



Università degli Studi di Trieste  
Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Navale

# Metodologie CFD per l'analisi della combustione

*Corso di termofluidodinamica computazionale*

Giulio Cassio

1

1. Introduzione
2. Cinetica chimica aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
3. Moto del fluido aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
4. Scambio di calore aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
5. Irraggiamento aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
6. Esempio definizione del problema  
generazione mesh  
modelli usati  
risultati
7. Conclusioni

2

1. **Introduzione**
2. Cinetica chimica aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
3. Moto del fluido aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
4. Scambio di calore aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
5. Irraggiamento aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
6. Esempio definizione del problema  
generazione mesh  
modelli usati  
risultati
7. Conclusioni

3

## Sommario

In questa lezione, dopo una breve introduzione, entreremo più nello specifico andando ad analizzare singolarmente i vari aspetti che sono coinvolti nella combustione seguendo una scaletta:

- Definizione degli aspetti teorici
- Analisi dell'influenza sull'interno processo
- Implementazione all'interno di un codice CFD

4

## Definizione

La combustione è una reazione chimica che comporta l'ossidazione di un combustibile da parte di un comburente, con sviluppo di calore e radiazione elettromagnetica, tra cui spesso anche radiazione luminose.

In termini più rigorosi la combustione è una ossidriduzione esotermica in quanto un composto si ossida mentre un altro si riduce con rilascio di energia e formazione di nuovi composti.

(Wikipedia)

5

Dalla definizione si evince:

- Complessità del fenomeno
- Problema che è multi-specie (multifase)
- Molti fenomeni fisici coinvolti simultaneamente



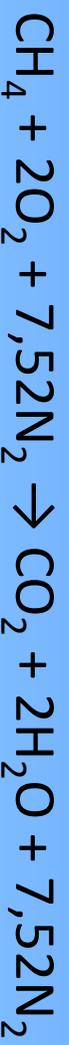
Difficoltà nel mettere a punto una simulazione  
fluidodinamica

6

1. Introduzione
2. **Cinetica chimica** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
**implementazione CFD**
3. Moto del fluido aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
4. Scambio di calore aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
5. Irraggiamento aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
6. Esempio definizione del problema  
generazione mesh  
modelli usati  
soluzioni
7. conclusioni

7

## Cinetica chimica: analisi teorica



In realtà la reazione di combustione è una reazione radicalica a catena, ovvero conta centinaia di reazioni e prodotti intermedi. La reazione del metano conta 325 reazioni intermedie e molti radicali (atomi instabili e molto reattivi)

8

## Cinetica chimica: analisi teorica

Dal punto di vista chimico si può fare una prima classificazione di come i reagenti arrivano nella zona di innesco:

1. Combustione premiscelata
2. Combustione non-premiscelata o diffusiva
3. Combustione a premiscelazione parziale

Dal tipo di combustibile che viene utilizzato:

1. Liquido
2. Gassoso
3. Solido

Dal rapporto comburente – combustibile:

1. Ricca
2. Stechiometrica
3. Magra

9

## Cinetica chimica: influenza

La reazione chimica dipende da:

- Temperatura
- Pressione
- Quantità di reagenti
- Irraggiamento
- Campo di velocità

Un'errata comprensione della cinetica chimica della reazione porta a un'errata determinazione del fenomeno stesso.

10

# Cinetica chimica: CFD

In ambito CFD i codici permettono di specificare quante reazioni si vogliono utilizzare, però per la maggior parte non hanno modelli già impostati.

	Complessità	Costo computazionale	Utilizzo	Finalità
Equazione globale	Quasi nessuna	Ininfluyente	Frequente	Applicazioni industriali
Meccanismo ridotto	Minima	Molto piccolo	Frequente	Applicazioni industriali più complesse
Reazione a catena	Molto complessa	Elevato	Rado	Analisi approfondite su inquinanti <sub>1,1</sub>

1. **Introduzione**
2. **Cinetica chimica** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
3. **Moto del fluido** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
4. **Scambio di calore** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
5. **Irraggiamento** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
6. **Esempio** definizione del problema  
generazione della mesh  
modelli usati  
risultati
7. **conclusioni**

## Moto del fluido: analisi teorica

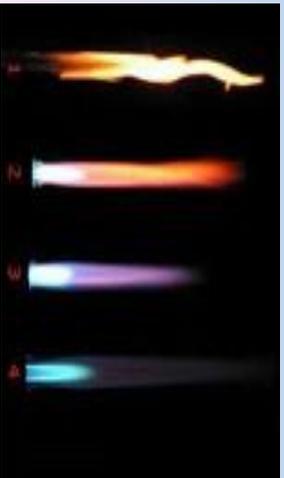
Spesso il campo di moto controlla lo sviluppo della reazione di combustione



La corretta determinazione del campo di velocità e pressione è di fondamentale importanza per la corretta comprensione della combustione.

A seconda del tipo di moto possiamo dividere la combustione in due grandi categorie:

Fiamma laminare



Fiamma turbolenta



13

## Moto del fluido: influenza

Il campo di moto influenza particolarmente:

Il miscelamento dei reagenti

La zona di innesco della fiamma

Lo scambio di calore in camera di combustione

Regime di fiamma turbolenta è utilizzato in quasi tutte le applicazioni industriali (motori, turbine, caldaie) perché permette di avere una combustione più veloce e intensa, in spazi più ristretti, con una minor produzione di inquinanti

14

## Moto del fluido: CFD

Le problematiche sono del tutto analoghe a quelle che si riscontrano nella simulazione della turbolenza più in generale.

Tipi di simulazione:

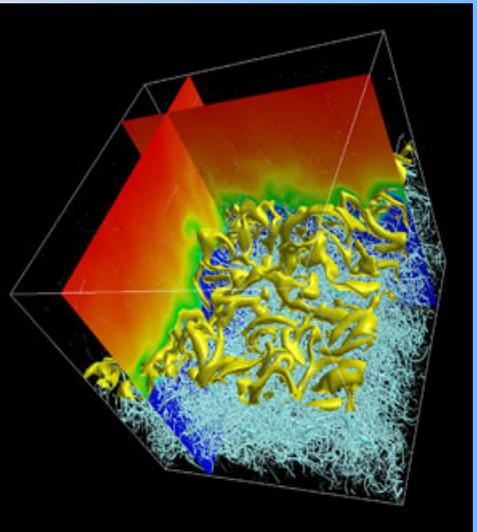
DNS

LES

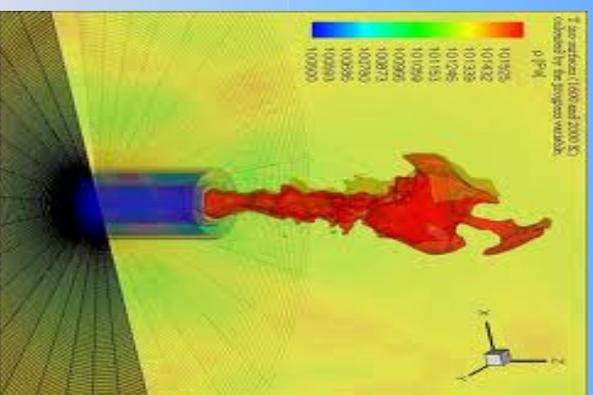
RANS

15

DNS

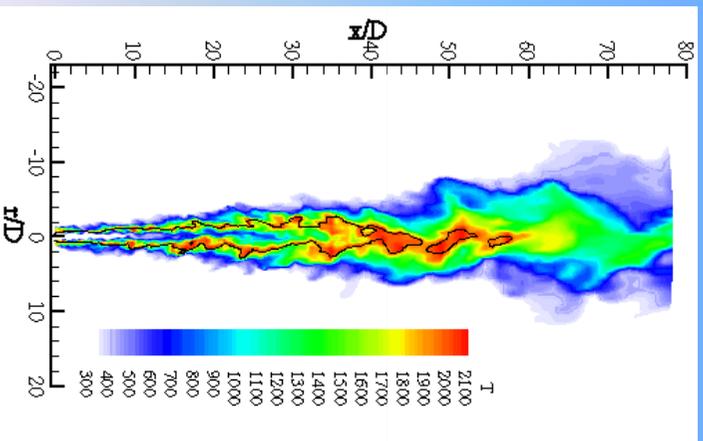


LES

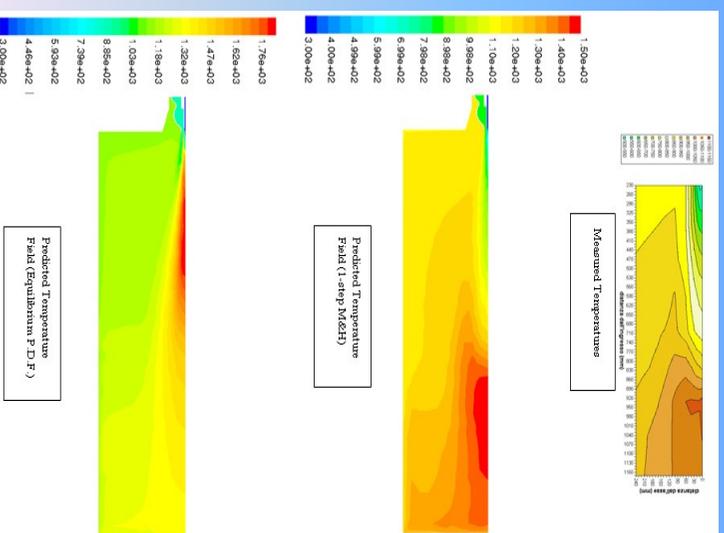


16

## LES



## RANS



17

## Interazione tra combustione e turbolenza

In ambito CFD esistono vari modelli per simulare flussi reattivi. Nell'ambito dell'analisi RANS i modelli possono essere divisi in due grandi famiglie:

- Modelli che usano grandezze medie
- Modelli che usano le probability density functions

18

# Interazione tra combustione e turbolenza

Modelli:

1. Eddy Break Up
2. Eddy Dissipation
3. Laminar Flamelet

flusso medio

4. Prescribed PDF
- (Probability Density function)
5. Composition PDF

varianza

## Eddy Break Up Model

Il modello EBU tiene conto del fatto che la turbolenza può modificare o addirittura stravolgere il processo di combustione e lo sviluppo del fronte di fiamma.

$$R_j = -A_j T^{\beta_j} \prod_{\text{reagenti}} \left( \frac{\rho Y_i}{M_i} \right)^{p_{ij}} e^{(-E/RT)}$$

$$R_{\text{turb}} = -\frac{\rho}{M_i} \left( \frac{1}{k/\varepsilon} \right) A_{\text{ebu}} \left[ \bar{Y}_i, \frac{Y_0}{S_0}, B_{\text{ebu}} \left( \frac{Y_{p1}}{S_{p1}}, \dots, \frac{Y_{pn}}{S_{pn}} \right) \right]$$

La prima espressione calcola la velocità di reazione se il processo fosse controllato esclusivamente dalla cinetica chimica, la seconda invece dalle caratteristiche del moto turbolento

# Laminar flamelet

Modello semplice che tiene conto di un meccanismo dettagliato per le reazioni.

Aspetti fondamentali:

- Il fronte di fiamma irregolare viene diviso in piccoli tratti lineari
- Si assume che il fronte di fiamma abbia le stesse caratteristiche di quello laminare
- Creare una libreria di proprietà
- Aggiungere delle correzioni per tenere conto dell'allungamento della fiamma legate agli sforzi o alla dissipazione

21

1. Introduzione
2. Cinetica chimica aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
3. Moto del fluido aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
4. **Scambio di calore** aspetti teorici  
**analisi dell'influenza sulla combustione**  
**implementazione CFD**
5. Irraggiamento aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
6. Esempio definizione del problema  
generazione della mesh  
modelli usati  
risultati
7. Conclusioni

22

## Scambio di calore: analisi teorica

Con questo termine intendiamo i processi di conduzione e convezione verso l'esterno del dominio di calcolo

Lo scambio di calore gioca un ruolo molto importante nella caratterizzazione del processo di combustione.

La presenza di forti gradienti di temperatura comporta un'attenzione nella zona a parete e in corrispondenza del fronte di fiamma

23

## Scambio di calore: CFD

Per simulare correttamente lo scambio di calore a parete esistono varie strategie.

- Non modellare fisicamente la parete ma utilizzare semplicemente una funzione a parete
- Modellare la parete ma non l'ambiente esterno e utilizzare sempre una funzione per lo scambio termico convettivo
- Modellare anche l'ambiente esterno

24

1. Introduzione
2. Cinetica chimica aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
3. Moto del fluido aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
4. Scambio di calore aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
5. Irraggiamento aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
6. Esempio definizione del problema  
generazione della mesh  
modelli usati  
risultati
7. Conclusioni

25

## Irraggiamento: analisi teorica

Irraggiamento è il trasferimento di calore tra due corpi mediante onde elettromagnetiche

È un fenomeno molto complesso che dipende da molti fattori:

- Caratteristiche del materiale
- Temperature
- Lunghezze d'onda
- Geometria della camera di combustione

26

## Irraggiamento: influenza

Ha un peso importante all'interno del trasferimento di calore e dipende fortemente dalla temperatura (quarta potenza)

Quantitativamente da studi fatti si è visto che l'errore commesso per non aver utilizzato un modello di irraggiamento è compreso tra gli 70 e i 150 gradi a seconda delle caratteristiche della fiamma.

27

## Irraggiamento

Nel caso della combustione non bisogna considerare solo le pareti ma anche il mezzo in cui viaggiano. Infatti i gas combustibili hanno delle proprietà:

- Assorbimento
- Riflessione
- Trasmissività
- Dispersione

28

## Irraggiamento: CFD

Esistono 3 metodi per risolvere lo scambio di calore per irraggiamento:

1. **DTM discrete transfer method**: lo spazio e le superfici vengono divisi in zone e dal centro vengono fatti partire raggi in direzioni diverse e poi seguita la loro traiettoria
2. **Monte Carlo**: da un numero elevato di punti vengono fatti partire raggi a random e poi vengono seguite le loro traiettorie
3. **Discrete ordinates method**: l'equazione di trasporto viene risolta per n direzioni, poi l'integrale viene rimpiazzato da una quadratura numerica

29

1. **Introduzione**
2. **Cinetica chimica** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
3. **Moto del fluido** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
4. **Scambio di calore** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
5. **Irraggiamento** aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
6. **Esempio** definizione del problema  
generazione della mesh  
modelli usati  
risultati
7. **Conclusioni**

30

# TPV

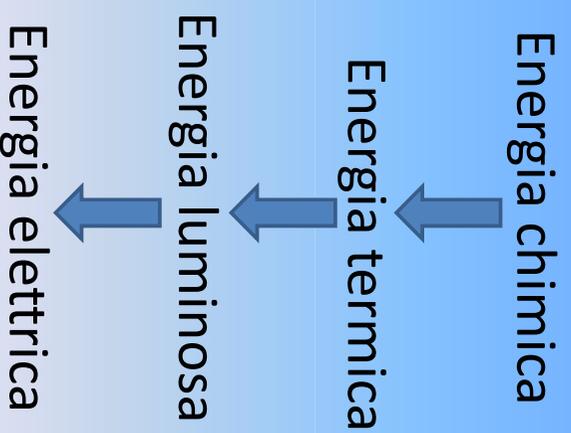
## Thermo Photovoltaic Device

Sistema di nuova concezione che sfrutta la conversione diretta del calore in energia elettrica.

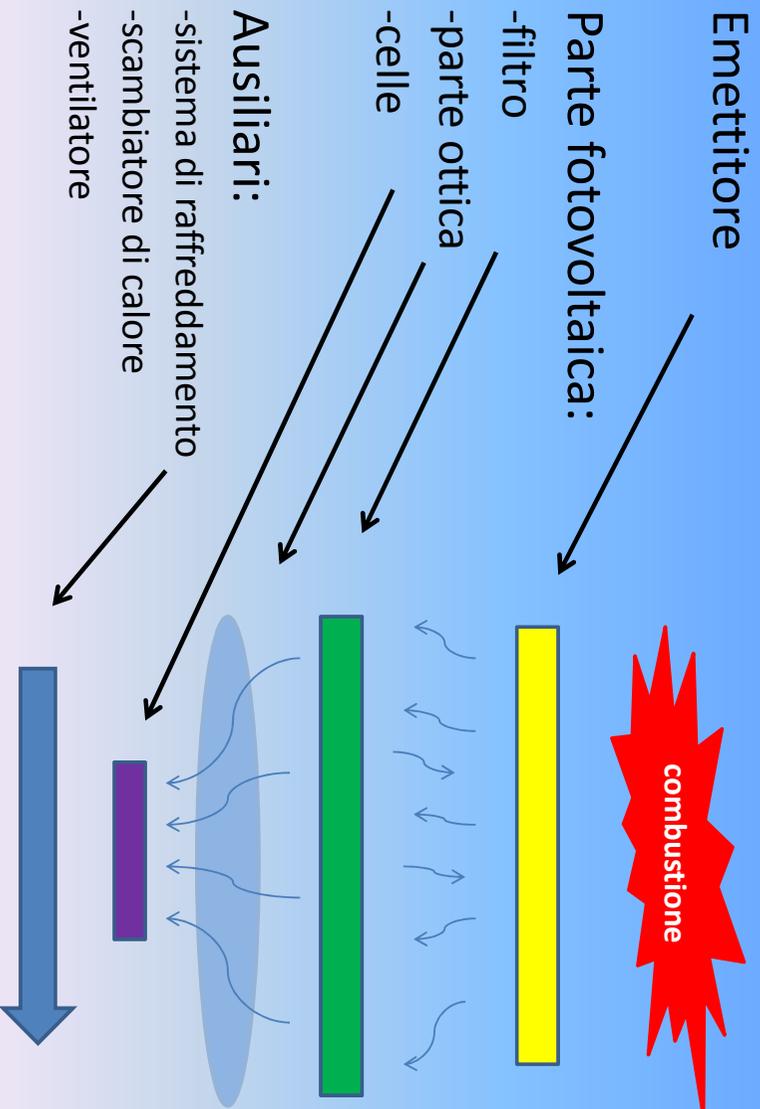
Ci sono tre parti fondamentali:

1. Combustore
2. Parte fotovoltaica
3. Ausiliari e accessori

## Funzionamento: flusso di energia



## Sistema cogenerativo



## Combustore

Specifiche di progetto fornite:

1. Potenza termica in ingresso pari a 10 kW
2. Combustibile : metano
3. Combustione in ambiente confinato rappresentato da un tubo dal diametro esterno di 20 mm



Fumi non a contatto con la parte ottica



Sorgente puntiforme di luce

## Obiettivi

- Massima temperatura sulla superficie esterna del tubo
- Temperatura uniforme sulla superficie esterna del tubo

## Scelte progettuali

1. Combustore a premiscelazione



Per controllare meglio la miscelazione di aria e gas

2. Componente di swirl



Massimizzare lo scambio termico con l'emettitore

3. Combustione intubata

## Come affrontare una simulazione

1. Studio del caso
2. Ricerca in letteratura di un problema simile
3. Analisi dei fenomeni coinvolti
4. Obiettivo dell'analisi
5. Simulazione di flusso non reattivo
6. Simulazione di flusso reattivo semplificato
7. Aggiunta dell'irraggiamento
8. Aggiunta dello scambio termico

37

## Mesh

La generazione di una griglia è abbastanza complessa. La scala spaziale ha grandezze diverse.

Zona critica è quella a ridosso del fronte di fiamma dove i gradienti sono molto elevati.

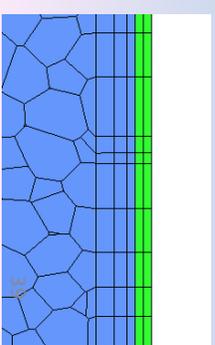
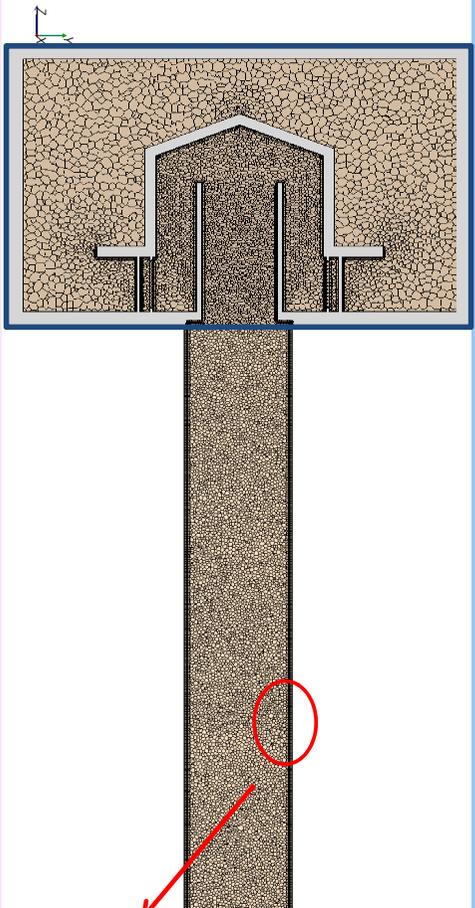


griglia ottimizzata

38

# Modellazione del combustore

- Regione fluida all'interno della camera di combustione
- Regione solida per il tubo
- Interfaccia tra le due
- Flusso di calore per irraggiamento all'esterno



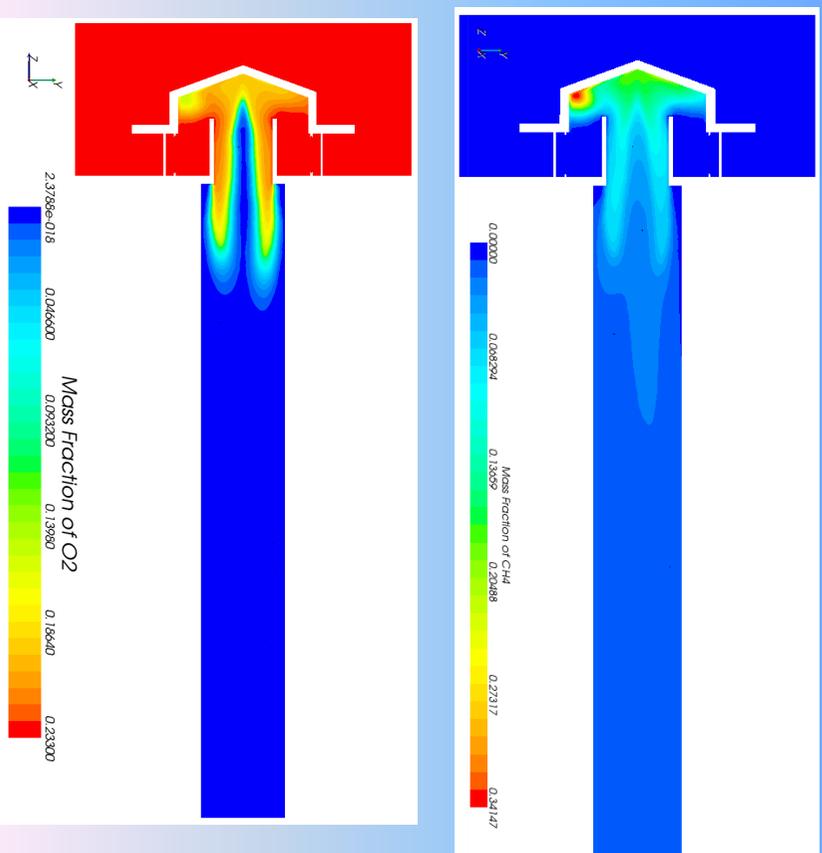
## Modelli

- Turbolenza: media sul tempo (RANS) e k- $\epsilon$
- Equazione dell'energia: equazione dell'entalpia
- Combustione: Eddy Break Up model
- Cinetica chimica: 2 Reazioni



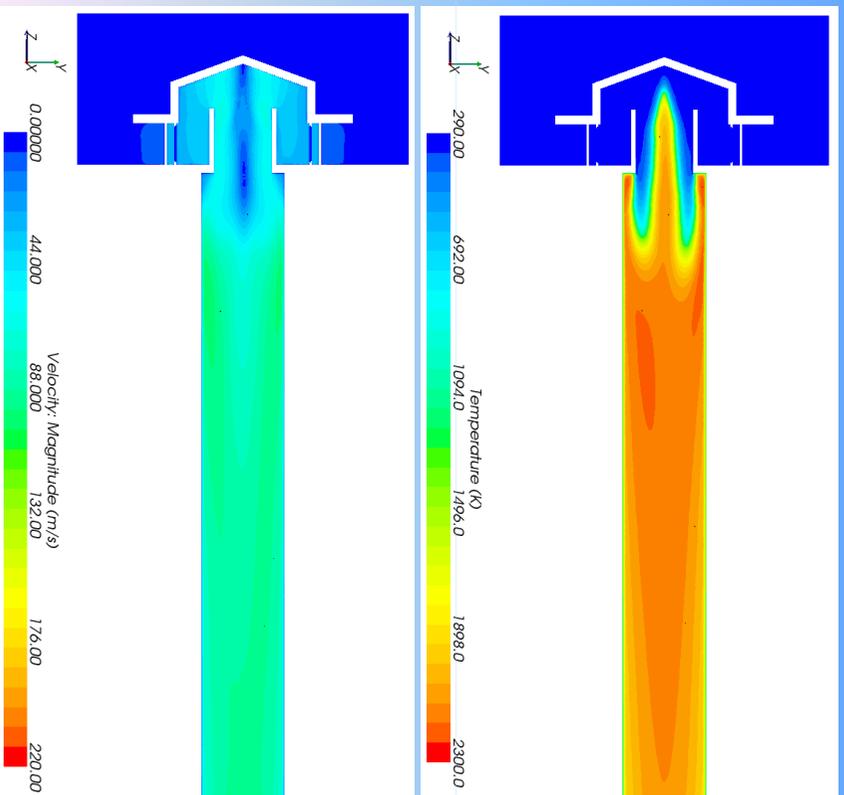
- Irraggiamento: approssimazione del corpo grigio

# Flusso reattivo



41

# Flusso reattivo



42

1. Introduzione
2. Cinetica chimica aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
3. Moto del fluido aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
4. Scambio di calore aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
5. Irraggiamento aspetti teorici  
analisi dell'influenza sulla combustione  
implementazione CFD
6. Esempio definizione del problema  
generazione della mesh  
modelli usati  
risultati
7. Conclusioni

43

## Consigli

- Controllare la temperatura massima all'interno del dominio di calcolo
- Confrontare il campo di temperatura con quello della frazione massica di prodotti e reagenti
- Cercare di ottenere i risultati con il modello più semplice possibile

44

## Presente e futuro

Oggi:

In ambito industriale si continuano a usare modelli semplificati usando metodi RANS, accanto a LES usando filtri abbastanza ampi

In ambito accademico vengono usate molto LES e DNS (solo per alcuni casi molto semplici)

Domani:

Con l'aumento della potenza di calcolo e il miglioramento dei modelli si andrà alla sempre maggior diffusione di tecniche LES

45

## Conclusioni

Non esiste un modo univoco per affrontare la simulazione del processo di combustione, perché dipende fortemente dall'obiettivo dell'analisi, dal tipo di fenomeno e dalle condizioni locali.

46

# Bibliografia

*“An introduction to computational fluid dynamics”* Versteeg,  
Malalaskerta

*“Detailed modelling in combustion systems”* Oran, Boris , prog.  
Energy Combustion Science, 7, 1-72

*“Combustion: physical and chemical fundamentals, modelling  
and simulation, experiments, pollutant formation”* Warnatz

*“Principles of combustion”* Kuo