
Lunghezza parte cilindrica	35 mm
Raggio raccordi sul fondo	5.65 mm

Tabella 2: Misure della camera di combustione (liner)

Tutti questi dati sono stati ricavati da misurazioni dirette o da calcoli effettuati tramite software di CAD 3D attraverso i quali sono state disegnate le geometrie in oggetto. In figura 18 viene mostrato il liner della camera di combustione del turbogetto in questione ed in tabella 2 sono riportate le principali dimensioni necessarie per un esame quantitativo del problema.

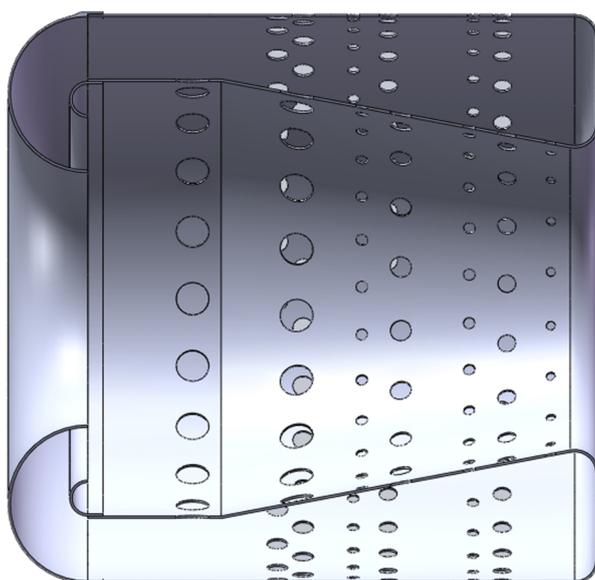


Figura 18: Sezione del liner

Sul turbogetto sono installati diversi sensori per misurare grandezze quali pressioni, temperature, regime di rotazione ecc. In fig. 19 vediamo lo schema che rappresenta il flusso seguito dal fluido operativo completo di tutte le variabili che possono essere misurate attraverso i sensori dislocati lungo il percorso. È possibile inoltre registrare l'andamento delle grandezze interfacciando un pc dotato di una scheda di acquisizione, ad una porta USB posta lateralmente al banco. D'ora in avanti per fare riferimento alle variabili in questione si userà la simbologia riportata nella tabella 3.

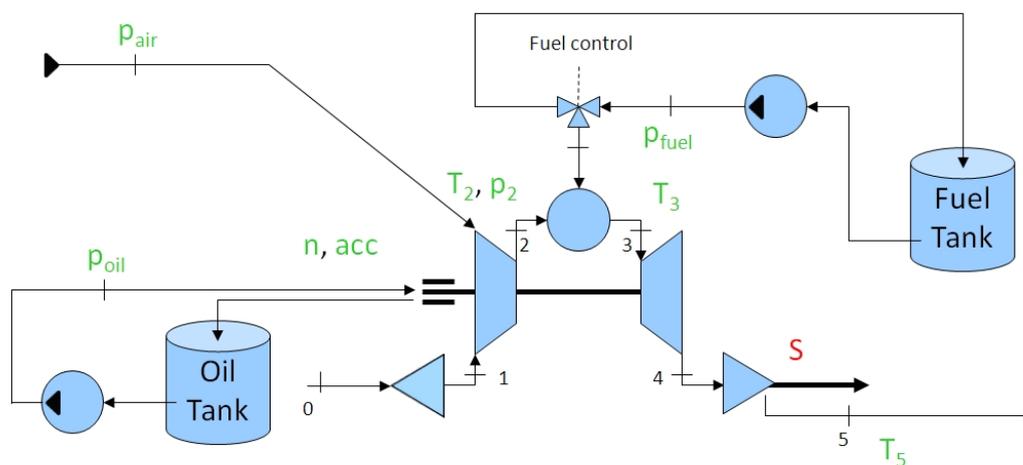


Figura 19: Posizionamento dei sensori

Variabile	Grandezza
p_0	Pressione atmosferica
T_0	Temperatura statica ambiente
p_1	Pressione dinamica di ingresso al compressore
T_1	Temperatura totale di ingresso al compressore
p_2	Pressione totale di uscita dal compressore / ingresso in camera di combustione
T_2	Temperatura totale di uscita dal compressore / ingresso in camera di combustione
p_3	Pressione statica di uscita dalla camera di combustione / ingresso in turbina
T_3	Temperatura totale di uscita dalla camera di combustione / ingresso in turbina
p_4	Pressione totale di uscita dalla turbina / ingresso nell'ugello
T_4	Temperatura totale di uscita dalla turbina / ingresso nell'ugello
p_5	Pressione totale di uscita dall'ugello
T_5	Temperatura totale di uscita dall'ugello
n	Regime di rotazione del motore

Tabella 3: Elenco delle variabili misurate dal sistema

In fig. 20 possiamo vedere i due sensori di temperatura T_2 e T_3 che essendo immersi nel fluido contribuiscono a modificare il campo di moto locale.

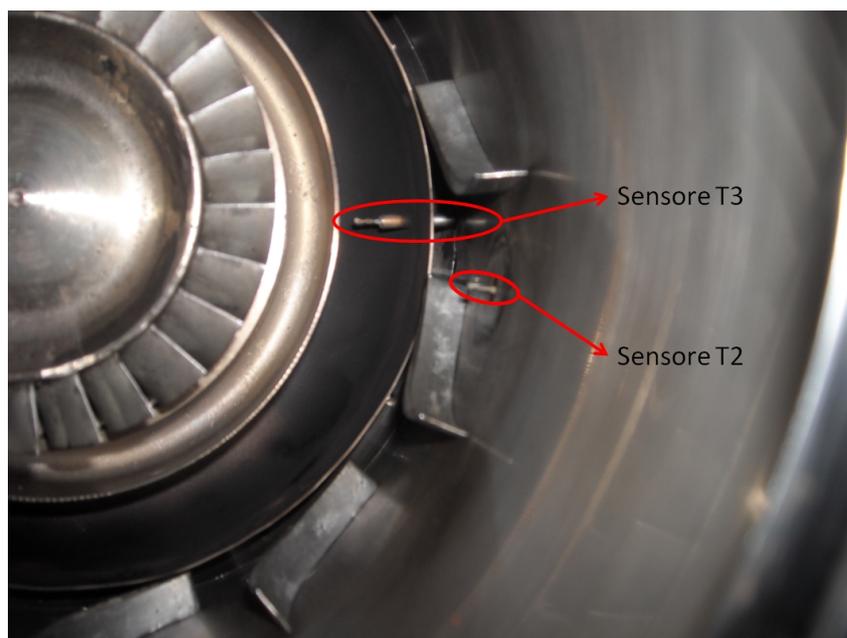


Figura 20: Posizione dei sensori per la misura delle T_2 e T_3

CANTERA

5.1 INTRODUZIONE

Cantera [19] è una suite open-source di software concepita per la risoluzione di problemi che spaziano dalla termodinamica alla cinetica chimica e ai processi di trasporto.

Il codice utilizza la programmazione ad oggetti in modo che si possano esplorare diversi modelli con delle minime modifiche al codice implementato. Per essere reso quanto più fruibile possibile questa suite è concepita per essere impiegata in diversi linguaggi di programmazione:

- Fortran;
- C++;
- Python;
- MatLab;

I codici usati per il completamento di questa tesi sono stati scritti in linguaggio Python.

Attualmente il software Cantera è utilizzato per applicazioni quali combustione, conversione e stoccaggio di energia elettrochimica, celle a combustibile, batterie, plasma, soluzioni di elettroliti e depositi di film sottili.

Per prima cosa è necessario definire le varie fasi coinvolte nel problema da analizzare e delle interfacce tra di esse. Possiamo definire diverse fasi:

- miscela di gas ideali;
- solido stechiometrico, cioè un solido costituito solamente da una specie chimica;
- liquido stechiometrico, cioè un liquido incompressibile costituito solamente da una specie chimica;
- metallo;

- solido incompressibile;
- liquido/vapore e Redlich-Kwong, cioè fluidi caratterizzati da equazioni di stato che permettono una descrizione degli equilibri liquido-vapore.

5.2 OGGETTI

Definite le fasi coinvolte nel problema, è necessario specificare le interfacce tra di esse. Cantera è dotato di un modello molto semplice per le interfacce tra le fasi, chiamato interfaccia ideale: esso tratta l'interfaccia come una soluzione ideale bidimensionale composta dalle specie presenti. È possibile definire, infine, un oggetto bordo che rappresenta un confine unidimensionale tra due fasi superficiali. Fasi e interfaccia vanno definite in file di input scritti in opportuni formati che Cantera è in grado di leggere.

Il modulo Reactor Networks di Cantera è quello che contiene gli oggetti e le funzioni necessari alla realizzazione ed evoluzione temporale di reti di reattori chimici. È possibile creare oggetti serbatoio (Reservoir), ovvero ambienti caratterizzati dall'aver stato costante nel tempo.

L'oggetto reattore (Reactor) rappresenta l'unica tipologia di reattore chimico prevista in Cantera: esso corrisponde al reattore comunemente denominato Continuously Stirred Tank Reactor (CSTR), Perfectly Stirred Reactor (PFR) e *Well Stirred Reactor (WSR)*. Queste tre denominazioni sono equivalenti e indicano un modello di reattore zero-dimensionale il cui stato può evolvere nel tempo. Le ipotesi alla base di questo modello sono che le proprietà della miscela di gas contenuta nel volume del reattore sono omogenee, che il fluido in ingresso nel reattore è istantaneamente miscelato con quello già presente e che quello in uscita ha le stesse proprietà del contenuto del reattore.

Un'altra tipologia di reattore che è possibile sfruttare in Cantera è il *Plug Flow Reactor*, un modello di reattore quasi uni-dimensionale capace di descrivere in modo semplificato l'avanzamento delle reazioni chimiche di una fase fluida all'interno di un condotto a sezione cilindrica, che può essere costante o variabile.

Possiamo inoltre definire oggetti parete in grado di simulare le reazioni superficiali che avvengono sulle pareti del reattore, oppure rappresentanti confini mobili tra due reattori attraverso cui è possibile lo scambio di calore. I reattori possono essere collegati tra loro oppure ai serbatoi tramite linee che permetto-

no il passaggio di fluido. Su queste linee devono essere inseriti degli oggetti che controllano il flusso. Esistono tre diversi oggetti facenti parte di questa categoria:

- Serbatoio: può essere pensato come un volume infinitamente grande in cui lo stato iniziale non varia nel tempo; viene usato per impostare temperatura e composizione della specie che deve fluire nel reattore;
- Muro: separa due reattori oppure un reattore ed un serbatoio; con un'area finita può condurre o irradiare calore tra i due reattori;
- Controllore di portata: mantiene una portata definita a priori, indipendentemente dalle condizioni a monte o di valle; l'equazione che permette il calcolo della portata è

$$\dot{m} = \max(\dot{m}_0, 0.0)$$

con \dot{m}_0 che può essere sia costante che funzione del tempo;

- Valvola: è un elemento che permette il flusso di portata solamente in una direzione ed è funzione del salto di pressione

$$\dot{m} = K_v(p_1 - p_2)$$

se $p_1 > p_2$, altrimenti $\dot{m} = 0$; sono usate per mantenere monte e valle di reattori ad una pressione simile;

- Controllore di pressione: è una valvola che fa passare una portata somma di un valore costante o con andamento temporale imposto e di un termine linearmente dipendente dal gradiente di pressione presente tra gli ambienti che separa.

$$\dot{m} = \dot{m}_{\text{master}} + K_v(p_1 - p_2)$$

Una volta creati i reattori e collegati tra loro opportunamente, possiamo implementare la rete di reattori, che permette un'evoluzione temporale comune a tutti i reattori, necessaria essendo collegati tra loro.

Abbiamo a disposizione due diversi metodi d'integrazione temporale:

- *advance*: permette di scegliere il passo di integrazione temporale, con il vantaggio di venire chiamato esclusivamente all'istante temporale in cui si vuole ottenere l'output del reattore, mentre ha lo svantaggio di perdere la descrizione di eventi transitori molto veloci se lo step di integrazione scelto non è sufficientemente piccolo;

- *advance to steady state*: al contrario del metodo precedente, lo step temporale è scelto in modo da avere il residuo del vettore di stato inferiore ad un certo valore;
- *step*: determina automaticamente il passo temporale in base alla velocità di evoluzione temporale dello stato dei reattori collegati nella rete, con il vantaggio di riuscire a cogliere tutti i fenomeni transitori.

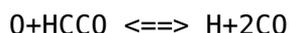
5.3 STRUTTURA FILE MECHANISM

Per definire le specie chimiche è necessario definire un file contenente le definizioni delle fasi (proprietà chimiche ed elenco delle reazioni) in modo tale da permettere a Cantera di usare le informazioni contenute per realizzare l'oggetto che rappresenta la fase o l'interfaccia nello script.

Tutte queste informazioni sono usate in due step:

- si importano le definizioni delle fasi da un file *.xml*;
- un preprocessor si avvia automaticamente per leggere il file di input e creare un file *.cti*.

Il formato *.xml* viene usato come standard per file data ed è progettato per essere facile da leggere. Il formato *.cti* differisce dal primo per come vengono gestite le reazioni:



In questo esempio abbiamo una reazione reversibile, se fosse stato $=>$ anziché $<==>$ allora la reazione sarebbe stata irreversibile. Nel file *.cti* i reagenti e i prodotti vengono indicati con i relativi coefficienti stechiometrici, mentre con il primo formato viene espressa ogni informazione che può essere ritenuta implicita in modo da evitare ogni rischio di fraintendimenti.

I dati termodinamici sono espressi con un formato fisso e ogni posizione occupata ha un significato fisico.

N2		N 2		G200.000	6000.000	1000.00	1
2.95258000E+00	1.39690000E-03	-4.92632000E-07	7.86010000E-11	-4.60755000E-15			2
-9.23949000E+02	5.87189000E+00	3.53101000E+00	-1.23661000E-04	-5.02999000E-07			3
2.43531000E-09	-1.40881000E-12	-1.04698000E+03	2.96747000E+00				4

Linea	Contenuto	Colonna
1	Nome della specie	1-18
1	Data (opzionale)	19-24
1	Simbolo atomico e formula	25-44
1	Fase della specie (S,G,L)	45
1	Temperatura inferiore	46-55
1	Temperatura superiore	56-65
1	Temperatura usuale	66-73
1	Simboli atomici addizionali	74-78
1	Numero linea	80
2	Nome della specie	1-75
2	Numero linea	80
3	Nome della specie	1-75
3	Numero linea	80
4	Nome della specie	1-60
4	Numero linea	80

Tabella 4: Dettaglio delle righe del file mechanism

Le tre linee di dati termodinamici rappresentano i coefficienti utilizzati nella formulazione polinomiale NASA a 7 coefficienti.

$$\frac{c_p^0(T)}{R} = a_0 + a_1 T - a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4$$

$$\frac{h^0(T)}{R} = a_0 + \frac{a_1}{2} T - \frac{a_2}{3} T^2 + \frac{a_3}{4} T^3 + \frac{a_4}{5} T^4 + \frac{a_5}{T}$$

$$\frac{s^0(T)}{R} = a_0 \ln(T) + a_1 T - \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 + a_6$$

I coefficienti numerici sono ricavati sperimentalmente; i primi 7 coefficienti a partire dalla linea 2 sono specifici per il range delle alte temperature, i successivi 7 appartengono al range delle basse temperature mentre l'ultimo valore serve per il calcolo di $H(T)$ cioè l'entalpia di formazione a 298 K.

Il file contenente il meccanismo è diviso in due parti: la prima contenente i dati della specie e la seconda contenente i dati della reazione. Nell'intestazione del file vengono elencate tutte le specie che sono definite nel seguito.

```

species(name='O2',
atoms='O:2',
thermo=(NASA([300.00, 760.00],
[ 3.46035080E+00, -8.85011121E-04, 5.15281056E-06, -5.40712413E-09, 1.87809542E-12,
-1.02942573E+03, 5.02236126E+00]),
NASA([760.00, 3500.00],
[ 2.81750648E+00, 2.49838007E-03, -1.52493521E-06, 4.50547608E-10, -4.87702792E-14,
-9.31713392E+02, 7.94729337E+00])))

```

In alcuni casi è possibile che il meccanismo completo sia scomposto in tre file: uno contenente il dettaglio delle specie, uno contenente le proprietà termochimiche e uno contenente le proprietà di trasporto. È possibile sfruttare un tool in Cantera che permette l'unione di questi 3 file in un unico file con estensione *cti*.

5.4 REACTOR

L'oggetto *Reactor* definito in Cantera rappresenta un reattore chimico 0D che simula il comportamento di un *Well Stirred Reactor*. Le variazioni del volume del reattore sono possibili a causa dello spostamento delle pareti.

Il Well Stirred Reactor è un modello semplificato di reattore chimico usato nella maggior parte degli studi riguardanti la combustione proprio per la sua semplicità. Alla base di questo modello ci sono le ipotesi:

- il reattore è aperto, cioè ammette fasi in ingresso e in uscita
- le fasi entranti nel volume di controllo vengono istantaneamente miscelate con quelle presenti all'interno;
- la fase in uscita dal volume di controllo è identica al contenuto del reattore nell'istante temporale considerato;

Queste assunzioni implicano che le reazioni chimiche siano governate dalla velocità di reazione e non dai processi di miscelamento.

Ritornando al reactor, le proprietà definite nell'ingresso sono:

- massa m ;
- volume del reattore V ;
- energia interna totale U ;
- frazioni in massa delle specie Y_i .

Note queste grandezze, possiamo calcolare:

- massa della specie i -esima

$$m_i = Y_i m$$

- energia totale interna specifica

$$u = \frac{U}{m}$$

- densità

$$\rho = \frac{m}{V}$$

- temperatura

$$T = T(u, \rho, Y_i)$$

- pressione

$$p = p(u, \rho, Y_i)$$

- frazione molare della specie i-esima

$$X_i = \frac{Y_i W}{M_i}$$

in cui M e M_i sono rispettivamente la massa molare media e della miscela i-esima contenute nel volume di controllo.

Adesso siamo in grado di scrivere le equazioni che descrivono l'evoluzione temporale delle variabili di stato. Definendo con A_w l'aria della parete w e v_w la sua velocità (positiva con un aumento di volume) si ha:

$$\frac{dV}{dt} = \sum_w A_w v_w \quad (41)$$

con t che rappresenta la variabile temporale. Le variazioni della massa sono attribuibili alla portata entrante \dot{m}_{in} , uscente \dot{m}_{out} e quella generata con reazioni di superficie sulle pareti \dot{m}_s :

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} + \dot{m}_s \quad (42)$$

Mentre le portate iniziali e finali sono calcolabili o comunque note, la portata generata sulla superficie delle pareti si calcola come:

$$\dot{m}_s = \sum_i W_i \sum_w A_w \dot{s}_{iw} \quad (43)$$

in cui \dot{s}_{iw} è la produzione molare per unità di tempo e superficie della specie i-esima sulla parete w .

Le equazioni per determinare la frazione in massa della specie Y_i vengono determinate sfruttando l'equazione di bilancio della massa includendo la produzione molare netta della specie per unità di volume e di tempo $\dot{\omega}_i$ dovuta a tutte le fasi presenti all'interno del volume:

$$\frac{d(mY_i)}{dt} = \dot{m}_{i,in} - \dot{m}_{i,out} + M_i \sum_w A_w \dot{s}_{iw} + VM_i \dot{\omega}_i \quad (44)$$

avendo definito $\dot{m}_{i,in}$, $\dot{m}_{i,out}$ calcolabili sommando le $\dot{m}_i = Y_i \dot{m}$ di ingressi e uscite del reattore. Rielaborando:

$$m \frac{dY_i}{dt} = \dot{m}_{i,in} - \dot{m}_{i,n} Y_i + M_i \sum_w A_w \dot{s}_{iw} + VM_i \dot{\omega}_i - Y_i \dot{m}_s \quad (45)$$

Sfruttando il primo principio della termodinamica per un sistema aperto otteniamo l'equazione dell'energia:

$$\frac{dU}{dt} = -p \frac{dV}{dt} - \dot{Q}_s + \dot{m}_{i,n} h_{i,n} - \dot{m}_{out} h \quad (46)$$

in cui il flusso di calore uscente dalle pareti del reattore \dot{Q}_s e l'entalpia specifica in ingresso $h_{i,n}$ e nel volume di controllo h sono calcolabili.

Essendo N_{sp} il numero delle specie contenute all'interno del volume si ricava un set di equazioni differenziali alle derivate ordinarie (ODE). Tutto quanto scritto dipende dalla geometria del problema o dalle variabili di stato del reattore. Il sistema si risolve con l'integrazione temporale in Cantera con un metodo opportunamente scelto tra quelli presentati in precedenza.

5.5 DETERMINAZIONE DEL VOLUME DEI REATTORI

Una variabile importante da valutare per l'integrazione temporale è il *tempo di residenza*

$$\tau_{res} = \frac{\rho V}{\dot{m}_{i,n}} \quad (47)$$

Il tempo di residenza è strettamente collegato con il volume del reattore ma non essendo nota a priori la densità della miscela all'interno del volume di controllo non possiamo valutare una delle due quantità a partire dall'altra. È necessario passare da un volume complesso, 3D, ad un volume più semplice 0D dato che il reattore è un Well Stirred. Per risolvere questo problema si può procedere iterativamente fino ad arrivare ad una certa tolleranza relativa sul valore esatto:

1. si calcola un volume iniziale $V^{(0)}$ utilizzando un valore di densità pari alla densità di N_2 con cui si riempie inizialmente il serbatoio:

$$V^{(0)} = \frac{\dot{m}_{i,n} \tau_{res}}{\rho^{(0)}}$$

2. con questo volume iniziale posso calcolare il tempo di residenza corrispondente all'iterata n , per un tempo in cui si raggiunge la soluzione stazionaria:

$$\tau_{res}^{(n)}$$

3. valuto l'errore relativo tra il tempo di residenza iniziale e quello corrispondente all'iterata n:

$$\text{err} = \frac{|\tau_{\text{res}}^{(n)} - \tau_{\text{res}}|}{|\tau_{\text{res}}|}$$

4. se l'errore così calcolato è inferiore alla tolleranza imposta allora si è trovato il volume di riferimento, altrimenti si reitera il calcolo usando un volume calcolato usando il nuovo tempo di residenza.

$$V^{(n)} = \frac{\dot{m}_{\text{in}} \tau_{\text{res}}^{(n)}}{\rho^{(n)}}$$

5.6 PROVA DI VALIDAZIONE

Proseguiamo quindi con il validare gli script che verranno utilizzati per implementare la rete di reattori sfruttando il lavoro di [17]: consideriamo una rete costituita da un serbatoio collegato ad un reattore in cui facciamo fluire una miscela di Argon, Metano, Ossigeno e Azoto alla temperatura di 300k e confrontiamo i risultati ottenuti con Chemkin e lo script realizzato sfruttando Python.

Il metano è il principale componente del gas naturale ed è un eccellente combustibile. Attualmente ci sono numerosi studi volti a valorizzare l'uso del gas naturale come fonte energetica alternativa al fine di sfruttare i numerosi giacimenti presenti sulla Terra, poiché le emissioni di inquinanti, in particolare di CO₂, risultano essere inferiori rispetto a quelle dei combustibili più pesanti.

L'obiettivo di questa prova è verificare che il codice sviluppato usando Cantera con linguaggio Python, a parità di condizioni iniziali, fornisca gli stessi risultati forniti dalla controparte in Chemkin.

Grandezza	Valore	Unità di misura
Serbatoio		
Portata \dot{m}	28.38	kg/s
Temperatura T	300	K
Pressione p	1	atm
Frazione molare χ_{Ar}	0.01	adim
Frazione molare χ_{CH_4}	0.05	adim
Frazione molare χ_{N_2}	0.74	adim
Frazione molare χ_{O_2}	0.2	adim

Tabella 5: Proprietà serbatoio

Grandezza	Valore	Unità di misura
Reattore		
Volume	1	m ³
Temperatura	2500	K
Pressione	1	atm
Frazione molare χ_{N_2}	1	adim

Tabella 6: Proprietà reattore

Per questa prova di validazione usiamo il *GRI-Mech 3.0*, un meccanismo [7] dettagliato per modellizzare la combustione di gas naturale composto da 53 specie e 325 reazioni chimiche ottimizzato per temperature comprese tra 1500 ÷ 2500 K e pressioni inferiori a 10 atm. Di seguito abbiamo la soluzione trovata a $t = 5$ s da cui possiamo calcolare il volume corrispondente.

Scarico - Soluzione stazionaria		
Grandezza	Chemkin	Python
Temperatura T	1457.7	1457.7
Frazione molare χ_{N_2}	0.739	0.739
Frazione molare χ_{O_2}	0.102	0.102
Frazione molare χ_{CH_4}	$1.75 \cdot 10^{-4}$	$1.75 \cdot 10^{-4}$
Frazione molare χ_{CO}	$2.34 \cdot 10^{-3}$	$2.34 \cdot 10^{-3}$
Frazione molare χ_{CO_2}	0.0474	0.0474
Frazione molare χ_{NO}	$7.75 \cdot 10^{-7}$	$7.75 \cdot 10^{-7}$
Frazione molare χ_{NO_2}	$4.65 \cdot 10^{-9}$	$4.64 \cdot 10^{-9}$
Frazione molare χ_{H_2O}	0.0987	0.0987

Tabella 7: Soluzione stazionaria

Dalla tabella precedente vediamo che lo script realizzato in Python ricalca perfettamente il comportamento in Chemkin. L'errore è molto contenuto ed in alcuni casi assente, il che conferma quanto detto.

REACTOR NETWORK

6.1 INTRODUZIONE AL MODELLO REACTOR NETWORK

Il lavoro svolto in questa tesi e quello svolto da [20], si è basato sulle ricerche di [15], volte a dimostrare l'accuratezza degli indici di emissione relativi a NO_x , CO in relazione al meccanismo considerato.

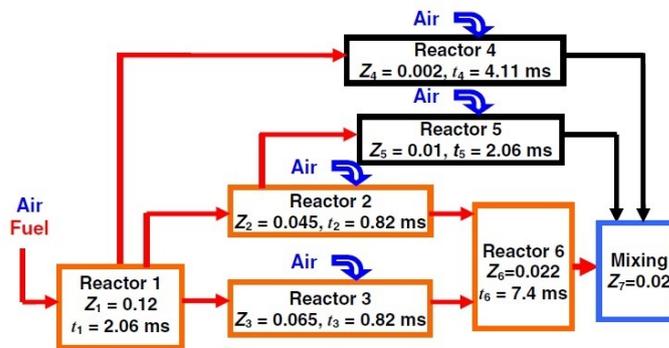


Figura 21: Reactor Network usato da Starik

L'analisi è condotta schematizzando il combustore con il reactor network in fig. 21, nella regione vicino l'iniettore si ha la zona fuel rich e alte temperature per mantenere una combustione stabile, mentre negli altri reattori si adotta una frazione stechiometrica variabile a seconda del comportamento che si vuole ottenere.

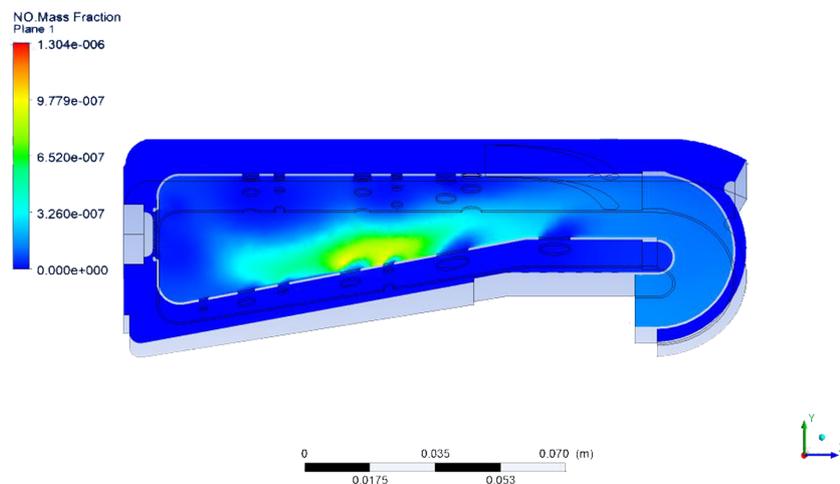
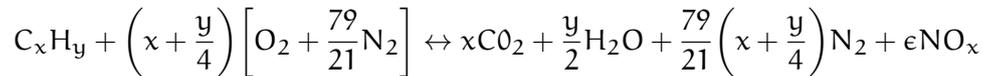


Figura 22: Andamento della frazione in massa del NO su un piano longitudinale

Il reactor network è un modello 0D per la descrizione di reazioni chimiche all'interno del combustore.

Per ricavare le zone a iso *Mixture Fraction* Z si scrivono le reazioni chimiche e le conseguenti equazioni di bilancio di massa. Considerando una combustione 2-step la reazione chimica di riferimento è:



L'unica concentrazione trascurabile è quella del NO. Possiamo calcolare il coefficiente stechiometrico utile per ricavare le grandezze fondamentali per la nostra analisi. Si ricava la prima equazione atta alla determinazione del coefficiente stechiometrico S :

$$xM_C + yM_H = M_{C_{12}H_{26}}$$

considerando la massa molare del n-dodecano $NC_{12}H_{26}$:

$$M_{C_{12}H_{26}} = 170 \frac{Kg}{Kmol}$$

anche quelle del O_2 e del N_2 :

$$M_{O_2} = 32 \frac{Kg}{Kmol}$$

$$M_{N_2} = 28 \frac{Kg}{Kmol}$$

$$\left(12 + \frac{26}{4}\right) \left(M_{O_2} + \frac{79}{21}M_{N_2}\right) = 2540 \frac{Kg}{Kmol}$$

Facendo il rapporto otteniamo il coefficiente stechiometrico S :

$$S = 14.9$$

Una volta trovato il coefficiente stechiometrico si può scrivere l'equazione del bilancio in massa nella quale i termini con pedice b sono relativi alle specie combuste e con u alle specie incombuste:

$$\dot{m}_{F1} + \dot{m}_{O_2} + \dot{m}_{N_2} = \dot{m}_{fb} + \dot{m}_{O_{2b}} + \dot{m}_{O_{2u}} + \dot{m}_{N_2} + \dot{m}_{fu}$$

Consideriamo:

$$\dot{m}_{f1} + \dot{m}_{O_2} + \dot{m}_{N_2} = \dot{m}_{air} = 1$$

inoltre:

$$\dot{m}_{fb} + \dot{m}_{O_{2b}} = \dot{m}_{fb} + 5.92\dot{m}_{fb}$$

di conseguenza si può ricavare \dot{m}_{fb} :

$$\dot{m}_{fb} = \frac{1 - [\dot{m}_{fu} + \dot{m}_{N_2} + \dot{m}_{O_{2u}}]}{6.92}$$

da \dot{m}_{fb} si può ricavare \dot{m}_{f1} :

$$\dot{m}_{f1} = \dot{m}_{fb} + \dot{m}_{fu}$$

grazie a \dot{m}_{f1} e sapendo che \dot{m}_{fst} è $\frac{1}{14.9}$ si può ricavare ϕ :

$$\phi = \frac{\dot{m}_{f1}}{\dot{m}_{fst}}$$

e infine da ϕ si può ricavare la variabile di nostro interesse il Mixture Fraction (Z) indicato su ANSYS con MF perchè Z è già stata utilizzata come variabile spaziale:

$$Z = MF = \frac{1}{1 + \frac{S}{\phi}}$$

È stata supposta l'iniezione di combustibile solo nei primi 3 reattori, quindi si considera una distribuzione del tipo:

- 60% nel primo reattore;
- 40% nel secondo reattore;
- 10% nel terzo reattore.

Conoscendo le portate di combustibile si possono ricavare le portate d'aria:

$$Z_1 = \frac{\dot{m}_{f1}}{\dot{m}_{f1} + \dot{m}_{a1}}$$

dall'equazione del MF si può ricavare \dot{m}_{a1} :

$$\dot{m}_{a1} = \frac{\dot{m}_{f1}(1 - Z_1)}{Z_1}$$

si fa la stessa cosa col secondo reattore:

$$Z_2 = \frac{\dot{m}_{f1} + \dot{m}_{f2}}{\dot{m}_{f1} + \dot{m}_{a1} + \dot{m}_{f2} + \dot{m}_{a2}}$$

e quindi

$$\dot{m}_{a2} = \frac{A - BZ_2}{Z_2}$$

con:

- $A = \dot{m}_{f1} + \dot{m}_{f2}$
- $B = \dot{m}_{f1} + \dot{m}_{a1} + \dot{m}_{f2}$

A questo punto si è suddiviso il liner interno in 5 regioni secondo lo schema in fig. 23:

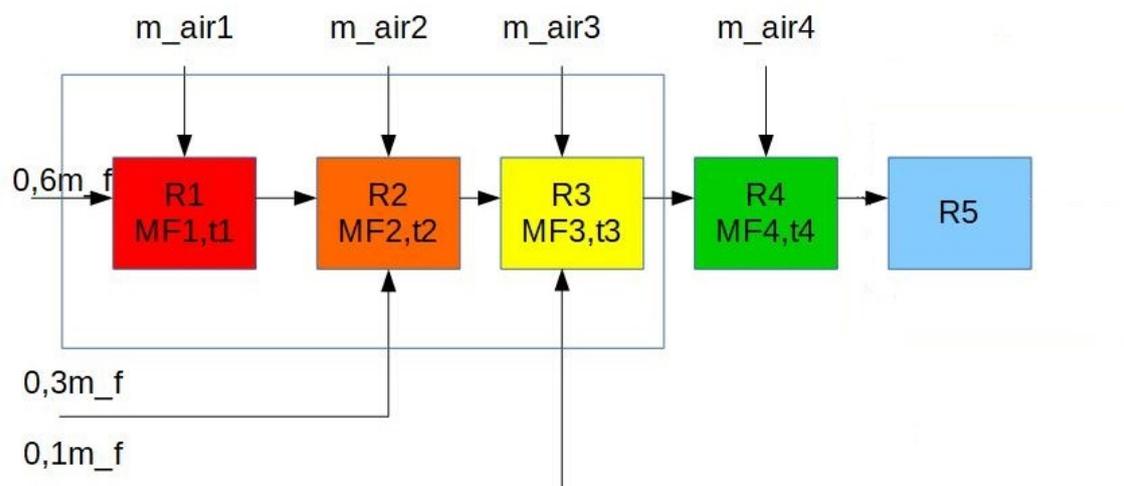


Figura 23: Diagramma schematico del modello a reattore per il combustore del TJ SR30.

Con queste considerazioni si possono calcolare i volumi *iso-MF*, i tempi di residenza e le portate di aria e combustibile:

70000 RPM	$V [m^3]$	$\tau_{res} [ms]$	Z_{medio}	$m_{air_i} [g/s]$	$m_{fuel_i} [g/s]$
R1	2,84294E – 07	2,045812447	0,179241218	2,075968942	0,45336
R2	9,43548E – 06	11,46326929	0,09379115	4,49456855	0,22668
R3	1,80487E – 05	16,0409372	0,041876886	10,71722903	0,07556
R4	3,39624E – 05	16,21682422	0,020373245	19,04449003	0
R5	0,000130716	2,622352712	0,008868827	48,10942912	0

Tabella 8: Risultati ottenuti da [20], reactor network a 5 reattori

6.2 SURROGATI DEL JET FUEL

Facciamo una breve panoramica sui surrogati impiegati negli script ponendo l'attenzione sui meccanismi che ne dettagliano il comportamento e sulle proprietà termochimiche. Come già detto nell'introduzione, generalmente i bio combustibili vengono ricavati da oli vegetali o grassi animali. Il $nC_{12}H_{26}$ si trova nelle noci nere, è un alcano liquido con formula $CH_3(CH_2)_{10}CH_3$.

Per descrivere la chimica di questo surrogato facciamo riferimento al *JetSurf - a Jet Surrogate Fuel Model* [21]: è un modello dettagliato di reazioni chimiche per la combustione di surrogati del jet fuel. Questo modello è stato sviluppato con la collaborazione di molteplici università ed è finanziato dall'*Air Force Office of Scientific Research*. Il JetSurf 2.0 comprende 348 specie e 2163 reazioni, gli sforzi compiuti per il suo sviluppo sono stati indirizzati alla modellazione del n-dodecano e n-butil-cicloesano ma include la chimica ad alte temperature di tutti gli n-alcani.

Il $nC_{10}H_{22}$ si può ricavare dall'origano, è un alcano con formula $CH_3(CH_2)_8CH_3$.

È un liquido incolore, meno denso dell'acqua e non solubile in acqua. In vapore è più pesante dell'aria e in alte concentrazioni i suoi vapori possono avere effetti narcolettici. Il meccanismo utilizzato per modellizzare questo bio combustibile è stato sviluppato da Jocelyn Luche [8] presso l'*Universite d'Orleans* come risultato di una tesi di dottorato. Il modello base è il meccanismo di *Daugat* per il surrogato del kerosene che coinvolge 225 specie e 1800 reazioni, mentre il modello di *Luche* si compone di 91 specie e 991 reazioni.

Il C_7H_{16} invece viene ricavato dal cardamomo, è un alcano con formula $CH_3(CH_2)_4CH_3$.

Per questo surrogato invece facciamo riferimento al meccanismo *San Diego* sviluppato dall'*Università di San Diego* [18]. Le ricerche svolte all'*UCSD* sono finanziate da *NASA*, vari settori del dipartimento delle difese *DOD*, dipartimento di energia *DOE* e la *National Science Foundation -NSF*. Il meccanismo San Diego è stato sviluppato per studiare i problemi riguardanti la stabilità della fiamma, iniezione ad alte temperature e detonazioni. È stato sviluppato assemblando meccanismi riguardanti diverse specie chimiche, partendo dai più semplici fino ad arrivare a quelli più complessi. Il numero di specie coinvolte e reazioni associate è tenuto al minimo necessario per descrivere quanto di interesse per minimizzare il più possibile l'incertezza derivante dai parametri utilizzati.

Per quanto riguarda le proprietà termochimiche dei combustibili appena descritti possiamo fare riferimento alla tabella 9:

Formula molecolare	C ₇ H ₁₆	nC ₁₀ H ₂₂	nC ₁₂ H ₂₆
Numero CAS	142 – 82 – 5	124 – 18 – 5	112 – 40 – 3
Massa molare [g mol ⁻¹]	100.205	142.286	170.340
Apparenza	Liquido incolore	Liquido incolore	Liquido incolore
Odore	Simil petrolio	Simil gasolio	Simil gasolio
Densità [g cm ⁻³]	0.6795	0.7495	0.730
Punto di fusione [° C]	-90.55	-30	-9.3
Punto di ebollizione [° C]	98.38	173.8	214
Pressione di vapore [Pa]	5330	195	18
$\Delta_f H_{298}$ [K J ⁻¹ mol ⁻¹]	-225.2	-302.1	-353.5
$\Delta_c H_{298}$ [MJ mol ⁻¹]	-4825	-6779.21	-7901.74

Tabella 9: Proprietà termodinamiche dei combustibili usati

Un altro meccanismo che è possibile utilizzare è quello sviluppato dal *CRECK Modeling Group* [22] del Politecnico di Milano, guidato dai Prof. Eliseo Ranzi e Prof. Tiziano Faravelli. Questo meccanismo è composto da 484 specie e 19341 reazioni, quindi per poter essere applicato per i nostri scopi è necessario un computer dalle prestazioni elevate oppure bisogna ridurlo, in modo da poter risolvere la rete in tempi ragionevoli. Un possibile esempio di riduzione è riportato come esempio sul sito di Cantera [19], inoltre è presente in appendice. Per riepilogare, in tabella 10 riportiamo i surrogati considerati e il meccanismo impiegato per modellizzare ciascun surrogato:

Surrogato	Meccanismo impiegato
C ₇ H ₁₆	<i>UCSD</i>
nC ₁₀ H ₂₂	<i>Luche</i>
nC ₁₂ H ₂₆	<i>JetSurf</i>

Tabella 10: Surrogati e meccanismi associati

6.3 REACTOR NETWORK IMPLEMENTATO

Vediamo come è definito il reactor network implementato negli script realizzati in questa tesi. Per prima cosa è necessario definire il file contenente il meccanismo, quindi il combustibile surrogato, che dovrà essere utilizzato nello script; ad esempio nel caso del *n-dodecano* il meccanismo è contenuto nel file *JetSurf.cti*:

```
gas = ct.Solution('JetSurf.cti')
```

Per comodità possiamo definire a priori le proprietà del gas senza dover ripetere la scrittura del codice; per definire temperatura, pressione e composizione l'istruzione da fornire è la seguente:

```
gas.TPX = 700.0, ct.one_atm, 'NC12H26:1.0'
```

Il combustibile e l'aria da fornire ai reattori sono contenuti nei rispettivi serbatoi:

```
fuel_in = ct.Reservoir(gas)
air = ct.Solution('air.xml')
```

in cui *air.xml* è il file che descrive l'aria ed è incluso in Cantera. collegati ai vari reattori con dei *MassFlowController* che stabiliscono la portata che passa tra i due oggetti, in questo caso i primi due reattori, e a quale velocità:

```
m2 = ct.MassFlowController(r1, r2, mdot)
```

É presente anche un serbatoio contenente idrogeno che serve a favorire l'innesco della reazione: tramite una gaussiana si stabilisce in quale istante, per quanto tempo e quanta deve essere la quantità di idrogeno per alzare momentaneamente la temperatura e innescare la fiamma.

```
fwhm = 0.0001
```

```
amplitude = 0.005
```

```
t0 = 0.00001
```

```
igniter_mdot = lambda t: amplitude * math.exp(-(t-t0)**2 * 4 * math.log(2) / fwhm**2)
```

Inizialmente i 5 reattori sono riempiti con gas inerte, N₂.

```
gas.TPX = 300.0, ct.one_atm*1.34, 'N2:1.0'
```

```
r_i = ct.IdealGasReactor(gas, volume)
```

Tra di loro i cinque reattori sono collegati usando i *MassFlowController*, per finire usiamo una valvola per collegare l'ultimo reattore con un serbatoio che funge da scarico.

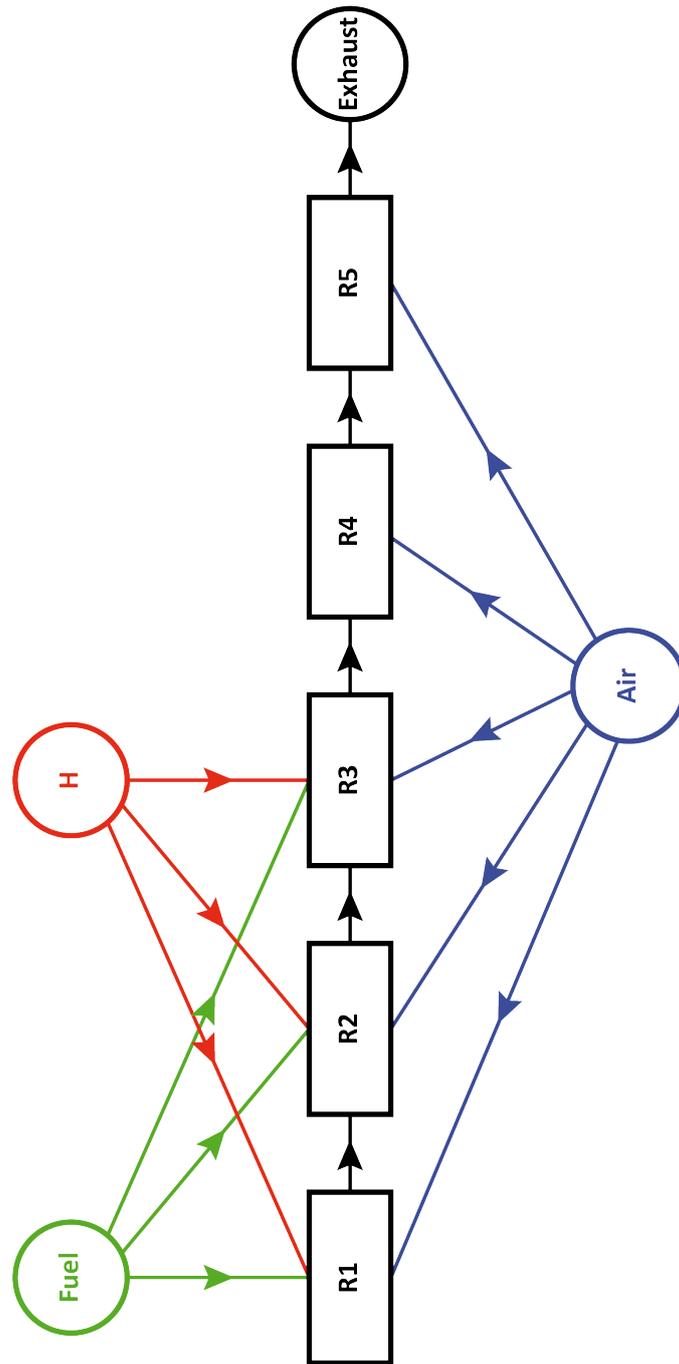


Figura 24: Reactor Network

6.4 LEGGE DEL D²

Durante la fase di iniezione la temperatura del combustibile aumenta e ne consegue l'evaporazione di una certa quantità. L'evaporazione del combustibile comporta un simultaneo processo di scambio di massa e calore, in cui il calore viene trasferito dalla superficie della goccia all'ambiente circostante tramite conduzione e convezione. La velocità di evaporazione dipende da pressione, temperatura e proprietà di trasporto del gas; temperatura, volatilità e diametro delle gocce e la velocità della goccia rispetto a quella del gas circostante. In *Ansys* si considera un modello interno di evaporazione, per poter considerare questo fenomeno negli script realizzati in Python andiamo a considerare la *Legge del D²* [14].

Consideriamo un sistema di riferimento sferico in cui la coordinata r rappresenta il raggio della goccia, facciamo anche alcune ipotesi:

- il processo di evaporazione è quasi stazionario, si semplifica il problema perchè possiamo trascurare le equazioni differenziali parziali;
- la temperatura della goccia è uniforme e sotto il punto di ebollizione del liquido;
- la frazione in massa del vapore alla superficie della goccia è determinata dall'equilibrio liquido-vapore;
- le proprietà termofisiche sono costanti.

Con queste assunzioni possiamo calcolare la variazione di diametro subita con l'evaporazione. Usiamo l'equazione di conservazione della massa per determinare il parametro adimensionale

$$B_\gamma = \frac{Y_{A,s} - Y_{A,\infty}}{1 - Y_{A,s}}$$

in cui $Y_{A,s}$ è la frazione in massa alla superficie della goccia, mentre $Y_{A,\infty}$ è la frazione in massa in una zona molto lontana dalla superficie.

Con questo parametro possiamo calcolare la velocità di evaporazione come

$$\dot{m} = 4\pi r_s \rho D_{ab} \ln(1 + B_\gamma)$$

Questa relazione ci dice che quando $B_\gamma = 0$ non abbiamo evaporazione, così come all'aumentare di B_γ aumenta l'evaporazione.

Possiamo calcolare il diametro della goccia scrivendo un bilancio di massa che stabilisce che la velocità con cui il diametro diminuisce è pari alla velocità con cui il liquido evapora:

$$\frac{d m_d}{d t} = -\dot{m} \quad (48)$$

in cui definiamo la massa della goccia (droplet) con m_d , che risulta pari a:

$$m_d = \rho_l \pi \frac{D^3}{6}$$

Quindi, sostituendo

$$\frac{dD}{dt} = -\frac{4\rho\mathcal{D}_{ab}}{\rho_l D} \ln(1 + B_\gamma)$$

In letteratura è più comune esprimere in termini di D^2 piuttosto che di D :

$$\frac{dD^2}{dt} = -\frac{8\rho\mathcal{D}_{ab}}{\rho_l} \ln(1 + B_\gamma) \quad (49)$$

Questa equazione esprime una relazione tra il diametro e il tempo: il D^2 varia linearmente nel tempo t con pendenza pari a $-K$, definita come costante di evaporazione:

$$K = \frac{8\rho\mathcal{D}_{ab}}{\rho_l} \ln(1 + B_\gamma) \quad (50)$$

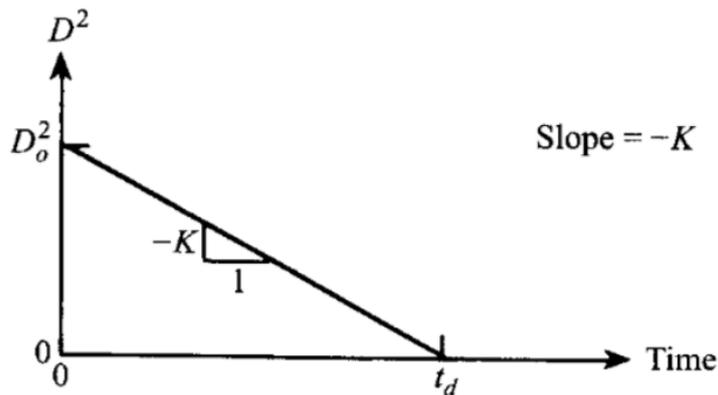


Figura 25: Legge del D^2

La relazione generale che esprime quindi la variazione del diametro della goccia nel tempo è quindi

$$D^2(t) = D_0^2 - Kt \quad (51)$$

Questa equazione è la *Legge del D^2* per l'evaporazione della goccia.

Possiamo adesso ritornare al nostro caso, consideriamo $\tau_{res} = 2.04 \mu s$, $D = 40 \mu m$ dal diagramma in fig. 26 riportato in [16]. La figura mostra il *Sauter Mean Diameter* alla velocità di iniezione v_0 in funzione della velocità del motore. Questo diametro è definito

come la media dei diametri delle particelle. Lo si può definire come il diametro della sfera che ha lo stesso rapporto *Volume/Area* della particella di interesse. Se definiamo

$$d_s = \sqrt{\frac{A_p}{\pi}}$$

e

$$d_v = \left(\frac{6 V_p}{\pi}\right)^{1/3}$$

in cui A_p, V_p sono rispettivamente l'area e il volume della particella, allora il Sauter Diameter viene definito come:

$$SD = d_{32} = \left(\frac{d_v}{d_s}\right)^2 = 6 \frac{V_p}{A_p}$$

da cui si ottiene il *SMD* come media di tutte le misurazioni.

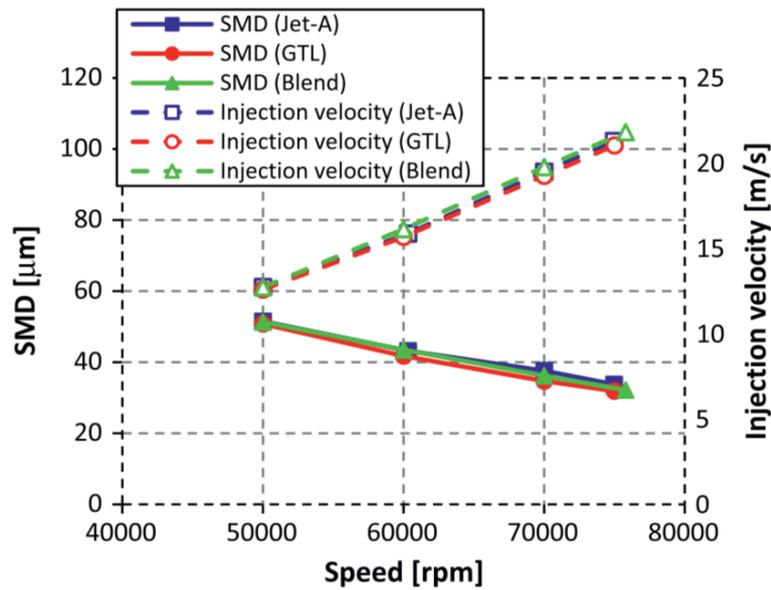


Figura 26: Sauter Mean Diameter *SMD*

Considerando ad esempio il surrogato $NC_{12}H_{26}$, si ha nel primo reattore

- $K = 2.15 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$;
- $D_0 = 40 \text{ μm}$;
- $D_1 = 34 \text{ μm}$;

quindi si ha una riduzione di diametro, che passa da $D_0 = 40 \text{ μm}$ a $D_1 = 34 \text{ μm}$. L'evaporato dipende dal numero di particelle, dal diametro di partenza D_0 , dalla co-

stante di evaporazione K e dal tempo di residenza τ_{res} . Per svincolarci dal numero di residenza possiamo esprimere la variazione di volume, nel primo reattore, come:

$$\frac{\Delta V_{R1}}{V_{R1}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r \left[\left(\frac{D_0}{2}\right)^3 - \left(\frac{D_1}{2}\right)^3 \right]}{\frac{4}{3}\pi r \left(\frac{D_0}{2}\right)^3} = 1 - \left(\frac{D_1}{D_0}\right)^3 = 0.38$$

Si modifica di conseguenza la portata di combustibile:

- nel primo reattore modifichiamo la portata di combustibile in modo da ottenere un rapporto di equivalenza

$$\lambda = \frac{\dot{m}_{air}}{\dot{m}_{fuel} \cdot \% \text{ evaporato}} = \frac{2.07}{0.453 \cdot 0.38} = 11.97 \approx 12$$

che è molto vicino allo stechiometrico;

- nel secondo reattore invece si aggiunge alla portata di combustibile quanto non è evaporato nel primo reattore.

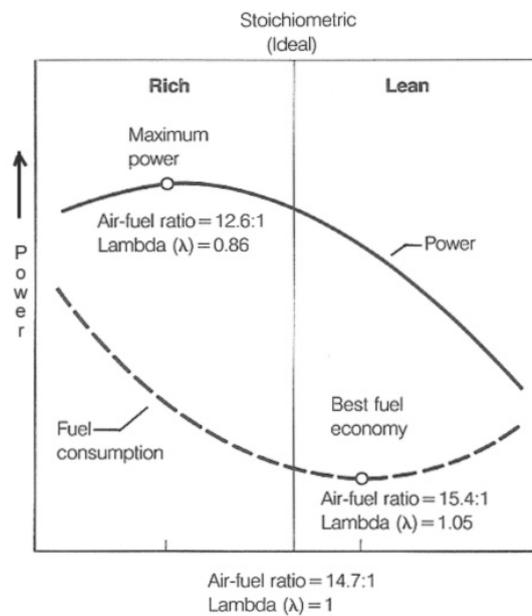


Figura 27: Equivalence ratio

Quanto detto è un discorso fatto a titolo di tentativo vista l'incertezza del diametro iniziale D_0 e della costante di evaporazione K . Per studiare le emissioni faremo uno studio parametrico considerando l'evaporato come parametro.

6.5 RISULTATI

Un modo per quantificare le emissioni di un motore è utilizzando gli indici di emissione, che rappresentano i g di specie emessa per kg di combustibile bruciato. Possiamo allora definire l'EINO_x, cioè l'indice di emissione di ossidi di azoto:

$$EINO_x = \frac{\dot{m}_{NO} \frac{M_{NO_2}}{M_{NO}} + \dot{m}_{NO_2}}{\dot{m}_f}$$

e l'EICO, cioè l'indice di emissione del monossido di carbonio:

$$EICO = \frac{\dot{m}_{CO}}{\dot{m}_f}$$

in cui si definisce con \dot{m}_i la portata della specie *i*-esima, \dot{m}_f la portata di combustibile e con M_i la massa molare della specie *i*-esima.

Dal reactor network abbiamo ottenuto i risultati tabellati nella pagina successiva ed espressi in [g/kg].

C ₇ H ₁₆		
Evaporato	EICO	EINO _x
0,2	7,43E - 05	3,83E - 01
0,3	4,55E - 05	2,28E - 01
0,4	3,40E - 05	1,68E - 01
0,5	2,78E - 05	1,43E - 01

Tabella 11: Risultati Emissioni per il C₇H₁₆ al variare dell'evaporato

nC ₁₀ H ₂₂		
Evaporato	EICO	EINO _x
0,2	3,55E - 05	3,10E - 01
0,3	3,04E - 05	1,84E - 01
0,4	2,75E - 05	1,32E - 01
0,5	2,54E - 05	1,12E - 01

Tabella 12: Risultati Emissioni per il nC₁₀H₂₂ al variare dell'evaporato

Evaporato	nC ₁₂ H ₂₆	
	EICO	EINO _x
0,2	8,80E - 05	4,52E - 01
0,3	6,09E - 05	3,08E - 01
0,4	4,58E - 05	2,37E - 01
0,5	3,71E - 05	2,06E - 01

Tabella 13: Risultati Emissioni per il nC₁₂H₂₆ al variare dell'evaporato

Per verificare l'attendibilità dei risultati possiamo confrontarli con quanto ottenuto in [16], misurando le emissioni: in questo lavoro si sono comparate le emissioni di tre diversi surrogati, tra cui l'*n-dodecano* sul turbogetto SR-30.

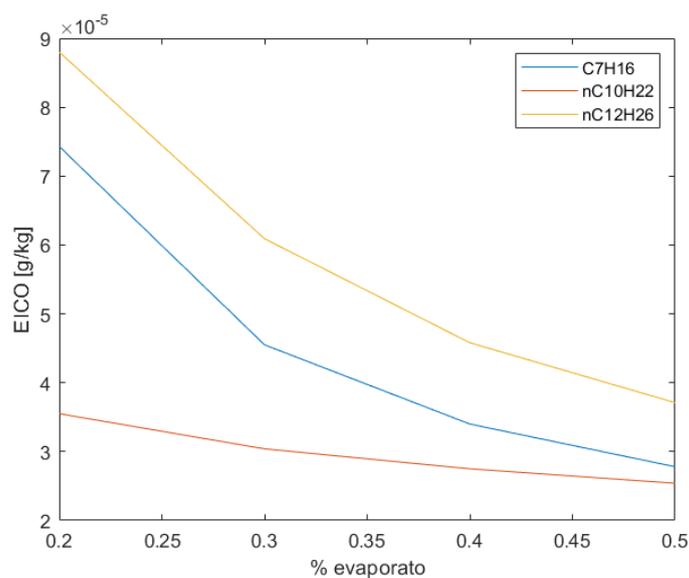


Figura 28: Confronto EICO per i tre surrogati

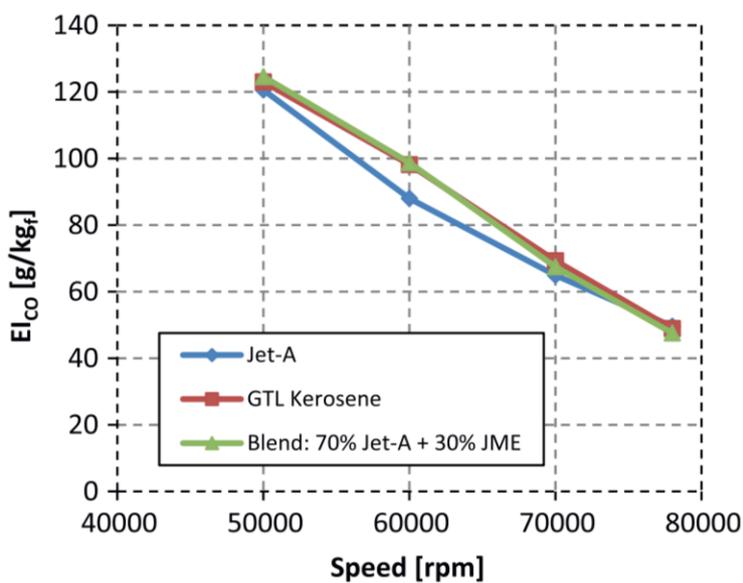


Figura 29: Emissioni sperimentali EICO, [16]

Le emissioni di monossido di carbonio non sono ben rappresentate dal modello implementato, questo può essere dovuto al fatto che i meccanismi utilizzati per descrivere i vari combustibili non sono stati sviluppati tenendo molto in considerazione questa specie chimica.

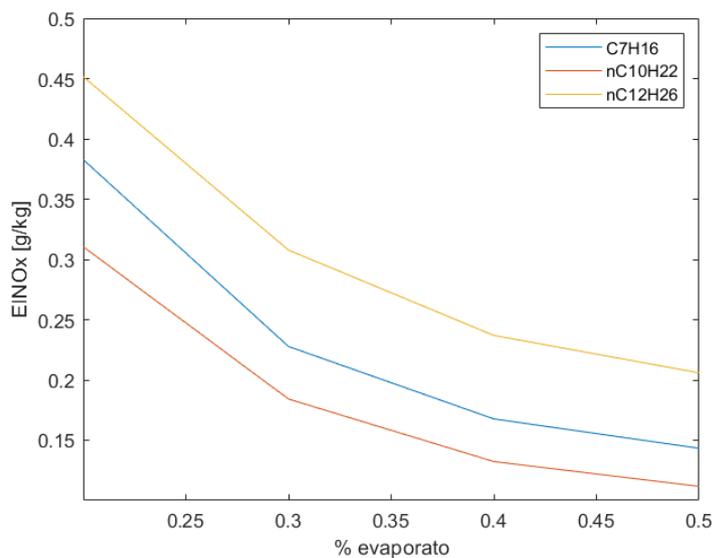


Figura 30: Confronto EINO_x per i tre surrogati

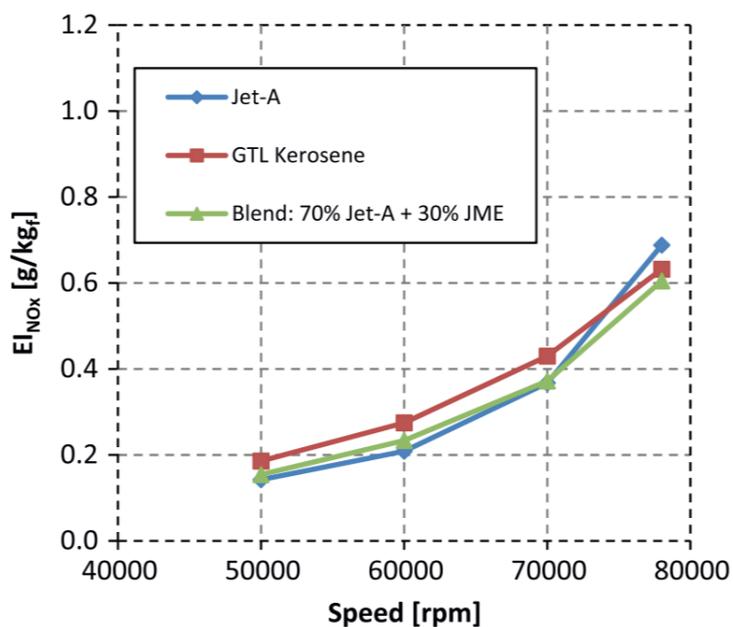


Figura 31: Emissioni sperimentali EINO_x, [16]

Le emissioni di ossido di azoto sono molte vicine a quelle ottenute sperimentalmente; per quanto riguarda l'*eptano*, andando a considerare 70000 rpm si ottiene dal CFD un valore di EINO_x ≈ 0.37 g/kg, mentre dal reactor network implementato con Cantera si ottiene EINO_x = 0.35 g/kg (per evap = 0.25), quindi un valore molto soddisfacente.

CONCLUSIONI

A seguito delle rigide politiche riguardanti la riduzione delle emissioni di agenti inquinanti è diventato necessario adottare provvedimenti sia di natura tecnologica, e quindi mirati all'efficienza dei motori, sia riguardanti la chimica della combustione. Per non fare sempre affidamento su combustibili come il *kerosene*, ottenuto dalla distillazione frazionata di petrolio, si cerca di studiare *bio combustibili* ottenuti da origine vegetale.

Un *reactor network* è la scelta migliore per questo tipo di analisi, disaccoppiando lo studio dettagliato della fluidodinamica da quello della chimica e permettendo in questa maniera di stimare numericamente le emissioni degli agenti inquinanti.

Per realizzare questo reactor network abbiamo utilizzato *Cantera*, un software open-source per la programmazione ad oggetti che permette lo studio di una rete di reattori, in questo caso lo studio è 0D dato che abbiamo usato lo *Well Stirred Reactor*, è però necessario un file contenente il meccanismo del combustibile che deve essere studiato.

Sfruttando gli oggetti in *Cantera* è stato possibile realizzare degli script in *Python* che hanno permesso l'implementazione del reactor network. Per la validazione è stata utilizzata una rete confrontata poi con risultati ottenuti con il software *Chemkin*, ottenendo errori molto contenuti. Una volta implementata, la rete è stata studiata testando tre diversi combustibili: *l'n-dodecano (-JetSurf-)* $\text{nC}_{12}\text{H}_{26}$, *l'n-decano (-Luche-)* $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ e *l'eptano -UCSD-* C_7H_{16} . Per poter studiare il problema è stato necessario considerare la legge di evaporazione, meglio nota come *Legge del D²*. Sono stati calcolati gli indici di emissione EICO, EINO_x al variare della percentuale di combustibile evaporato, successivamente questi valori sono stati confrontati con quanto ottenuto nel combustore *SR-30* sfruttando risultati sperimentali. Per quanto riguarda l'EICO i valori ottenuti sono molto distanti da quanto ottenuto sperimentalmente, mentre considerando l' EINO_x i risultati ottenuti per l'eptano sono molto vicini a quelli ottenuti sperimentalmente per percentuale di evaporato compreso tra $0.2 \div 0.3$.

Per continuare il lavoro svolto in questa tesi si può pensare ad una strada per calcolare in maniera esatta le emissioni di monossido di carbonio e più in generale si può pensare, anche per le emissioni di ossidi di azoto, ad un miglior metodo per la stima dell'evaporato in modo da raffinare maggiormente la precisione dei risultati.

Parte I

APPENDICE

SENSORISTICA

Sul banco di prova del *MiniLab* Inclusi nel banco di prova *MiniLab* trovano alloggiamento i sensori necessari per la misura dei principali parametri che caratterizzano il ciclo termodinamico del motore. I relativi dati vengono elaborati da un sistema di acquisizione digitale installato sul banco (il National Instruments 6218). Esso può essere collegato, tramite un cavo USB, ad un computer per permettere la memorizzazione e la visualizzazione in tempo reale dei dati acquisiti. In figura 32 viene riportata la posizione dei sensori utilizzati per la misura di temperature, pressioni, spinta, velocità di rotazione e portata di combustibile.

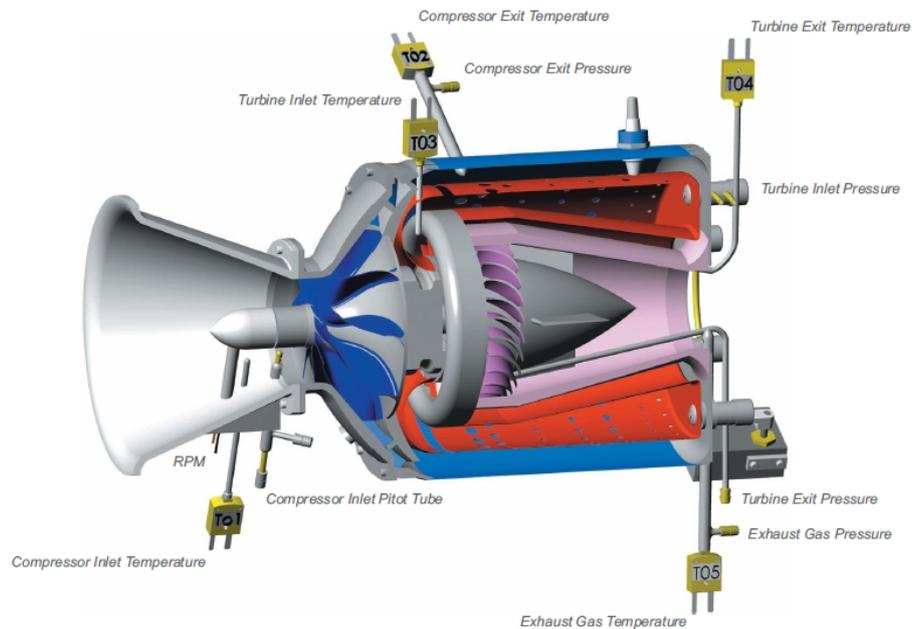


Figura 32: Posizione dei sensori

In tabella 14 viene riportato un elenco delle caratteristiche dei sensori.

Parametro [-]	Tipo sensore [-]	Intervallo di misura [-]	Uscita sensore [Volt]
P ₁	Setra Differential	0 - 25" [WC]	0,0 - 5,0
P ₂	Setra Model 209	0 - 50 [psig]	0,5 - 5,0
P ₃	Setra Model 209	0 - 50 [psig]	0,5 - 5,5
P ₄	Setra Model 209	0 - 5 [psig]	0,5 - 5,5
P ₅	Setra Model 209	0 - 5 [psig]	0,5 - 5,5
\dot{m}_f	Setra Model 209	0 - 200 [psig]	0,5 - 5,5
RPM	Pulse Counting	0 - 100000 [RPM]	
Spinta	Pulse Counting	0 - 10000 [RPM]	
T ₁	Termocoppia tipo K	Max 1375 [°C]	
T ₂	Termocoppia tipo K	Max 1375 [°C]	
T ₃	Termocoppia tipo K	Max 1375 [°C]	
T ₄	Termocoppia tipo K	Max 1375 [°C]	
T ₅	Termocoppia tipo K	Max 1375 [°C]	

Tabella 14: Caratteristiche sensori

Osservando la tabella si possono notare diverse particolarità, prima fra tutte il fatto che la misura della portata di combustibile non viene effettuata utilizzando un flussometro, ma misurando la sua pressione e correlandola con la relativa portata. Non essendo una lettura diretta, potrebbe essere influenzata da errori quali variazioni di densità e viscosità.

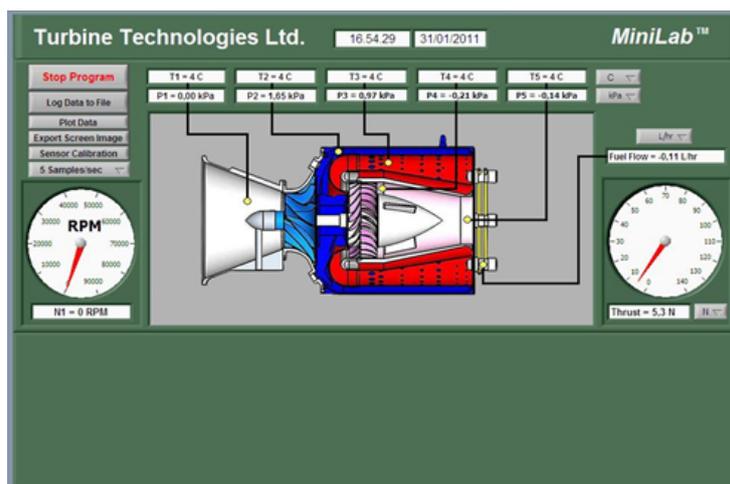


Figura 33: MiniLab [13]

Le termocoppie di tipo K sono delle giunzioni che presentano il polo positivo costruito con una lega di nichel e cromo e quello negativo da nichel e alluminio.

SCRIPT PER LA RIDUZIONE DI UN MECCANISMO

```

gas = ct.Solution('gri30.xml')
initial_state = 1200, 5 * ct.one_atm, 'CH4:0.35, O2:1.0, N2:3.76'

# Run a simulation with the full mechanism
gas.TPX = initial_state
r = ct.IdealGasConstPressureReactor(gas)
sim = ct.ReactorNet([r])

tt = []
TT = []
t = 0.0
# Rmax is the maximum relative reaction rate at any timestep
Rmax = np.zeros(gas.n_reactions)
while t < 0.02:
    t = sim.step()
    tt.append(1000 * t)
    TT.append(r.T)
    rnet = abs(gas.net_rates_of_progress)
    rnet /= max(rnet)
    Rmax = np.maximum(Rmax, rnet)

plt.plot(tt, TT, label='K=53, R=325', color='k', lw=3, zorder=100)

# Get the reaction objects, and sort them so the most active reactions are first
R = sorted(zip(Rmax, gas.reactions()), key=lambda x: -x[0])

# Test reduced mechanisms with different numbers of reactions
C = plt.cm.winter(np.linspace(0,1,5))
for i,N in enumerate([40,50,60,70,80]):
    # Get the N most active reactions
    reactions = [r[1] for r in R[:N]]

# find the species involved in these reactions. At a minimum, include all
# species in the reactant mixture

```

```
species_names = {'N2', 'CH4', 'O2'}
for reaction in reactions:
    species_names.update(reaction.reactants)
    species_names.update(reaction.products)

# Get the species objects
species = [gas.species(name) for name in species_names]

# create the new reduced mechanism
gas2 = ct.Solution(thermo='IdealGas', kinetics='GasKinetics',
species=species, reactions=reactions)
```

BIBLIOGRAFIA

- [1] F.L. Dryer e I. Glassman. «High-temperature oxidation of CO and CH₄». In: *Symposium (International) on Combustion* (1973).
- [2] F. Magnussen e B.H. Hjertager. «On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion». In: (1977).
- [3] B. F. Magnussen. «On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow». In: *19th AIAA Aerospace Science Meeting* (1981).
- [4] Charles K. Westbrook e Frederick L. Dryer. «Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion». In: *Progress in Energy and Combustion Science* (1984).
- [5] W.P. Jones e R.P. Lindstedt. «Global reaction schemes for hydrocarbon combustion». In: *Combustion and Flame* 73.3 (1988), pp. 233–249.
- [6] B. F. Magnussen. «Modeling of NO_x and soot formation by the Eddy Dissipation Concept». In: *Int.Flame Research Foundation* (1989).
- [7] G.P. Smith. *GRI-Mech: An Optimized Detailed Chemical Reaction Mechanism for Methane Combustion*. 1995.
- [8] J. Luche. «Obtention de modèles cinétiques réduits de combustion, Application à un mécanisme du kérosène». Tesi di laurea mag. Université d'Orleans, 2003.
- [9] A. Agosta et al. «Reference components of jet fuels: kinetic modeling and experimental results». In: *Experimental Thermal and Fluid Science* 28.7 (2004), pp. 701–708.
- [10] Mikael H Emma Nugrem Kjell Aleklett. «Aviation fuel and future oil production scenarios». In: *Energy Policy* 37, 4003-4010 (2009).
- [11] Dilip R. Ballal Arthur H. Lefebvre. *Gas Turbine Combustion*. 3^a ed. CRC Press, 2010.
- [12] Sarviya RM Gupta KK Rehman A. «Bio-fuels for the gas turbine: a review». In: *Renew Sust Energy Rev* (2010).

- [13] *Report di Avanzamento sull'analisi della camera di combustione del Tj SR30*. 2011.
- [14] S. Turns. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. 2011.
- [15] Alexander B. Lebedev Alexander M. Starik* Vycheslav E. Kozlov e Nataliya S. Titova. «Application of reactor net models for the simulation of gas-turbine combustor emissions». In: *Int. J. Sustainable Aviation* (2014).
- [16] D. Pastrone et al. M. Badami P. Nuccio. «Performance of a small-scale turbojet engine fed with traditional and alternative fuels». In: *Energy Conversion and Management* (2014).
- [17] A. Nava. «Analisi delle emissioni di combustore aeronautico tramite sviluppo di reti di reattori chimici». Tesi di laurea mag. Politecnico di Torino, 2014.
- [18] *Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications*. 2016. URL: <http://combustion.ucsd.edu>.
- [19] David G. Goodwin, Harry K. Moffat e Raymond L. Speth. *Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes*. <http://www.cantera.org>. Version 2.3.0. 2017. DOI: [10.5281/zenodo.170284](https://doi.org/10.5281/zenodo.170284).
- [20] S. Martina. «Sviluppo di una rete di reattori chimici per l'analisi delle emissioni di un turbogetto». Tesi di laurea mag. Politecnico di Torino, 2017.
- [21] *A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane (up to n-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, n-propyl and n-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures*. URL: <http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/JetSurF/JetSurF2.0/index.html>.
- [22] *CRECK Modeling Group*. URL: <http://creckmodeling.chem.polimi.it/>.