



Ricerca di Sistema elettrico

## Simulazione di Instabilità Termo-Acustiche

E. Giacomazzi, D. Cecere, G. Calchetti, A. Di Nardo, F.R. Picchia

## SIMULAZIONE DI INSTABILITA' TERMO-ACUSTICHE

E. Giacomazzi, D. Cecere, G. Calchetti, A. Di Nardo, F.R. Picchia (ENEA)

Settembre 2015

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Piano Annuale di Realizzazione 2014

Area: Produzione di energia elettrica e protezione dell'ambiente

Progetto: B.2 - Cattura e sequestro della CO<sub>2</sub> prodotta da combustibili fossili

Obiettivo: Parte A - b - Ampliamento del range operativo di sistemi turbogas sottoposti a variabilità del carico e della composizione del combustibile

Task b.1 - Simulazione di instabilità termo-acustiche

Responsabile del Progetto: Stefano Giammartini, ENEA

## Indice

SOMMARIO .....	4
1 INTRODUZIONE.....	5
2 DESCRIZIONE DELLE ATTIVITÀ SVOLTE E RISULTATI .....	5
2.1 LO STRUMENTO DI SIMULAZIONE: IL CODICE HEART .....	5
2.2 IL CASO TEST.....	7
2.3 LA SIMULAZIONE.....	8
3 CONCLUSIONI .....	12
4 RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI.....	13

## Sommario

Sebbene oggi alcuni tipi di bruciatori industriali sono efficientemente dotati di sistemi di controllo attivo e passivo, in grado di attenuare o eliminare completamente le instabilità termoacustiche, l'inibizione di tali fenomeni in una vasta gamma di condizioni operative è ancora lontana dall'essere raggiunta. Nel prossimo futuro si prevede che il problema diventi ancora più importante fondamentalmente per due motivi: il primo è legato alla flessibilità del combustibile, a causa del crescente interesse per combustibili alternativi (syngas, biogas, shale gas); il secondo è legato alla crescente esigenza di flessibilità di carico, imposta dal crescente utilizzo di fonti energetiche rinnovabili.

Il lavoro ha riguardato la simulazione numerica mediante tecnica Large Eddy di un caso test operato in condizioni di instabilità termo-acustiche con un forte fenomeno di "flashback" (ritorno di fiamma). In particolare, il caso test analizzato è stato studiato sperimentalmente presso l'ONERA: si tratta di un combustore a gradino, premiscelato metano/aria a rapporto di equivalenza 0.8 e con preriscaldamento. La fiamma investigata è di particolare interesse non solo per il fenomeno di flashback, ma anche perché la fiamma premiscelata si colloca nel regime ispessito e corrugato tipico dei combustori adottati nelle turbine a gas negli impianti di produzione di energia.

Le simulazioni hanno colto fenomeni di estinzione del fronte di fiamma, presenti negli esperimenti, ma solo deboli ritorni di fiamma. Analizzando i dati, si è dimostrato che assumendo all'ingresso una condizione di tipo riflessivo, il fenomeno di flashback è contrastato e addirittura impedito. Si crea un'inevitabile interazione tra la fisica all'interno del campo e la lunghezza del canale di ingresso.

Nella prossima annualità sarà quindi implementata nel codice HeaRT una condizione non riflessiva o parzialmente non riflessiva per gli ingressi. La simulazione sarà nuovamente effettuata, assumendo anche meccanismi cinetici più dettagliati con caratteristiche di stabilità per la numerica attualmente implementata nel codice HeaRT.

## 1 Introduzione

La combustione premiscelata in condizioni magre è la tecnica più utilizzata per ridurre le emissioni di  $\text{NO}_x$  nelle turbine a gas e le instabilità termoacustiche sono un problema comune per le macchine operanti in queste condizioni. L'instabilità termoacustica è un fenomeno derivante da complesse interazioni tra onde acustiche e rilascio di calore all'interno del bruciatore. Le fluttuazioni di velocità, perturbazioni nella pressione e nella concentrazione del combustibile rappresentano delle cause di oscillazione del rilascio di calore e di nascita onde acustiche che, quando correttamente in fase, fornendo energia alla perturbazione iniziale, sono in grado di sostenere l'instabilità termoacustica stessa (criterio di Rayleigh). Anche la variazione periodica dell'intensità turbolenta generata da oscillazioni di pressione, producendo oscillazioni nella velocità di fiamma turbolenta e di conseguenza delle oscillazioni della velocità di reazione, è in grado di innescare instabilità termoacustiche. In fiamme confinate le frequenze delle instabilità sono centrate attorno alle frequenze acustiche naturali della camera di combustione. Infatti le pareti del sistema selezionano passivamente i disturbi caratterizzati da quelle frequenze.

Nei sistemi operanti ad alta pressione, le fluttuazioni di pressione generate dalla combustione possono causare direttamente oscillazioni del rilascio di calore in fase con l'onda acustica. Nei bruciatori alimentati con combustibile liquido, sono in grado di modificare la configurazione del flusso e il processo di atomizzazione e break-up, causando oscillazioni nella velocità di combustione. In bruciatori a gas, le variazioni del rapporto di equivalenza e del tasso di miscelazione tra reagenti e prodotti della combustione, sono stati identificati come meccanismi in grado di avviare l'instabilità termoacustica. L'identificazione del meccanismo iniziale responsabile delle instabilità termoacustiche è ancora ardua, poiché molti e distinti sono i fenomeni fisici suscettibili di avviare l'instabilità, e ciascuno è caratterizzato da una diversa scala temporale.

L'instabilità termoacustica non costituisce un fenomeno locale e le onde acustiche che interessano l'intero sistema possono compromettere l'integrità. Il fenomeno diventa pericoloso quando le ampie oscillazioni di pressione e di velocità si traducono in vibrazioni auto-sostenute che interferiscono con il sistema e possono indurre fenomeni di flashback ed estinzione della fiamma ed usura prematura dei componenti. In casi estremi può danneggiare gravemente i componenti con conseguente interruzione di funzionamento.

Sebbene oggi alcuni tipi di bruciatori industriali sono efficientemente dotati di sistemi di controllo attivo e passivo, in grado di attenuare o eliminare completamente instabilità termoacustica, l'inibizione di tali fenomeni in una vasta gamma di condizioni operative è ancora lontana dall'essere raggiunta. Nel prossimo futuro si prevede che il problema diventi ancora più importante per fondamentalmente due motivi: il primo è legato alla flessibilità del combustibile, a causa del crescente interesse per combustibili alternativi (syngas, biogas, shale gas); il secondo è legato alla crescente esigenza di flessibilità di carico, imposta dal crescente utilizzo di fonti energetiche rinnovabili.

## 2 Descrizione delle attività svolte e risultati

Il lavoro ha riguardato la simulazione numerica mediante tecnica Large Eddy di un caso test operato in condizioni di instabilità termo-acustiche con un forte fenomeno di "flashback" (ritorno di fiamma). Le simulazioni sono state effettuate sulla piattaforma di calcolo CRESCO4 (Computational RESearch center on COmplex system), un cluster basato su architettura Linux x86-64, che ha fino a 4864 core.

### 2.1 Lo Strumento di Simulazione: il Codice *HeaRT*

Il codice *HeaRT* (Heat Release and Turbulence) opera su domini computazionali (multi-blocco) tridimensionali, in coordinate cilindriche e cartesiane, discretizzati con griglie strutturate. E' basato sull'approccio Large Eddy Simulation, ma è anche in grado di eseguire Direct Numerical Simulation. *HeaRT* può simulare flussi turbolenti non stazionari, reattivi e non, a basso ed alto numero di Mach. Le equazioni adottate sono in forma pienamente comprimibile anche a bassi Mach, in modo da catturare fenomeni non stazionari legati alle oscillazioni di pressione, come nel caso delle instabilità termo-acustiche. Il codice è in grado di trattare geometrie complesse per mezzo della tecnica Immersed Volume Method (IVM), sviluppata

dallo stesso gruppo di ricercatori. Questa tecnica è stata validata in flussi laminari e turbolenti, con e senza reazioni chimiche [1]. *HeaRT* può anche simulare flussi multifase con un approccio euleriano-euleriano di tipo mesoscopico [2]; tale modello è stato validato con dati relativi a flussi turbolenti non reattivi [3] e a flussi con particelle di carbone soggette a devolatizzazione, con un forte effetto del trasporto di energia radiante [4].

Le equazioni comprimibili sono scritte in forma conservativa e risolte con una formulazione "staggered" delle variabili per migliorare le proprietà dispersive degli schemi numerici spaziali [5]. In particolare, il codice implementa un'integrazione spaziale alle differenze finite ed un'integrazione nel tempo al terzo ordine di tipo Runge-Kutta. Sono implementati diversi schemi spaziali, dal secondo ordine centrato, al terzo ordine upwind-biased (AUSM), ed al quinto-terzo ordine WENO per flussi supersonici [6]. In particolare, l'implementazione dello schema AUSM nel trattamento dei termini convettivi dell'equazione della quantità di moto ha migliorato la stabilità numerica nel calcolo di fiamme premiscelate. Gli autori hanno anche implementato uno schema "staggered" compatto al sesto ordine per avere soluzioni più accurate [7-8]. Uno schema ai volumi finiti secondo ordine upwind è usato per la fase dispersa nei flussi multifase. Un approccio ai volumi finiti è anche usato nelle celle di calcolo che tagliano la superficie di una geometria complessa trattata con il metodo IVM. Oscillazioni non fisiche dovute agli schemi numerici possono essere smorzate mediante un filtro esplicito Gaussiano applicato alle componenti della quantità di moto oppure mediante l'uso di una viscosità artificiale localizzata specifica per le equazioni di trasporto della quantità di moto, dell'energia e delle specie chimiche [9].

Sono previste diverse condizioni al contorno. In particolare, ai contorni aperti del dominio di calcolo sono implementate condizioni di tipo non riflessivo (Navier-Stokes-Characteristic-Boundary-Conditions), o parzialmente non riflessivo, estese per trattare flussi reagenti con proprietà di trasporto variabili con la temperatura, la pressione e la composizione, ed in modo che risentano dell'effetto del rilascio di calore locale [10-13]. Un generatore di turbolenza sintetica è adottato per produrre fluttuazioni turbolente di velocità all'ingresso [14].

I trasporti diffusivi includono: la legge di Fourier ed il termine legato alle entalpie delle singole specie ed alla diffusione delle specie stesse nel flusso di calore; la diffusione preferenziale, modellata con la legge di Hirschfelder e Curtiss, e l'effetto Soret nel flusso diffusivo di massa. Il trasferimento di energia radiante può essere simulato per mezzo del modello diffusivo M1 [15]. Le proprietà di trasporto sono accuratamente calcolate per mezzo della teoria cinetica. Esse sono tabulate, ad eccezione dei coefficienti di diffusione binaria, usando le routine fornite dai Prof. Ern e Giovangigli [16-19]. Le leggi di mescolamento di Wilke, Mathur, Hirschfelder e Curtiss, sono usate per stimare la viscosità, conducibilità ed i coefficienti di diffusione. E' in corso un lavoro per simulare fluidi ad alta pressione (flussi supercritici) per mezzo di una nuova strategia di mescolamento, già parzialmente validata [20].

Sono implementati diversi modelli di sottogriglia: il modello di Smagorinsky dinamico, un modello basato sul trasporto dell'energia cinetica di sottogriglia (anche questo dinamico) [21-24] accoppiato con il Fractal Model [25-27], un approccio di tipo flamelet-variabile di progresso [28], ed il modello Localised Turbulent Scale Model, sviluppato e validato recentemente [29-30]. Il formato CHEMKIN è usato per descrivere gli schemi di cinetica chimica dettagliati.

Il codice *HeaRT* è accompagnato da un insieme di programmi di pre- e post- processing. I tool di pre-processing includono programmi per generare o rigenerare il campo fluidodinamico su diverse griglie di calcolo, un programma per convertire i dati di uscita in file leggibili dal visualizzatore grafico *TECPLOT*, ed infine, un programma (*PRE-DEC*) in grado di pre-generare la decomposizione del dominio di calcolo per ottimizzare il parallelismo al variare del numero di cores utilizzati. Quest'ultimo tool è stato sviluppato per scegliere "a priori" il numero di processi che meglio si adatta allo specifico caso da simulare. I tool di post-processing includono alcuni programmi per calcolare le statistiche (medie di insieme, medie alla Favre, fluttuazioni rms, cross-correlazioni, ...), ed alcuni programmi più sofisticati per l'analisi di dati DNS/LES (estrazione accurata di iso-superficie, curvatura del fronte di fiamma, stiramento del fronte di fiamma, velocità di fiamma, velocità di consumo dei reagenti, velocità di spostamento, pdf di diverse grandezze).

Il codice *HeaRT* è scritto in FORTRAN95 ed il suo parallelismo è basato sul "Domain Decomposition" e sul "Message Passing Interface" (MPI). Si è deciso di utilizzare l'MPI per rendere il codice il più possibile

indipendente dalle macchine presenti nella GRID dell'ENEA, che ospita vari tipi di piattaforme HPC (cluster di macchine a singolo- o multi- core, macchine SMP, ed altre). Nella pratica, il dominio computazionale, definito da una griglia strutturata ortogonale multi-blocco, è partizionato in un certo numero di sotto-dominii per mezzo di un algoritmo di decomposizione genetico. La "fitness function" alla base di tale algoritmo ha lo scopo di bilanciare il costo computazionale dei processori coinvolti e di minimizzare la quantità di dati da comunicare attraverso i contorni assegnati ai processori (o cores) stessi.

## 2.2 Il Caso Test

Il bruciatore sperimentale selezionato per le simulazioni LES è il combustore a gradino ONERA/LAERTE [31] (vedi Fig. 1). Con questa configurazione il sistema è in grado di generare sia uno shear layer che una zona di ricircolazione, entrambi causa di instabilità, la quale produce il flashback instabile e quasi-periodico della fiamma, che si distacca dal bordo del gradino. Il numero di Reynolds turbolento  $Re_t > 10^3$ , corrisponde al regime di "thickened wrinkled flame" nel diagramma di Borghi, che è fortemente influenzato dalla turbolenza, e caratteristico dei combustori nelle turbine a gas. Il test rig è costituito da un condotto rettangolare di 1.7 m di lunghezza e  $0.1 \times 0.1 \text{ m}^2$  di sezione. La camera di combustione è lunga 1.4 m ed il gradino è alto 3.5 cm. La pressione della camera e l'impedenza acustica possono essere regolati per mezzo di un plug regolabile, collocato in corrispondenza dell'ugello di uscita. Aria preriscaldata (fino a 650 K) e combustibile (metano) sono premiscelati prima di entrare nella camera di combustione e passano attraverso una griglia a nido d'ape, usata per raddrizzare il flusso e ridurre la turbolenza.

Gli esperimenti sono stati condotti presso ONERA per una vasta gamma di condizioni operative: velocità di ingresso dell'aria  $U_0 = 40\text{-}65 \text{ m/s}$ , temperatura ingresso dell'aria  $T_{\text{air}} = 450\text{-}600 \text{ K}$ , rapporto di equivalenza aria-combustibile  $ER = 0.8\text{-}1.0$ , portata massica dell'aria  $m_{\text{air}} = 200\text{-}350 \text{ g/s}$ , pressione della camera  $P = 1.12 - 1.5 \text{ bar}$  e potenza termica della camera di 550 - 830 kW.

La tecnica PLIF dell'OH e la chemiluminescenza dell'OH con camera ad alta velocità, sono stati usati per analizzare la struttura della fiamma e per studiare l'interazione fronte di fiamma-vortice. Il campo di moto è stato studiato mediante misure PIV. I segnali di pressione acustica sono stati rilevati in due posizioni nella camera di combustione, a 1.5 cm e 67.5 cm a valle del gradino, nella parete superiore (piano centrale).

Il flusso nella sua configurazione stabile è caratterizzato da due strati limite attaccati nel canale di ingresso (vedi Fig. 1). Lo spessore dello strato limite (misurato da un tubo di Pitot) all'ingresso è di circa circa 13 mm. Il profilo di velocità corrisponde ad uno strato limite turbolento completamente sviluppato ed è ben descritto dalla legge di potenza  $1/7$ .

Immediatamente a valle del gradino si sviluppa uno shear-layer che porta all'ancoraggio della fiamma turbolenta (vedi Fig. 1). Nella zona del gradino ci sono due ricircoli, uno piccolo in corrispondenza dello spigolo, ed uno molto più grande.

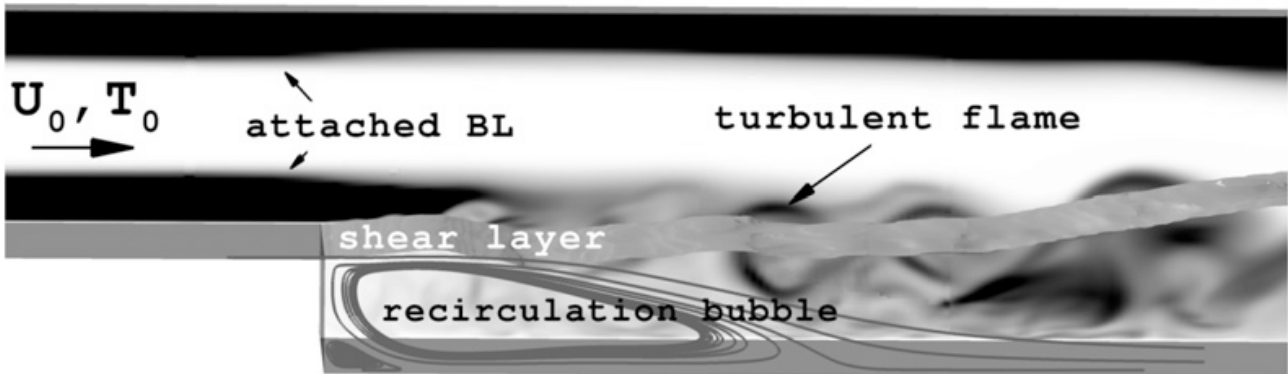


Figura 1. Rappresentazione delle caratteristiche fluidodinamiche osservate nell'esperimento e nella simulazione numerica.

La transizione da regime stabile a instabile si è verificata sperimentalmente quando la pressione è stata aumentata oltre 1.25 bar. In particolare, il caso studiato in questo lavoro mediante simulazione numerica di tipo Large Eddy, la velocità "bulk" della miscela di metano e aria all'ingresso è di 51 m/s, il suo rapporto di equivalenza è 0.82, la temperatura dell'aria di 550 K, la portata di aria è di 270 g/s, e la pressione nel combustore è di 1.35 bar. E' stato rilevato un forte flashback della fiamma che ha interessato una zona ampia circa due volte (65 mm) l'altezza del gradino, a monte di esso. Va osservato che la finestra ottica nell'esperimento non consente di visualizzare più a monte dei 65 mm. La fiamma risale il canale di ingresso quando la pressione diminuisce da un massimo ad un minimo, in circa 8ms; ritorna poi a valle quando la pressione aumenta, in appena 2 ms. Inoltre, sono state identificate fluttuazioni di velocità molto intense, da circa quattro volte (200 m/s) la velocità media fino a valori negativi (ritorno di flusso). Lo spettro dei segnali di pressione ha fatto registrare un picco di 154 dB alla frequenza di 66 Hz (corrisponde ad 1/4 della lunghezza acustica longitudinale del canale di ingresso). Comunque, il segnale di pressione presenta una forte modulazione in frequenza (nel range 55-80 Hz) ed in ampiezza; ha anche mostrato improvvise cadute verso ampiezza nulla con una frequenza molto bassa (circa 2 Hz).

### 2.3 La Simulazione

La simulazione è stata effettuata con il codice ENEA HeaRT utilizzando una griglia di calcolo tridimensionale cartesiana di circa 27M di nodi di calcolo. Sono state incluse nella simulazione anche le pareti laterali. Il canale di ingresso ha 122x132x140 nodi con lunghezze 0.21x0.075x0.1 m nelle direzioni del flusso, quella dell'altezza e della profondità, rispettivamente. La zona di reazione principale a valle del gradino ha 877x200x140 nodi con lunghezze 1.3x0.1x0.1 m.

Le pareti sono state assunte adiabatiche, impermeabili e viscosi. L'uscita è stata trattata come parzialmente non riflessiva con una costante di rilassamento di 0.1. L'ingresso è stato trattato come riflessivo, imponendo le velocità, le relative fluttuazioni turbolente (7 m/s, pari ad un'intensità di turbolenza di circa il 14%, ed imposte con la tecnica di Klein), ed un'ulteriore pulsazione dell'intero profilo medio di velocità imposto, con una frequenza di 66 Hz (come da misure sperimentali) ed un'ampiezza di 2.8 m/s (che in una preparatoria simulazione RANS ha fornito un'ampiezza di 154 dB a 66 Hz nel punto di misura collocato ad 1.5 cm a valle del gradino nella parete superiore). Si osserva che sono state effettuate due classi di simulazioni: una in cui all'ingresso sono state aggiunte, al profilo medio di velocità, solo le fluttuazioni turbolente, ed un'altra in cui è stata anche aggiunta la forzante a 66 Hz (per questa seconda classe, è stata anche effettuata un'analisi parametrica descritta nel seguito).

Per il termine convettivo delle equazioni di trasporto degli scalari (densità, energia, frazioni massiche) è stato adottato lo schema HLLC (solutore di Riemann semplificato) con interpolazione QUICK al terzo ordine, mentre per il termine convettivo dell'equazione di trasporto della quantità di moto è stato adottato lo schema centrato al secondo ordine. Un filtraggio gaussiano delle tre componenti di quantità di moto è stato effettuato ogni 500 passi di integrazione temporale nella sola seconda parte del combustore a valle del gradino, ove la griglia presenta celle con rapporto base/altezza superiore a 10: questa procedura aumenta la robustezza del calcolo smorzando eventuali onde spurie.

E' stato utilizzato il modello di turbolenza di Smagorinsky nella sua formulazione dinamica. Lo Schmidt turbolento è stato assunto pari a 0.7, mentre il Prandtl turbolento a 0.9.

Il meccanismo di reazione adottato è il single step di Westbrook and Dryer [32]. Il modo più semplice di rappresentare l'ossidazione di un combustibile convenzionale è quello costituito da un'unica reazione globale del tipo



L'adozione di una reazione globale è il modo più conveniente per approssimare gli effetti delle molte reazioni elementari che effettivamente avvengono. La velocità di tale reazione deve quindi essere una media opportuna delle velocità delle singole reazioni coinvolte. Un meccanismo single-step predice generalmente bene le velocità di fiamma in un ampio range di condizioni operative, ma presenta diversi difetti che possono essere importanti per certe applicazioni. Assumendo semplicemente che i prodotti di combustione siano CO<sub>2</sub> ed H<sub>2</sub>O, le temperature sono generalmente sovrappredette. Infatti, in corrispondenza della temperatura adiabatica di fiamma tipica degli idrocarburi (circa 2000K), tra i prodotti



della combustione esiste una non trascurabile quantità di CO ed H<sub>2</sub> in equilibrio con CO<sub>2</sub> ed H<sub>2</sub>O. Questo è vero, seppur a livelli più bassi, anche per altre specie, come ad esempio H, O ed OH (specie radicali di particolare importanza), che derivano da reazioni endotermiche (assorbono calore). Questo equilibrio abbassa le temperature al di sotto dei valori predetti da un meccanismo single-step.

Adottando quindi un meccanismo globale, l'accensione tende ad essere favorita, e quindi poco si adatta a cogliere in modo accurato eventuali fenomeni di estinzione localizzata, che presumibilmente accompagnano il fenomeno di flashback rilevato sperimentalmente nel caso in esame. Tale meccanismo single-step ha però il vantaggio di far ottenere in tempi relativamente brevi una fiamma nel dominio computazionale, poiché richiede il trasporto di sole cinque specie (azoto compreso). Si sottolinea che è comunque in grado di cogliere fenomeni globali, e cioè estinzioni generalizzate dovute a macroscopici effetti di stiramento fluidodinamico del fronte di fiamma, e fenomeni di flashback generalizzato (con generalizzato si intende che i fenomeni riguardano una zona macroscopica del fronte di fiamma).

Come già detto, sono state effettuate due classi di simulazioni. La prima simulazione, effettuata senza la pulsazione di velocità a 66 Hz forzata in ingresso, predice una fiamma stabilmente ancorata al gradino. La Fig. 2 mostra un campo istantaneo della temperatura e della pressione su alcune pareti del combustore, e riporta anche due iso-superficie di temperatura a 1700 e 2000 K. Come si può notare, la fiamma predetta risulta ben ancorata allo spigolo e molto corrugata.

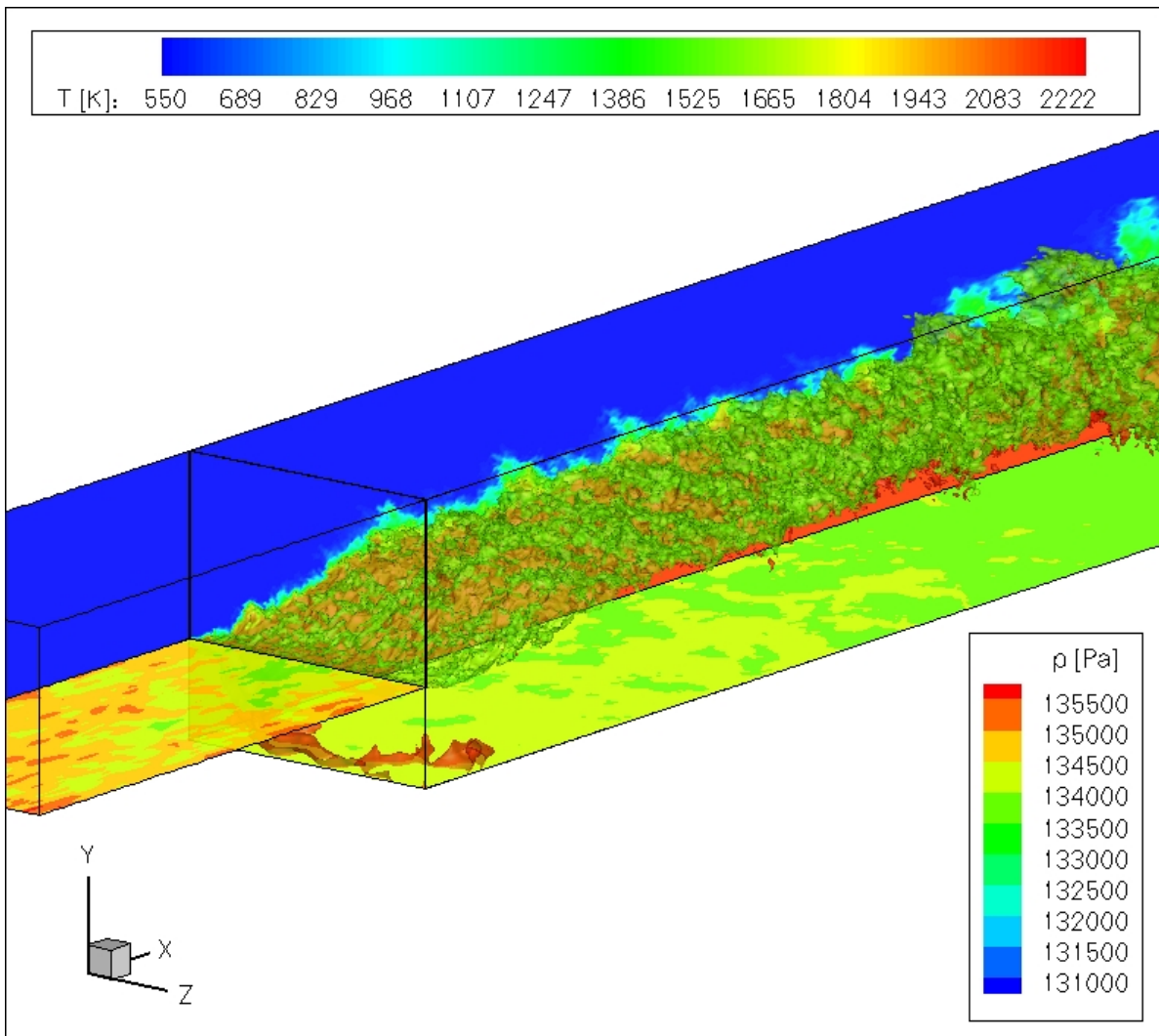


Figura 2. Campo istantaneo associato alla simulazione senza pulsazione forzata della velocità all'ingresso: sulla parete verticale è mostrata la distribuzione di temperatura [K], su quelle orizzontali la distribuzione di pressione [Pa]. Sono inoltre riportate le due iso-superficie a 1700 e 2000 K.

A valle della prima simulazione, è stata aggiunta la pulsazione di velocità all'ingresso, forzata a 66 Hz con un'ampiezza di 2.8 m/s. Sono stati variati diversi parametri: il coefficiente di rilassamento dell'uscita non riflessiva è stato variato da 0.1 a 0.8; l'ampiezza della pulsazione a 66 Hz è stata aumentata da 2.8 a 12 m/s. Si sottolinea che nessuna delle simulazioni effettuate ha predetto fenomeni di flashback evidenti come nell'esperimento, ma solo un diverso modo di oscillare del fronte di fiamma, accompagnato da qualche debole ritorno di fiamma e soprattutto da estinzioni generalizzate nella zona tra il gradino e la fine del ricircolo principale. Si rileva che l'aumento dell'ampiezza della pulsazione a 66 Hz ha solo intensificato tali fenomeni di estinzione, senza neppure produrre deboli flashback.

Le Fig. 3 e 4 mostrano un campo istantaneo ottenuto con coefficiente di riflessione pari a 0.1 ed ampiezza della oscillazione forzata di velocità pari a 2.8 m/s. Si nota l'effetto prodotto dal passaggio dell'onda positiva di pressione (sovrapressione), forzata all'ingresso, sul fronte di fiamma. In questo istante il fronte viene schiacciato verso la parete inferiore del combustore, subendo un forte stiramento fluidodinamico che porta ad un'estinzione generalizzata, evidenziata con dettaglio nella Fig. 4, che si ritrova negli esperimenti. Allo stesso tempo si osserva che un fronte di fiamma resta stabilmente acceso in prossimità della parete del gradino. E' questa la zona che garantisce lo sviluppo di un nuovo fronte di fiamma continuo, simile a quello di Fig. 2.

Quando l'onda di depressione investe la zona del gradino, il fronte di fiamma tende a risalire nel canale di iniezione, come mostrato in Fig. 5. Tale fenomeno di flashback è però molto debole: il fronte riesce a risalire solo una piccola distanza a monte del gradino. Analizzando la distribuzione della pressione sulla parete inferiore del canale di ingresso (sempre in Fig. 5), si capisce che questo è dovuto ad una rapida crescita della pressione all'ingresso, con conseguente accelerazione del flusso a valle che impedisce al fronte di risalire. La pressione osservata all'ingresso, circa 1.7 bar, è superiore alla pressione nominale del combustore (1.35 bar). Questa sovrapressione è non fisica: è dovuta all'accoppiamento tra l'onda forzata all'ingresso, l'onda riflessa dalla propagazione del fronte di fiamma nel canale a monte del gradino, ed il tipo di condizione al contorno adottata per l'ingresso. Infatti, avendo assunto una condizione di ingresso di tipo riflessivo (ove cioè velocità, temperatura e composizione sono fissate), eventuali onde incidenti su esso saranno riflesse in modo non fisico, andando così ad impedire il fenomeno di flashback che stiamo cercando di riprodurre nella simulazione.

La cura per il problema riscontrato all'ingresso consiste nell'assumere una condizione non riflessiva o parzialmente non riflessiva per l'ingresso [10-13]; al tempo stesso è necessario imporre una condizione "più riflessiva" per l'uscita (al massimo pressione imposta all'uscita se si assume la pura non riflessione all'ingresso) per evitare problemi di "deriva" del campo di pressione (cioè, allontanamento dalla pressione nominale, dovuto alla mancanza di una condizione forte sulla pressione).

Al momento la condizione non riflessiva non è implementata per gli ingressi, nel codice HeaRT. E' necessario dunque un certo lavoro che sarà affrontato nella prossima annualità. Lo stesso caso test qui esaminato verrà quindi simulato nuovamente con le nuove condizioni di ingresso e con un'opportuna scelta delle condizioni di uscita (riflessiva pura, equivalente a pressione imposta, o parzialmente non riflessiva ma con un coefficiente di rilassamento tale da far "sentire" il valore di pressione nominale all'integrazione delle equazioni).

Per concludere il presente lavoro, abbiamo esaminato gli effetti di una cinetica chimica più dettagliata. Si ritiene che il passaggio ad un meccanismo di cinetica chimica finito più dettagliato del semplice single-step, sia obbligatorio per cogliere in modo più accurato gli attesi fenomeni di estinzione localizzata e di flashback. Quindi a partire dal campo ottenuto con il meccanismo single-step, abbiamo investigato gli effetti di cinetica chimica adottando due diversi meccanismi a 17 specie chimiche, quello di Law e quello di Smooke. Tali meccanismi si sono però rivelati "stiff", portando alla divergenza del calcolo. Anche questo aspetto verrà quindi considerato nelle simulazioni della prossima annualità.

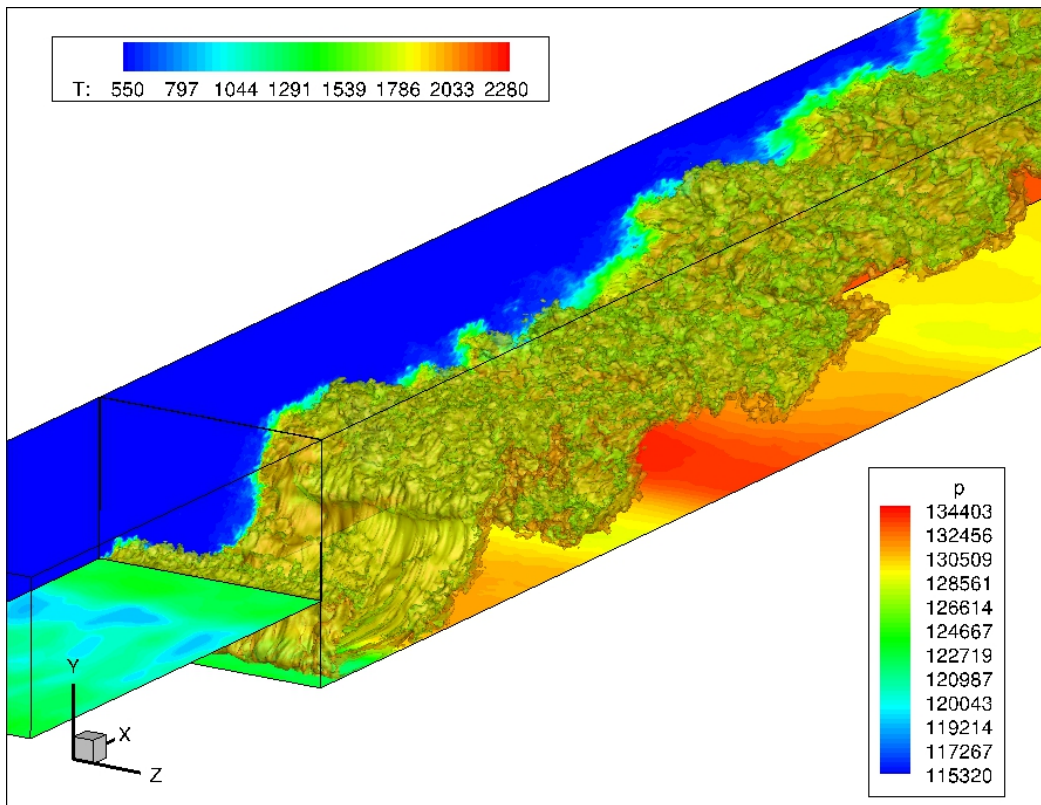


Figura 3. Stiramento del fronte. Campo istantaneo associato alla simulazione con pulsazione forzata della velocità all'ingresso (66 Hz con ampiezza di 2.8 m/s): sulla parete verticale è mostrata la distribuzione di temperatura [K], su quelli orizzontali la distribuzione di pressione [Pa]. Sono inoltre riportate le due iso-superficie a 1700 e 2000 K.

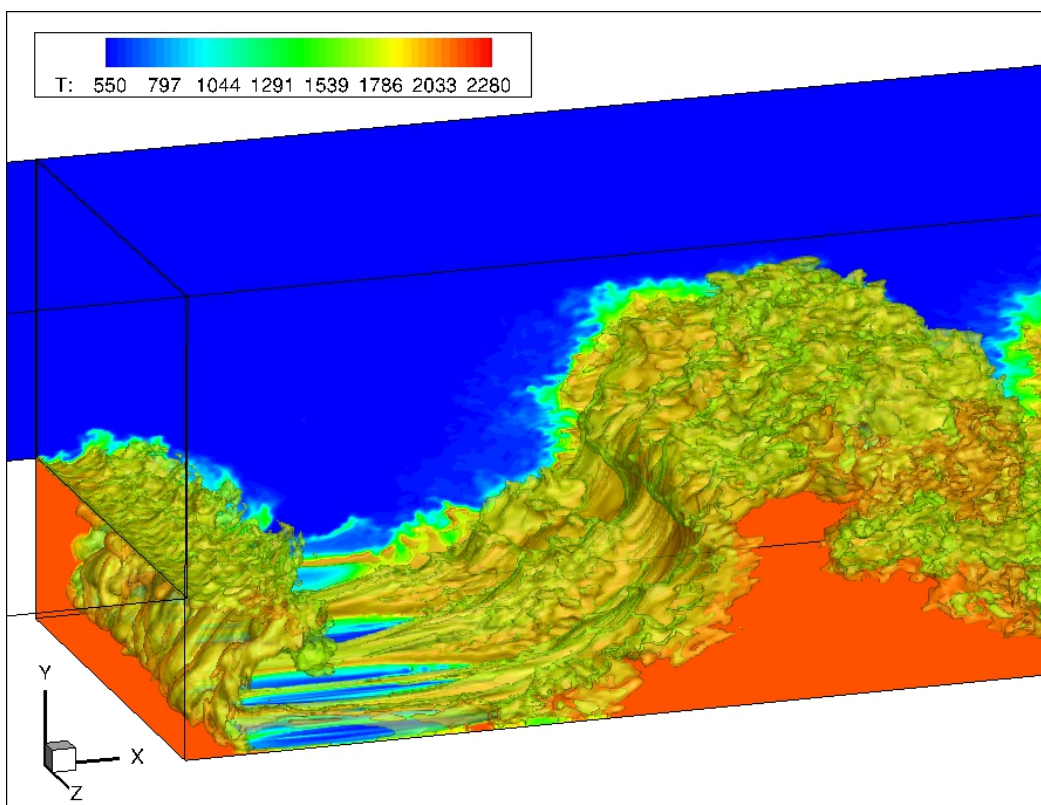


Figura 4. Estinzione del fronte. Dettaglio della Fig. 3, che evidenzia diverse zone di estinzione del fronte di fiamma a valle del gradino, che portano alla separazione della fiamma. Sulla parete verticale è ancora una volta mostrata la distribuzione di temperatura [K], e sono sempre riportate le due iso-superficie a 1700 e 2000 K.

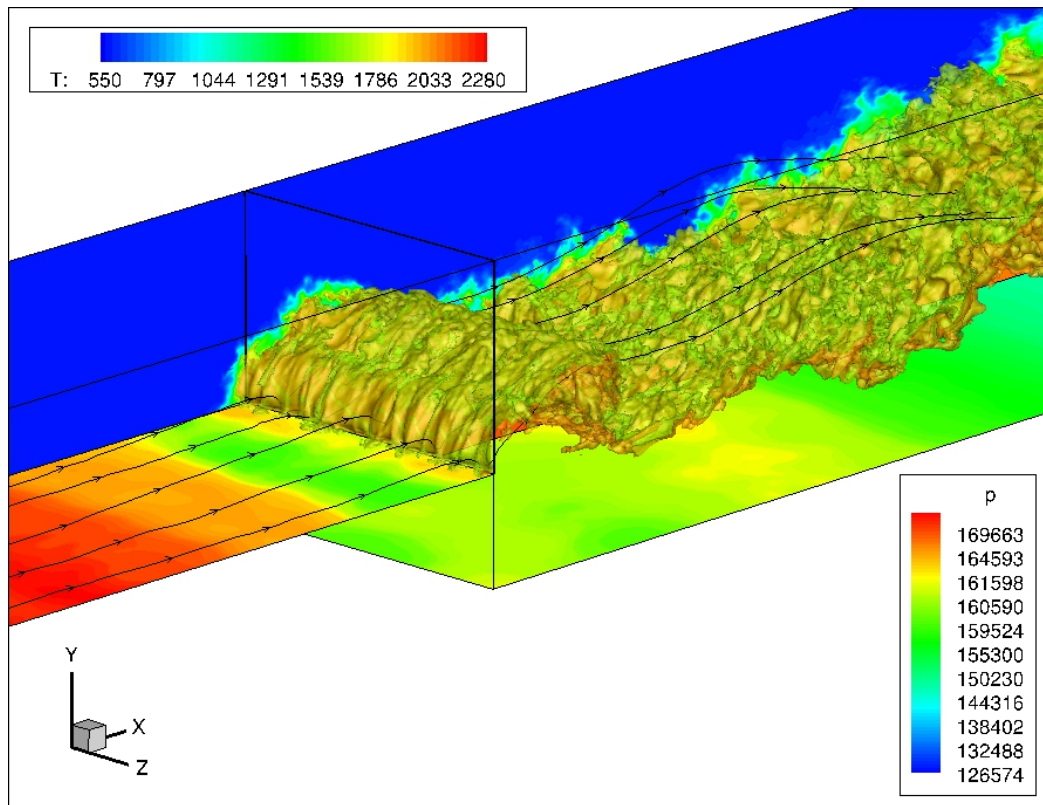


Figura 5. Debole fenomeno di flashback. Campo istantaneo associato alla simulazione con pulsazione forzata della velocità all'ingresso (66 Hz con ampiezza di 2.8 m/s): sulla parete verticale è mostrata la distribuzione di temperatura [K], su quelli orizzontali la distribuzione di pressione [Pa]. Sono inoltre riportate le due iso-superficie a 1700 e 2000 K.

### 3 Conclusioni

Il caso test selezionato è molto interessante dal punto di vista applicativo, perché la fiamma premiscelata in esame si colloca nel regime ispessito e corrugato tipico dei combustori operati nelle turbine a gas per la produzione di energia elettrica. L'interesse è intensificato dalla presenza di fenomeni di flashback.

Le simulazioni hanno colto fenomeni di estinzione generalizzata e deboli ritorni di fiamma. Analizzando i dati, si è dimostrato che assumendo all'ingresso una condizione di tipo riflessivo, il fenomeno di flashback è contrastato e addirittura impedito. Si crea un'inevitabile interazione tra la fisica in gioco all'interno del campo e la lunghezza del canale di ingresso.

Nella prossima annualità sarà quindi implementata nel codice HeaRT una condizione non riflessiva o parzialmente non riflessiva per gli ingressi. La simulazione sarà nuovamente effettuata, assumendo anche meccanismi cinetici più dettagliati con caratteristiche di stabilità per la numerica attualmente implementata nel codice HeaRT.

## 4 Riferimenti bibliografici

- [1] Cecere D., Giacomazzi E. "An Immersed Volume Method for Large Eddy Simulation of Compressible Flows Using a Staggered-Grid Approach", *Comp. Meth. in Applied Mech. and Eng.*, 280:1-27, 2014.
- [2] Février P., Simonin O., and Squires K.D., "Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: theoretical formalism and numerical study", *J. Fluid Mech.*, 533:1-46, 2005.
- [3] Donato F., Giacomazzi E., Cecere D., Picchia F.R., Arcidiacono N., Favini B., Bruno C. "Large Eddy Simulation of Particle Laden Flows", XXXIV Italian Section of the Combustion Institute, Rome, Italy, 24-26 October 2011.
- [4] Donato F., Rossi G., Favini B., Giacomazzi E., Cecere D., Picchia F.R., Arcidiacono N. "LES Simulation of a Devolatilization Experiment on the IPFR Facility", XXXV Italian Sect. Comb. Inst., Milano, 10-13 October 2012.
- [5] Nagarajan S., Lele S.K., Ferziger J.H., *J. Comput. Phys.*, 191:392-419, 2003.
- [6] Cecere D., Ingenito A., Giacomazzi E., Bruno C., "Hydrogen / Air Supersonic Combustion for Future Hypersonic Vehicles", *Int. J. Hydrogen Energy*, 36(18):11969-11984, 2011.
- [7] Nagarajan S., Lele S.K., Ferziger J.H., "A robust high order compact method for large eddy simulation", *J. Comput. Phys.*, 191(2):392-419, 2003.
- [8] Gamet L., Ducros F., Nicoud F., Poinso T., "Compact finite difference scheme on non-uniform meshes. Application to direct numerical simulations of compressible flows", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 29:159-191, 1999.
- [9] Kawai S., Shankar S.K., Lele S., "Assessment of localized artificial diffusivity scheme for large-eddy simulation of compressible turbulent flows", *J. Comput. Phys.* 229:1739-1762, 2010.
- [10] Rudy D.H. and Strikverda J.C., *J. Comput. Phys.*, 36:55-70, 1981.
- [11] Poinso T.J. and Lele S.K., "Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows", *J. Comput. Phys.*, 101:104-129, 1992.
- [12] Polifke W. and Wall C., "Non-reflecting boundary conditions for acoustic transfer matrix estimation with LES", Center for Turbulence Research, Proceedings of Summer Program, Stanford, 2002.
- [13] Sutherland J.C. and Kennedy C.A., *J. Comput. Phys.*, 191:502-524, 2003.
- [14] Klein M., Sadiki A., Janicka J., "Digital filter based generation of inflow data for spatially developing Direct Numerical or Large Eddy Simulations", *J. Comput. Phys.*, 186:652-665, 2003.
- [15] Rippol J.F. and Pitsch H., "Modelling turbulence-radiation interactions for large sooting turbulent flames". Annual research briefs, Center for Turbulence Research, 2002.
- [16] Ern, A. and Giovangigli, V., "Fast and accurate multicomponent transport property evaluation", *J. Comput. Phys.*, 120:105-116, 1995.
- [17] Ern A. and Giovangigli V., "Optimized transport algorithms for flame codes". *Combustion Science and Technology*, 118:387-395, 1996.
- [18] Ern A. and Giovangigli V., "EGlib: A General-Purpose Fortran Library for Multicomponent Transport Property Evaluation". Manual of EGlib version 3.4, 2004.
- [19] Giacomazzi E., Picchia F.R., Arcidiacono N., "A Review on Chemical Diffusion, Criticism and Limits of Simplified Methods for Diffusion Coefficients Calculation", *Combustion Theory and Modeling*, 12(1):135-158, 2008.
- [20] Giacomazzi E., Cecere D., Picchia F.R., Arcidiacono N., "A New CFD-Oriented Mixing-Rule Strategy for the Calculation of Mixture Properties in High-Pressure Fluids", RdS/PAR2013, Ricerca di Sistema, Accordo di Programma tra ENEA ed il Ministero dello Sviluppo Economico, October 2014.
- [21] Yoshizawa A. and Horiuti K., "A statistically-derived subgrid scale kinetic energy model for large-eddy simulation of turbulent flows", *J. Phys. Soc. Japan*, 54:2834, 1985.
- [22] Menon S., Yeung P.-K., and Kim W.-W., "Effect of subgrid models on the computed interscale energy transfer in isotropic turbulence", *Computers and Fluids*, 25(2):165-180, 1996.
- [23] Chakravarthy V.K. and Menon S., "Subgrid modeling of turbulent premixed flames in the flamelet regime", *Flow, Turbulence and Combustion*, 65:133-161, 2000.
- [24] Tramecourt N., Menon S., Amaya J., "LES of supercritical combustion in a gas turbine engine", n. 3381, 40<sup>th</sup> AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Fort Lauderdale, USA, 12-14 July 2004.

- [25] Giacomazzi E., Bruno C., Favini B., “Fractal Modelling of Turbulent Mixing”, Comb. Theory and Mod., 3:637-655, 1999.
- [26] Giacomazzi E., Bruno C., Favini B., “Fractal Modelling of Turbulent Combustion”, Comb. Theory and Mod., 4:391-412, 2000.
- [27] Giacomazzi E., Battaglia V., Bruno C., “The Coupling of Turbulence and Chemistry in a Premixed Bluff-Body Flame as Studied by LES”, Comb. and Flame, 138(4):320-335, 2004.
- [28] Cecere D., Giacomazzi E., Picchia F.R., Arcidiacono N., Donato F., Verzicco R., “*A Non-Adiabatic Flamelet Progress-Variable Approach for LES of Turbulent Premixed Flames*”, Flow Turbulence and Combustion, 86(3-4):667-688, 2011.
- [29] Giacomazzi E., Cecere D., Picchia F.R., Arcidiacono N., “*Sviluppo di un Modello di Combustione Generalizzato per la Large Eddy Simulation di Fiamme Premiscelate*”, RdS/2013/214, PAR2012, Ricerca di Sistema, Accordo di Programma tra ENEA ed il Ministero dello Sviluppo Economico, 26 September 2013.
- [30] Giacomazzi E., Cecere D., Picchia F.R., Arcidiacono N., “*Validazione di un Modello di Combustione Generalizzato per la Large Eddy Simulation di Fiamme Premiscelate*”, RdS/PAR2013, Ricerca di Sistema, Accordo di Programma tra ENEA ed il Ministero dello Sviluppo Economico, October 2014.
- [31] V. Sabel'nikov, C. Brossard, M. Orain, F. Grisch, M. Barat, A. Ristori, P. Gicquel, "Thermo-Acoustic Instabilities in a Backward-Facing Step Stabilized Lean-Premixed Flame in High Turbulence Flow", 14th Int. Symp. on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics, Lisbon, Portugal, 07-10 July, 2008.
- [32] C.K. Westbrook, F.L. Dryer, “*Simplified Reaction Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames*”, Combustion Science and Technology, 27:31-43, 1981.
- [33] M.D. Smooke, I.K. Puri, K. Seshadri, “*A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air*”, Proceedings of the 22nd Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 21:1783-1792, 1988.
- [34] R. Sankaran, E.R. Hawkes, J.H. Chen, T. Lu, C.K. Law, “*Structure of a spatially developing turbulent lean methane-air Bunsen flame*”, Proceedings of the Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 31(1):1291-1298, 2007.