

## SOMMARIO

<b>LEZIONE 9. DEFLAGRAZIONE /TEORIA TERMICA.....</b>	<b>103</b>
INTRODUZIONE.....	103
MODELLO DI MALLARD /LE CHATELIER. VELOCITÀ DI PROPAGAZIONE LAMINARE DI FIAMMA.....	103
DIPENDENZE FUNZIONALI.....	107
a) - dipendenza dalla temperatura della miscela $T_0$ :.....	109
b) - dipendenza dalla temperatura adiabatica di fiamma:.....	109
c) - influenza del rapporto aria/combustibile:.....	111
d) - dipendenza dalla pressione ambiente.....	113
RIFERIMENTI E NOTE.....	114
TESTI CONSIGLIATI.....	114

## Lezione 9. Deflagrazione /Teoria termica

### **Introduzione**

Una propagazione di un processo di combustione attraverso una miscela di combustibile e comburente, in cui il rilascio di energia genera un'espansione (abbassamento di densità e pressione) nella regione occupata dai prodotti della reazione di ossidazione, è detta deflagrazione. L'abbassamento della pressione è quasi sempre una frazione trascurabile della pressione media rilevabile in tutta la regione interessata al processo di combustione. Pertanto il processo viene considerato quasi isobarico, nel senso che le variazioni di pressione rilevabili su tutto il campo sono trascurabili rispetto a qualsiasi variazione dell'energia cinetica o dell'entalpia sensibile.

L'espansione della parte della miscela in cui la combustione ha avuto luogo genera l'aumento della velocità.

Le caratteristiche, su menzionate, cioè la diminuzione della pressione e della densità, nonché l'aumento della velocità sono tipiche della deflagrazione e sono esattamente l'opposto di quanto si verifica nella propagazione per detonazione (aumento di pressione e densità, diminuzione della velocità).

La regione dello spazio in cui avviene la propagazione del processo di combustione in regime di deflagrazione è usualmente definita come "fronte di fiamma" o "onda di combustione" e la struttura spaziale del processo, cioè la distribuzione spaziale del campo termico, fluidodinamico e chimico viene generalmente chiamata struttura di fiamma. I termini "deflagrazione" e "fiamma premiscelata laminare" vengono usati in pratica nella stessa accezione scientifica, sebbene al secondo (fiamma) vengono generalmente associati fenomeni di emissione di luce che ne estendono il significato nell'uso comune.

### **Modello di Mallard /Le Chatelier. Velocità di propagazione laminare di fiamma**

Lo studio della struttura di fiamma premiscelata verrà qui di seguito presentato sotto l'ipotesi di campo unidimensionale e stazionario. Queste ipotesi sono semplificative, ma non tolgono generalità alla trattazione da un punto di vista concettuale. L'estensione al caso multidimensionale ed instazionario (p.e. propagazione libera di fiamma) può presentare problemi di rappresentazione matematica, ma le variabili che controllano il processo non cambiano.

L'analisi verrà inoltre condotta seguendo l'evoluzione della temperatura ( $T$ ) e dell'entalpia di formazione di tutta la miscela reagente  $h^o$  in quanto rappresentano, insieme alla

velocità, il processo di combustione nel suo insieme e sono meno sensibili alla natura chimica del combustibile. Inoltre su queste grandezze è possibile imporre delle ipotesi che nascono dall'analisi del processo dal punto di vista cinetico-chimico e che sono verificabili sia sperimentalmente sia per mezzo di modelli numerici più dettagliati.

Le evoluzioni spaziali della temperatura e dell'entalpia di formazione di tutta la miscela possono essere seguite sul diagramma schematico di fig. 3.6.

I valori riportati sul diagramma sono puramente indicativi e possono considerarsi delle prime approssimazioni solo per ciò che concerne la temperatura. Il diagramma serve per evidenziare la presenza di tre diverse regioni.

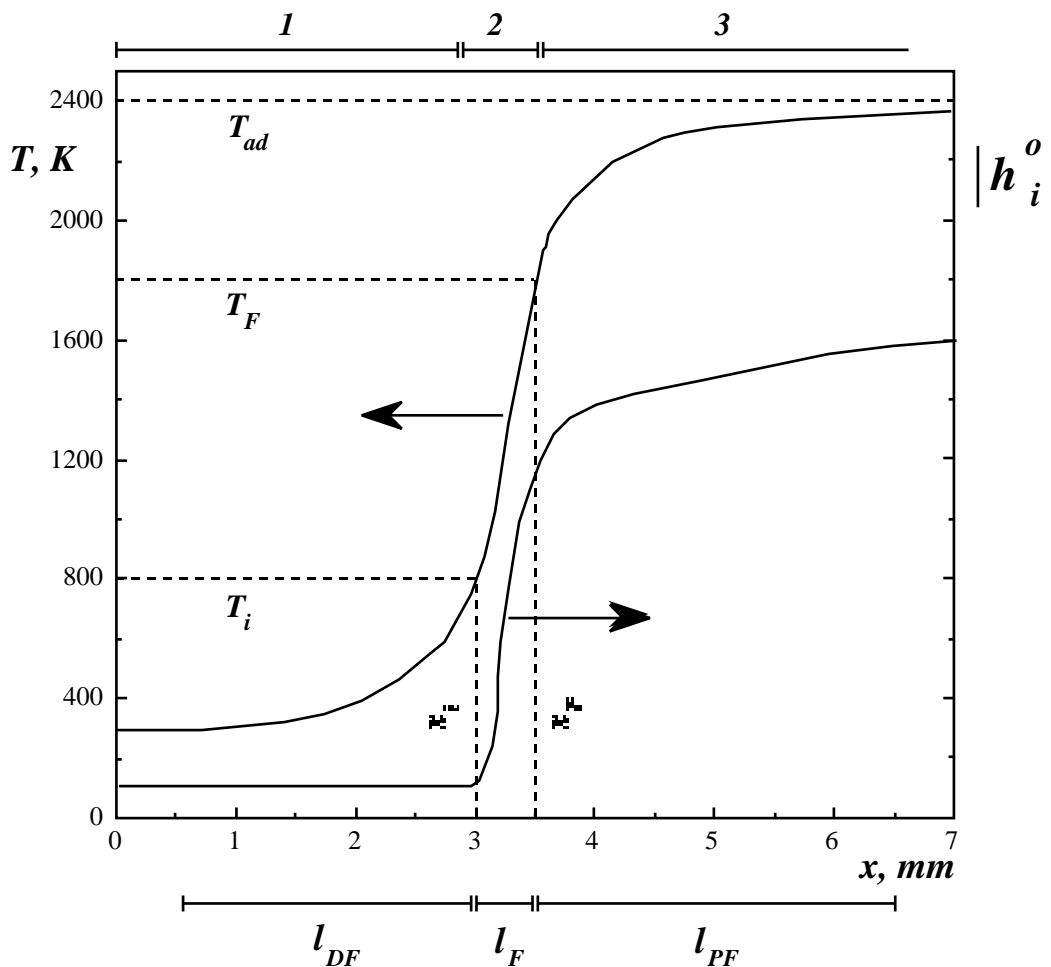


Fig. 3.6 Evoluzione spaziale della temperatura e della entalpia di formazione totale in una fiamma premiscelata unidimensionale.

Nella prima la temperatura sale esponenzialmente e l'entalpia di formazione rimane uguale al valore della miscela nelle condizioni iniziali. Ciò significa che in questa zona il combustibile non è ignito. Ovviamente possono avvenire reazioni di medio-bassa temperatura, come ad esempio i primi attacchi dell'ossigeno sul combustibile, l'estrazione

di idrogeno dal combustibile di partenza da parte di radicali che provengano per diffusione dalla zona di reazione, infine reazioni di scissione e condensazione del combustibile. Però per ciò che concerne la temperatura, o meglio l'entalpia sensibile  $h^s$ , questa zona deve considerarsi come controllata solo dalla diffusione e dalla convezione; il termine generazione nell'equazione del bilancio dell'entalpia sensibile  $\dot{h}_i^o$ , deve essere considerato nullo (così come appare sul diagramma). Lo spessore di questa zona verrà denominato come "lo spessore di fiamma controllato dalla diffusione" e verrà indicato con  $l_{DF}$ .

La seconda zona è caratterizzata da un aumento lineare della temperatura e dell'entalpia di formazione in un intervallo spaziale più ristretto, che chiameremo spessore di fiamma e verrà indicato con  $l_F$ . Si assume che in questa zona il trasporto per diffusione sia trascurabile e prevalgano solo la convezione e la generazione.

In questa regione si ha la formazione di  $H_2O$ ,  $CO$  ed  $H_2$  e solo una frazione minore del combustibile si trasforma in  $CO_2$ . Il combustibile alla fine della regione è completamente scomparso nella sua composizione chimica iniziale ed ha subito una parziale ossidazione ( $H_2O$  e  $CO$ ) oppure rimane sotto forma di piccole molecole (p.e.  $H_2$ ,  $C_2H_6$ , etc.) e radicali (p.e.  $CH_3$ ,  $C_2$ , etc.).

Infine nella terza regione la temperatura e l'entalpia di formazione salgono più lentamente fino alla temperatura adiabatica di fiamma e ad un valore dell'entalpia di formazione pari, approssimativamente, al calore di combustione.

In questa zona l'ossido di carbonio si ossida lentamente ad anidride carbonica, ed i radicali si ricombinano per formare, ancora più lentamente, specie stabili. A causa di questa differenza di velocità di reazione questa zona viene, a volte, suddivisa in due zone dette di "post-combustione" e di "ricombinazione". L'intera zona verrà denominata, qui davanti, come zona di post-combustione (anche se la combustione continua ad avvenire) ed il suo spessore verrà designato con  $l_{PF}$ .

Ricapitolando, il modello proposto prevede un aumento di temperatura dal valore iniziale ( $T_o$ ) a quello di ignizione ( $T_i$ ) dovuto alla diffusione (in bilancio con la convezione), quindi un ulteriore aumento lineare fino alla temperatura, detta di fiamma ( $T_F$ ) dovuto al rilascio "veloce" di calore (in bilancio con la convezione) ed infine un graduale aumento fino alla temperatura adiabatica ( $T_{ad} = T_F$ ) dovuto al rilascio di calore "più lento".

Le due equazioni che meglio descrivono le grandezze riportate in figura 3.6 sono quelle relative ai bilanci di entalpia sensibile e di entalpia di formazione:

$$\frac{h^s}{t} + \nu h^s - \left( \nu h^s \right) = - \dot{h}_i^o \quad (3.27)$$

$$\frac{h^o}{t} + \nu h^o - J_{h^o} = - \dot{h}_i^o \quad (3.28)$$

Sotto l'ipotesi di unidimensionalità e stazionarietà riscriviamo la 3.27) per descrivere la zona di fiamma controllata solo dalla diffusione e dalla convezione, e la 3.28) per descrivere la zona controllata dalla generazione e dalla convezione.

$$\frac{d(\nu h^s)}{dx} - \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} h^s = 0 \quad (3.29)$$

$$\frac{d(\nu h^o)}{dx} = \dot{h}_i^o \quad (3.30)$$

la 3.29 sotto l'ipotesi di  $c_p(T) = \text{cost}$  può essere scritta come:

$$d(\nu T) - \frac{dT}{dx} = 0 \quad (3.31)$$

integrando la 3.31 tra la condizione indisturbata (pedice o) e la condizione di ignizione (pedice i), considerando inoltre che il flusso convettivo di massa ( $\nu$ ) è una costante si ottiene:

$$\nu(T_i - T_o) - \frac{dT}{dx} = 0 \quad (3.32)$$

se si pone  $\frac{dT}{dx} = \frac{T_F - T_i}{l_F}$ , considerando un aumento lineare di  $T$  nella zona di reazione

"veloce", e se si valuta il flusso convettivo ( $\nu$ ) nel punto dove avviene l'ignizione la 3.32 diventa:

$$\nu_i(T_i - T_o) - \frac{T_F - T_i}{l_F} = 0 \quad (3.33)$$

se infine si definisce la velocità di propagazione di fiamma  $u_i = v_F$  dalla 3.31 si ricava:

$$v_F l_F = \frac{T_F - T_i}{T_i - T_o} \quad (3.34)$$

$v_F$  è la velocità di fiamma calcolata come la velocità del gas nella posizione dove avviene l'ignizione.

### Dipendenze funzionali

Nel caso si voglia far riferimento ad una quantità più facilmente misurabile si può definire una velocità di combustione  $u_o = \frac{1}{\rho} \dot{m}_F$  che è la velocità nella regione indisturbata dalla presenza della fiamma.

Per calcolare lo spessore di fiamma nella zona controllata dalla diffusione  $l_{DF}$  si può integrare la 3.31 due volte. La prima volta l'integrazione viene compiuta tra una generica temperatura  $T$  e la  $T_o$ :

$$u(T - T_o) - \frac{dT}{dx} = 0 \quad (3.35)$$

infatti i flussi diffusivi, là dove  $T = T_o$ , sono zero.

La seconda integrazione viene compiuta sulla 3.35 dopo aver separato le variabili e posto  $u = v_F$

$$v_F dx = \frac{d(T - T_o)}{T - T_o} \quad (3.36)$$

tra una posizione  $x_i$  (ed una temperatura  $T_i$ ), dove avviene l'ignizione ed una posizione generica  $x$  (ed una temperatura generica  $T$ )

$$v_F(x_i - x) = \ln \frac{T_i - T_o}{T - T_o} \quad (3.37)$$

nell'integrazione è stata considerata una costante per qualsiasi valore di  $T$ ; in questo caso è conveniente assumere  $v_F = v_{Fi}$ . Per calcolare  $l_{DF}$  bisogna fissare la posizione dove la temperatura assume un valore di riferimento ( $T$ ) tale che  $T - T_o$  sia una frazione "piccola" di  $T_i - T_o$ , pertanto ponendo  $l_{DF} = x_i - x$  si ottiene

$$v_{Fi} l_{DF} = v_{Fi} \ln \frac{T_i - T_o}{T - T_o} \quad (3.38)$$

per esempio assumendo una  $T_i - T_o = 900$  K ed una  $T - T_o = 10$  K si ottiene un valore del logaritmo pari a 3. Le relazioni che legano la velocità di fiamma con gli spessori di fiamma  $l_F$  e  $l_{DF}$  possono essere utilizzate per conoscere gli spessori di fiamma quando la velocità sia nota per altra strada (per esempio sperimentalmente). Nel caso si voglia avere un'altra relazione tra  $v_F$  e  $l_F$  almeno per avere la dipendenza funzionale della  $v_F$  dai parametri

che entrano in gioco, si può utilizzare l'equazione del bilancio dell'entalpia di formazione sotto forma unidimensionale e stazionaria come si presenta nell'equazione 3.30 e cioè

$$\frac{d}{dx} u h^o = \dot{\omega}_i h_i^o \quad (3.39)$$

da cui integrando tra  $x_i$  ed  $x_F$  si ottiene (  $u$  è sempre calcolato nel punto di ignizione )

$$u_i \int_{x_i}^{x_F} dh^o = \int_{x_i}^{x_F} (\dot{\omega}_i h_i^o) dx \quad (3.40)$$

e quindi

$$u_i [h_F^o - h_i^o] = \int_{x_i}^{x_F} (\dot{\omega}_i h_i^o) dx \quad (3.41)$$

La quantità all'interno della parentesi quadra è la "quantità di calore" rilasciata dal mezzo reattivo nello spessore di fiamma (esteso, come detto all'inizio, fino alla formazione di  $H_2O$  e  $CO$ ). Questa quantità è stimabile (come risulta da modelli numerici e misure sperimentale) intorno al 60-80% dell'entalpia di combustione (  $h_c$  ) e quindi si può considerare approssimativamente uguale a  $h_c$  almeno nelle valutazioni che riguardano ordini di grandezza. L'integrale a destra della 3.41 è più difficilmente quantificabile perché rappresenta la velocità con cui evolvono le reazioni di ossidazione. In questo caso o si procede con delle forti semplificazioni (p.e. Zel'dovich (1985) considera la temperatura costante) o si studiano direttamente modelli numerici che coinvolgono tutte le reazioni significative nel processo di ossidazione. Se si vogliono conoscere invece le dipendenze funzionali dell'integrale e di conseguenza di  $u_i$  (che verrà posto uguale anche in questo caso a  $v_F$  ) è opportuno sintetizzare la 3.48 utilizzando un grado di avanzamento della reazione  $(x)$  così definita:

$$(x) = \frac{\dot{\omega}_i h_i^o}{u_i [h_F^o - h_i^o]} \quad (3.42)$$

ed inserendola nella 3.39 si ottiene

$$v_F = \int_{x_i}^F (x) dx = \bar{v} l_F \quad (3.43)$$

$\bar{v}$  è la velocità di reazione media nello spessore di fiamma, ed anche se non nota con precisione, sarà comunque dipendente dalla temperatura con una legge esponenziale e dalla pressione con legge di potenza con esponente  $(n-1)$  dove  $n$  è l'ordine della reazione

complessiva. E' da notare che  $n$  viene diminuito di una unità per la presenza a denominatore della 3.42 della densità nel punto di ignizione. Pertanto:

$$- \exp -\frac{1}{T} p^{n-1} \quad (3.44)$$

Utilizzando la 3.34 e la 3.43 si può ricavare  $v_F$  come:

$$v_F = \sqrt{i \frac{T_F - T_i}{T_i - T_o}} \quad (3.45)$$

E' chiara da questa ultima relazione la dipendenza di  $v_F$  dai parametri che caratterizzano una fiamma. Consideriamoli ognuno schematicamente:

a) dipendenza dalla temperatura della miscela  $T_o$ :

- la diffusività  $i$  non dipende sensibilmente dalla temperatura  $T_o$  poiché è calcolata sempre a  $T_i$  che dipende dalla composizione della miscela e non da  $T_o$ .
- $v_F$  dipende dalla temperatura in modo esponenziale ed è quindi sensibile ad un aumento della temperatura della miscela perché la temperatura di fiamma si innalza proporzionalmente.
- nel rapporto  $\frac{T_F - T_i}{T_i - T_o}$   $T_o$  appare esplicitamente:

In Figura 3.7 la dipendenza della ( $u_o$ ) velocità di combustione (ottenuta come  $u_o = \frac{T_o}{T_i} v_F$ ) dalla temperatura della miscela è mostrata per tre tipi di combustibili. I dati sperimentali vengono interpolati da una curva di tipo  $T_o^m$  con  $m$  compreso tra 1 e 2.

b) dipendenza dalla temperatura adiabatica di fiamma:

- questa temperatura è proporzionale a  $T_F$  per cui la velocità di propagazione verrà influenzata dall'aumento di temperatura all'interno della zona compresa tra l'ignizione e la fine della combustione. L'influenza della  $T_F$  sarà particolarmente sentita perché influenza direttamente la velocità di reazione. In fig. 3.8 la velocità di combustione è diagrammata contro  $T_F$  (nella figura  $T_f$ ). La variazione di  $T_F$  è ottenuta facendo variare la composizione della miscela con aggiunta di inerte.



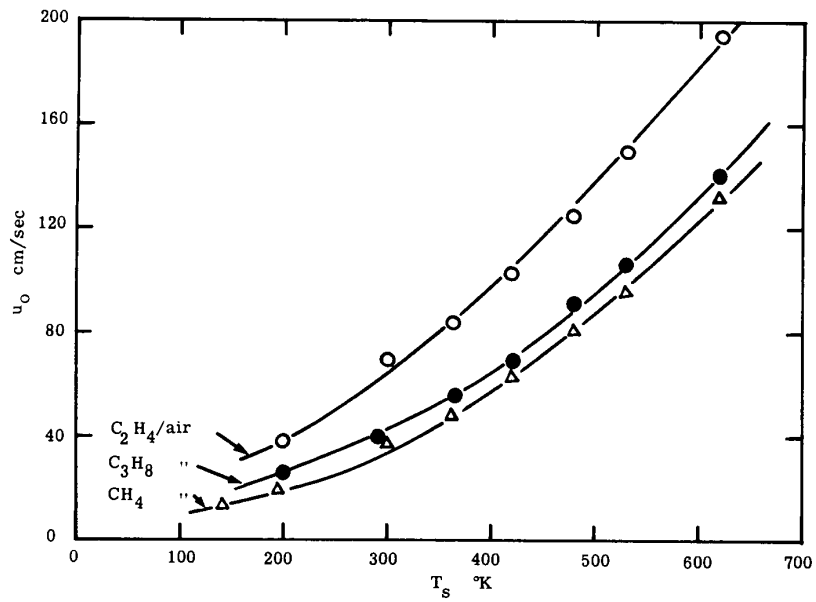


Fig. 3.7 Influenza della temperatura ambiente sulla velocità di combustione. (Introduction to Combustion Phenomena, A.M. Kanury, Gordon and Breach Science Publ., N.Y., 1975).

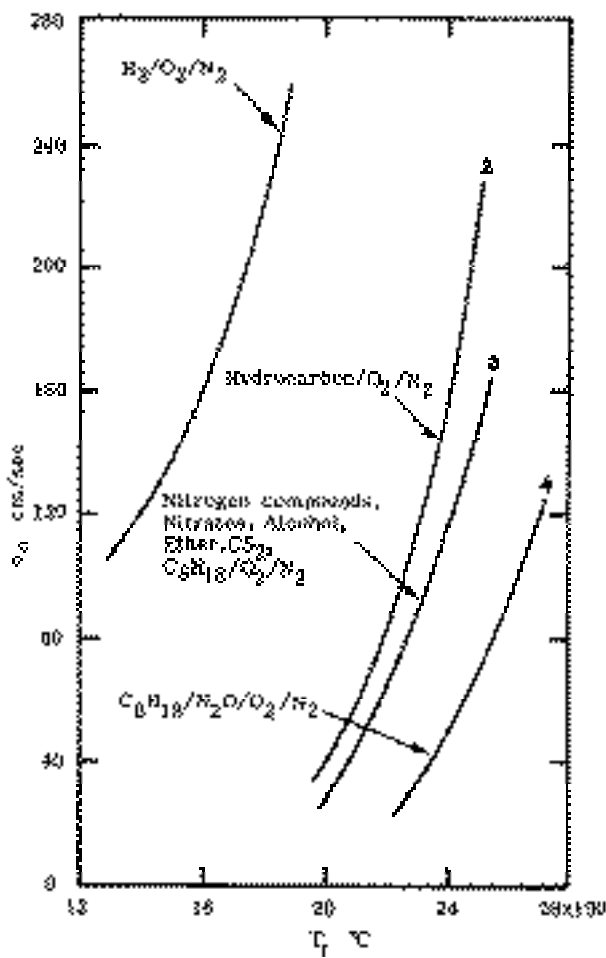


Fig. 3.8 Andamento della velocità di combustione con la temperatura adiabatica. (Introduction to Combustion Phenomena, A.M. Kanury, Gordon and Breach Science Publ., N.Y., 1975).

c) - influenza del rapporto aria/combustibile:

- la dipendenza dalla temperatura adiabatica di fiamma chiarisce anche la dipendenza qualitativa della velocità di fiamma dal rapporto aria/combustibile. Infatti in corrispondenza del rapporto stechiometrico la temperatura adiabatica di fiamma sarà massima, per cui in corrispondenza di tale rapporto si realizzerà la velocità massima

In figura 3.9 sono riportate le velocità di fiamma  $u_0$  in funzione della percentuale di combustibile nella miscela per diversi combustibili. E' immediato osservare la configurazione a campana delle curve. Sebbene non esplicitamente riportati, i valori sulle ascisse in corrispondenza dei massimi sono i valori del rapporto stechiometrico.

Nella figura 3.9 é anche interessante per notare che le curve sono spezzate in corrispondenza di due valori della percentuale per cui le fiamme non si propagano affatto. Questi valori limiti definiscono un campo di "infiammabilità" della miscela all'esterno dei quali non c'è propagazione di fiamma. Una seconda notazione riguarda i valori delle velocità che sono state misurate. Le velocità dei massimi nel diagramma superiore sono approssimativamente uguali, fatta eccezione per l'etilene, e sono racchiuse in un intervallo di 30-50 cm/sec.

Questa indifferenza delle velocità massime, indica che il meccanismo di propagazione e le velocità di reazione in gioco sono simili per tutte le miscele di composti organici ed aria (in condizioni stechiometriche).

Nel diagramma di figura 3.10 questa dipendenza dal tipo di combustibile é esplicitata per tre categorie (paraffine, olefine ed acetilenici). La velocità di combustione  $u_0$  normalizzata rispetto alla velocità di combustione del propano é diagrammata contro il numero di atomi di carbonio presenti nella molecola.

E' evidente che per alti valori di  $n_c$  (maggiori di 4) la velocità di fiamma raggiunge un asintoto che per le paraffine e le olefine é circa quello corrispondente alla velocità di propagazione del propano (cioé approssimativamente circa 40 cm/sec).

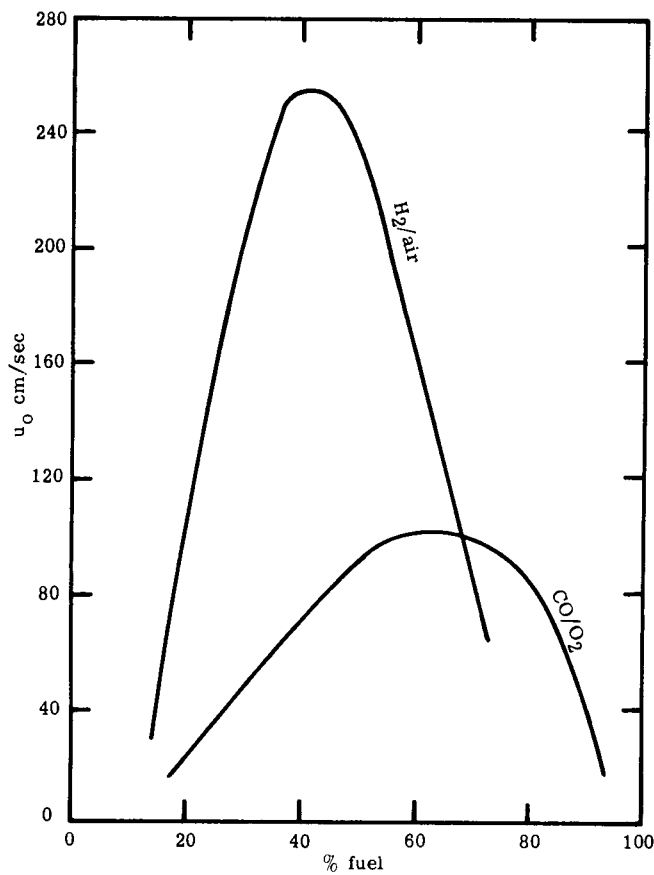
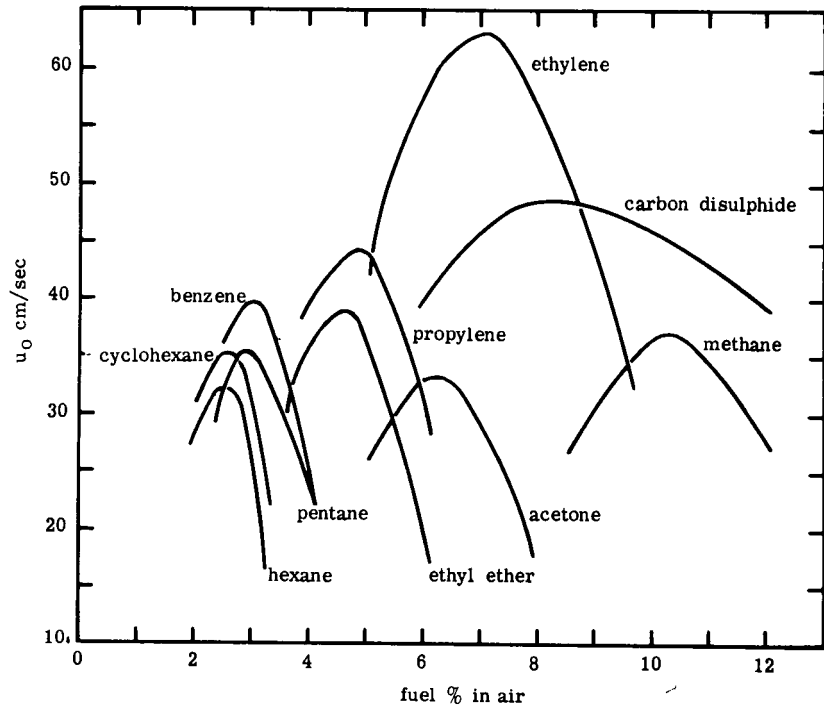


Fig. 3.9 Velocità di combustione contro il rapporto aria combustibile. (Introduction to Combustion Phenomena, A.M. Kanury, Gordon and Breach Science Publ., N.Y., 1975).

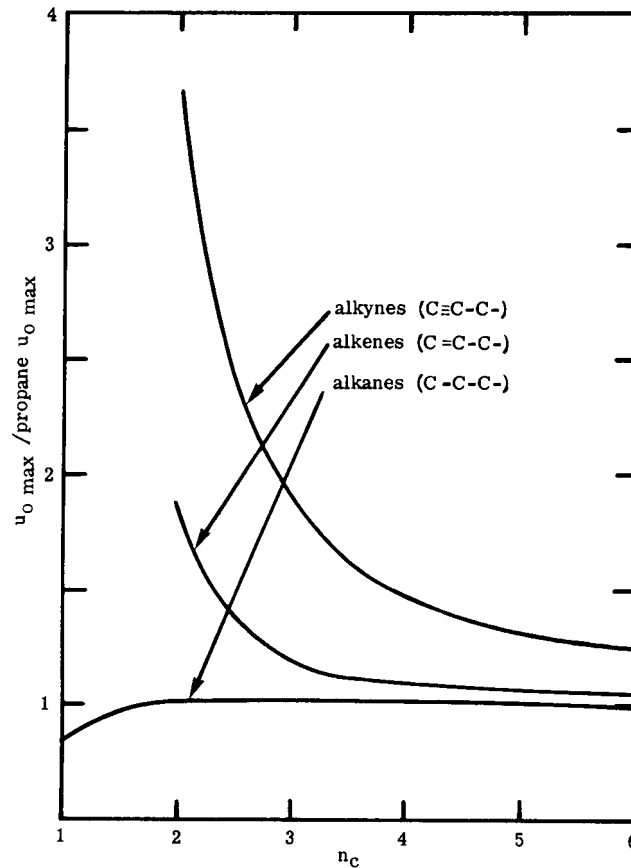


Fig. 3.10 Massima velocità di combustione come funzione del numero di atomi di carbonio nella molecola del combustibile. (Introduction to Combustion Phenomena, A.M. Kanury, Gordon and Breach Science Publ., N.Y., 1975).

d) dipendenza dalla pressione ambiente

- La diffusività ha una dipendenza dalla pressione come quella della densità

$$D \propto \frac{1}{p} \quad (3.46)$$

- la velocità di reazione media  $\bar{v}$  dipende dalla pressione con una legge del tipo  $p^{n-1}$  (come osservato in precedenza), pertanto la  $u_o$  o la  $v_F$  dipendono dalla pressione come

$$u_o \quad v_F \propto \sqrt{p^{n-1}} = p^{\frac{n-2}{2}} \quad (3.47)$$

Si osserva sperimentalmente che  $u_o$  non dipende dalla pressione per molti combustibili per cui si può ipotizzare che l'ordine complessivo della reazione é circa 2.

**Riferimenti e note**

A.M. Kanury *Introduction to Combustion Phenomena*, , Gordon and Breach Science Publ., N.Y., 1975

Zel'dovich Y.B. et al *The mathematical Theory of Combustion and Explosion*, Consultants Bureau, N.Y. 1985

**Testi consigliati**

Barnard e Griffith: *Flame and Combustion*, 3a ed. Blackie Academic and Professional, London, 1995.

Bookmaster J.D. e Ludford G.S.S.; *Theory of Laminar Flames*, Cambridge University Press, Cambridge, 1982

Glassman I.: *Combustion*, Academic Press N.Y. 1977

A.M. Kanury *Introduction to Combustion Phenomena*, , Gordon and Breach Science Publ., N.Y., 1975