



Ente per le Nuove tecnologie,
l'Energia e l'Ambiente



Ministero dello Sviluppo Economico

RICERCA SISTEMA ELETTRICO

Modellazione della combustione bifase solido-gas di uno slurry di carbone

F. Donato, B. Favini, E. Giacomazzi, F. R. Picchia

MODELLAZIONE DELLA COMBUSTIONE BIFASE SOLIDO-GAS DI UNO SLURRY DI CARBONE

F. Donato, B. Favini (Università di Roma La Sapienza)

E. Giacomazzi, F. R. Picchia (ENEA)

Novembre 2008

Report Ricerca Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Area: Produzione e fonti energetiche

Tema: Tecnologie innovative per migliorare i rendimenti di conversione delle centrali a polverino di carbone - Sviluppo di un sistema di combustione di tipo "flameless" per impianti di produzione di elettricità con ridottissimi livelli di emissione di inquinanti e CO₂

Responsabile Tema: Stefano Giammartini, ENEA

Sommario

Nel presente documento viene proposto un modello per la simulazione di flussi bifase che dovrà essere implementato nel codice HeaRT. Tale codice è ad oggi in grado di simulare flussi turbolenti di miscele di specie reagenti con formulazione LES (Large Eddy Simulation). Il modello è scritto in un riferimento euleriano per entrambe le fasi che sono trattate come mezzi continui all'interno del volume di controllo. Per ciascuna viene scritto un set di equazioni di conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. A queste si aggiungono le equazioni di conservazione delle specie chimiche. Tali equazioni sono scritte in termini di variabili filtrate, il che ci riconduce ad una formulazione di tipo LES. Per quanto riguarda la fase gassosa, il modello è stato sostanzialmente ottenuto partendo da quello implementato nel codice HeaRT, nel quale sono stati introdotti i termini sorgente che descrivono l'interazione tra le fasi. Le principali ipotesi sotto le quali sono state ottenute le espressioni delle leggi di conservazione sono quelle di particelle sufficientemente piccole, densità della fase condensata molto maggiore di quella della fase gassosa e flusso ad alta diluizione, ovvero di bassa frazione volumetrica della fase condensata e di assenza di urti tra particelle. Tale modello è da considerarsi un passo intermedio verso un modello più complesso. Sono infine mostrate le risposte ad una serie di problemi alle condizioni iniziali, indotte in un modello monodimensionale dai termini sorgente proposti nel presente lavoro.

Indice

Introduzione	1
1 Sviluppo modello matematico per la simulazione di flussi bifase	3
1.1 Modello euleriano miscela gas reagenti	3
1.2 Modello euleriano di flussi multifase di tipo multifluido	5
1.2.1 Equazioni di conservazione per la fase gassosa	6
1.2.2 Equazioni di conservazione per la fase solida	7
1.2.3 Osservazioni sull'accoppiamento fase continua-fase dispersa	9
1.3 Modello d'interazione due vie classico di tipo aerotermodinamico	11
1.3.1 Termini di scambio di forze	11
1.3.2 Termini di scambio di calore	15
1.4 Modello di cambiamento di fase del tipo evaporazione - solidificazione	16
1.5 Modello di combustione	18
1.6 Modello di chiusura LES	18
2 Modello monodimensionale di prova per flussi bifase	20
2.1 Modello matematico	20
2.1.1 Formulazione dei termini di accoppiamento tra le fasi	21
2.2 Condizioni al contorno	23
2.3 Schema numerico adottato	24
2.4 Prove effettuate	24
2.4.1 Prova 1	24
2.4.2 Prova 2	28
2.4.3 Prova 3	28
2.4.4 Prova 4	30
2.4.5 Prova 5	33

2.4.6 Prove con scambio di massa	37
Conclusioni	40
A Equazione dell'energia per la fase gassosa in forma di temperatura	42
Bibliografia	45

Introduzione

Il presente lavoro nasce nell'ambito di una collaborazione tra il Dipartimento di Meccanica ed Aeronautica (Prof. Bernardo Favini ed Ing. Filippo Donato) ed il Dipartimento ENE/IMP (Dr.ssa Franca Rita Picchia) del Centro Ricerche ENEA Casaccia. L'obiettivo principale è quello di creare le basi per la simulazione numerica del combustore multi-fase ISOTHERM nel progetto ITEA-ENEL-ENEA.

Avere a disposizione strumenti di predizione dei processi fisico-chimici coinvolti in funzione dei parametri costruttivi e di quelli di controllo dell'intero processo è di centrale importanza da un punto di vista economico, ad esempio per una corretta valutazione a priori del rendimento nominale dell'impianto, e dal punto di vista tecnico per stimare i requisiti di sottosistemi come ad esempio quello di controllo delle emissioni in atmosfera. Questo lavoro è da considerarsi come iniziale approccio al problema dei flussi multi-fase. In particolare, qui vengono accoppiati opportunamente un modello per flussi monofase, multispecie e reagenti, con condizioni di ingresso in mezzo poroso, applicabile per esempio per la simulazione di un gassificatore. Ovviamente, nettamente diverse sono le condizioni del campo termo-fluidodinamico nei sistemi in cui la fase dispersa sia trascinata da una corrente continua gassosa. In questo caso la fase solida è dispersa nella fase gassosa e scambia con questa massa, quantità di moto ed energia. Il cambiamento di fase avviene durante il moto delle particelle. Tutto questo comporta che non si possa studiare l'evoluzione delle variabili che descrivono una delle fasi senza risolvere contemporaneamente il campo relativo alla o alle altre. Questo spiega la necessità di sviluppare un modello nel quale gli scambi tra le fasi siano opportunamente modellati in modo, tra l'altro, da tenere conto degli effetti legati alla presenza di fenomeni turbolenti.

Nel presente documento viene proposto un modello per la simulazione di flussi bifase che dovrà essere implementato nel codice *HeaRT* di proprietà dell'ENEA.

Tale codice è ad oggi in grado di simulare flussi turbolenti di miscele di specie reagenti con formulazione LES (*Large Eddy Simulation*). Il modello è scritto in un riferimento euleriano per entrambe le fasi ed è del tipo *two-fluid*, ovvero entrambe le fasi sono trattate come mezzi continui all'interno del volume di controllo, e per ciascuna viene scritto un set di equazioni di conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. A queste si aggiungono le equazioni di conservazione delle specie chimiche. Tali equazioni sono scritte in termini di variabili filtrate, il che ci riconduce ad una formulazione di tipo LES. Per quanto riguarda la fase gassosa, il modello è stato sostanzialmente ottenuto partendo da quello implementato nel codice *HeaRT*, nel quale sono stati introdotti i termini sorgente che descrivono l'interazione tra le fasi. Le principali ipotesi sotto le quali sono state ottenute le espressioni delle leggi di conservazione sono quelle di particelle sufficientemente piccole, densità della fase condensata molto maggiore di quella della fase gassosa e flusso ad alta diluizione, ovvero di bassa frazione volumetrica della fase condensata e di assenza di urti tra particelle. Tale modello è da considerarsi un passo intermedio verso un modello comprensivo, capace di simulare l'intero campo.

Capitolo 1

Sviluppo modello matematico per la simulazione di flussi bifase

Nelle sezioni che seguono saranno presentate le equazioni necessarie a descrivere i flussi bifase sotto opportune ipotesi. La maggior parte di queste saranno evidenziate in corrispondenza del contesto nel quale la loro assunzione si rende necessaria per proseguire nello sviluppo. Alcune ipotesi sono tuttavia necessarie a ricavare tutte le equazioni di conservazione che compongono il modello e ci sembra perciò opportuno richiamarle qui di seguito:

- le interfacce tra le fasi hanno spessori nulli e non permettono perciò processi di accumulo al loro interno;
- si suppongono nulli gli errori di commutazione tra le operazioni di derivata e di filtraggio.

1.1 Modello euleriano miscela gas reagenti

L'equazione di trasporto delle specie per miscele di gas reagenti in sistemi bifase, filtrata alla Favre, può essere ottenuta seguendo le indicazioni riportate in [1] e [2], ottenendo

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\alpha}_g \bar{\rho}_{gas} \tilde{Y}_i \right) + \nabla \cdot \left(\bar{\alpha}_g \bar{\rho}_{gas} \tilde{Y}_i \tilde{\mathbf{u}}_g \right) &= -\nabla \cdot \left(\bar{\alpha}_g \bar{\mathbf{J}}_i \right) + \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_{gas} \tilde{\dot{\omega}}_i + \tilde{\dot{\omega}}_i^{ev} \\ &+ \nabla \cdot \left(\bar{\alpha}_g \bar{\rho}_{gas} \tilde{Y}_i \tilde{\mathbf{u}}_g - \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_{gas} \widetilde{Y_i \mathbf{u}_g} \right) \end{aligned} \quad (1.1)$$

dove ρ_{gas} è la densità della fase gassosa, α_g è la frazione volumetrica della fase gasosa nel volume di controllo, Y_i è la frazione in massa della specie i-esima nella fase gassosa, \mathbf{u}_g è la velocità della fase gassosa, $\dot{\omega}_i$ e $\dot{\omega}_i^{ev}$ sono i tassi di produzione della specie i-esima dovuti alle reazioni chimiche ed all'evaporazione dalla fase solida rispettivamente e \mathbf{J}_i è il flusso di massa diffusivo definito secondo Hirschfelder come

$$\mathbf{J}_i = +\rho_{gas} Y_i \mathbf{V}_i = -\rho_{gas} \frac{W_i}{W_{mix}} D_i \nabla X_i \quad (1.2)$$

Nella 1.2 W_i e W_{mix} sono i pesi molecolari della specie i-esima e della miscela rispettivamente, \mathbf{V}_i è la velocità di diffusione della specie i-esima, D_i è il suo coefficiente di diffusività nella miscela mentre X_i è la frazione molare che le compete. Il coefficiente di diffusività D_i è a sua volta definito come

$$D_i = \frac{1 - Y_i}{\sum_{j=1, j \neq i}^{N_s} \frac{X_j}{D_{ji}}} \quad (1.3)$$

dove N_s è il numero di specie presenti nella miscela e D_{ji} è il coefficiente di diffusione binaria della specie j-esima nella i-esima.

Le grandezze soprallineate nella 1.1 sono filtrate alla Reynolds mentre quelle con la tilde sono filtrate alla Favre.

Nell'ipotesi di frazione volumetrica della fase gassosa $\alpha_g \simeq 1$ (flussi molto diluiti), sarà possibile trascurare gli effetti della sola variazione di α_g sul resto delle variabili. Riscriveremo perciò le equazioni in termini di $\rho_g = \alpha_g \rho_{gas}$. La chiusura dei termini non-lineari così come la rappresentazione dei termini di sottogriglia è operata tramite il concetto di viscosità turbolenta μ_t il cui valore, così come quello del termine sorgente dovuto alle reazioni chimiche, viene stimato nel modello FM [3]. La forma finale della 1.1 è dunque, omettendo per semplicità le indicazioni sul tipo di filtraggio,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g Y_i) + \nabla \cdot [\rho_g Y_i (\mathbf{u}_g + \mathbf{V}_C)] = \nabla \cdot \left(\rho_g \frac{W_i}{W_{mix}} (D_i + D_{ti}) \nabla X_i \right) + \rho_g \dot{\omega}_i + \dot{\omega}_i^{ev} \quad (1.4)$$

dove la $D_{ti} = \left(\frac{\mu_t}{\rho_g Sc_{ti}} \right)$ è la diffusività turbolenta, la quale è definita in funzione

della μ_t e del numero di Schmidt della specie i -esima. La velocità \mathbf{V}_C è invece una velocità di correzione che è necessario introdurre nel modello al fine di garantire la conservazione della massa complessiva della miscela. Tale velocità è data da

$$\mathbf{V}_C = - \sum_{i=1}^{N_s} \frac{W_i}{W_{mix}} D_i \nabla X_i \quad (1.5)$$

La 1.4 è formalmente analoga a quella che si ottiene per il caso monofase, ad eccezione della presenza del termine sorgente $\dot{\omega}_i^{ev}$ che rappresenta il flusso in massa per unità di volume della specie considerata dalla fase condensata a quella gassosa. Tale termine può essere modellato semplicemente come una frazione, definita dall'utente, del complessivo flusso di massa tra le due fasi $\dot{\Gamma}_g$ (almeno nel caso in cui venga trascurato il processo di condensazione, o quanto meno esso non venga specificato specie per specie). Il modello utilizzato per tale flusso sarà descritto nella sezione 1.4.

1.2 Modello euleriano di flussi multifase di tipo multifluido

Le procedure per ottenere le equazioni del tipo multifluido per flussi multifase, derivandole dalle ben note equazioni di Navier-Stokes, sono sintetizzate in [1], [4] e [2]. Seguendo tali indicazioni per la generica fase f , ipotizzando che le sole forze di massa agenti sul sistema siano quelle di gravità e trascurando gli effetti delle fluttuazioni di pressione nel ricavare l'equazione di quantità di moto, si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\alpha}_f \bar{\rho}_f) + \nabla \cdot (\bar{\alpha}_f \bar{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f) = \dot{\Gamma}_f \quad (1.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\alpha}_f \bar{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f) + \nabla \cdot (\bar{\alpha}_f \bar{\rho}_f \mathbf{u}_f \tilde{\mathbf{u}}_f) &= \nabla \cdot (\bar{\alpha}_f \bar{\boldsymbol{\tau}}_f) - \bar{\alpha}_f \nabla \bar{P}_f + \bar{\alpha}_f \bar{\rho}_f \mathbf{g} + \\ &+ \dot{\boldsymbol{\Psi}}_f + \dot{\mathbf{I}}_f \end{aligned} \quad (1.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\alpha}_f \bar{\rho}_f \widetilde{e_{t,f}}) + \nabla \cdot (\bar{\alpha}_f \bar{\rho}_f e_{t,f} \widetilde{\mathbf{u}}_f) &= \nabla \cdot (\bar{\alpha}_f \overline{\mathbf{T}}_f \mathbf{u}_f) - \nabla \cdot (\bar{\alpha}_f \bar{\mathbf{q}}_f) + \\ &+ \bar{\alpha}_f \bar{\rho}_f \left[\sum_{s=1}^{N_s} Y_s \mathbf{g} \cdot (\mathbf{u}_f + \mathbf{V}_{sf}) \right] + \\ &+ \dot{Q}_{f1} + \dot{Q}_{f2} + L\dot{F}_f \end{aligned} \quad (1.8)$$

Nelle relazioni precedenti $e_{t,f}$ è l'energia totale, \mathbf{g} è l'accelerazione di gravità, $\bar{\mathbf{q}}_f$ è il flusso di calore uscente dal volume di controllo, mentre $\overline{\mathbf{T}}_f$ e $\boldsymbol{\tau}_f$ sono il tensore degli sforzi e degli sforzi viscosi rispettivamente e P_f è la pressione; tutte queste grandezze sono riferite alla fase f . I termini sorgente $\dot{\Gamma}_f$, $\dot{\boldsymbol{\Psi}}_f$, $\dot{\mathbf{I}}_f$, \dot{Q}_{f1} , \dot{Q}_{f2} , $L\dot{F}_f$, che compaiono nelle 1.6-1.8, rappresentano gli effetti sulle variabili integrate dell'interazione tra le fasi e saranno oggetto delle sezioni 1.3 e 1.4. In particolare $\dot{\Gamma}_f$ tiene in conto gli effetti dello scambio di massa tra le fasi, $\dot{\boldsymbol{\Psi}}_f$ rappresenta il contributo nella 1.7 dovuto alla quantità di moto della massa che passa da una fase all'altra, così come \dot{Q}_{f2} ne rappresenta il contributo alla variazione locale dell'energia totale. $\dot{\mathbf{I}}_f$ tiene invece conto degli effetti delle forze di natura aerodinamica sulla variazione della quantità di moto della fase f mentre $L\dot{F}_f$ è il lavoro fatto dalle stesse all'interfaccia e \dot{Q}_{f1} è il flusso di calore verso la fase f . La formulazione 1.6-1.8 è comune ad entrambe le fasi. Vedremo ora che forma acquistano queste equazioni per la fase solida o gassosa, avendo assunto valide alcune ipotesi semplificative.

1.2.1 Equazioni di conservazione per la fase gassosa

Le equazioni di conservazione per la fase gassosa sono facilmente derivabili dalle 1.6-1.8. Come già fatto nel paragrafo 1.1 poniamoci nel limite $\alpha_g \simeq 1$. Sia anche qui definita una $\rho_g = \alpha_g \rho_{gas}$. Seguendo quanto fatto in [3] assumeremo

che la chiusura dei termini non lineari così come la rappresentazione dei termini di sottogriglia possa essere fatta semplicemente moltiplicando i coefficienti di diffusione per un fattore $1 + \frac{\mu_t}{\mu}$ dove μ e μ_t sono la viscosità molecolare e quella turbolenta rispettivamente. Le equazioni così ottenute e scritte in termini di grandezze filtrate saranno

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}_g) = \dot{\Gamma}_g^* \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial \rho_g \mathbf{u}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g^* - \nabla P + \rho_g \mathbf{g} + \dot{\Psi}_g^* + \dot{\mathbf{I}}_g^* \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g e_{t,g}) + \nabla \cdot [(\rho_g e_{t,g} + P) \mathbf{u}_g] &= \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_g^* \mathbf{u}_g) - \nabla \cdot \mathbf{q}_g^* + \\ &+ \rho_g \sum_{s=1}^{N_s} Y_s \mathbf{g} \cdot (\mathbf{u}_g + \mathbf{V}_{sg}^*) + \\ &+ \dot{Q}_{g1}^* + \dot{Q}_{g2}^* + L\dot{F}_g^* \end{aligned} \quad (1.11)$$

Le grandezze contrassegnate con un asterisco sono quelle che vengono influenzate dalla chiusura dei termini di sottogriglia, operata nel modo che è stato indicato. Le 1.9-1.11 sono formalmente analoghe alle equazioni per il caso monofase, a meno dei termini sorgente, il che non stupisce viste le ipotesi che sono alla base della loro derivazione. Questo faciliterà l'implementazione nel codice *HeaRT*. Si rimanda alla documentazione relativa a tale codice per ogni ulteriore approfondimento che non riguardi i termini d'interazione tra le fasi. Queste equazioni, depurate dei termini diffusivi e dei contributi del modello di chiusura, sono state implementate in un modello monodimensionale per testare la risposta a semplici problemi alle condizioni iniziali, del sistema con termini sorgente. I risultati di tali test sono oggetto dell'Allegato 1.

1.2.2 Equazioni di conservazione per la fase solida

In questo paragrafo verrà proposto un sistema di equazioni derivato dalle 1.6-1.8 ed adatto a descrivere l'evoluzione della fase solida in condizioni di alta diluizione, vale a dire $\alpha_p \ll 1$, dove il pedice p sta per particolato. Come già fatto nel-

la derivazione dell'equazione di trasporto delle specie chimiche (par. 1.1), sotto questa ipotesi verrà trascurata anche qui l'evoluzione separata delle frazioni volumetriche; sia definita pertanto la variabile $\rho_p = \alpha_p \rho_{solid}$ dove ρ_{solid} è la densità effettiva della fase solida. L'ipotesi di alta diluizione porta a notevoli semplificazioni nel sistema 1.6-1.8: se si assume che la pressione (ovvero gli sforzi normali) all'interno della fase solida sia la stessa della fase gassosa, che ($\rho_g \ll \rho_p$) e che non vi siano elevati gradienti di pressione nel campo in esame, sarà possibile trascurare i termini in P nelle 1.7-1.8 per la fase solida; inoltre, per alta diluizione ($\alpha_p < 10^{-3}$) sarà possibile trascurare gli effetti degli urti tra particelle. Questa osservazione permette di assumere nullo il tensore degli sforzi nella fase solida, che è unicamente dovuto agli scambi di quantità di moto che intervengono durante le collisioni, che queste siano di natura elastica o no. La temperatura all'interno delle particelle viene assunta uniforme. Questa assunzione insieme all'assenza di urti permette di trascurare il termine di flusso di Fourier nell'equazione dell'energia. Si assume infine che come la velocità di diffusione all'interno della fase solida sia trascurabile rispetto alla velocità delle particelle. Le equazioni così ottenute, omettendo per semplicità le soprilineature sono

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p) = \dot{\Gamma}_p^* \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_p \mathbf{u}_p) + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p \mathbf{u}_p) = \rho_p \mathbf{g} + \dot{\Psi}_p^* + \dot{\mathbf{I}}_p^* \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_p e_{t,p}) + \nabla \cdot (\rho_p e_{t,p} \mathbf{u}_p) = \rho_p \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_p + \dot{Q}_{p1}^* + \dot{Q}_{p2}^* + L\dot{F}_p^* \quad (1.14)$$

La 1.14 può essere riscritta in termini dell'energia interna $e_p = C_s T_p$, dove C_s è la capacità termica specifica della fase solida e T_p è la temperatura della stessa. Questo è possibile sostituendovi le 1.12 e 1.13, da cui si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_p e_p) + \nabla \cdot (\rho_p e_p \mathbf{u}_p) = \dot{Q}_{p1}^* + \dot{Q}_{p2}^* - \dot{\Psi}_p^* \cdot \mathbf{u}_p + \dot{\Gamma}_p^* \frac{u_p^2}{2} \quad (1.15)$$

Il sistema così scritto può essere analizzato da un punto di vista del comportamento dinamico. Se si scrivono le 1.12-1.14 in forma matriciale e si calcolano gli autovalori del sistema per il caso monodimensionale risulterà che esso ammette

tre autovalori coincidenti $\lambda_{1,2,3} = u_p$. A tali autovalori corrispondono solo due autovettori linearmente indipendenti. Il sistema non è perciò *strettamente iperbolico*. Si può tuttavia verificare come il sistema ammetta comunque una soluzione per tre tipi di onde semplici (onde di densità, temperatura o velocità). Va inoltre sottolineato come una di tali onde, cioè la perturbazione sulla velocità, porti ad un aumento della densità in presenza di gradienti negativi di velocità (vedi *Prova 1* e *Prova 2* in Allegato 1). Se lasciata evolvere a lungo, tale condizione può portare alla formazione dei cosiddetti urti delta. Questo può avvenire in assenza di interazioni significative con onde di altra natura, se i tempi di residenza delle particelle sono circa pari, in corrispondenza alle stesse, all'inverso del gradiente iniziale di velocità della fase solida. Qualora questo si dovesse verificare durante una fase transitoria di interesse sarà necessario modificare il modello qui presentato.

Il sistema costituito dalle 1.12, 1.13 e 1.15, per il caso monodimensionale e con le definizioni dei termini sorgente riportate nei paragrafi 1.3 e 1.4, è stato implementato in Allegato 1 ai fini di testarne le caratteristiche.

1.2.3 Osservazioni sull'accoppiamento fase continua-fase dispersa

In accordo con la classificazione dei flussi bifase gas-solido riportata in [5], per frazioni volumetriche della fase condensata $\alpha_p \leq 10^{-6}$, la presenza della stessa può essere trascurata ai fini della valutazione del flusso nella fase gassosa. Si ha dunque un accoppiamento di tipo *one-way*, ovvero le condizioni di flusso della fase continua influiscono sul moto delle particelle, posto che l'inerzia di queste lo permetta, ma le particelle non influenzano il campo di moto della fase continua.

Per $10^{-6} < \alpha_p \leq 10^{-3}$ la presenza delle particelle può comparire nelle equazioni del moto della fase gassosa sotto due forme: il primo attraverso la presenza di termini sorgente; il secondo alterando il modello di sottogriglia. La necessità di modificare il modello di sottogriglia deriva dall'opportunità di tenere in conto il possibile fenomeno dell'intensificazione dei fenomeni turbolenti, dovuta al rilascio di strutture vorticosi a valle delle particelle (*vortex shedding*). Tale tipo di interazione sarà trasparente al moto medio delle particelle (nel senso che non lo influenza), in quanto agirà su scale più piccole di quelle delle particelle stesse. La

modifica sui termini sorgente dovrà invece tenere conto dell'effetto di smorzamento della turbolenza dovuta all'energia spesa dai vortici per accelerare le particelle. Tale azione altererà di conseguenza il moto delle particelle, sia per quanto riguarda il campo di moto filtrato che per quello di sottogriglia. Poichè, per le ragioni che chiariremo poco più avanti, trascureremo la componente del campo non risolta, l'effetto su questa non sarà visibile nel modello. L'intersificarsi dei fenomeni turbolenti è tipico dei flussi di particelle le cui dimensioni risultano molto maggiori della scala dissipativa nella fase gassosa. L'attenuazione dei fenomeni turbolenti è invece predominante nel caso di particelle il cui tempo di rilassamento τ_r (che dipende dalle dimensioni) è superiore di non più di due ordini di grandezza rispetto al tempo caratteristico delle scale dissipative. Si ricorda a tal proposito che il tempo di rilassamento è il tempo necessario perchè una particella, introdotta in un flusso costante ed uniforme con una data velocità relativa iniziale, annulli tale velocità, e può essere stimato tramite la

$$\tau_r = \frac{\rho_{solid} D_p^2}{18 \mu_g} \quad (1.16)$$

Il regime descritto è dunque caratterizzato da un accoppiamento *two-way* (fluido-particella, particella-fluido).

Per $\alpha_p > 10^{-3}$ occorre tener in conto anche gli effetti degli urti tra le particelle. In questo caso si parla di accoppiamento di tipo *four-way*.

Avendo scritto le equazioni per $\alpha_g \simeq 1$ ci siamo implicitamente posti nei primi due regimi. Qualora tale vincolo dovesse essere rimosso occorrerà modellare il moto di tipo Browniano delle particelle. Se questo viene trascurato non vi è la necessità di modellare gli urti tra le particelle stesse e dunque le equazioni della fase dispersa non presenteranno termini di natura dissipativa. In caso contrario comparirà nelle stesse equazioni un tensore degli sforzi della fase solida che andrà opportunamente modellato, così come i termini che dipendono dalle fluttuazioni rispetto alle grandezze filtrate. Nel modello sviluppato allo stato attuale tali tensori sono stati trascurati. Quando si trascurano gli urti tra particelle si esclude non solo la possibilità di trasferire quantità di moto all'interno della fase dispersa ma anche di trasferire energia dalle grandi alle piccole scale del moto di questa e viceversa. Nella realtà, tuttavia, anche in assenza di urti tra particelle, è possibile comprendere come le grandi strutture nel campo di moto della fase solida tendano

ad essere distrutte dall'interazione con la turbolenza nella fase continua. È dunque necessario valutare gli effetti di tale interazione per non sovrastimare l'energia presente nel campo di moto filtrato. La turbolenza nella fase continua aumenterà infatti l'energia che spetta al campo di moto non risolto delle particelle, a scapito di quello risolto. Non essendovi altri meccanismi che permettano un flusso inverso di energia cinetica dalle piccole alle grandi scale potremo trascurare il campo non risolto nella fase dispersa, filtrando le variabili senza preoccuparci di modellare i termini di sottogriglia. È tuttavia opportuno segnalare come in assenza di un modello per i termini di sottogriglia della fase dispersa, sarà impossibile riprodurre fenomeni quali l'addensamento delle particelle in prossimità delle pareti per flussi in un condotto verticale.

Il campo di applicazione del presente modello sarà presumibilmente quello dei flussi con accoppiamento di tipo *two-way*. Resta tuttavia, affinché il modello sia pienamente consistente, da modellare l'interazione tra le particelle e la turbolenza nella fase gassosa.

1.3 Modello d'interazione due vie classico di tipo aerotermodinamico

I termini sorgente che esprimono le forze ed i flussi termici scambiati tra le fasi sono stati sviluppati.

1.3.1 Termini di scambio di forze

Per quanto riguarda i termini di scambio di forze, sono stati trascurati rispetto alle forze aerodinamiche:

- gli effetti dovuti alla storia della particella (effetto Basset);
- la forza da masse aggiunte, che tiene conto del fatto che quando una particella viene accelerata una certa quantità del fluido che la circonda è accelerata anch'essa;
- le forze che il fluido circostante eserciterebbe qualora il volume occupato dalla particella fosse occupato dal fluido stesso (forza di Tchen);

- la portanza che si esercita sulla particella nel caso di flussi rotazionali o di particelle in rotazione;
- le forze di galleggiamento.

Come sottolineato in [1] l'effetto Basset scala come $2/D_p$ mentre le forze aerodinamiche come $4/D_p^2$. Gli altri contributi scalano invece come ρ_{gas}/ρ_{solid} . Nell'ipotesi di particelle piccole e densità (effettiva) della fase dispersa molto maggiore di quella della fase continua l'assunzione di considerare le sole forze aerodinamiche risulta quindi giustificata.

Il termine $\dot{\mathbf{I}}_p = -\dot{\mathbf{I}}_g$ che compare nella 1.7 potrà dunque essere modellato come la media sulla fase dispersa delle forze aerodinamiche per unità di volume che si esercitano su tale fase. Assumiamo che la forza per unità di volume agente sulla singola particella possa essere espressa come

$$\mathcal{F}_{g-p} = \frac{1}{2}\rho_g\pi\left(\frac{D_p}{2}\right)^2\left[\frac{4}{3}\pi\left(\frac{D_p}{2}\right)^3\right]^{-1}C_D|\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p|(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p) \quad (1.17)$$

dove D_p è il diametro della particella e C_D è il coefficiente di resistenza aerodinamico della stessa. Questo sarà espresso mediante una relazione semi-empirica molto comune in letteratura data da

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re}\left(1 + \frac{Re^{\frac{2}{3}}}{6}\right) & Re < 1000 \\ 0.424 & Re \geq 1000 \end{cases} \quad (1.18)$$

Per ottenere i termini sorgente che compaiono nelle equazioni mediate occorrerà filtrare sulla fase solida all'interno del volume di controllo. Seguendo anche qui le procedure riportate in [1] e [2] si ottiene

$$\dot{\mathbf{I}}_p = \frac{3}{8}\alpha_p\overline{\left[\frac{2}{D_p}C_D\rho_g|\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p|(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p)\right]}_p \quad (1.19)$$

dove la soprilineatura indica il filtro sul volume occupato dalla fase solida. A questo punto occorre fare alcune ipotesi semplificative per chiudere il problema: in primo luogo supponiamo che le particelle all'interno del volume di controllo abbiano tutte lo stesso diametro; si suppongono trascurabili ai fini della valutazione

di $\dot{\mathbf{I}}_p$ le fluttuazioni della densità e l'errore che si commette esprimendo la media di prodotti che compare nella 1.19 come il prodotto delle medie. Tale relazione assumerà così la forma:

$$\dot{\mathbf{I}}_p = \frac{3}{8} \alpha_p \frac{2}{D_p} \rho_g \overline{[C_D]_p} \overline{[\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p]_p} \overline{[(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p)]_p} \quad (1.20)$$

Il $\overline{[C_D]_p}$ sarà espresso attraverso un numero di Reynolds calcolato con le grandezze mediate, ovvero

$$Re = \frac{\rho_g \overline{[\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p]_p} D_p}{\mu} \quad (1.21)$$

Per quanto riguarda la velocità relativa media $\overline{[(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p)]_p}$, esprimendo le velocità in termini di grandezze filtrate e fluttuazioni e trascurando le seconde per la fase dispersa otterremo

$$\overline{[(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p)]_p} = \overline{[(\tilde{\mathbf{u}}_g + \mathbf{u}''_g - \tilde{\mathbf{u}}_p)]_p} = (\tilde{\mathbf{u}}_g - \tilde{\mathbf{u}}_p) + \overline{[\mathbf{u}''_g]_p} \quad (1.22)$$

Il termine $\overline{[\mathbf{u}''_g]_p}$ viene detto *velocità di deriva* ed è importante per modellare l'effetto della turbolenza nella fase gassosa sul moto della fase solida. Tale effetto consiste nella tendenza a distruggere le grandi scale (ovvero l'organizzazione) nel moto della fase dispersa sottraendo loro energia e cedendola alle piccole scale. Se tale contributo non venisse opportunamente modellato si avrebbe dunque una sovrastima dell'energia che compete al moto medio. Per modellare questo termine si propone di fare ricorso allo stesso modello (FM) [3], già implementato nel codice *HeaRT*, impiegato per valutare gli effetti della turbolenza nella fase gassosa. Questa scelta è motivata dalla relativa semplicità di questo modello rispetto ad altri descritti in letteratura e dall'opportunità di mantenere una trattazione uniforme dei vari aspetti dei fenomeni turbolenti.

L'estensione del modello FM al calcolo della velocità di deriva $\overline{[\mathbf{u}''_g]_p}$ presuppone che le fluttuazioni di velocità siano dovute alle strutture vorticosi che si generano nella cascata dalle grandi alle piccole scale, in genere imputata al *vortex stretching*. Tale cascata è schematizzata in FM con una generazione successiva, tipica dei frattali, di strutture più piccole da parte di una struttura seme più

grande ma uguale a quelle generate. La cascata si interrompe quando viene raggiunta la scala dissipativa, individuata da un numero di Reynolds caratteristico unitario.

La procedura che viene qui proposta per la stima di $\overline{[\mathbf{u}''_g]_p}$ può riassumersi nei seguenti punti:

1. calcolata la scala dissipativa η ci si assicura che questa sia inferiore a due volte il diametro delle particelle, ovvero che sia $\eta < \sigma = 2 D_p$;
2. se la condizione in 1. è verificata calcolo il numero di replicazioni N^σ che devo tener in conto per arrivare a strutture di dimensione caratteristica σ . Il numero di tali replicazioni sarà funzione del rapporto R_C tra la scala generatrice e quelle generate. Se la condizione in 1. non è verificata si prenderà in considerazione l'intera cascata di vortici;
3. calcolo la dimensione del frattale troncato alla scala σ , $D_3^\sigma = 3 - \frac{\log \pi}{\log \frac{\Delta}{\sigma}}$, dove Δ è la dimensione della cella di calcolo;
4. da D_3^σ si può ottenere la frazione γ_{tot} del volume di controllo occupata dal frattale in questione data da $\gamma_{tot} = \left(\frac{\Delta}{\sigma}\right)^{D_3^\sigma - 3}$;
5. nel modello FM si suppone che ad ogni struttura corrisponda lo stesso volume e che dunque alla scala l_i , generata alla i -esima replicazione, corrisponda una frazione volumetrica γ_{l_i} del frattale pari al numero di strutture dalle dimensioni l_i fratto il numero totale di strutture componenti il frattale stesso. Avremo dunque $\gamma_{l_i} = \frac{N_C^{i+1} - 1}{N_C^{N_C^\sigma + 1} - 1}$ dove N_C è il numero di strutture generate dalla stessa struttura madre. La frazione del volume di controllo interessata dalla scala l_i sarà dunque pari a $\gamma_{tot} \cdot \gamma_{l_i}$;
6. resta a questo punto da individuare direzione e modulo della $\overline{[\mathbf{u}''_g]_p}$. Si può come detto ipotizzare che la cascata di vortici sia generata dal termine di *vortex stretching* $\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \mathbf{u}_g$ che compare nell'equazione della vorticità, dove $\boldsymbol{\omega}$ è la vorticità stessa. Possiamo perciò supporre che la velocità di deriva giaccia su un piano ortogonale a $\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \mathbf{u}_g$ calcolato con le grandezze filtrate. La direzione effettiva in tale piano ed il modulo saranno individuati in modo da ottenere, per ogni scala, la variazione media della quantità di moto imposta da un vortice ad un fascio di particelle che lo investano viaggiando

inizialmente parallele (secondo \mathbf{u}_p) e distribuite uniformemente lungo il diametro. Tale contributo andrà poi moltiplicato per $\gamma_{tot} \gamma_{l_i}$ per tener conto dell'effettiva probabilità che una particella incontri un vortice di scala l_i . Per ricavare la velocità caratteristica u_i di tale scala avremo dall'ipotesi di range inerziale

$$N_C^i \frac{u_i^3}{\Delta} \Rightarrow u_i = \left(\frac{u_\Delta^3}{\Delta} \cdot \frac{l_i}{N_C^i} \right)^{\frac{1}{3}} = u_\Delta (R_C N_C)^{-\frac{i}{3}} \quad (1.23)$$

L'ultima parte del modello, riguardante il calcolo della variazione della quantità di moto imposta da un vortice ad un fascio di particelle, è ad oggi in corso di definizione.

Per chiudere il problema occorre esprimere la dipendenza del diametro delle particelle dalle grandezze note relative alla fase dispersa. Si è scelto di far dipendere il diametro dalla dimensione iniziale (prima di ogni processo di evaporazione) delle particelle e linearmente dalla densità locale della fase solida ρ_p . Questo presuppone che la ρ_p cambi solo in seguito ai processi di evaporazione o di trasporto e non di accumulo, il che sarebbe vero per un campo con $\nabla \cdot \mathbf{u}_p = 0$. Questa ipotesi non sarà in generale verificata ma abbiamo tuttavia scelto a questo stadio di trascurare gli effetti dell'accumulo locale di particelle. Poichè il campo di velocità della fase dispersa u_p è sostanzialmente indotto da quello della continua u_g appare ragionevole assumere $\nabla \cdot \mathbf{u}_p \simeq 0$. Sarà dunque

$$D_p = D_p^0 \sqrt[3]{\frac{\rho_p}{\rho_p^0}} \quad (1.24)$$

Termini derivati dallo scambio di forze tra le fasi

Il termine $L\dot{F}_f$ che compare nella 1.8 e che rappresenta il lavoro svolta dalle forze aerodinamiche sarà dato da

$$L\dot{F}_p = -L\dot{F}_g = \dot{\mathbf{I}}_p \cdot \mathbf{u}_p \quad (1.25)$$

1.3.2 Termini di scambio di calore

Per quanto riguarda il modello di scambio termico si è fatta l'assunzione di particelle a temperatura costante. Tale assunzione va adoperata con cautela poichè, se il coefficiente di conduttività termica nella fase solida k_g è troppo basso e la

differenza di temperatura tra le fasi è troppo alta, è possibile che vi sia un ritardo eccessivo nell'ottenere il riscaldamento della particella fino alla temperatura di liquefazione, e quindi nell'inizio del processo di evaporazione.

Procedendo come nella sezione precedente, il flusso di calore tra la fase gassosa e quella solida sarà dato da

$$Q_{p1} = -Q_{g1} = 2\pi n_p \frac{D_p}{2} k_g^* Nu (T_g - T_p) \quad (1.26)$$

nella quale le grandezze che compaiono sono da intendersi filtrate. Il numero di Nusselt Nu è dato in forma di relazione semiempirica

$$Nu = 1 + 0.6Re^{0.5}Pr^{0.33} \quad (1.27)$$

$$Pr = \frac{\mu C_p}{k_g} \quad (1.28)$$

Pr è il numero di Prandtl mentre C_p è il calore specifico della miscela a pressione costante. Per chiudere il problema si è scelto di porre nella 1.26

$$k_g^* = k_g \left(1 + \frac{\mu_t}{\mu} \right) \quad (1.29)$$

n_p è invece il numero di particelle per unità di volume dato, assumendo che le particelle nel volume di controllo siano tutte sfere di raggio uguale tra loro, da

$$n_p = \frac{\rho_p}{\rho_{p_{solid}} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{D_p}{2} \right)^3} \quad (1.30)$$

1.4 Modello di cambiamento di fase del tipo evaporazione - solidificazione

Nel modello di cambiamento di fase si è preso in considerazione il processo di evaporazione dalla fase liquida. $\dot{\Gamma}_g = -\dot{\Gamma}_p$ è il flusso di massa dalla fase solida a quella gassosa per unità di volume e di tempo. Per quanto riguarda la sua modellazione, è possibile esprimere sinteticamente tale termine sulla base di alcune semplici assunzioni:

- temperatura della particella superiore a quella di liquefazione;
- pressione del fluido all'interno del quale è immersa la particella inferiore alla pressione di vapore per le condizioni date.

Una volta che siano state verificate queste ipotesi, il flusso di massa dalla fase condensata a quella gassosa può essere espresso [6] (rispetto al lavoro citato sono stati aggiunti gli effetti della turbolenza nella fase continua) come

$$\dot{\Gamma}_g = n_p \frac{4\pi \frac{D_p}{2} \mu_g}{Sc^*} \left(\frac{P_{ev}}{p} - 1 \right) \quad (1.31)$$

$$P_{ev}(T_p) = P_{ev}(T_o) \exp \left[\frac{L_V}{R_g T_o} \left(1 - \frac{T_o}{T_p} \right) \right] \quad (1.32)$$

$$Sc^* = \frac{\mu_g}{\rho_g} \left[\frac{\nu}{Sc} + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right]^{-1} \quad (1.33)$$

dove Sc e Sc_t sono il numero di Schmidt molecolare e turbolento rispettivamente, P_{ev} è la pressione di vapore corrispondente alle condizioni considerate, T_o e $P_{ev}(T_o)$ sono valori di riferimento mentre D_{v-g} è il coefficiente di diffusione binaria del vapore nel gas che circonda la particella, R_g è la costante dei gas riferita alla miscela ed L_V è il calore latente di evaporazione della fase solida. Anche qui si è scelto di chiudere il problema rispetto alla procedura di filtraggio, aumentando in funzione della viscosità turbolenta il coefficiente di diffusione del vapore nella miscela, come appare dal numero di Schmidt modificato Sc^* . Allo stato attuale si è trascurata la possibilità che vi sia una ricondensazione dei vapori o dei prodotti di combustione sulle particelle. Là dove le ipotesi richiamate non siano verificate non si avrà passaggio di fase.

L'introduzione dei termini dovuti al cambiamento di fase impone di considerare la variazione nelle dimensioni delle particelle. Questo viene fatto nel presente modello attraverso la 1.24. Tale trattamento implica che se si vuole considerare la possibilità di una completa evaporazione delle particelle sarà necessario contemplare la possibilità che la ρ_p vada a zero. Questo crea una serie di problemi dovuti alla natura del solutore attualmente implementato nel codice *HeaRT*, come emerso durante la stesura dell'Allegato 1. Le oscillazioni che si vengono a creare

in corrispondenza della cella di calcolo nella quale la ρ_p si annulla sono tali da portare la stessa variabile ad avere valori negativi. Questo tende ad instabilizzare il codice attraverso n_p . Alla data della stesura del presente documento, tale problema non è stato ancora completamente risolto.

Termini derivanti dallo scambio di massa tra le fasi

La massa che passa dalla fase solida alla gassosa porterà con sé la sua quantità di moto e la sua energia totale. Questi contributi sono espressi da $\dot{\Psi}_g$ e da Q_{g2} rispettivamente e sono valutabili secondo le seguenti relazioni

$$\dot{\Psi}_g = -\dot{\Psi}_p = \dot{\Gamma}_g \mathbf{u}_p \quad (1.34)$$

$$Q_{g2} = -Q_{p2} = \dot{\Gamma}_g (e_{tp} + L_V) \quad (1.35)$$

Nella 1.35 e_{tp} è l'energia totale nella fase solida data da $e_{tp} = C_s T_p + 0.5 \mathbf{u}_p \cdot \mathbf{u}_p$ dove C_s è la capacità termica specifica della fase solida.

1.5 Modello di combustione

Deve essere fornito dall'ENEA

1.6 Modello di chiusura LES

Per quanto riguarda le equazioni della fase gassosa viene mantenuto il modello di chiusura FM [3]. Per la fase dispersa l'effetto dei termini di sottogriglia è stato trascurato per l'assunzione di accoppiamento *two-way*. Qualora tale assunzione dovesse venire a mancare occorrerà dapprima modellare il tensore degli sforzi. L'applicazione di un modello lineare nel tensore velocità di deformazione (come quelli per fluidi Newtoniani) non sembra applicabile in questo caso, visto che fin dai primi esperimenti su questo tema [7] la dipendenza degli sforzi dai gradienti di velocità sembrò essere più quadratica che lineare. I modelli ad oggi presenti in letteratura [4], [8] sono derivati dalla teoria cinetica per flussi granulari in rapida deformazione. Tale teoria impone forti ipotesi semplificative (e.g. particelle tutte uguali tra loro per forma sferica, massa e dimensioni) e necessita l'introduzione

di un'equazione di trasporto per la *temperatura granulare*, ovvero per l'energia cinetica associata ai moti browniani più i termini di sottogriglia. Recentemente è stato proposto un modello per la trattazione di particelle diverse tra loro [9] che consiste nel modellare la fase dispersa con un numero finito di fasi disperse, diverse tra loro per dimensione caratteristica delle particelle.

Tornando al modello di chiusura FM, si è sottolineato nella sezione 1.2 come, per applicazioni nel regime di accoppiamento *two-way*, esso vada modificato per tenere conto della presenza delle particelle. Tale aspetto deve essere ancora investigato. Tuttavia una strada percorribile sembra essere quella di introdurre ad una data scala, frazione di D_p in funzione del Re di particella, un numero di strutture proporzionali ad n_p , che rappresentino il *vortex shedding* e si uniscano alla cascata. Tale effetto non potrà che aumentare la quantità di energia dissipata, aumentando così il flusso totale di energia dalle grandi alle piccole scale.

È bene inoltre sottolineare un aspetto importante dell'applicazione del modello FM al problema bifase: quando il campo di moto non risolto della fase gassosa interagisce con il campo di moto di quella dispersa, si avrà che una parte dell'energia cinetica dal primo verrà spesa per compiere lavoro sulle particelle. Tale sottrazione di energia dal campo non risolto della fase gassosa, che avverrà in corrispondenza di scale superiori alle dimensioni delle particelle, fa cadere l'ipotesi di range inerziale sulla quale il modello FM è stato sviluppato. Nello sviluppo del presente modello si è assunto e si assumerà che tale effetto non alteri il flusso netto di energia dalle scale risolte a quelle di sottogriglia. Si immagina in definitiva che una parte dell'energia che in assenza di particelle arriverebbe alle scale dissipative venga ceduta al campo di moto non risolto della fase dispersa, ma che la somma dei due contributi sia uguale al flusso netto di energia di cui sopra.

Capitolo 2

Modello monodimensionale di prova per flussi bifase

2.1 Modello matematico

Il sistema di equazioni per un sistema bifase, schematizzato mediante modello di tipo *two-fluid*, implementato nel codice di prova il cui studio è oggetto del presente documento, sono:

$$\frac{\partial \rho_g A}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g A u_g}{\partial x} = \dot{m} A \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho_g A u_g}{\partial t} + \frac{\partial A(\rho_g u_g^2 + p)}{\partial x} = p \frac{\partial A}{\partial x} + A(\mathcal{F}_{p-g} + \dot{m} u_p) \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho_g A E_g}{\partial t} + \frac{\partial A u_g(\rho_g E_g + p)}{\partial x} = A[\mathcal{F}_{p-g} u_p + Q_{p-g} + \dot{m}(E_p + L_V)] \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho_p A}{\partial t} + \frac{\partial \rho_p A u_p}{\partial x} = -\dot{m} A \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \rho_p A u_p}{\partial t} + \frac{\partial \rho_p A u_p^2}{\partial x} = A(\mathcal{F}_{g-p} - \dot{m} u_p) \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \rho_p A e_p}{\partial t} + \frac{\partial \rho_p u_p A e_p}{\partial x} = A[Q_{g-p} - \dot{m}(e_p + L_V)] \quad (2.6)$$

dove ρ_g è la densità della fase gassosa per la frazione volumetrica della stessa, \dot{m} è la massa per unità volume e di tempo che passa dalla fase solida alla fase gassosa, A è la sezione del condotto (che sarà ovunque assunta costante all'interno

del presente documento), u_g ed E_g sono la velocità e l'energia totale per unità di massa della fase gassosa, p è la pressione ρ_p è la densità della fase solida per la frazione volumetrica della stessa mentre u_p ed e_p sono la velocità e l'energia interna per unità di massa sempre della fase solida; \mathcal{F}_{p-g} e Q_{p-g} sono le forze ed il flusso di calore dalla fase solida verso quella gassosa ed L_V è il calore latente di evaporazione dalla fase condensata.

Considerando il vettore $Q^T(q_1, \dots, q_6)$ delle variabili conservate così come definite dalle 2.1-2.6, per ottenere le variabili primitive si avrà:

$$\begin{aligned} \rho_g &= \frac{q_1}{A} & \alpha &= 1 - \frac{q_4}{A \rho_{solid}} \\ u_g &= \frac{q_2}{q_1} & \rho_{gas} &= \frac{q_1}{A \alpha} \\ E_g &= \frac{q_3}{q_1} & T_g &= \frac{1}{cv_g} \left[E_g - \frac{1}{2} u_g^2 \right] \\ \rho_p &= \frac{q_4}{A} & p &= \rho_g R_g T_g \\ u_p &= \frac{q_5}{q_4} & T_p &= \frac{e_p}{c_s} = \frac{q_6}{q_4 c_s} \\ e_p &= \frac{q_6}{q_4} \end{aligned}$$

dove α è la frazione in volume della fase gassosa, cv_g è il calore specifico a volume costante della fase gassosa, R_g è la costante del gas, ρ_{gas} è l'ipotetica densità della fase gassosa qualora essa occupasse l'intero volume di controllo, T_g e T_p sono le temperature delle due fasi, c_s è il calore specifico della fase solida e ρ_{solid} è la densità del materiale di cui la fase solida si compone. È bene sottolineare come α e ρ_{gas} siano state esplicitate per completezza ma non rientrino nell'algoritmo d'integrazione.

2.1.1 Formulazione dei termini di accoppiamento tra le fasi

Per quanto riguarda le forze aerodinamiche e gli scambi di calore tra le fasi, queste sono state modellate come segue

$$\mathcal{F}_{g-p} = \frac{1}{2} \rho_g \pi \left(\frac{D_p}{2} \right)^2 C_D n_p |u_g - u_p| (u_g - u_p) \quad (2.7)$$

$$\mathcal{Q}_{g-p} = 2\pi \frac{D_p}{2} k_g Nu (T_g - T_p) n_p \quad (2.8)$$

dove

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{Re^{\frac{2}{3}}}{6} \right) & Re < 1000 \\ 0.424 & Re \geq 1000 \end{cases} \quad (2.9)$$

$$Nu = 1 + 0.6 Re^{0.5} Pr^{0.33} \quad (2.10)$$

$$Re = \frac{\rho_g |u_g - u_p| D_p}{\mu} \quad (2.11)$$

$$Pr = \frac{\mu c_p}{k_g} \quad (2.12)$$

dove c_p è il calore specifico a pressione costante della fase gassosa, D_p è il diametro delle particelle, μ è la viscosità dinamica della fase gassosa ed n_p è il numero di particelle per unità di volume. Questo è ottenuto tramite la

$$n_p = \frac{\rho_p}{\rho_{solid} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{D_p}{2} \right)^3} \quad (2.13)$$

Per quanto riguarda la modellazione del termine \dot{m} , è possibile esprimere sinteticamente tale termine sulla base di alcune semplici assunzioni:

- temperatura della particella superiore a quella di liquefazione;
- pressione del fluido all'interno del quale è immersa la particella inferiore alla pressione di vapore per le condizioni date.

Sotto queste ipotesi il flusso di massa dalla fase condensata a quella gassosa può essere espresso [6] come

$$\dot{m} = n_p \frac{4\pi \frac{D_p}{2} \mu_g}{Sc} \left(\frac{P_{ev}}{p} - 1 \right) \quad (2.14)$$

$$P_{ev}(T_p) = P_{ev}(T_o) \exp \left[\frac{L_V}{RT_o} \left(1 - \frac{T_o}{T_p} \right) \right] \quad (2.15)$$

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g D_{v-g}} \quad (2.16)$$

dove Sc è il numero di Schmidt, P_{ev} è la pressione di vapore corrispondente alle condizioni considerate, T_o e $P_{ev}(T_o)$ sono valori di riferimento mentre D_{v-g} è il coefficiente di diffusione binaria del vapore nel gas che circonda la particella.

Avendo incluso nel modello lo scambio di massa tra le fasi, occorrerà tenere in conto l'evoluzione delle dimensioni delle particelle. In prima approssimazione ciò verrà fatto facendo dipendere il diametro della particella linearmente dalla radice cubica della densità ρ_p nel seguente modo:

$$D_p = D_{p_o} \sqrt[3]{\frac{\rho_p}{\rho_{p_o}}} \quad (2.17)$$

dove il pedice o si riferisce a grandezze caratteristiche delle particelle non ancora sottoposte ad evaporazione.

2.2 Condizioni al contorno

Le condizioni al contorno utilizzate nelle prove che seguono sono di gradiente nullo

$$\frac{\partial q_i}{\partial x} = 0 \quad i = 1..6 \quad (2.18)$$

oppure periodiche

$$\begin{aligned} q_i(0) &= q_i(j_{max} - 1) & i &= 1..6 \\ q_i(j_{max} + 1) &= q_i(2) \end{aligned} \quad (2.19)$$

dove j_{max} è l'indice dell'ultimo nodo. Ove non specificato, i risultati saranno identici per entrambe le strategie utilizzate al contorno.

2.3 Schema numerico adottato

Le 2.1-2.6, una volta discretizzate alle differenze finite, sono integrate con il metodo di Runge-Kutta elaborato da Shu ed Osher [10], attualmente implementato nel codice *HeaRT*, il quale prevede tre aggiornamenti delle variabili per ogni passo d'integrazione. Le condizioni al contorno descritte saranno imposte ad ogni nuova valutazione del vettore delle variabili conservate. Per quanto riguarda la discretizzazione spaziale, essa è alle derivate centrate, accurata al secondo ordine e prevede l'utilizzo di coefficienti metrici. Per approfondire questo aspetto è possibile consultare il manuale d'uso di *HeaRT*.

2.4 Prove effettuate

2.4.1 Prova 1

Nella Prova 1 si è simulata l'evoluzione di una condizione iniziale costituita da valori costanti nel campo per tutte le variabili eccetto che per la u_p . Le 2.1-2.6 sono state integrate depurate dei termini sorgente, al fine di validare le equazioni per la fase solida ed apprezzarne le caratteristiche. Come condizione iniziale per la u_p si è assunta

$$\begin{cases} u_p = 20 \text{ m/s} & x < 3 \text{ m} \\ u_p = (-10 x + 50) \text{ m/s} & 3 \text{ m} \leq x \leq 4 \text{ m} \\ u_p = 10 \text{ m/s} & x > 4 \text{ m} \end{cases}$$

mentre per le altre variabili è stato inizialmente imposto:

$$\begin{array}{ll} u_g = 0 & \alpha = 0.99 \\ T_p = 300 \text{ K} & \rho_{gas} = 1 \text{ Kg/m}^3 \\ T_g = 300 \text{ K} & \end{array}$$

Per le costanti, non tutte utilizzate in questo caso, si sono scelti i seguenti valori

$$\begin{array}{lll} R_g = 287 \text{ J/Kg K} & \rho_{solid} = 10 \text{ Kg/m}^3 & D_p = 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ m} \\ c_s = 3200 \text{ J/Kg K} & k_g = 2.58 \cdot 10^{-2} \text{ N/s K} & \\ cv_g = 718 \text{ J/Kg K} & \mu_g = 2 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s} & \end{array}$$

dove k_g e μ_g sono la conducibilità termica e la viscosità dinamica della fase gassosa mentre D_p è il diametro delle particelle. Si è dunque simulata l'evoluzione delle sole equazioni della fase solida imponendo nulla la variazione delle variabili conservate nella fase gassosa e l'area della sezione del condotto A è stata assunta costante pari a 1 m^2 .

In Figura 2.1 sono riportate le evoluzioni degli andamenti delle variabili relative alla fase solida. I simboli che compaiono nelle varie figure sono presi uno ogni dieci nodi di calcolo. La prima curva in ciascuna figura si riferisce all'istante $t = 2.88345 \cdot 10^{-5} \text{ s}$, e rappresenta lo stato ottenuto dopo un solo passo d'integrazione. Il valore di tale passo d'integrazione è dato dalla generica condizione di stabilità per il sistema completo

$$\lambda_{max} \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (2.20)$$

dove $\lambda_{max} = \max_x(a + u_g)$ ed a è la velocità del suono nella fase gassosa calcolata come

$$a^2 = \gamma R_g T_g = \left(1 + \frac{R_g}{cv_g}\right) R_g T_g \quad (2.21)$$

Poichè in realtà le equazioni della fase gassosa non sono qui risolte, tale vincolo è sicuramente più forte di quanto sarebbe necessario a garantire la stabilità in regime lineare. In questo caso infatti si ha che $\lambda_{max} = \max_x(u_p)$.

Come si può notare la soluzione presenta evidenti oscillazioni che si originano dai punti di raccordo, nel profilo iniziale della u_p , tra la rampa lineare ed i due tratti a valore costante. A risentire di tali oscillazioni è in particolare la ρ_p , come dimostrato invece dalla loro assenza nel grafico della u_p , la quale è il rapporto tra le variabili conservate q_5 e q_4 . Tali oscillazioni sono generate dalla discontinuità nella derivata prima nello spazio della u_p . Si verificherà questa affermazione nel prossimo paragrafo.

È da sottolineare, anche se qui non viene mostrato, come all'aumentare della ρ_{solid} vari la scala delle figure 2.1 (a) e (b) ma l'andamento resti lo stesso.

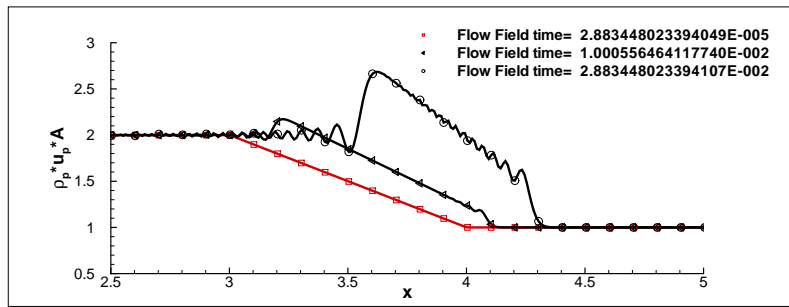
Per quanto riguarda la variabile α , che in questo caso non ha alcun significato fisico visto che le variabili conservate relative alla fase gassosa sono artificialmente mantenute costanti, la scelta di riportarla in Figura 2.1 d) ha interesse

puramente numerico. Si può osservare come, a fronte di un moderato gradiente di velocità, si generi una variazione nella α pari a circa il 5%.

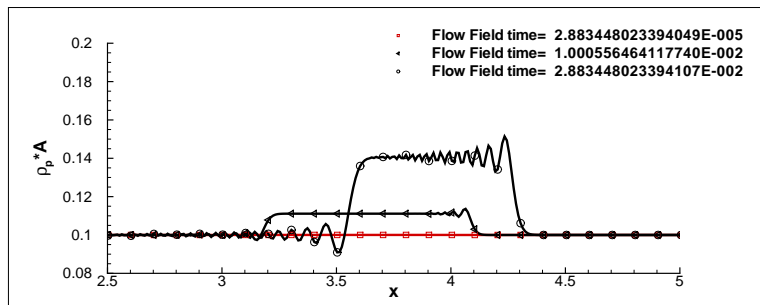
Nonostante la pessima qualità della soluzione, è possibile altresì notare come alcune caratteristiche della stessa siano confortanti dal un punto di vista della correttezza del codice scritto. Lo spazio percorso dalla perturbazione sulla u_p , ad esempio, è quello atteso. Anche per quanto riguarda l'aumento della ρ_p nella zona a gradiente di velocità non nullo, la soluzione al tempo finale $t_f = 2.88345 \cdot 10^{-2}$ s oscilla in tale zona attorno al valore atteso

$$\rho_p(t_f) = \rho_p(t_o) \left(\frac{1}{1 - \beta t_f} \right) = 1.4052 \rho_p(t_o) \quad (2.22)$$

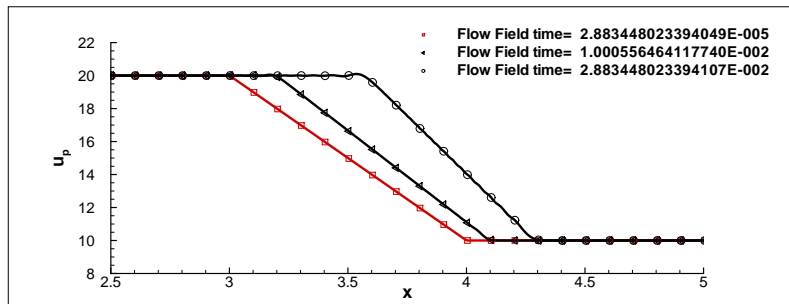
dove β è il valore assoluto del gradiente di velocità iniziale in corrispondenza delle particelle considerate. Tale valore coincide in questo caso con la differenza tra le velocità massima e minima.



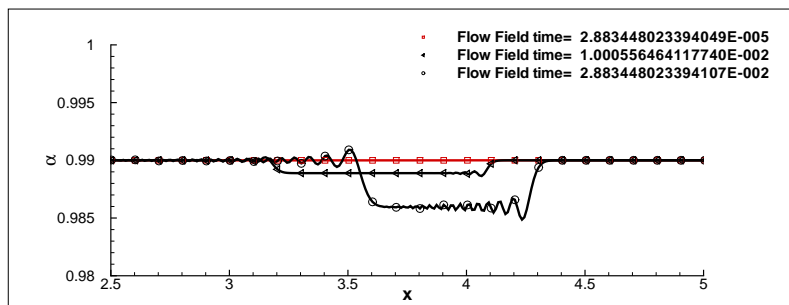
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 2.1: Evoluzione nel tempo dell'andamento lungo x di $\rho_p A u_p$ (a), ρ_p (b), u_p (c) e α (d) per il test *Prova 1*. Le unità di misura sono quelle del SI.

2.4.2 Prova 2

In questo paragrafo verranno presentati i risultati di un caso test in tutto analogo a quello presentato nel paragrafo precedente, eccetto che per il profilo iniziale della u_p . Questo sarà dato da

$$\begin{cases} u_p = 20 \text{ m/s} & x < 3 \text{ m} \\ u_p = (20 x^3 - 210 x^2 + 720 x - 790) \text{ m/s} & 3 \text{ m} \leq x \leq 4 \text{ m} \\ u_p = 10 \text{ m/s} & x > 4 \text{ m} \end{cases}$$

Il polinomio che definisce la perturbazione sulla u_p assicura la continuità della stessa e della sua derivata rispetto ad x nei punti di raccordo. Per quanto detto a proposito dell'effetto della discontinuità di tale derivata nel caso precedente, ci aspettiamo che tale scelta porti ad una soluzione numerica molto più regolare.

In Figura 2.2 sono rappresentati gli andamenti delle medesime variabili mostrate in Figura 2.1 per il caso *Prova 1*. Come è possibile costatare, sebbene le due condizioni iniziali non differiscano molto quanto andamento dei profili, la soluzione per il caso *Prova 2* presenta oscillazioni molto ridotte rispetto al caso precedente. Esse sono tuttavia presenti e visibili sui profili di ρ_p , A , u_p e di ρ_p immediatamente a valle della perturbazione. Del resto la condizione iniziale scelta garantisce la continuità della derivata prima ma non quella della derivata seconda di u_p in x .

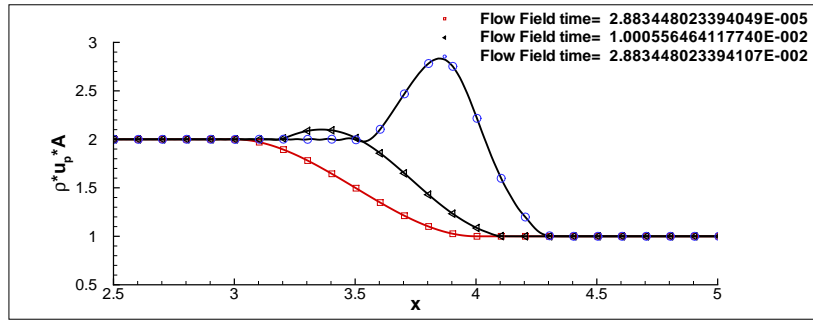
2.4.3 Prova 3

Il test mostrato in questa sezione si riferisce ad una prova pseudo zero-dimensionale, nel senso che la condizione iniziale non presenta alcun gradiente spaziale. Tale condizione è espressa da

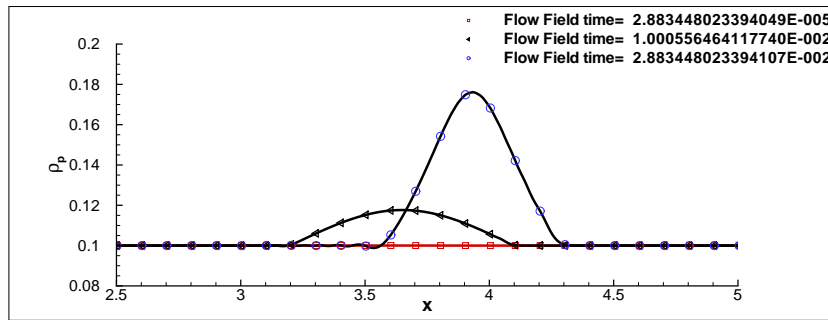
$$\begin{array}{ll} u_g = 10 \text{ m/s} & T_p = 300 \text{ m/s} \\ u_p = 20 \text{ m/s} & \rho_{gas} = 1 \text{ Kg/m}^3 \\ T_g = 700 \text{ m/s} & \alpha = 0.99 \end{array}$$

mentre i valori delle costanti utilizzate sono gli stessi di quelli adoperati per i due casi precedenti.

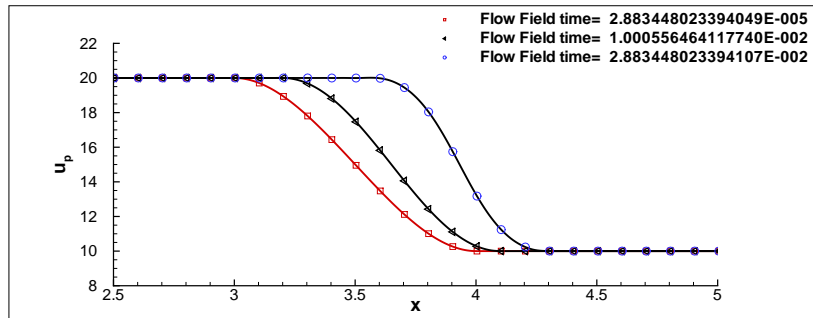
A differenza dei casi *Prova 1* e *Prova 2* sono state risolte tutte le sei equazioni 2.1-2.6, complete dei termini sorgente indicati, escludendo quelli che dipendono



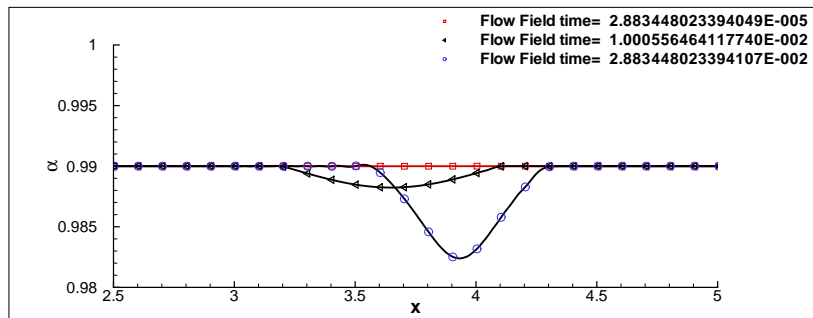
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 2.2: Evoluzione nel tempo dell'andamento lungo x di $[\rho_p A u_p]$ (a), ρ_p (b), u_p (c) e α (d) per il test *Prova 2*. Le unità di misura sono quelle del SI.

dallo scambio di massa tra le fasi, nei quali compare \dot{m} . L'integrazione è stata condotta fino al raggiungimento della condizione a stazionario. Una volta ottenuta tale soluzione, si è verificato come i valori computati di velocità e temperatura delle due fasi fossero quelli derivanti dall'imposizione della conservazione della quantità di moto e dell'energia totale.

2.4.4 Prova 4

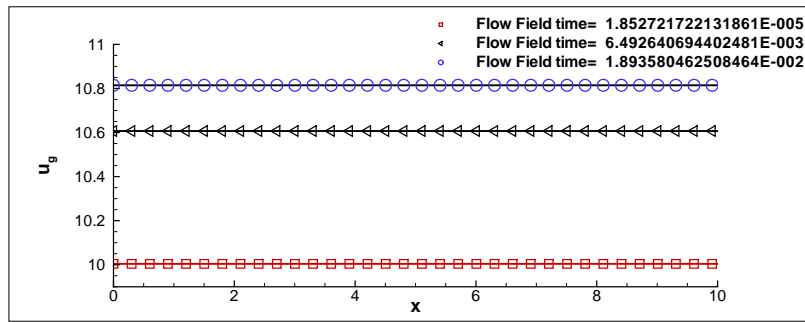
Il caso test illustrato in questa sezione è mirato a verificare la capacità del codice nel riprodurre correttamente la propagazione di fenomeni nella fase continua. Esso è costituito da un'espansione centrata della prima famiglia, che separa due regioni del dominio d'integrazione: la *zona 1* è caratterizzata da una velocità del suono $a_1 = 321$ m/s, da una velocità $u_1 = 0$ m/s ed una pressione $p_1 = 1$ atm. Nella *zona 2* si ha invece $a_2 = 305$ m/s. Essendo l'onda della prima famiglia, l'invariante $R_2 = a + \delta u$ sarà costante su tutto il campo. Da ciò si ottiene $u_2 = 80$ m/s mentre il valore della pressione può essere ottenuto dalla relazione isentropica

$$p = p_1 \left(\frac{a}{a_1} \right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} \quad (2.23)$$

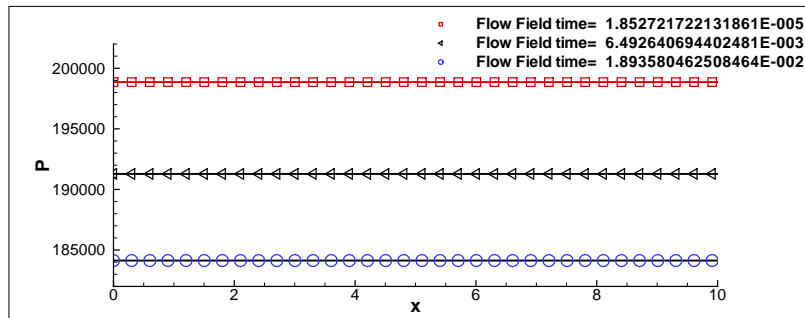
Si è imposto che l'espansione originasse dal punto $x_0 = 2$ m al tempo t_0 . La simulazione è stata però condotta a partire dall'istante t_1 in cui il fronte dell'espansione raggiunge il punto $x_{11} = 1.6$ m, al fine di evitare una condizione iniziale discontinua. Tale istante è dato da $t_1 = \frac{x_{11} - x_0}{-a_1}$. Il fronte posteriore dell'onda allo stesso istante sarà giunto nella posizione $x_{21} = (u_2 - a_2) \cdot (t_1 - t_0)$. All'interno dell'espansione, la velocità u e la velocità del suono a si possono ottenere risolvendo il sistema costituito dalla conservazione dell'invariante R_2 e dall'equazione della caratteristica della prima famiglia passante per il punto considerato, ovvero

$$\frac{x - 2}{t - t_0} = u - a \quad (2.24)$$

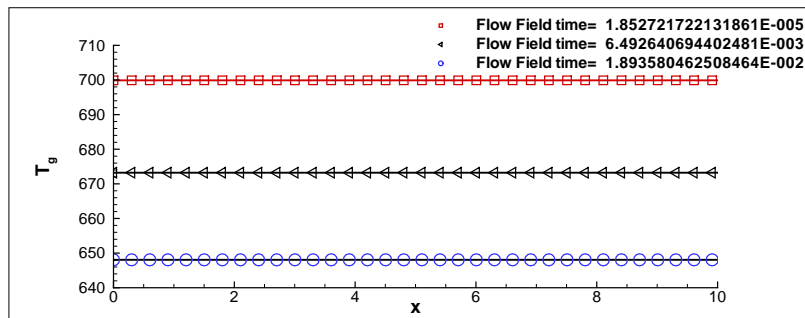
La pressione può essere nuovamente ottenuta tramite la relazione isentropica. Il sistema di equazioni, depurato dai termini sorgente per eliminare l'accoppiamento tra fase continua e fase dispersa, è stato integrato a partire dalle condizioni



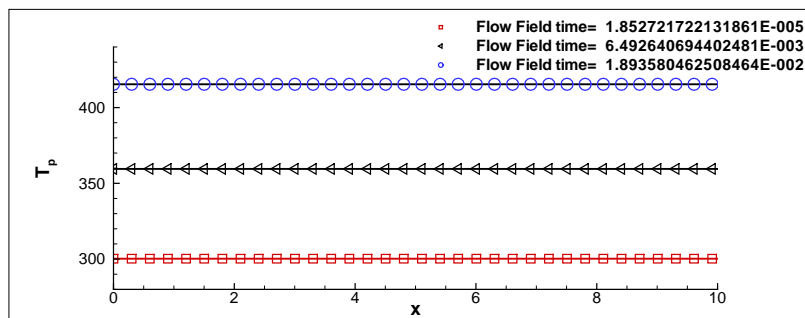
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 2.3: Evoluzione nel tempo dell'andamento lungo x di u_g , p , T_g e T_p per il caso test *Prova 3*. Le unità di misura sono quelle del SI.

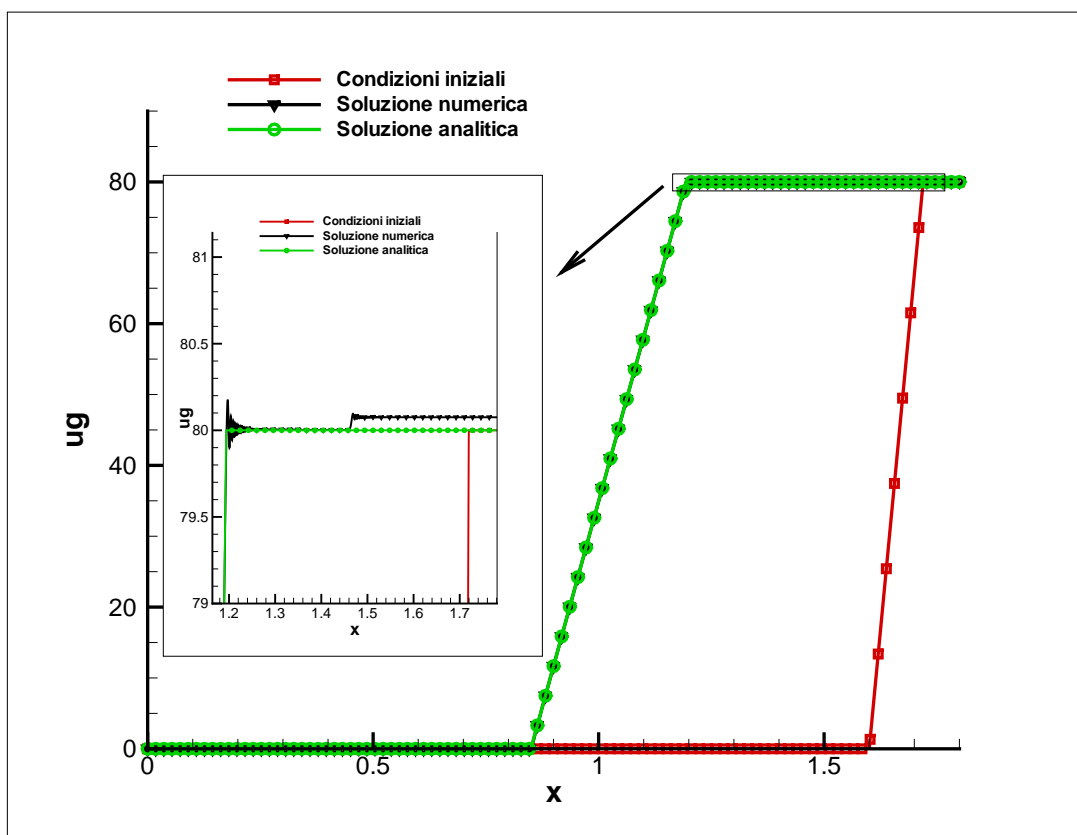


Figura 2.4: Evoluzione nel tempo dell'andamento lungo x di u_g per il caso test *Prova 4*. Le unità di misura sono quelle del SI.

iniziali così ottenute avendo imposto $CFL = 1$. L'intervallo temporale d'integrazione è costituito da 5000 passi per un totale di $t_f - t_1 \simeq 2.337 \cdot 10^{-3}$ s. Il dominio d'integrazione è invece $x \in [0 : 1.8]$ ed è stato ripartito in un dominio computazionale di 10000 sottointervalli.

Le condizioni iniziali, la soluzione analitica e quella ottenuta numericamente sono riportate in Figura 2.4. Come è possibile verificare, la soluzione numerica riproduce in modo soddisfacente l'andamento della soluzione analitica. Solo ingrandendo la zona nel riquadro indicato in Figura 2.4 si possono apprezzare le oscillazioni subito a valle dell'espansione, dovute al carattere dispersivo dell'errore di troncamento legato alla discretizzazione spaziale centrata al secondo ordine. Sempre nell'ingrandimento è possibile notare uno scalino nella zona a valle dell'espansione, che invece dovrebbe essere uniforme. Si è verificato come tale scalino risulti dall'interazione tra le condizioni al contorno (di gradiente nullo) ed i treni d'onda che si generano nei punti di raccordo tra l'espansione, la *zona 1* e la *zona 2*.

2.4.5 Prova 5

Il test che sarà illustrato in questa sezione consiste nell'integrare su un dominio compatto, definito da $x \in [0 : 1]$, discretizzato con 101 punti ($dx = 0.01$ m), le equazioni 2.1-2.6 a partire dalle condizioni iniziali espresse da:

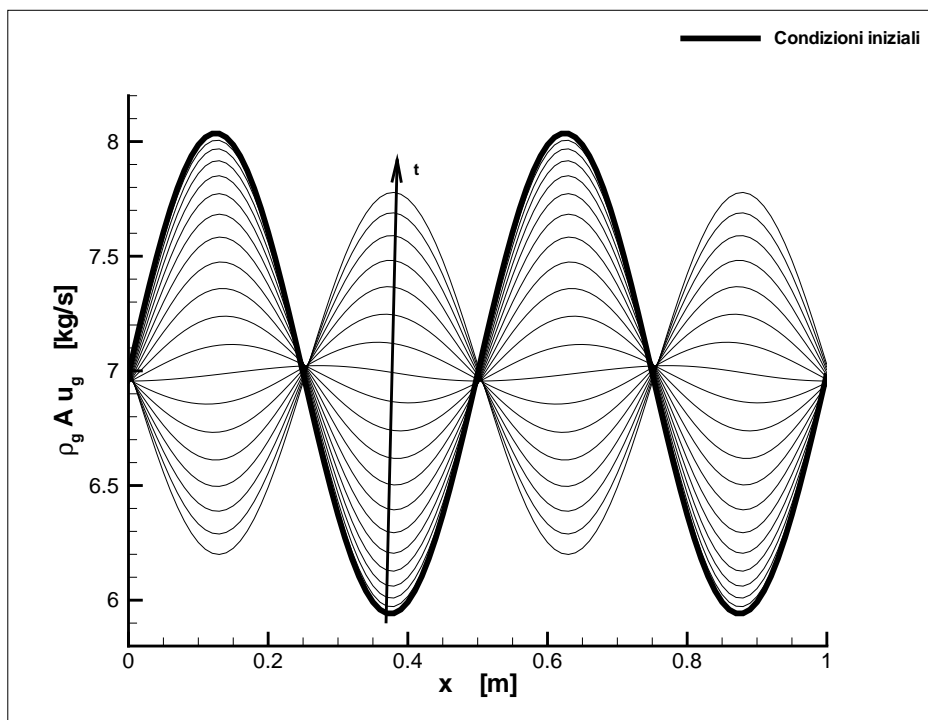
$$\begin{aligned} u_g &= 20 + 3 \sin(4\pi x) \text{ m/s} & T_p &= 300 \text{ K} \\ u_p &= 20 + 0.5 \sin(4\pi x) \text{ m/s} & p &= 1 \text{ atm} \\ T_g &= 1000 \text{ K} & \alpha &= 0.99 \end{aligned}$$

Si richiamano per completezza anche i valori assegnati alle costanti utilizzate, dati da

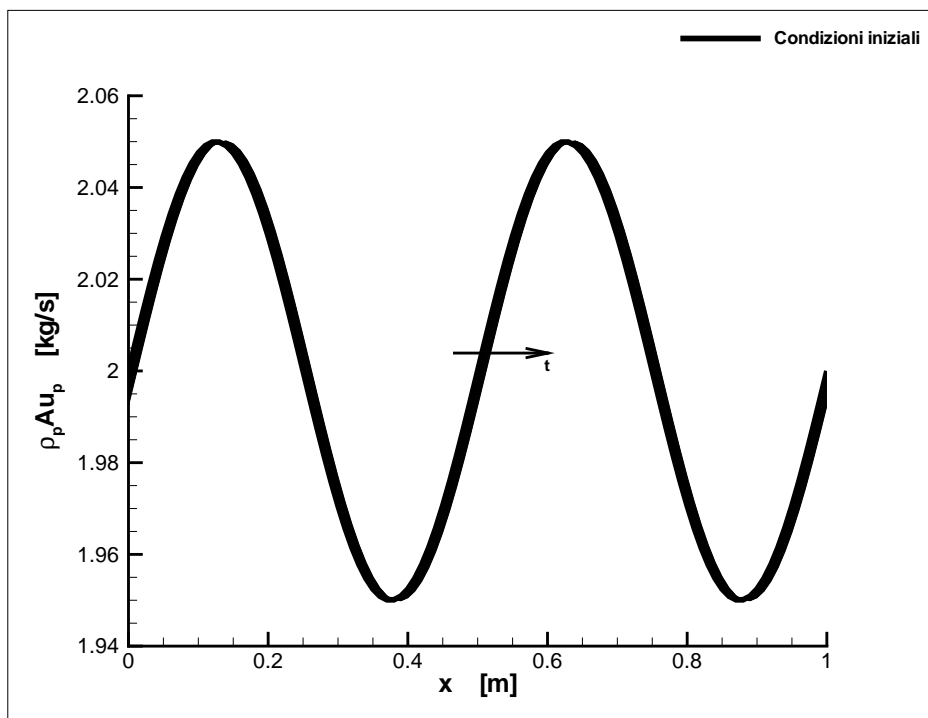
$$\begin{aligned} R_g &= 287 \text{ J/Kg K} & \rho_{p \text{ mono}} &= 10 \text{ Kg/m}^3 & D_p &= 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ m} \\ c_s &= 3200 \text{ J/Kg K} & k_g &= 2.58 \cdot 10^{-2} \text{ N/s K} & A &= 1 \text{ m}^2 \\ cv_g &= 718 \text{ J/Kg K} & \mu_g &= 2 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s} \end{aligned}$$

Prova senza termini sorgente

In Figura 2.5 (a) è possibile osservare l'evoluzione nel tempo dell'andamento lungo x di $\rho_g A u_g$, per $0 < t < 3.5077 \cdot 10^{-4}$ s, per il set di equazioni e le condizioni descritte. Si può notare come l'evoluzione della soluzione per questa variabile sia rappresentata da un'oscillazione ad alta frequenza della sua ampiezza. L'evoluzione nello spazio, ben più lenta, non è percepibile dato il piccolo intervallo temporale esaminato. In Figura 2.5 (b) è invece riportata l'evoluzione nello stesso intervallo temporale della variabile $\rho_g A u_p$. È possibile constatare come l'ampiezza di questa variabile non presenti le rapide oscillazioni nel tempo della precedente. La soluzione sembra piuttosto evolvere trasportata con una velocità dell'ordine di u_p . Se tuttavia si considerano le evoluzioni di $\rho_g A$ e $\rho_p A$ presentate in Figura 2.6 (a) e (b) rispettivamente, è possibile osservare come esse siano simili per le due fasi. La principale differenza sta nella frequenza di oscillazione: per la densità della fase gassosa tale frequenza è maggiore, come dimostra il fatto che, al termine dell'intervallo considerato, l'andamento ha già raggiunto il punto d'inversione (l'ampiezza del segnale ridimuisce), diversamente da quanto avviene per la fase solida. In Figura 2.7 è infine riportata la successione degli andamenti di $\rho_g A u_g$ con ampiezza massima e segno positivo per $0 < t < 5.5502 \cdot 10^{-3}$ s. È qui possibile apprezzare la lenta evoluzione del campo nello spazio.

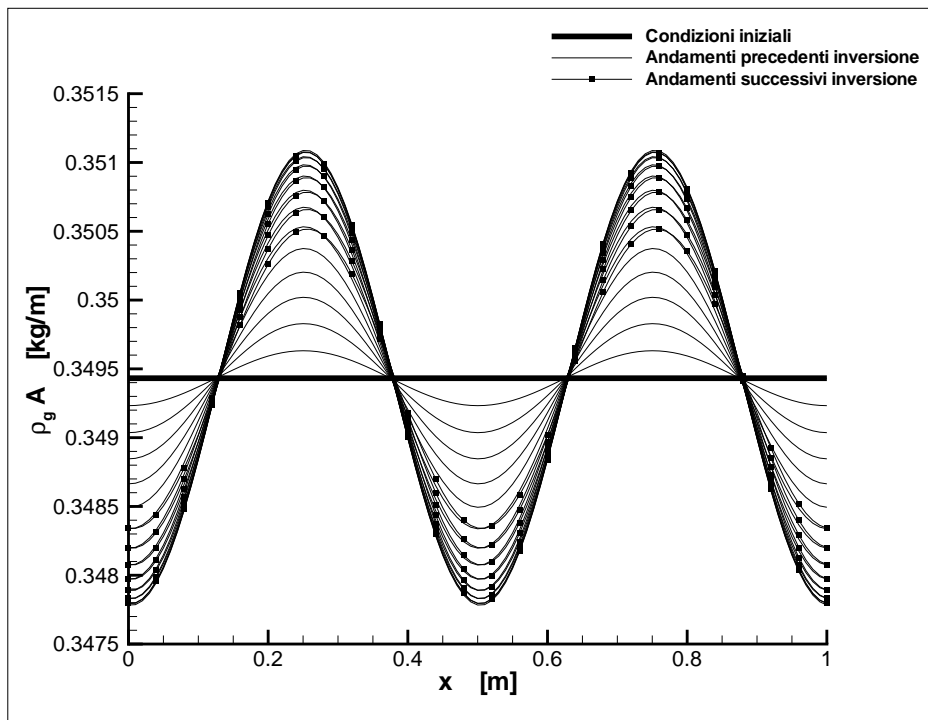


(a)

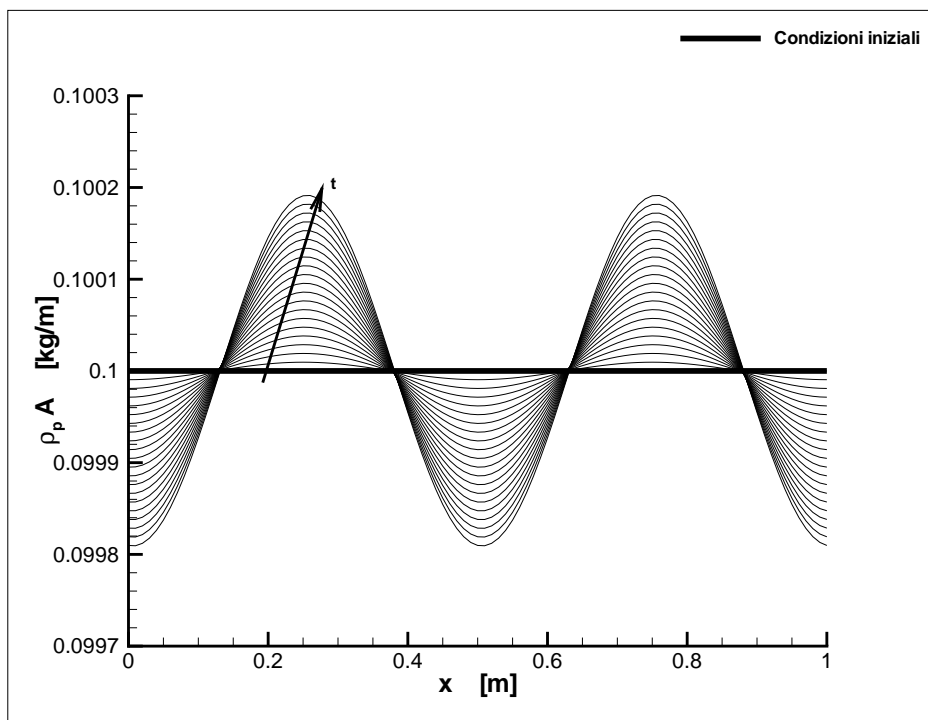


(b)

Figura 2.5: Evoluzione nel tempo dell'andamento lungo x di $\rho_g A u_g$ (a) e $\rho_p A u_p$ (b), per $0 < t < 3.5077 \cdot 10^{-4}$ s per il caso test *Prova 5* senza termini sorgente



(a)



(b)

Figura 2.6: Evoluzione nel tempo dell'andamento lungo x di $\rho_g A$ (a) e $\rho_p A$ (b), per $0 < t < 3.5077 \cdot 10^{-4}$ s per il caso test *Prova 5* senza termini sorgente

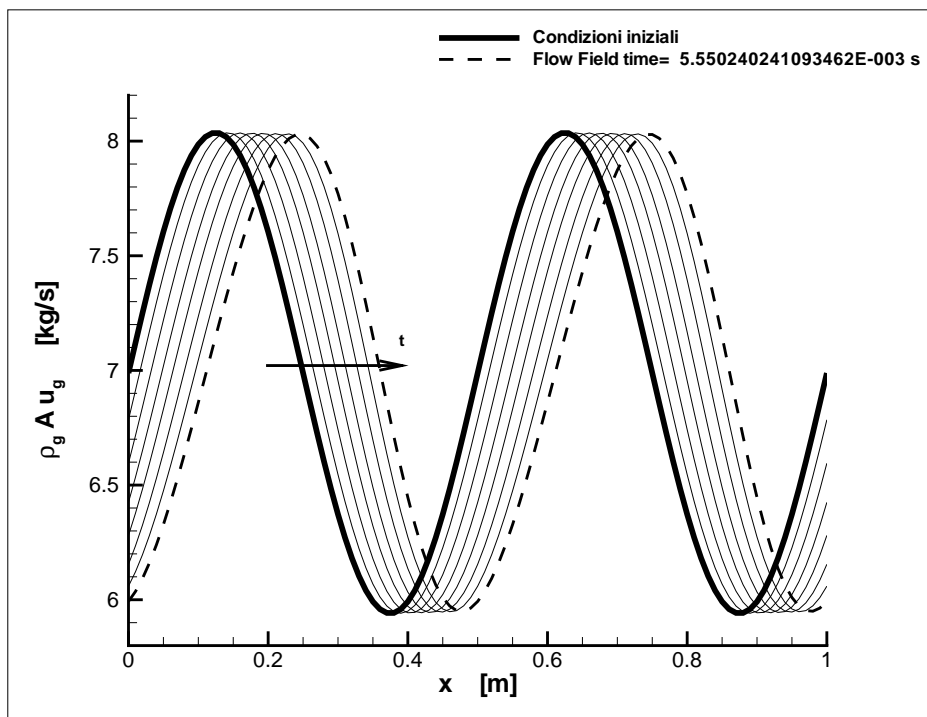


Figura 2.7: Evoluzione nel tempo dell'andamento lungo x di $\rho_g A u_g$ per $0 < t < 5.5502 \cdot 10^{-3}$ s per il caso test *Prova 5* senza termini sorgente

Prova con termini sorgente ma senza scambi di massa tra le fasi

In questa sezione sono presentate le soluzioni numeriche ottenute risolvendo le 2.1-2.6 dopo aver imposto $\dot{m} = 0$, ovvero trascurando gli scambi di massa tra le fasi. In Figura 2.8 sono confrontati gli andamenti ottenuti per la variabile $\rho_g A u_g$ con e senza termini sorgente, per due istanti molto vicini tra loro e interni al primo periodo di oscillazione dell'ampiezza. Nell'ingrandimento è possibile osservare come l'introduzione dei termini sorgente produca l'insorgere di oscillazioni oltre a deformare l'iniziale andamento sinusoidale. Segnaliamo senza mostrarlo come tali oscillazioni siano visibili solo per piccoli valori dell'ampiezza; per valori più alti della stessa essi vengono probabilmente nascosti dagli elevati valori dei gradienti. Tali oscillazioni non sono tali da distruggere il campo, come è possibile apprezzare dalla Figura 2.9, nella quale viene riproposto lo stesso confronto per un'istante nettamente successivo al precedente, ovvero per $t = 1.5247 \cdot 10^{-2}$ s. Si nota qui come l'introduzione dei termini sorgente, modifichi la soluzione introducendo nuove frequenze caratteristiche nella stessa. Questo porta ad una diversa distribuzione nello spazio delle variabili conservate, con il palese risultato di aumentare i valori di picco della quantità di moto della fase gassosa. In Figura 2.10

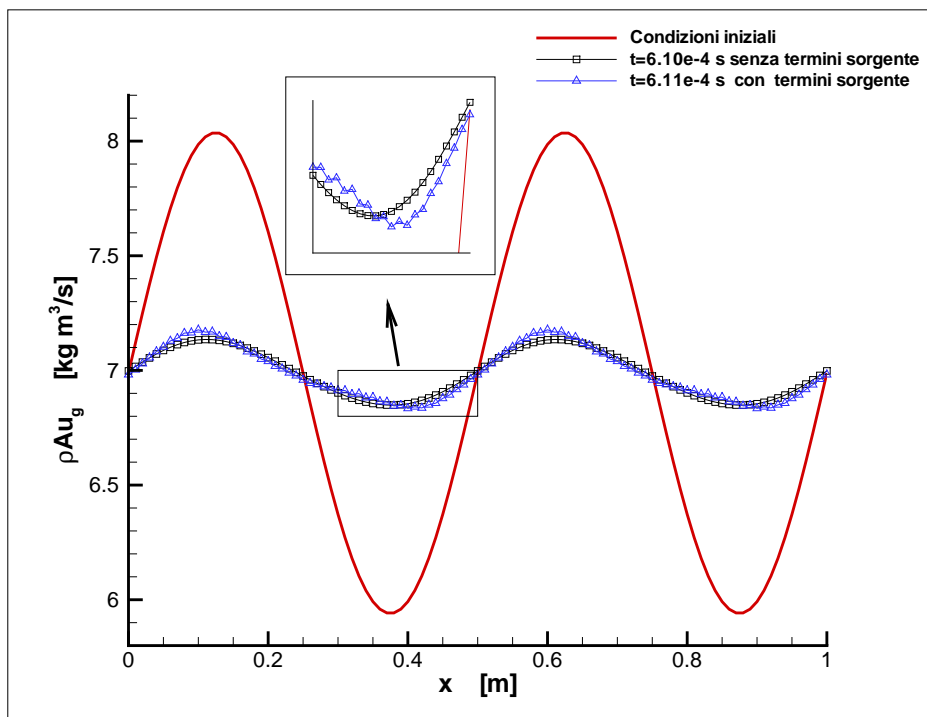


Figura 2.8: Confronto delle soluzioni ottenute per la variabile $\rho_g Au_g$ con e senza termini sorgente all'istante $t = 6.1 \cdot 10^{-4}$ s per il caso test *Prova 5*

si riportano per completezza i confronti tra gli andamenti delle variabili $\rho_g AE_g$ (a) e $\rho_p Ae_p$ (b), sempre per $t = 1.5247 \cdot 10^{-2}$ s, ottenute con e senza termini sorgente. Nella parte (b) della figura è ancor più evidente l'effetto di introduzione di nuove frequenze nella soluzione ad opera dei termini sorgente.

2.4.6 Prove con scambio di massa

Alla data di stesura del presente documento non è stato ancora possibile ottenere risultati significativi di simulazioni con scambio di massa tra le fasi. Con significativi qui si intende che abbiano rilevanza per il processo che sarà oggetto dell'applicazione del modello in studio. Tale rilevanza implica che il modello sviluppato debba prevedere la possibilità che la ρ_p possa andare a zero (gassificazione completa della particella). Le prove effettuate con una parte del campo caratterizzato da valori di ρ_p prossimi allo zero (10^{-11} kg/m³), sebbene con gradienti della variabile $\rho_p A$ sulla cella prossimi all'unità, hanno evidenziato una strutturale instabilità del codice. Questa è dovuta alla tendenza dell'algoritmo numerico a generare oscillazioni che portano la ρ_p ad assumere valori negativi. Quando ciò avviene il calcolo degenera nel giro di poche iterate. Occorre perciò

mettere a punto strategie che consentano di limitare i valori possibili per ρ_p a quelli positivi, salvaguardando la conservazione della massa. Lo sviluppo di tali strategie non sembra comunque presentare particolari problemi.

Alla data di stesura del presente documento, questa risulta essere l'unica criticità emersa rispetto all'implementazione del modello proposto nell'algoritmo numerico di integrazione attualmente usato nel codice *HeaRT*.

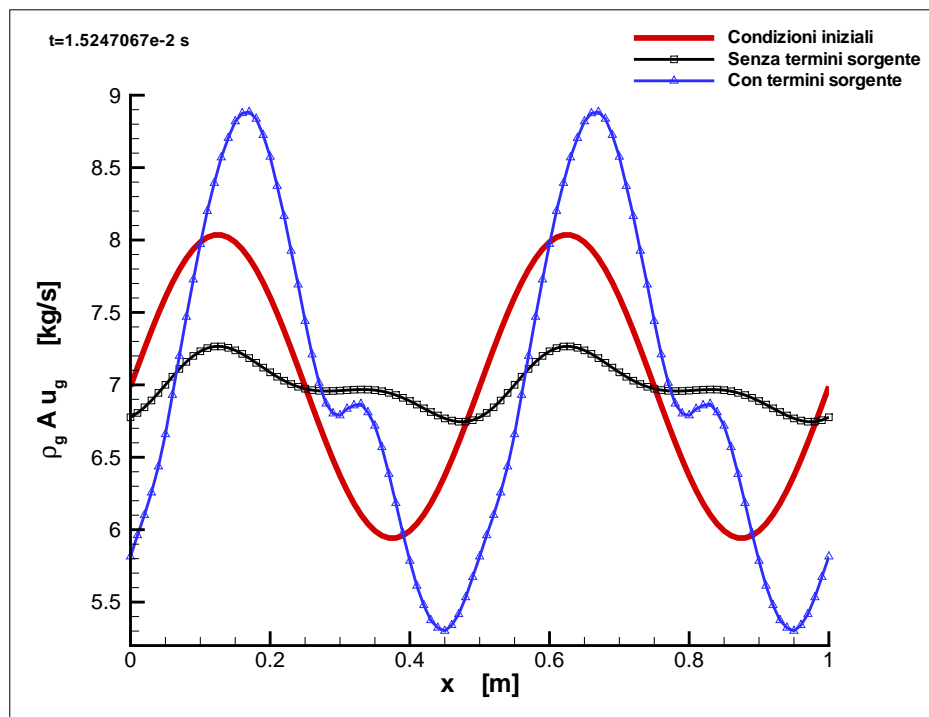
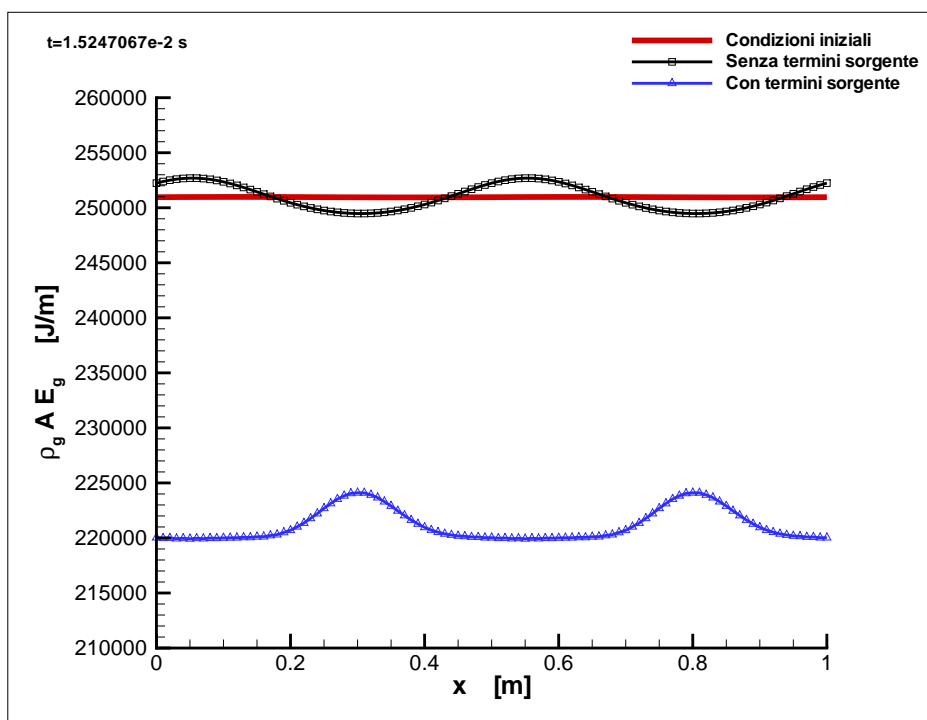
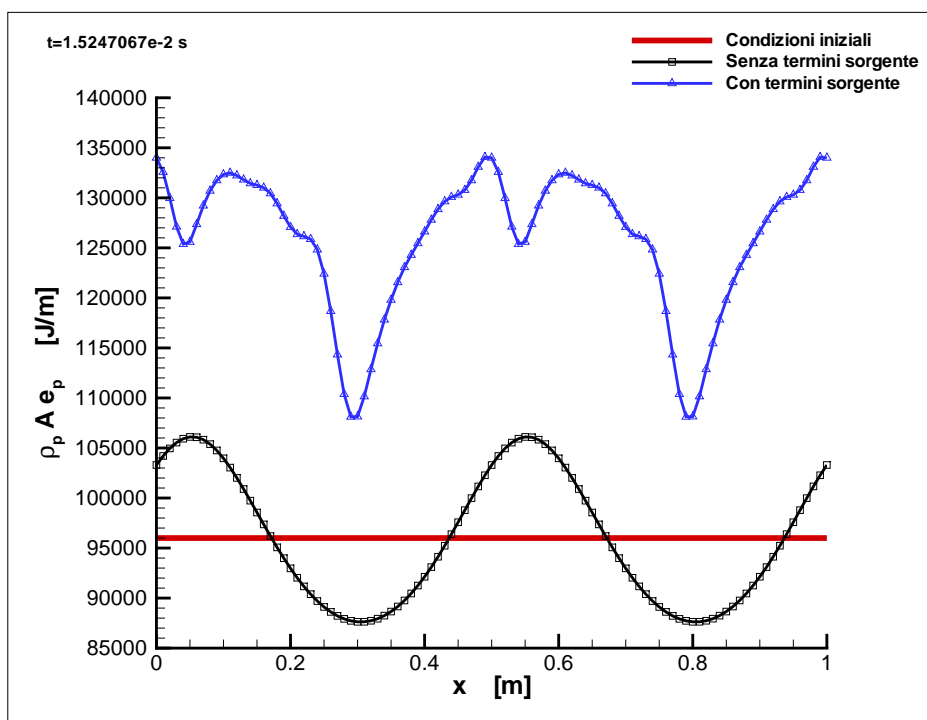


Figura 2.9: Confronto delle soluzioni ottenute per la variabile $\rho_g A u_g$ con e senza termini sorgente all'istante $t = 1.5247 \cdot 10^{-2}$ s per il caso test *Prova 5*



(a)



(b)

Figura 2.10: Confronto delle soluzioni ottenute per le variabili $\rho_g A E_g$ (a) e $\rho_p A e_p$ (b) con e senza termini sorgente all'istante $t = 1.5247 \cdot 10^{-2}$ s per il caso test *Prova 5*

Conclusioni

Obiettivo del presente lavoro era quello di sviluppare un iniziale modello bifase gas-solido, capace per le ipotesi semplificative adottate di simulare processi di gassificazione. La scelta, di sviluppare un modello in un riferimento euleriano, operata in partenza per motivi di risparmio di risorse di calcolo, ha imposto la necessità di operare delle ipotesi semplificative per ottenere nei tempi previsti dal presente contratto un modello implementabile nel codice *HeaRT* di proprietà dell'ENEA. Le principali ipotesi che sono alla base dello sviluppo presentato nel presente documento sono: particelle sufficientemente piccole; densità della fase condensata molto maggiore di quella della fase gassosa; raggio delle particelle presenti all'interno del volume di controllo, assunte sferiche, dipendente dalla radice cubica della frazione volumetrica della fase dispersa; flusso ad alta diluizione, ovvero di bassa frazione volumetrica della fase condensata e di assenza di urti tra particelle. L'ipotesi sulle dimensioni delle particelle è particolarmente restrittiva in quanto presuppone che non vi siano fenomeni di accumulo e/o rarefazione della fase dispersa al campo di moto. Tale ipotesi sarà tanto più penalizzante quanto maggiore sarà il modulo di $\nabla \cdot \mathbf{u}_p$.

Il presente modello sembra tuttavia adatto a fornire dati utili, come ad esempio, sul flusso di particelle che abbandonano un letto fluido in un gassificatore che sfrutti tale tecnologia.

All'interno del presente lavoro viene proposto un modello del tipo *two-fluid*, nel quale entrambe le fasi sono studiate con sistemi di equazioni del tipo *Navier-Stokes*, accoppiate attraverso termini sorgente. All'interno di questi, ove possibile, si è proposto di sfruttare i risultati del modello di sottogriglia FM già implementato nel codice *HeaRT*, per tener conto degli effetti delle scale non risolte. In particolare si è proposta una estensione del modello FM per la valutazione delle interazioni tra turbolenza nella fase gassosa e particelle.

È stato inoltre creato un codice numerico di prova , con algoritmo in tut-

to analogo a quello implementato nel codice *HeaRT*, in modo da evidenziare le criticità nell'integrazione dei termini di accoppiamento tra le fasi all'interno del codice stesso. Parte dei risultati di tale attività e le osservazioni su dette criticità sono riportate in Allegato 1.

In Allegato 2 si è inoltre proceduto a valutare l'opportunità di applicare tecniche di preconditionamento al futuro codice *HeaRT* bifase, in modo da alleviare l'inevitabile aumento del costo computazionale dovuto all'integrazione delle equazioni per la fase dispersa.

Appendice A

Equazione dell'energia per la fase gassosa in forma di temperatura

Il modello implementato nel codice *HeaRT* alla data di stesura del presente documento prevede che l'equazione dell'energia sia scritta in termini di temperatura. Al fine di preservare la congruenza con tale modello si presentano in questa sezione i passaggi che permettono di riscrivere la 1.11 in termini di temperatura della fase gassosa T_g .

Sfruttando la definizione di energia totale e sostituendo le 1.9 e 1.10 nella 1.11 si ottiene

$$\begin{aligned} \rho_g \dot{\Gamma}_g^* &- \frac{u_g^2}{2} \dot{\Gamma}_g^* + \rho_g \frac{D e_g}{D t} + \mathbf{u}_g \cdot \left[\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g^* - \nabla P + \rho_g \mathbf{g} + \dot{\boldsymbol{\Psi}}_g^* + \dot{\mathbf{I}}_g^* \right] = -\nabla \cdot (P \mathbf{u}_g) + \\ &+ \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_g^* \mathbf{u}_g) - \nabla \cdot \mathbf{q}_g^* + \rho_g \sum_{s=1}^{N_s} Y_s \mathbf{g} \cdot (\mathbf{u}_g + \mathbf{V}_{sg}^*) + \dot{Q}_{g1}^* + \dot{Q}_{g2}^* + L\dot{F}_g^* \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

dove e_g è l'energia interna della fase gassosa data da $e_g = C_v T_g$ e C_v è il calore specifico della miscela a volume costante.

Una volta definita la derivata materiale come

$$\frac{D \square}{D t} = \frac{\partial \square}{\partial t} + \mathbf{u}_g \cdot \nabla \square \quad (\text{A.2})$$

da semplici relazioni termodinamiche, sotto l'ipotesi di miscela di gas perfetti in equilibrio termico, è possibile scrivere

$$\begin{aligned}
 \frac{D e_g}{D t} &= \frac{D e_g}{D T_g} \frac{D T_g}{D t} + \sum_{s=1}^{N_s} \frac{D e_g}{D Y_s} \frac{D Y_s}{D t} = C_v \frac{D T_g}{D t} + \sum_{s=1}^{N_s} C_v^s T_g \frac{D Y_s}{D t} = \\
 &= C_v \frac{D T_g}{D t} + \sum_{s=1}^{N_s} \left(C_p^s - \frac{\mathcal{R}_u}{W_s} \right) \frac{T_g}{\rho_g} [-\nabla \cdot \mathbf{J}_s + \rho_g \dot{\omega}_s + \dot{\omega}_s^{ev} + \\
 &\quad - Y_s \dot{\Gamma}_g^* - \nabla \cdot (\rho_g Y_s \mathbf{V}_C)] \tag{A.3}
 \end{aligned}$$

dove C_p^s e C_v^s sono i calori specifici della specie s a pressione e volume costante rispettivamente, ed \mathcal{R}_u è la costante universale dei gas. Sostituendo la A.3 nella A.1 avremo infine, dopo pochi passaggi matematici

$$\begin{aligned}
 \rho_g C_v \frac{D T_g}{D t} &= -P \nabla \cdot \mathbf{u}_g + \nabla \cdot (k_g \nabla T_g) + \Phi - \rho_g \sum_{s=1}^{N_s} \left[-\frac{W_s}{W_{mix}} D_s (\mathbf{g} \cdot \nabla X_s + \right. \\
 &\quad \left. - C_p^s \nabla X_s \cdot \nabla T_g) \right] - \sum_{s=1}^{N_s} \rho_g h_s \dot{\omega}_s + \mathcal{R}_u T_g \sum_{s=1}^{N_s} \left[\frac{1}{W_s} \nabla \cdot \left(\rho_g \frac{W_s}{W_{mix}} D_s \nabla X_s \right) \right. \\
 &\quad \left. + \rho_g \dot{\omega}_s \right] + \sum_{s=1}^{N_s} \left[\left(C_p^s - \frac{\mathcal{R}_u}{W_s} \right) T_g \nabla \cdot (\rho_g Y_s \mathbf{V}_C) \right] \tag{A.4}
 \end{aligned}$$

Bibliografia

- [1] A. Kaufmann. Towards eulerian-eulerian large eddy simulation of reactive two-phase flows. Phd thesis, CERFACS Toulouse, 2004.
- [2] J.C. Oefelein. Large eddy simulation of turbulent combustion processes in propulsion and power systems. *Prog. Aerosp. Sci.*, 42:2–37, 2006.
- [3] E. Giacomazzi. Modellistica e simulazione della combustione turbolenta. Tesi di dottorato di ricerca in meccanica teorica e applicata, Università La Sapienza, Dipartimento di Meccanica ed Aeronautica, Roma, 1999.
- [4] E. Peraino and B. Leckner. Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 24:259–296, 1998.
- [5] S.E. Elgobashi and G.C. Truesdell. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles: Turbulence modification. *Physics of Fluids A*, 5(7):1790–1801, 1993.
- [6] F.E. Marble. Dynamics of dusty gases. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 2:397–446, 1970.
- [7] R.A. Bagnold. Experiments on a gravity-free dispersion of large solid spheres in a newtonian fluid under shear. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 225:49, 1954.
- [8] S. Abu-Zaid and G. Ahmadi. A thermodynamically consistent rate-dependent model for turbulent two-phase flows. *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 30:509–529, 1995.
- [9] H. Iddir and H. Arastoopour. Modeling of multitype particle flow using the kinetic theory approach. *AIChE Journal*, 51(6):1620–1631, 2005.

- [10] C. Shu and S. Osher. Efficient implementation of eno shock-capturing schemes. *J. Comp. Phys.*, 77:439–471, 1988.