



ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

DIN – Dipartimento di Ingegneria Industriale

**CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN INGEGNERIA
MECCANICA**
Curriculum macchine a fluido

TESI DI LAUREA MAGISTRALE
in
ADVANCED COMBUSTION SYSTEMS

**Simulazione CFD di un getto sottoespanso
attraverso la metodologia del
Notional Nozzle**

RELATORE:

Chiar.mo Prof. Ing. Gian Marco Bianchi

CANDIDATO:

Valentina Frisoni

CORRELATORI:

Ill.ma Prof. Ing. Stefania Falfani

Prof. Ing. Giulio Cazzoli

Anno accademico 2023/2024

Sessione III

Sommario

Questa tesi tratta l'applicazione e lo studio di metodologie per la simulazione di getti gassosi sottoespansi di idrogeno in aria. Questo bisogno deriva dal fatto nel mondo del trasporto su ruota si è posta molta attenzione sull'abbattimento dei principali inquinanti prodotti dalla combustione dei carburanti tradizionali nei motori a combustione interna. Tra le soluzioni proposte c'è quella di usare l'idrogeno come combustibile gassoso, in quanto offre una combustione priva di emissioni di anidride carbonica. Uno dei principali problemi però dell'utilizzo di idrogeno nel mondo dei trasporti è il fatto che quest'ultimo, sotto forma di gas, risulta particolarmente complesso da stoccare e trasportare. La prima parte di questo studio si concentra nell'analisi degli studi presenti in letteratura sull'argomento per comprendere il fenomeno fisico alla base dei getti sottoespansi. Successivamente viene esposta la metodologia utilizzata in questo studio per la loro analisi numerica CFD eseguita tramite il software commerciale AVL FireM.

Indice

Sommario	i
Introduzione	1
Capitolo 1	
Utilizzo e stoccaggio di idrogeno	7
1.1 Stato dell'arte	7
1.2 Processi termodinamici	10
1.3 Hydrogen ICE	14
Capitolo 2	
Getti sottoespansi	19
2.1 Mach	19
2.2 Caratteristiche	21
2.3 Struttura	25
2.4 Gradi di sottoespansione	27
2.4.1 Sottoespansione contenuta	27
2.4.2 Getto moderatamente sottoespanso	27
2.4.3 Getto fortemente sottoespanso	28
2.4.4 Getto estremamente sottoespanso	30
2.5 Disco di Mach	31
2.6 Miscelamento getto	35
Capitolo 3	
Notional nozzle	41
3.1 Definizione del concetto di "Notional nozzle"	41

3.2	Birch 1984	43
3.3	Birch 1987	45
3.4	Ewan	46
3.5	Schefer	46
3.6	Harstad	48
3.7	Confronto	49
3.7.1	Modelli di turbolenza	49
3.7.2	Confronto tra approcci "notional nozzle" per la simulazione di un getto libero sottoespanso	50
 Capitolo 4		
	Comportamento del getto a valle: impatto con ostacolo verticale	65
4.1	Impatto con ostacolo verticale	65
4.2	Two-layer partitioning model	67
4.2.1	Portata in massa attraverso il diametro fittizio	68
4.2.2	Condizioni nella slip region	71
4.3	Modello Birch1987	72
4.4	Setup simulazione numerica	73
4.5	Risultati	75
4.6	Implementazione modello in Python	76
 Capitolo 5		
	Simulazione getto subsonico	79
5.1	Geometria	79
5.2	Griglia	81
5.3	Setup simulazione	83
5.3.1	Durata simulazione e time-step	83
5.3.2	Materiale	84
5.3.3	Condizioni al contorno e condizioni iniziali	85
5.3.4	Impostazioni calcolo numerico	88
5.4	Confronto risultati	92
5.4.1	Pressione	92

5.4.2	Velocità	93
5.4.3	Numero di Mach	94
5.4.4	Temperatura	95
5.4.5	Densità	96
5.4.6	Frazione in massa	97
Capitolo 6		
Simulazione condizioni soniche		105
6.1	Setup	105
6.2	Risultati	108
Conclusioni		113

Elenco delle figure

1	Tabella caratteristiche idrogeno	3
1.1	Caratteristiche idrogeno	8
1.2	Riscaldamento isocoro	11
1.3	Curve isoentalpiche	13
2.1	Schema ugello	21
2.2	Rapporto critico	23
2.3	Andamento pressione	24
2.4	Struttura getto sottoespanso	25
2.5	Andamento velocità lung il raggio	26
2.6	Getto moderatamente sottoespanso	27
2.7	Getto fortemente sottoespanso	29
2.8	Getto estremamente sottoespanso	30
2.9	Disco di Mach	31
2.10	Dimensioni disco di Mach	32
2.11	Andamento dimensioni caratteristiche del disco in funzione del rap- porto critico	33
2.12	Diametro disco in funzione del foro di uscita	35
2.13	Miscelamento getto	37
2.14	Vortici di Goertler	38
2.15	Shock a botte	39
3.1	Schema ugello	42
3.2	Parametri sperimentali	50
3.3	Schema coordinate getto	52

3.4	Caratteristiche uscita getto	53
3.5	HD35-37: MG e VG relativi alla velocità	55
3.6	HD35-37: velocità e concentrazione idrogeno lungo asse	56
3.7	HD35-37: MG e VG per frazione in massa di idrogeno	57
3.8	HD35-37: MG e VG per velocità e frazione in massa	58
3.9	HD00-02: MG e VG relativi alla velocità	59
3.10	HD00-02: MG e VG relativi alla concentrazione in massa	60
3.11	HD00-02: valori di velocità e frazione in massa	60
3.12	HD00-02: MG e VG relativi alla velocità e frazione in massa	61
3.13	HD22-24: MG e VG relativi a velocità e concentrazione in massa	61
3.14	HD22-24: velocità e concentrazione in massa	62
3.15	Condizioni sul notional nozzle	64
4.1	Schema two-layer partitioning	67
4.2	Griglie prese come riferimento nei due modelli	74
4.3	Valori ricavati come condizioni al contorno	75
4.4	Frazione in massa lungo parete	76
5.1	Geometria dominio	80
5.2	Sezione griglia	81
5.3	Sezione griglia	82
5.4	Confronto pressioni	92
5.5	Confronto velocità	93
5.6	Confronto numero di Mach	94
5.7	Confronto temperatura	96
5.8	Confronto densità	97
5.9	Confronto frazione in massa	98
5.10	Mass fraction a $t=0.006s$	100
5.11	Indice di infiammabilità a $t=0.006s$	101
5.12	Temperatura a $t=0.006s$	102
5.13	Mass fraction a $t=0.006s$	102
5.14	Indice di infiammabilità a $t=0.006s$	103

6.1	Pressione totale a $t=0.000125s$	108
6.2	Velocità e temperatura a $t=0.000125s$	109
6.3	Densità e Mach a $t=0.000125s$	110
6.4	Frazione in massa a $t=0.000125s$	110

Elenco delle tabelle

1	Tabella riassuntiva frazioni in massa.	86
2	Tabella riassuntiva dei valori di energia cinetica turbolenta(k) e tasso di dissipazione(ϵ).	87
3	Tabella riassuntiva dei valori delle condizioni iniziali per entrambi i casi.	87
4	Tabella riassuntiva dei valori di setup per entrambi i casi.	88
5	Tabella riassuntiva dei valori dei fattori di sottorilassamento.	89
6	Tabella riassuntiva dei setup dello schema di calcolo e dei blending factors.	90
7	Tabella riassuntiva dei setup.	91
8	Tabella rampa time-step.	105
9	Tabella setup schemi di calcolo.	107
10	Tabella setup linear solver setting.	107

Introduzione

Negli ultimi anni, la crescente consapevolezza della società riguardo ai cambiamenti climatici e all'inquinamento atmosferico ha spinto la comunità scientifica e industriale a esplorare soluzioni sostenibili per il futuro della mobilità. I motori termici, tradizionalmente alimentati da combustibili fossili, sono stati al centro di questa discussione, poiché contribuiscono in modo significativo alle emissioni di gas serra, le quali portano ad un innalzamento della temperatura media globale, e all'inquinamento atmosferico, dovuto alla produzione di sostanze che risultano dannose sia per l'uomo che per l'ambiente.

I principali inquinanti derivanti dal mondo automotive sono di diversa natura, tuttavia quello di cui si ha una maggiore produzione risulta la CO_2 dovuta alla combustione di carburanti fossili come benzina o diesel all'interno di motori definiti ICE (Internal Combustion Engine). Durante la combustione vengono prodotti anche inquinanti atmosferici quali: particolato, formatosi da una incompleta combustione, ossidi di azoto (NO_x) che si formano soprattutto nei motori diesel a causa delle elevate temperature in camera di combustione, e monossido di carbonio (CO) che è dovuto ad una incompleta combustione del combustibile. Questi fattori vanno a contribuire in modo importante sull'inquinamento atmosferico, contribuendo allo sviluppo di malattie al sistema respiratorio e cardiovascolare dell'essere umano.

In questi anni per cercare di limitare le emissioni sono state emanate varie leggi, ad esempio entro il 2050 l'Unione Europea si è prefissata di raggiungere l'obiettivo della neutralità rispetto alle emissioni di CO_2 . Per poter raggiungere tale obiettivo nel settore automotive, sono state avanzate diverse proposte di mobilità sostenibile.

Tra le proposte vi sono i veicoli elettrici (BEV) alimentati con energia elettrica rinnovabile, i veicoli a fuel cell alimentati a idrogeno (FCEV) e i veicoli ibridi (PHEV e HEV). Vi è inoltre lo sviluppo di una serie di motori a combustione che utilizzano carburanti di nuova generazione che non provengono da fonte fossile, come i biofuels, provenienti da scarti agricoli, e gli e-fuels, derivanti dalla raccolta di CO_2 e dalla produzione di idrogeno. Tra queste nuove tipologie di carburanti vi è anche l'idrogeno. Per quanto riguarda biofuels ed e-fuels si ha un bilancio nullo di produzione di CO_2 , ciò significa che la CO_2 che viene prodotta durante il ciclo produttivo dei carburanti è pari a quella che viene utilizzata per produrli. Tuttavia, si ha comunque la produzione di altre tipologie di inquinanti come particolato, ossidi di azoto (NOX), idrocarburi incombusti (UHC) e monossido di carbonio (CO), tutti altamente nocivi per l'essere umano e per l'ambiente.

Uno dei vantaggi dell'idrogeno è che non avendo atomi di carbonio, una volta bruciato in camera di combustione non produce per sua natura gli inquinanti come CO, UHC e particolato, né tantomeno CO_2 . Ciò nonostante, però si hanno come prodotti della combustione vapore acqueo ed NOX, questi ultimi dovuti alla presenza di azoto e di ossigeno nell'aria e alle alte temperature raggiunte durante la combustione. Anche se l'utilizzo di tale gas non è del tutto esente dalla produzione di inquinanti risulta comunque interessante studiarne il comportamento in ambito automotive, in particolar modo se l'idrogeno viene prodotto tramite elettrolisi oppure a partire da energia elettrica proveniente da fonti rinnovabili. In tal caso il gas, oltre ad essere un prodotto di origine completamente biologica, potrà fungere da "energy carrier" ed andare quindi a stoccare l'energia elettrica prodotta in eccesso.

Di seguito, in figura 1, vengono riportate in tabella le principali caratteristiche fisiche dell'idrogeno messe a confronto con quelle di benzina e gas naturale.

Come si può notare l'idrogeno offre un potere calorifico, LHV, per unità di massa molto elevato, ma se si considera il contenuto energetico per unità di volume tale gas non risulta molto conveniente, ciò è dato dal fatto che a parità di condizioni di pressione e temperatura la densità dell'idrogeno è molto inferiore rispetto a quella degli altri combustibili. Di conseguenza risulta quindi necessario andare a stoccare il gas ad elevate pressioni per poter compensare la quantità di energia.

PROPRIETÀ	Idrogeno	Benzina	Gas naturale
Contenuto in carbonio (% in massa)	0	84	75
Peso molecolare (kg/kmol)	2.016	114	16
Diffusività (cm ² /s)	0.61	0.05	0.189
Densità (kg/m ³) @ 273.15 K, 1 bar	0.089	720-780	0.717
LHV (MJ/kg)	119.6	42.7	52.5
LHV (MJ/m ³) @ 273.15 K, 1 bar	10.2	33 · 10 ³	35
AFR stechiometrico	34.3	14.6	17.2
Limiti di infiammabilità (Φ (-))	0.1 – 7.1	0.7 – 1.5	0.4 – 1.6
Energia minima di accensione (mJ) @ 1 bar, $\lambda = 1$	0.017	0.2 – 0.3	0.2
Velocità fiamma laminare (m/s) @ 298.15 K, 1 bar, $\lambda = 1$	1.9	0.37 – 0.43	0.38
Temperatura di autoaccensione (K)	850	501 – 744	813
Temperatura adiabatica di fiamma (K)	2527	2411	2236
Distanza di spegnimento (mm) @ 298.15 K, 1 bar	0.64	2	2.03

Figura 1: Caratteristiche H_2

Per riuscire ad implementare tecnologie ad idrogeno è necessario far fronte a vari problemi di stoccaggio dati dal fatto che per rendere competitivo sul mercato l'utilizzo di veicoli ad idrogeno è necessario comprimere il gas in serbatoi ad elevate pressioni, i quali non sono, tecnologicamente parlando, semplici da realizzare. Una soluzione alternativa alla compressione è la liquefazione del gas per agevolarne il trasporto e lo stoccaggio, ma anche la liquefazione dell'idrogeno rappresenta una sfida complessa, sia dal punto di vista tecnico della realizzazione dei serbatoi, per il fattore economico, che per il fattore energetico, in quanto per poter raffreddare e comprimere l'idrogeno per poter essere stoccato ed utilizzato è richiesta una elevata quantità di energia.

Oltre a queste difficoltà di gestione di tale gas si deve tener conto del fatto che cambiando la tipologia di combustibile si dovranno apportare modifiche sul progetto del motore, andandone quindi a studiare nuovi aspetti costruttivi del e nuove metodologie per il controllo e la dinamica della combustione. Infatti, durante la fase di costruzione bisogna tener conto del fatto che l'idrogeno ha una lubrificazione praticamente nulla e quindi si tenderà ad avere più attenzione sul tipo di metalli utilizzati per la costruzione per evitare un eccessivo infragilimento dei componenti. Altra caratteristica dell'idrogeno è quella di essere molto volatile e quindi può dare

problemi nelle sedi delle valvole e nel pistone.

Dalla tabella mostrata in figura 1 si possono notare che il gas è caratterizzato da un'ampia finestra di infiammabilità ed una bassa energia di accensione che rendono possibile una combustione anche molto magra, con $\lambda \approx 2$. Questo permette di avere una minore temperatura in camera di combustione che porta ad avere una minor produzione di NOX e ad una maggiore efficienza complessiva, ma allo stesso tempo richiede una maggior attenzione nel controllo e nella gestione delle temperature in camera di combustione per ridurre il rischio di accensione anticipata o posticipata. L'elevata velocità laminare di fiamma e la relativamente alta temperatura di autoaccensione dovrebbero ridurre la tendenza alla detonazione (knock), mentre l'elevata temperatura adiabatica di fiamma va a incrementare gli stress termici subiti dal motore.

Lo sviluppo di elevate temperature rende necessari nuovi sistemi di raffreddamento attorno alle sedi valvole di scarico e la scelta di candele "cold rated" per mitigare la presenza di punti caldi in camera di combustione e ridurre il rischio di autoaccensione. La ridotta distanza di spegnimento favorisce il ritorno di fiamma, che porta alla preferibile sostituzione dei tradizionali sistemi PFI (Port Fuel Injection) per l'iniezione di gas naturale in favore di sistemi DI (Direct Injection) in camera di combustione, che offrono anche una migliore efficienza volumetrica e favoriscono l'abbassamento delle temperature in camera di combustione. I sistemi DI, avendo meno tempo a disposizione per completare l'iniezione, necessitano di pressioni di iniezione elevate dell'ordine di 100 bar, per garantire una adeguata portata in massa di idrogeno. L'ampio salto di pressione tra l'iniettore e la camera di combustione comporta la formazione di un getto che risulta fortemente sottoespanso, da cui deriva la necessità di osservare attentamente il comportamento di tali getti, per poter valutare correttamente il miscelamento dell'idrogeno gassoso all'interno della camera di combustione, al fine di garantire le corrette condizioni di accendibilità.

Per aumentare la sicurezza in caso di perdite di idrogeno si cerca di promuovere la dispersione e la diluizione di idrogeno altamente reattivo, per tale motivo è importante studiare il comportamento del gas che fuoriesce da una perdita da un serbatoio ad alta pressione.

Come si vedrà nei prossimi capitoli più nel dettaglio l'idrogeno è estremamente leggero e per questo risulta inevitabile che una certa percentuale di gas venga disperso, in aggiunta è anche uno dei gas più reattivi poiché possiede una bassa energia di accensione.

Sono proprio queste due caratteristiche a rendere una sfida l'utilizzo di idrogeno in campo automotive poiché non garantiscono un sufficiente livello di sicurezza, tale problema viene poi riscontrato anche nelle stazioni di servizio per rifornimento dei serbatoi.

Data la sua bassa densità e la bassa energia contenuta in unità di volume, nei veicoli ad idrogeno il gas viene stoccato in serbatoi a 70Mpa, mentre nelle stazioni di rifornimento ha una pressione di circa 35Mpa, questo salto di pressione per ragioni di sicurezza richiede di realizzare pareti protettive attorno al serbatoio per evitare le perdite di gas e ridurre il campo di infiammabilità.

Per quanto riguarda i possibili sviluppi futuri dell'utilizzo di idrogeno in campo automotive i veicoli a celle a combustibile a idrogeno, detti anche FCEV, generando energia elettrica da reazioni indotte tra idrogeno e ossigeno rappresentano una valida alternativa ai veicoli a batteria, fornendo inoltre una maggiore autonomia di guida. Oltre ad i vantaggi già elencati che tale gas porterebbe tuttavia vi sono degli aspetti che rappresentano una sfida per il futuro sviluppo di tecnologie ad idrogeno. Tra le sfide tecnologiche vi è la produzione del così detto "idrogeno verde" che viene prodotto per elettrolisi di prodotti rinnovabili a differenza della maggior parte dell'idrogeno che viene prodotto da gas naturale o carbonio. Altri fattori sfidanti sono l'elevato costo di produzione, stoccaggio e trasporto del gas ed il limitato numero infrastrutture adibite al rifornimento del gas, tali aspetti contribuiscono a rendere meno efficiente l'utilizzo e quindi lo sviluppo di tecnologie ad idrogeno.

Per rendere quindi vantaggioso l'utilizzo di idrogeno in futuro sarà necessario espandere la rete di stazioni di rifornimento, andare a ridurre quelli che sono i costi per la produzione di idrogeno verde e per ciò che è necessario per il suo stoccaggio e trasporto, utilizzare l'idrogeno come mezzo per stoccare energia in eccesso provenienti da fonti rinnovabili non programmabili e promuovere incentivi come il Green Deal che promuovono la diffusione dell'idrogeno.

L'obiettivo di questo elaborato è quello di simulare, tramite una analisi CFD, un getto di idrogeno fortemente sottoespanso al fine di comprenderne l'andamento di frazione in massa e velocità nell'ambiente a valle, lontano dal foro. Al fine di rendere più leggero, in termini di tempo computazionale, tale studio si è utilizzato un approccio definito come "notional nozzle", il quale verrà analizzato all'interno di questo elaborato. Al fine di facilitare la lettura del testo verranno di seguito riportati gli argomenti trattati per ogni capitolo.

Nel primo capitolo vengono descritte le principali caratteristiche del gas preso in analisi, concentrandosi su come queste influenzino il comportamento del gas in relazione a differenti processi termodinamici. Viene fatto poi un accenno sull'utilizzo dell'idrogeno nei motori a combustione interna, andando ad evidenziarne vantaggi e criticità.

Nel secondo capitolo viene presentato uno studio relativo ai getti sottoespansi, analizzandone la struttura, i livelli di sottoespansione in funzione della pressione nel serbatoio ed infine il miscelamento.

Nel terzo capitolo viene descritto il concetto di notional nozzle, andando ad analizzare le diverse variazioni nel corso del tempo. Infine si realizza un confronto per valutare quale sia la migliore, ovvero quella che approssima meglio la situazione sperimentale.

Nel capitolo quattro è riportato uno studio realizzato su come simulare ed analizzare un getto che impatta un ostacolo verticale, come può essere una parete.

Nel quinto capitolo vengono descritti i passaggi realizzati per la generazione della geometria e della griglia realizzate, per poi passare ai setup utilizzati per ed ai risultati ottenuti con una differenza di pressione di 0.32bar.

Nel capitolo sei vengono infine descritti setup e risultati considerando una pressione a monte di 1.9bar che rappresenta le condizioni soniche.

Capitolo 1

Utilizzo e stoccaggio di idrogeno

1.1 Stato dell'arte

Per rendere competitivo nel mercato l'utilizzo di tecnologie ad idrogeno deve esserci una convenienza anche nella produzione di tale gas. Le due modalità principali con cui viene prodotto sono steam-reforming ed elettrolisi. Lo steam-reforming è il modo più comune di produrre idrogeno e prevede la combustione parziale di un combustibile fossile, come ad esempio il gas naturale. Come prodotti di questa reazione parziale si ha la formazione di idrogeno ma anche di CO_2 , in tal modo si va quindi a perdere quelli che sono i benefici dell'utilizzo di idrogeno, ovvero la produzione nulla di diossido di carbonio. L'elettrolisi prevede di far fluire un flusso di corrente attraverso una cella galvanica, il passaggio di corrente permette di ossidare e ridurre acqua andando a produrre idrogeno e ossigeno. Il problema dell'elettrolisi è che per poter estrarre idrogeno dalle molecole di acqua è necessaria una grande quantità di energia ($39 - 48 kWh/kg_{H_2}$).

Per poter capire meglio le sfide ed i problemi legati all'utilizzo di idrogeno gassoso è necessario andare ad analizzarne le proprietà fisiche e chimiche per comprenderne il comportamento.

La prima cosa da sottolineare è che in fase gassosa l'idrogeno è completamente trasparente ed inodore e per tale motivo risulta difficile accorgersi di eventuali perdite di fluido.

Oltre ad essere invisibile all'occhio umano presenta anche una elevata diffusività che lo porta a diffondersi in aria molto velocemente andando ad aumentare il rischio di dispersione e perdita di gas negli impianti di stoccaggio e trasporto.

In tabella sono riportate le principali caratteristiche fisiche dell'idrogeno a confronto con quelle di benzina e gas naturale:

Properties	Hydrogen	Natural gas	Gasoline (Liquid)
Kinematic Viscosity @300 K [mm ² /s]	110	17.2	1.18
Thermal Conductivity @300 K [MW/mK]	182	34	11.2
Diffusion Coefficient [cm ² /s]	0.61	0.189	0.05
Molecular weight [kg/kmol]	2.016	16	114
Density (gas phase) @ 0°C and 760 mmHg [kg/m ³]	0.0899	0.717	5.11
Density (liquid) [kg/liter]	0.071	0.42	0.73
Octane Number	>130	>120	90-98
LHV (gas 0°C and 760 mmHg) [MJ/m ³]	10.22	33.95	216.38
LHV (gas 0°C and 760 mmHg) [MJ/kg]	119.6	53.0	42.7
Boiling Point [K]	20.3	111.6	310-478
Stoichiometric ratio [kg/kg _{comb}]	34.32	17.2	14.6

Properties	Hydrogen	Natural gas	Gasoline
Flammability Limits (ϕ)	0.1-7.1	0.4-1.6	0.7-1.5
Minimum Ignition Energy [mJ]	0.017	0.30	0.2-0.3
Laminar Flame Speed [m/s]	1.90	0.38	0.37-0.43
Adiabatic Temperature [K]	2527	2236	2411
Auto-Ignition Temperature [K]	848-853	813	501-744
Quenching Distance [mm]	0.64	2.03	2.0
Energy per unit mass of mixture [MJ/kg _{mixture}]	3.37	2.56	2.79

Figura 1.1: Caratteristiche idrogeno.

Come si può notare l'idrogeno offre un potere calorifico, LHV, per unità di massa molto elevato rispetto agli altri due combustibili, ma se si considera il contenuto energetico per unità di volume l'idrogeno non risulta molto conveniente, ciò è dato dal fatto che a parità di condizioni di pressione e temperatura la densità dell'idrogeno è molto inferiore rispetto a quella di benzina e gas naturale. Di conseguenza risulta quindi necessario andare a stoccare tale gas ad elevate pressioni oppure addirittura liquefarlo per poter compensare la quantità di energia in grado di fornire. Sono tipicamente richieste infatti pressioni tra i 350-700 bar e temperature estremamente basse, circa 20 K, per poter garantire una densità energetica soddisfacente.

Si comprime l'idrogeno a 700 bar per poterlo stoccare nei serbatoi che vanno montati sulla vettura, mentre a 350 bar si comprime il gas per i serbatoi delle stazioni di rifornimento. Il salto di pressione che si va a creare tra i serbatoi nel momento del rifornimento, per ragioni di sicurezza, richiede di realizzare pareti protettive per evitare le perdite di gas e ridurre il campo di infiammabilità.

L'idrogeno è un materiale estremamente leggero, circa 14 volte più leggero dell'aria, e per questo risulta inevitabile che una certa percentuale di gas venga disperso a causa di perdite. In aggiunta è anche uno dei gas più reattivi con una energia di accensione pari a $0.02mJ$, questa caratteristica permette di andare ad innescare facilmente anche miscele magre ma allo stesso tempo vi è una maggior possibilità di avere preaccensione. Sono proprio queste due caratteristiche a rendere una sfida l'utilizzo di idrogeno in campo automotive poiché non garantiscono un sufficiente livello di sicurezza per poter essere utilizzato senza recare danni.

Sicurezza che non viene garantita neanche dalla ampia finestra di infiammabilità del gas che viene riportata in tabella; la quale, insieme ad una temperatura di autoaccensione di 500-580 °C (più bassa di quella di molti combustibili fossili), rende molto semplice l'accensione di fiamme. L'ampia finestra di infiammabilità, tuttavia, presenta anche dei vantaggi, tra cui la possibilità di far funzionare il motore anche con miscele molto magre, cala la produzione di NOX ed aumenta l'efficienza della combustione. Con una più bassa temperatura di autoaccensione invece si può avere un maggior rapporto tra le pressioni di uscita ed ingresso così da avere migliori prestazioni e maggior potenza sviluppabile.

Un'ulteriore caratteristica che non ne favorisce lo stoccaggio è la temperatura di liquefazione estremamente bassa (-253°C) che permette di aumentare la densità volumetrica del gas ma allo stesso tempo per mantenere l'idrogeno in tali condizioni di temperatura è necessaria una sostanziale quantità di energia.

Vi è una ulteriore caratteristica da tenere in considerazione nell'analisi del comportamento dell'idrogeno, ovvero la comprimibilità. Tale caratteristica influenza in modo significativo le proprietà del gas, ma questo aspetto verrà analizzato più nel dettaglio nel capitolo seguente.

1.2 Comportamento del gas in relazione a processi termodinamici

Uno dei principali problemi legati all'idrogeno riguarda le sue proprietà termodinamiche, che possono subire significative variazioni durante processi come lo stoccaggio e l'utilizzo. Queste variazioni, come ad esempio un incremento di temperatura, possono innescare l'accensione del gas, portando alla formazione di una fiamma. L'elevata infiammabilità dell'idrogeno può generare diversi scenari di rischio. Ad esempio, in un veicolo alimentato a idrogeno, un aumento della temperatura del serbatoio potrebbe favorire l'innescò e la propagazione di una fiamma, con il potenziale di incendiare l'intero veicolo e causare danni sia agli occupanti sia all'ambiente circostante.

I processi termodinamici di particolare interesse nell'analisi dell'idrogeno includono il riscaldamento isocoro, l'espansione isoentalpica e l'espansione isoentropica. La densità dell'idrogeno riveste un ruolo cruciale, poiché i processi termodinamici cui il gas è sottoposto dipendono significativamente dalla sua densità al momento del riempimento del serbatoio. Dal punto di vista della sicurezza, un sistema a idrogeno esposto a un riscaldamento esterno o a un preriscaldamento prima di un'espansione isoentalpica presenta un aumento del rischio di incendio, in particolare se la temperatura raggiunta dal gas si avvicina alla sua temperatura di autoaccensione. Tale incremento termico può derivare anche da un aumento della pressione del gas, contribuendo ulteriormente al rischio di accensione spontanea.

Riscaldamento isocoro

Per lo studio del riscaldamento isocoro si analizza un sistema in cui viene compresso idrogeno gassoso dentro ad un contenitore, all'interno del quale il gas subirà un aumento di temperatura. Vengono analizzate diverse situazioni fisiche andando a mantenere una temperatura pari a 295K e variando la densità di riempimento (ρf) dell'idrogeno, fattore che viene definito dal rapporto tra la massa di idrogeno nel serbatoio ed il volume di quest'ultimo.

Nella analisi si considera un riscaldamento a densità costante di un serbatoio contenente idrogeno montato in un veicolo che possiede una fuel cell (HFCV), serbatoio realizzato in alluminio e rinforzato in fibra di carbonio in cui è presente un sistema di sicurezza (TPRD) per il rilascio di gas in modo da evitare eccessivo incremento di pressione. Nel caso in cui il TPRD dovesse avere dei malfunzionamenti può verificarsi distruzione del serbatoio dato da un estremo incremento di pressione. Del sistema di sicurezza citato ne esistono due tipologie che si differenziano per il tipo di set-point che lo fa attivare; infatti, è possibile determinare un limite sia in termini di pressione che di temperatura sopra al quale viene attivato.

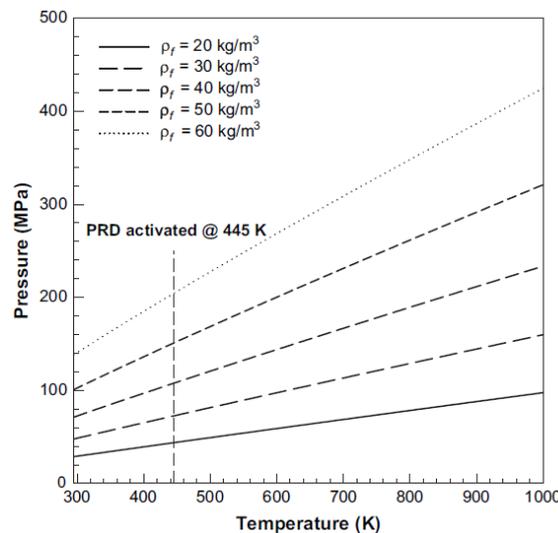


Figura 1.2: Riscaldamento isocoro a differenti densità iniziali.

In figura 1.2 è possibile vedere come varia la pressione interna dopo un riscaldamento a densità costante fino a 445K, tali limiti di temperatura e pressione sono considerati per determinare i set point di attivazione dei TPRD in un HFCV. Genericamente l'idrogeno in forma gassosa compresso in un serbatoio ha una densità variabile in un range tra 20 e 40 Kg/m^3 ad una temperatura di 295K e corrispondente ad un range di pressione tra i 29Mpa e 71Mpa. Sempre in figura si può notare come si ha un maggiore incremento di pressione durante il riscaldamento per gas che hanno una maggiore densità di riempimento. Se si considera un malfunzionamento del sistema in cui fallisce la attivazione termica del TPRD alla temperatura impostata, assumendo che l'integrità strutturale del serbatoio non sia compromessa dal fuoco,

la pressione all'interno continua ad aumentare data la propagazione delle fiamme che vi sono al suo interno.

Da una ulteriore analisi del grafico è possibile notare che, se la pressione di rottura del serbatoio è considerata con un fattore di sicurezza pari a 2.35, la pressione di rottura è raggiunta quando la temperatura all'interno del cilindro è pari a 800K (temperature superiori si raggiungono solo in presenza di combustione) per un intervallo di densità tra $20Kg/m^3$ e $60Kg/m^3$. Un ulteriore scenario potenzialmente pericoloso si ha quando il serbatoio è soggetto ad uno schianto, ovvero quando si ha una compressione del gas estremamente rapida, ciò comporta un notevole incremento della densità dell'idrogeno. Andando a riscaldare il gas a densità maggiore si avrà di conseguenza anche una maggiore pressione.

Un ulteriore aspetto da considerare è quello che per poter aumentare la distanza di guida tra un rifornimento e l'altro è necessario stoccare una maggior quantità di idrogeno nel serbatoio andando quindi a comprimere maggiormente il gas. Come alternativa per gas a bassa densità si può pensare di aumentare il volume del serbatoio per aumentare la massa di idrogeno stoccata senza compromettere l'integrità del serbatoio stesso causata dalle elevate pressioni. Tale opzione però non risulta pratica e funzionale per veicoli a piccola propulsione in cui lo spazio per il serbatoio è ridotto, allo stesso tempo progettare un serbatoio resistente alle più alte pressioni di un gas a maggiore densità è tecnologicamente complesso. Se invece si considerano secondari i problemi dati da volume e peso del serbatoio ed il posto in cui lo si colloca, una soluzione per incrementare la quantità di idrogeno è di realizzare un sistema di più serbatoi con una minore pressione di stoccaggio in modo da avere una densità minore rispetto ad un serbatoio ad alta pressione e quindi ridurre il rischio di incendio.

Espansione isoentalpica

Per quanto riguarda l'analisi di una espansione isoentalpica si può affermare che l'idrogeno espandendosi può subire un aumento di temperatura, aumentando così il rischio di autoaccensione, rischio che aumenta se il gas viene preriscaldato ad una temperatura vicino a quella critica.

Un gas che passa attraverso ad un foro, una valvola o qualsiasi cosa opponga resistenza allo scorrere del flusso è caratterizzato da un processo isoentalpico che si può definire come espansione di Joule-Thomson.

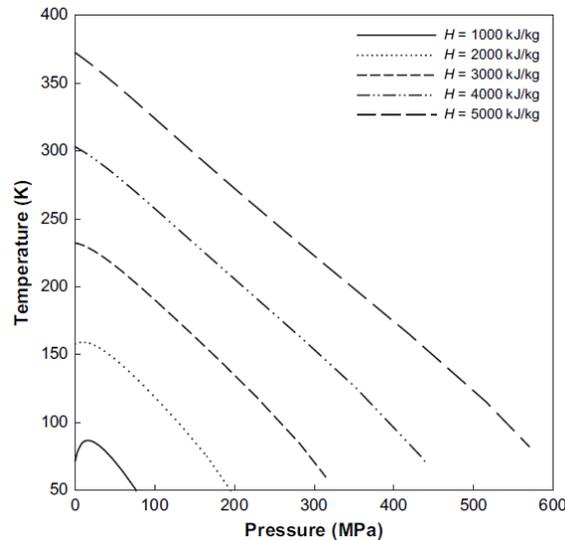


Figura 1.3: Curve isoentalpiche.

In figura 1.3 sono riportate in un diagramma P-T alcune linee isoentalpiche in cui la pendenza della linea (data dal rapporto $\delta T/\delta P$) è espressa dal coefficiente di Joule-Thomson. Coefficiente che è pari a zero per i gas ideali, mentre può essere maggiore, minore o uguale a 0 per l'idrogeno in funzione dello stato termodinamico in cui il gas si trova. Quanto $\delta T/\delta P > 0$ una riduzione di pressione data da un'espansione isoentalpica porta ad una diminuzione di temperatura e quindi raffreddamento del gas, se $\delta T/\delta P < 0$ una riduzione di pressione porta ad un incremento di temperatura e quindi riscaldamento del gas. Quest'ultima condizione non risulta ottimale, specialmente se la temperatura iniziale del gas è poco più bassa di quella di autoaccensione (per l'idrogeno pari a 858K) prima del processo isoentalpico. Quando si ha $\delta T/\delta P = 0$ si ha la curva di inversione Joule-Thompson. Per l'idrogeno ad alta pressione ($> 30MPa$) e temperatura ambiente, il coefficiente Joule-Thomson è negativo, causando un aumento della temperatura durante l'espansione.

Espansione isoentropica

Per semplificare il fenomeno fisico si può approssimare un rilascio rapido di idrogeno da un serbatoio come una espansione isoentropica. Questa tipologia di processo comporta una diminuzione di temperatura del gas che si espande, indipendentemente dalla densità di quest'ultimo. Tuttavia, vi è una correlazione tra densità e temperatura, infatti maggiore è la densità iniziale del gas minore risulterà la temperatura finale una volta terminata l'espansione. Tale fenomeno potrebbe dunque portare a fenomeni di raffreddamento eccessivo e non desiderato.

In conclusione, si può affermare che il comportamento termodinamico dell'idrogeno durante il suo stoccaggio o utilizzo è fortemente influenzato dalla densità dello stesso, infatti se il gas supera una certa temperatura di soglia da luogo alla formazione di incendi. Un malfunzionamento dei TPRD oppure uno schianto possono portare il gas alle condizioni critiche di pressione e temperatura, favorendo l'autoaccensione della fiamma. Per tale motivo risulta fondamentale valutare tali scenari che possono essere fonte di pericolo per poter diminuire il rischio di incendio.

1.3 Hydrogen ICE

L'idrogeno in ambito automotive viene utilizzato principalmente rimpiazzando i combustibili tradizionali nei motori a combustione interna oppure nei veicoli elettrici alimentati con la tecnologia delle fuel cells.

Entrambe le soluzioni presentano aspetti vantaggiosi e criticità, anche se tuttavia si hanno maggiori vantaggi nella modifica dei motori ICE.

I principali vantaggi dell'utilizzo del gas come combustibile, rispetto alla tecnologia delle fuel cells, sono:

- possibilità di utilizzare idrogeno meno puro, infatti nei FCs è richiesto un livello di purezza del gas $> 99.9\%$
- maggiore conoscenza e quindi maturità tecnologica
- minore costo, infatti per gli ICE si ha un costo dell'energia pari a $50\text{€}/\text{kW}$, mentre per una FCs sale fino a $3.000\text{€}/\text{kW}$

- le FC hanno una ancora limitata durata, in termine di anni, e reperibilità, devono infatti riuscire a garantire una vita equivalente alla percorrenza di $240.000km$ a qualsiasi condizione atmosferica, in un range quindi che va dai $-40C$ ai $40C$
- non è necessario un severo controllo delle temperature, come necessario invece per le FC
- gli svantaggi dell'utilizzo di idrogeno nei veicoli ICE sono legati principalmente sia alla produzione di particolato ed NOX che alla riduzione della "quenching distance", la quale comporta una diminuzione del rendimento isoentropico ed un aumento del rischio di ritorno di fiamma

Oltre alle caratteristiche chimiche e fisiche del gas precedentemente descritte che permettono di utilizzare miscele più magre ed avere meno produzione di inquinanti e rendimenti maggiori, se si utilizza idrogeno come combustibile si avrà anche una maggiore velocità laminare di fiamma che riduce il moto del "tumble" e quindi le perdite ad esso legate.

Uno dei più grandi vantaggi dell'utilizzo di idrogeno in sostituzione dei tradizionali combustibili è la produzione nulla di CO_2 ; tuttavia, non si ha una combustione priva di emissioni; infatti, l'olio necessario per una corretta lubrificazione, bruciando produce UHC (idrocarburi incombusti), CO e particolato. Come già detto la produzione di NOX è contenuta rispetto a quella della benzina dal momento che, quando si è in condizioni stechiometriche, la temperatura adiabatica di fiamma è più elevata. Vi è la possibilità di usare una miscela più magra e ridurre le temperature e la produzione di NOX.

Per quanto riguarda la potenza sviluppata come output, considerando un rapporto di aria e combustibile stechiometrico, un motore ad idrogeno è in grado di produrre il 15% in più o in meno di potenza rispetto ad un motore a benzina in base a come viene calcolata la quantità di idrogeno da iniettare. Solitamente per limitare la produzione di NOX questi motori sono disegnati con un punto di design avente $\lambda = 2$, in cui per bassi carichi la miscela sarà magra, mentre per carichi più elevati si

dovrà avere una iniezione anticipata poiché per avere una maggior potenza in uscita è necessario ridurre λ a 1.3/1.4.

Questa tipologia di propulsione, come si è visto, presenta tuttavia una serie di fattori a cui prestare attenzione. Vi sono inoltre una serie di modifiche da realizzare necessariamente come ad esempio:

- modifiche alla candela in modo da trasferire il calore nel minor tempo possibile per evitare il rischio di autoaccensione
- incrementare il controllo della temperatura nelle zone critiche (es. temperatura valvole di scarico, olio e gas di scarico)
- utilizzo di materiali differenti capaci di compensare l'incapacità del gas di autolubrificazione
- aumento ventilazione del carter per evitare ingresso di idrogeno
- riduzione dello spazio laterale tra cilindro e pistone per evitare propagazione fiamma tra i componenti
- realizzare cielo del pistone in materiali più resistenti poiché soggetto a carichi termici più elevati
- implementazione di sensori per rilevare perdite di idrogeno
- variazioni nella geometria per poter resistere a picchi di pressione più elevati

Nei veicoli a propulsione ad idrogeno, a differenza dei motori diesel o benzina, l'energia prodotta in output dipende fortemente dalla qualità della miscela; infatti, per un sistema di iniezione PFI (Port Fuel Injection) ho una produzione di energia massima di $2.98MJ/m^3$, mentre per un sistema DI (Direct Injection) si ha una energia sviluppabile di $4.23MJ/m^3$. Inoltre, la potenza generata con una direct injection di idrogeno è maggiore di quella generata con lo stesso sistema di iniezione con motori diesel o benzina.

Per quanto riguarda lo stoccaggio di idrogeno vi sono tre possibilità valide sia per gli H_2 ICE che per le fuel cells:

- 1 Stoccaggio dell'idrogeno sotto forma di gas in recipienti ad alta pressione
- 2 Stoccaggio di idrogeno liquido, metodo che richiede temperature criogeniche estremamente basse ed elevata energia
- 3 Stoccaggio di idrogeno mediante assorbimento sulla superficie o all'interno di materiali solidi

Quest'ultima rappresenta una soluzione promettente per immagazzinare grandi quantità di idrogeno in un volume ridotto, operando a pressioni e temperature prossime alle condizioni ambientali. Soluzione che offre inoltre una maggior sicurezza rispetto alle precedenti modalità di stoccaggio andando a ridurre il rischio di perdite. Tuttavia, nonostante il suo potenziale, questa tecnica non è ancora sufficientemente sviluppata per un'applicazione su larga scala, principalmente a causa delle limitazioni legate alla capacità di assorbimento dei materiali e alla cinetica dei processi per riportare l'idrogeno in condizioni di utilizzo.

Capitolo 2

Getti sottoespansi

2.1 Comprimibilità e numero di Mach

Un getto viene definito come un rilascio in ambiente caratterizzato da una elevata energia cinetica data dalla elevata pressione che si trova a monte della sezione di rilascio. Un getto libero viene definito come un getto che si propaga nell'aria a partire da un orificio dove però non vi sono superfici solide o geometrie in grado di influenzare lo sviluppo di questo, e dove la pressione statica all'interno del getto è la medesima dell'ambiente circostante.

Quando un gas fuoriesce da un ugello con una pressione statica superiore a quella dell'ambiente circostante a valle del foro, significa che l'espansione del gas all'interno dell'ugello non è stata completata. Di conseguenza, il fluido continua a espandersi dopo l'uscita per raggiungere l'equilibrio con la pressione ambiente. Questa condizione caratterizza una tipologia precisa di getti che vengono definiti "sottoespansi".

Trovandosi ad avere una pressione statica maggiore rispetto a quella ambiente, prima di espandersi per raggiungere un equilibrio con la pressione atmosferica, si avrà una differenza di pressione che per annullarsi tenderà a formare delle onde d'urto date da fenomeni di espansione e compressione.

Il comportamento di un getto è descritto da due caratteristiche che lo caratterizzano quali la comprimibilità ed il valore del numero di Mach. Il numero di Mach è fortemente legato alla caratteristica di comprimibilità di un gas, tale caratteristica

del gas descrive quanto la densità del fluido varia in funzione della pressione.

Nei gas la densità è definita in funzione di pressione (e quindi anche velocità) e temperatura. Considerando il moto di un fluido gli effetti della comprimibilità diventano rilevanti se la velocità che possiede il fluido stesso si avvicina alla velocità del suono.

Per velocità basse o moderate il fluido può considerarsi incomprimibile dal momento che la sua densità resta più o meno invariata, se invece il gas ha una velocità elevata gli effetti della comprimibilità si vedono attraverso un cambiamento di densità in funzione di pressione e velocità.

Il numero di Mach è dato dall'equazione:

$$M = \frac{u}{a} \quad (2.1)$$

Dove u è la velocità del flusso e a è la velocità di propagazione del suono attraverso il fluido considerato e vale:

$$a = \sqrt{\gamma RT} \quad (2.2)$$

Con γ che rappresenta il rapporto tra calori specifici a pressione e volume costante ed è pari a 1.41 per l'idrogeno, R è la costante specifica dei gas e per l'idrogeno vale $4124 J/kgK$ e T è la temperatura del gas.

Il numero di Mach è fondamentale per definire la tipologia di moto che possiede il fluido, si possono definire le seguenti tipologie: subsonico ($M < 1$), transonico ($0.8 < M < 1.2$), sonico ($M = 1$), supersonico ($M > 1$) e ipersonico ($M > 5$).

Il valore che assume questo numero mi consente inoltre di andare a definire il comportamento della densità del fluido, infatti per valori di $M < 0.3$ gli effetti della comprimibilità sono trascurabili quindi il fluido può considerarsi incomprimibile. In queste condizioni vale la legge di Bernoulli in cui si mostra come all'aumentare della velocità la pressione cali mantenendo pressoché costante la densità:

$$P + \frac{1}{2}\rho u^2 = cost \quad (2.3)$$

Al contrario per valori di $M > 0.3$ la densità varia significativamente con il variare della velocità del fluido quindi il flusso è comprimibile.

Se la velocità aumenta fino a superare il rapporto di 0.3 il gas espandendosi diminuisce la sua densità, in tal caso la relazione di Bernoulli non è più valida ma il gas segue la legge di espansione isentropica:

$$\frac{P_{TOT}}{P_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} \quad (2.4)$$

P_{tot} rappresenta la pressione totale, data dalla pressione statica P_0 più un contributo cinetico dato dalla velocità. Dalla legge isentropica si può osservare che, se la velocità aumenta (aumento del numero di Mach) la pressione totale diminuisce e la densità varia notevolmente, la relazione tra pressione e velocità non è più lineare.

2.2 Caratteristiche getti sottoespansi

Un fluido comprimibile uscente da un ugello convergente va a formare un getto che può avere comportamenti molto differenti a seconda delle condizioni di monte e di valle. Introducendo un condotto convergente schematizzato, visibile in figura 2.1, è possibile individuare le condizioni indisturbate a monte, indicate con il pedice “0”, e le condizioni indisturbate a valle indicate con il pedice “ ∞ ”, e le condizioni sulla sezione d’uscita dell’ugello, indicate con il pedice “e”:

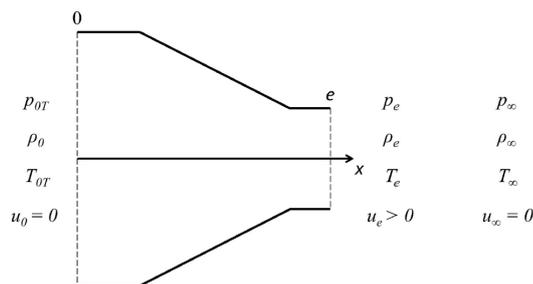


Figura 2.1: Schema ugello convergente.

Il fluido sulla sezione 0 ha le condizioni di pressione e temperatura totali definite come:

$$T_{0T} = T_0 + \frac{u_0^2}{2c_p} \quad (2.5)$$

$$p_{0T} = p_0 \left(\frac{T_{0T}}{T_0} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (2.6)$$

Considerando la conservazione della portata in massa in eq.2.7 e sfruttando una trasformazione isoentropica descritta dalla legge in eq.2.8, è possibile andare a ricavare l'eq.2.9 che rappresenta la portata in massa in funzione del rapporto di pressione tra un punto generico a valle e la sezione a monte, ovvero p_∞/p_{0T} :

$$\dot{m} = \rho u A = cost \quad (2.7)$$

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = cost \quad (2.8)$$

$$\dot{m} = A \rho_0 \left(\frac{p_\infty}{p_{0T}} \right)^{\frac{1}{\gamma}} u \quad (2.9)$$

Introducendo successivamente il numero di Mach (eq.2.11), ovvero la relazione tra la velocità scalare del flusso u e la velocità del suono isoentropica c_s (eq.2.10), è possibile riarrangiare l'eq.2.9 fino ad ottenere l'eq.2.12, ovvero l'andamento della portata attraverso la sezione d'uscita da un ugello di area A_e :

$$c_s = \sqrt{\frac{dp}{d\rho}} = \sqrt{\gamma RT} \quad (2.10)$$

$$M = \frac{|\bar{u}|}{c_s} = \frac{u}{\sqrt{\gamma RT}} \quad (2.11)$$

$$\dot{m} = A_e \sqrt{\frac{2\gamma}{R(\gamma-1)} \frac{p_{0T}^2}{T_{0T}} \left[\left(\frac{p_\infty}{p_{0T}} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{p_\infty}{p_{0T}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right]} \quad (2.12)$$

L'eq.2.12 mostra un andamento parabolico, che si annulla in corrispondenza di $p_\infty/p_{0T} = 1$, ovvero in assenza di salto di pressione, e per $p_\infty = 0$, ma quest'ultima risulta essere una condizione fittizia in quanto la velocità $u_e \rightarrow \infty$ e la densità $\rho_e \rightarrow 0$. In realtà, come confermato da evidenze sperimentali, la portata in massa raggiunge il suo massimo per il rapporto di pressione critico $(p_\infty/p_{0T})^*$ e resta costante se si continua a diminuire il rapporto di pressione, come visibile in figura 2.2.

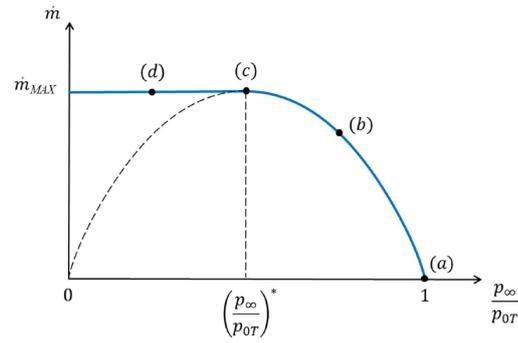


Figura 2.2: Portata in massa in funzione del rapporto critico.

Seguendo l'andamento dei punti indicati sul grafico in figura 2.2, si può affermare che:

- nel punto (a) il rapporto di pressione è unitario, per cui non c'è differenza di pressione e la portata in massa attraverso l'ugello è nulla
- nel punto (b) il rapporto di pressione viene ridotto, e quindi la portata risulta non nulla
- nel punto (c) il rapporto di pressione raggiunge il valore critico, la portata è massima
- nel punto (d), diminuendo ulteriormente il rapporto di pressione, la portata si mantiene costante pari al valore massimo \dot{m}_{MAX}

Il rapporto di pressione critico $(p_\infty/p_{0T})^*$ rappresenta la condizione in cui il flusso in corrispondenza della sezione di uscita raggiunge la condizione di blocco sonico (“choked”), raggiungendo la condizione di $M = 1$. In conclusione, l'andamento reale della portata è riportato in equazione:

$$\dot{m} = \begin{cases} A_e \sqrt{\frac{\gamma}{R} \frac{p_{0T}^2}{T_{0T}} \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}} & 0 < \frac{p_\infty}{p_{0T}} < \left(\frac{p_\infty}{p_{0T}}\right)^* \\ A_e \sqrt{\frac{2\gamma}{R(\gamma-1)} \frac{p_{0T}^2}{T_{0T}} \left[\left(\frac{p_\infty}{p_{0T}}\right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{p_\infty}{p_{0T}}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right]} & \left(\frac{p_\infty}{p_{0T}}\right)^* < \frac{p_\infty}{p_{0T}} < 1 \end{cases} \quad (2.13)$$

Osservando la figura 2.3, si può affermare che:

- nel caso (a) il rapporto di pressione è unitario
- nel caso (b) il rapporto di pressione cala, ma resta superiore a quello critico
- nel caso (c) il rapporto di pressione risulta esattamente quello critico, per cui nella sezione di uscita dall'ugello, alla quota x_e , il fluido raggiunge la condizione di sonicità ($M = 1$)
- nel caso (d) il rapporto di pressione risulta essere inferiore a quello critico, di conseguenza il fluido in corrispondenza della sezione di uscita dell'ugello è in regime di blocco sonico ed è caratterizzato da una pressione p_e maggiore di quella a valle p_∞ : questo comporta un'ulteriore espansione del fluido a valle dell'ugello stesso. In questo caso si parla di getto sottoespanso.

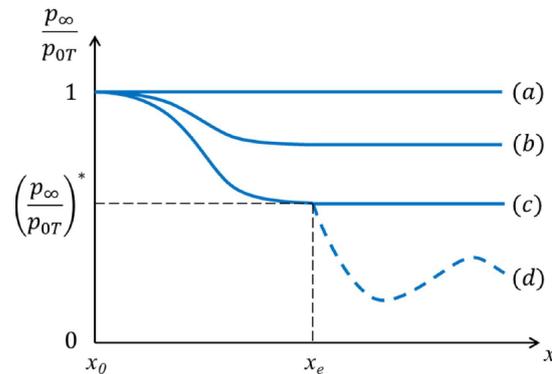


Figura 2.3: Andamento pressione lungo asse

Per l'aria e l'idrogeno, che hanno un γ a pressione e temperatura ambiente di circa 1.4, si ha che il rapporto di pressione critico risulta $(p_\infty/p_{0T})^* = 0.528$. Per definire in modo più agevole le condizioni in cui si forma un getto sottoespanso, sono stati definiti i seguenti rapporti di pressione:

$$NetPressureRatio = NPR = \eta_0 = \frac{p_{0T}}{p_\infty} \quad (2.14)$$

$$\eta_e = \frac{p_e}{p_\infty} \quad (2.15)$$

Nel caso di un ugello convergente, al fine di ottenere un getto sottoespanso si deve verificare la seguente condizione:

$$NPR = \eta_0 > \left(\frac{p_{0T}}{p_\infty}\right) \text{ (circa 2 per l'idrogeno)} \quad (2.16)$$

Nel caso invece l'ugello sia di tipo convergente-divergente, oltre alla eq.2.16, si deve verificare anche la condizione aggiuntiva di $\eta_e > 1$.

2.3 Struttura getti sottoespansi

Supponendo un regime stazionario si possono evidenziare tre zone principali in un getto sottoespanso. In figura si vedono chiaramente le zone: “nearfield zone”, ovvero la sezione più vicina all'uscita dell'ugello, “transition zone” in cui nel cuore del getto si ha un moto supersonico ($M > 1$) e la “farfield zone” che è la zona più a valle del getto in cui si hanno caratteristiche di pressione e temperatura prossime alle condizioni ambiente.

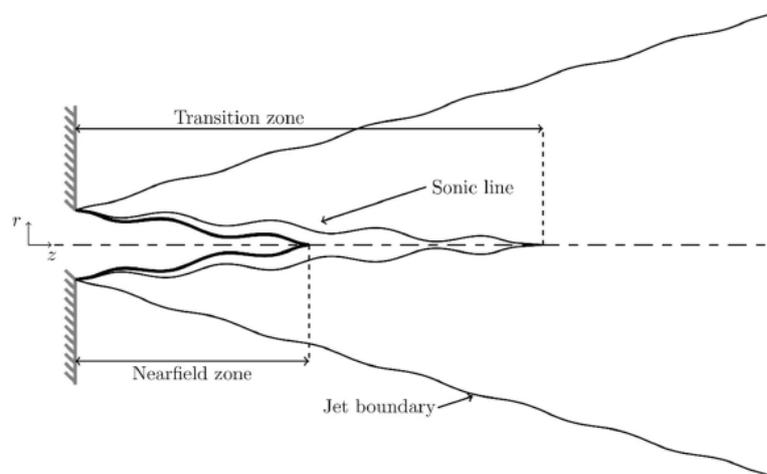


Figura 2.4: Struttura getto sottoespanso.

In figura 2.4 è possibile visualizzare le zone citate precedentemente, analizzandole più nel dettaglio si può notare che la “nearfield zone” è a sua volta suddivisa in due parti, una più interna ed una più esterna in cui si ha miscelamento con l'ambiente, quest'ultima zona prende il nome di “mixing layer” e va ad isolare il fluido uscente dall'ugello dall'esterno. La zona centrale risulta caratterizzata da fluido il

cui comportamento è principalmente legato agli effetti di comprimibilità di esso, subendo fenomeni di espansione e compressione isoentropica. Nella zona dei “mixing layer” invece il fluido è caratterizzato da elevati fenomeni di turbolenza che, dando origine a strutture vorticose, vanno a permettere il miscelamento dei due tipi di fluidi, vortici che si sviluppano nella direzione verso valle. Il regime di moto risulta essere altamente subsonico, caratterizzato da una elevata velocità specialmente in direzione assiale.

Nella “transition zone” il fluido ha ancora un comportamento subsonico ma inizia ad uniformarsi con le condizioni di pressione e temperatura che possiede il fluido nell’ambiente di valle, adattamento delle variabili che avviene sia longitudinalmente sia radialmente.

Infine, nella “farfield zone” viene raggiunto un equilibrio in termini di pressione tra il fluido uscente dal getto ed il fluido a valle, raggiungendo quindi la massima espansione per il fluido iniettato. Le caratteristiche del fluido hanno raggiunto la condizione di “auto-similarità”, ovvero sono le stesse di un getto subsonico; infatti, si ha un brusco calo di velocità in direzione assiale. Velocità che cala, lungo la direzione radiale, in modo inversamente proporzionale alla distanza dalla sezione di uscita dell’ugello, mentre in direzione radiale diminuisce con un andamento gaussiano, come mostrato in figura 2.5.

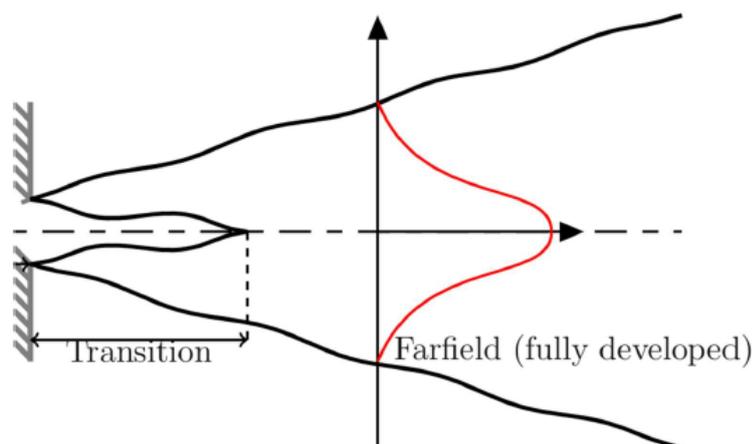


Figura 2.5: Velocità lungo il raggio del getto.

2.4 Gradi di sottoespansione

Nella “nearfield zone” il fluido ha comportamenti differenti a seconda del salto di pressione che c'è tra il serbatoio a monte ed a valle (indicato con η_0) e tra la sezione di uscita dall'ugello e valle (indicato con η_e). si possono distinguere quattro tipologie di getto sottoespanso: sottoespansione contenuta, moderatamente, fortemente ed estremamente sottoespanso.

2.4.1 Sottoespansione contenuta

Il getto raggiunge la condizione di blocco sonico con $M = 1$ sulla sezione di uscita dell'ugello, generando uno shock normale. In condizioni di pressione e temperatura ambiente per l'idrogeno ($\gamma = 1.41$) si raggiunge questa condizione per $1 < \eta_0 < 1.9$ oppure $1 < \eta_e < 1.1$.

2.4.2 Getto moderatamente sottoespanso

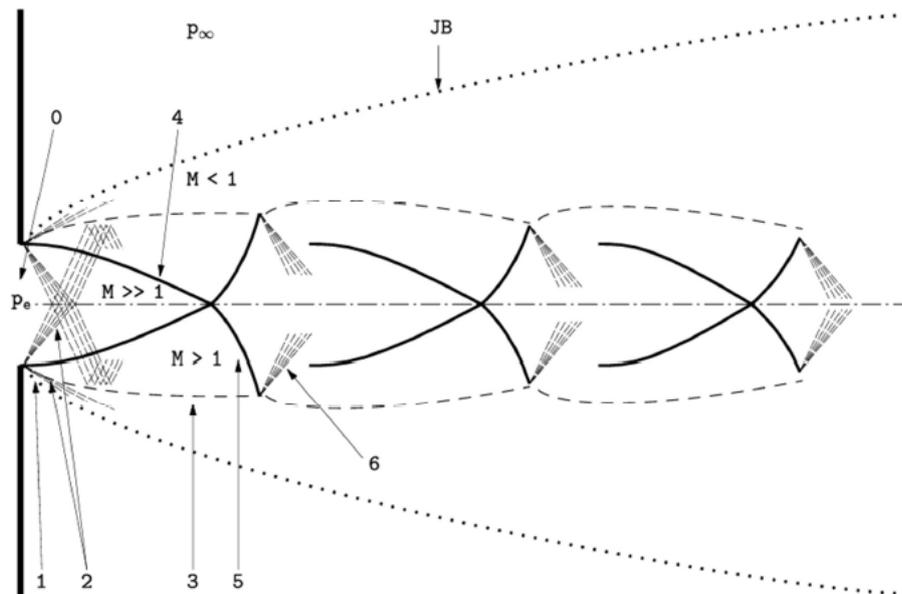


Figura 2.6: Getto moderatamente sottoespanso.

Il getto assume una forma a diamante (fig.2.6), forma caratteristica dei getti moderatamente sottoespansi. Questa situazione si verifica per $2 < \eta_0 < 4$ oppure $1.1 < \eta_e < 3$.

In figura si può notare che a partire dagli spigoli dalla sezione di uscita (punto 0) si va ad aprire un ventaglio di espansioni di Prandtl-Meyer (punto 2) che espande il fluido fino al confine del getto, indicato con JB (“Jet Boundary”), corrispondente alla superficie esterna dello strato di miscelazione (“outer shear layer”). Quando queste onde di espansione raggiungono la linea di flusso a pressione costante (punto 3), in valore uguale a quella ambientale, vengono riflesse come onde di compressione. Quest’ultime convergono nuovamente verso il cuore del getto, e quando si incontrano con la zona di espansione vanno a formare uno shock obliquo (punto 4). Questo shock cade verso l’asse e qui si riflette in un nuovo shock obliquo, chiamato “reflected shock” (punto 5), rivolto verso l’esterno del getto. Infine, quando questa onda d’urto incontra nuovamente la linea a pressione costante, si genera un nuovo ventaglio di espansioni di Prandtl-Meyer (punto 6) che consente di replicare la medesima struttura più volte a valle. Progredendo verso valle la dimensione di tale struttura tenderà a diminuire a causa della dissipazione di energia in corrispondenza degli shock successivi.

2.4.3 Getto fortemente sottoespanso

Il getto assume una forma definita a “botte”, visibile in figura 2.7, in cui compare il disco di Mach, andamento che si ripete varie volte progredendo in direzione assiale verso valle. Il disco di Mach compare in presenza di getti fortemente sottoespansi che, sempre per l’idrogeno, si hanno se $4 < \eta_0 < 7$ oppure $2 < \eta_e < 4$.

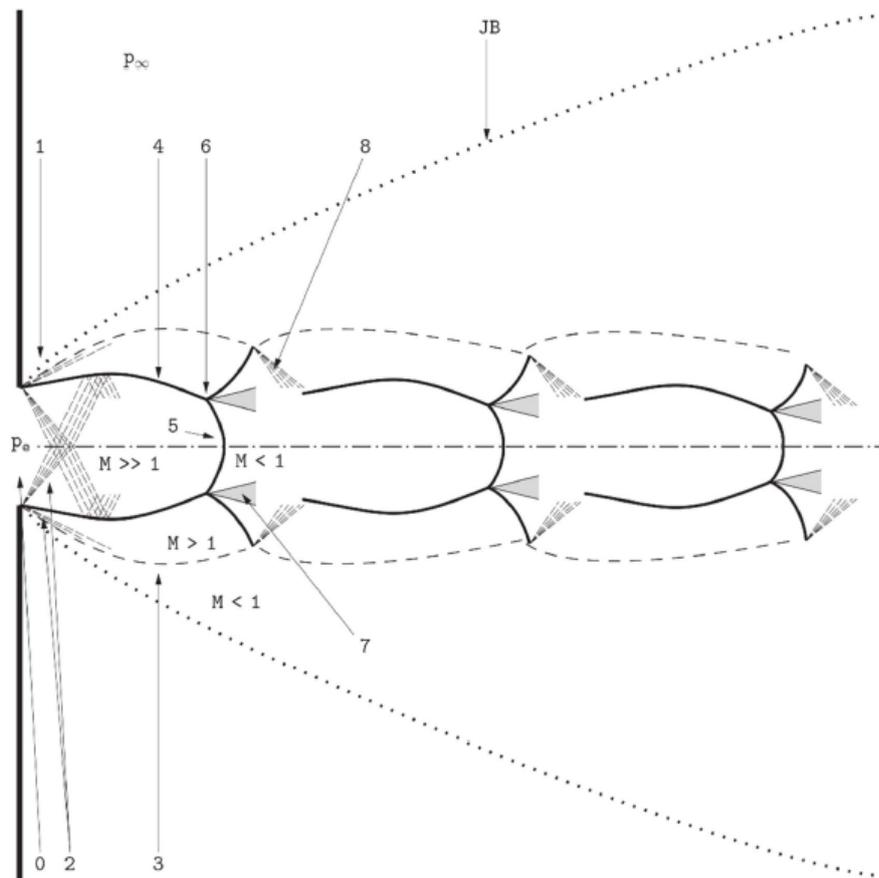


Figura 2.7: Getto fortemente sottoespanso.

Quando il rapporto di pressione aumenta, la riflessione dell'intercepting shock non può più avvenire sull'asse. Di conseguenza si assiste alla comparsa di uno shock forte normale alla direzione del getto, chiamato disco di Mach (punto 5). Il punto in cui l'intercepting shock, il disco di Mach e lo shock riflesso si intersecano (punto 6) viene chiamato punto triplo. Da questo punto nasce una scia definita "slip region" (punto 7): si tratta di uno strato di miscelazione turbolento nella parte più interna del getto (detto "inner shear layer"), che separa il flusso dietro al disco di Mach, che è subsonico, dal flusso a valle dello shock riflesso, che è supersonico. La linea che separa la "slip region" dal cuore del getto viene chiamata "slip line". Come nel caso precedente, si assiste ad una ripetizione di queste celle di shock che diminuiscono progressivamente in dimensione a causa della dissipazione di energia in corrispondenza degli shock successivi.

2.4.4 Getto estremamente sottoespanso

Il getto presenta una sola unica struttura a botte (figura 2.8) tipica di getti estremamente sottoespansi che si hanno per valori del rapporto di pressione $NPR = \eta_0 \geq 7$ oppure $\eta_e \geq 4$.

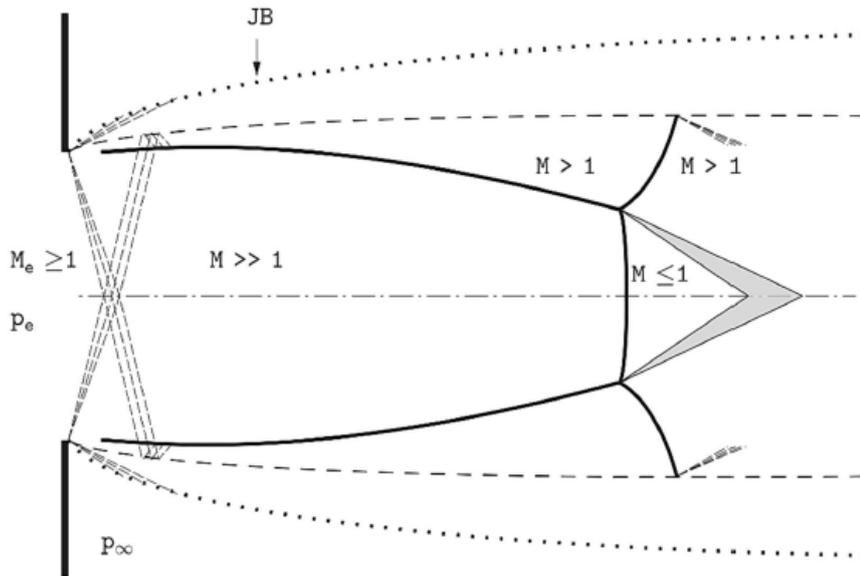


Figura 2.8: Getto estremamente sottoespanso.

Con un ulteriore aumento del rapporto di pressione, si assiste alla diminuzione del numero di celle di shock, fino al punto in cui il getto è dominato dalla prima cella, dietro alla quale non si forma nessun'altra struttura di shock. In questo caso il disco di Mach è caratterizzato da un diametro molto elevato e una curvatura non trascurabile. In questi casi la quantità di moto del getto è molto elevata, fatto che porta ad avere un getto più contenuto in dimensioni radiali rispetto ai casi precedenti, e con una penetrazione del pennacchio molto elevata in direzione assiale.

2.5 Disco di Mach

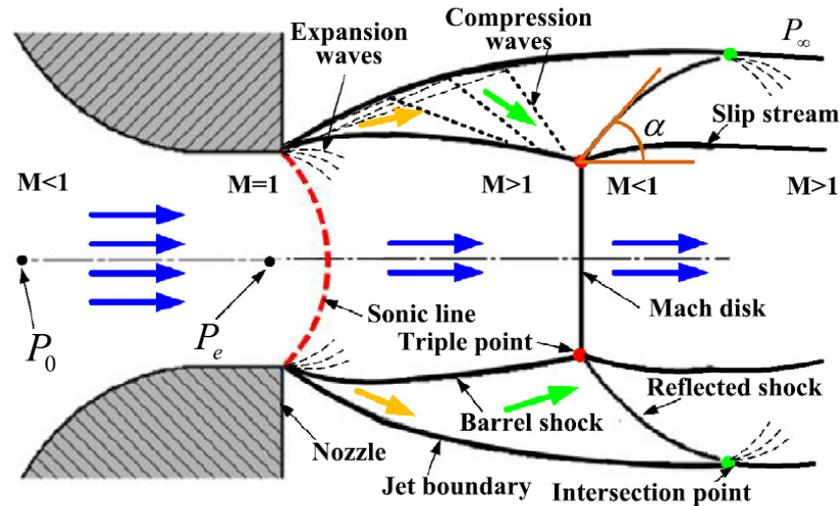


Figura 2.9: Primo tratto di una getto estremamente sottoespanso con evidenziato le differenti zone distinguibili nel getto.

Il disco di Mach è una particolare tipologia di shock che si estende in direzione normale a quella del getto uscente dal foro. Come descritto in [1] si ritiene shock normale anche in corrispondenza del punto triplo; perciò, più tale punto si allontana dalla linea di asse più aumenta la curvatura del disco. A valle del disco il fluido avrà un comportamento subsonico con $M < 1$, in cui si avrà un brusco calo di velocità ma un incremento di densità, pressione e temperatura [2]. Per quanto riguarda la sezione a monte invece il moto sarà ampiamente supersonico con $M \gg 1$, in tale regione il fluido entrando in un ambiente più ampio subirà una rapida espansione che porta ad una diminuzione della pressione statica del fluido. Pressione che diminuisce in base alla posizione rispetto al disco secondo la formula:

$$p = p_{0T} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{-\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (2.17)$$

Come risulta intuibile il disco di Mach risulta fondamentale per la definizione delle caratteristiche termofluidodinamiche del getto, specialmente per quanto riguarda la sezione a valle, per questo motivo risulta importante determinare distanza dal foro

dell'ugello e diametro di esso.

Questi due parametri definiti come L_{md} e D_{md} rispettivamente variano in funzione alla differenza di pressione che vi è tra serbatoio a monte ed ambiente a valle. Secondo vari studi fatti si è dimostrato che entrambe le grandezze dipendono dal diametro del foro di uscita, senza il bisogno di specificare il tipo di fluido o la tipologia di ugello, andando a rendere più semplice il confronto tra vari casi analizzati.

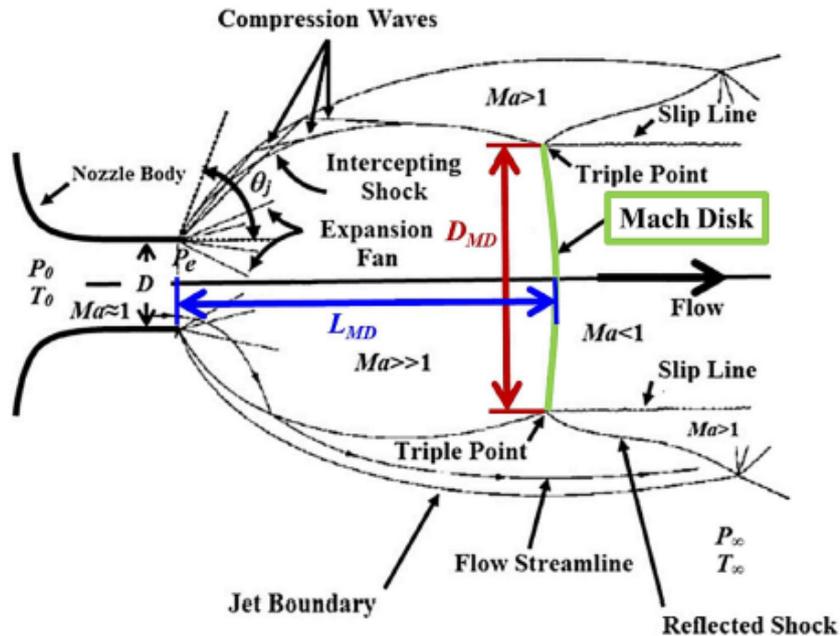


Figura 2.10: Grandezze caratteristiche del disco di Mach.

Come viene illustrato da [3] e [1] la distanza del disco di Mach dalla sezione di uscita dall'ugello viene definita come L_{md} e presenta le seguenti caratteristiche:

- è influenzata dal salto di pressione η_0 , definito anche come Net Pressure Ratio
- aumenta con l'aumentare del valore del numero di Mach sulla sezione di uscita (M_e)
- non dipende dal tipo di fluido che si utilizza
- non è influenzata dall'angolo β di semiapertura dell'ugello

Vari studi in letteratura hanno portato a definire la geometria del getto come viene mostrato nella precedente figura ed a definire una funzione che mette in relazione la distanza del disco con rapporto di pressione e diametro della sezione di uscita:

$$\frac{L_{MD}}{D_e} = 0.62(\eta_0)^{0.51} \quad (2.18)$$

In realtà si è studiato che la relazione che meglio descrive il fenomeno fisico è descritta in [4]:

$$\frac{L_{MD}}{D_e} = \sqrt{\frac{\eta_0}{2.4}} = 0.645497(\eta_0)^{0.5} \quad (2.19)$$

Funzione derivante da quella precedente (eq.2.18) ma validata sperimentalmente per un intervallo di η_0 maggiori.

Si può notare da entrambe le equazioni che la distanza del disco di Mach è proporzionale alla radice quadrata del rapporto tra pressioni η_0 , dipendenza descritta in letteratura e visibile in figura 2.11.

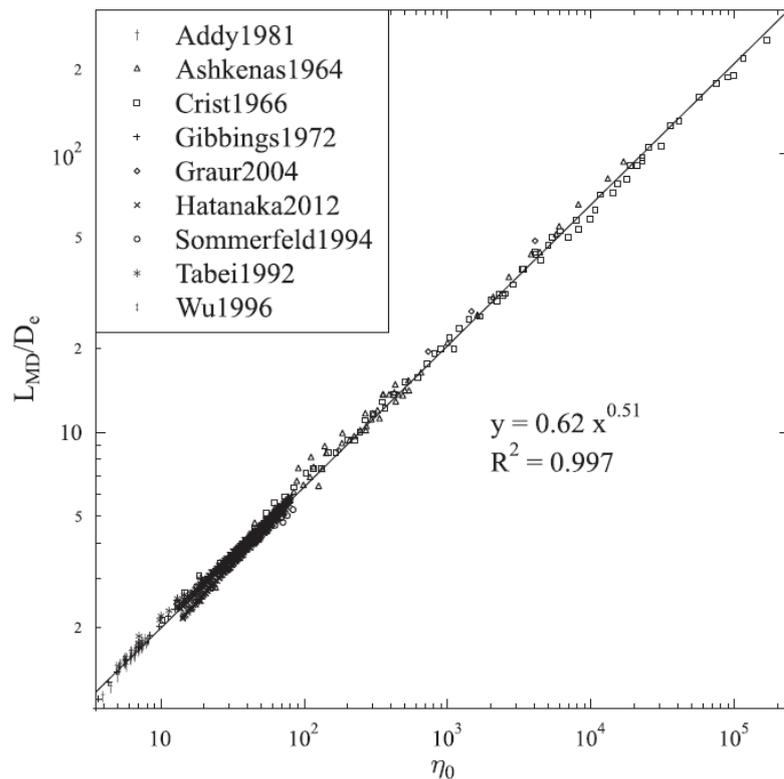


Figura 2.11: Andamento variabili disco di Mach in funzione del salto di pressione.

Per quanto riguarda il diametro del disco D_{md} sempre nello stesso articolo viene affermato che:

- è influenzato dal salto di pressione η_0
- diminuisce all'aumentare del numero di Mach sulla sezione di uscita M_e
- è legato al tipo di gas che si considera, risulta infatti inversamente proporzionale a γ
- Dipende dalla geometria e dalla forma dell'ugello, diminuisce se aumenta l'angolo β di apertura dell'ugello nel caso di ugelli convergenti ed aumenta con l'aumentare di β per ugelli convergenti-divergenti

Negli articoli [3] e [1] vengono riportate due equazioni che legano la grandezza D_{md} ad η_0 :

$$\frac{D_{MD}}{D_e} = \begin{cases} 0.06(\eta_0)^{1.00} & \eta_0 < 50 \\ 0.37(\eta_0)^{0.50} & \eta_0 > 10^4 \end{cases} \quad (2.20)$$

Come si può notare in figura 2.12 però l'equazione 2.20, rappresentata con una linea verde in figura, non fornisce risultati ottimali di approssimazione per valori di η_0 bassi, si preferisce usare per tale motivo l'equazione ricavata da Abby descritta in [5] per valori di $\eta_0 < 50$:

$$\frac{D_{MD}}{D_e} = \begin{cases} 0.36\sqrt{\eta_0 - 3.9} & \text{per ugelli sagomati} \\ 0.31\sqrt{\eta_0 - 5} & \text{per ugelli coniciorifizi} \end{cases} \quad (2.21)$$

I dati raccolti in letteratura hanno portato a rappresentare l'andamento del diametro, in funzione del rapporto tra le pressioni, secondo le curve mostrate in figura 2.12.

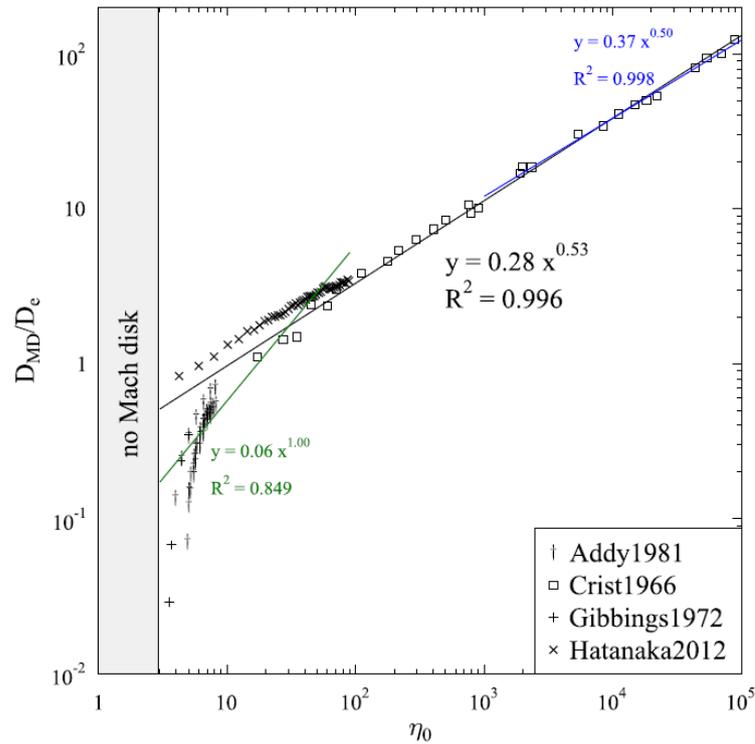


Figura 2.12: Andamento diametro disco in relazione al diametro del foro di uscita e del salto di pressione.

2.6 Miscelamento getto

Il regime di moto nello strato esterno del getto in cui il fluido della zona centrale del core si va a miscelare con il fluido nell'ambiente circostante dipende dal numero di Reynolds che si ha nello strato limite:

$$Re_i = \frac{u_e L_{MD}}{\nu} \quad (2.22)$$

Dove, come già descritto in precedenza, u_e è la velocità che possiede il fluido in uscita dall'ugello, L_{MD} è la distanza a cui si trova il disco rispetto alla sezione di uscita del foro e ν è la viscosità che il fluido ha nell'ambiente a valle dove si trova a pressione e temperatura ambiente.

Il regime di moto può variare da laminare a più o meno turbolento e questo dipende appunto dal valore di Re_i , per $Re_i > 10^4$ si ha che il mixing layer ha un regime di moto turbolento la cui ampiezza aumenta man mano che ci si allontana dalla sezione di uscita del getto.

Se invece si hanno valori compresi tra $10^3 < Re_i < 10^4$ la zona di mixing si trova in un regime di moto laminare inizialmente per poi subire una transizione ad un moto turbolento prima di attraversare il disco di Mach. Il quale, andando a diminuire l'intensità della turbolenza, vede una diminuzione del suo diametro e anche una diminuzione dello spessore dello strato di mixing. Abbassando ulteriormente i valori del numero di Reynolds in un intervallo compreso tra $10^2 < Re_i < 10^3$ si avrà nella zona di mixing un moto puramente laminare dallo spessore ancora più sottile del caso precedente e con una struttura delle onde di shock totalmente differente da quella caratteristica del disco di Mach, il quale tende quasi a scomparire.

Per alti valori di Re_i si hanno forti zone di instabilità date dalla elevata turbolenza che si è generata dagli stress di taglio che si hanno quando il fluido attraversa le varie linee di flusso; infatti, gas passa da una zona centrale del getto in cui si hanno velocità supersoniche ad una zona in cui mischiandosi con il fluido circostante fermo passa ad avere velocità subsoniche. In tale zona si crea una zona di instabilità che verrà chiamata di Kelvin-Helmholtz ed è la causa di formazione di vortici di grandi dimensioni che andranno poi ad evolversi verso valle insieme al getto.

Di seguito, in figura 2.13, vengono riportati vari istanti della diffusione del getto, in particolare nelle prime due immagini è possibile vedere la prima fase di propagazione in cui ancora non si è formato il disco di Mach, seguita dalla formazione della prima struttura di shock con fase iniziale di mixing ed in seguito lo sviluppo dei vortici.

Generalmente l'evoluzione temporale del getto vede una prima fase, al tempo $t = 14T_0$, in cui il fluido espandendosi inizia a generare lateralmente quelli che saranno i vortici che ne promuoveranno il miscelamento. All'istante $t = 18T_0$ iniziano ad essere visibili gli shock obliqui generatisi in seguito all'espansione di Prandtl-Meyer. Dopo circa un tempo pari a $t = 42T_0$ è possibile osservare lo sviluppo dei vortici e delle strutture di shock, tali strutture iniziano a comparire anche negli istanti precedenti pur non essendo del tutto sviluppate, infatti il disco sarà completamente formato dopo un tempo di circa $t = 60T_0$.

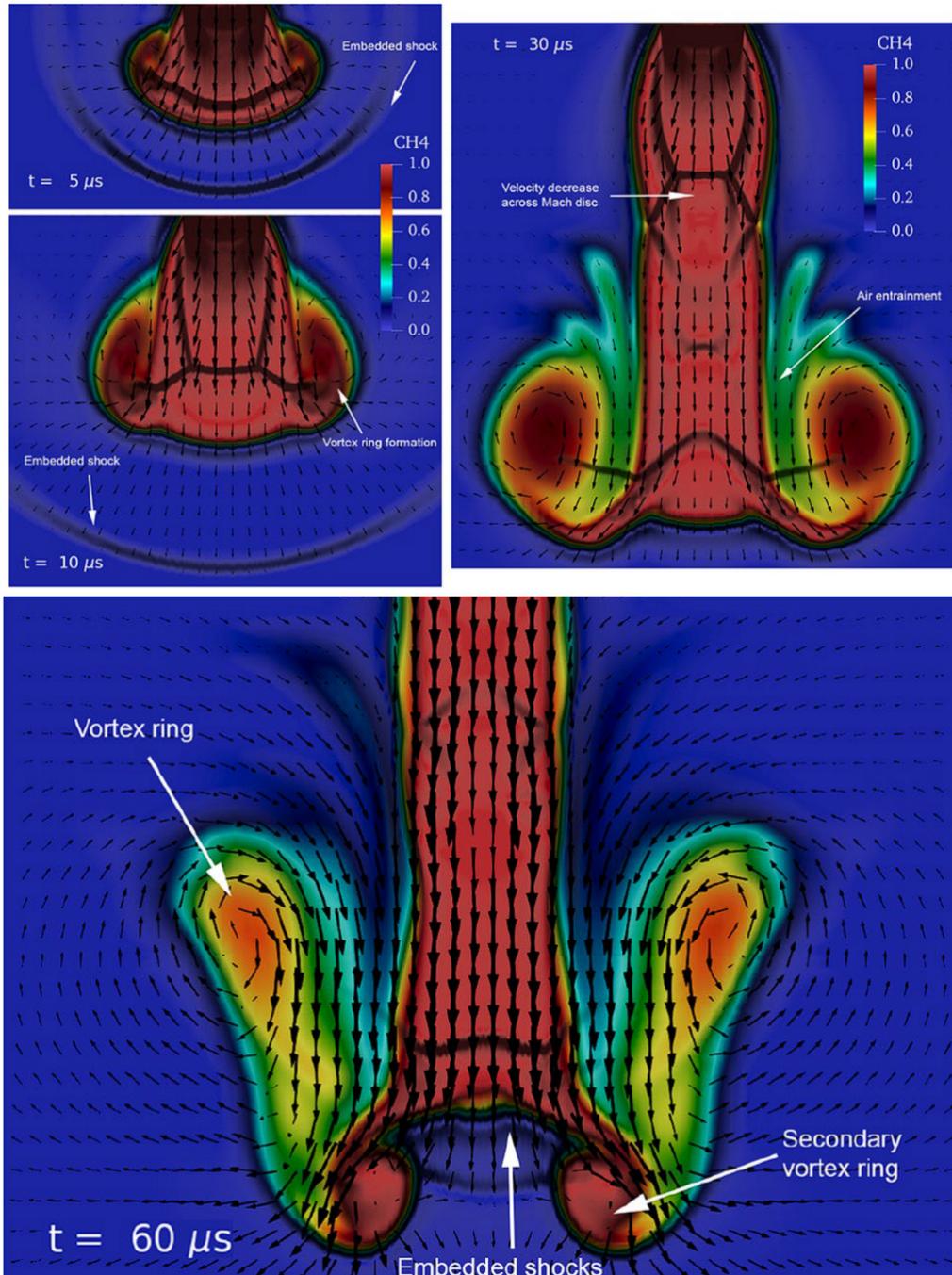


Figura 2.13: Prime fasi di espansione di un getto sottoespanso con inizio formazione di vortici.

Una tipologia di instabilità che si genera nei mixing layer prende il nome di "Taylor-Goertler", la sua schematizzazione è riportata in figura 2.14 e le sue caratteristiche sono descritte in [1]. Instabilità data dalla forte curvatura delle linee di flusso, le quali dipendono dal grado di sottoespansione del fluido. Fluido che si muove lungo

traiettorie curvilinee risente di forze centrifughe, le quali insieme al gradiente di velocità che si sviluppa in direzione radiale vanno a creare non uniformità del flusso che assume la forma di vortici controrotanti stazionari con asse parallelo al getto. Questi ultimi tendono ad aumentare le perturbazioni iniziali date dalla geometria o conformazione dell'ugello. Per tale motivo è possibile osservare che, diversamente da quanto descritto in letteratura, il miscelamento del getto con l'aria esterna inizia ad essere presente, anche se di lieve entità, nella zona esterna della prima struttura di shock a botte, prima della formazione del disco di Mach.

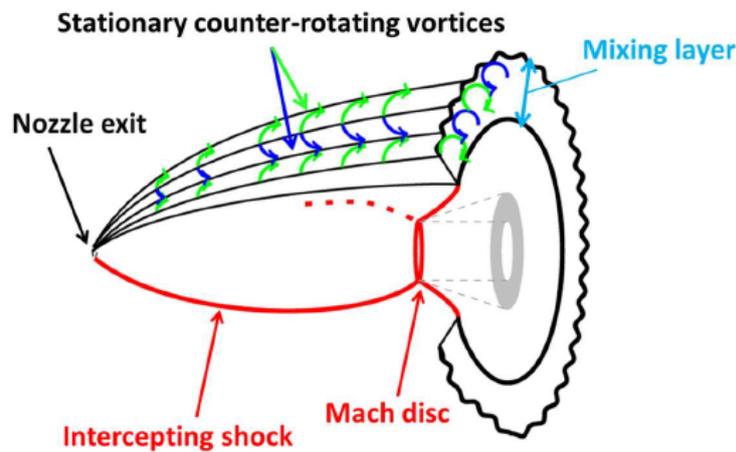


Figura 2.14: Rappresentazione schematica dei vortici controrotanti di Goertler.

Osservando un getto come quello preso in esempio in figura 2.15, superata la fase transitoria iniziale, nella condizione di regime stazionario del moto, si può vedere come il miscelamento di maggiori quantità di fluido avviene a valle dello shock a botte, nella parte più esterna al getto, ovvero nella zona in cui è predominante il contributo della turbolenza. Procedendo verso valle si ha un aumento della intensità del flusso e dello spessore (in direzione radiale) dello strato esterno in cui avviene il miscelamento, quest'ultimo assumerà un regime fortemente turbolento grazie al quale verrà favorito il miscelamento tra la zona centrale del getto ed il fluido nell'ambiente.

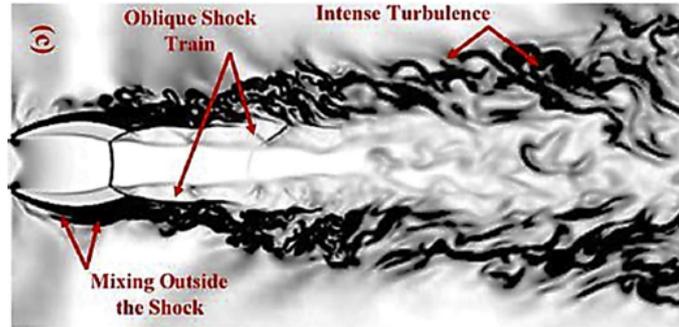


Figura 2.15: Immagine ricavata da analisi CFD in, si può notare il miscelamento nei limiti esterni dato dalle componenti di turbolenza e nella zona ai lati della regione di shock a botte dato dai vortici di Goertler.

A valle dello shock riflesso in un getto sottoespanso si forma, oltre alla slip region, uno strato di miscelamento interno caratterizzato da un moto che viene chiamato “inner shear layer”. Zona caratterizzata da una elevata componente di turbolenza, anche se comunque di intensità minore rispetto a quella della slip region.

Per riassumere si può affermare che parlando di getti sottoespansi il miscelamento del getto con il fluido all’interno dell’ambiente avviene nella zona esterna del getto dove il moto turbolento è predominante, più importante sarà la turbolenza più rapido e profondo sarà il miscelamento.

Capitolo 3

Notional nozzle

3.1 Definizione del concetto di "Notional nozzle"

Come precedentemente descritto, l'idrogeno gassoso viene stoccato in recipienti ad alta pressione per migliorarne l'efficienza di trasporto e aumentarne la densità di energia. Pertanto, lo studio di un getto di idrogeno sottoespanso risulta di fondamentale importanza, poiché un rilascio accidentale di gas ad alta pressione può generare una fiamma di notevole lunghezza, la quale si propagherà estendendosi per diversi metri. Per il motivo appena descritto e quindi per ragioni di sicurezza è necessaria l'analisi dell'andamento del getto ad alta pressione. Il getto che si andrà a formare sarà sottoespanso vicino al foro di uscita per poi accelerare bruscamente espandendosi fino ad arrivare a pressione atmosferica attraverso una serie di shock. L'analisi di ciò che accade dopo che il gas è uscito dall'ugello, ovvero lo studio del flusso supersonico e della regione dove avviene lo shock, richiedono un elevato peso computazionale. Vari studi in letteratura hanno infatti determinato che se la pressione di iniezione nel serbatoio a monte è pari ad esempio a 20Mpa è necessaria una risoluzione con celle di diametro pari ad almeno $1/32$ del diametro del foro di uscita del getto per ottenere una analisi accurata. Se, come nel seguente caso, si vuole analizzare come si comporta il getto a valle del disco di Mach quando si ha un moto subsonico, risulta superfluo tale elevato sforzo computazionale. Per ridurre i tempi di calcolo della simulazione, sono state studiate soluzioni come l'impiego del concetto di notional nozzle. Questa tecnica consente di semplificare la simulazione

andando ad escludere la regione più critica, sia a livello fisico che di simulazione, del getto, ovvero l'area immediatamente a valle dell'ugello in cui si ha moto supersonico. Concentrandosi sulle caratteristiche a partire dal disco di Mach in poi, è possibile adottare per la simulazione una griglia meno fitta, riducendo significativamente il costo computazionale senza compromettere l'accuratezza dei risultati nelle zone di interesse.

Approccio che consiste quindi nell'introdurre un foro fittizio che verrà utilizzato come condizione al contorno per risolvere le equazioni di stato del moto dei fluidi in modo più veloce, dal momento che il diametro fittizio andrà a riprodurre quelle che sono le condizioni della zona più prossima alla sezione di uscita del foro. La portata uscente dal foro fittizio sarà pari a quella reale ma avrà velocità sonica, uniforme su tutta la sezione del foro, e differenti condizioni di pressione e temperatura.

Negli anni si sono sviluppati ed implementati vari modelli per andare a definire quelle che sono le caratteristiche fisiche da attribuire al disco di Mach da cui si parte a simulare il getto subsonico. I modelli di maggior interesse che verranno presi in considerazione nel seguente elaborato sono quelli descritti da Birch, Ewan, Schefer ed Harstad.

Di seguito si analizzeranno i diversi approcci in modo specifico, andando a definire le equazioni che si utilizzano per definire le condizioni al contorno della simulazione da imporre sul foro fittizio. Lo schema utilizzato, a cui faranno riferimento tutti i termini, per descrivere la situazione fisica è il medesimo per tutti i modelli descritti e risulta essere il seguente:

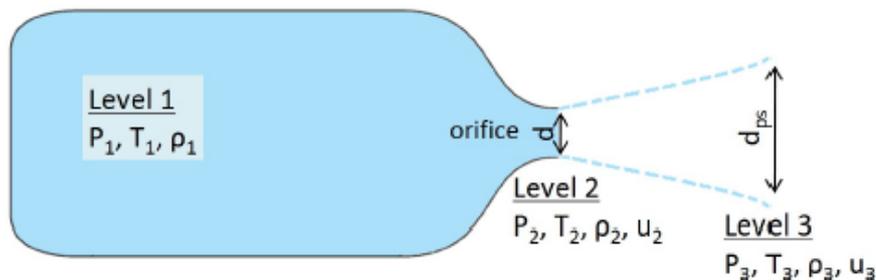


Figura 3.1: Schema ugello per la definizione del notional nozzle.

Nei capitoli seguenti verranno descritti gli approcci sopra citati, le quali equazioni che vengono utilizzate per rappresentare il foro fittizio sono riportate in [6].

3.2 Birch 1984

Il primo modello sviluppato da Birch si basa sul concetto di conservazione della massa assumendo non essere presente la componente di trascinamento dell'aria ambiente tra il piano del foro di uscita e la zona a valle del disco di Mach. Inoltre, si analizzano i parametri fisici del getto supponendo di avere un gas comprimibile all'interno di un serbatoio in pressione. Durante lo sviluppo del modello si sono svolte varie analisi variando la pressione del serbatoio in un range che va dai 2bar ai 70 bar, mentre per quanto riguarda la temperatura si considera uniforme e pari a quella ambiente.

Per un fluido comprimibile la conservazione della massa segue la formula:

$$\dot{m} = C_d \rho_2 u_2 A_2 = \rho_3 u_3 A_3 \quad (3.1)$$

Dove C_d è il coefficiente che esprime il rapporto tra portata reale e ideale che passa attraverso il foro, u_2 la velocità locale sonica, u_3 la velocità sonica a condizione ambiente, A_2 area del foro, A_3 area teorica, ρ_2 e ρ_3 le densità del fluido nelle sezioni 2 e 3.

Andando ad esplicitare l'area delle due sezioni è possibile ricavare dalla equazione (3.1) il diametro del getto nella sezione 3 definito come d_{ps} :

$$\frac{d_{ps}^2}{d^2} = \frac{C_d \rho_2 u_2}{\rho_3 u_3} \quad (3.2)$$

Considerando che tra la sezione 1 e la sezione 2 vi sia una compressione isoentropica si possono definire:

$$T_2 = T_1 \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right) \quad (3.3)$$

$$P_2 = P_1 \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (3.4)$$

Dove $\gamma = 1.41$ per l'idrogeno è il rapporto tra il calore specifico a pressione costante ed il calore specifico a volume costante.

Considerando il fluido come un gas ideale, vale la legge dei gas perfetti $PV = RT$, quindi, tenendo conto anche della equazione (3.4), si definisce la pressione nel foro come:

$$\rho_2 = \frac{P_1 \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} MW}{RT_1} \quad (3.5)$$

Dove MW è il peso molecolare del gas ed R la costante universale dei gas perfetti ($R = 8,314J/molK$).

Conoscendo la formula della velocità quadratica media possiamo calcolarci la velocità del fluido all'interno del foro:

$$u_2 = \sqrt{\frac{\gamma RT_2}{MW}} = \sqrt{\frac{\gamma RT_1 \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)}{MW}} \quad (3.6)$$

Allo stesso modo si possono andare a definire velocità e densità nella sezione3:

$$u_3 = \sqrt{\frac{\gamma RT_3}{MW}} \quad (3.7)$$

$$\rho_3 = \frac{P_3 MW}{RT_3} \quad (3.8)$$

Andando a sostituire le equazioni (3.5), (3.6), (3.7), (3.8) nella equazione (3.2) si ottiene:

$$\frac{d_{ps}^2}{d^2} = C_d \frac{P_1}{P_3} \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \sqrt{\frac{T_3}{T_1}} \quad (3.9)$$

Se infine si considera che la temperatura di ristagno sia pari circa alla temperatura ambiente ($T_1 = T_3$) si definisce l'equazione (3.9) semplificata nel seguente modo:

$$\frac{d_{ps}^2}{d^2} = C_d \frac{P_1}{P_3} \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (3.10)$$

3.3 Birch 1987

Il primo modello di Birch1984 venne successivamente implementato andando ad introdurre, oltre alla conservazione della massa, la conservazione del momento e quantità di moto. I restanti parametri utilizzati per la definizione del modello sono gli stessi usati in precedenza, con temperatura pari a quella di stoccaggio.

Aggiungendo la componente data dal momento l'equazione di conservazione definita in Birch1984 diventa:

$$\rho_3 u_3^2 A_3 = C_d^2 \rho_2 u_2^2 A_2 + A_2 (P_2 - P_3) \quad (3.11)$$

Dall'equazione (3.11) e da quelle enunciate precedentemente, (3.5) (3.6) e (3.1), si può ricavare quella che è la velocità del fluido quando attraversa la sezione 3:

$$u_3 = u_2 \left(C_d + \frac{1 - \frac{P_3}{P_1} \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{-\frac{\gamma}{\gamma-1}}}{\gamma C_d} \right) \quad (3.12)$$

Inoltre, se la pressione nel serbatoio risulta essere sufficientemente elevata, ovvero se $\frac{P_1}{P_3} \gg \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{-\frac{\gamma}{\gamma-1}}$, la precedente equazione può essere semplificata in:

$$u_3 \approx u_2 \left(C_d + \frac{1}{\gamma C_d} \right) \quad (3.13)$$

Con le equazioni appena esplicitate è possibile ricavarsi il diametro del foro fittizio utilizzando l'equazione:

$$d_{ps} = d \sqrt{\frac{u_2}{u_3} C_d \frac{P_1}{P_3} \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}}} \quad (3.14)$$

3.4 Ewan

Questa terza tipologia di approccio, descritta in modo più accurato in [7] utilizza ipotesi simili a quelle fatte nel modello Birch1984, basandosi quindi sulle equazioni di conservazione di massa, considerando però che la sezione 3 sia attraversata da un flusso sonico a pressione atmosferica. La portata in massa che si ha tra la sezione 3 e la sezione 2 è considerata essere costante.

La sostanziale differenza che si ha con i precedenti approcci risulta essere la temperatura; infatti, non si considera più un fluido a temperatura ambiente ma la temperatura del fluido che attraversa la sezione 3 è considerata pari a quella che il gas ha mentre attraversa la sezione 2 ($T_3 = T_2$). In altre parole, la temperatura che si avrà sul diametro fittizio sarà pari a quella che possiede il fluido alla fine dell'espansione isoentropica che avviene tra la condizione di ristagno e l'ugello.

Avendo fatto tali assunzioni la velocità sonica e il diametro del notional nozzle risultano essere definiti nel seguente modo:

$$d_{ps} = d \sqrt{C_d \frac{P_2}{P_3}} \quad (3.15)$$

$$u_3 = \sqrt{R\gamma T_3} \quad (3.16)$$

3.5 Schefer

Anche questo metodo per determinare le proprietà del fluido sul diametro fittizio risulta analogo a Birch1987 poiché basato su equazioni di conservazione di massa e momento. Vi sono due ulteriori considerazioni da fare, ovvero che si suppone non avere perdite date dalla viscosità del fluido e si consideri avere un profilo di velocità uniforme lungo la sezione del foro fittizio.

La sostanziale differenza tra gli approcci sta nel fatto che, per calcolarsi le caratteristiche del fluido sul foro, nei precedenti approcci venivano utilizzate le equazioni di stato dei gas perfetti, mentre Schefer le ricava risolvendo le equazioni di Abel-Noble, le quali descrivono il comportamento dei gas reali. Equazioni che permettono di calcolarsi i valori caratteristici del flusso, dopo una espansione isoentropica con pressione di ristagno iniziale superiore a $170bar$, nel seguente modo:

$$P = \frac{\rho R_{H_2} T}{1 - b\rho} \quad (3.17)$$

dove si hanno $b = 7.691 \times 10^{-3} m^3/kg$ e $R_{H_2} = 4124 Nm/kgK$.

Questa ultima equazione viene utilizzata per calcolare la pressione di ristagno del serbatoio:

$$\rho_1 = \frac{P_1}{P_1 b + R_{H_2} T_1} \quad (3.18)$$

Supponendo un'espansione isoentropica e un flusso sonico nella sezione 2 è possibile ricavarsi la densità del fluido in quelle specifiche condizioni di velocità, pressione e temperatura:

$$\left(\frac{\rho_1}{1 - b\rho_1} \right)^\gamma = \left(\frac{\rho_2}{1 - b\rho_2} \right)^\gamma \left[1 + \frac{\gamma - 1}{2(1 - b\rho_2)^2} \right]^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (3.19)$$

Successivamente si possono calcolare temperatura, pressione e velocità nella sezione del foro:

$$T_2 = \frac{T_1}{1 + \frac{\gamma-1}{2(1-b\rho_2)^2}} \quad (3.20)$$

$$P_2 = \frac{\rho_2 R T_2}{1 - b\rho_2} \quad (3.21)$$

$$u_2 = \frac{1}{1 - b\rho_2} \sqrt{\gamma R T_2} \quad (3.22)$$

3.6 Harstad

Harstad in [8] considera la posizione del foro fittizio immediatamente a valle del disco di Mach, assumendo che quest'ultimo e il foro abbiano la stessa area. Inoltre, si ipotizza che la pressione nel foro fittizio sia uguale a quella atmosferica. Approccio che si basa sulla conservazione di massa, quantità di moto ed energia e definisce il diametro del foro fittizio nel seguente modo:

$$d_{ps} = d_2 \left(\frac{\rho_0}{\rho_{ps}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.23)$$

Per quanto riguarda la velocità, si assume che essa sia determinata applicando i principi di conservazione della quantità di moto e dell'energia durante il processo di espansione. Essa è espressa dalla seguente equazione:

$$u_{ps} = \sqrt{\frac{2\Delta p}{\rho_{ps}} + u_2^2} \quad (3.24)$$

Con Δp che indica la variazione di pressione tra l'interno dell'ugello ed il foro fittizio. Una ulteriore considerazione da fare sulla velocità è che, a differenza dei precedenti approcci, nel modello di Harstad si considera che il fluido, mentre attraversa la sezione fittizia, abbia velocità molto inferiore a quella che avrebbe in condizioni di moto sonico.

Per quanto riguarda la pressione si considera pari a quella ambiente poiché tale modello assume una rapida espansione fino a pressione ambiente.

Infine, la temperatura risulta pari a:

$$T_{ps} = T_2 \left(\frac{P_{ps}}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (3.25)$$

3.7 Confronto tra metodologie

Definite le quattro tipologie di approccio il passo successivo è comprendere quale approssima al meglio la dinamica fisica del moto del getto, per tale motivo si vanno a confrontare i modelli analizzati con esperimenti reali. In tal modo si ha la possibilità di fare un confronto tra i valori trovati sperimentalmente e quelli ricavati dai modelli in modo da vedere quale approssima meglio il comportamento del getto per la tipologia di analisi che si vuole effettuare.

3.7.1 Modelli di turbolenza

In una analisi CFD la turbolenza può essere simulata sia tramite modelli RANS, sia tramite modelli LES. I modelli RANS sono più leggeri dal punto di vista computazionale, ma allo stesso tempo risultano meno accurati sulla rappresentazione della diffusione del gas, al contrario i modelli LES richiedono un maggiore sforzo computazionale ma rappresentano in modo più fedele alla realtà i fenomeni turbolenti. Per questo confronto fra modelli si utilizzano differenti tipologie di equazioni con cui vengono risolte le equazioni della turbolenza, quelle prese in considerazione per questa analisi sono tre: $k - \epsilon$, Shear Stress Transport (SST) ed il baseline (BSL) $k - \omega$.

Il modello $k - \epsilon$ è un modello RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) in cui “ k ” rappresenta l’energia cinetica turbolenta ed “ ϵ ” indica la dissipazione di tale energia. Le equazioni che compongono tale modello sono in grado di legare i fenomeni di turbolenza al gradiente di velocità medio, risulta inoltre ottimo per simulare flussi lontani dalle pareti e con un costo computazionale inferiore rispetto ai successivi modelli.

Il modello SST è dato dalla combinazione $k - \omega$ vicino alle pareti e $k - \epsilon$ lontano dalle pareti, risulta ottimo per simulare i vortici della turbolenza e le onde d’urto che si creano nella zona esterna del getto poiché riproduce in modo molto accurato la separazione del flusso e le componenti di moto in direzione di taglio. Risulta essere il metodo più accurato per la rappresentazione del caso reale però ovviamente rispetto agli altri due modelli citati sarà necessario un maggiore sforzo computazionale.

Infine, il modello BSL è un modello SST semplificato, che non tiene conto degli effetti che sono causa della separazione del getto, è inoltre meno sensibile ai cambiamenti della griglia e per tale motivo risulta più stabile. Modello che risulta meno accurato rispetto al modello SST ma comunque più accurato rispetto al modello $k - \epsilon$ per simulare il comportamento a parete del fluido.

Ogni modello analizzato sarà risolto con ognuna di queste tipologie di equazione per la turbolenza in modo da definire la migliore combinazione per una simulazione ottimale.

3.7.2 Confronto tra approcci "notional nozzle" per la simulazione di un getto libero sottoespanso

Un esempio di confronto è descritto in [9], nel testo si analizza un getto uscente da un foro che va dai 0.25mm a 1mm , mentre la pressione è fatta variare in un range tra 20bar e 250bar . Per evitare che il suolo influenzi l'andamento del getto il foro viene posizionato ad una distanza di 0.9m dal suolo. I valori di concentrazione di idrogeno di cui si parlerà in seguito saranno campionati ad una distanza fissa dall'uscita del getto che sarà pari a 0.75m , 1.5m e 2.25m .

Variando i parametri in termini di pressione iniziale di ristagno e diametro del foro di uscita sono stati realizzati tre esperimenti con cui paragonare i modelli, le quali condizioni iniziali vengono riportate in tabella 3.2 (valori che fanno riferimento ad un gas reale):

Test No.	Nozzle diameter (mm)	Pressure (bar)	Flow rate (10^{-3} kg/s)	Distance from nozzle (m)
HD35-37	1	54.6	2.46	0.75
		52.1	2.35	1.5
		53.1	2.39	2.25
HD00-02	0.75	113.3	2.87	0.75
		104.8	2.66	1.5
		99.6	2.53	2.25
HD22-24	0.25	162.8	0.46	0.75
		160.4	0.45	1.5
		162.1	0.46	2.25

Figura 3.2: Parametri settati per casi sperimentali

Per quanto riguarda invece i diversi modelli si può notare che analizzando la stessa tipologia di getto, avendo differenti metodi per calcolare le condizioni al contorno, si avranno anche differenti campi di velocità iniziali sulla sezione fittizia.

I parametri iniziali di setup delle simulazioni per verificare l'accuratezza dei modelli sono i seguenti: per poter raggiungere una situazione stazionaria la durata della simulazione deve essere almeno di 10s, la griglia che viene utilizzata ha un raffinamento fine. Come condizioni di ristagno si considerano una pressione atmosferica di 1bar ed una temperatura di 14.5°C. Il gas viene considerato come reale e vengono presi in considerazione gli effetti della energia cinetica. La velocità e la temperatura calcolate con l'approccio del notional nozzle sono impostate come condizioni al contorno nella sezione di ingresso del fluido. In tutte le simulazioni viene inoltre considerata una turbolenza del 5% in ingresso e mentre il getto si espande all'interno dell'ambiente, tale valore successivamente tenderà ad aumentare con un incremento del 5%. Il dominio all'interno del quale si studia il getto è considerato essere una stanza di dimensioni 15m x 10m x 10m, della quale il suolo ed il soffitto, insieme alle pareti, vengono definiti come pareti, mentre il piano in ingresso e quello di uscita sono aperti.

Per quanto riguarda le caratteristiche di un getto turbolento in uscita da un foro (schematizzato in 3.3), si considera che: nella regione in cui si ha un elevato numero di Reynolds ($Re > 10^4$), la quale si trova ad una distanza tale da rispettare $x/d > 30$, la velocità a distanza $r/2$ dall'asse del getto è pari alla metà della velocità che si ha nell'asse del getto. Più in generale la velocità e la metà del raggio variano secondo le seguenti equazioni:

$$\frac{U_0(x)}{U_j} = \frac{B}{\frac{(x-x_0)}{d_j}} \quad (3.26)$$

$$r_{1/2}(x) = S(x - x_0) \quad (3.27)$$

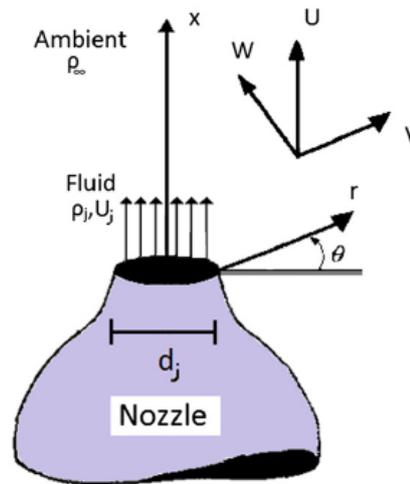


Figura 3.3: Schema di coordinate di un getto rotondo

Dove B ed S sono due costanti empiriche e x_0 l'origine del getto, secondo Pope [10] le costanti sono indipendenti dal numero di Reynolds (Re) e valgono rispettivamente 5.8 e 0.094.

Come si è già descritto in precedenza in un getto turbolento si possono distinguere tre diverse regioni: una più vicina al foro il cui regime è supersonico in quanto dominato dall'elevato momento, una regione intermedia ed infine la zona più lontana in cui si ha un regime largamente subsonico in cui il fluido tende a stabilizzarsi nella condizione di equilibrio. Considerando un caso sperimentale in cui si ha un valore del numero di Mach basso (si considera quindi una riproduzione del getto nella zona dopo il disco di Mach) si può notare che velocità e temperatura variano in modo differente a seconda del punto lungo l'asse del getto in cui vengono misurate. Chen e Rodi in [11] stimano che la distanza tra la zona di uscita del getto e quella subsonica sia pari a quanto descritto in equazione (3.28), si avrà quindi la zona supersonica per $x_b < 0.53$. In realtà in [12] Papanicolaou e List dimostrano che la zona supersonica è in realtà più estesa, fino $x_b < 1$.

$$x_b = Fr^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\rho_j}{\rho_\infty} \right)^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{x}{d_j} \right) \quad (3.28)$$

Sempre nella [11] sono riportate le equazioni che esprimono come diminuiscono la velocità e la concentrazione di idrogeno lungo l'asse:

$$\frac{U_c}{U_j} = 6.2 \left(\frac{\rho_j}{\rho_\infty} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{x}{d_j} \right)^{-1} \quad (3.29)$$

$$\frac{C_c}{C_j} = 5 \left(\frac{\rho_j}{\rho_\infty} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{x}{d_j} \right)^{-1} \quad (3.30)$$

Nell'articolo [13] Yüceil e Ötügen definiscono un approccio per stabilire la velocità del flusso e la concentrazione in massa di idrogeno lungo l'asse del getto. Analizzando la curva che rappresenta la velocità media in funzione della distanza dall'uscita del foro si determina che la pendenza della retta che approssima la velocità risulta pari a 6.25. Pendenza che diminuisce con l'aumentare del rapporto tra pressione in ingresso e pressione ambiente, ciò sta a significare che più è alta la pressione iniziale più lento sarà il decadimento della velocità del getto.

Nella tabella mostrata in figura 3.4 vengono riportati i valori dei numeri di Reynolds e Froude in uscita calcolati sia sperimentalmente che con i modelli del notional nozzle. Viene inoltre riportata la distanza alla quale diventano predominanti gli effetti del fluido in quiete a valle. In primo luogo si può notare che l'estensione della zona in cui il fluido è in regime supersonico non è la stessa in tutti i casi analizzati, infatti per Harstad si ricava una estensione minore rispetto a quella ricavata con Schefer e Birch1987. Tuttavia tutti gli approcci forniscono estensioni minori rispetto a quella effettiva determinata sperimentalmente.

		Exp.	Birch 1984	Birch 1987	Ewan	Schefer	Harstad
HD35-37 (1 mm)	Re	$1.16 \cdot 10^4$	$6.69 \cdot 10^4$	$8.29 \cdot 10^4$	$5.82 \cdot 10^4$	$8.33 \cdot 10^4$	$4.14 \cdot 10^4$
	Fr	$2.45 \cdot 10^8$	$2.48 \cdot 10^6$	$7.25 \cdot 10^6$	$2.64 \cdot 10^6$	$7.41 \cdot 10^6$	$2.56 \cdot 10^5$
	x (m)	9.71	2.14	2.95	2.21	2.97	1.09
HD00 (0.75 mm)	Re	$8.70 \cdot 10^3$	$7.32 \cdot 10^4$	$9.11 \cdot 10^4$	$6.37 \cdot 10^4$	$9.19 \cdot 10^4$	$4.49 \cdot 10^4$
	Fr	$2.35 \cdot 10^8$	$2.27 \cdot 10^6$	$6.76 \cdot 10^6$	$2.42 \cdot 10^6$	$7.07 \cdot 10^6$	$2.26 \cdot 10^5$
	x (m)	8.63	2.24	3.11	2.31	3.15	1.12
HD01-02 (0.75 mm)	Re	$8.70 \cdot 10^3$	$6.96 \cdot 10^4$	$8.65 \cdot 10^4$	$6.06 \cdot 10^4$	$8.73 \cdot 10^4$	$4.28 \cdot 10^4$
	Fr	$2.47 \cdot 10^8$	$2.39 \cdot 10^6$	$7.10 \cdot 10^6$	$2.54 \cdot 10^6$	$7.40 \cdot 10^6$	$2.38 \cdot 10^5$
	x (m)	8.46	2.18	3.03	2.25	3.07	1.10
HD22-24 (0.25 mm)	Re	$2.90 \cdot 10^3$	$2.93 \cdot 10^4$	$3.65 \cdot 10^4$	$2.55 \cdot 10^4$	$3.70 \cdot 10^4$	$1.79 \cdot 10^4$
	Fr	$6.57 \cdot 10^8$	$5.67 \cdot 10^6$	$1.70 \cdot 10^7$	$6.03 \cdot 10^6$	$1.81 \cdot 10^7$	$5.55 \cdot 10^5$
	x (m)	5.26	1.42	1.97	1.46	2.01	0.707

Figura 3.4: Caratteristiche in uscita del getto

Una volta definite le caratteristiche dell'esperimento e delle tre metodologie prese in analisi, prima di passare al confronto vero e proprio tra esse è importante definire le caratteristiche delle griglie che vengono utilizzate per testare i vari modelli. L'affinamento utilizzato ha una forma conica che si estende fino a $2.3m$ dalla sezione di uscita con un affinamento spinto delle celle, per poi continuare fino a $4m$ di distanza con un ingrandimento della dimensione di quest'ultime. Nella parte di griglia più prossima al foro le celle avranno diametro di dimensioni inferiori di $1/4$ del diametro foro fittizio. La seguente analisi è stata realizzata con quattro differenti tipologie di griglia con diversi gradi di affinamento, analizzando i risultati con i diversi raffinamenti si è confermato che con la tipologia di griglia più fine i risultati ottenuti non dipendevano dalla qualità della discretizzazione.

Per valutare la qualità della metodologia del notional nozzle e dei tre modelli di turbolenza ci si basa sulla loro abilità nel calcolare la frazione in massa di idrogeno e la velocità del getto lungo l'asse nei tre punti di misurazione. Una delle cose che si può notare fin da subito è che le due grandezze in analisi hanno un andamento gaussiano una volta che si è superata la regione in cui il fluido ha un moto supersonico.

Dal momento che il confronto diretto tra risultati sperimentali e quelli simulati risulta complesso dato il numero elevato di simulazioni, si scelgono di utilizzare due indicatori di performance, i quali valutano la dispersione dell'idrogeno nei modelli analizzati. L'errore medio geometrico (MG) tiene conto solo degli errori sistematici su scala logaritmica ed è determinato dalla formula: formula 3.31. (in caso di modello ideale: $MG = 1$). La varianza media geometrica (VG) misura la dispersione dell'errore ed è definito dalla formula: formula 3.32, dove V_0 è il valore misurato sperimentalmente mentre V_p quello previsto.

$$MG = e^{(\ln V_0 - \ln V_p)} \quad (3.31)$$

$$VG = e^{[(\ln V_0 - \ln V_p)^2]} \quad (3.32)$$

Per ogni tipologia di approccio si hanno tre valori che corrispondono ai tre punti differenti in cui misuro le variabili lungo la linea di asse.

Nella figura 3.5 viene mostrato un esempio di grafico in cui sono riportati lungo una parabola i valori minimi di VG corrispondenti ad un determinato valore di MG .

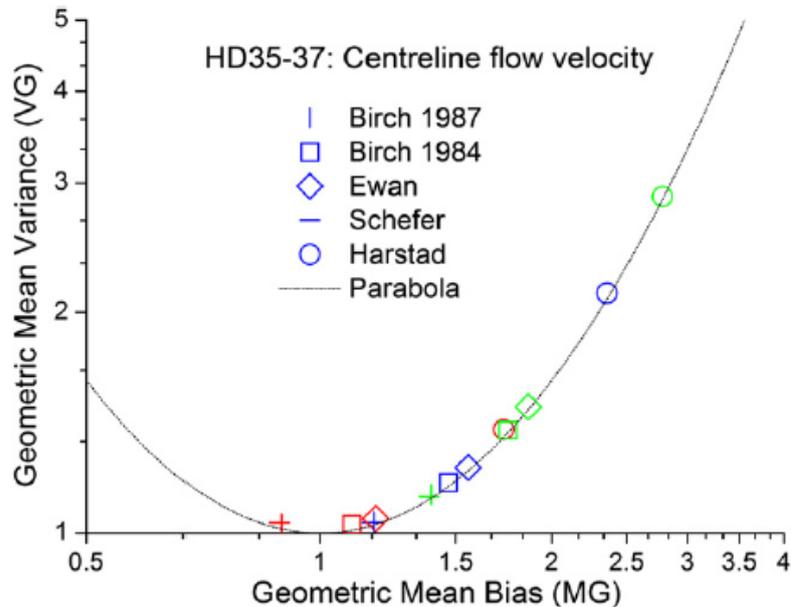


Figura 3.5: Geometric mean bias(MG) e geometric mean variance(VG) per esperimento HD35-37, valori relativi alla velocità nella linea d'asse

Tutti i punti devono trovarsi sulla parabola o al suo interno. Se una serie di punti si collocano molto vicini alla parabola, significa che i valori ottenuti presentano un errore sistematico. Al contrario, se i punti si distribuiscono vicino all'asse centrale in corrispondenza di $x = 1$, ciò indica una dispersione nei risultati. Tutti i punti che si trovano nella parte sinistra del grafico sono caratterizzati da una tendenza a sovrastimare i risultati, mentre quelli sulla destra mostrano una tendenza a sottostimare i risultati. Per avere una perfetta approssimazione tra valori sperimentali e modelli i punti sul grafico devono trovarsi sul vertice della parabola, ovvero nel punto $(1, 1)$.

Di seguito verranno confrontati i vari modelli con i diversi casi sperimentali.

HD35-37: foro con diametro di 1mm e pressione di ristagno 53bar

In generale i modelli tendono a sottostimare la velocità lungo l'asse, eccetto per Birch1987 e Schefer i quali, utilizzano il modello $k - \epsilon$ per risolvere le equazioni della turbolenza, forniscono risultati poco più elevati rispetto a quelli sperimentali.

Nel punto più prossimo all'uscita del getto ($0.75m$) Birch1984 ed Ewan predicano dei valori che sono molto prossimi a quelli sperimentali mentre gli altri due approcci tendono a sottostimano i valori. Anche Birch1987 e Scheffer con i modelli BSL e SST danno valori simili a quelli sperimentali vicino al foro. Harstad con i modelli BSL e SST fornisce i valori meno accurati rispetto agli altri approcci, risulta infatti l'approccio che tende a restituire valori con la più alta tendenza ad essere sottostimati. In generale si può affermare che il modello per la risoluzione delle equazioni di turbolenza più realistico è il modello $k - \epsilon$, il quale fornisce valori più prossimi al vertice della parabola. Il fatto che i punti si trovano vicini o sopra la parabola, come si vede in figura 3.5 dimostra che il rapporto C_0/C_p rimane pressoché costante nei tre differenti punti lungo l'asse in cui lo si misura.

La linea che rappresenta i valori sperimentali della velocità, visibile in figura 3.6, è più bassa rispetto i valori ricavati da Chen e Rodi dell'1.2%, mentre per Birch1984 i valori si discostano da quelli sperimentali di valori percentuali che vanno dal 5% al 54% a seconda dell'equazione della turbolenza utilizzata. Per Birch1987, Ewan e Schefer i valori più accurati si hanno con il modello $k - \epsilon$, Harstad al contrario fornisce valori estremamente lontani, differenza che risulta particolarmente rilevante solamente per quanto riguarda il primo punto a $0.75m$ sulla linea d'asse.

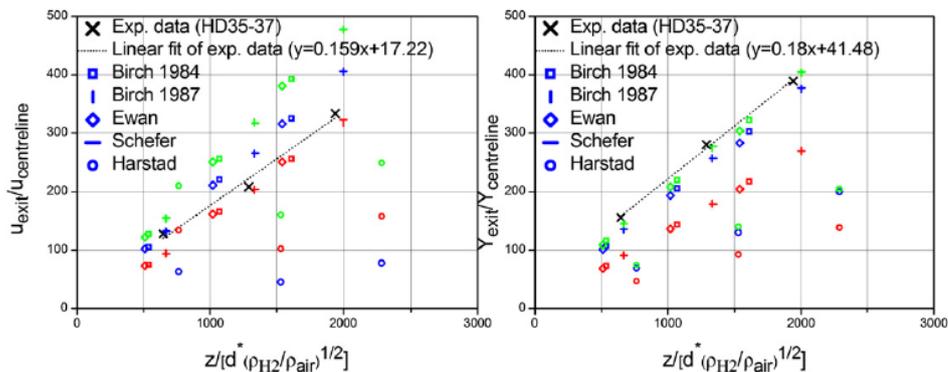


Figura 3.6: Sulla sinistra vi sono i valori della velocità lungo l'asse del getto e sulla destra i valori della concentrazione di H_2 (in verde sono rappresentati i valori ottenuti con il modello SST, in blu il BSL ed in rosso il $k - \epsilon$)

Sempre in figura 3.6, sulla destra, viene riportata la concentrazione di idrogeno in funzione del diametro del foro e della distanza da esso. Si può notare che la pendenza della retta che approssima i valori ricavati con Birch1984, rispettivamente con i modelli BSL e SST, è più alta dell'1% e 6% rispetto ai valori sperimentali, mentre per il modello $k - \epsilon$ è più bassa del 25%. Ewan e Schefer hanno la stessa tendenza in termini di pendenza della linea che approssima i valori, i modelli più veritieri risultano essere BSL e SST, mentre Harstad risulta l'approccio peggiore tra quelli proposti in quanto quello i cui valori si discostano di più da quelli sperimentali.

Nella figura 3.7 si può notare che, per quanto riguarda la frazione in massa di H_2 , si ha una generale tendenza a sovrastimare i risultati. Birch1984 ed Ewan forniscono una sovrastima per tutti e tre i punti lungo l'asse a prescindere dal modello utilizzato, anche se tuttavia il $k - \epsilon$ risulta il peggiore. Con il modello BSL ed i modelli di Birch1987 e Schefer si ottengono i risultati migliori, mentre si ha una leggera sottostima con il modello SST ed una rilevante sovrastima con $k - \epsilon$. Harstad fornisce valori ampiamente sovrastimati a prescindere dal modello di turbolenza utilizzato. Così come per la velocità anche la frazione in massa non ha un andamento simmetrico rispetto la linea d'asse della parabola, allo stesso modo, indipendentemente dall'approccio il modello $k - \epsilon$ fornisce i valori più prossimi al vertice della parabola, seguito da BSL e SST. Come si può però vedere in figura 3.7 la sovrastima è sempre inferiore a 0.5, eccetto per Harstad che è circa 0.3.

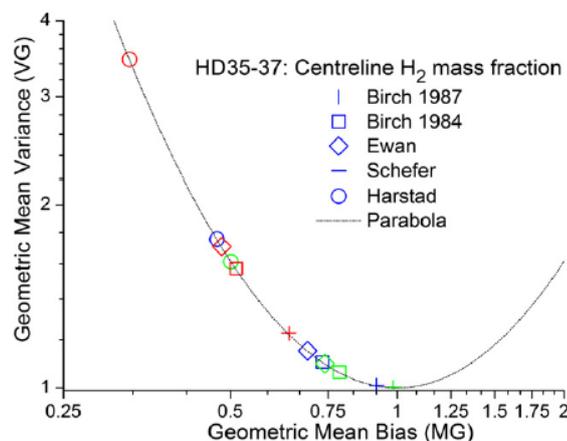


Figura 3.7: MG e VG relativi alla frazione in massa di idrogeno. In blu vengono riportati i valori ricavati dal modello BSL, in verde SST ed in rosso $k - \epsilon$

Un altro parametro che permette di valutare la veridicità degli approcci è l'abilità di predire la velocità di diffusione e la diffusione della frazione in massa di idrogeno. Dai dati riportati in figura 3.8 sulla sinistra si può notare che a prescindere dall'approccio il modello BSL è il migliore per predire la velocità di diffusione, SST la sovrastima mentre $k - \epsilon$ la sottostima, tuttavia si può notare che globalmente tutti i punti sono prossimi alla parabola.

Anche per quanto riguarda la concentrazione di idrogeno sono accurati tutti gli approcci, in particolare BSL e SST. In questo ultimo confronto il modello di Harstad non viene preso in considerazione dal momento che tale fenomeno è rilevante solo nella zona più prossima al foro di uscita, per tale motivo i due punti più distanti da esso sulla linea d'asse non risulterebbero propriamente rappresentati.

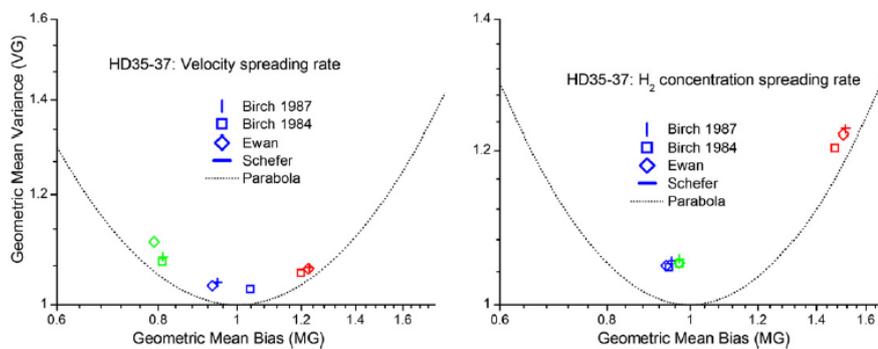


Figura 3.8: MG e VG per la velocità del getto lungo l'asse nel grafico a sinistra e per la concentrazione di H_2 a destra. In verde i valori ricavati con il modello SST, in blu il BSL ed in rosso il $k - \epsilon$

HD00-02: foro con diametro di 0.75mm e pressione di ristagno 110bar

In figura 3.9 si può notare che, come nel caso precedente, vi è una tendenza a sottostimare i valori da parte dei modelli. Si può vedere infatti che Birch1984 ed Ewan con i modelli di turbolenza BSL e SST sottostimano i valori di tutti i punti in cui si misurano le variabili. Gli stessi approcci con $k - \epsilon$ sovrastimano i valori per il punto preso in analisi a 0.75m di distanza, mentre i valori negli altri due punti vengono leggermente sottostimati. Birch1987 e Schefer approssimano bene i valori sperimentali con i modelli BSL e SST, Harstad sottostima invece i valori a

prescindere dal modello di turbolenza.

Come nel caso precedente la maggior parte delle simulazioni produce valori di MG solo nell'intervallo di valori tra 0.5 e 2, come è possibile vedere in figura 3.9. Anche in tal caso si può notare una tendenza a sottostimare ed al fatto che Harstad risulta essere l'approccio meno preciso. Gli approcci analizzati hanno la stessa precisione del caso con setup precedente.

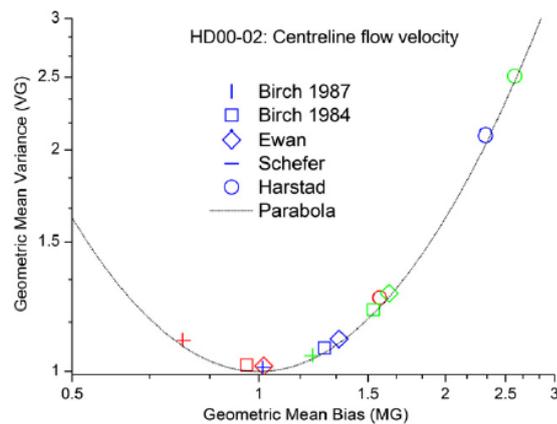


Figura 3.9: MG e VG per velocità lungo linea d'asse nel caso sperimentale HD00-02. In verde il modello SST, in rosso il $k - \epsilon$ ed in blu il BSL.

Allo stesso modo in figura 3.10 è possibile notare che per Birch1984 ed Ewan si ha una peggiore performance con il modello $k - \epsilon$, mentre si ottengono risultati simili a quelli sperimentali per i modelli BSL e SST. I risultati migliori vengono ottenuti utilizzando gli approcci di Birch1987 e Schefer con i modelli di turbolenza SST e BSL.

In generale si può osservare che i risultati di velocità e frazione in massa di idrogeno hanno lo stesso andamento del caso precedente, ovvero che Birch1987 e Schefer forniscono risultati più accurati con i modelli BSL e SST mentre Harstad risulta essere il peggiore con qualsiasi modello di turbolenza.

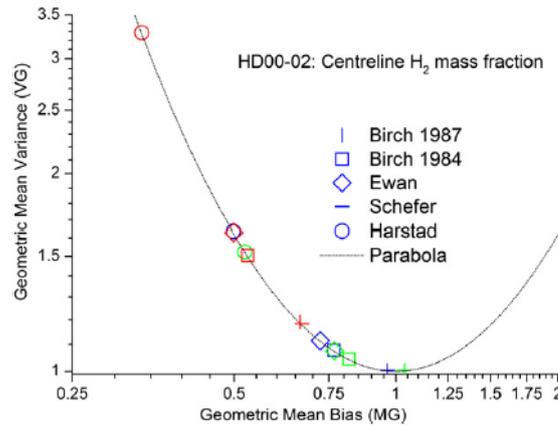


Figura 3.10: MG e VG per la concentrazione di H_2 lungo linea d'asse nel caso sperimentale HD00-02. In verde il modello SST, in rosso il $k - \epsilon$ ed in blu il BSL.

In figura 3.11 sulla sinistra è riportata la velocità lungo la linea d'asse, la retta che approssima i valori sperimentali risulta essere più alta rispetto a quella teorica descritta in [11]. La linea che approssima il modello di Birch1984 al meglio è data dal modello SST, mentre Birch1987, Ewan e Schefer hanno lo stesso andamento ed anche essi performano meglio con il modello SST. Anche in questo caso Harnstad produce i valori che si discostano maggiormente da quelli misurati sperimentalmente. Sulla figura di destra è possibile vedere come varia la quantità di idrogeno lungo la l'asse del getto, anche in questo caso la retta che approssima i valori sperimentali non è coincidente con quella teorica descritta in [14]. Per i primi tre approcci il modello peggiore risulta essere il $k - \epsilon$.

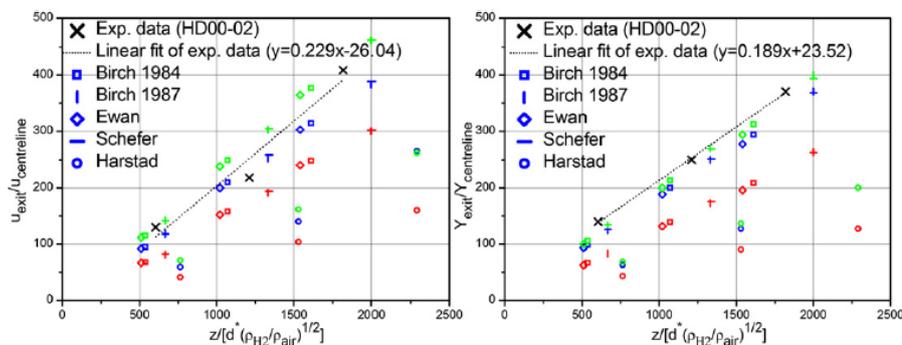


Figura 3.11: Sulla sinistra si hanno i valori normalizzati di velocità e sulla destra quelli della concentrazione di H_2 confrontati con il caso sperimentale HD00-02. In verde si ha il modello SST, il blu il BSL ed in rosso il $k - \epsilon$.

In figura 3.12 sono riportati i valori di MG e VG di velocità e frazione in massa. In tal caso, se si considera la velocità, il modello che approssima meglio risulta essere il k-epsilon poiché gli altri due sovrastimano il tasso; tuttavia, tali valori risultano comunque accettabili poiché non sono eccessivamente sovrastimati. Anche per quanto riguarda la frazione in massa i modelli lavorano bene non discostandosi eccessivamente dai valori sperimentali, eccetto per il $k - \epsilon$.

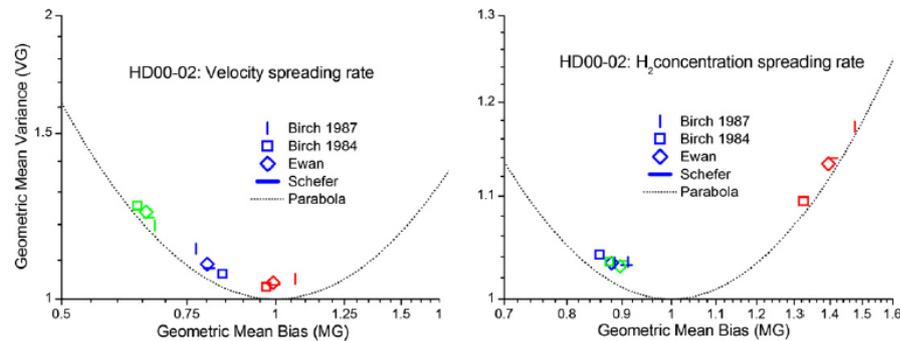


Figura 3.12: MG e VG per la velocità sulla sinistra e per la concentrazione di H_2 sulla destra, riferiti al caso sperimentale HD00-02. In verde si ha il modello SST, il blu il BSL ed in rosso il $k - \epsilon$.

HD22-24: foro con diametro di 0.25mm e pressione di ristagno 160bar

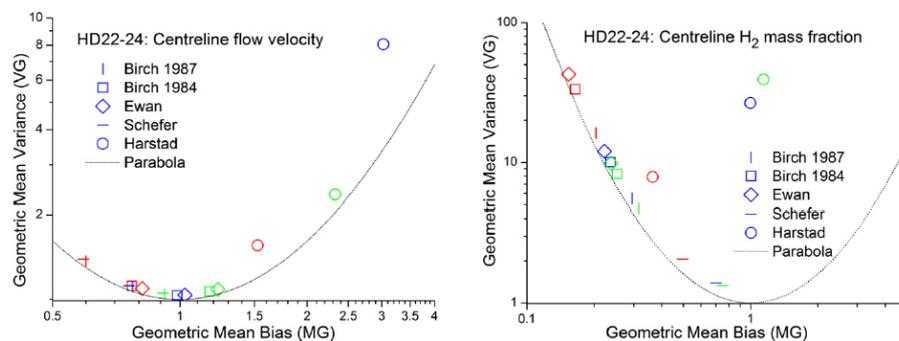


Figura 3.13: MG e VG per la velocità sulla sinistra e per la concentrazione di H_2 sulla destra, riferiti al caso sperimentale HD22-24. In verde si ha il modello SST, il blu il BSL ed in rosso il $k - \epsilon$.

In questo caso tutte le simulazioni eseguite con i differenti approcci sovrastimano la velocità nel punto più vicino al foro di uscita, eccetto per il modello di Harstad,

come è possibile osservare in figura 3.13. Birch1987 e Schefer con l'uso del modello $k - \epsilon$ sono i modelli che si discostano di più dai valori sperimentali, Birch1984 e Ewan hanno una sovrastima con il modello $k - \epsilon$ ma si ha una leggera sottostima con BSL e SST.

Per quanto riguarda la predizione della frazione in massa di idrogeno tutte le simulazioni la sovrastimano in modo non accettabile, specialmente Birch1984 ed Ewan con il modello $k - \epsilon$, come è possibile osservare a destra in figura 3.13.

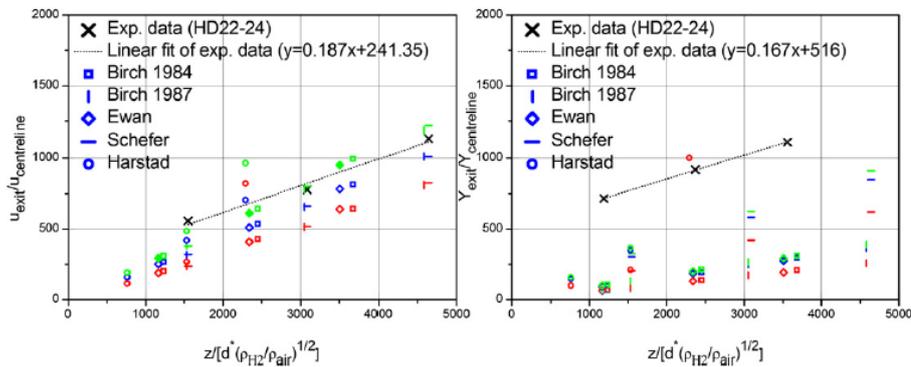


Figura 3.14: Sulla sinistra la velocità lungo l'asse del getto normalizzata e sulla destra la concentrazione in massa di H_2 , riferiti al caso sperimentale HD22-24.

In verde si ha il modello SST, il blu il BSL ed in rosso il $k - \epsilon$.

Se si analizzano le rette, rappresentate in figura 3.14, che approssimano i valori notiamo che la linea che rappresenta gli esperimenti è più alta di quella teorica del 160% per la velocità e 34% per la frazione in massa. Le pendenze delle rette che rappresentano le simulazioni sono più basse, sia per velocità che per frazione in massa, di quelle sperimentali. Harstad, come per i casi precedenti, non risulta corretto per rappresentare le condizioni del getto nelle zone più lontane dalla sezione di uscita del foro.

Tutti i risultati ottenuti, sia quelli ricavati dai modelli che quelli sperimentali, devono essere confrontati con l'andamento a parabola definito in letteratura. Le simulazioni con l'utilizzo del diametro fittizio e le prove sperimentali sono realizzate con le stesse condizioni iniziali di pressione e temperatura, come si è visto dall'analisi precedente, andando a variare il diametro del foro si ottengono diversi gradi di precisione.

Infatti, più il diametro dell'ugello diminuisce più la precisione e la validità di questa semplificazione diminuisce.

Per quanto riguarda i valori ricavati dal notional nozzle, i risultati si possono dividere in tre categorie in base alla similitudine tra gli andamenti, Birch1987 e Schefer sono gli approcci che si avvicinano di più ad avere risultati simili a quelli sperimentali, in ordine poi ci sono Birch1984 e Ewan ed in ultimo Harstad che è quello che si discosta di più dai risultati desiderati.

Comparando solo gli approcci notional nozzle si ha che quelli più performanti sono Birch1987 e Schefer poiché tengono conto delle equazioni di momento ed energia, seguiti da Birch1984 ed Ewan e per ultimo Harstad. Per i modelli di turbolenza, che determinano la miscelazione dell'idrogeno, i modelli che approssimano meglio i valori sperimentali sono, in ordine, il SST, BSL ed infine $k - \epsilon$. Per quanto riguarda la velocità il modello $k - \epsilon$ è migliore con l'approccio Birch1984 ed Ewan, mentre SST e BSL sono più realistici con Birch1987 e Schefer.

Per quanto riguarda i risultati sperimentali, rispetto ai valori ipotizzati in letteratura, si nota che si approssimano meglio per valori del diametro del foro di uscita più grandi e per una pressione di ristagno minore.

Come conclusione di questo primo confronto vengono riportati in tabella 2 i valori riassunti delle grandezze fisiche che possiede il fluido sulla sezione fittizia, a seconda della dimensione del diametro reale dell'ugello e della pressione del fluido nel serbatoio di ristagno a monte del foro. Per ognuno di questi casi vengono riportati i valori calcolati sia sperimentalmente che con i diversi modelli del notional nozzle. I valori da impostare come condizioni al contorno per simulare un getto sottoespanso nella zona dopo il disco di Mach risultano essere i seguenti:

Approach	Temperature (K)	Density (kg/m ³)	Velocity (m/s)	Diameter (10 ⁻³ m)	Mass flow rate (10 ⁻³ kg/s)	Momentum flow rate (kg m ² /s)	Enthalpy flux (kJ/s)	Net rate of energy flow (10 ³ kJ/s)
HD35-37 (1 mm nozzle diameter, 53.27 bar)								
Birch1984	287.6	0.0854	1292	5.262	2.4	3.1	10.2	2.01
Birch1987	287.6	0.0854	1984	4.247	2.4	4.76	10.2	4.73
Ewan	238.8	0.1029	1178	5.024	2.4	2.83	8.58	1.67
Schefer	287.6	0.0854	2001	4.228	2.4	4.81	10.2	4.82
Harstad	278.4	0.0882	510	8.241	2.4	1.23	9.92	0.32
Exp. data	237	2.74	1200	1.0	2.4	2.88	57.2	1.78
HD00 (0.75 mm nozzle diameter, 113.3 bar)								
Birch1984	287.6	0.0854	1292	5.754	2.87	3.71	12.2	2.41
Birch1987	287.6	0.0854	1999	4.626	2.87	5.74	12.2	5.75
Ewan	238.8	0.1029	1178	5.492	2.87	3.38	10.3	2.00
Schefer	287.6	0.0854	2036	4.584	2.87	5.85	12.2	5.96
Harstad	278.6	0.0882	503	9.079	2.87	1.44	11.9	0.37
Exp. data	235	5.59	1221	0.75	2.87	3.50	133	2.27
HD01-02 (0.75 mm nozzle diameter, 102.2 bar)								
Birch1984	287.6	0.0854	1292	5.471	2.59	3.35	11.1	2.18
Birch1987	287.6	0.0854	1998	4.399	2.59	5.19	11.1	5.19
Ewan	238.8	0.1028	1178	5.223	2.59	3.06	9.27	1.81
Schefer	287.6	0.0854	2031	4.363	2.59	5.27	11.1	5.36
Harstad	278.6	0.0882	504	8.626	2.59	1.31	10.7	0.34
Exp. data	235	5.08	1217	0.75	2.59	3.16	110	2.03
HD22-24 (0.25 mm nozzle diameter, 162 bar)								
Birch1984	287.6	0.0854	1292	2.303	0.46	0.59	1.96	0.39
Birch1987	287.6	0.0854	2004	1.849	0.46	0.92	1.96	0.93
Ewan	238.8	0.1028	1178	2.199	0.46	0.54	1.64	0.32
Schefer	287.6	0.0854	2055	1.827	0.46	0.95	1.96	0.97
Harstad	278.7	0.0881	500	3.645	0.46	0.23	1.90	0.06
Exp. data	234	7.76	1239	0.25	0.46	0.57	29.4	0.38

Figura 3.15: Condizioni sul diametro fittizio

Capitolo 4

Comportamento del getto a valle: impatto con ostacolo verticale

4.1 Simulazione di un getto sottoespanso ad alta pressione che impatta un ostacolo verticale

Per poter simulare in modo più rapido i getti fortemente sottoespansi, come si è già descritto in precedenza, si sono sviluppati modelli di ordini inferiori che vanno a studiare il comportamento del getto considerando solamente il comportamento a valle del disco di Mach. Oltre ai modelli descritti nel capitolo precedente in questo capitolo viene analizzato anche un nuovo modello implementato, ovvero il “two-layer partitioning model” che non fa più riferimento alle equazioni di stato dei gas perfetti ma utilizza le Abel-Nobel EOS (Equation of state).

Nell’articolo [15], che si andrà ad analizzare in questo capitolo, con “full CFD simulation” si intende analizzare, con l’utilizzo delle equazioni di Navier-Stokes (relative a continuità, momento ed energia), l’intero getto, andando a simulare sia la parte in cui ho moto supersonico che subsonico. Vi è da fare attenzione però perché una analisi di questo tipo risulta instabile quando deve simulare la struttura degli shock in moto supersonico. Questo metodo richiede un tempo computazionale molto lungo e per tale motivo non risulta appropriato per simulare getti sottoespansi in ambienti vasti.

Questo problema diventa secondario quando l’obiettivo è un’analisi dei rischi per la

sicurezza dell'idrogeno, poiché l'interesse principale si sposta sulla concentrazione di idrogeno lontano dalla regione di sottoespansione.

Per tale motivo il getto sottoespanso può essere assimilato ad un flusso subsonico comprimibile che ha determinate condizioni iniziali di modesta sottoespansione date da assunzioni derivate dalla conservazione di massa, momento ed energia. A tal fine, sono stati sviluppati i diversi approcci per la definizione del notional nozzle precedentemente analizzati. In genere, questi modelli sostituiscono le condizioni al contorno di un getto ad alta pressione con le condizioni di velocità e portata in massa di un gas completamente espanso. In questo modo, si evita di rappresentare le complesse strutture d'urto associate alla sottoespansione, ed evitare così la realizzazione di complesse simulazioni numeriche. Le simulazioni devono comunque essere eseguite sull'intera geometria, ma l'uso del notional nozzle le rende più efficienti, permettendo di concentrarsi sull'evoluzione del getto lontano dalla sezione di uscita, riducendo significativamente i tempi di calcolo.

Per calcolare i valori dei parametri sul notional nozzle sono state utilizzate le equazioni di stato dei gas perfetti, tenendo conto della relazione che vi è tra il flusso prima e dopo il disco di Mach. Modelli sviluppati in seguito invece non si basano più sulle equazioni di stato dei gas perfetti ma sulle equazioni di stato di Abel-Noble. Li in [16] sviluppò il modello "two-layer partitioning" che tiene in considerazione la divisione del gas tra la regione del core e la slip region subito dopo che il getto è uscito dall'ugello. Parte del flusso accelera fino a numeri di Mach molto elevati prima di passare attraverso il disco per poi diventare un flusso subsonico, mentre l'altra parte di flusso si espande nelle regioni circostanti e si va a miscelare con aria. In questo modello le caratteristiche del gas sono ricavate usando le Abel-Nobel EOS. Questo modello è stato validato per getti liberi ad alta pressione, assumendo che nel serbatoio a monte vi sia una pressione pari a 35Mpa .

Data l'elevata pressione a monte, quando si ha lo shock in uscita del foro la pressione è più alta di quella ambiente e per tale motivo il gas all'interno del disco non può essere trattato come un gas ideale. La versione migliorata del modello two-layer partitioning viene utilizzata per simulare la sicurezza di stoccaggio per idrogeno ad alta pressione.

4.2 Two-layer partioning model

In figura viene rappresentato lo schema del modello migliorato:

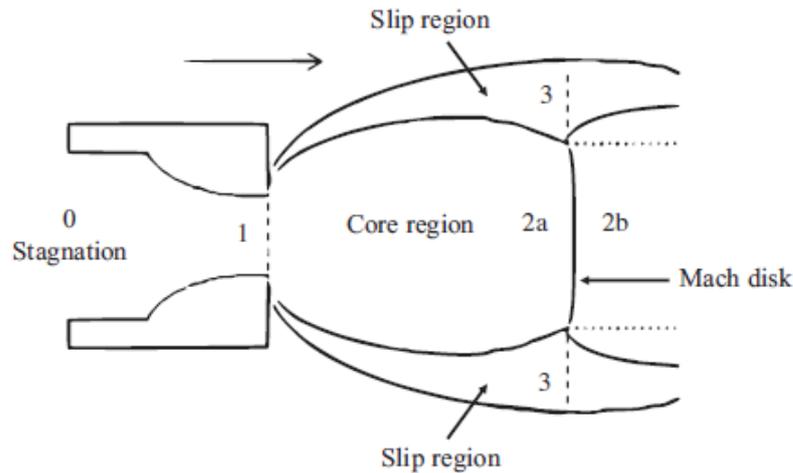


Figura 4.1: Schema "two-layer partioning model"

In questo modello si considera un rapporto tra le pressioni molto maggiore di quello critico per il quale il fluido raggiunge la condizione di blocco sonico, per tale motivo il getto in analisi risulta estremamente sottoespanso. In alcuni studi viene dimostrato che il disco di Mach non ha la struttura di uno shock normale ma presenta una determinata curvatura che deve essere tenuta in considerazione, anche se nelle considerazioni successive non si terrà in considerazione questa caratteristica per semplicità di calcolo.

Il modello assume che il gas si comporti in modo isoentropico andando dalla zona di ristagno (stato 0) nel serbatoio fino alla sezione di uscita dall'ugello (stato 1). La pressione di ristagno si suppone sia più alta della pressione critica così che il gas in uscita si trovi in condizione sonica. A valle della sezione di uscita parte del gas fluisce attraverso la zona centrale del core fino a raggiungere il disco di Mach (stato 2a), superata l'onda di shock la pressione del gas torna ad essere quella ambiente (stato 2b). Il restante gas si espande al di fuori della zona centrale in quella che viene definita slip region, anche definita come la regione del barrel shock, che circonda la regione centrale ed in cui si ha un significativo ingresso di aria proveniente

dall'ambiente esterno. La miscela di gas che si è creata si espande fino ad arrivare a pressione atmosferica (stato 3).

Gli stati 2b e 3 formano due cerchi concentrici che rappresentano le due zone che si andranno a definire nel modello del two-layer partitioning.

Per quanto riguarda l'aria che è presente nell'ambiente a valle si considera possedere velocità nulla nel momento in cui si mescola con l'idrogeno del getto ed è inoltre trattata come un gas ideale.

4.2.1 Portata in massa attraverso il diametro fittizio

Essendoci una condizione di blocco sonico e subendo il gas una espansione isoentropica tra lo stato0 e lo stato1 si può dire che in entrambi gli stati valgono le equazioni di Abel-Nobel EOS:

$$p_1(v_1 - b) = R_g T_1 \quad (4.1)$$

$$p_0(v_0 - b)^\gamma = p_1(v_1 - b)^\gamma \quad (4.2)$$

Dove v è il volume specifico del gas in relazione alla sua densità ρ , b è il coefficiente di co-volume del gas ed è costante per ogni Abel-Nobel gas.

La velocità del gas nello stato1 è uguale alla velocità locale del suono, perciò il numero di Mach risulta pari ad 1. Il valore della velocità è dato dalla velocità del suono calcolata con le Abel-Nobel EOS:

$$U_1 = \frac{v_1}{v_1 - b} \sqrt{\gamma R_g T_1} \quad (4.3)$$

In funzione della entalpia $h = c_p T + bp$ si può ricavare l'equazione dell'energia tra lo stato0 e lo stato1:

$$c_p T_0 + bp_0 = c_p T_1 + bp_1 + \frac{U_1^2}{2} \quad (4.4)$$

Da queste equazioni è possibile ricavarsi i valori di pressione, temperatura, densità e velocità che possiede il fluido quando si trova nella sezione di uscita dell'ugello. Per quanto riguarda invece la portata in massa per una certa pressione di ristagno ed un certo diametro del foro è data da:

$$\dot{m}_1 = \frac{U_1 \pi d_1^2}{4v_1} \quad (4.5)$$

Condizioni sul disco di Mach

Come già detto, il getto ad alta pressione una volta uscito dall'ugello si divide tra la zona centrale del disco di Mach e la slip region che la circonda. Si considera che l'aria non entri nella zona del core ma solo nella slip region e che quindi non ci siano effetti dovuti alla viscosità del fluido tra quest'ultima e l'aria dell'ambiente circostante.

Anche l'espansione dallo stato 1 a 2a si considera essere isoentropica e con una entalpia per unità di massa che si conserva tra i due stati, valgono quindi:

$$h_1 = h_2 = c_p T_{2a} + b p_{2a} + \frac{U_{2a}^2}{2} \quad (4.6)$$

$$p_1 (v_1 - b)^\gamma = p_{2a} (v_{2a} - b)^\gamma \quad (4.7)$$

Una volta che il gas ha superato il disco raggiunge lo stato 2b in cui incontra aria presente nell'ambiente, la quale si trova a pressione atmosferica. La massa di gas, il momento e l'energia si conservano tra lo stato 2a e 2b, perciò si può affermare che valgono:

$$\frac{U_{2a}}{v_{2a}} = \frac{U_{2b}}{v_{2b}} \quad (4.8)$$

$$p_{2a} + \frac{U_{2a}^2}{v_{2a}} = p_{2b} + \frac{U_{2b}^2}{v_{2b}} \quad (4.9)$$

$$c_p T_{2a} + b p_{2a} + \frac{U_{2a}^2}{2} = c_p T_{2b} + b p_{2b} + \frac{U_{2b}^2}{2} \quad (4.10)$$

Ovviamente si avranno velocità di due tipologie di moto differente poiché u_{2a} sarà supersonico, mentre u_{2b} subsonico.

Sia nella zona antecedente che in quella seguente al disco si considera che il gas segua le equazioni di Abel-Nobel quindi pressione, temperatura e densità sono relazionate nel seguente modo:

$$p_{2a}(v_{2a} - b) = R_g T_{2a} \quad (4.11)$$

$$p_{2b}(v_{2b} - b) = R_g T_{2b} \quad (4.12)$$

Per quanto riguarda il flusso in massa si può definire in funzione di velocità, densità e diametro del disco di Mach:

$$\dot{m}_2 = \frac{U_{2b} \pi d_m^2}{4v_{2b}} \quad (4.13)$$

Le dimensioni del diametro del disco possono essere stabilite in vari modi, quello usato in questa analisi è descritto in [17] e conclude che:

$$\frac{d_m}{d_1} = \alpha \frac{z_m}{d_1} \sqrt{1 - \frac{\gamma + 1}{\gamma} \left(\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right)^{-0.5}} \quad (4.14)$$

Dove α è una costante e vale 0.954, z_m è la distanza del disco dalla sezione di uscita dell'ugello ed è determinata da Li in [18] e vale:

$$\frac{z_m}{d_e} = 0.67 \sqrt{\frac{p_0}{p_\infty}} \quad (4.15)$$

dove p_∞ è la pressione del fluido a valle, ovvero quella ambiente.

Questa analisi serve per poter andare a definire i valori da attribuire alle condizioni al contorno della simulazione: \dot{m}_2 , t_{2b} , z_m e d_{2a} . I valori ricavati vengono utilizzati nel modello two-layer partitioning.

4.2.2 Condizioni nella slip region

Nella slip region il gas ad alta pressione si diffonde nell'aria che inizialmente si considera avere velocità nulla, pressione e temperatura atmosferica.

Lo spessore di tale regione viene calcolato dalla equazione empirica descritta in [18] e che vale:

$$\frac{B_m}{d_1} = 0.30 \sqrt{\frac{p_0}{p_\infty}} \quad (4.16)$$

Equazione che varia in funzione del gas che si tiene in considerazione per la simulazione, perciò la precedente risulta valida solo nel caso in cui si stia considerando come gas l'idrogeno.

Le equazioni di massa, momento ed energia sono usate per determinare le caratteristiche della miscela di idrogeno ed aria:

$$\dot{m}_1 - \dot{m}_2 = \frac{U_3 B_{Bm}}{v_{3gas}} \quad (4.17)$$

$$(p_1 - p_\infty) \frac{\pi d_1^2}{4} + \dot{m}_1 U_1 = \dot{m}_2 U_{2b} + U_3^2 A_{Bm} \left(\frac{1}{v_{3gas}} + \frac{1}{v_{3air}} \right) \quad (4.18)$$

$$(\dot{m}_1 - \dot{m}_2) \left(c_p T_1 + b p_1 + \frac{U_1^2}{2} \right) = U_3 A_{Bm} \frac{c_p T_3 + b p_{3gas} + \frac{U_3^2}{2}}{v_{3gas}} + \frac{c_{p3air} (T_3 - T_\infty) + \frac{U_3^2}{2}}{v_{3air}} \quad (4.19)$$

A differenza dell'idrogeno ad alta pressione, l'aria nell'ambiente segue le leggi di stato dei gas perfetti:

$$p_{3gas} (v_{3gas} - b) = R_g T_3 \quad (4.20)$$

$$p_{3air} v_{3air} = R_{g,air} T_3 \quad (4.21)$$

La miscela tra le due tipologie di gas verifica la relazione $p_{3,gas} + p_{3,air} = p_3$.

Considerando insieme a quest'ultima legge l'equazione (4.17) si ricavano le caratteristiche termodinamiche della miscela. La portata in massa in tale regione e la frazione in massa di idrogeno sono calcolate usando le equazioni:

$$\dot{m}_3 = U_3 A_{Bm} \left(\frac{1}{v_{3,gas}} + \frac{1}{v_{3,air}} \right) \quad (4.22)$$

$$Y = \frac{U_3 A_{Bm}}{\dot{m}_3 v_{3,gas}} \quad (4.23)$$

I valori ricavati di \dot{m}_3 , t_3 , B_m , z_m e Y sono utilizzati come condizioni iniziali per la slip region e condizioni al contorno per il modello del two-layer partitioning.

La pressione e la temperatura di ristagno nel serbatoio, il diametro dell'ugello e la pressione ambiente sono usate per calcolare tutti i parametri relativi alla regione del disco e alla slip region.

4.3 Modello Birch1987

Nella rivisitazione del modello si utilizzano le equazioni di Abel-Nobel per tenere in considerazione il comportamento reale del gas dovuto alle alte pressioni.

Il modello fluisce in modo isoentropico dallo stato0 allo stato1, stato in cui il flusso è sonico. Il flusso del gas si considera possedere una velocità uniforme all'uscita dell'ugello. Sia la massa che il momento si conservano tra il foro reale ed il notional nozzle.

Considerando pressione e temperatura pari alle condizioni ambiente, usando le equazioni di Abel-Nobel si ricavano le condizioni del notional nozzle:

$$p_n(v_n - b) = R_g T_n \quad (4.24)$$

dove $p_n = p_\infty$ e $T_n = T_\infty$.

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_n = \frac{U_n \pi d_n^2}{4v_n} \quad (4.25)$$

$$(p_1 - p_\infty) \frac{\pi d_1^2}{4} + \dot{m}_1 U_1 = \dot{m}_n U_n \quad (4.26)$$

Dalle equazioni 4.24 e 4.26 si possono ricavare il diametro del notional nozzle d_n e la velocità del getto u_n , valori che verranno definiti come condizioni al contorno della simulazione.

Nel modello birch non è fondamentale prendere in considerazione la distanza che c'è tra il foro reale dell'ugello ed il notional nozzle.

4.4 Setup simulazione numerica

Nell'articolo preso come riferimento [15] il getto viene simulato sia con il modello "full CFD simulation" sia con i due metodi semplificati di ordine inferiore con lo scopo di predire la distribuzione di idrogeno lungo l'asse del getto. Tutti i modelli utilizzati vanno a risolvere le equazioni 3D di Navier-Stokes con il modello di turbolenza $k-\omega$, le equazioni di energia e trasporto di specie.

La geometria in analisi viene orientata secondo gli assi cartesiani nel seguente modo: in direzione x si posiziona l'asse della sezione di uscita dell'ugello e quindi l'asse del getto, in direzione y si ha la direzione verticale e lungo z quella radiale. Per rendere la simulazione meno pesante a livello computazionale si analizza solo metà della geometria, scegliendo come piano di simmetria il piano $z=0$.

Per ogni simulazione si è utilizzata una griglia a celle esagonali con una discretizzazione che segue uno schema "upwind" di secondo ordine, per quanto riguarda il modello di turbolenza invece si è impostato il modello $k-\omega$. Tutte le selezioni che rappresentano le condizioni al contorno esterne vengono definite come "outlet" con pressione nulla. La simulazione tiene conto di una miscela di aria e gas comprimibile con densità, calore specifico, conduttività termica e viscosità determinate dalla legge che regola la dinamica del mixing tra differenti tipologie di gas. Per quanto riguarda la geometria sia nel modello di Birch che in quello del two-layer partitioning non viene tenuta in considerazione la zona in cui il getto ha moto supersonico, si danno in ingresso le condizioni che il fluido possiede al notional nozzle.

In figura possiamo vedere le due tipologie differenti di griglie usate per simulare i due modelli semplificati:

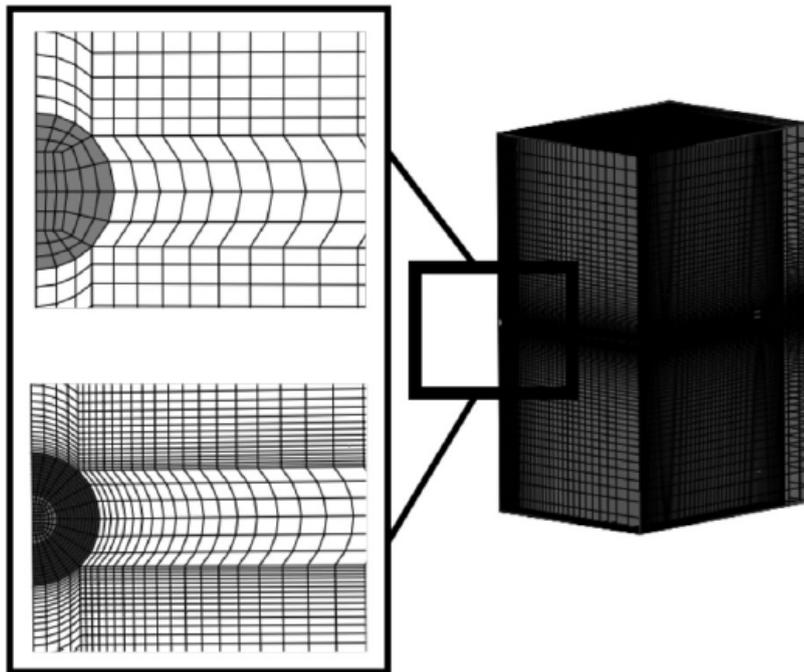


Figura 4.2: Modello semplificato delle due griglie utilizzate, in alto quella per il modello Birch ed in basso quella per il modello two-layer.

Dal momento che il fenomeno fisico che si andrà a simulare risulta semplificato, si può realizzare anche una mesh con un raffinamento più grossolano di quello che si utilizzerebbe simulando anche la parte supersonica.

Nella simulazione di Birch si ha come boundary una condizione di "inlet" che rappresenta il disco di Mach ed ha un diametro pari a $3,303\text{mm}$. Nel modello a due strati si hanno invece due zone concentriche definite come condizioni al contorno di ingresso, la più interna rappresenta il disco di Mach ed ha un diametro di $2,130\text{mm}$, quella più esterna invece ha uno spessore di $0,660\text{mm}$ e rappresenta la slip region. In entrambi i casi il disco di Mach è posto alla stessa distanza rispetto alla sezione di uscita dall'ugello ed è inoltre posizionato in ottica simulazione sul piano $x = 0$ con il centro coincidente con l'origine degli assi di riferimento.

Modelli risolti andando ad impostare la pressione ed utilizzando la densità in alcuni casi per controllare la correttezza della simulazione.

Le condizioni di velocità imposte in ingresso sono in entrambi i casi più basse di quelle che si hanno nella regione del core, prima che il fluido attraversi il disco di

Mach, per questo motivo i due modelli semplificati risultano più veloci nel calcolo e più stabili.

La griglia ottimale per il modello Birch97 che è stata usata nella simulazione possiede approssimativamente 700000 celle, mentre per il modello two-layer partitioning ne bastano 600000.

4.5 Risultati

Dalle simulazioni eseguite vengono ricavati i seguenti dati:

	Improved two-layer partitioning		Revised Birch87
	Mach disk region	Slip region	Notional nozzle
Diameter/thickness (mm)	2.130	0.660	3.606
Gas mass flow (kg/s)	1.52×10^{-4}	3.08×10^{-3}	1.75×10^{-3}
Gas temperature (K)	298.4	136.1	300.0
Gas mass fraction	1.0	0.52	1.0

Figura 4.3: Parametri del flusso ricavati dai modelli Birch e two-layer per un getto con pressione di ristagno a monte del foro di 15Mpa, temperatura di 300K ed un diametro del foro pari a 0.5mm.

I valori ricavati di diametro, portata, temperatura e frazione in massa sul disco vengono dall'analisi di un getto uscente da un ugello con foro di diametro pari a 0,5mm, pressione nel serbatoio di 15Mpa e temperatura di 300K come condizioni di ristagno. La quantità di gas che fluisce attraverso il disco è pari a circa l'8.7% del flusso totale di idrogeno che esce dall'ugello, mentre la percentuale che fluisce nella slip region è pari al 52%.

In figura 4.4 possiamo vedere come varia la concentrazione del gas lungo la direzione assiale del detto. Idrogeno che sarà disposto in maniera simmetrica lungo la direzione ortogonale all'asse e assumendo una forma gaussiana lungo esso.

Man mano che la distanza assiale aumenterà la concentrazione di gas diminuirà, tale variazione di concentrazione si può apprezzare soprattutto avvicinandosi radialmente

all'asse del getto, mentre sarà meno evidente per maggiori distanze radiali.

Le diverse concentrazioni di gas sono dovute ai fenomeni legati alla turbolenza che determinano la miscelazione del gas in pressione con l'aria circostante in condizioni di quiete. Nella zona vicina alla sezione di uscita del gas il getto è determinato dalle condizioni iniziali del momento ed a loro volta le condizioni in cui si trova il gas influiscono sulla concentrazione di idrogeno in aria.

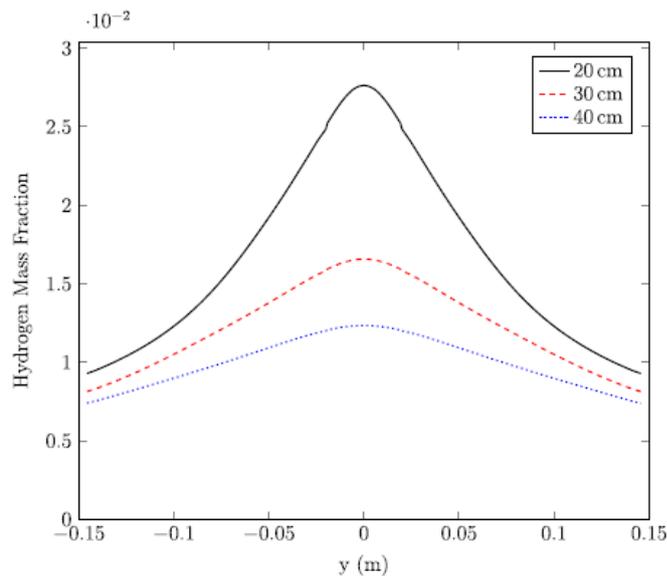


Figura 4.4: Frazione in massa di idrogeno predetta lungo l'asse centrale della parete impattante.

La capacità del modello a due strati di predire la concentrazione di idrogeno in modo accurato e con un ridotto peso computazionale, rispetto ad una completa analisi CFD, lo rende un ottimo modello per valutare ed analizzare problemi relativi alla sicurezza nell'utilizzo di tale gas.

4.6 Implementazione modello in Python

Le equazioni descritte in questo capitolo per calcolare le differenti portate in massa nel foro reale, sul disco di Mach e nella slip region sono state implementate in Python.

I valori ricavati sono relativi a condizioni di ristagno nel serbatoio pari a 300k e 500bar e ad un diametro di uscita di 0.5mm. Le condizioni a valle invece sono

considerate quelle ambienti, ovvero 300k e 101323Pa. Come detto in precedenza le equazioni utilizzate sono quelle di Abel-Noble in cui il covolume (b) per l'idrogeno vale $0.02661e - 3m^3/kg$.

Vengono definite tre differenti funzioni che descrivono velocità, pressione, temperatura e portata in massa sulle sezioni definite di uscita foro, disco e starato di miscelamento esterno. Per quanto riguarda la zona del disco vengono calcolate le caratteristiche termodinamiche appena elencate sia nella zona precedente al disco che in quella successiva. Fatta eccezione per la portata in massa e per la frazione in massa di idrogeno, tra la zona 2a e la zona 2b si hanno valori nettamente differenti di pressione, temperatura, velocità, densità e numero di Mach. Differenza data dal fatto che prima del disco si ha che il fluido è caratterizzato da un moto altamente supersonico, mentre superato il disco la velocità rallenta in modo considerevole fino a raggiungere condizioni subsoniche.

Definite le equazioni ed i parametri iniziali si è utilizzata una funzione "fsolve" ed un array definito come soluzione di primo tentativo per definire i valori sopracitati. Con i valori impostati di pressione e temperatura a valle ed a monte del foro di uscita si è calcolato un diametro del disco di Mach pari a $3.8mm$, per semplicità si è scelto di considerare nelle simulazioni svolte di seguito un diametro del foro di uscita pari a $4mm$.

Per quanto riguarda la temperatura non si utilizzerà quella ricavata dal calcolo pari a circa $341k$ ma verrà impostata a $383k$, ovvero temperatura alla quale la membrana della valvola di sicurezza (TPRD) sulle bombole si rompe lasciando uscire così il gas per evitare che si incendi al suo interno generando un'esplosione.

Capitolo 5

Simulazione getto subsonico

5.1 Geometria

Le simulazioni condotte per lo studio del comportamento di un getto di idrogeno sottoespanso vengono eseguite con una determinata geometria, realizzata con l'utilizzo del software "Salome". Una volta modellata la geometria tridimensionale, il file viene esportato in formato .stl per essere successivamente importato nel software FireM per la simulazione.

La geometria da realizzare è assialsimmetrica, per tale motivo, inizialmente, il dominio computazionale considerato è una sezione di cilindro con un raggio di 150mm e un'altezza di 150mm . Tuttavia, le prime simulazioni hanno evidenziato difficoltà, da parte del software, nel mantenere le condizioni al contorno imposte sul piano di simmetria del cilindro. Per risolvere questo problema, si è scelto di estendere il dominio all'intero cilindro, garantendo una maggiore stabilità nella simulazione, nonostante questa scelta comporti un aumento notevole del tempo di calcolo, ed una corretta rappresentazione di ciò che accade alle caratteristiche del getto.

Al fine di ottimizzare i tempi computazionali, si è successivamente adottata una geometria con un raggio inferiore, pur mantenendolo sufficientemente ampio da consentire l'osservazione del comportamento del getto in direzione radiale, ovvero ortogonalmente alla direzione di propagazione.

La modellazione del dominio è stata effettuata inizialmente attraverso la definizione di uno sketch bidimensionale rappresentante un rettangolo di dimensioni $20\text{mm} \times 150\text{mm}$, seguito dalla sua rivoluzione di 360° attorno al lato più lungo dei due. La geometria finale impiegata nella simulazione corrisponde a un cilindro di 40mm di diametro e 150mm di altezza, ed è rappresentata in figura 5.1. In ultimo si è realizzata, sul piano ortogonale all'asse X , una faccia circolare di raggio 1.8mm che verrà definita come la sezione del foro di ingresso, questo valore è stato scelto in modo tale da poter confrontare i dati ottenuti in questo studio con quelli descritti nel capitolo precedente.

Il cilindro è stato orientato nello spazio in modo tale che il suo sviluppo assiale si estenda lungo l'asse x , mentre il foro da cui fuoriesce il gas è collocato sul piano YZ . La velocità del getto si sviluppa lungo la direzione positiva dell'asse x .

Una volta importata la geometria su FameM, prima di realizzare la griglia, è fondamentale definirne le selezioni, andando ad evidenziare il foro di inlet, le pareti ed il fondo del serbatoio, nel modo illustrato in figura 5.1. Questo passaggio permette di andare a definire, come si vedrà in seguito, le condizioni al contorno e le condizioni iniziali della simulazione.

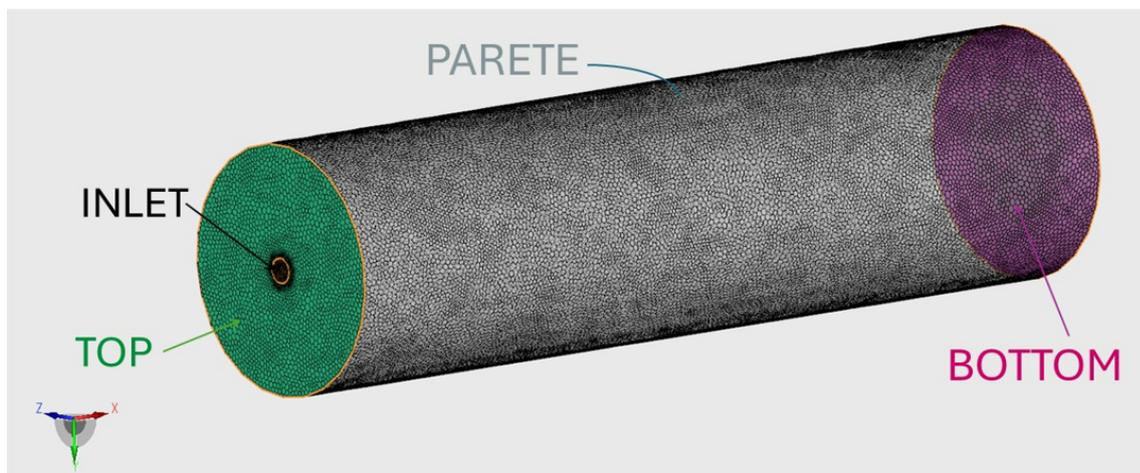


Figura 5.1: Geometria realizzata per la simulazione con relative selezioni in evidenza.

5.2 Griglia

La prima cosa da definire per una corretta realizzazione della griglia è la definizione degli edge, ovvero i bordi del dominio, sia quelli esterni che quelli che dividono le diverse selection, fondamentali per garantire la continuità nodale nella discretizzazione del dominio.

Per quanto riguarda la creazione della griglia l'obbiettivo rimane sempre quello di trovare il giusto compromesso tra una buona qualità della simulazione ed un tempo di calcolo accettabile e quindi non eccessivamente elevato.

Secondo quanto riportato da Hamzeloo nella sua tesi [19], per garantire una buona qualità della griglia, la dimensione massima delle celle dovrebbe essere pari a $4/3$ del diametro dell'orifizio di iniezione, mentre la dimensione minima delle celle dovrebbe essere approssimativamente $D_{foro}/48$.

Questi valori sono definiti da Hamzeloo per lo studio della zona a monte del disco di Mach in cui si ha un regime di moto supersonico, perciò, in questo studio, non è necessario un tale raffinamento spinto. Si è quindi scelto di adottare una griglia con celle di dimensioni più grandi andando quindi a suddividere il dominio in un numero minore di elementi al fine di diminuire il tempo di calcolo.

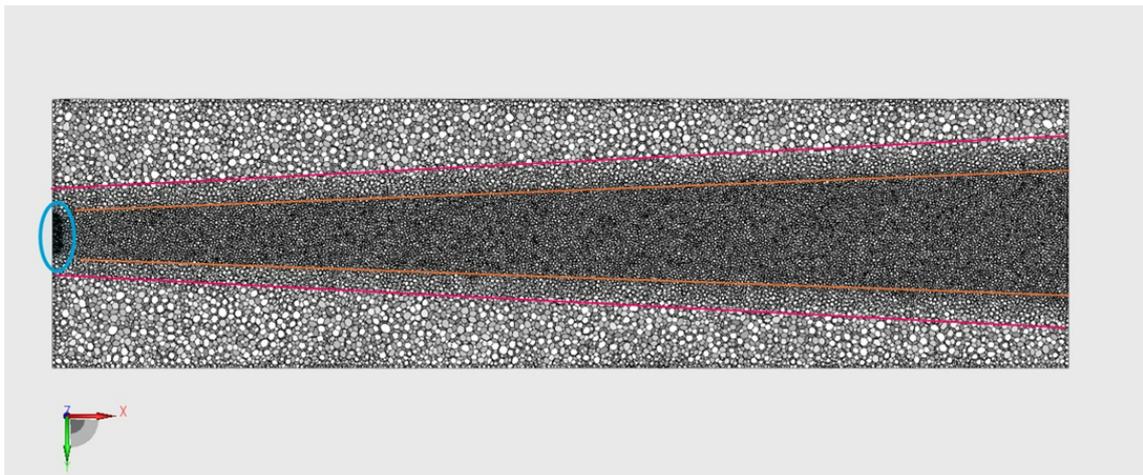


Figura 5.2: Sezione del piano XY in cui sono visibili le zone con i diversi raffinamenti di griglia.

La griglia è stata realizzata con l'utilizzo del meshatore presente in FireM, il quale permette di realizzare una griglia di volume a partire da una geometria 3D e dalla definizione dei relativi bordi. La griglia realizzata è composta da celle poliedriche di varie dimensioni che possono essere distinte in quattro diverse zone di raffinamento. Nella zona esterna in cui l'aria ambiente non viene influenzata in modo rilevante dal propagarsi del getto si è adottato un raffinamento più grossolano, con celle aventi dimensioni massime di $0.8mm$. Le celle con minori dimensioni invece si trovano sulla condizione al contorno di ingresso e hanno una dimensione di $0.2mm$, raffinamento che viene esteso anche all'interno della geometria per uno spessore di $1mm$. Raffinamento evidenziato in azzurro in figura 5.2. Un'elevata risoluzione nella fase iniziale di propagazione del getto risulta cruciale per la stabilità del calcolo, poiché questa regione rappresenta l'area più critica del sistema in analisi. In figura 5.3 viene mostrata frontalmente l'estensione radiale del raffinamento sulla sezione di ingresso e nella zona cercostante.

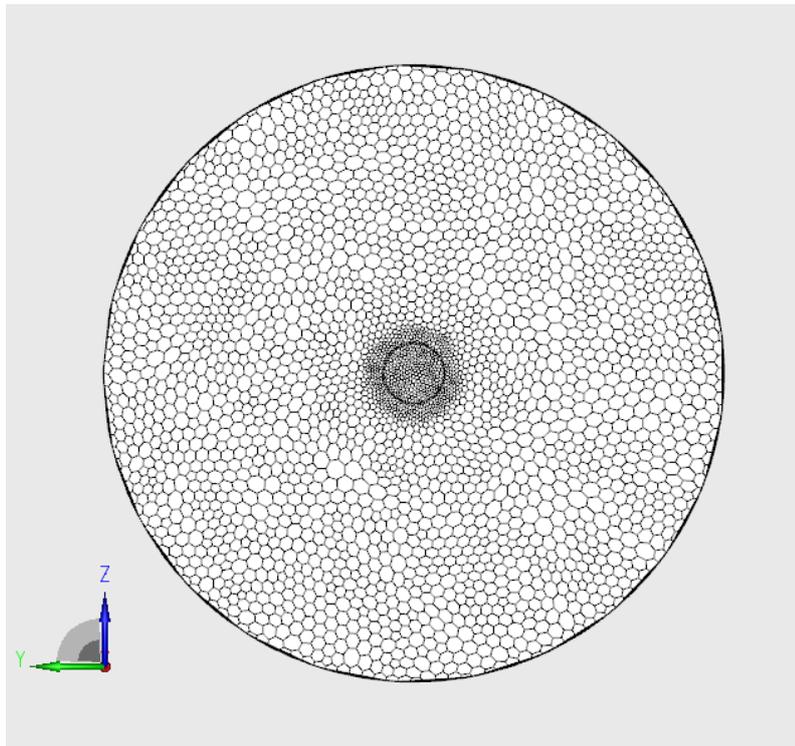


Figura 5.3: Vista completa della griglia sulla sezione di inlet.

Per poter rappresentare al meglio l'evoluzione del getto nell'ambiente si è poi realizzato un raffinamento a forma di tronco di cono, delimitato in figura dalle rette arancioni, con celle di dimensioni di $0.4mm$, raffinamento che si estende per tutta la lunghezza della geometria ed il raggio cresce fino a $10mm$ di lunghezza. Per avere una corretta griglia non è ottimale avere celle di dimensioni $0.4mm$ accanto a celle da $0.8mm$, per tale motivo si è realizzato un ulteriore raffinamento a tronco di cono per ottenere un raffinamento più graduale. Le celle di quest'ultimo sono delimitate dalle rette rosa in figura 5.2 e hanno dimensione di $0.6mm$, si estendono lungo l'asse x per $150mm$ partendo da un raggio di $6mm$ nella zona del foro per poi finire con raggio $12mm$ nel punto più a valle del getto.

Infine, per migliorare la risoluzione delle interazioni tra fluido e geometria, è stato definito uno strato limite sulla parete esterna, caratterizzato da uno spessore di $0.1mm$.

5.3 Setup simulazione

Di seguito verranno illustrate, e poi messe a confronto, due tipologie di setup utilizzate per simulare con l'approccio del Notional Nozzle un getto di idrogeno con condizioni iniziali di moto subsonico.

Le principali differenze di setup riguardano le impostazioni del calcolo numerico. Setup relativo al software AVL Fire 2023 R2.

5.3.1 Durata simulazione e time-step

La prima cosa da determinare è stata la scelta della durata delle simulazioni. Dal momento che l'obiettivo è quello di studiare cosa accade quando si ha un impatto a parete si è scelto un tempo della simulazione pari a $0.005s$, in modo da poter vedere come si evolve la forma del getto a seguito dell'impatto. Tuttavia in questo primo confronto si è analizzata la forma del getto prima che impatti a parete, ad un istante $t=0.0013s$.

Per quanto riguarda invece il time-step, considerando le condizioni soniche in uscita dall'ugello, si è stabilito in [20] e [21] quello ottimale pari a $t_0 = 0.62 \times 10^{-6}s$.

Tale valore ricavato fa riferimento alla condizione in cui si voglia analizzare un fluido in regime di moto supersonico, con valori di pressioni molto più elevate di quelle che si utilizzano in questo elaborato. Per questo motivo si è scelto un time-step più ampio per non avere un tempo di simulazione inutilmente troppo lungo ma allo stesso tempo abbastanza piccolo da garantire la stabilità del calcolo. Un time-step ottimale soddisfa la relazione di Courant-Friedrichs-Levy(CFL):

$$CFL = \frac{|\bar{u}|\Delta t}{\Delta x} \leq CFL_{MAX} \quad (5.1)$$

dove $|\bar{u}|$ è il modulo della velocità del getto, Δt il time-step e Δx la dimensione della cella nella direzione del moto. Se il CFL risulta maggiore del CFL_{MAX} l'informazione ha una velocità che la porta a coprire nel time-step scelto una distanza maggiore a quella delle celle, portando di conseguenza alla divergenza del calcolo in quanto l'informazione va a saltare una o più celle. Ciò significa che il tempo di calcolo è maggiore dell'intervallo di tempo con cui la simulazione va avanti. Il valore di CFL_{MAX} dipende dal tipo di risolutore che si sta utilizzando.

Il time step utilizzato è pari a $t = 0.005ms$, tale valore permette di ottenere un buon compromesso tra qualità risultati, stabilità e durata del calcolo.

5.3.2 Materiale

Per poter simulare idrogeno in pressione che entra in un ambiente pieno di aria è necessario attivare su FireM nella sezione del dominio il modulo “Species Transport”, il quale fornisce tutto il sistema di equazioni necessario per calcolare il trasporto di specie chimiche, liquide o gassose, all'interno del dominio. Attivando tale modulo il risolutore ha la possibilità di calcolare come variano le proprietà termodinamiche dei differenti materiali, definiti dall'utente in seguito, durante il corso della simulazione. Per la definizione dei materiali presi in analisi si ha la possibilità di impostare lo stato di aggregazione, la comprimibilità ed il materiale. Come materiale è stato scelto, tra i materiali presenti nel database del software, il “combustion hydrogen” poiché fornisce la possibilità di definire in un secondo momento la frazione in massa degli elementi presenti nel dominio. La definizione del materiale termina specificando che

si tratta di un gas ed attivando l'opzione "compressible" per far sì che durante la risoluzione delle equazioni di moto dei fluidi si tenga conto dei fenomeni legati alla comprimibilità, aspetto fondamentale dati i fenomeni di espansione e compressione a cui è sottoposto il fluido.

Definendo il gas come comprimibile il risolutore andrà a calcolare la densità attraverso la legge dei gas reali, considerando la seguente formula:

$$\rho = \frac{p}{ZRT} \quad (5.2)$$

con p è la pressione in Pa , T la temperatura in K e R la costante del gas in J/kgK . Rispetto alla legge di stato dei gas perfetti viene aggiunto il fattore di comprimibilità Z che è adimensionale.

5.3.3 Condizioni al contorno e condizioni iniziali

Come già detto in precedenza il modulo Species Transport rende necessario definire la frazione in massa delle specie chimiche presenti nel dominio. In generale si ha che nella sezione di ingresso vi è solamente idrogeno, mentre nel dominio a valle è presente aria, considerandola composta per semplicità solo da ossigeno ed azoto.

Per quanto riguarda le condizioni al contorno si ha la possibilità di definire le specie solamente nelle boundary di Inlet, per tale motivo in ingresso si è settata la frazione in massa di idrogeno pari ad 1. Per la tipologia di boundary impostata nelle restanti zone del dominio il software non fornisce la possibilità di andarne a specificare le componenti.

Risulta possibile però definire la specie dell'ambiente imponendole come condizioni iniziali generali nella sezione "Initial Conditions" in cui si specificheranno le frazioni in massa relative ad ossigeno ed azoto.

Nella tabella riportata in seguito è possibile vedere una schematizzazione delle frazioni in massa impostate.

Nome della sezione	Frazione massa H_2	Frazione massa O_2	Frazione massa N_2
BND Inlet	1	0	0
IC general	0	0.23	0.77

Tabella 1: Tabella riassuntiva frazioni in massa.

Un parametro fondamentale da settare è la pressione. Il software permette di definire in ingresso differenti tipologie di pressione, quelle più adeguate al caso in analisi sono la total, la stagnation e la static. Tuttavia, dopo varie prove di setup, andando a definire in ingresso le varie pressioni, si è visto che la scelta migliore ricade sulla definizione della pressione totale. La pressione impostata sulla boundary è definita come la somma di pressione statica e pressione cinematica (dipendente dalla componente di velocità):

$$p_{totale} = p_{statica} + \frac{\rho |\bar{u}|^2}{2} \quad (5.3)$$

Per quanto riguarda invece la pressione in uscita e nell'ambiente si è imposta una boundary di pressione statica, priva quindi del contributo cinetico poiché si considera il fluido in una condizione di quiete. In modo da garantire che la pressione venga mantenuta nel modo corretto si è imposta la direzione che deve mantenere il flusso, ovvero “normal to boundary”, ortogonale alla sezione a cui si fa riferimento.

Volendo simulare inizialmente un flusso subsonico si è imposta una pressione totale di $1.32bar$ ed una pressione statica di $1.01323bar$. Con tale salto di pressione il valore del numero di Mach risulta pari a 0.6, ampiamente sotto il valore di blocco sonico pari ad 1.

Per quanto riguarda la temperatura si è definita circa una temperatura ambiente a $300K$ su tutto il dominio poiché esso si considera molto maggiore rispetto al diametro del getto, il quale quindi non andrà ad influenzare in modo significativo la temperatura dell'intero dominio. La temperatura in ingresso invece si è scelto di impostarla pari a $383K$ poiché il foro della geometria rappresenta l'uscita di una valvola di sicurezza che prende il nome di TPRD, la quale viene realizzata per

sopportare una temperatura limite pari a 110°C , al di sopra della quale la valvola si apre, lasciando uscire il gas per evitare che si incendi all'interno del serbatoio creando una esplosione.

Supponendo sempre di trovare il fluido in uno stato iniziale di quiete il dominio a valle viene inizializzato con velocità nulla, andando a definire uguali a zero tutte le componenti della velocità nelle diverse direzioni cartesiane. Per quanto riguarda la turbolenza invece nelle due differenti simulazioni viene definita in modi diversi come riportato in tabella 2, i valori di k sono definiti in m^2/s^2 mentre quelli del tasso di dissipazione in m^2/s^3 .

	Caso (a)		Caso (b)	
	k	ϵ	k	ϵ
BND Inlet	0.375	2.943	0.375	2.943
IC	0.05	0.5	0.375	2.943

Tabella 2: Tabella riassuntiva dei valori di energia cinetica turbolenta(k) e tasso di dissipazione(ϵ).

Come si può notare i valori dell'energia cinetica turbolenta e del tasso di dissipazione hanno valori contenuti, in particolar modo nel primo setup, fondamentali per l'inizializzazione della turbolenza con il modello k-zeta-f.

I parametri settati delle condizioni al contorno e delle condizioni iniziali vengono riassunti nelle tabelle seguenti.

	Pressione	Velocità	Energia cinetica		Temperatura	Mass fraction	
			k	ϵ		N_2	O_2
IC	101323 Pa	0 m/s	$0.375\text{m}^2/\text{s}^2$	$2.943\text{m}^2/\text{s}^3$	300K	0.77	0.23

Tabella 3: Tabella riassuntiva dei valori delle condizioni iniziali per entrambi i casi.

Nome boundary	Condizione al contorno	Valore impostato	Temperatura
BND Inlet	Pressure	Ptot=1.32 bar	383K
Top	Wall	No slip wall	300K
Parete	Outlet	Pstatic=1.01323 bar	300K
Bottom	Wall	No slip wall	300K

Tabella 4: Tabella riassuntiva dei valori di setup per entrambi i casi.

5.3.4 Impostazioni calcolo numerico

Per quanto riguarda le discretizzazioni delle equazioni differenziali alle derivate parziali che governano il moto dei fluidi in questo studio si è utilizzato l'algoritmo implicito, basato sulla pressione, SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). Tale algoritmo esprime la correlazione tra pressione e velocità ed è utilizzato nel caso in cui si cerchi stabilità della simulazione piuttosto che velocità per arrivare a convergenza. Possiede inoltre il vantaggio di mantenere la stabilità anche con time-step abbastanza grandi. In alternativa si ha il SIMPLE-PISO (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations con la correzione aggiuntiva sulla pressione tramite l'algoritmo Pressure-Implicit with Splitting of Operators), con cui vengono aggiunte delle correzioni sul calcolo delle pressioni. Ha come vantaggio di arrivare prima a convergenza e risulta ottimale per simulazioni transitorie.

Dal momento che la simulazione è tempo-variante l'algoritmo è caratterizzato da iterazioni, definite dal time-step, e sotto-iterazioni interne che hanno la funzione di correggere le equazioni fino a portare il calcolo a convergenza. Una volta raggiunta la convergenza l'algoritmo passerà all'iterazione successiva. FireM offre la possibilità di impostare sia il numero minimo che il numero massimo di sotto-iterazioni relativi ad ogni iterazione. Si può anche definire un valore di soglia relativo ai residui in ogni sotto-iterazione. Per questa analisi si è scelto un numero minimo di sotto-iterazioni pari a 3 ed un numero massimo di 40, quest'ultimo valore è stato ricavato dopo varie prove e offre il giusto compromesso tra stabilità e tempo di calcolo. Nonostante il

numero massimo di sotto-iterazioni non sia elevato, il calcolo riesce comunque ad arrivare a convergenza senza particolari problemi di stabilità. In caso di difficoltà si potrebbe pensare di aumentare il numero di sotto-iterazioni nei primi time-step per aiutare ad arrivare a convergenza soprattutto nella fase iniziale di propagazione del getto dove il calcolo risulta più complesso. Inoltre, il calcolo delle sotto-iterazioni prosegue finché il residuo di ogni equazione non è inferiore ad un valore soglia impostato dall'utente, a quel punto il programma passa a quella successiva. Una volta raggiunto il numero massimo di sotto-iterazioni impostate il passaggio all'iterazione esterna successiva è forzato. In questo studio si sono utilizzati i valori soglia per i residui normalizzati di default sul software, pari a 1×10^{-4} per tutte le equazioni.

Le derivate sono state calcolate secondo il metodo dei minimi quadrati, e per agevolare il calcolo sono state selezionate delle funzioni di correzione aggiuntive di AVL Fire ovvero la “cell face adjustment – equation” che migliora il calcolo in caso di celle male orientate rispetto al flusso, e la “realizability constraint”, che aiuta a uniformare la soluzione.

Per quanto riguarda i fattori di sottorilassamento invece nel primo caso sono stati utilizzati quelli settati di default dal software, mentre nel secondo si sono apportate delle modifiche andandone ad abbassare alcuni, come mostrato in tabella:

Equazione	Fattore sottorilassamento	
	Caso (a)	Caso (b)
Continuità	0.1	0.1
Momento	0.6	0.2
Turbolence(TKE)	0.1	0.1
Turbolence(TDE)	0.1	0.1
Energy	0.9	0.6
Species	0.8	0.8

Tabella 5: Tabella riassuntiva dei valori dei fattori di sottorilassamento.

I coefficienti sono compresi tra 0 e 1 e vanno a stabilire quanto ogni sottoiterazione di calcolo fa affidamento sui calcoli svolti in quella precedente. Usando valori che si avvicinano a 0 si va ad aumentare la stabilità della soluzione in quanto si va a diffidare molto della soluzione precedente in ogni sotto-iterazione. Al contrario, usando fattori di sottorilassamento che si avvicinano a 1, la stabilità della soluzione diminuisce, ma può portare a una soluzione più rapida.

Anche per lo schema di calcolo si è optato per un setup differente:

Equazione	Caso (a)		Caso (b)	
	Schema di calcolo	Blending factor	Schema di calcolo	Blending factor
Continuità	MINMOD Relaxed	0.5	Central differencing	1
Quantità di moto	MINMOD Relaxed	0.5	Central differencing	0.5
Turbolenza	Upwind		Upwind	
Energia	Upwind		Upwind	
Specie	Upwind		Upwind	

Tabella 6: Tabella riassuntiva dei setup dello schema di calcolo e dei blending factors.

Gli schemi di calcolo utilizzati sono Upwind (del primo ordine), Central Differencing (del secondo ordine) e MINMOD Relaxed (del secondo ordine). Gli schemi del primo ordine favoriscono la stabilità della soluzione ma possono andare a smorzare fenomeni caratterizzati da gradienti elevati e forti discontinuità spaziali (come il fenomeno del disco di Mach). Al contrario gli schemi del secondo ordine risultano più precisi ma possono indurre ad instabilità. Vi è la possibilità di usare un “blending factor”, che varia tra 0 e 1, per andare a fare una media tra uno schema del secondo ordine e l’Upwind, usando così una soluzione intermedia. Un blending factor pari ad 1 indica uno schema di calcolo del secondo ordine puro, mentre usando un blending factor di 0 si avrà uno schema di calcolo del primo ordine puro. Se le equazioni sono tutte Upwind, i blending factor vengono ignorati.

Il setup generale delle equazioni utilizzato in entrambi i casi è quello descritto in tabella:

EQUAZIONE	SETUP
Momentum and Continuity	Yes
Compressibility	Variable density
Turbulence	Yes
Turbulence model	RANS
RANS submodels	k-zeta-f
Turbulence wall model	Hybrid
Turbulence Prandtl number	0.9
Energy	Yes
Variable	Total enthalpy
Viscous heating	Yes
Pressure work	Yes
Wall model	Standard
Scalars	No
Species transport	Yes
Turbulent Schmidt number	0.7
Second order time scheme	Activated

Tabella 7: Tabella riassuntiva dei setup.

Osservando i modelli di turbolenza, oltre a quello utilizzato del $k - zeta - f$ Fire offre la possibilità di utilizzare anche il modello $k - \epsilon$, entrambi sono di tipologia RANS. Le equazioni alla base di tutti e due si basano sulla determinazione dell'energia cinetica turbolenta (TKE) e sul suo tasso di dissipazione (TDR). Nel modello $k - zeta - f$ vi è una componente aggiuntiva per il calcolo della turbolenza che migliora la rappresentazione del comportamento a parete rispetto al $k - \epsilon$. Quest'ultimo modello risulta essere il più stabile ed il più veloce ma quello che a fine simulazione fornisce valori meno accurati, per tale motivo è preferibile usarlo nel caso in cui si vogliono riprodurre salti di pressione contenuti.

5.4 Confronto risultati

I due setup appena descritti si differenziano principalmente, oltre che per i valori di turbolenza iniziali, per la tipologia di solutore che viene scelto per il calcolo delle equazioni del moto. Il seguente confronto avrà come scopo quello di analizzare la qualità dei risultati ottenuti con i differenti schemi di calcolo. A causa dei problemi riscontrati nella simulazione di un getto subsonico imponendo sulla boundary di inlet condizione soniche, si è deciso di semplificare la simulazione per cercare di capire il setup ottimale. Si è quindi impostata in ingresso, come descritto in precedenza, una pressione totale pari a 1.32 bar in modo da avere un salto di pressione moderato. Di seguito verranno confrontati i risultati ottenuti relativi alla prima fase di propagazione del getto, ad un tempo pari a $t = 0.0013s$. Le immagini riportate sono relative ad una sezione di taglio centrata nell'origine del sistema di riferimento ed ortogonale all'asse z .

5.4.1 Pressione

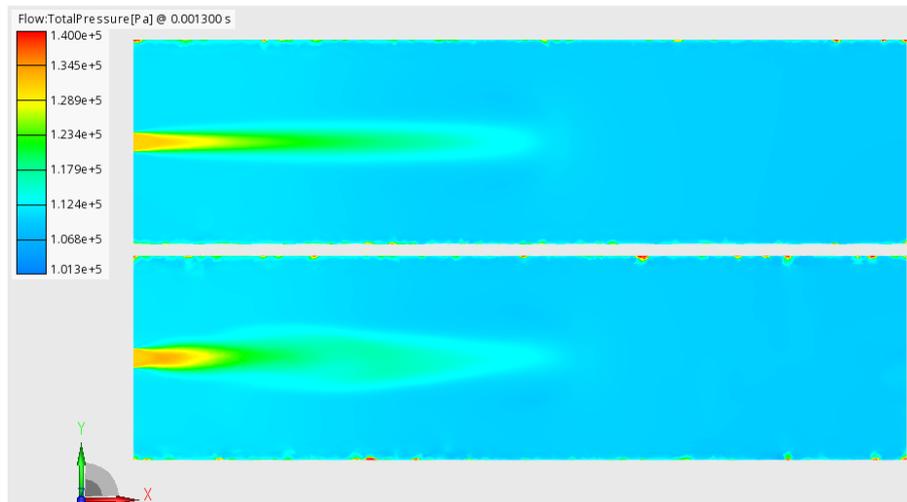


Figura 5.4: Confronto risultati pressione totale con i due diversi setup. Nella figura in alto il setup (a), in quella in basso il setup (b).

Come si può vedere in figura 5.4 la boundary viene mantenuta nel modo corretto ad 1.32bar, pressione totale che si propaga per un tratto all'interno del core del getto

e che poi tende a diminuire, sia in direzione radiale che in direzione assiale, per uniformarsi con la pressione atmosferica.

In figura si può vedere come il setup (a) fornisce un getto con una forma più simmetrica e corretta rispetto al secondo setup, se confrontato con la forma dei getti riportati nei primi capitoli.

Per quanto riguarda la pressione totale il risolutore la calcola sovrastimandola di circa 0.1bar , questo fatto molto probabilmente è dovuto dai troppo elevati valori di turbolenza impostati sulla boundary di ingresso. Sovrastimando la pressione statica e mantenendo la pressione totale coerente con i valori numerici calcolati, ovviamente si ha una sottostima della pressione relativa. Di questo fenomeno ne risentiranno anche tutte le proprietà descritte inseguito.

5.4.2 Velocità

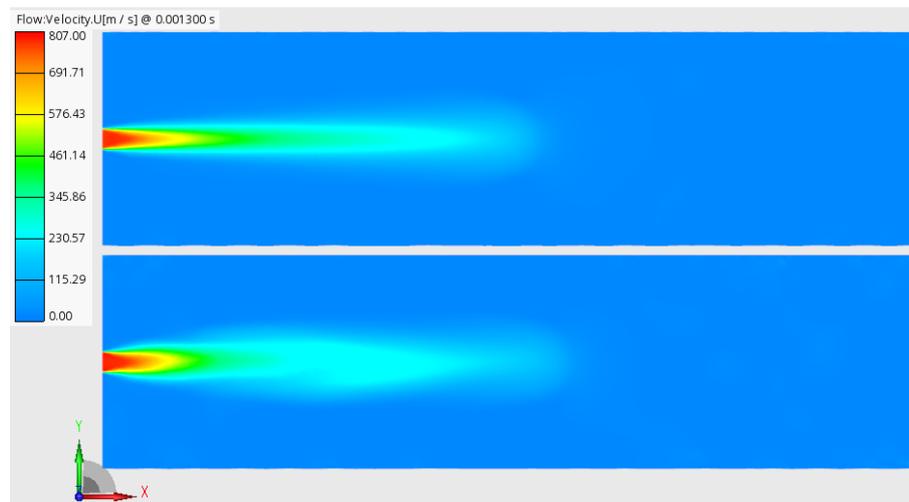


Figura 5.5: Confronto risultati velocità assiale con i due diversi setup. Nella figura in alto il setup (a), in quella in basso il setup (b).

Osservando i valori calcolati relativi alla velocità si può, anche in questo caso, osservare che il primo setup fornisce una struttura del getto migliore, specialmente per la forma che assume la zona centrale che risulta molto più uniforme. Tuttavia, in entrambi i casi è rimasto costante il valore di velocità sulla boundary. Velocità che, come viene descritto in letteratura, è maggiore lungo l'asse del getto per poi diminuire in direzione radiale poiché tende a tornare in uno stato di quiete.

Il valore di velocità ottenuto risulta concorde con quello calcolato sperimentalmente secondo l'equazione:

$$v = \sqrt{\frac{2\Delta p}{\rho}} \quad (5.4)$$

dove $\rho = 0.089 \text{ kg/m}^3$ e $\Delta p = 29000 \text{ Pa}$.

Volendo fare una ulteriore verifica si può utilizzare la formula (5.3) che esprime il legame tra pressione totale, statica e cinematica utilizzando i valori risultanti dalla simulazione.

Eseguendo il calcolo si otterrà la pressione totale definita come condizione al contorno.

Si può notare inoltre, sia osservando la pressione che la velocità, che con il secondo setup, pur riproducendo una forma meno precisa del getto, si ha una maggior propagazione del getto a parità di tempo simulato.

5.4.3 Numero di Mach

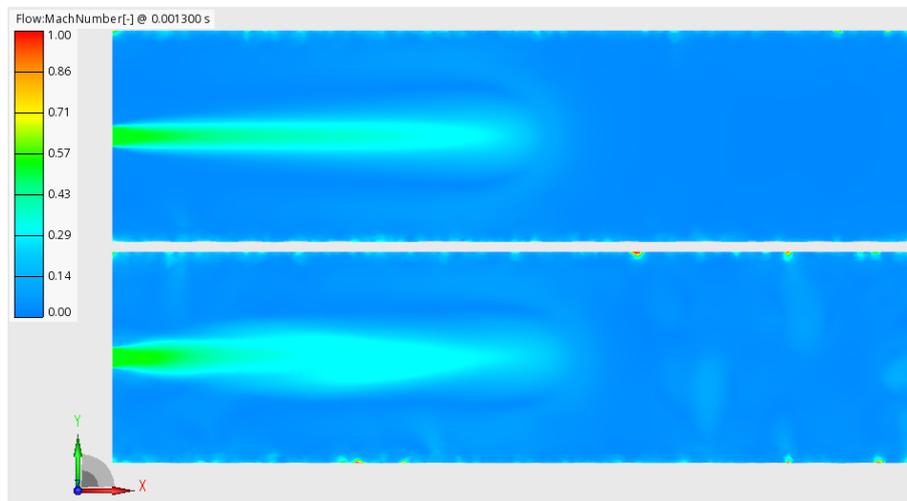


Figura 5.6: Confronto risultati relativi al numero di Mach con i due diversi setup. Nella figura in alto il setup (a), in quella in basso il setup (b).

Il valore del numero di Mach, come già definito nei primi capitoli è dato dal rapporto tra le velocità u , di cui si è precedentemente determinato il valore, ed a che risulta pari a circa 1320 m/s .

Per quanto riguarda i risultati relativi al numero di Mach nel secondo setup si nota una grande diffusione data dalla turbolenza insieme ad una grande componente di rumore.

Utilizzando un modello RANS il risolutore non è in grado di simulare i vortici del getto, è per tale motivo che si può definire la macchia non omogenea attorno all'asse del getto come dovuta ai fenomeni di diffusione.

Valori di viscosità elevati fanno aumentare la diffusione del getto rendendolo visivamente meno definito e più ampio.

Anche la scelta dello schema numerico può incidere su questo fenomeno, infatti lo schema Upwind essendo di primo ordine tende a smorzare le strutture turbolente data la elevata dissipazione numerica. Uno schema di secondo ordine con il central differencing invece riesce a mantenere più dettagli del getto.

Per quanto riguarda il rumore nello strato esterno è particolarmente visibile in questo confronto e probabilmente è dato dalla boundary impostata sulle pareti esterne.

Determinati i valori della pressione totale, statica e del numero di Mach si può dire che sono ricavati in modo tale da soddisfare la condizione di ristagno del fluido. Tale viene definita la condizione termodinamica che assumerebbe il fluido se venisse rallentato fino ad ottenere velocità nulla in condizioni adiabatiche ed isoentropiche. In tale stato vale la seguente relazione:

$$P_{tot} = P_{st} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (5.5)$$

Come si può notare si ha anche con il primo setup una maggior propagazione del valore di Mach all'interno dell'ambiente, ciò è sicuramente dovuto alla migliore rappresentazione del flusso.

5.4.4 Temperatura

Anche nella temperatura risulta ben visibile una diffusione nella zona in cui il getto si propaga, tuttavia in entrambi i casi risulta ben visibile la struttura a “fungo” dovuta ai fenomeni di espansione e quindi riscaldamento del gas. Fenomeno dato dal fatto

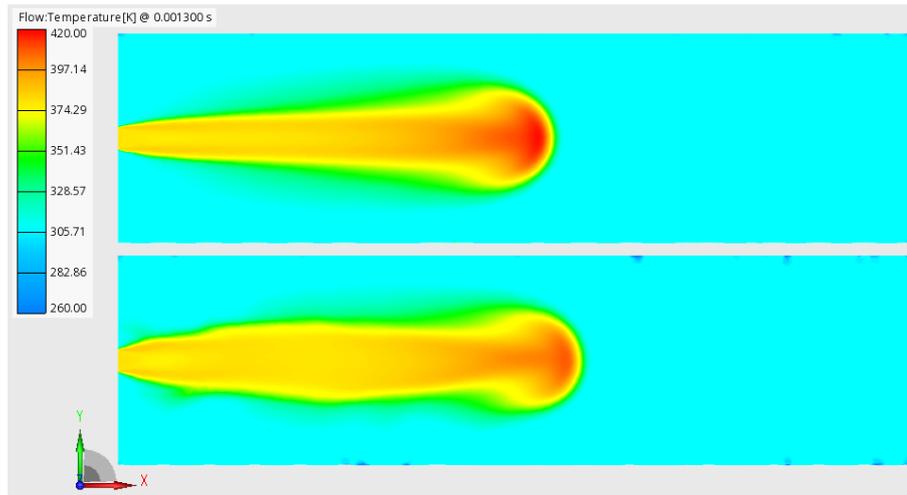


Figura 5.7: Confronto risultati relativi alla temperatura con i due diversi setup.

Nella figura in alto il setup (a), in quella in basso il setup (b).

che il coefficiente di Joule-Thompson per l'idrogeno ha un valore negativo, questo spiega il perchè durante l'espansione si ha un riscaldamento del gas. Innalzamento di temperatura che si può apprezzare anche ai lati del getto, dove il gas è libero di espandersi. Anche in questo caso si può notare come l'espansione radiale viene descritta in modo più nitido e quindi ben visibile dal primo setup.

Il fenomeno in analisi prende il nome di effetto Joule-Thomson e viene descritto nei primi capitoli dell'elaborato.

5.4.5 Densità

La densità viene mantenuta in modo corretto sulla sezione di ingresso con entrambi i setup, anche se il primo anche in questo caso risulta più accurato.

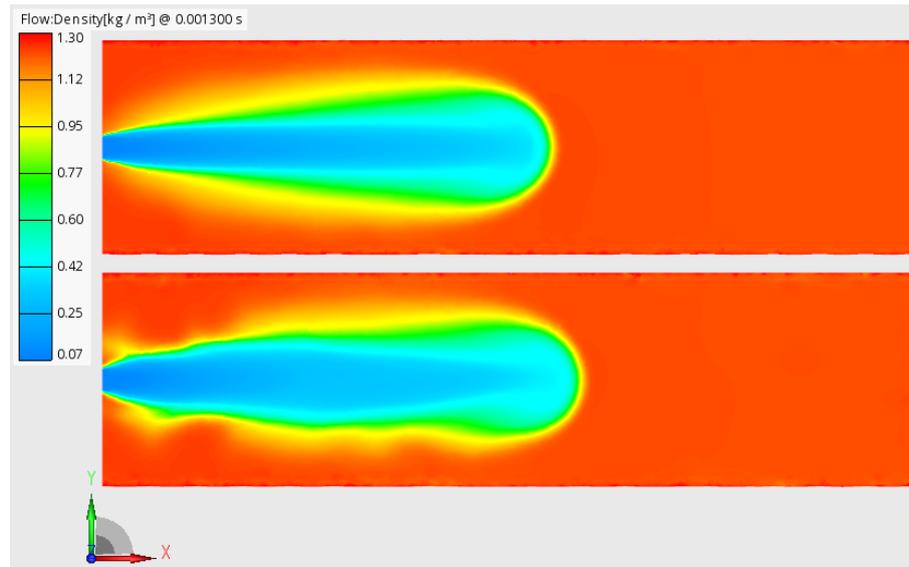


Figura 5.8: Confronto risultati relativi alla densità con i due diversi setup. Nella figura in alto il setup (a), in quella in basso il setup (b).

Anche se il solutore calcola la densità con le equazioni dei gas reali Peng-Robinson, osservando i valori di temperatura e densità calcolati al termine della simulazione tuttavia si può notare che non vi è molta differenza tra i valori ricavati utilizzando la legge dei gas perfetti: $\rho = p/RT$ con $R = 4124 J/molK$.

5.4.6 Frazione in massa

Un parametro molto importante da analizzare per ragioni di sicurezza in caso di perdita di gas ad alta pressione è la frazione in massa. Per valutare la distanza di sicurezza da adottare nel caso in cui ci siano perdite di idrogeno si analizza visivamente come varia la frazione in massa lungo linea di asse.

Una volta controllata la forma assialsimmetrica del getto basta misurare la concentrazione di idrogeno per misurare la distanza di dispersione del gas. Infatti, valutando la concentrazione del gas è possibile vedere quanto velocemente e a che distanza l'idrogeno risulta completamente disperso e miscelato in aria, condizioni nelle quali il gas non risulta pericoloso e dannoso.

Come si può vedere in figura la concentrazione diminuisce man mano che il getto si propaga all'interno dell'ambiente. Andamento descritto secondo una legge che

segue la formula di un'iperbole, ovvero si ha una elevata concentrazione iniziale che si disperde rapidamente data la volatilità del gas in analisi.

Quest'ultimo confronto mostra quanto l'idrogeno si diffonde all'interno dell'aria, evidenziandone la concentrazione nelle diverse zone del getto. In entrambe le simulazioni si può notare come la maggior concentrazione di idrogeno si ha sulla sezione di ingresso e nella zona centrale del getto.

Per quanto riguarda invece l'avanzamento del getto nell'ambiente a valle del foro si ha una poco precisa rappresentazione del zone del mixing nella zona più vicina alla sezione di uscita. Si può vedere in entrambe le simulazioni come prima ancora di arrivare a parete la concentrazione di idrogeno sia notevolmente diminuita rispetto a quella iniziale. Ovviamente per vederne la concentrazione che impatta a parete è necessario far proseguire per più tempo la simulazione.

I risultati ottenuti hanno una piccola dispersione rispetto a quelli sperimentali data dal fatto che uscendo dal foro il gas subisce un fenomeno di riscaldamento dato dall'espansione.

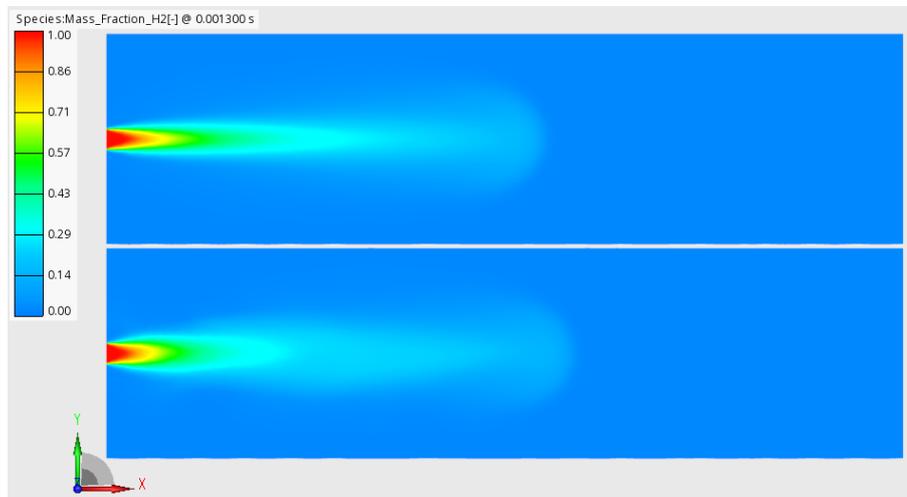


Figura 5.9: Confronto risultati relativi alla frazione in massa con i due diversi setup. Nella figura in alto il setup (a), in quella in basso il setup (b).

In generale si può quindi affermare che volendo simulare un flusso subsonico, dato da un piccolo salto di pressione, si ottengono risultati più precisi andando ad utilizzare un setup che comprende un valore molto basso di turbolenza iniziale, inquanto una maggior turbolenza può condurre ad una diffusione dei risultati rendendo la rappresentazione del getto visivamente meno definita.

Per quanto riguarda i fattori di sottorilassamento non influenzano i risultati delle simulazioni però si è potuto notare come abbassandoli per le equazioni più critiche si aumenta la stabilità del sistema a convergenza. Dove non necessario si sono mantenuti piuttosto alti e prossimi ad 1 per evitare che la simulazione diventi troppo lenta.

La differenza sostanziale che porta ad avere una migliore o peggiore riproduzione del getto è data dagli schemi di calcolo utilizzati. Lo schema central differencing è un sistema del secondo ordine che da come risultato una minore diffusione numerica, però può risultare più instabile per forti salti di pressione. Al contrario uno schema MINMOD Relaxed è utilizzato per evitare forti oscillazioni in caso di discontinuità, infatti se il gradiente tra le celle è piccolo il solutore adotterà uno schema central differencing, mentre se il gradiente è più elevato utilizzerà in automatico uno schema upwind, schema più stabile ma che può rallentare la convergenza. Tuttavia con un modesto salto di pressione si può notare come lo schema central differencing restituisca una maggiore diffusione numerica rispetto al minmod. Tuttavia questa differenza può essere data dal blending factor che ha la funzione di trovare un buon compromesso tra stabilità ed accuratezza. Per valori prossimi ad 1 il risolutore favorisce uno schema più vicino a Central Differencing (più preciso ma meno stabile), se invece è più prossimo a 0, viene applicato uno schema di tipo Upwind o Minmod, aumentando stabilità, ma con maggiore diffusione numerica. Risultati che sono incoerenti anche dal punto di vista dei blending factor.

In conclusione si può affermare che la differenza nella qualità dei risultati sia data dal fatto che, nel secondo setup, usando valori di sottorilassamento molto bassi, la simulazione non ha avuto tempo necessario per stabilizzarsi. Problema che quindi si dovrebbe risolvere andando ad aumentare il tempo della simulazione.

Facendo continuare la simulazione fino ad un tempo pari a $t = 0.006s$ si può meglio vedere lo sviluppo del getto fino a parete, in questo caso diventa interessante analizzare la frazione in massa a parete e l'indice di infiammabilità.

Analizzando i risultati relativi al primo setup si è notato che, avendo impostato come boundary sulla parete esterna una di tipo outlet, la percentuale di idrogeno che raggiunge la parete è estremamente bassa, quasi nulla, come si può notare in figura 5.10. Questo è dato dal fatto che si ha un basso salto di pressione iniziale ed un'alta volatilità del gas, caratteristiche che fanno sì che il gas si disperda all'interno dell'aria circostante prima di arrivare a parete.



Figura 5.10: Frazione in massa calcolata con il setup (a) all'istante $t=0.006s$.

Un altro aspetto valore da tenere in considerazione per la valutazione del rischio di detonazione è l'indice di infiammabilità. L'indice in questione rappresenta l'intervallo di concentrazione di idrogeno in aria per il quale può verificarsi l'accensione, al di fuori di tale intervallo quest'ultima non può avvenire. All'interno di tale limite si ha anche un intervallo per cui si ha una detonazione e non una semplice accensione. La concentrazione di idrogeno è in funzione di pressione e temperatura iniziali, turbolenza e condizioni dell'ambiente. Studiando quindi la distribuzione dell'idrogeno all'interno della miscela permette di individuare le zone critiche e adottare misure di sicurezza per evitarne l'accensione.

Il comportamento descritto per la frazione in massa è ben visibile anche analizzando in due istanti di tempo differenti l'indice di infiammabilità. In figura ?? è possibile vedere in due istanti di tempo differenti come evolve l'indice di infiammabilità.

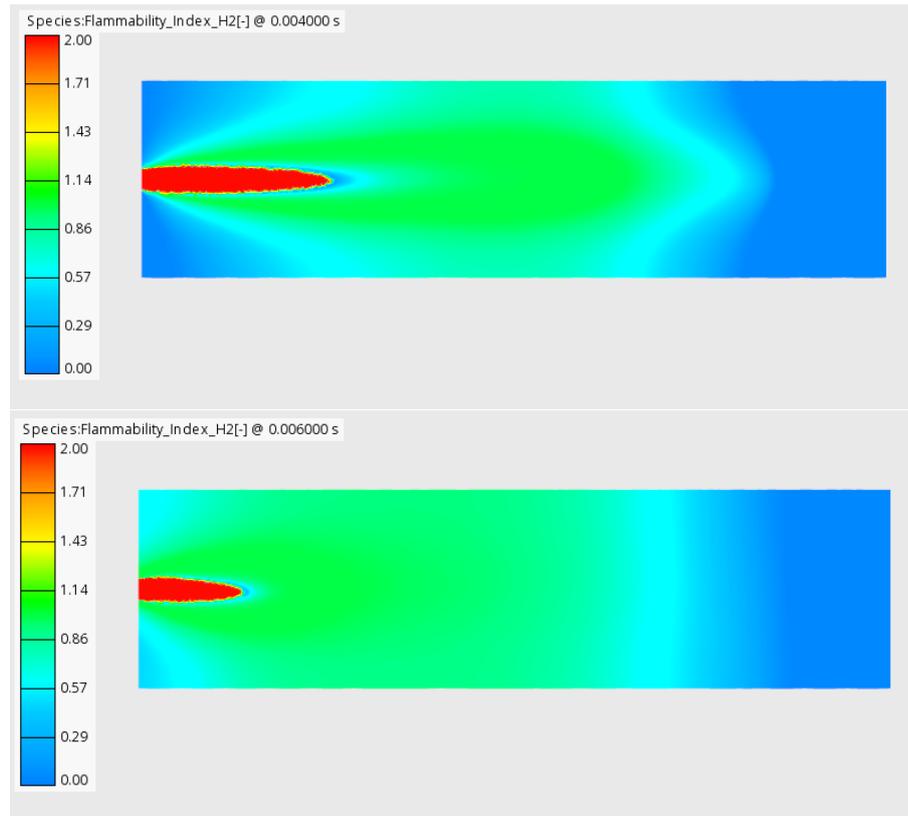


Figura 5.11: Indice di infiammabilità calcolato con il setup (a) agli istanti $t=0.004s$ e $t=0.006s$.

Risulta ben visibile come il gas si propaghi più rapidamente in direzione radiale piuttosto che in direzione assiale, senza mai arrivare in concentrazioni pericolose a parete.

Per provare a "forzare" l'arrivo a parete con le condizioni iniziali impostate si è realizzata una ulteriore simulazione andando ad impostare sulle pareti esterne una boundary di wall, in modo da limitare la diffusione laterale del fluido.

Un primo aspetto che si può osservare è il fatto che, non disperdendo calore con l'ambiente aperto circostante, la temperatura del gas quando arriva a parete è decisamente più elevata, condizione che aumenta il rischio di accensione del gas. Tuttavia, si può notare in figura 5.12 che la massima temperatura si ha al centro del getto e non sono visibili le zone esterne di espansione, come visibili ad esempio in figura 5.7.

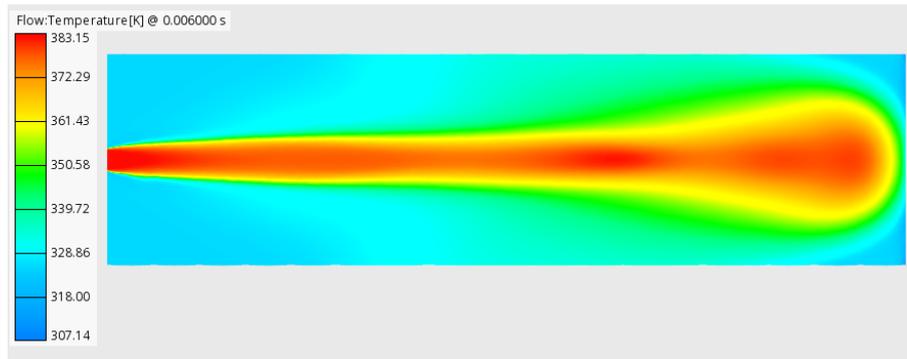


Figura 5.12: Temperatura calcolata con il setup (b) all'istante $t=0.006s$, tenendo come boundary esterna una parete.

In questo caso risulta ben visibile la maggior penetrazione della frazione in massa all'interno dell'ambiente in direzione assiale. Cosa che si deduce dal fatto che il pennacchio visibile in figura 5.13 risulta più lontano dal foro di uscita del getto rispetto a quello rappresentato in figura 5.10.



Figura 5.13: Mass fraction calcolata con il setup (b) all'istante $t=0.006s$, tenendo come boundary esterna una parete.

Non avendo possibilità di espandersi troppo lateralmente il gas sarà presente in maggiori concentrazioni. Lo stesso ragionamento si può fare per l'indice di infiammabilità, il quale avrà ovviamente un valore più elevato nei pressi della parete rispetto al caso in figura 5.11.

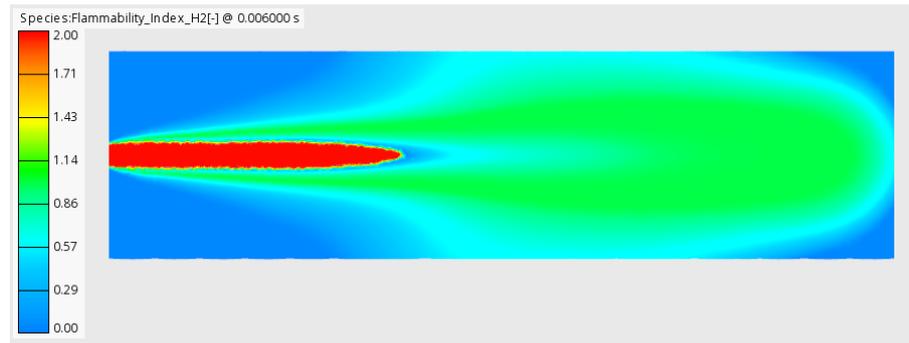


Figura 5.14: Indice di infiammabilità calcolato con il setup (b) all'istante $t=0.006s$, tenendo come boundary esterna una parete.

Una prima cosa da notare è come l'indice di infiammabilità si mantenga a valori elevati nella zona centrale del getto, cosa che non succedeva nel caso precedente, anzi da un certo punto in poi diminuiva. Si può chiaramente notare come la presenza di boundary chiusa ai lati forzi la propagazione verso la parete dell'idrogeno, il quale come già detto non è più libero di muoversi radialmente, ma è forzato ad una espansione assiale.

A parete l'indice ha valori elevati e quindi, combinati con una maggiore temperatura, potenzialmente pericolosi. Facendo proseguire la simulazione tale indice e tale pericolo aumenterà sempre di più fino a portare il gas alle condizioni di detonazione.

Capitolo 6

Simulazione condizioni soniche

6.1 Setup

Dopo aver simulato un getto di moto supersonico si è passati alla simulazione di un getto avente condizioni iniziali soniche, condizioni che si ottengono imponendo sulla boundary di ingresso una pressione totale di 1.9 bar. Facendo partire le prime simulazioni mantenendo gli stessi setup precedentemente descritti la simulazione falliva dopo pochi time-step. Il calcolo diverge con problemi relativi alla turbolenza, relativa probabilmente al troppo alto salto di pressione, rispetto al caso precedente. Per aiutare il risolutore ad arrivare a convergenza si è scelto di variare sia la geometria che il setup. Si è infatti aggiunto un condotto cilindrico dopo la boundary per aiutare il calcolo. Per quanto riguarda la griglia della nuova geometria si è solo aggiunto un raffinamento con celle di 0.2mm nella parte di geometria aggiunta.

From(micros)	Time step(micros)
0	0.25
20	0.5
35	0.125
120	0.25
150	1
500	5

Tabella 8: Tabella rampa time-step.

Per quanto riguarda il time-step si è scelto di realizzare una rampa (illustrata in tabella 8) in modo tale da velocizzare il calcolo in alcune zone e rallentare nelle parti più critiche, come ad esempio subito dopo la boundary e nel tratto in cui il flusso esce dal condotto ed entra nell'ambiente con un cambiamento brusco di sezione.

Il numero minimo di iterazioni è rimasto invariato, mentre come numero massimo per i primi time-step si è scelto 60, mentre dal tempo $t = 0.03ms$ si è ridotto a 50. Scelta basata sul fatto che avviando le simulazioni si è visto essere un numero sufficiente per arrivare a convergenza. Si è attivata anche l'opzione "second order time scheme" per avere la possibilità di settare nella sezione del solver control i differenti blending factors per le equazioni.

Le condizioni al contorno subiscono qualche modifica. Tuttavia, per quanto riguarda le specie in gioco si è mantenuto il setup illustrato nel capitolo precedente. Si ha infatti idrogeno puro in ingresso e nella restante parte dell'ambiente una miscela di 77% azoto e 23% di ossigeno.

Le temperature impostate sia come boundary che come condizione iniziale rimangono le medesime, mentre la pressione in ingresso viene impostata ad $1.9bar$. Per aiutare il calcolo ed evitare un brusco salto di pressione si è imposta sul condotto una condizione iniziale di pressione di $1.4bar$, una temperatura di $300k$ ed una velocità nulla.

I valori di turbolenza invece sono differenti, si sono scelti due valori più bassi rispetto a quelli che si sono impostati precedentemente sulla boundary di inlet e più elevati di quelli presi nel setup (a) come condizione iniziale. Sia per la boundary che per la condizione iniziale di tutto il dominio si attribuisce all'energia cinetica turbolenta (TKE) un valore di $0.1m^2/s^2$ mentre per il tasso di dissipazione (TDR) un valore di $1m^2/m^3$.

Per quanto riguarda invece il calcolo numerico si è mantenuto lo stesso setup riportato in tabella 7, fatta eccezione per il modello di turbolenza, al posto del $k - zeta - f$ si è usato un $k - \epsilon$ per aiutare la convergenza.

Nella sezione relativa al modulo si è attivata l'opzione "Real gas/Peng-Robinson" per far sì che il risolutore consideri gas reali aria ed idrogeno.

Per quanto riguarda la sezione del solver control si è scelto in questo caso un accoppiamento di tipo Simple/Piso per pressione e velocità con il quale durante il calcolo vengono attuate delle correzioni sul calcolo delle pressioni. Vengono attivate anche due correzioni che prendono il nome di “Two stage pressure correction” e “High frequency pressure correction”. Setup conveniente nelle simulazioni transitorie perché ha come vantaggio quello di arrivare prima a convergenza.

In tutte le equazioni, come nel caso precedente, si è adottato un valore di convergenza pari a 1.10^{-4} .

I valori settati invece per gli altri parametri sono riportati in tabella:

Equazione	Underrel. factor	Differencing scheme	Blending factor	Blending scheme
Continuità	0.1	Central differencing	1	0.8
Momento	0.4	MINMOD Relaxed	0.5	1
Turbolenza	0.1	Upwind		1
Energia	0.6	Upwind		1
Specie	0.6	Upwind		1

Tabella 9: Tabella setup schemi di calcolo.

Per quanto riguarda invece il setup del solutore lineare si sono definiti i parametri nel modo seguente:

Equazione	Linear solver	Max. iterations	Min. iterations	Tolerance
Continuità	GSBT	500	10	0.01
Momento	GSBT	50	5	0.1
Turbolenza	GSBT	500	5	0.1
Energia	GSBT	500	5	0.1
Specie	GSBT	50	0	0.1

Tabella 10: Tabella setup linear solver setting.

Infine, si è scelto di imporre, nella sezione “numeric control”, dei limiti ad alcune variabili come temperatura, densità, velocità e turbolenza. Si sono inoltre disattivate le voci “Cell face adjustment” e “Realizability constrains” che il software attiva di default in modo da facilitare la convergenza ma perdendo un po’ la qualità dei risultati in caso di celle mal orientato nella griglia.

6.2 Risultati

Come già detto, senza la presenza del condotto le simulazioni fallivano ancora prima di poter visualizzare dei risultati, grazie all’aggiunta di esso invece si sono ottenuti dei miglioramenti. Infatti, con l’aggiunta del condotto si è riusciti ad aiutare il calcolo in una della zone più critiche, ovvero la partenza di esso. Come si può vedere dai risultati questa modifica è servita per far si che le condizioni impostate come boundary di ingresso venissero mantenute e calcolate correttamente, cosa che nelle prime simulazioni di approccio al problema non accadeva.

Come prima cosa si può osservare in figura 6.1 il corretto mantenimento della pressione totale impostata per avere condizioni di moto sonico.

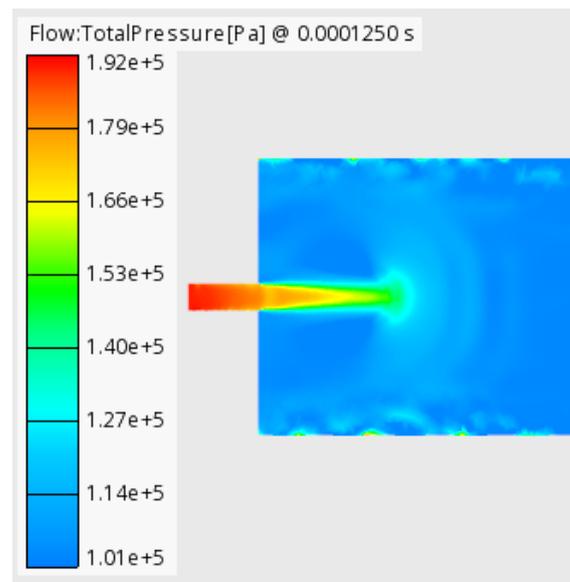


Figura 6.1: Pressione totale all’istante $t=0.000125s$, utilizzando un condotto in ingresso.

Pressione che diminuisce percorrendo il condotto ma ciò può essere dato dal fatto che il calcolo non si è ancora stabilizzato correttamente.

Per quanto riguarda temperatura e velocità anch'esse sono ben mantenute sulla sezione di ingresso, come si può osservare in figura 6.2.

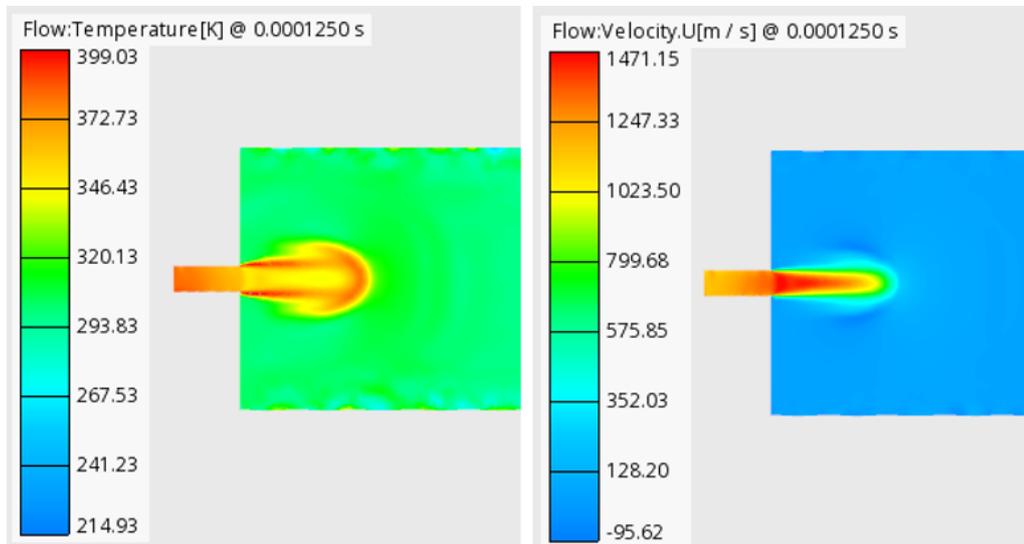


Figura 6.2: Velocità e temperatura all'istante $t=0.000125s$, utilizzando un condotto in ingresso.

La temperatura risulta mantenuta correttamente ad un valore di 383k sulla boundary e si può notare anche come vengano ben rappresentate le zone di espansione in cui si ha un riscaldamento del gas, ovvero la zona a fungo e le zone esterne alla parte centrale del getto.

Per quanto riguarda la velocità è mantenuta a valori leggermente più bassi di quelle che sarebbero le condizioni per avere un moto sonico, ovvero a circa $1200m/s$.

Per quanto riguarda invece i valori di densità e numero di Mach si può notare che vengono leggermente sottostimati. La densità infatti risulta pari a circa $0.07kg/m^3$, invece che essere pari a $0.089kg/m^3$, anche se tuttavia la sua propagazione all'interno dell'ambiente in un primo momento ha una corretta forma.

Per il valore calcolato dal solutore del numero di Mach si ha una importante sottostima, infatti il valore calcolato dovrebbe essere pari ad 1 ma in realtà risulta pari a circa 0.078. Tale sottostima può essere data dal fatto che il solutore calcola valori di velocità e densità inferiori rispetto a quelli che si dovrebbero ottenere.

L'innalzamento sopra al valore di 1 che si verifica in uscita dal condotto è dato dal fatto che in tale zona il gas si espande, la pressione diminuisce e la velocità aumenta. Risultato che risulta non corretto, ma coerente con i valori calcolati dei parametri da cui dipende.

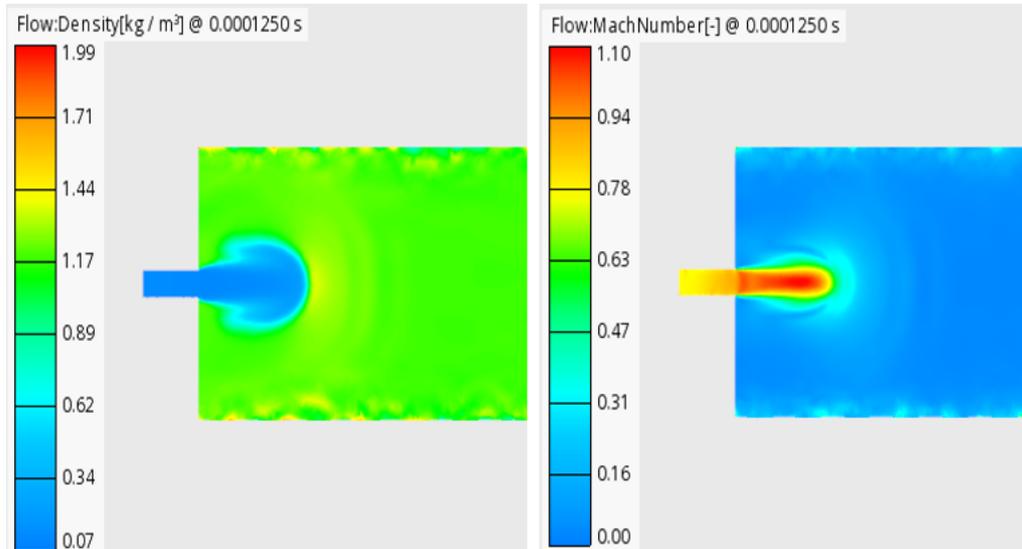


Figura 6.3: Densità e numero di Mach all'istante $t=0.000125s$, utilizzando un condotto in ingresso.

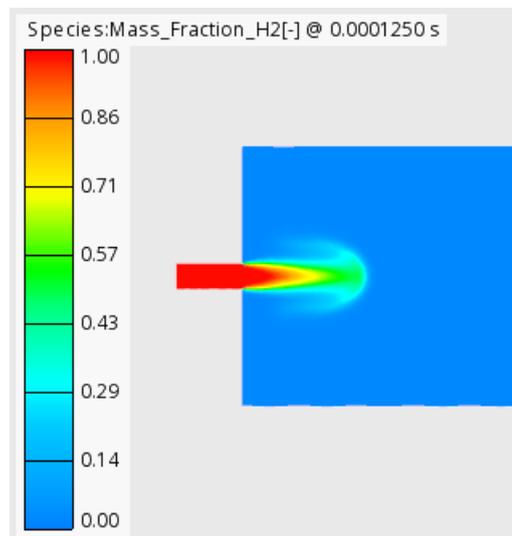


Figura 6.4: Frazione in massa all'istante $t=0.000125s$, utilizzando un condotto in ingresso.

Un'ultima caratteristica da analizzare risulta essere la frazione in massa (visibile in figura 6.4), giustamente all'interno del condotto vi è solo la presenza di idrogeno puro. La forma che si sta sviluppando risulta essere corretta, sia perché assialsimmetrica sia per la forma che assume il pennacchio mentre il gas si miscela con l'aria. Questo dato risulta però ancora troppo poco sviluppato per poter trarre delle conclusioni a riguardo, anche se la forma risulta ben sviluppata, poiché la sua analisi è interessante svolgerla nei pressi della parete di fondo.

Sarebbe interessante vedere inoltre l'andamento della turbolenza per riuscire a visualizzare gli inner e outer shear layer con le differenti quantità di mixing, ma anche in questo caso la simulazione non è avanzata fino a un punto tale da poterne osservare gli effetti.

Nonostante si sia riusciti a fare mantenere nel modo corretto i valori impostati come condizioni al contorno, il calcolo, arrivato all'istante di tempo $t=0.0001255s$, diverge. Divergenza che risulta causata da problemi relativi alle equazioni di continuità ed alla opzione attivata di "pressure correction". Per tale motivo in futuro si può rilanciare una simulazione con il setup descritto ad inizio capitolo in cui però non vengono attivate le opzioni "Two stage pressure correction" e "High frequency pressure correction".

Conclusioni

Dopo aver descritto le caratteristiche dell'idrogeno gassoso che lo rendono molto complesso da stoccare, e quindi da utilizzare, si sono descritte le varie problematiche relative alle potenziali perdite accidentali di gas.

Lo studio del comportamento del getto nell'ambiente lontano dal foro di uscita è risultato fondamentale per ragioni di sicurezza, poiché l'idrogeno rilasciato da un serbatoio a pressioni molto elevate dà luogo alla formazione di una fiamma libera in aria. Per tale motivo si è sviluppato il concetto di "Notional Nozzle", il quale permette di realizzare analisi CFD per studiare il comportamento del getto dopo la formazione della prima struttura di shock in modo da ridurre notevolmente la durata delle simulazioni. Dopo una descrizione dei differenti metodi di approccio che negli anni si sono sviluppati, si è realizzato un confronto per capire quale tra essi rappresentasse al meglio i valori ottenuti sperimentalmente di velocità e frazione in massa lungo la linea d'asse del getto.

Dopo aver implementato in Python le equazioni descritte nel capitolo quattro si è determinato un valore del diametro della sezione di ingresso da utilizzare nelle simulazioni. Per una pressione di 50bar nel serbatoio a monte si è determinato un diametro del disco pari a 4mm , valore utilizzato per costruire la geometria utilizzata nelle successive simulazioni.

Definito il valore del diametro si sono definite le dimensioni esterne del dominio, le quali devono essere tali da garantire di visualizzare l'espansione del getto sia in direzione radiale che assiale in modo da valutarne il miscelamento e la concentrazione in proporzione con la quantità di aria. Questo perché è proprio dalla dispersione del gas che si valuta la distanza di sicurezza da adottare in caso di perdite di gas.

Una volta realizzata la geometria si è creata poi un griglia formata da un numero relativamente contenuto di celle, a cui è stato attribuito un raffinamento fine nei pressi della sezione di ingresso e due raffinamenti progressivi a forma di trono di cono con il diametro che cresce in direzione assiale, seguendo l'espansione del getto. Alla fine di questo elaborato si può concludere che grazie all'approccio del notional nozzle è possibile diminuire in modo significativo i tempi di calcolo delle simulazioni, andando ad evitare di simulare la zona in cui si ha un flusso con velocità supersoniche. Purtroppo, tale beneficio non si è potuto riscontrare dal momento che sono stati riscontrati problemi del software nel mantenere nel modo corretto la simmetria sul relativo piano. Non si è potuto quindi simulare solamente metà del dominio ma si è utilizzata l'intera geometria, aumentando così del doppio il tempo di calcolo, andando a ridurre le dimensioni del dominio per avere risultati in tempi accettabili. Si sono analizzati differenti setup con cui rappresentare un getto sottoespanso partendo a simulare dalla zona a valle del disco di Mach, non tutti però risultano ottimali per avere un buon compromesso tra una velocità di calcolo accettabile e qualità dei risultati.

Fin dalle prime simulazioni realizzate con un piccolo salto di pressione, di $0.32bar$, tra sezione in ingresso ed ambiente si è potuto notare che il solutore raggiunge convergenza con valori di turbolenza ridotti. Infatti, impostare una componente turbolenta sovrastimata può portare ad un'instabilità numerica e quindi al fallimento della simulazione. Valori troppo elevati della turbolenza possono condurre, oltre al fallimento della simulazione, ad errori numerici nella risoluzione delle equazioni e a gradienti di velocità eccessivamente smorzati.

Per aiutare ad arrivare a convergenza e ad avere stabilità del calcolo senza variare però la qualità dei risultati si possono abbassare i valori di sotto rilassamento per le equazioni più critiche come turbolenza e momento per non aumentare troppo la durata della simulazione.

Dato che dopo il primo confronto tra i setup si è concluso che la minor precisione nei risultati del secondo poteva essere data dal fatto che la simulazione non aveva ancora avuto il tempo di stabilizzarsi si è mantenuto il setup ed aumentato il tempo totale della simulazione fino a $t = 0.005s$.

Dall'analisi dei primi risultati facendo arrivare il getto a parete si è potuto notare che per un getto con velocità basse, risulta difficile osservarne il comportamento a parete considerando la superficie laterale del cilindro come boundary di outlet. Questo dal momento che il gas è libero di espandersi radialmente quanto vuole e questo fa sì che l'idrogeno non arrivi mai in concentrazioni pericolose a parete. Tale aspetto è verificabile anche osservando il valore dell'indice di infiammabilità che in prossimità della parete ha valori prossimi a zero. Questo accade poiché in direzione radiale ha minori resistenze da vincere per potersi miscelare con il fluido circostante, risultando così più veloce il mixing radiale di quello assiale. Per tale motivo si è eseguita una simulazione con stesse condizioni ma imponendo una boundary di parete sulla superficie laterale. Dai risultati della quale si è potuto vedere che "forzando" il gas ad arrivare a parete ovviamente è più facile raggiungere condizioni critiche di temperatura e frazione in massa.

I setup utilizzati fino ad ora per una piccola differenza di pressione non vanno bene per un salto di pressione più ampio. Per tale motivo nel sesto capitolo ne viene descritto uno differente.

Come si è descritto nel corso dell'elaborato per valori elevati del salto di pressione può accadere che, con il modello k-epsilon ed un valore alto di turbolenza iniziale, la turbolenza che si crea può crescere in maniera incontrollata, raggiungendo valori irrealistici e portare a divergenza.

Per questi ed altri motivi le simulazioni hanno sempre portato a divergenza, tuttavia in questa ultima ipotesi di setup si è riusciti a far mantenere al software le condizioni al contorno desiderate, cosa che fin dall'inizio non si verificava.

In conclusione, possibili sviluppi futuri per la simulazione di un getto di idrogeno sottoespanso con condizioni soniche al notional nozzle sono quelle di realizzare simulazioni partendo dal setup descritto in questo elaborato andando a disattivare le opzioni relative alla correzione della pressione e vedere che succede. Un'ulteriore prova futura da realizzare è andare a modificare le equazioni di continuità ad esempio provando ad aumentare il blending time scheme da 0.8 ad 1.

Bibliografia

- [1] Franquet Erwin. Free underexpanded jets in a quiescent medium: A review. *Technical Report*, (DOI:10.13140), 2015.
- [2] Hamzehloo A. Computational study of hydrogen direct injection for internal combustion engines. *SAE Technical Papers 11*, (DOI:10.4271), 2013.
- [3] Franquet Erwin. Free underexpanded jets in a quiescent medium: A review. *Progress in Aerospace Sciences*, 77(DOI:10.1016):25–53, 2015.
- [4] Crist S. Study of the highly underexpanded sonic jet. *AIAA Journal*, 4(DOI:10.2514/3.3386):68–71, 1966.
- [5] Addy A.L. Effects of axisymmetric sonic nozzle geometry on mach disk characteristics. *AIAA Journal*, 19(DOI: 10.2514/3.7751):121–122, 1981.
- [6] E. Papanikolaou. Comparison of modelling approaches for cfd simulations of high pressure hydrogen releases. pages 1–13.
- [7] B. C. R. Ewan and Moodie K. Structure and velocity measurements in underexpanded jets. *Combustion Science and Technology*,, 45:275–288, 1986.
- [8] Travis J.R. Xiao J. and Breitung W. Hydrogen release from a high pressure gaseous hydrogen reservoir in case of a small leak. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36:2545–2554, 2011.
- [9] M. Kuznetsov E. Papanikolaou, D. Baraldi and A. Venetsanos. Evaluation of notional nozzle approaches for cfd simulations of free-shear under-expanded hydrogen jets. *internationaljournal o f hydrogen energy*, 37, 2012.

- [10] Pope SB. Turbulent flows. *Cambridge University Press*, 2003.
- [11] Rodi W. Chen CJ. Vertical turbulent buoyant jets, a review of experimental data. *Oxford: Pergamon Press*, 1980.
- [12] List EJ. Papanicolaou PN. Investigations of round vertical turbulent buoyant jets. *J Fluid Mech*, 1988.
- [13] Ötügen MV. Yüceil KB. Scaling parameters for underexpanded supersonic jets. *Phys Fluids*, 14, 2002.
- [14] Molkov V Makarov D. Structure and concentration decay in supercritical plane hydrogen jet. *Yokohama Japan.*, 2010.
- [15] Xuefang Li Jinghu Hu, David M. Christopher. Simplified partitioning model to simulate high pressure under-expanded jet flows impinging vertical obstacles. *international journal of hydrogen energy* 43, 2018.
- [16] Hecht ES Ekoto IW Li X, Christopher DM. Comparison of two-layer model for hydrogen and helium jets with notional nozzle model predictions and experimental data for pressures up to 35 mpa. *Int J Hydrogen Energy*, 2017.
- [17] Kudriakov S Velikorodny A. Numerical study of the nearfield of highly underexpanded turbulent gas jets. *Int J Hydrogen Energy*, 2012.
- [18] Hecht ES Ekoto IW Li X, Christopher DM. Comparison of two-layer model for hydrogen and helium jets with notional nozzle model predictions and experimental data for pressures up to 35 mpa. *Int J Hydrogen Energy*, 2017.
- [19] Arash Hamzehloo. Computational study of under-expanded jets, mixture formation and combustion in direct-injection spark-ignition hydrogen engines. Technical report, Department of Mechanical Engineering University College London (UCL), 2015.
- [20] A. Hamzehloo. Large eddy simulation of near-nozzle shock structure and mixing characteristics of hydrogen jets for direct-injection spark-ignition engines. 2014.

- [21] A.Hamzehloo. Large eddy simulation of highly turbulent under-expanded hydrogen and methane jets for gaseous-fuelled internal combustion engines. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2014.