

ALMA MATER STUDIORUM – UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

SCUOLA DI INGEGNERIA E ARCHITETTURA

Dipartimento di Ingegneria Civile, Chimica, Ambientale e dei Materiali – DICAM

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Chimica e di Processo

TESI DI LAUREA

Implementazione di Cinetiche di Dettaglio per la Simulazione Numerica di Fiamme Premiscelate

CANDIDATO

Stefano Doddo

RELATORE

Prof. Ernesto Salzano

CORRELATORE

Gianmaria Pio

Anno Accademico 2018/19

Sessione II

Ai miei adorati genitori.

Alla mia amata fidanzata Giada.

SOMMARIO

INDICE FIGURE	iv
INDICE TABELLE	ix
NOMENCLATURA	x
1. Introduzione	1
2. STATO DELL'ARTE	9
2.1 Misurazione della velocità di fiamma	18
2.2 Stima della velocità di fiamma	27
1.3 Fiamme Premiscelate Metano–Aria	34
3. MATERIALI E METODI	41
4. RISULTATI E DISCUSSIONI	59
4.1 Cinetica GRI–Mech 3.0	61
5. CONCLUSIONI	77
BIBLIOGRAFIA	81
RINGRAZIAMENTI	96

INDICE FIGURE

Figura 2-1. Schema di un'onda di combustione premiscelata planare, monodimensionale.	11
Figura 2-2. Schematizzazione della fiamma, secondo il modello di Mallard - Le Chatelier [25].	16
Figura 2-3. Schematizzazione di un sistema sperimentale counterflow flame.	22
Figura 2-4. Rappresentazione del profilo di velocità assiale.	24
Figura 2-5. Rappresentazione schematica di un heat flux burner: a) sistema sperimentale completo; b) visione superiore della piastra forata [60].	26
Figura 2-6. Schema rappresentativo della struttura utilizzata da OpenFOAM [65].	28
Figura 2-7. Discretizzazione del dominio di controllo [66].	30
Figura 2-8. Connessione tra due celle contigue [66].	31

- Figura 2-9. Esempio di una griglia bidimensionale, strutturata, non ortogonale [67]. 32
- Figura 2-10. Risultati sperimentali e numerici della velocità di fiamma per miscele metano + aria in condizioni standard, ottenuti mediante misure sperimentali (simboli) e simulazioni numeriche con modelli cinetici (linee) [38] 35
- Figura 2-11. Risultati sperimentali e numerici della velocità di fiamma per miscele metano + aria in condizioni standard, ottenuti mediante misure sperimentali (simboli) e simulazioni numeriche con modelli cinetici (linee) [38]. 38
- Figura 3-1. Rappresentazione del volume di riferimento considerato nel presente lavoro. 45
- Figura 3-2. Schema del dominio computazionale 2D per il counterflow flame. 47
- Figura 3-3. Suddivisione della mesh lungo i piani: a) x-y; b) y-z; c) x-z. 49

- Figura 3-4. Variazione della s_b e del tempo di simulazione (t_s)
al variare della mesh nelle seguenti condizioni: $T_u = 300$ K;
 $p = 1$ bar; $u_0 = 0.25$ m/s; $\phi = 1$. 51
- Figura 3-5. Profilo di velocità e notazione utilizzata per la
determinazione della stretch rate a valle della $s_{u,ref}$. 54
- Figura 3-6. Profilo di velocità e notazione utilizzata per la
determinazione della stretch rate a monte della $s_{u,ref}$. 55
- Figura 3-7. Profilo di velocità e notazione utilizzata per la
determinazione della s_u e della κ_u con il metodo d). 57
- Figura 3-8. Profilo di velocità a bassi valori di κ . 58
- Figura 4-1. Campo di temperatura stimato nel caso di condizioni
iniziali pari a $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar; $u_0 = 1.1$ m/s e $\phi =$
0.7. 62
- Figura 4-2. Campo di velocità stimato nel caso di condizioni
iniziali pari a $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar; $u_0 = 1.1$ m/s e $\phi =$
0.7. 63

- Figura 4-3. Campo di temperatura stimato nel caso di condizioni iniziali pari a $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar; $u_0 = 0.1$ m/s e $\phi = 0.7$. 64
- Figura 4-4. Campo di velocità stimato nel caso di condizioni iniziali pari a $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar; $u_0 = 0.1$ m/s e $\phi = 0.7$. 65
- Figura 4-5. Profili di velocità e di temperatura lungo x a $T_u = 300$ K, $p = 1$ bar, $u_0 = 1.1$ m/s e $\phi = 0.7$. 66
- Figura 4-6. Profili di velocità e di temperatura lungo x a $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar; $u_0 = 0.1$ m/s e $\phi = 0.7$. 67
- Figura 4-7. Struttura della fiamma a $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar; $u_0 = 1.1$ m/s e $\phi = 0.7$. 68
- Figura 4-8. Struttura della fiamma a $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar; $u_0 = 0.1$ m/s e $\phi = 0.7$. 68
- Figura 4-9. Confronto tra i valori della s_u^0 estrapolati con i diversi metodi e con i risultati sperimentali di Hu et al. [91] estrapolati linearmente. 70

Figura 4-10. Valori della LBV per la miscela CH_4 + aria al variare del rapporto equivalente (ϕ), per i vari metodi di estrapolazione analizzati in questo lavoro. 72

Figura 4-11. Confronto valori sperimentali con risultati CFD utilizzando il metodo e), con cinetica semplificata. Simboli: Risultati sperimentali. Linea: risultati CFD di S. Wang et al. [96] e del presente lavoro. 73

Figura 4-12. Confronto valori sperimentali con risultati CFD utilizzando il metodo e), con cinetica KIBO. Simboli vuoti: Risultati sperimentali. Linea: risultati CFD di S. Wang et al. [96] e del presente lavoro. 74

Figura 4-13. Andamento della temperatura al variare di ϕ , alle condizioni iniziali $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar e $u_0 = 0.25$ m/s 75

INDICE TABELLE

Tabella 3-1. Condizioni al contorno utilizzate per le simulazioni.

46

NOMENCLATURA₁

A	Fattore pre-esponenziale
a_s	<i>Stretch rate</i> globale
c_p	Calore specifico a pressione costante
D	Diametro
\mathcal{D}	Diffusività
f	Flusso di materia
h	Entalpia
K	Energia cinetica
k	<i>Stretch rate</i> globale
ℓ	Spessore
Le	Numero di Lewis
\mathbf{n}	Vettore normale unitario
p	Pressione idrostatica
\mathbf{P}	Tensore della pressione
\mathbf{q}	Flusso di calore
Q_{dot}	Potenza termica per unità di volume

₁ Nel presente lavoro si considera la notazione Foraboschi.

\hat{q}_c	Calore di reazione per unità di massa del combustibile
r	Velocità di generazione di massa per unità di volume
s	Velocità di fiamma
Sc	Numero di Schmidt
T	Temperatura
T_a	Temperatura di attivazione
u	Velocità
V	Volume
Y_i	Frazione in massa delle specie i
α	Diffusività termica
κ	<i>Stretch rate</i> locale
μ	Viscosità dinamica
ν	Viscosità cinematica
π	Momento della quantità di moto per unità di massa
ρ	Densità
τ	Tensore degli sforzi
ϕ	Rapporto di equivalenza o <i>equivalence ratio</i>
φ	Campo tensoriale
$\dot{\omega}$	Velocità di reazione

Apici e Pedici

<i>a</i>	Attivazione
ad	Adiabatica
<i>b</i>	Stato combusto
D	Regione di diffusione
<i>eff</i>	Effettivo
<i>f</i>	Fiamma
<i>F</i>	Combustibile
<i>H</i>	Regione fluidodinamica
o	Stato di riferimento standard
<i>O</i>	ossidante
<i>R</i>	Regione di reazione
<i>u</i>	Stato incombusto
±	Regioni non reattive separate da piani di reazione
★	Prodotto tensoriale generico

1. Introduzione

La combustione è un processo complesso caratterizzato da reazioni di ossido–riduzione tra combustibile (riducente) e comburente (ossidante) e dai fenomeni di trasporto di quantità di moto, di energia e di materia.

Il combustibile maggiormente utilizzato ancora oggi è di origine fossile. In particolare, si stima che contribuisca nella misura di circa l'80% della produzione totale di energia. Il resto del fabbisogno energetico è ricoperto da energie rinnovabili e questo andamento si prevede continuerà ancora nei prossimi decenni [1].

I settori che utilizzano maggiormente tali combustibili sono i trasporti, l'industriale e il civile, ognuno dei quali contribuisce in maniera significativa al loro consumo ed alle conseguenti emissioni in atmosfera di gas e particolato, i quali causano una drastica riduzione della

qualità dell'aria ed il riscaldamento globale. Ad esempio, in Europa circa un quarto delle emissioni totali di gas ad effetto serra o *greenhouse gases* (GHG) è attribuibile al settore dei trasporti, con combustibili derivati dal petrolio e che dominano il trasporto su strada. Nell'attuale contesto ambientale ed economico viene incoraggiato l'uso di combustibili alternativi meno inquinanti che garantiscano un miglioramento sia dal punto di vista degli aspetti legati alla sicurezza durante la fase di stoccaggio e sia dal punto di vista del fabbisogno energetico specifico. Tra le principali fonti energetiche alternative emergono le biomasse, l'idrogeno ed il gas naturale. Tuttavia, l'utilizzo della biomassa, non in miscela con combustibili tradizionali, richiede ulteriori valutazioni riguardanti il sistema di combustione e la loro produzione; l'idrogeno è, ad oggi, fortemente limitato da ragioni di sicurezza in fase di stoccaggio; il gas naturale è in grado di sfruttare le

infrastrutture e i sistemi attualmente già in commercio o presenti sul territorio. Ne consegue che la combustione di gas naturale è largamente considerata una soluzione a breve e medio termine per ridurre l'impatto ambientale e raggiungere l'obiettivo prefissato dalla Commissione Europea: sostituire il 20% dei combustibili derivanti dal petrolio con combustibili alternativi nel settore dei trasporti su strada entro il 2020 [2]. Attualmente l'uso del gas naturale (*natural gas*, NG) per il trasporto è già abbastanza diffuso sotto forma di gas compresso (*compressed natural gas*, CNG) negli autoveicoli. Tuttavia, nello stato di gas compresso, il combustibile non ha una elevata densità energetica e questo causa una limitata autonomia degli autoveicoli. A tal proposito, la direttiva UE 94/2014 regola i termini per la realizzazione della rete infrastrutturale per i carburanti alternativi, stabilendo la scadenza per l'installazione di

stazioni elettriche e CNG in aree densamente popolate urbane e suburbane entro il 2020. Inoltre, delinea come termine ultimo il 2025 per l'installazione di stazioni di gas naturale liquefatto (*liquefied natural gas*, LNG) e idrogeno liquido (*liquefied hydrogen*, LH₂) su strade e porti che collegano la rete *Trans-European Networks* (TEN-T) per il rifornimento di navi, veicoli pesanti (*heavy duty vehicles*, HDV) [3].

Grazie alla sua densità energetica, il LNG ha una autonomia maggiore per il trasporto su strada a lunga distanza: basti pensare che un veicolo a LNG a parità di dimensioni del serbatoio potrebbe percorrere fino a 2.4 volte la distanza rispetto a uno alimentato da CNG [4,5] e per questo motivo risulta essere l'unica alternativa valida al diesel [6]. Inoltre, l'uso del LNG nei veicoli pesanti riduce le emissioni di gas serra fino al 20% per chilometro percorso ed elimina quasi il 100% degli ossidi di zolfo e

del particolato, riducendo, allo stesso tempo, l'inquinamento acustico causato dai motori diesel nei centri urbani [7].

Anche il settore dell'aviazione ha preso in considerazione l'uso di combustibili alternativi in luogo dei combustibili tradizionali [8,9]. È stato stimato che le emissioni dovute al trasporto aereo causano circa 10.000 morti all'anno, a livello globale, a causa dell'inquinamento atmosferico [10]. Si prevede, inoltre, che la domanda di combustibili per aerei negli Stati Uniti aumenterà del 48.7% entro il 2033 rispetto al 2012 [11], mentre la domanda mondiale aumenterà dell'86.0–105.9% [12]. Questi scenari ipotizzati porterebbero ad una maggiore dipendenza dalle riserve di petrolio ed indicano quanto sia necessaria, oggi, una svolta alla strada percorsa finora. Tuttavia, è anche necessario considerare gli aspetti pratici legati ad un cambiamento, come quello in oggetto, per esempio le modifiche da

apportare al mezzo aereo ed al sistema connesso, tra cui le infrastrutture di distribuzione e di alimentazione. A tal proposito, tra le risorse disponibili, si considera molto oneroso l'utilizzo della propulsione elettrica, mentre i combustibili criogenici, come LH₂ e LNG, possono essere utilizzati apportando alcune modifiche, in particolare ai motori degli aeromobili, ai sistemi di alimentazione ed ai sistemi di stoccaggio del combustibile, a seconda dell'utilizzo [8].

Per favorire l'uso di combustibili alternativi, come soluzioni a breve e medio termine, sono in corso di sviluppo tecniche che consentono un maggiore risparmio di combustibile e la riduzione delle emissioni inquinanti [13–17]. Per fare ciò, è possibile avvalersi di un approccio computazionale in grado di garantire l'implementazione di idonei modelli fluidodinamici e chimici. Lo scopo principale del presente lavoro di tesi è lo sviluppo

di un modello di dettaglio per lo studio della propagazione del fronte di fiamma di miscele di metano riproducendo una tecnologia sperimentale definita “*counterflow*”. I risultati ottenuti verranno validati mediante il confronto con dati sperimentali della velocità laminare di fiamma, parametro chimico–fisico fondamentale e specifico di una determinata miscela combustibile–comburente, utilizzando l’analisi computazionale o *Computational Fluid-Dynamics* (CFD). In particolare, è stato utilizzato il software *open access* OpenFOAM (*Open Fied Operation And Manipulation*) e il modulo *counterFlowFlame method* (CFF).

Ai fini della validazione del modello i parametri della fiamma ottenuti mediante l’analisi numerica sono stati confrontati con i dati sperimentali ottenuti con un sistema tecnologico definito *Heath-Flux Burner* (HFB). Per tener conto dell’aspetto chimico sono stati confrontati

i risultati ottenuti mediante: i) l'implementazione del modello cinetico sviluppato dal *Gas Research Institute* (GRI-Mech 3.0) dell'università di Berkeley in California [18], spesso utilizzato come *benchmark* di modelli cinetici; ii) una cinetica semplificata; iii) ed un modello cinetico sviluppato all'Università di Bologna, *Kinetic Modelling at University of Bologna* (KIBO) [19].

2. STATO DELL'ARTE

La necessità di attingere a fonti alternative per il crescente fabbisogno energetico è alimentata da stime economiche sul costo del combustibile e dalla analisi dei costi/benefici. Nel 2013 il gas naturale risultava più economico del combustibile tradizionale per aerei di circa il 70–80% per unità di energia. A tal proposito la NASA ha condotto uno studio sugli aspetti tecnici del LNG in aeromobili appositamente progettati e dal quale non sono emersi particolari problemi tecnici che ne impedirebbero l'uso come combustibile alternativo per l'aviazione [20]. Dal punto di vista delle emissioni, inoltre, il gas naturale ha un effetto benefico sull'ambiente rispetto ai tradizionali combustibili: emissioni di CO₂ inferiori del 23% su base energetica unitaria [21,22]. Inoltre, la combustione del gas

naturale comporta una riduzione delle emissioni di particolato e di SO₂ [23,24]. Tuttavia, risulta ad oggi necessaria una ricerca dettagliata dei fenomeni in atto durante la combustione. Da un punto di vista chimico il meccanismo principale che regola la combustione si può individuare a seconda delle condizioni in cui i reagenti sono alimentati: le cosiddette fiamme premiscelate, dove i reagenti sono già intimamente miscelati, oppure fiamme diffusive, dove i reagenti sono alimentati separatamente. La fiamma premiscelata può essere descritta come un fenomeno caratterizzato dalla propagazione di una onda di reazione a partire dal punto di innesco della miscela combustibile e ossidante. Risulta pertanto conveniente definire la velocità di propagazione dell'onda [25].

Si consideri un'onda planare stabile monodimensionale che si propaga con velocità u_u in una miscela combustibile gassosa in quiete, come rappresentato in Figura 2-1.

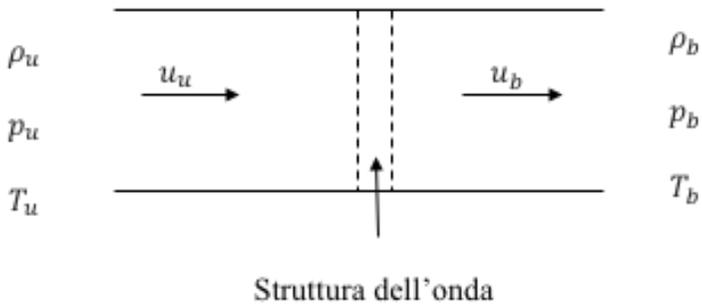


Figura 2-1. Schema di un'onda di combustione premiscelata planare, monodimensionale.

Poiché i fenomeni di non equilibrio come diffusione e reazione svaniscono a monte e a valle dell'onda, in condizioni stazionarie si hanno le seguenti relazioni di conservazione:

Massa:

$$\rho_u u_u = \rho_b u_b = f \quad (2.1)$$

Quantità di moto:

$$\rho_u u_u^2 + p_u = \rho_b u_b^2 + p_b \quad (2.2)$$

Energia:

$$\hat{h}_u + \frac{1}{2}u_u^2 = \hat{h}_b + \frac{1}{2}u_b^2 \quad (2.3)$$

dove f è il flusso di massa costante attraverso l'onda e i pedici u e b indicano gli stati di equilibrio incombusto e combusto del gas a monte e a valle della struttura dell'onda.

La velocità laminare di combustione (LBV) è una proprietà chimico-fisica di una miscela premiscelata combustibile + ossidante, risultante dall'influenza combinata della diffusività, della reattività e della esotermicità della miscela [25,26]. Fornisce una misura della reattività

complessiva delle miscele combustibile + comburente ed aiuta a determinare le portate di calore rilasciato, a testare e validare meccanismi di reazione dettagliati e modelli cinetici semplificati e può essere utilizzata per la modellazione di vari sistemi reali [14,17,25,27,28]. Dalla conservazione di energia attraverso la fiamma, assumendo che tutto il reagente limitante venga consumato, che non vi siano perdite di calore, e che il \hat{c}_p sia costante si ha:

$$\hat{c}_p(T_b^o - T_u) = \hat{q}_c Y_u \quad (2.4)$$

Pertanto, la temperatura a valle T_b^o è solo la temperatura adiabatica di fiamma T_{ad} , data da:

$$T_b^o = T_{ad} = T_u + \hat{q}_c Y_u / \hat{c}_p \quad (2.5)$$

Per determinare il flusso di combustione laminare f^o e lo spessore caratteristico della fiamma ℓ_D^o , bisogna

considerare i processi di non equilibrio di diffusione e reazione all’interno della struttura della fiamma [25]. Le prime misure della velocità di fiamma, utilizzando un eudiometro munito di due elettrodi per innescare una miscela di gas, risalgono al 1867 da parte di Bunsen il quale utilizzò l’idrogeno e il monossido di carbonio come combustibili [29]. Da allora i metodi per la descrizione di questo importante parametro hanno subito molte evoluzioni, partendo dalle prime misure sperimentali, passando per diversi modelli teorici, dai più semplici fino ai modelli più recenti ed eleganti che utilizzano un’analisi asintotica, finanche a modelli di simulazione fluidodinamica, i quali implementano cinetiche sempre più dettagliate e metodi numerici avanzati per risolvere sistemi di equazioni complesse come quelle alle derivate parziali di Navier–Stokes. I modelli teorici per determinare la

velocità di fiamma, inizialmente si suddividevano in tre categorie: teorie termiche, teorie diffusive, teorie termiche + diffusive.

Il primo modello teorico, appartenente alla prima categoria, è quello di Mallard e Le Chatelier [30] del 1883, il quale si basava sulla ipotesi semplicistica che il meccanismo controllante durante il processo di combustione fosse la propagazione del calore attraverso gli strati di gas. La base per lo sviluppo della teoria termica è una forma dell’equazione dell’energia. Mallard e Le Chatelier hanno ipotizzato, come mostrato in Figura 2-2, che una fiamma consiste di due zone separate da una interfaccia, una regione in cui avviene la combustione ed

una regione, di gas incombusti, in cui si ha la conduzione del calore.

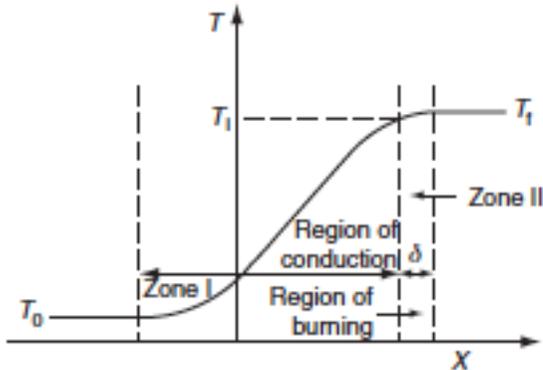


Figura 2-2. Schematizzazione della fiamma, secondo il modello di Mallard - Le Chatelier [25].

Un'altra teoria termica proposta da Zel'dovich e Frank-Kamenetskii, è stata sviluppata in dettaglio da Semenov [30]. Gli ulteriori sviluppi della teoria avvennero con l'introduzione della ipotesi che il processo controllante nel meccanismo di reazione fosse la diffusione di alcune specie attive come i radicali. In generale le particelle a

basso peso atomico e basso peso molecolare possono diffondere facilmente e dare luogo a nuove reazioni. La teoria della diffusione di particelle è stata introdotta nel 1934 da Lewis e von Elbe [31]. Tanford e Pease [32] hanno portato avanti quest’ultimo concetto sostenendo l’importanza maggiore della diffusione di radicali rispetto alla diffusione dovuta al gradiente termico. Entrambe le teorie hanno comunque contribuito a determinare sperimentalmente l’effetto della temperatura e della pressione sulla velocità di fiamma e, partendo da ipotesi diverse, sono giunte alla stessa conclusione: maggiore è la temperatura iniziale della miscela incombusta, maggiore sarà la temperatura di fiamma e quindi più alta sarà la velocità di fiamma. Si fa notare, infatti, che le equazioni caratteristiche della diffusione di materia sono formalmente identiche alle equazioni

caratteristiche della diffusione termica.

Hirschfelder *et al.* [33] hanno infine concluso che si dovrebbe essenzialmente seguire il concetto della teoria termica considerando anche gli effetti diffusivi di materia di tutte le particelle, sia all’interno che all’esterno della zona di fiamma.

2.1 Misurazione della velocità di fiamma

Nel corso dei decenni sono state sviluppate svariate tecniche per la misurazione sperimentalmente della velocità laminare di fiamma, tra cui:

- *Spherical flame method* [34]. La miscela combustibile + comburente viene innescata al centro utilizzando una scintilla e la velocità di propagazione della fiamma viene determinata dalla variazione della pressione [35] o dal raggio della fiamma col tempo e successivamente

corretta dalla *stretch rate* [36–38]. Tuttavia, tale sistema genera una *stretch rate*, per cui vanno adoperate opportune correzioni.

- *Stagnation o Counterflow flame method* [39–43]. Nel caso di fiamme premiscelate, le miscele di combustibile + ossidante vengono alimentate da entrambi gli ugelli. In caso contrario si alimentano i gas separatamente. La velocità minima del flusso vicino alla fiamma stabilizzata viene considerata come la velocità di propagazione della fiamma. Il principale effetto indesiderato in questo metodo è lo stiramento della fiamma (*flame stretch*), causato dall’effetto del flusso esterno [26]. Per tenere conto di questo fenomeno sono state sviluppate diverse correlazioni [44,45].
- *Heat-flux method* [46]. Si ottiene una fiamma stazionaria e planare, mediante un bruciatore a piastra

forata. La velocità di fiamma è misurata direttamente dalla velocità di alimentazione della miscela studiata. Per evitare effetti fluidodinamici e termici indesiderati, la fiamma viene stabilizzata mediante un flusso di calore fornito/sottratto da un fluido passante per una camicia attorno alla piastra forata [38].

- *Burner method* [47–49]. Una fiamma conica premiscelata è ancorata all'uscita di un bruciatore di forma cilindrica, in condizioni di flusso laminare, dalla sua forma si deriva la velocità di fiamma [38].
- *Annular stepwise diverging tube (ASDT)* [50]. È un sistema costituito da un tubo al quarzo al cui interno viene inserito un nucleo di forma conica. I reagenti vengono fatti fluire attraverso lo spazio tra il nucleo e la parete interna del tubo, misurandone la velocità di propagazione.

- *Externally heated diverging channel method* [51]. La geometria prevede un canale divergente di sezione rettangolare riscaldato esternamente. La miscela reattiva viene innescata sulla sezione di uscita del canale e la fiamma si stabilizza in una posizione, dove la velocità del flusso è uguale alla velocità di combustione della miscela [38].

Tra queste, verranno analizzate in maggior dettaglio CFF e HFB, in quanto oggetto di studio di questa tesi. Il principio di funzionamento del sistema *counterflow flame*, in generale, si basa sulla generazione di un campo di flusso da parte di un ugello, il quale, impattando su una superficie, dà luogo ad un piano di ristagno ($u_x = 0$). Tale superficie è stata modificata nel tempo utilizzando diversi metodi, uno dei quali, come rappresentato in Figura 2-3 , consiste nella generazione di due campi di flusso identici e

opposti da parte di due ugelli di diametro D e distanti $L \equiv D$ e tale configurazione corrisponde alla stessa presa in esame in questo lavoro.

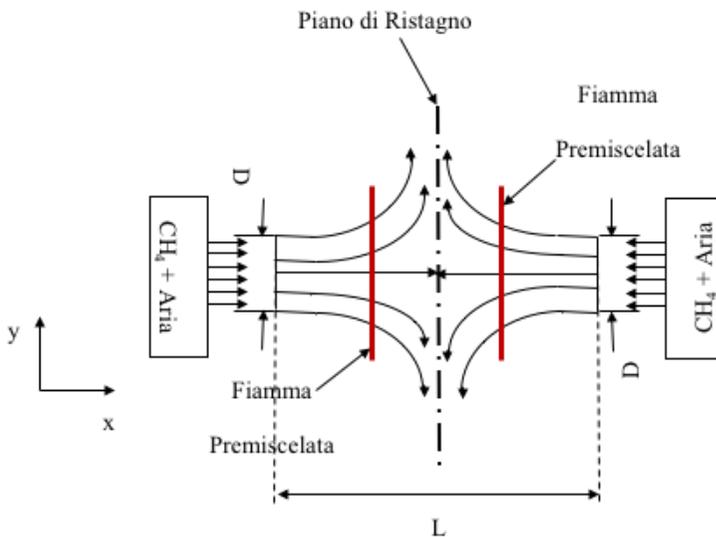


Figura 2-3. Schematizzazione di un sistema sperimentale counterflow flame.

Tale rappresentazione dà luogo a due fiamme premiscelate, poiché le correnti iniziali presentano la stessa composizione metano/aria, consentendo di ottenere

un sistema perfettamente simmetrico.

Esistono recenti teorie asintotiche che rappresentano il sistema, anche in forma adimensionale, delle quali se ne consiglia la lettura [25,52].

Grazie alla morfologia del sistema è possibile assumere le seguenti ipotesi:

1. Condizioni perfettamente adiabatiche
2. Assenza dell’effetto Dufour
3. Assenza dell’effetto Soret

questi ultimi due effetti riguardano, rispettivamente, il trasporto di energia dovuto al gradiente di concentrazione ed il trasporto di particelle dovuto al gradiente termico.

Pertanto, si riporta l’effetto della *stretch rate*, κ , definita dalla Eq. (2.6):

$$\kappa = -\frac{du}{dx} \quad (2.6)$$

sul profilo di velocità del sistema e sulla determinazione della s_u^o .

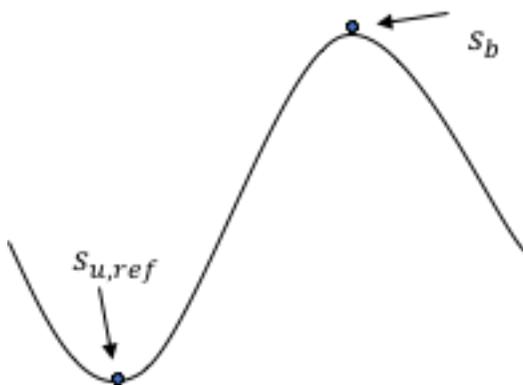


Figura 2-4. Rappresentazione del profilo di velocità assiale.

Come si può notare dalla Figura 2-4, le velocità indicate corrispondono alla velocità a monte e alla velocità a valle della zona di reazione, rispettivamente $s_{u,ref}$ e s_b , legate tra di loro dal coefficiente di espansione termica $\rho_b/\rho_u \approx T_u/T_b$.

I valori ottenuti sia dalle sperimentazioni e sia dal punto di vista computazionale necessitano di una estrapolazione al

valore nullo di κ , per ottenere la velocità laminare di fiamma corrispondente. La prima tecnica di estrapolazione adottata fu quella lineare [53–55], successivamente, notando che tale estrapolazione produceva valori maggiori di quelli ottenuti con le tecniche sperimentali, sono stati sviluppati diversi metodi alternativi [52,56–59].

Il principio di funzionamento del sistema HFB [60] si basa sul trasporto di calore tra la fiamma e la piastra. Per portare più possibile il sistema in condizioni adiabatiche, si implementa un sistema di scambio termico attraverso una camicia al cui interno scorre un fluido di servizio, generalmente acqua.

In particolare si considera il sistema utilizzato per la sperimentazione, il bruciatore Heat Flux (HFB) incamiciato [60] Figura 2-5:

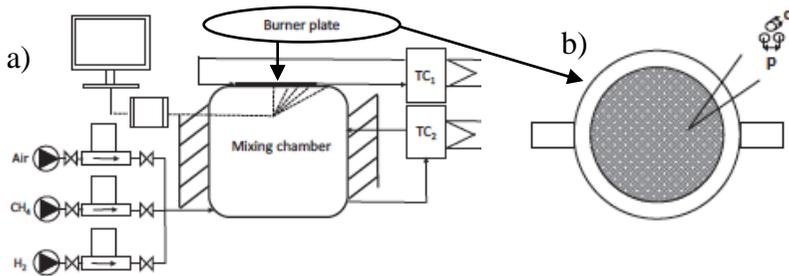


Figura 2-5. Rappresentazione schematica di un heat flux burner: a) sistema sperimentale completo; b) visione superiore della piastra forata [60].

Le parti principali che costituiscono lo strumento sono:

- Il bruciatore, costituito da una piastra forata con termocoppie collegate, una camera di miscelazione, due termostati a bagno, uno per mantenere la piastra calda alla temperatura richiesta dall’esperimento e l’altro per mantenere la camera di miscelazione alla temperatura ambiente che viene considerata uguale alla temperatura della miscela in ingresso, per esperimenti a basse temperature.

- Il sistema di alimentazione (*mass flow controllers*, MFC), situato prima dell’ingresso all’interno della camera di miscelazione, fornisce una miscela di combustibile/comburente. Gli MFC vengono calibrati utilizzando un gas di riferimento, seguendo una determinata procedura di calibrazione [61].
- Il sistema di acquisizione dati, in grado di misurare il profilo radiale della temperatura del piatto forato.

2.2 Stima della velocità di fiamma

Ad oggi il principale approccio per la stima della velocità di fiamma è legato alla implementazione di cinetiche chimiche di dettaglio all’interno di software capaci di simulare sistemi 0-dimensionali in transitorio o 1-dimensionali in stazionario, quali Chemkin o Cantera [62,63]. Tuttavia, è auspicabile l’implementazione di

modelli fluidodinamici in grado di valutare le interazioni tra questi fenomeni e quelli di natura chimica. A tale scopo, il software gratuito OpenFOAM®[64] risulta ottimale. La sua struttura generale viene rappresentata nella Figura 2-6:

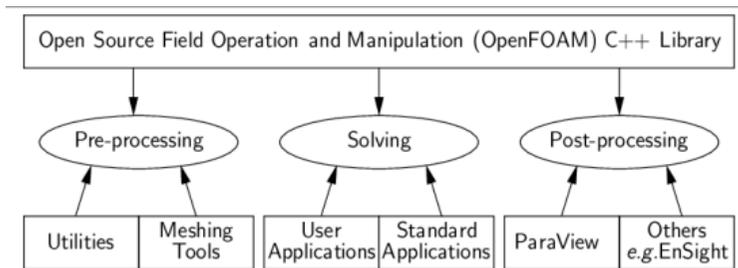


Figura 2-6. Schema rappresentativo della struttura utilizzata da OpenFOAM [65].

Il *pre-processing* è la fase preliminare della simulazione, in cui vanno specificati i parametri di processo, tra cui le condizioni al contorno, le equazioni caratteristiche del sistema studiato, i quali verranno descritti più in dettaglio nel capitolo seguente ed infine la discretizzazione del volume. In particolare, la discretizzazione del dominio

della soluzione viene effettuata mediante il metodo dei volumi finiti (FVM). Nel FVM il dominio viene prima suddiviso in un numero finito di volumetti di controllo contigui, su ciascuno dei quali vengono applicate, in forma integrale, le equazioni di conservazione. Gli integrali di volume vengono trasformati in integrali di superficie usando il Teorema di Gauss:

$$\int_V \nabla \star \varphi dV = \int_S d\mathbf{S} \star \varphi \quad (2.7)$$

dove \mathbf{S} è il vettore della superficie, V un volume, φ può rappresentare qualsiasi campo tensoriale e la notazione a stella \star può rappresentare qualsiasi prodotto tensoriale, ad esempio, prodotto interno, esterno e le rispettive

operazioni: divergenza $\nabla \cdot \varphi$, gradiente $\nabla \varphi$ e $\nabla \times \varphi$ (66).

La discretizzazione del dominio viene mostrata nella

Figura 2-7 [66]:

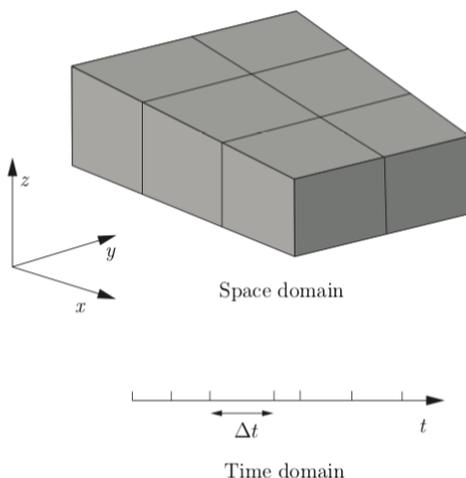


Figura 2-7. Discretizzazione del dominio di controllo [66].

Il dominio spaziale viene discretizzato in una *mesh* computazionale, sulla quale, a sua volta, vengono discretizzate successivamente le equazioni alle derivate parziali (PDE). La discretizzazione del tempo è semplice:

viene suddiviso in una serie di intervalli di tempo Δt che possono cambiare durante la simulazione numerica, a seconda di alcune condizioni calcolate durante la simulazione stessa. Ad un livello più dettagliato, la discretizzazione dello spazio richiede la suddivisione del dominio in un numero di celle o volumi di controllo. Le celle sono contigue, ovvero non si sovrappongono e coprono l’intero dominio. Una tipica cella ed i parametri utilizzati vengono mostrati nella Figura 2-8:

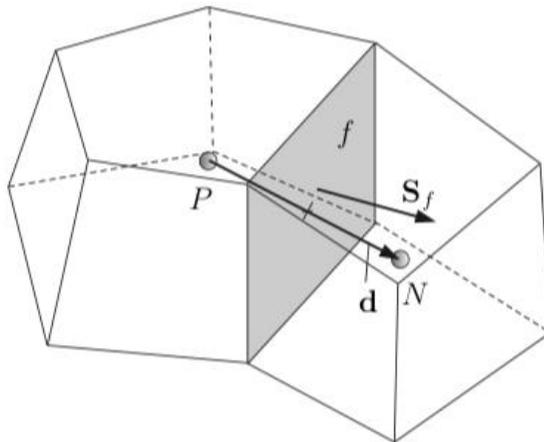


Figura 2-8. Connessione tra due celle contigue [66].

dove P ed N sono i centri delle celle, f , in questo caso, le facce piane che delimitano la cella, \mathbf{S}_f il vettore uscente ed infine \mathbf{d} la distanza dal centro. Le variabili dipendenti e le altre proprietà si riferiscono principalmente al centro della cella, sebbene possano essere riportate su facce o vertici, attraverso interpolazioni. La cella è delimitata da una serie di facce piane, indicate da f . La Figura 2-9 mostra come una griglia suddivida il dominio in un numero finito di piccoli volumi di controllo.

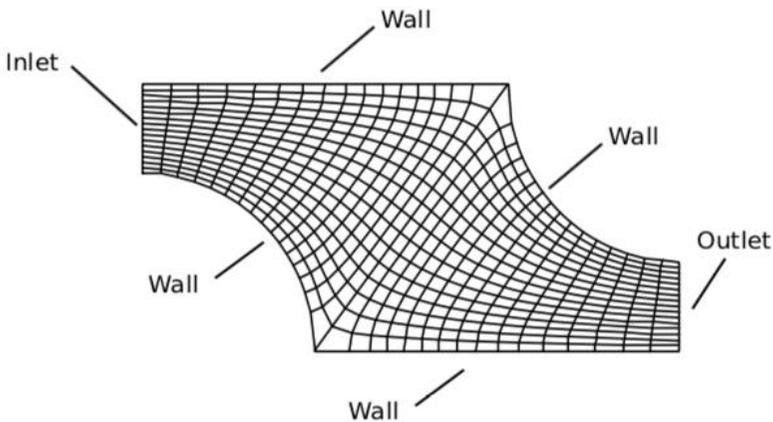


Figura 2-9. Esempio di una griglia bidimensionale, strutturata, non ortogonale [67].

L’Eq. (2.7) si applica ad ogni singolo volumetto. La somma su tutti i volumetti determina l’equazione di conservazione globale, poiché gli integrali di superficie sui volumi di controllo interni si annullano [67]. L’utente ha la possibilità, inoltre, di scegliere tra una vasta gamma di schemi di discretizzazione che differiscono tra di loro per precisione, stabilità e ordine di errore (ad esempio schemi di Gauss lineari del secondo o quarto ordine per i gradienti, *upwind* o divergenza cubica, Crank–Nicholson per il tempo e molti altri ancora). Ha anche la possibilità di scegliere quale tra i modelli di turbolenza, combustione o termodinamici debba utilizzare il risolutore.

1.3 Fiamme Premiscelate Metano–Aria

Grazie alla sua struttura molecolare semplice, le caratteristiche di combustione del metano, tra cui la LBV, sono state ampiamente studiate e usate di sovente per la validazione di nuove apparecchiature sperimentali [68–71]. La LBV delle miscele metano + aria viene rappresentata in funzione del rapporto di equivalenza della miscela, ϕ , definito dalla Eq. (2.8), a pressione atmosferica e temperatura iniziale di 300 K per i diversi lavori svolti negli ultimi 30 anni nella Figura 2-10..

Il parametro ϕ , è definito da:

$$\phi = \frac{(Fuel/Ox)}{(Fuel/Ox)_{st}} \quad (2.8)$$

dove $(Fuel/Ox)$ al numeratore è il rapporto tra combustibile ed ossidante in condizioni operative e $(Fuel/Ox)_{st}$ al denominatore è il rapporto tra combustibile ed ossidante alle condizioni stechiometriche.

La Figura 2-10, mostra i dati ottenuti mediante HFB [72,73], *diverging channel method* [74], *anular step-wise method* [75] e i dati ottenuti mediante i metodi *spherical/counterflow flames* con correzione non lineare [38].

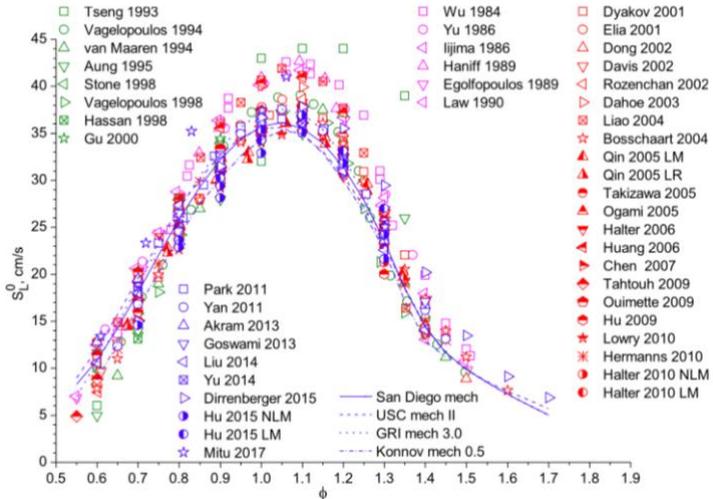


Figura 2-10. Risultati sperimentali e numerici della velocità di fiamma per miscele metano + aria in condizioni standard, ottenuti mediante misure sperimentali (simboli) e simulazioni numeriche con modelli cinetici (linee) [38]

Si può osservare un valore massimo della LBV in corrispondenza di un valore leggermente superiore allo stechiometrico ($\phi \cong 1.1$), un andamento decrescente quasi lineare per le miscele magre ($\phi < 1$) e un andamento decrescente per le miscele ricche ($\phi > 1$). Questo tipo di andamento è strettamente legato alla variazione della temperatura di fiamma in funzione del rapporto di equivalenza, come verrà discusso più in dettaglio nel prossimo capitolo.

Tra i valori più alti si registrano quelli di Tseng *et al.*[76] (43 *cm/s* per $\phi = 1$) ottenuti mediante l’utilizzo di una *spherical flames* ed una estrapolazione lineare per la *stretch rate*. Tuttavia, nei successivi lavori Aung *et al.* [77] hanno corretto i loro stessi dati con il calore di formazione ed il coefficiente di espansione termico, portando ad una riduzione della LBV (34 *cm/s* per $\phi = 1$). Ciò dimostra

che le tecniche di *post-processing* utilizzate per l’extrapolazione della LBV da quantità misurabili ha un forte impatto sui risultati ottenuti. Pertanto, le differenze registrate tra i dati sperimentali potrebbero essere, anche solo parzialmente, legate alle diverse tecniche di misurazione ed extrapolazione dei dati. In alternativa, è possibile utilizzare altre apparecchiature sperimentali, quali il bruciatore *Bunsen* [78,79]. Tuttavia, anche questo metodo è influenzato significativamente dalla *stretch rate* e dalle perdite di calore sul bordo del bruciatore. Al fine di valutare l’impatto del sistema sperimentale scelto su eventuali errori sistematici, nella Figura 2-11 si riportano alcuni dei dati sperimentali disponibili ottenuti mediante i metodi *spherical flames* e CFF in condizioni standard, insieme a stime numeriche ottenute mediante diversi modelli cinetici di dettaglio.

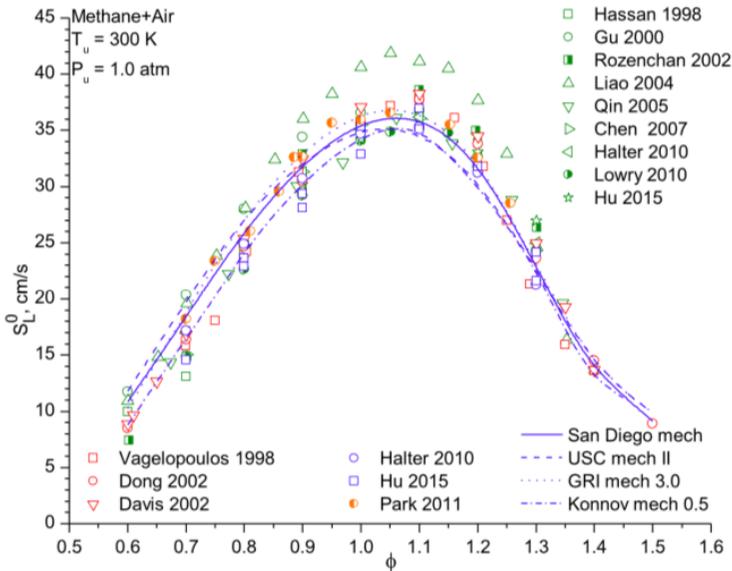


Figura 2-11. Risultati sperimentali e numerici della velocità di fiamma per miscele metano + aria in condizioni standard, ottenuti mediante misure sperimentali (simboli) e simulazioni numeriche con modelli cinetici (linee) [38].

Grazie alla introduzione dei metodi di correzione della *stretch rate*, la dispersione dei dati si è ridotta in modo significativo. È interessante notare che i dati ottenuti con l’extrapolazione non lineare sono più elevati in corrispondenza di miscele magre e inferiori in

corrispondenza di miscele ricche.

L’abbondanza di dati permette di concludere che le discrepanze riscontrate non possono essere attribuite ad erronee valutazioni in fase di correzione dei dati sperimentali e, pertanto, possono essere correlate ad aspetti cinetici o fluidodinamici. I primi possono essere investigati mediante opportune campagne sperimentali dedicate alla valutazione dei profili di fiamma ed al successivo sviluppo di modelli cinetici di dettaglio mediante l’approccio della chimica quantistica. I secondi possono essere analizzati mediante l’implementazione dei modelli cinetici ad oggi esistenti, in codici fluidodinamici in grado di confermare o meno le ipotesi poste in prima approssimazione, tra cui quella di monodimensionalità della fiamma. Per questo motivo il presente lavoro di tesi

verterà sullo studio CFD della miscela metano–aria, implementando cinetiche di dettaglio [19].

3. MATERIALI E METODI

I software utilizzati per affrontare lo studio CFD, sono tutti *open-source*. È stata una scelta specifica per dimostrare la disponibilità di potenti mezzi per la risoluzione di problemi della meccanica del continuo o meglio noti come CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Considerando le informazioni riportate nei capitoli precedenti, vengono riportate le principali ipotesi semplificative assunte del sistema CFF reale analizzato, al fine di rendere possibile il calcolo numerico.

Le ipotesi sono:

1. Sistema adiabatico
2. Flusso a pistone
3. $Le = 1$
4. $Sc = 1$
5. $\frac{\partial}{\partial z} = 0$

Quest'ultima condizione si basa sul fatto che le variabili non variano lungo la coordinata z , come precedentemente osservato in altri lavori [80], consentendo, quindi, di semplificare il sistema da 3-D a 2-D. Il risolutore utilizzato è *reactingFoam*, il quale si occupa di risolvere sistemi di combustione con schemi cinetici. Per le simulazioni si considerano le condizioni standard $T_u = 300\text{ K}$ e $p = 1\text{ bar}$ utilizzate nella quasi totalità dei lavori precedentemente studiati e soprattutto nello studio sperimentale svolto da Pio *et al* [19]. Le equazioni implementate per rendere il problema risolvibile sono:

- Equazione di conservazione della quantità di moto:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\pi u) = -\nabla P - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (3.1)$$

- Equazione di conservazione della materia:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\pi Y_i) - \nabla \cdot (\mu \nabla Y_i) = \dot{\omega}_{Y_i} \quad (3.2)$$

- Equazione di conservazione della energia:

$$\frac{\partial(\rho \hat{h}_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \hat{K})}{\partial t} + \nabla \cdot (\pi \hat{h}_e) + \nabla \cdot (\pi \hat{K}) - \nabla^2(\alpha_{eff} \hat{h}_e) = \dot{Q}_{dot} \quad (3.3)$$

Dove in questo caso:

$$\pi = \rho u \quad (3.4)$$

si può notare che l'Eq. (3.2), si basa sulla ipotesi che la diffusività di materia e la diffusività della quantità di moto, cioè la viscosità cinematica ($\nu = \mu/\rho$), siano uguali. Questa ipotesi fa sì che il numero di Schmidt (Sc), il quale mette in relazione queste due grandezze, sia rispettivamente:

$$Sc = \frac{\nu}{D} = 1 \quad (3.5)$$

Questo significa che la diffusività sarà la stessa per tutte le specie e il loro processo di diffusione sarà controllato dalla viscosità di miscela. L'Eq. (3.3), è stata scritta mantenendo i termini di energia cinetica (\widehat{K}) e di entalpia (\widehat{h}_e) separati, per riprodurre fedelmente la forma utilizzata nel codice sorgente.

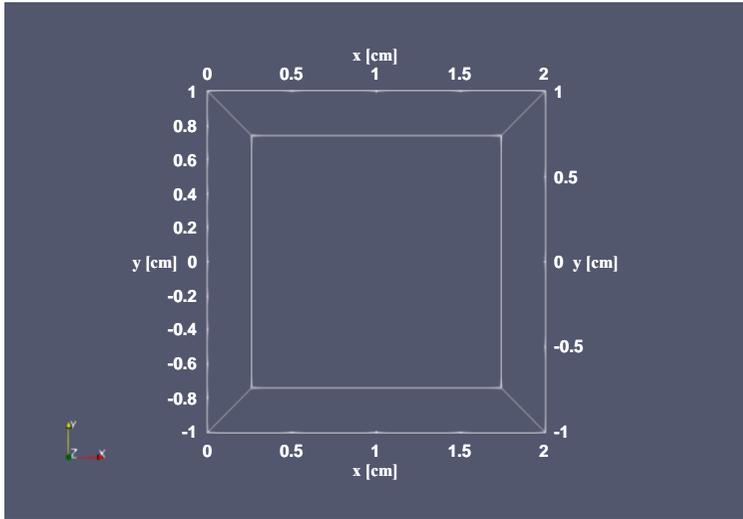


Figura 3-1. Rappresentazione del volume di riferimento considerato nel presente lavoro.

Facendo riferimento alla Figura 3-1 , le condizioni iniziali e al contorno sono:

Tabella 3-1. Condizioni al contorno utilizzate per le simulazioni.

	$x _0$	$x _L$	$y _{-L/2}$	$y _{+L/2}$
u [m/s]	$\begin{cases} u_x = B_2 \\ u_y = 0 \end{cases}$	$\begin{cases} u_x = B_3 \\ u_y = 0 \end{cases}$	$\begin{cases} \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0 \end{cases}$	$\begin{cases} \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0 \end{cases}$
T [K]	300	300	300	300
p [Pa]	$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \end{cases}$	$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \end{cases}$	10^5	10^5
Y_{CH_4} [~]	C^4	C^4	0	0
Y_{O_2} [~]	E^4	E^4	0	0
Y_{N_2} [~]	F^4	F^4	1	1
Y_{CO_2} [~]	0	0	0	0
Y_{H_2O} [~]	0	0	0	0

2 Il valore (positivo) dipende dalla simulazione presa in considerazione.

3 Il valore (negativo) dipende dalla simulazione presa in considerazione.

4 Il valore dipende dalla simulazione presa in considerazione.

Nel caso in esame è stato utilizzato un volume di controllo definito da un cubo dai vertici mostrati nella Figura 3-1 e successivamente ridotto ad una geometria 2D come mostrato nella Figura 3-2

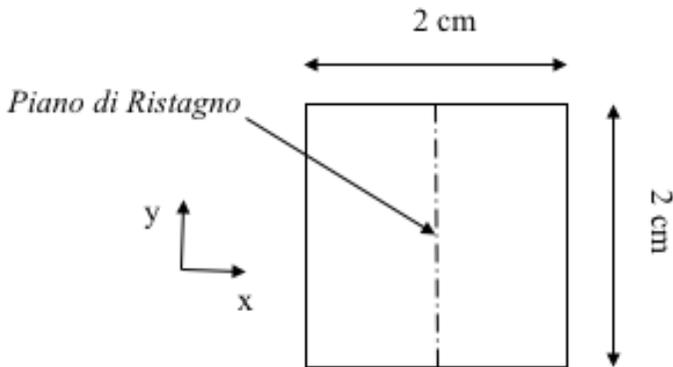


Figura 3-2. Schema del dominio computazionale 2D per il counterflow flame.

La lunghezza pari a 2 cm, è stata scelta in modo da utilizzare la massima distanza finora incontrata nel sistema CFF [40,41,58,59,68,80–83,42,43,52–57] e rendere, quindi, valida la condizione per una successiva estrapolazione lineare come già discusso precedentemente

nel capitolo 2. Solitamente viene considerata una cella elementare di tipo esaedrica, con dimensioni che variano tra $5 \mu\text{m}$ per cinetiche semplici e $100 \mu\text{m}$ per cinetiche più dettagliate [84,85].

Qualora non specificato da una condizione specificata in fase di impostazione del problema, le condizioni al contorno utilizzate tra celle adiacenti sono le condizioni di Neumann e Dirichlet [65], atte a garantire l'assenza di discontinuità tra le proprietà della superficie in comune. A titolo esemplificativo, di seguito, nella Figura 3-3 si riporta una suddivisione del dominio di controllo investigato. Si può notare che esso è stato suddiviso in blocchi esagonali, con un rapporto di espansione unitario lungo tutte le direzioni.

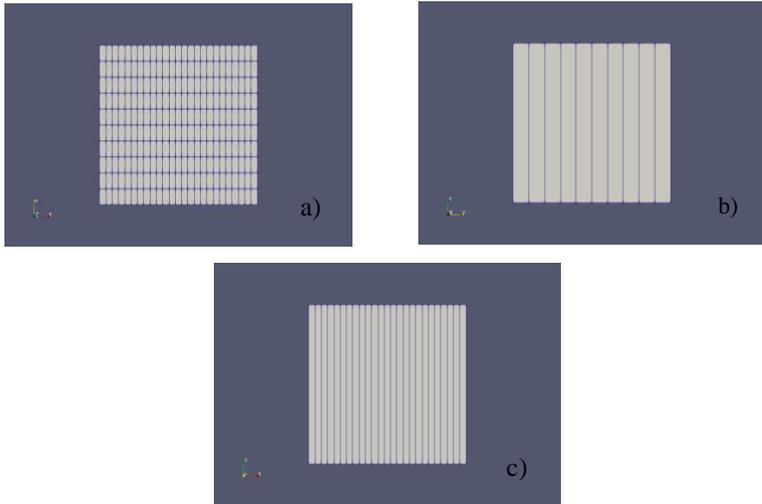


Figura 3-3. Suddivisione della mesh lungo i piani: a) $x - y$; b) $y - z$; c) $x - z$.

Si vuole evidenziare che la suddivisione lungo la direzione z risulta unitaria, in quanto si è implementata una geometria semplificata (2D) sulla base dell'analisi preliminare precedentemente riportata. Risulta evidente che, maggiore sarà la suddivisione in celle elementari, maggiore sarà il carico computazionale richiesto per la risoluzione del sistema di equazioni.

Tuttavia, l'applicazione di un insieme di celle più strette garantisce una risoluzione più accurata del problema. Pertanto, prima di procedere con la modellazione di dettaglio, si è soliti effettuare una analisi preliminare, detta *grid sensitivity*, atta ad individuare le dimensioni ottimali della griglia in termini di costo computazionale richiesto e livello di dettaglio raggiunto. A tale scopo, sono state considerate 4 diverse *mesh* le cui dimensioni sono di seguito riportate nella forma $(\Delta x; \Delta y; \Delta z)$ in *mm*:

1. (0.8; 2; 20)
2. (0.4; 1; 20)
3. (0.2; 0.5; 20)
4. (0.1; 0.25; 20)

mantenendo sempre lo stesso rapporto di cella, $\Delta x/\Delta y$. I risultati così ottenuti sono riportati nella Figura 3-4.

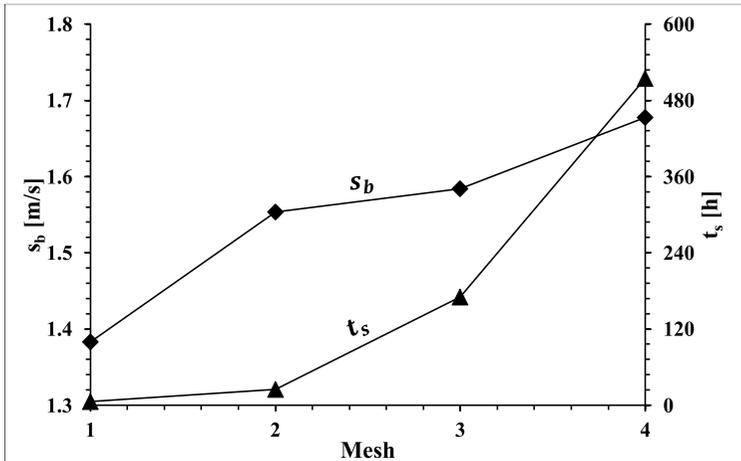


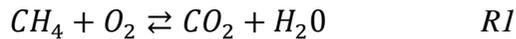
Figura 3-4. Variazione della s_b e del tempo di simulazione (t_s) al variare della mesh nelle seguenti condizioni: $T_u = 300\text{ K}$; $p = 1\text{ bar}$; $u_0 = 0.25\text{ m/s}$; $\phi = 1$.

Come si può notare, aumentando il livello di dettaglio della mesh, il tempo di calcolo (t_s) aumenta, come era facilmente intuibile. Tuttavia, ciò non ha un egual impatto sulla soluzione ottenuta. Alla luce di questi risultati si è

ritenuto un ottimo compromesso scegliere la *mesh* di tipo 2).

Dopo aver definito la *mesh* da utilizzare, è necessario definire le cinetiche di dettaglio utilizzate nelle diverse simulazioni. Le cinetiche implementate sono:

- una cinetica semplificata, ovvero la reazione di ossidazione del metano con aria:



la quale ha le seguenti costanti cinetiche:

$$A = 5.2 * 10^{16} \left[\frac{mol}{m^3 s K^\beta} \right]$$

$$\beta = 0$$

$$T_a = 14906 [K]$$

L'equazione cinetica è di tipo Arrhenius ed è della forma:

$$r = AT^\beta \exp \left[\frac{T_a}{T} \right] \quad (3.6)$$

- una cinetica di dettaglio, utilizzata come *benchmark* nel settore della combustione, sviluppata dal Gas Research Institute (GRI-Mech 3.0) [18].
- la cinetica KIBO [19], ottenuta negli studi condotti da Pio *et al.* con l'utilizzo del sistema HFB e che consiste di 109 specie e 311 reazioni.

Al fine di ottenere il valore della LBV a partire dai dati ottenuti (profili di concentrazione, velocità e temperatura), si sono confrontate diverse metodologie, di seguito riportate. In generale, tutte consistono nella determinazione di diverse coppie di valori $s - \kappa$. Il metodo comune si basa sulla individuazione di una generica velocità di fiamma di riferimento s e successivamente riportarla nella condizione in cui non è influenzata dalla *stretch rate*, estrapolandola linearmente al valore di $\kappa = 0$.

La diversità tra i vari metodi sta in alcune differenze che verranno di seguito elencate.

Il metodo a) si basa sulla definizione della *stretch rate*, Eq.

(2.6) [81], calcolata a valle della $s_{u,ref}$ come mostrato

nella Figura 3-5:

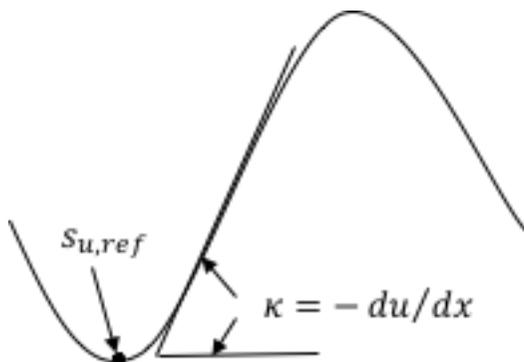


Figura 3-5. Profilo di velocità e notazione utilizzata per la determinazione della *stretch rate* a valle della $s_{u,ref}$.

Il metodo b), analogo al precedente, considera invece la *stretch rate* a monte, definita dalla Eq. (2.6), come

mostrato nella Figura 3-6.

Tuttavia, entrambi i metodi presentati fino ad ora, utilizzano una forma locale della *stretch rate*.

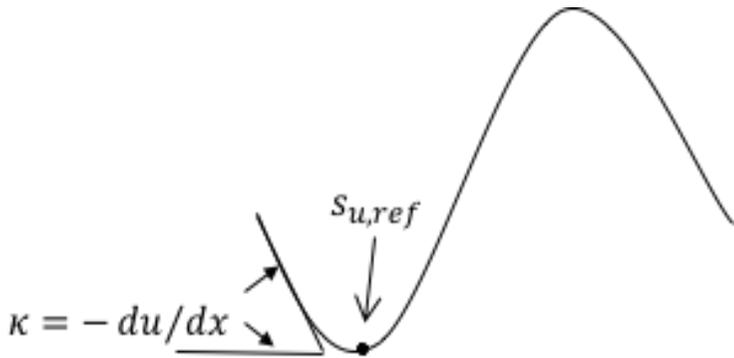


Figura 3-6. Profilo di velocità e notazione utilizzata per la determinazione della *stretch rate* a monte della $S_{u,ref}$.

Pertanto il metodo c) introduce il calcolo della *stretch rate* globale $[k]$ [82]:

$$k = \frac{2|u_{ox}|}{L} \left(1 + \frac{|u_F| \sqrt{\rho_F}}{|u_{ox}| \sqrt{\rho_{ox}}} \right) \quad (3.7)$$

Dove L è la distanza assiale tra i due ugelli, u_F e u_{ox} sono rispettivamente le velocità di ingresso del combustibile e dell'ossidante, ρ_F e ρ_{ox} sono le densità della miscela del combustibile e dell'ossidante, rispettivamente. Se, come nel caso in esame, le correnti sono premiscelate e identiche, si ha che $u_F = u_{ox} = u_0$, $\rho_F = \rho_{ox} = \rho_0$, riducendo l'Eq. (3.7) a:

$$a_s = \frac{4|u_0|}{L} \quad (3.8)$$

Il metodo d), utilizza come velocità di riferimento la s_u , ottenuta estrapolando il valore della u_x in corrispondenza del valore della massima potenza termica rilasciata, unitamente alla κ_u estrapolata dalla funzione $\kappa(x)$ anch'essa definita dalla Eq. (2.6), come mostrato nella Figura 3-7.

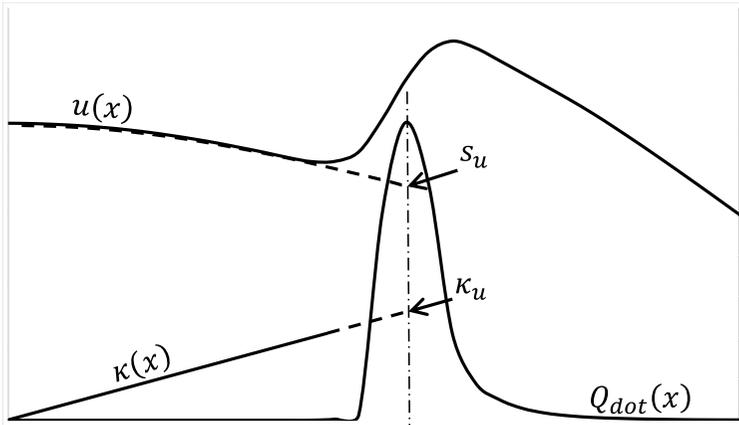


Figura 3-7. Profilo di velocità e notazione utilizzata per la determinazione della s_u e della κ_u con il metodo d).

Infine, il metodo e), limita le velocità in ingresso a valori tali da ottenere $10 \leq a_s \leq 100 \text{ s}^{-1}$, in modo da ridurre gli effetti fluidodinamici. Tale metodo prende in considerazione il valore massimo della $u_x (s_b)$, ed una volta individuato, si calcola il valore puntuale della κ corrispondente, Eq. (2.6), come riportato nella Figura 3-8

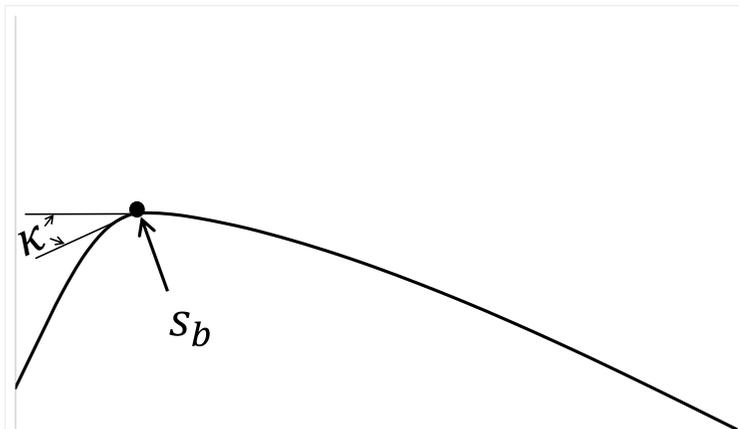


Figura 3-8. Profilo di velocità a bassi valori di κ .

4. RISULTATI E DISCUSSIONI

Si è discusso nel capitolo precedente delle fasi di *pre-processing* e *solving* dell'intero processo di simulazione.

In questo capitolo, verranno presentati i risultati elaborati in fase di *post-processing* dalla estrapolazione dei dati ottenuti con i metodi esposti nel capitolo precedente per ottenere il valore della LBV, al variare del rapporto di equivalenza (ϕ) definito dalla Eq. (2.8), in corrispondenza delle diverse cinetiche implementate – cinetica semplificata, che consiste nella reazione di ossidazione del metano; cinetica GRI-Mech 3.0, già implementata durante il rilascio del software; cinetica KIBO, implementata attraverso l'uso della applicazione *chemkintofam*. Si evidenzieranno, inizialmente, i risultati della simulazione CFD per la cinetica GRI-Mech 3.0, i

corrispondenti risultati delle estrapolazioni dai diversi metodi elencati nel capitolo precedente al variare del parametro ϕ e, infine, si riassumeranno tutti i valori ottenuti della LBV per un successivo confronto. I valori che si otterranno dalla cinetica GRI-Mech 3.0 verranno confrontati con i dati in letteratura, ottenuti sperimentalmente da diversi autori, sia attraverso il metodo CFF [86–95] e sia attraverso il metodo HFB [72–74,79,96–98]. Successivamente, i risultati ottenuti dalla cinetica semplificata e dalla cinetica KIBO, invece, verranno riportati solo con il metodo e). In particolare, i risultati ottenuti dalla cinetica KIBO verranno confrontati con i dati ottenuti sperimentalmente da Pio *et al.* [19] tramite il metodo HFB, grazie alle considerazioni trovate in letteratura in merito al confronto tra le due diverse tecniche trattate nel presente lavoro [68].

4.1 Cinetica GRI–Mech 3.0

La cinetica considerata consiste di 53 specie e 325 reazioni [18]. Si è studiata una miscela metano + aria con rapporti di equivalenza $\phi = 0.7; 1.0$ e 1.3 , Eq. (2.8), ad un intervallo di velocità in ingresso pari $0.1 \leq u_0 \leq 1.5$ m/s. I valori di velocità sono stati determinati in funzione della *stretch rate* globale, $20 \leq a_s \leq 300$ s⁻¹, dalla Eq. (3.8). Nelle prossime figure si può notare il risultato dei calcoli CFD, attraverso l' interfaccia grafica ParaView, per i rispettivi valori di velocità in ingresso: $u_0 = 1.1$ m/s e $u_0 = 0.1$ m/s. In particolare si ha, il campo di temperatura nelle Campo di temperatura stimato nel caso di condizioni iniziali pari a $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar; $u_0 = 1.1$ m/s e $\phi = 0.7$. e Figura 4-3 e il campo di velocità nelle Figura 4-2 e Figura 4-4. Si noti nelle Figura 4-2 e Figura 4-4 la simmetria del sistema.

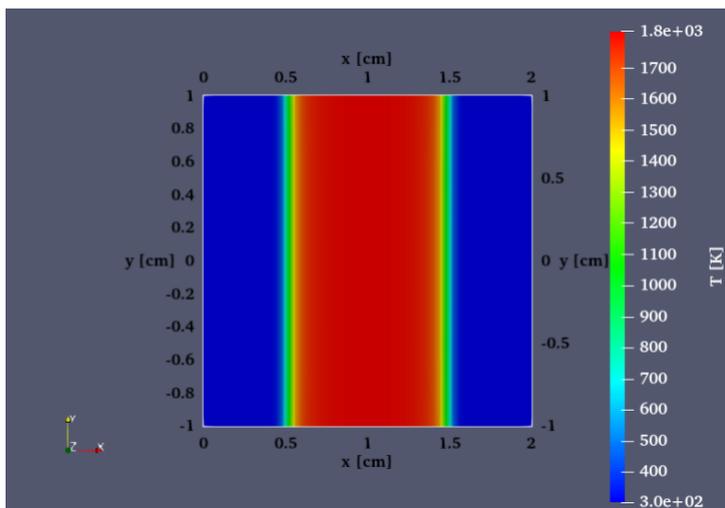


Figura 4-1. Campo di temperatura stimato nel caso di condizioni iniziali pari a $T_u = 300\text{ K}$; $p = 1\text{ bar}$; $u_0 = 1.1\text{ m/s}$ e $\phi = 0.7$.

In particolare, nella Figura 4-2), a partire dall'ugello di sinistra, a $x = 0$, dove il campo di velocità è positivo rispetto al piano di ristagno, a $x = 0.1$, si hanno le seguenti distinte regioni: quella relativa alla fluidodinamica, in giallo; quella relativa alla reazione, in

rosso; ed infine il piano di ristagno, in verde, dove la velocità è nulla, al centro del sistema.

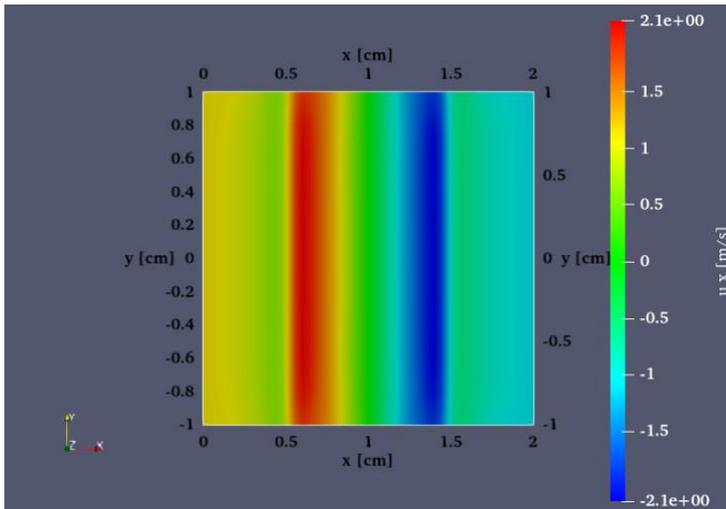


Figura 4-2. Campo di velocità stimato nel caso di condizioni iniziali pari a $T_u = 300\text{ K}$; $p = 1\text{ bar}$; $u_0 = 1.1\text{ m/s}$ e $\phi = 0.7$.

Nella Figura 4-4 in cui la velocità in ingresso u_0 è inferiore rispetto a quella della Figura 4-2), la regione relativa alla fluidodinamica, regione in giallo, si è ridotta notevolmente

e si nota un ispessimento della regione rossa, ovvero la regione di reazione.

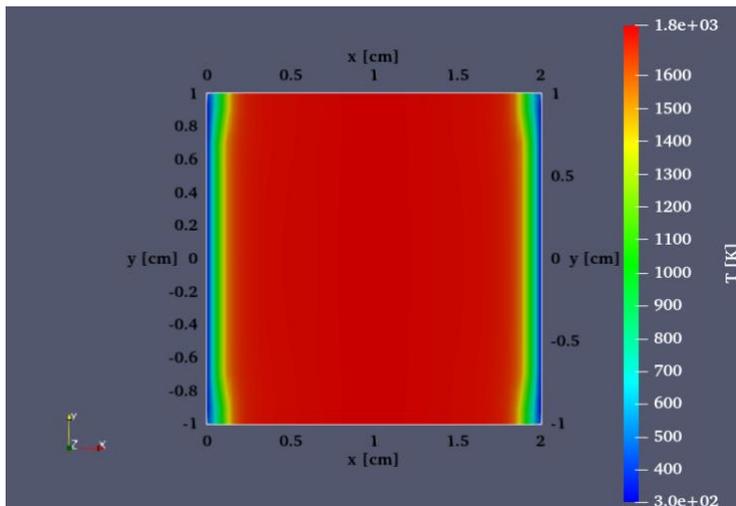


Figura 4-3. Campo di temperatura stimato nel caso di condizioni iniziali pari a $T_u = 300\text{ K}$; $p = 1\text{ bar}$; $u_0 = 0.1\text{ m/s}$ e $\phi = 0.7$.

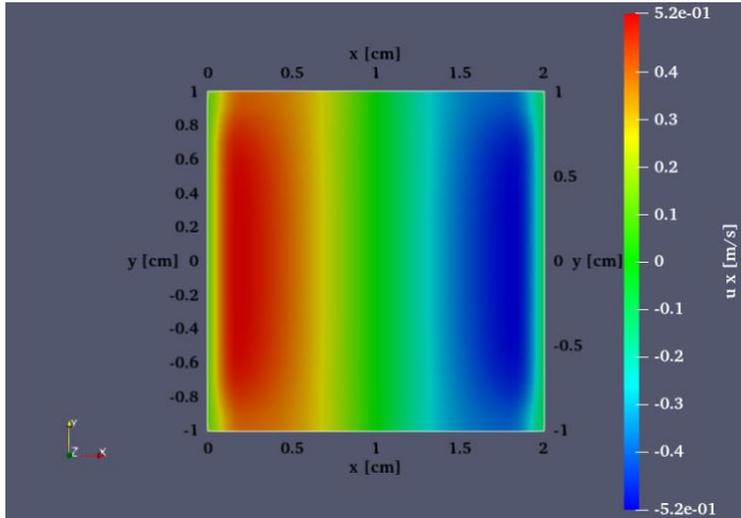


Figura 4-4. Campo di velocità stimato nel caso di condizioni iniziali pari a $T_u = 300\text{ K}$; $p = 1\text{ bar}$; $u_0 = 0.1\text{ m/s}$ e $\phi = 0.7$.

La stessa situazione, si può notare nelle Figura 4-5 e Figura 4-6, in cui si hanno i profili di velocità e di temperatura corrispondenti.

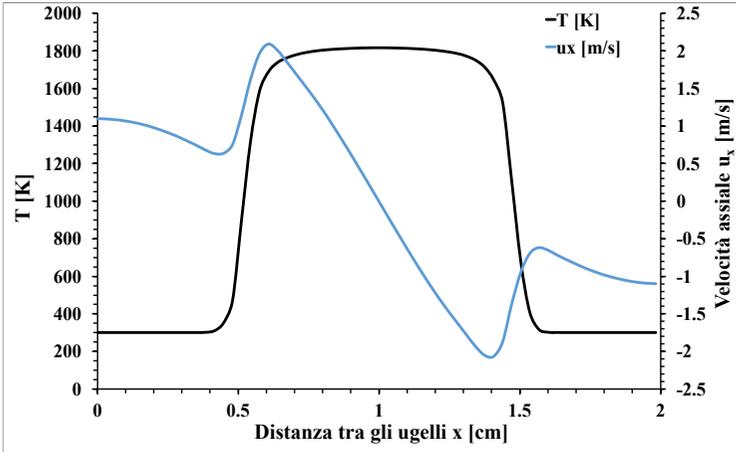


Figura 4-5. Profili di velocità e di temperatura lungo x a $T_u = 300\text{ K}$, $p = 1\text{ bar}$, $u_0 = 1.1\text{ m/s}$ e $\phi = 0.7$.

Da un ulteriore confronto si può notare come variano i profili al variare della velocità in ingresso della corrente incombusta e di conseguenza al variare della *stretch rate* globale, a_s , Eq. (3.8).

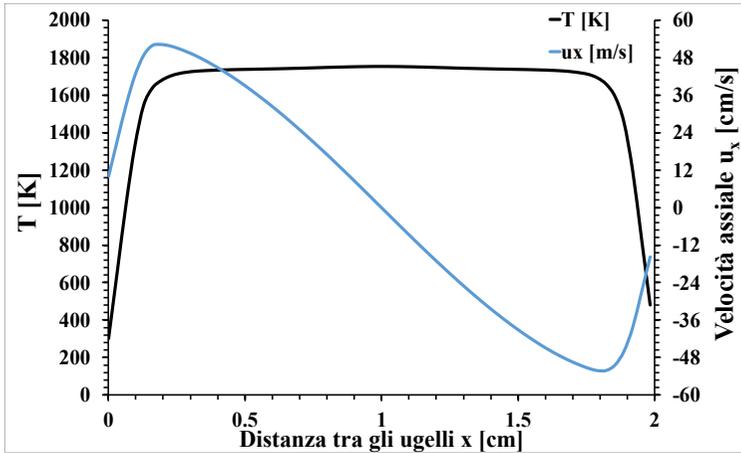


Figura 4-6. Profili di velocità e di temperatura lungo x a $T_u = 300\text{ K}$; $p = 1\text{ bar}$; $u_0 = 0.1\text{ m/s}$ e $\phi = 0.7$.

Si vuole considerare, inoltre, la struttura della fiamma per i due diversi casi di velocità in ingresso, per studiarne gli effetti, Figura 4-7 e Figura 4-8.

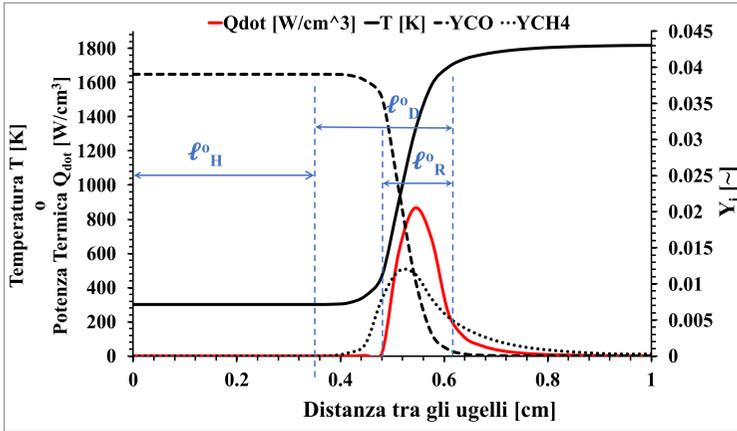


Figura 4-7. Struttura della fiamma a $T_u = 300 \text{ K}$; $p = 1 \text{ bar}$; $u_0 = 1.1 \text{ m/s}$ e $\phi = 0.7$.

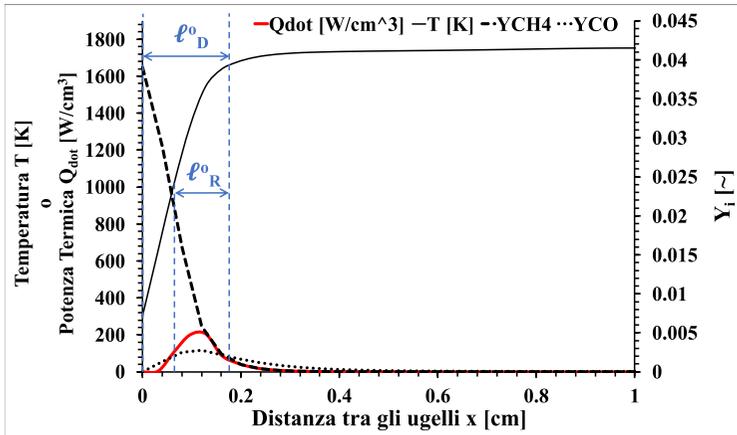


Figura 4-8. Struttura della fiamma a $T_u = 300 \text{ K}$; $p = 1 \text{ bar}$; $u_0 = 0.1 \text{ m/s}$ e $\phi = 0.7$.

Delle Figura 4-7 e Figura 4-8 è interessante notare il profilo della potenza termica (Q_{dot}), il quale determina lo spessore della regione di reazione, ℓ_R^o , in cui i fenomeni di reazione e diffusione sono dello stesso ordine di grandezza. Si nota, inoltre, che i due profili, quello del reagente (Y_{CH_4}) e quello di temperatura, sono entrambi speculari.

Questa è una conseguenza della ipotesi iniziale $Le = 1$. L'aumento graduale della temperatura, prima della regione di reazione, nella Figura 4-7, è dovuto allo scambio termico di natura sia convettiva e sia diffusiva. Infatti, in tale regione, i due fenomeni sono confrontabili.

Questa situazione ricorda lo studio dello strato limite fluidodinamico. Si ha, quindi, lo spessore della regione diffusiva, ℓ_D^o . Infine, si nota che, variando la quantità di moto dal caso di Figura 4-7 al caso di Figura 4-8, la regione relativa alla fluidodinamica, ℓ_H^o ,

si riduce a tal punto che non risulta più valutabile e questo risulterà determinante nella estrapolazione della LBV. Di seguito, vengono confrontati i risultati ottenuti dalla estrapolazione lineare attraverso i diversi metodi, al variare del parametro ϕ , con i risultati sperimentali di Hu et al. [91] estrapolati linearmente, Figura 4-9

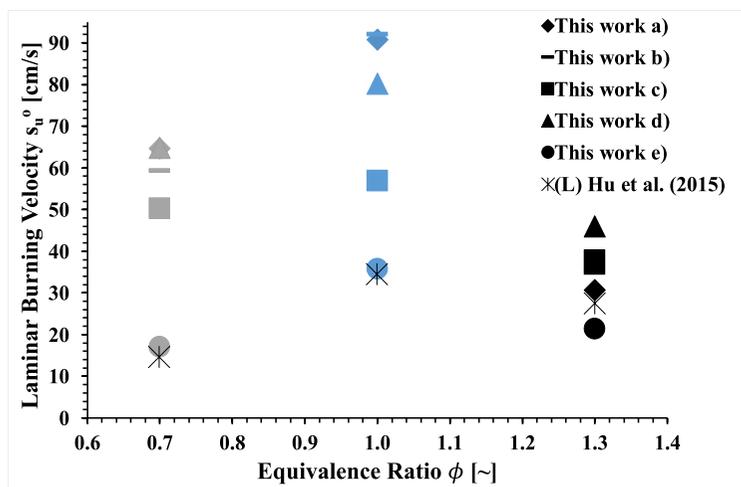


Figura 4-9. Confronto tra i valori della s_u^0 estrapolati con i diversi metodi e con i risultati sperimentali di Hu et al. [91] estrapolati linearmente.

I valori ottenuti nell'intervallo di velocità $1.1 \leq u_0 \leq 1.5 \text{ m/s}$ - quindi mediante i metodi a), b), c) e d) - forniscono dei valori della LBV elevati rispetto ai valori sperimentali ed ai precedenti valori CFD riportati in letteratura. Dopo aver analizzato sia i risultati e sia i precedenti profili, si può concludere che l'errore non è determinato dalle diverse estrapolazioni, bensì dalle ipotesi iniziali di $Le = 1$ e $Sc = 1$, le quali implicano anche l'assenza di un effetto non equidiffusivo, ovvero una diffusione preferenziale unitaria, definita da:

$$\frac{D_i}{D_j} = 1 \quad (4.1)$$

Dove i è il reagente limitante e j il reagente in eccesso. Tuttavia, i valori ottenuti nell'intervallo di velocità $0.1 \leq u_0 \leq 0.25 \text{ m/s}$, ovvero il metodo e), risultano coerenti con i valori sperimentali ed i precedenti valori CFD riportati in letteratura. Il metodo consente di rendere quasi

ideale il sistema, riducendo al minimo l'effetto della *stretch rate* ($\kappa \sim 10 \div 50 \text{ s}^{-1}$). Si riassumono nella Figura 4-10 i risultati ottenuti dai diversi metodi:

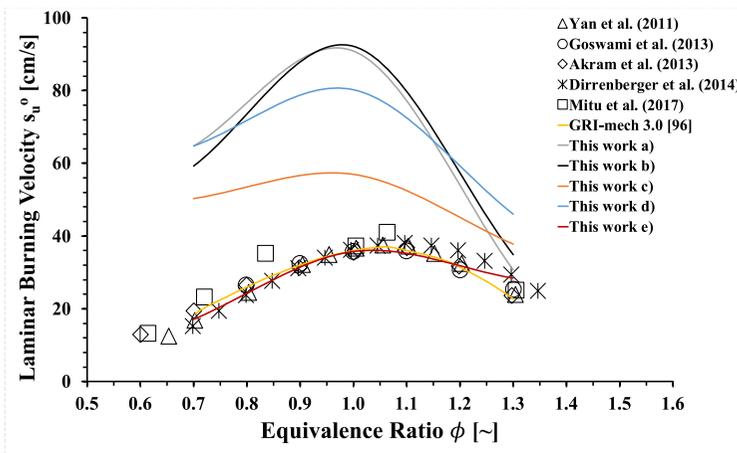


Figura 4-10. Valori della LBV per la miscela $\text{CH}_4 + \text{aria}$ al variare del rapporto equivalente (ϕ), per i vari metodi di estrapolazione analizzati in questo lavoro.

Considerando i risultati precedentemente riportati, si è deciso di adottare il solo metodo e) per le successive analisi riguardanti gli altri modelli cinetici.

Si considera prima la cinetica semplificata, la quale consiste nella reazione di ossidazione del metano $CH_4 + O_2 \rightleftharpoons CO_2 + H_2O$ R1. I risultati relativi al metodo e) sono riportati di seguito, nella Figura 4-11:

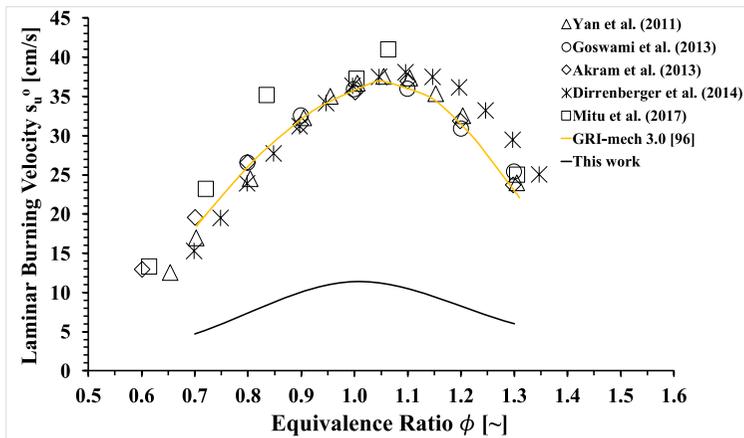


Figura 4-11. Confronto valori sperimentali con risultati CFD utilizzando il metodo e), con cinetica semplificata. Simboli: Risultati sperimentali. Linea: risultati CFD di S. Wang et al. [96]e del presente lavoro.

In questo caso, è evidente la necessità di uno schema cinetico dettagliato.

Infine, si è implementato il modello cinetico di dettaglio KIBO, caratterizzato da 109 specie e 311 reazioni, Figura 4-12:

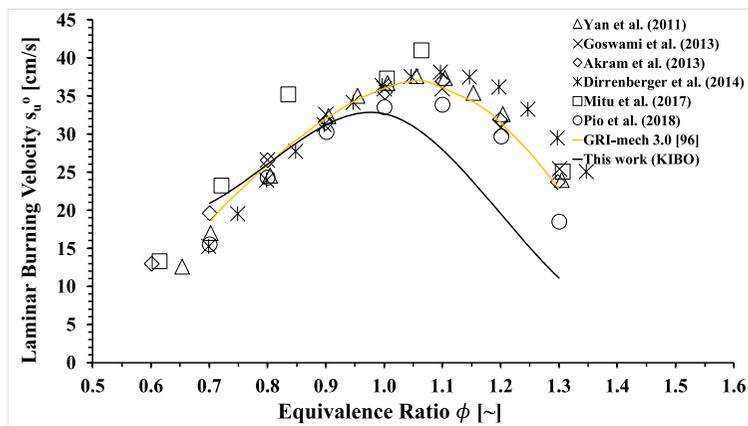


Figura 4-12. Confronto valori sperimentali con risultati CFD utilizzando il metodo e), con cinetica KIBO. Simboli vuoti: Risultati sperimentali. Linea: risultati CFD di S. Wang et al. [96] e del presente lavoro.

Si nota una diminuzione dei valori della LBV per miscele ricche dai risultati di Pio *et al.*, i quali vengono comunque previsti bene dal calcolo CFD, validando così il modello. Si conclude facendo notare il tipico andamento della LBV

in funzione del rapporto equivalente con un massimo in prossimità della miscela leggermente ricca ($\phi \approx 1.1$). Questo andamento è legato, come già anticipato nel capitolo precedente, all'andamento della temperatura massima di reazione in funzione di ϕ , come riportato nella Figura 4-13:

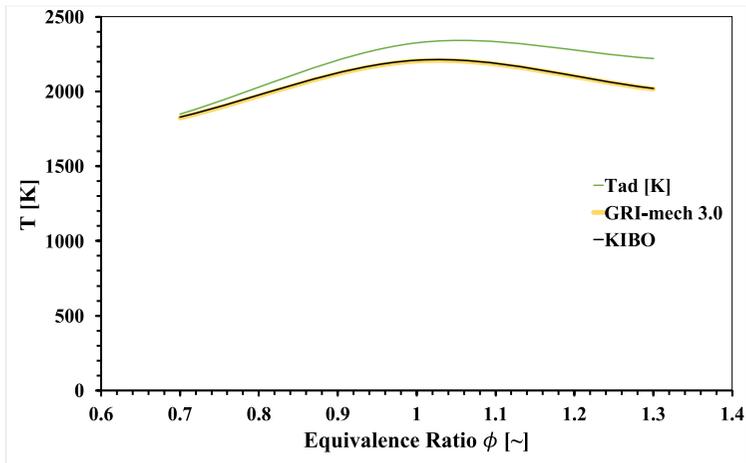


Figura 4-13. Andamento della temperatura al variare di ϕ , alle condizioni iniziali $T_u = 300$ K; $p = 1$ bar e $u_0 = 0.25$ m/s

Come si può notare l'andamento rispecchia esattamente quello della LBV, infatti questa dipendenza così forte è anche espressa dalla correlazione tra s_u^o e T_{ad} , in particolare, da una analisi fenomenologica, si ottiene che $s_u^o \sim \sqrt{\dot{\omega}_b^o}$ e poiché $\dot{\omega}_b^o \sim T_b^o$, si ha una proporzionalità diretta tra velocità laminare di fiamma, s_u^o , e temperatura massima di reazione, T_b^o . In realtà, la LBV è influenzata anche dai fenomeni diffusivi, ma nel caso degli idrocarburi l'effetto dominante risulta essere la temperatura massima di reazione.

5. CONCLUSIONI

Il presente lavoro di tesi è stato incentrato sullo studio dei modelli attualmente esistenti e sullo sviluppo di nuove metodologie per la stima degli aspetti fluidodinamici e chimici di miscele infiammabili. A tal fine sono state analizzate le fiamme premiscelate di metano ed aria a basse temperature e pressione atmosferica, grazie all'abbondanza di dati che hanno facilitato la validazione e valutazione degli approcci sviluppati in questa tesi. In particolare, è stata stimata la velocità di fiamma ottenuta da un sistema “*counterflow flame*” al variare dei modelli cinetici, sia di dettaglio e sia semplificati ad una singola reazione, e della composizione della miscela iniziale, mediante il codice fluido–dinamico *open access*, OpenFOAM. I dati numerici così ottenuti sono stati

confrontati con dati sperimentali in letteratura e stime ottenute mediante l’approccio standard in cui gli aspetti fluidodinamici sono trascurati.

Al fine di ottenere la velocità di fiamma “*unstretched*”, sono stati implementati diversi metodi di estrapolazione, sulla base di quanto riportato in letteratura e delle equazioni costitutive del sistema.

I risultati hanno evidenziato che il metodo caratterizzato da bassi valori della *stretch rate* globale è in grado di riprodurre al meglio i dati sperimentali riportati in questo lavoro. Pertanto, si suggerisce l’implementazione di quest’ultimo per ulteriori studi incentrati sulla materia. Si vuole concludere con una valutazione oggettiva sui metodi utilizzati, evidenziando i diversi aspetti:

- Il metodo CFF risulta essere uno strumento molto semplice dal punto di vista costruttivo e molto versatile.

L'utente è in grado di adattare la sua configurazione in base alle necessità sperimentali. È possibile trascurare le perdite di calore, grazie alla sua configurazione simmetrica, nel caso di fiamme premiscelate, senza commettere errori rilevanti nei risultati. È stato riscontrato un solo aspetto negativo, legato alla non idealità del sistema. I risultati sperimentali e delle simulazioni CFD sono influenzati dalla quantità di moto, in modo tale da deviare le linee di corrente. Di conseguenza, tali valori vanno corretti ed estrapolati al valore nullo della *stretch rate*.

- Il metodo HFB, studiato solo dal punto di vista sperimentale, non prevede correzioni di tipo fluidodinamico come il metodo precedente, quindi, non è soggetto alla correzione dei risultati. Tuttavia, non essendo anch'esso un sistema ideale, in questo caso

sono le perdite di calore tra la fiamma e piastra forata ad influenzare i risultati, quindi, è necessario un sistema di scambio termico per ridurre al minimo tali effetti.

Una possibile fase successiva, potrebbe essere implementare tale sistema in un codice fluidodinamico, come fatto per il metodo CFF e confrontarne i risultati.

- OpenFOAM, infine, si è rivelato un software completo, affidabile, molto versatile e preciso per l'analisi CFD.

La sua versatilità, però, è legata alla conoscenza del linguaggio C++, fondamentale per un corretto utilizzo del software. Sicuramente tra gli aspetti positivi prevale la disponibilità gratuita di tale strumento inversamente proporzionale, però, alla *user friendliness* di altri software a pagamento della stessa categoria.

BIBLIOGRAFIA

1. REN21. Renewables 2016 Global Status Report. Renewables 2016 Global Status Report. 2016.
2. EC. WHITE PAPER: European transport policy for 2010: time to decide. Comm Eur Communities. 2001;
3. Consejo de la Unión Europea. Directiva 2014/94/UE del Parlamento Europeo y del Consejo de 22 de octubre de 2014. D Of la Unión Eur. 2014;
4. Kumar S, Kwon HT, Choi KH, Lim W, Cho JH, Tak K, et al. LNG: An eco-friendly cryogenic fuel for sustainable development. Applied Energy. 2011.
5. Fedorova EB, Fedorov V V., Shakhov AD. Promising technology for recovery and use of liquefied natural gas. Chem Pet Eng. 2009;
6. European Commission. EU launches clean fuel strategy. EU Press Releases. 2013.
7. Osorio-Tejada JL, Llera-Sastresa E, Scarpellini S. Liquefied natural gas: Could it be a reliable option for road freight

Bibliografia

- transport in the EU? Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2017.
8. Schmidtchen U, Behrend E, Pohl HW, Rostek N. Hydrogen Aircraft and Airport Safety. *Renew Sustain Energy Rev.* 1997;
 9. Withers MR, Malina R, Gilmore CK, Gibbs JM, Trigg C, Wolfe PJ, et al. Economic and environmental assessment of liquefied natural gas as a supplemental aircraft fuel. *Progress in Aerospace Sciences.* 2014.
 10. Barrett SRH, Britter RE, Waitz IA. Global mortality attributable to aircraft cruise emissions. *Environ Sci Technol.* 2010;
 11. Roger, Schaufele. FAA AEROSPACE FORECAST FISCAL YEARS (2017-2037). Federal Aviation Administration. 2014.
 12. ICAO. Aviation Outlook. In: ICAO Environmental Report 2010. 2010.
 13. Correa SM. A review of NO_x formation under gas-turbine combustion conditions. *Combust Sci Technol.* 1993;
 14. Flamme M. New combustion systems for gas turbines (NGT). In: *Applied Thermal Engineering.* 2004.
 15. Yetter RA, Glassman I, Gabler HC. Asymmetric whirl

- combustion: A new low NO_x approach. Proc Combust Inst. 2000;
16. Steinberg AM, Arndt CM, Meier W. Parametric study of vortex structures and their dynamics in swirl-stabilized combustion. Proc Combust Inst. 2013;
 17. Nichols KM, Thompson LM, Empie HJ. A review of NO_x formation mechanisms in recovery furnaces. Tappi J. 1993;
 18. Smith GP, Golden DM, Frenklach M, Moriarty NW, Eiteneer B, Goldenberg M, et al. GRI-Mech 3.0. [Http://Www.Me.Berkeley.Edu/Gri_Mech/](http://www.me.berkeley.edu/Gri_Mech/). 2000.
 19. Pio G, Palma V, Salzano E. Comparison and validation of detailed kinetic models for the oxidation of light alkenes. Ind Eng Chem Res. 2018;
 20. Carson LK, Davis GW, Versaw EF, Cunnington, G. R. J., Daniels EJ. Study of Methane Fuel For Subsonic Transport Aircraft. Contract. 1980.
 21. Argonne National Laboratory. The Greenhouse Gases, Regulated Emissions, and Energy Use in Transportation (GREET) Model, 2015. GREET [available at <http://greet.es.anl.gov/>]. 2015.

Bibliografia

22. Outlook AE. AEO2012 Early Release Overview. Energy. 2012;
23. Outlook AE, Argonne National Laboratory. The Greenhouse Gases, Regulated Emissions, and Energy Use in Transportation (GREET) Model, 2015. Energy. 2015;
24. Min Wong H, Carter NA, Stratton RW, Bredehoeft MK, Hileman JI. Energy and environmental viability of select alternative jet fuel pathways. In: 47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit 2011. 2008.
25. Law CK. Combustion physics. Combustion Physics. 2006.
26. Williams FA. Combustion Theory (2nd Ed.). Journal of Chemical Information and Modeling. 1985.
27. Wang H, Sheen DA. Combustion kinetic model uncertainty quantification, propagation and minimization. Progress in Energy and Combustion Science. 2015.
28. Wu F, Liang W, Chen Z, Ju Y, Law CK. Uncertainty in stretch extrapolation of laminar flame speed from expanding spherical flames. Proc Combust Inst. 2015;
29. Bunsen R. Ueber die Temperatur der Flammen des

- Kohlenoxyds und Wasserstoffs. Ann Phys. 1867;
30. Glassman I, Yetter RA, Glumac NG. Combustion: Fifth Edition. Combustion: Fifth Edition. 2014.
 31. LEWIS B, von ELBE G. Combustion Waves in Laminar Flow. In: Combustion, Flames and Explosions of Gases. 1961.
 32. Tanford C, Pease RN. Theory of burning velocity. II. The square root law for burning velocity. J Chem Phys. 1947;
 33. Hirschfelder JO, Curtiss CF, Bird RB. Molecular Theory of Gases and Liquids. Phys Today. 1955;
 34. Lewis B, Von Elbe G. Determination of the speed of flames and the temperature distribution in a spherical bomb from time-pressure explosion records. J Chem Phys. 1934;
 35. Xiouris C, Ye T, Jayachandran J, Egolfopoulos FN. Laminar flame speeds under engine-relevant conditions: Uncertainty quantification and minimization in spherically expanding flame experiments. Combust Flame. 2016;
 36. Giannakopoulos GK, Gatzoulis A, Frouzakis CE, Matalon M, Tomboulides AG. Consistent definitions of “Flame Displacement Speed” and “Markstein Length” for premixed

Bibliografia

- flame propagation. *Combust Flame*. 2015;
37. Clavin P. Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*. 1985.
 38. Konnov AA, Mohammad A, Kishore VR, Kim N II, Prathap C, Kumar S. A comprehensive review of measurements and data analysis of laminar burning velocities for various fuel+air mixtures. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2018.
 39. Simmons RF, Wolfhard HG. Some limiting oxygen concentrations for diffusion flames in air diluted with nitrogen. *Combust Flame*. 1957;
 40. Tsuji H, Yamaoka I. The counterflow diffusion flame in the forward stagnation region of a porous cylinder. In: *Symposium (International) on Combustion*. 1967.
 41. Jain VK, Mukunda HS. On the ignition and extinction problems in forced convection systems. *Int J Heat Mass Transf*. 1968;
 42. The structure of flat, counter-flow diffusion flames. *Proc R Soc London Ser A Math Phys Sci*. 1964;
 43. Spalding DB. *Theory of Mixing and Chemical Reaction in the*

- Opposed-Jet Diffusion Flame. ARS J. 1961;
44. Wu CK, Law CK. On the determination of laminar flame speeds from stretched flames. Symp Combust. 1985;
45. Zhu DL, Egolfopoulos FN, Law CK. Experimental and numerical determination of laminar flame speeds of methane/(Ar, N₂, CO₂)-air mixtures as function of stoichiometry, pressure, and flame temperature. Symp Combust. 1989;
46. de Goey LPH, van Maaren A, Ouax RM. Short Communication: Stabilization of Adiabatic Premixed Laminar Flames on a Flat Flame Burner. Combust Sci Technol. 1993;
47. Scholte TG, Vaags PB. The burning velocity of hydrogen-air mixtures and mixtures of some hydrocarbons with air. Combust Flame. 1959;
48. Scholte TG, Vaags PB. Burning velocities of mixtures of hydrogen, carbon monoxide and methane with air. Combust Flame. 1959;
49. Scholte TG, Vaags PB. The influence of small quantities of hydrogen and hydrogen compounds on the burning velocity of carbon monoxide-air flames. Combust Flame. 1959;

Bibliografia

50. Kim GT, Kim N II. Laminar burning velocity predictions by meso-scale flames in an annular diverging tube. *Fuel*. 2011;
51. Akram M, Kumar S. Experimental studies on dynamics of methane-air premixed flame in meso-scale diverging channels. *Combust Flame*. 2011;
52. Chao BH, Egolfopoulos FN, Law CK. Structure and propagation of premixed flame in nozzle-generated counterflow. *Combust Flame*. 1997;
53. Sun CJ, Sung CJ, He L, Law CK. Dynamics of weakly stretched flames: Quantitative description and extraction of global flame parameters. *Combust Flame*. 1999;
54. Ju Y, Guo H, Maruta K, Niioka T. Determination of burning velocity and flammability limit of methane/air mixture using counterflow flames. *Japanese J Appl Physics, Part 1 Regul Pap Short Notes Rev Pap*. 1999;
55. Law CK, Zhu DL, Yu G. Propagation and extinction of stretched premixed flames. *Symp Combust*. 1988;
56. Davis SG, Wang H, Breinsky K, Law CK. Laminar flame speeds and oxidation kinetics of benzene-air and toluene-air flames. *Symp Combust*. 1996;

57. Ji C, Dames E, Wang YL, Wang H, Egolfopoulos FN. Propagation and extinction of premixed C5-C12 n-alkane flames. *Combust Flame*. 2010;
58. Veloo PS, Wang YL, Egolfopoulos FN, Westbrook CK. A comparative experimental and computational study of methanol, ethanol, and n-butanol flames. *Combust Flame*. 2010;
59. Wang YL, Ji C, Holley AT, Egolfopoulos FN, Tsotsis TT, Curran HJ. Propagation and extinction of premixed dimethyl-ether/air flames. In: Western States Section/Combustion Institute Spring Meeting 2008. 2008.
60. Salzano E, Pio G, Ricca A, Palma V. The effect of a hydrogen addition to the premixed flame structure of light alkanes. *Fuel*. 2018;
61. Bosschaart KJ, De Goey LPH. Detailed analysis of the heat flux method for measuring burning velocities. *Combust Flame*. 2003;
62. Ansys. ANSYS Chemkin - Pro Software [Internet]. Available from: <https://www.ansys.com/-/media/Ansys/corporate/resourcelibrary/brochure/ANSYS->

Bibliografia

- Chemkin-Pro-Brochure.pdf
63. Cantera Developers. Cantera Software [Internet]. Available from: <https://cantera.org>
 64. OpenCFD Ltd is a wholly owned subsidiary of ESI Group. OpenFOAM | Open Source CFD toolbox [Internet]. 2019. Available from: <https://www.openfoam.com/releases/openfoam-v1906/>
 65. OpenFOAM. OpenFOAM - The Open Source CFD Toolbox - User Guide. OpenFOAM Found. 2014;
 66. OpenFOAM. The Open Source CFD Toolbox - Programmer's Guide. 2019;(June).
 67. Kadar AH. Modelling Turbulent Non-Premixed Combustion in Industrial Furnaces [Internet]. 2015. Available from: <http://repository.tudelft.nl/>.
 68. Egolfopoulos FN, Hansen N, Ju Y, Kohse-Höinghaus K, Law CK, Qi F. Advances and challenges in laminar flame experiments and implications for combustion chemistry. Progress in Energy and Combustion Science. 2014.
 69. Dahoe AE, de Goey LPH. On the determination of the laminar burning velocity from closed vessel gas explosions. J Loss

- Prev Process Ind. 2003;
70. Andrews GE, Bradley D. Determination of burning velocities: A critical review. *Combust Flame*. 1972;
71. Linnett JW. Methods of measuring burning velocities. *Symp Combust*. 1953;
72. Dirrenberger P, Le Gall H, Bounaceur R, Glaude PA, Battin-Leclerc F. Measurements of laminar burning velocities above atmospheric pressure using the heat flux method-application to the case of n- pentane. *Energy and Fuels*. 2015;
73. Goswami M, Derks SCR, Coumans K, Slikker WJ, de Andrade Oliveira MH, Bastiaans RJM, et al. The effect of elevated pressures on the laminar burning velocity of methane+air mixtures. *Combust Flame*. 2013;
74. Akram M, Saxena P, Kumar S. Laminar burning velocity of methane-air mixtures at elevated temperatures. *Energy and Fuels*. 2013;
75. Liu Z, Kim N II. An assembled annular stepwise diverging tube for the measurement of laminar burning velocity and quenching distance. *Combust Flame*. 2014;
76. Tseng LK, Ismail MA, Faeth GM. Laminar burning velocities

Bibliografia

- and Markstein numbers of hydrocarbon air flames. *Combust Flame*. 1993;
77. Aung KT, Tseng LK, Ismail MA, Faeth GM. Response to comment by S.C. Taylor and D.B. Smith on “laminar burning velocities and Markstein numbers of hydrocarbon/air flames.” *Combust Flame*. 1995;
78. Ouimette P, Seers P. Numerical comparison of premixed laminar flame velocity of methane and wood syngas. *Fuel*. 2009;
79. Mitu M, Giurcan V, Razus D, Oancea D. Inert gas influence on the laminar burning velocity of methane-air mixtures. *J Hazard Mater*. 2017;
80. Cho SJ, Takita K. Numerical study of premixed twin edge flames in a counterflow field. *Combust Flame*. 2006;
81. Vagelopoulos CM, Egolfopoulos FN, Law CK. Further considerations on the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin-flame technique. *Symp Combust*. 1994;
82. Aggarwal S. Effects of Stretch and Preferential Diffusion in Laminar Syngas Premixed Flames. *J Energy Eng*. 2017;

83. Seshadri K, Williams FA. Laminar flow between parallel plates with injection of a reactant at high reynolds number. *Int J Heat Mass Transf.* 1978;
84. Belhi M, Lee BJ, Bisetti F, Im HG. A computational study of the effects of DC electric fields on non-premixed counterflow methane-air flames. *J Phys D Appl Phys.* 2017;
85. Tomidokoro T, Yokomori T, Im HG, Ueda T. Characteristics of counterflow premixed flames with low frequency composition fluctuations. *Combust Flame* [Internet]. 2020;212:13–24. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.10.004>
86. Chen Z, Qin X, Ju Y, Zhao Z, Chaos M, Dryer FL. High temperature ignition and combustion enhancement by dimethyl ether addition to methane-air mixtures. *Proc Combust Inst.* 2007;
87. Davis SG, Quinard J, Searby G. Markstein numbers in counterflow, methane- and propane- air flames: A computational study. *Combust Flame.* 2002;
88. Dong Y, Vagelopoulos CM, Spedding GR, Egolfopoulos FN. Measurement of laminar flame speeds through digital particle

Bibliografia

- image velocimetry: Mixtures of methane and ethane with hydrogen, oxygen, nitrogen, and helium. Proc Combust Inst. 2002;
89. Gu XJ, Haq MZ, Lawes M, Woolley R. Laminar burning velocity and Markstein lengths of methane-air mixtures. Combust Flame. 2000;
90. Halter F, Tahtouh T, Mounaïm-Rousselle C. Nonlinear effects of stretch on the flame front propagation. Combust Flame. 2010;
91. Hu E, Li X, Meng X, Chen Y, Cheng Y, Xie Y, et al. Laminar flame speeds and ignition delay times of methane-air mixtures at elevated temperatures and pressures. Fuel. 2015;
92. Liao SY, Jiang DM, Cheng Q. Determination of laminar burning velocities for natural gas. Fuel. 2004;
93. Lowry W, De Vries J, Krejci M, Petersen E, Serinyel Z, Metcalfe W, et al. Laminar flame speed measurements and modeling of pure alkanes and alkane blends at elevated pressures. J Eng Gas Turbines Power. 2011;
94. Park O, Veloo PS, Liu N, Egolfopoulos FN. Combustion characteristics of alternative gaseous fuels. Proc Combust Inst.

- 2011;
95. Qin X, Ju Y. Measurements of burning velocities of dimethyl ether and air premixed flames at elevated pressures. *Proc Combust Inst.* 2005;
96. Wang S, Wang Z, He Y, Han X, Sun Z, Zhu Y, et al. Laminar burning velocities of CH₄/O₂/N₂ and oxygen-enriched CH₄/O₂/CO₂ flames at elevated pressures measured using the heat flux method. *Fuel.* 2020;
97. Yan B, Wu Y, Liu C, Yu JF, Li B, Li ZS, et al. Experimental and modeling study of laminar burning velocity of biomass derived gases/air mixtures. *Int J Hydrogen Energy.* 2011;
98. Vagelopoulos CM, Egolfopoulos FN. Direct experimental determination of laminar flame speeds. In: *Symposium (International) on Combustion.* 1998.

RINGRAZIAMENTI

Senz'altro questa è la parte del lavoro più gratificante, per me e spero anche per chi riceverà da parte mia la riconoscenza per l'aiuto che ho ritenuto fondamentale per raggiungere questo obiettivo.

Ringrazio il Professore Salzano, per avermi concesso un lavoro così interessante e per la sua disponibilità in qualsiasi momento. Il Dott. Pio, per l'aiuto fondamentale nella riuscita del presente lavoro sotto tutti gli aspetti.

Entrambi vorrei ringraziarli ancora per il loro elevato spessore professionale ed umano.

Grazie a tutti i Professori del corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Chimica e di Processo dell'Università di Bologna ed ai miei colleghi, Ale, Carolina, Claudio,

Diego, Eugenio, Giusy, Matteo e Tina.
L'aiuto necessario, sicuramente, non è stato solo tecnico.
Ho avuto bisogno di sostegno e quale maggiore forza avrei potuto ricevere, se non quella di due pilastri fondamentali come i miei genitori, Enzo e Pina, grandi esempi di vita.
Grazie per il vostro incondizionato amore e per aver creduto sempre in me e nelle mie capacità, anche quando io stesso avevo rinunciato a credere.
Grazie all'unico vero amore della mia vita, la mia fidanzata Giada, per essermi stata vicina sempre, nonostante tutte le difficoltà, dal primo giorno in cui ci siamo incontrati.
Grazie alla mia famiglia, ai miei cari nonni scomparsi da tempo, Francesco, Maria e Stefano. Grazie a mia zia Rina che non c'è più, a mia nonna Lucia, a mia zia Diana, a mia zia e madrina Maria che sono state sempre amorevoli come delle mamme. Grazie a mio zio Sarino. Ai miei cugini

Francesco, Giuseppe e Maria, che sono i fratelli che non ho avuto.

Ringrazio il Signor Leone, mio suocero, grand'uomo e gran signore, e la sua famiglia, per avermi accolto con amore e per la fiducia che mi hanno concesso.

Grazie alla mia adorata figlioccia Cloé, per essere venuta al mondo tre anni fa.

Grazie ai veri amici, quelli che reputo fraterni, come Alessandro Paino, per essermi stato vicino sempre, soprattutto nei momenti più difficili, Alfio, Ciccetto, Dalila e Diego, Emanuele (padre di Cloé e fratello che non ho mai avuto), Francesca e Giovanni, Marco, Nicolò e a tutti gli amici e conoscenti della mia amata Milazzo.

Grazie ai miei vicini di casa a Parma, Giuseppe e Marianna, che sono diventati come una famiglia per noi. I vicini di casa a Milazzo, Maria Galletta e Nuccia.

Grazie a Cinzia, per essere stata amica e punto di riferimento per i miei genitori a Parma. Infine voglio ringraziare Dio, per avermi donato la vita, soprattutto una vita serena, per aver vegliato sempre su di me con il suo immenso amore ed aver ricondotto i miei passi sulla via che oggi mi ha portato fin qui.

Grazie a tutti di vero cuore.

Stefano.