

# POLITECNICO DI MILANO

Facoltà di Ingegneria Industriale e dell'Informazione  
Dipartimento di Energia

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica



## **Sviluppo di un modello CFD per la simulazione di espansori volumetrici di cicli ORC per il recupero termico dai gas di scarico di motori a combustione interna**

Relatore: Prof. Gianluca MONTENEGRO

Co-Relatore: Ing. Augusto DELLA TORRE

Tesi di Laurea di:

Dalia BROGGI Matr. 787279

Anno Accademico 2013-2014

# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>1 Ciclo ORC</b>	<b>5</b>
1.1 Descrizione del ciclo termodinamico e dei componenti . . . . .	5
1.2 Applicazioni . . . . .	7
1.3 Fluido di lavoro . . . . .	9
1.4 Tipologie di espansori . . . . .	13
1.4.1 Turbina . . . . .	15
1.4.2 Espansore di tipo <i>screw</i> . . . . .	16
1.4.3 Espansore di tipo <i>scroll</i> . . . . .	17
1.4.4 Espansore a palette scorrevoli . . . . .	17
1.4.5 Scelta dell'espansore piú adeguato . . . . .	18
<b>2 Equazioni della fluidodinamica</b>	<b>20</b>
2.1 Equazioni di conservazione . . . . .	20
2.2 Metodo dei volumi finiti . . . . .	23
2.2.1 Discretizzazione del dominio . . . . .	24
2.2.2 Discretizzazione delle equazioni . . . . .	25
<b>3 Modelli Termodinamici di Gas Reale</b>	<b>31</b>
3.1 Calcolo della densità . . . . .	31
3.2 Calcolo dell'entalpia . . . . .	36
3.3 Calcolo della viscosità . . . . .	44
<b>4 Implementazione dei Modelli</b>	<b>53</b>
4.1 Il software OpenFOAM . . . . .	53
4.2 Calcolo della densità nella libreria . . . . .	56
4.3 Calcolo dell'entalpia nella libreria . . . . .	58
4.4 Calcolo della viscosità nella libreria . . . . .	60
<b>5 Applicazione al caso di un espansore reale</b>	<b>62</b>
5.1 Espansore a palette scorrevoli a doppio effetto . . . . .	62
5.2 Generazione della mesh . . . . .	64
5.3 Conservazione della massa . . . . .	67

---

5.4	Modello di trafilamento . . . . .	68
5.5	Condizioni operative . . . . .	71
<b>6</b>	<b>Descrizione delle prove e analisi dei risultati</b>	<b>73</b>
6.1	Prove sul solo corpo macchina . . . . .	75
6.1.1	Confronto tra i modelli di trafilamento . . . . .	78
6.1.2	Confronto tra i modelli termodinamici . . . . .	87
6.1.3	Confronto tra le varie condizioni operative . . . . .	95
6.1.4	Effetto della turbolenza . . . . .	100
6.2	Flussaggio . . . . .	102
6.2.1	Condotto di ammissione . . . . .	103
6.2.2	Condotto di scarico . . . . .	112
6.3	Macchina completa . . . . .	117
6.3.1	Sistema macchina-condotti . . . . .	119
6.3.2	Macchina singola . . . . .	125
	<b>Conclusioni</b>	<b>129</b>
	<b>A</b>	<b>131</b>
A.1	Implementazione del calcolo della densità . . . . .	131
A.2	Implementazione del calcolo dell'entalpia . . . . .	136
A.3	Implementazione del calcolo della viscosità . . . . .	137
	<b>Lista dei simboli</b>	<b>143</b>



## Elenco delle figure

1.1	Diagramma T-s . . . . .	6
1.2	Componenti del ciclo termodinamico . . . . .	7
1.3	Sorgenti di calore del ciclo ORC . . . . .	8
1.4	Curve di saturazione dei vari fluidi di lavoro . . . . .	10
1.5	Curva di saturazione dell' R245fa . . . . .	12
1.6	Potenze di vari tipi di espansori al variare del numero di giri . . . . .	14
1.7	Turboespansore per ciclo ORC . . . . .	15
1.8	Espansore a vite . . . . .	16
1.9	Espansore a spirale . . . . .	17
1.10	Espansore a palette scorrevoli . . . . .	18
2.1	Condizioni per la convergenza . . . . .	23
2.2	Volume di controllo . . . . .	24
2.3	Modello upwind . . . . .	26
2.4	Termine diffusivo in caso di non ortogonalità . . . . .	28
3.1	Funzione Peng-Robinson . . . . .	33
3.2	Plot delle soluzioni . . . . .	36
3.3	Coefficienti dei vari fluidi per l'equazione del calore specifico ideale . . . . .	40
3.4	Coefficienti dei vari fluidi per l'equazione dell'energia di Helmonz ideale adimensionale e del calore specifico ideale . . . . .	41
3.5	Coefficienti per la parte reale dell'equazione di stato per fluidi polari . . . . .	42
3.6	Distribuzione dei dati sperimentali per l'R134a utilizzati per lo sviluppo della correlazione . . . . .	49
4.1	OpenFoam . . . . .	53
4.2	Confronto tra i valori dell'entalpia sensibile calcolato con vari modelli . . . . .	59
4.3	Confronto tra i valori del calore specifico a pressione costante calcolato con vari modelli . . . . .	60

4.4	Calcolo della viscosità . . . . .	61
5.1	Espansore magnaSteyr . . . . .	63
5.2	Gestione del movimento della mesh . . . . .	64
5.3	Passaggi per ottenere la mesh definitiva a partire dalla mesh di base . . . . .	65
5.4	Bilancio in direzione radiale delle forze sulla pala . . . . .	66
5.5	Variazione angolare del trafilamento . . . . .	69
5.6	Celle a cui viene applicato il modello di resistività . . . . .	72
6.1	Tabella della densità al variare della temperatura per varie pressioni . . . . .	74
6.2	Tabella dell' entalpia al variare della temperatura per varie pressioni . . . . .	74
6.3	Espansore volumetrico rotativo utilizzato nelle simulazioni . . . . .	75
6.4	Campo di pressione in forma adimensionale . . . . .	76
6.5	Campo di temperatura in forma adimensionale . . . . .	76
6.6	Campo di velocità . . . . .	77
6.7	Fattore di comprimibilità . . . . .	77
6.8	Pressioni in ingresso risultanti dalla campagna di simulazioni per le varie condizioni operative al variare del valore del coefficiente di Forchheimer . . . . .	80
6.9	Confronto tra la potenza ottenuta dalle simulazioni e quella misurata sperimentalmente tenendo conto delle perdite meccaniche per le varie condizioni operative . . . . .	81
6.10	Confronto tra la potenza ottenuta dalle simulazioni con modello di trafilamento a uno e tre coefficienti e quella misurata sperimentalmente tenendo conto delle perdite meccaniche per le varie condizioni operative . . . . .	82
6.11	Schematizzazione delle zone di trafilamento nel caso di modello On-Off . . . . .	84
6.12	Andamento della velocità attraverso le zone di trafilamento appartenenti al tip della pala nel caso in cui si utilizzi il modello On-Off . . . . .	85
6.13	Andamento della velocità attraverso le zone di trafilamento laterali nel caso in cui si utilizzi il modello On-Off . . . . .	85
6.14	Potenza: confronto tra modello di gas ideale e gas reale con calcolo delle proprietà effettuato con interpolazione e con i modelli descritti nel capitolo 4 . . . . .	90
6.15	Pressione: confronto tra modello di gas ideale e gas reale con calcolo delle proprietà effettuato con interpolazione e con i modelli descritti nel capitolo 4 . . . . .	90

6.16	Temperatura: confronto tra modello di gas ideale e gas reale con calcolo delle proprietà effettuato con interpolazione e con i modelli descritti nel capitolo 4 . . . . .	91
6.17	Trafilamento: confronto tra modello di gas ideale e gas reale con calcolo delle proprietà effettuato con interpolazione e con i modelli descritti nel capitolo 4 . . . . .	91
6.18	Errore commesso utilizzando un modello di gas ideale al posto di un modello di gas reale . . . . .	92
6.19	Potenza: confronto tra modello di gas reale con calcolo della viscosità effettuato con Sutherland e con il modello descritto nel capitolo 4 . . . . .	93
6.20	Pressione: confronto tra modello di gas reale con calcolo della viscosità effettuato con Sutherland e con il modello descritto nel capitolo 4 . . . . .	94
6.21	Temperatura: confronto tra modello di gas reale con calcolo della viscosità effettuato con Sutherland e con il modello descritto nel capitolo 4 . . . . .	94
6.22	Trafilamento: confronto tra modello di gas reale con calcolo della viscosità effettuato con Sutherland e con il modello descritto nel capitolo 4: Leakage . . . . .	95
6.23	Potenza ottenuta adimensionalizzata per le sei condizioni operative considerate . . . . .	97
6.24	Pressione di ingresso adimensionalizzato per le sei condizioni operative considerate . . . . .	97
6.25	Temperatura di uscita adimensionalizzata nelle sei condizioni operative . . . . .	98
6.26	Trafilamento nelle sei condizioni operative . . . . .	98
6.27	Diagramma pressione volume per le OC0 e la OC3 . . . . .	99
6.28	Condotto di ammissione: mesh . . . . .	103
6.29	Condotto di ammissione: pressione adimensionalizzata nel caso senza turbolenza . . . . .	105
6.30	Condotto di ammissione: temperatura adimensionalizzata nel caso senza turbolenza . . . . .	106
6.31	Condotto di ammissione: Linee di flusso della velocità nel caso senza turbolenza . . . . .	106
6.32	Condotto di ammissione: pressione adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellata con un k-Epsilon . . .	107
6.33	Condotto di ammissione: temperatura adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellata con un k-Epsilon	107
6.34	Condotto di ammissione: Linee di flusso della velocità nel caso in cui la turbolenza venga modellata con un k-Epsilon . . .	108

6.35	Condotto di ammissione: Linee di flusso della viscosità turbolenta nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Epsilon . . . . .	108
6.36	Condotto di ammissione: pressione adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega . . .	109
6.37	Condotto di ammissione: temperatura adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega . . .	109
6.38	Condotto di ammissione: Linee di flusso della velocità nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega . . .	110
6.39	Condotto di ammissione: Linee di flusso della viscosità turbolenta nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega . . . . .	110
6.40	Tubo di inlet: Profilo di velocità all'interno del tubo nel caso laminare e turbolento con modellizzazione k-Epsilon e k-Omega	111
6.41	Condotto di scarico: mesh . . . . .	113
6.42	Condotto di scarico: pressione adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega . . . . .	113
6.43	Condotto di scarico: temperatura adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega . . . . .	114
6.44	Condotto di scarico: linee di flusso della velocità nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega . . . . .	114
6.45	Condotto di scarico: linee di flusso della viscosità turbolenta nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega	115
6.46	Espansione nel diagramma T-s considerando la caduta di pressione o meno . . . . .	116
6.47	Rendimento isoentropico della macchina considerando la caduta di pressione o meno . . . . .	117
6.48	Andamento della velocità nelle sezioni di ingresso e uscita della macchina . . . . .	118
6.49	Mesh del sistema costituito da espansore volumetrico e condotti	119
6.50	Campo di velocità nel sistema espansore-condotti . . . . .	121
6.51	Campo di pressione adimensionalizzata nel sistema espansore-condotti . . . . .	121
6.52	Campo di temperatura adimensionalizzata nel sistema espansore-condotti . . . . .	122
6.53	Confronto tra l'andamento della pressione sulla sezione di ingresso del condotto e sulle due sezioni di ingresso dell'espansore	123
6.54	Confronto tra l'andamento della pressione sulla sezione di ingresso del condotto e sulle due sezioni di ingresso dell'espansore	124
6.55	Potenza calcolata per il sistema espansore-condotti . . . . .	125
6.56	Pressione calcolata su un ciclo per il solo espansore volumetrico	126



6.57	Potenza calcolata su un ciclo per il il solo espansore volumetrico	127
A.1	Classe specie e sue derivate . . . . .	132
A.2	Classe specie e sue derivate . . . . .	137
A.3	Classe specie e sue derivate . . . . .	138



## Elenco delle tabelle

1.1	Confronto tra fluidi di lavoro del ciclo Rankine e del ciclo ORC	11
3.1	Calcolo di densità e fattore di comprimibilità con l'equazione di Peng-Robinson	34
3.2	Calcolo di densità e fattore di comprimibilità con l'equazione RKS	34
3.3	Calcolo di densità e fattore di comprimibilità con l'equazione di gas perfetto	34
3.4	Tabella dei dati NIST	35
3.5	Proprietà del fluido fornite dal database NIST	35
3.6	Incertezze ottenute con le equazioni tecniche di Span e Wagner	38
3.7	Parametri per calcolare il secondo coefficiente viriale	51
3.8	Parametri per calcolare il termine ad con dipendenza di ordine superiore	52
5.1	Metodi per settare il coefficiente di trafileamento	68
5.2	Condizioni operative	71
6.1	Parametri per calcolare la parte ideale dell'energia di Helmonz per l'R245fa, da sostituire nel termine sommatoria della formulazione	88
6.2	Parametri per calcolare la parte ideale dell'energia di Helmonz per l'R245fa	88
6.3	Parametri per calcolare la parte reale dell'energia di Helmonz per l'R245fa	89
6.4	Parametri per calcolare $\rho_{0,v}$	93
6.5	Parametri per calcolare $\ln\theta_{\mu}^*$	93
6.6	Flusso di massa adimensionalizzato nelle varie condizioni operative	96
6.7	Pressione di uscita adimensionalizzata nelle varie condizioni operative	96

6.8	Temperatura in ingresso adimensionalizzata nelle varie condizioni operative . . . . .	96
6.9	Giri al minuto [ <i>rpm</i> ] nelle varie condizioni operative . . . . .	96
6.10	Caduta di pressione tra la sezione di ingresso e le sezioni di uscita del condotto di ammissione, coincidenti con le sezioni di entrata della macchina . . . . .	112
6.11	Caduta di pressione tra le sezioni di uscita e la sezione di uscita del condotto di scarico, coincidenti con le sezioni di uscita della macchina . . . . .	115

# Sommario

Questo lavoro di tesi si propone di implementare dei modelli termodinamici nel software OpenFOAM per tenere conto dell'effetto di gas reale nel calcolo delle grandezze di interesse. In seguito si sono applicati tali modelli per simulare, tramite l'utilizzo della CFD, un espansore volumetrico utilizzato in un ciclo ORC per il recupero termico di calore di scarto.

Per gestire il movimento della griglia di calcolo sono state create delle applicazioni ad hoc nel software. Il modello utilizza una tecnica di deformazione della mesh a cui segue un'interpolazione da mesh a mesh, passando da una griglia di calcolo all'altra sulla base di criteri che tengono conto della qualità della mesh deformata.

Questo approccio permette inoltre di tenere in considerazione la presenza di trafileamento tra la pala rotorica e lo statore implementando degli opportuni modelli basati sull'approccio di mezzo poroso di Darcy-Forchheimer, che controllano il flusso di massa attraverso tale zona. Questa analisi ha inoltre permesso di studiare l'influenza del trafileamento sulle prestazioni globali della macchina, come ad esempio la potenza e la coppia in uscita.

Per quanto riguarda il fluido di lavoro (R245fa) si tiene conto del fatto che le sue proprietà termodinamiche sono fortemente soggette agli effetti di fluido reale e se ne propone il calcolo sia con i metodi analitici implementati che interpolando i valori forniti dal database NIST.

Infine si è considerato l'effetto dell'instazionarietà delle condizioni al contorno sulle prestazioni della macchina simulando un sistema costituito dalla macchina comprensiva di condotti di ammissione e scarico.

I risultati ottenuti sono stati confrontati con i dati sperimentali per sei condizioni operative che differiscono per velocità di rotazione, flusso di massa, salto di pressione e temperatura del fluido.

**Parole chiave:** *OpenFoam, ORC, gas reale, leakage, espansore volumetrico*

This MSc thesis focuses on the implementation of thermodynamic models in the software OpenFOAM in order to take account of the real gas effect when the interested quantities are computed. Furthermore these models have been applied to CFD simulation of a sliding vane volumetric expander used in a ORC cycle for waste heat recovery.

In order to handle the particular motion of the calculation grid, a customized application of the software has been developed. The model uses a mesh deformation technique followed by a mesh to mesh interpolation, switching from the calculation grid to the new one on the basis of considerations on the deformed mesh quality.

This particular approach allows to account for the presence of leakages occurring between the stator and the blade, implementing appropriate models based on the Darcy-Forchheimer porous media approach. These models permit to control the mass flow through the gap. Moreover, the analysis has allowed the estimation of the influence of the leakage mass flow on overall machine performances, such as the output power and torque.

For what concerns the working fluid (R245fa) it has to be taken into account that its thermodynamic properties are strongly dependent on real gas effects, so it has been proposed the calculation of such properties via the implemented analytical methods and via interpolation methods of values from NIST database.

Finally it has been considered the effect of the unsteadiness of the boundary conditions on the machine performances, simulating a system which comprises the expander and the admission and escape pipe.

The computed results have been compared with experimental data for six different operating conditions of rotating speed, mass flow, pressure drop and fluid temperature.

***Key words:*** *OpenFoam, ORC, real gas, leakage, volumetric expander*

# Introduzione

Negli ultimi anni, a causa di fattori ambientali quali l'aumento delle emissioni di sostanze inquinanti e di fattori economici come l'aumento del costo del combustibile, il mondo dell'industria e i governi hanno incrementato la ricerca nel campo delle fonti di energia alternative e rinnovabili, soprattutto a livello di piccole e medie potenze (0.1 - 100 kW).

Tra queste risorse compaiono le biomasse liquide e solide, l'energia solare, l'energia geotermica e il calore dei fumi di scarto. Quest'ultimo è calore a bassa temperatura che può essere proveniente da processi industriali (cementifici, centrali nucleari, forni), motori a combustione interna e turbine a gas. Nel campo dell'industria automobilistica i limiti legislativi riguardanti l'emissione di  $CO_2$  diventano sempre più restrittivi (nel 2020 sarà ammesso un massimo di 95 g/km) e risulta quindi sempre più importante aumentare l'efficienza globale dei motori a combustione interna (ICE).

I motori a combustione interna tipicamente riescono a convertire in potenza solamente un terzo dell'energia fornita dal combustibile [1]; i restanti due terzi di energia termica vengono dissipati passando attraverso una serie di scambiatori di calore o addirittura vengono espulsi direttamente dal tubo di scarico come calore dei gas combusti.

Questo calore di scarto, caratterizzato dall'essere a differenti temperature e contenuti energetici, può essere utilizzato come sorgente per scaldare il fluido di lavoro di un Ciclo Rankine Organico (ORC).

Per sfruttare questo tipo di risorse in applicazioni con basse e medie potenze utilizzare un ciclo a vapore tradizionale risulta essere svantaggioso sia dal punto di vista economico che di rendimento, per cui la ricerca si è focalizzata su alternative più efficienti come gli ORC. Questi ultimi risultano essere una tecnologia ben nota e consolidata per convertire calore a bassa temperatura in potenza. A causa del loro costo e della loro complessità, attualmente i cicli ORC vengono utilizzati principalmente in applicazioni stazionarie come ad esempio i cicli cogenerativi o nell'industria dei trasporti di grande scala come le navi container.

Si può allora pensare di utilizzare un ciclo ORC per aumentare l'efficienza globale di un motore a combustione interna utilizzando il calore di scarto

del processo di combustione che viene fornito attraverso i gas combusti e il refrigerante.

Utilizzando un ciclo ORC a valle di un MCI, questo può soffrire di instabilità dovuta alle diverse condizioni di lavoro del motore (alti o bassi carichi) e usare una turbomacchina in questo caso provocherebbe una notevole perdita di efficienza dovuta sia alle dimensioni limitate del dispositivo sia alle condizioni termodinamiche variabili del fluido di lavoro. Di conseguenza in questo tipo di cicli si utilizzano degli espansori volumetrici che sono caratterizzati da buona efficienza, piccole vibrazioni, basso impatto acustico e da una struttura semplice e affidabile.

Dal punto di vista del fluido di lavoro il ciclo Rankine organico si distingue dal convenzionale ciclo a vapore poiché utilizza dei fluidi organici, in particolare gli idrofluorocarburi. Tali fluidi hanno la caratteristica di avere un elevato peso molecolare e una bassa temperatura di saturazione, il che da un lato limita l'energia estraibile ma dall'altro permette di sfruttare sorgenti di calore a bassa temperatura. Inoltre la curva di vapore saturo di questi fluidi nel diagramma T-s risulta avere pendenza positiva, permettendo di effettuare un'espansione senza cadere in un campo bifase con vantaggi dal punto di vista della progettazione e della manutenzione dell'impianto. I fluidi refrigeranti hanno anche buone caratteristiche anche dal punto dell'affidabilità: si ha un buon potere lubrificante e stabilità alle temperature di utilizzo tipiche dei cicli ORC.

Nel lavoro proposto è stato considerato il penta-fluoro-propano (R245fa), le cui caratteristiche risultano essere adeguate alle pressioni e temperature operative, permettendo di ottenere una buona efficienza. Inoltre l'R245fa non è soggetto a restrizioni riguardanti l'effetto serra in quanto non danneggia lo strato di ozono dell'atmosfera.

Una delle problematiche dei cicli ORC che utilizzano questi fluidi è dovuta al fatto che l'espansione inizia in condizioni vicine al punto critico. In tale zona le interazioni intermolecolari delle particelle e il loro volume non sono più trascurabili, rendendo inadatto l'utilizzo di relazioni costitutive basate sull'ipotesi di gas perfetto. L'effetto di gas reale va ad influire sul valore assunto dalle grandezze termodinamiche e di trasporto del fluido.

Per tenere conto di questo effetto è possibile utilizzare due approcci:

- utilizzare il metodo lookup table con il quale le grandezze fisiche di interesse vengono lette da tabelle in funzione di pressione e temperatura;
- utilizzare dei modelli analitici che considerano la realtà del gas.

La prima parte di questo lavoro di tesi si propone dunque di implementare nel codice OpenFoam dei modelli termodinamici e di trasporto che permettano di considerare un fluido reale.



In particolare si è andati a sviluppare:

- due leggi costitutive che permettono di calcolare la densità del fluido (Peng-Robinson e RKS);
- una legge che permetta, attraverso il calcolo dell'energia libera di Helmonz e delle sue derivate, di calcolare il calore specifico a pressione costante;
- un modello che permette di calcolare la viscosità del fluido basandosi sull'approccio degli stati corrispondenti, che esprime la viscosità ridotta in modo che questa avrà valori simili per fluidi differenti alle stesse condizioni ridotte. A tale valore calcolato verrà poi applicata una correzione per considerare il fatto che all'aumentare della densità le interazioni intermolecolari del fluido diventano importanti ed è quindi necessaria una correzione.

In seguito tali modelli sono stati applicati a un espansore volumetrico e si è effettuata un'analisi CFD su tale macchina utilizzando il fluido organico R245fa.

Per andare a simulare l'espansore è stato necessario porre particolare attenzione alla generazione della mesh e alla strategia di movimento di quest'ultima dal momento che le piccole dimensioni della macchina e della distanza tra rotore e statore risultano essere difficili da modellare durante la rotazione delle pale rotoriche. Si è posta quindi particolare attenzione allo spazio presente tra le pale e lo statore e se ne è studiato l'impatto sulle prestazioni della macchina.

Tramite una versione customizzata del codice OpenFoam si è andati a realizzare una simulazione dell'espansione e si è andati a confrontare le grandezze di output della macchina con i dati sperimentali forniti in sei differenti condizioni operative. Utilizzando questo approccio si è considerata solamente la macchina singola in una situazione stazionaria. Non sono quindi state considerate le cadute di pressione causate dal passaggio del flusso attraverso i condotti di ammissione e scarico, né l'instazionarietà del flusso.

Per tener conto di tali cadute di pressione si sono dunque svolte delle prove stazionarie sui condotti di ammissione e scarico per le sei condizioni operative.

Infine per considerare anche gli aspetti dinamici del processo dovuti all'inerzia del fluido e agli effetti d'onda si sono aggiunti al modello CFD anche i condotti di ammissione e scarico e si sono confrontati le grandezze ottenute, in termini di potenza ottenuta e contropressione all'ingresso, con quelle risultanti dalla prova sulla singola macchina, a parità di tutte le condizioni.

Il lavoro di tesi è dunque così articolato:

- Capitolo 1: Si analizza il ciclo ORC sia sotto un'ottica termodinamica che di componentistica e si descrivono i fluidi di lavoro tipici di tali cicli e le loro caratteristiche. Inoltre viene fatta una panoramica delle possibili tipologie di macchine volumetriche utilizzabili per l'espansione.
- Capitolo 2: Si presentano le equazioni che governano i fenomeni fluidodinamici e la loro discretizzazione al fine di poter risolvere il problema computazionalmente.
- Capitolo 3: Si descrivono i modelli termodinamici di gas reale che sono stati implementati per il calcolo della densità, del calore specifico, dell'entalpia e della viscosità.
- Capitolo 4: Viene trattata l'implementazione di tali modelli all'interno del software OpenFoam, creando delle apposite classi all'interno delle quali sono definiti gli oggetti e le funzioni necessari al calcolo.
- Capitolo 5: Si analizza la macchina oggetto dello studio, la sua modellizzazione all'interno del codice e le problematiche ad essa connesse. Particolare attenzione viene rivolta alla modellizzazione del leakage tra la pala rotorica e lo statore.
- Capitolo 6: Vengono descritte le prove effettuate sulla singola macchina, sui condotti di ammissione e scarico e sul sistema completo.

# Capitolo 1

## Ciclo ORC

In questo capitolo verrà presentata una breve descrizione del ciclo ORC (Organic Rankine Cycle). In particolare ci si concentrerà sullo studio del ciclo termodinamico, sul fluido di lavoro, sulla componentistica necessaria per attuare il ciclo, sulle applicazioni tipiche e sulle potenze che si è in grado di ottenere. Particolare attenzione viene rivolta allo studio degli espansori volumetrici tipicamente utilizzati in queste applicazioni.

### 1.1 Descrizione del ciclo termodinamico e dei componenti

Un Organic Rankine Cycle, detto anche ciclo ORC, é sostanzialmente analogo a un ciclo Rankine tradizionale nel quale viene utilizzato un fluido organico come fluido di lavoro, in sostituzione all' acqua. Il ciclo si compone quindi di quattro fasi che, nell'ipotesi di ciclo termodinamico ideale , possono essere descritte come:

- Compressione isoentropica;
- Riscaldamento isobaro;
- Espansione isoentropica;
- Raffreddamento isoentropico.

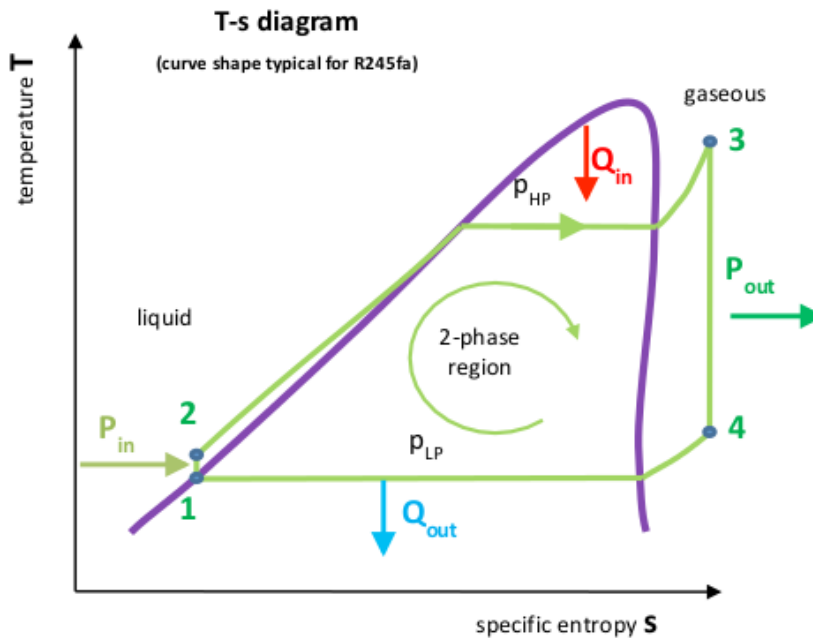


Figura 1.1: Diagramma T-s

Nella realtà il ciclo differisce da quello ideale a causa di vari fenomeni di dissipazione quali le cadute di pressione, sotto e sovra-espansione, attrito, trafiletti interni, scambio di calore tra i componenti e l'ambiente. Tutto questo comporta una riduzione della potenza ottenibile dal ciclo, a cui poi dovrà poi essere sottratta la potenza persa a causa degli attriti tra i vari componenti e delle forze di inerzia. Il ciclo termodinamico reale é realizzato per mezzo di quattro componenti [2]:

- Viene fornita potenza meccanica  $P_{in}$  a una pompa che permette di comprimere il fluido di lavoro che si trova allo stato liquido, aumentando la sua pressione.
- Il fluido pressurizzato viene trasferito in un evaporatore dove avviene lo scambio di calore che permette al fluido di passare dalla fase liquida alla fase gassosa. La sorgente di calore, la quale permette il riscaldamento del fluido, può essere di vario tipo; nel caso specifico sarà data dall'energia di scarto dei gas combusti di un MCI (Motore a Combustione Interna). In ogni caso lo scambio di calore non avviene direttamente perché, a causa dell'instabilità chimica del fluido organico ad

alte temperature e pressioni si avrebbe il surriscaldamento locale del fluido organico. Inoltre per questo motivo la temperatura massima del fluido di lavoro in un ciclo ORC é di 600 K.

- Il fluido che si trova ad alte pressioni e temperature viene trasferito in un espansore. Quest' ultimo é l'oggetto di studio del lavoro di tesi. Questa fase é l'unica in cui si ha produzione di potenza  $P_{out}$ .
- Dopo l'espansione il fluido si trova ancora nello stato di vapore (grazie alle proprietà particolari dei fluidi organici) e viene trasferito in un condensatore che estrae calore  $Q_{out}$  e lo trasferisce al refrigerante provocando il passaggio di fase da vapore a liquido.

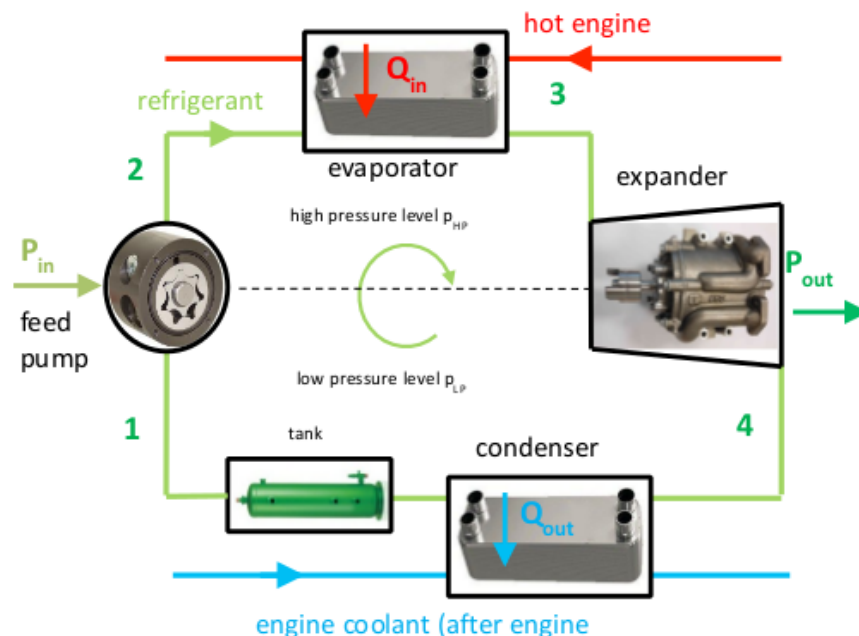


Figura 1.2: Componenti del ciclo termodinamico

## 1.2 Applicazioni

Grazie all'utilizzo di un fluido organico all'interno del ciclo ORC si ha la possibilità di sfruttare sorgenti di calore a bassa temperatura (cosa invece impossibile in un tradizionale ciclo Rankine a causa delle proprietà termodinamiche dell'acqua). Per questo motivo il ciclo ORC trova applicazione

nel campo cogenerativo delle medie e basse potenze, laddove sono disponibili fonti di calore di facile reperibilità e utilizzo. In particolare i campi di maggior diffusione sono:

- Biomassa liquida (oli vegetali di colza, soia, girasole, mais, arachidi, olio di palma): in queste applicazioni si ha generazione di energia tramite combustione di biomassa liquida in motori endotermici. Il calore dei fumi di scarico può essere valorizzato tramite un ciclo ORC posto allo scarico dei motori.
- Biomassa solida (legno, cippato, trucioli, corteccia, sansa, lolla, nocciolino): in questo caso l'alimentazione del ciclo ORC viene effettuata tramite una caldaia ad acqua surriscaldata.
- Fumi di scarto: si può sfruttare il calore dei fumi provenienti da processi industriali, motori alternativi e turbine a gas ponendo un ORC allo scarico [3] .
- Energia solare: è possibile trasformare l'energia termica raccolta dai collettori solari in energia elettrica. In questo caso il ciclo ORC viene alimentato con acqua surriscaldata a 150 °C.
- Energia geotermica: produce energia sfruttando il calore del sottosuolo che si trova ad una temperatura medio-bassa, generalmente compresa tra 110-200 ° C.

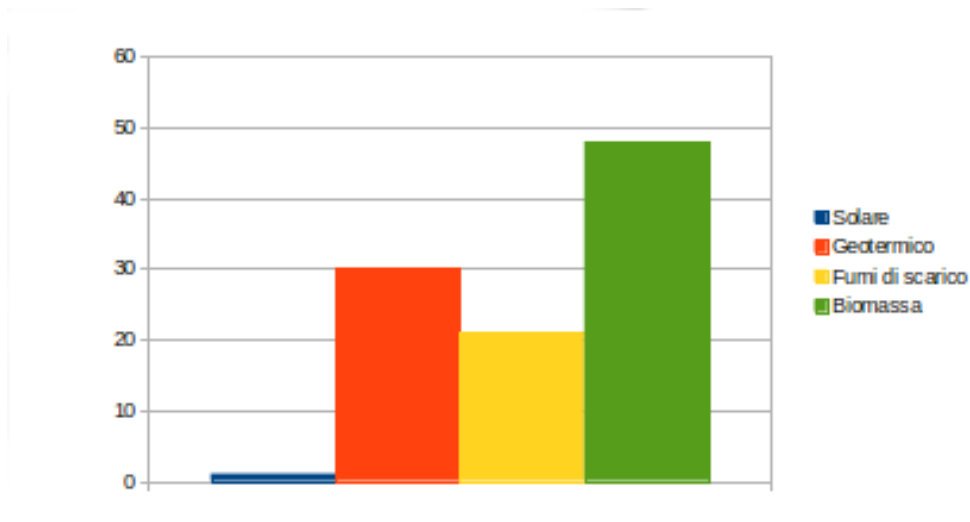


Figura 1.3: Sorgenti di calore del ciclo ORC

Come è possibile osservare dalla Figura 1.3, il recupero di energia dal calore di scarto costituisce buona parte delle applicazioni di un ciclo ORC e risulta quindi di particolare interesse conoscere nel dettaglio i processi coinvolti nel ciclo al fine di poterne migliorare l'efficienza. Per quanto riguarda le potenze in gioco il ciclo ORC trova applicazione nel campo delle basse e medie potenze, che si aggirano dunque tra 0.1 kW - 100 kW [4].

### 1.3 Fluido di lavoro

Affinché un fluido possa essere considerato adeguato ed essere utilizzato in un ciclo ORC ci sono una serie di caratteristiche che esso deve rispettare [5].

- basse temperature e pressioni critiche dato che si utilizza calore a basse temperature;
- bassi volumi specifici;
- buone proprietà di trasferimento del calore come bassa viscosità e tensione superficiale;
- alta conduttività termica;
- stabilità termica;
- deve essere non corrosivo, non tossico e compatibile con i materiali e i lubrificanti presenti;
- alto calore latente di vaporizzazione e basso calore specifico del liquido o una linea di saturazione quasi verticale in modo che la maggior parte del calore sia aggiunto durante la fase di transizione in modo da evitare l'aggiunta di un rigeneratore;
- pressioni di condensazione e di evaporazione accettabili, rispettivamente  $>1$  bar e  $<25$  bar;
- deve essere stabile chimicamente anche ad alte temperature;
- deve avere bassi costi ed essere affidabile;
- basso impatto ambientale;
- la curva di saturazione del vapore nel diagramma T-s deve avere pendenza positiva.

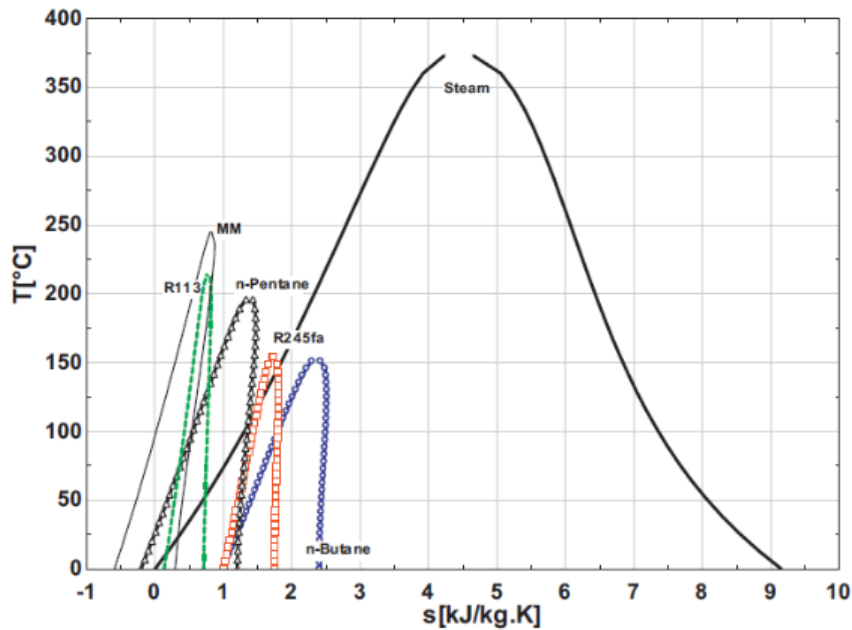


Figura 1.4: Curve di saturazione dei vari fluidi di lavoro

Come si può osservare dalla Figura 1.4 le curve dei fluidi organici hanno il punto critico molto più basso rispetto a quello dell'acqua e la zona di saturazione del vapore possiede pendenza positiva. Quest'ultimo aspetto risulta fondamentale in questa applicazione in quanto permette di effettuare l'espansione del fluido completamente in fase di vapore il che comporta dei vantaggi dal punto di vista dei componenti, che sono soggetti a un minore stress e quindi hanno una maggiore durata. In realtà nel caso di fluidi frigogeni la pendenza risulta praticamente nulla ma data l'irreversibilità del processo l'espansione risulta sempre essere confinata alla zona di vapore.



	Ciclo Rankine	Ciclo ORC
Fluido di lavoro	Acqua	Fluido organico
Pressione critica	Alta	Bassa
Temperatura critica	Alta	Bassa
Punto di ebollizione	Alto	Basso
Pressione di condensazione	Bassa	Accettabile
Calore specifico	Alto	Bassa
Viscosit�	Bassa	Relativamente bassa
Infiammabilit�	No	Si, dipende da fluido
Tossicit�	No	Si
Impatto ambientale	No	Alta dipende dal fluido
Disponibilit�	Disponibile	Problematico
Costo	Economico	Costoso

Tabella 1.1: Confronto tra fluidi di lavoro del ciclo Rankine e del ciclo ORC

Storicamente i primi fluidi utilizzati nei cicli ORC sono pentano, butano e toluene, i quali per  presentano problemi di infiammabilit .   inoltre possibile utilizzare i perfluorocarburi che posseggono parametri critici favorevoli ma sono molto costosi e durante la decomposizione rilasciano prodotti pericolosi. Vi sono poi gli idrofluorocarburi che sono i pi  adeguati ad applicazioni a bassa temperatura a causa della loro bassa temperatura critica, ma risultano problematici dal punto di vista dell'inquinamento. Infatti a causa dei sempre pi  stringenti requisiti ambientali, sono stati eliminati i fluidi CFC, i quali contribuiscono negativamente al riscaldamento globale andando a diminuire lo spessore di ozono. Di conseguenza negli ultimi anni   stato necessario individuare nuovi fluidi adeguati all'applicazione nei cicli ORC che per  rispettino anche le normative odierne riguardanti l'impatto ambientale. Usualmente vengono quindi utilizzati fluidi HFC come il 1,1,1,3,3 pentafluoropropano (detto R245fa) che possiede le caratteristiche sopra elencate e inoltre possiede un indice GWP(global warming potential) relativamente basso rispetto ad altri fluidi simili (950). Un'ulteriore propriet  di questo tipo di fluidi   l'alta massa molecolare, che nel caso dell R245fa   pari a 134.05 g/mol. Per questo motivo in queste applicazioni   importante fare particolare attenzione al campo supersonico dato che la velocit  del suono nel mezzo risulta bassa. Date le condizioni di lavoro tipiche di un ciclo ORC si avr  durante l'inizio della fase di espansione una zona in cui il fluido si trova ad alte pressioni vicino alla linea di vapor saturo. In questa condizione si ha una deviazione tra il comportamento reale e ideale del gas, il che   da attribuire al fatto che nel modello di gas ideale si trascura il volume molecolare e le forze intermolecolari.

Pertanto quando vengono utilizzati fluidi organici come l' R245fa, l'ipotesi di gas ideale è accettabile solo ad alte temperature e basse pressioni.

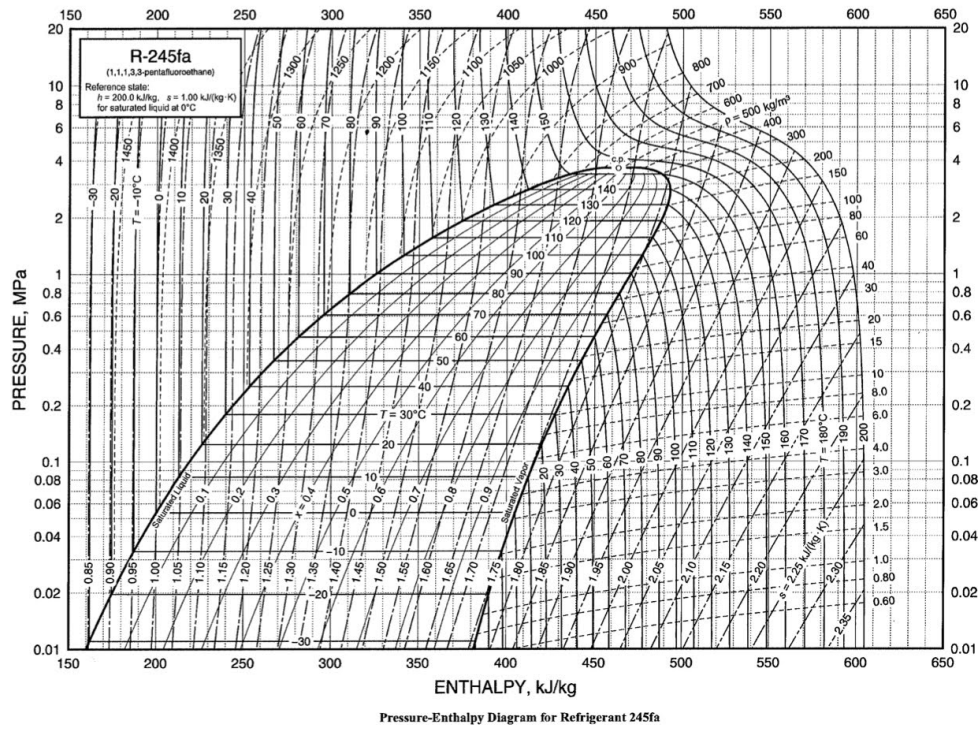


Figura 1.5: Curva di saturazione dell' R245fa

Infatti si definisce gas reale un gas il cui comportamento termodinamico si discosta da quello di gas ideale, ovvero che non segue l'equazione di stato dei gas perfetti, ovvero:

$$pv = RT$$

Un gas non può più essere considerato ideale per pressioni elevate e basse temperature, infatti in tali condizioni si hanno degli scostamenti dal comportamento ideale dovuti al fatto che le due ipotesi su cui si basa la legge di Gay-Lussac non sono più accettabili.

Si deve quindi tenere conto che:

- le molecole del gas non sono più puntiformi;
- l'energia di interazione tra le molecole non è trascurabile.

Per valutare gli effetti di gas reale, in termodinamica è usuale definire un fattore di comprimibilità, la cui forma è:

$$Z = \frac{pMM}{RT\rho}$$

Il fattore di comprimibilità  $Z$  è una quantità adimensionale che può assumere valori fra 0 e 1 e che in particolare nell'ipotesi di gas ideale è pari ad 1.

## 1.4 Tipologie di espansori

Come descritto in precedenza un ciclo ORC è costituito da quattro componenti fondamentali: una pompa che ha il compito di pressurizzare il fluido in fase liquida, un evaporatore che sfruttando il calore della fonte di energia in questione (solare, geotermica, biomassa, calore di scarto) permette al fluido di passare da fase liquida a fase di vapore, un espansore che produce lavoro riducendo l'entalpia del fluido e un condensatore che estrae calore dal fluido provocando il passaggio del fluido da fase vapore a fase liquida. In particolare in questi cicli il componente più problematico risulta essere l'espansore in quanto è proprio questo che va a limitare l'efficienza del ciclo. Inoltre l'espansore costituisce la parte più cara dell'impianto in quanto rappresenta circa il 70% del costo totale del sistema. Risulta quindi fondamentale la scelta del tipo di macchina da utilizzare e la sua ottimizzazione. La scelta dell'espansore più adeguato risulta essere fortemente dipendente dalle condizioni operative e dalle potenze in gioco. In particolare possono essere distinti due tipi principali di espansori: gli espansori dinamici come ad esempio gli espansori a turbina assiale e gli espansori volumetrici come gli espansori a vite, espansori a spirale ed espansori a palette scorrevoli.

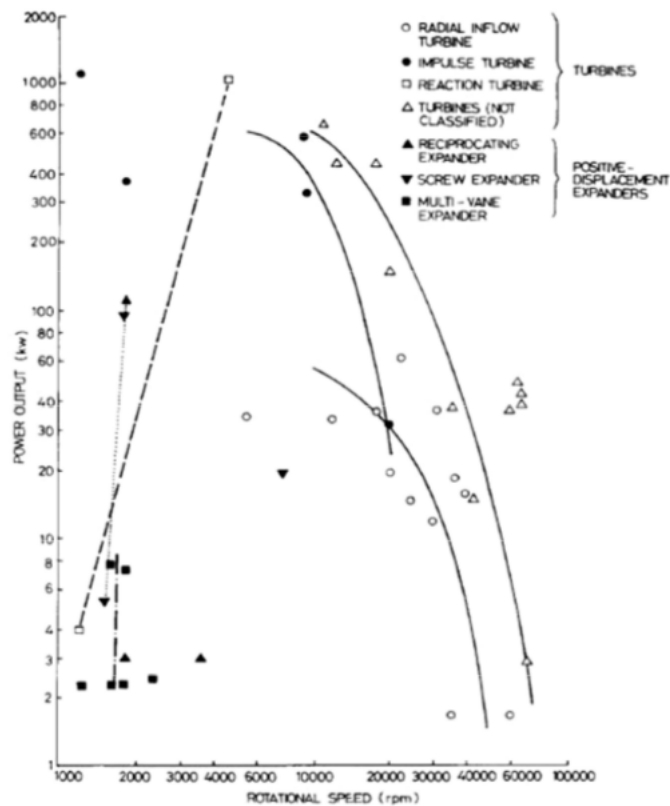


Figura 1.6: Potenze di vari tipi di espansori al variare del numero di giri

Tra i due tipi di espansori quelli volumetrici risultano essere piú appropriati ai cicli ORC perché sono caratterizzati da flussi minori, rapporti di espansione maggiori e velocità di rotazione piú basse se comparate con quelle dei turboespansori. Infatti come si può notare dal grafico nelle turbine l'efficienza (e di conseguenza la potenza ottenibile) é direttamente proporzionale alla velocità di rotazione. Quindi, utilizzando una turbina a velocità ridotte si avrà un minore rendimento. Poiché i fluidi organici posseggono una grande massa molecolare le velocità di rotazione ottenibili sono molto ridotte e di conseguenza risulta spesso conveniente l'utilizzo di un espansore volumetrico. Da notare inoltre che avere basse velocità di rotazione risulta un vantaggio in termini di componentistica, in quanto:

- permette l'accoppiamento diretto tra espansore e generatore, evitando l'utilizzo di riduttori;
- riduce le sollecitazioni subite dai componenti, che avranno dunque una maggior durata.

### 1.4.1 Turbina

Una turbina in generale può essere descritta come una macchina rotativa che permette di trasformare l'energia cinetica di un determinato fluido in energia meccanica facendo passare il flusso attraverso un certo numero di stadi palettati. A seconda del fluido utilizzato le turbine si possono distinguere in turbina a vapore, a gas, idraulica o eolica. Nel caso di un ciclo ORC, date le basse temperature e pressioni della sorgente di calore viene tipicamente usato un turboespansore al posto di una turbina a vapore, principalmente per il fatto che le turbine a vapore in commercio non sono adeguate alle basse potenze dei cicli ORC e sono molto costose. I turboespansori sono caratterizzati da una serie di vantaggi quali:

- struttura compatta;
- costruzione semplice e leggera;
- alta efficienza;
- il singolo stadio di espansione permette un grande salto di entalpia.

I turboespansori tipicamente vengono utilizzati in cicli che posseggono un output di potenza superiore a 50 KW. Sotto questo valore l'efficienza del turboespansore inizia a decrescere fino a raggiungere valori inaccettabili attorno a 10kW. Inoltre più piccolo è il turboespansore più la sua produzione risulterà cara. Realisticamente un turboespansore utilizzato in un ciclo ORC può girare ad una velocità di 60000 rpm con una potenza ottenuta di 3.5 kW.



Figura 1.7: Turboespansore per ciclo ORC

### 1.4.2 Espansore di tipo *screw*

Un espansore a vite tipicamente é composto da due rotori ellittici, un maschio a quattro lobi e una femmina a sei lobi. Vi é poi un involucro che le contiene entrambe con un gioco dell'ordine di  $50 \mu m$ . Durante la rotazione dei due rotori il volume contenuto tra i rotori e l'involucro cambia. Se quindi si ammette un fluido ad una estremitá dei rotori, il suo volume aumentará (espansione) o diminuirá (compressione) solamente in funzione del senso di rotazione, finché raggiungerá l'altra estremitá e verrà espulso. Durante questo processo, poiché varia il volume del fluido, varierá anche la pressione del fluido sui rotori e si avrà quindi produzione di potenza. L'output di potenza adeguato a queste applicazioni é di 20-50 kW, in quanto all'interno di questo range il costo di installazione risulta relativamente basso. Per potenze molto inferiori a questo range é molto difficile ottenere un espansore a vite a costi accettabili, soprattutto per la difficoltà crescente nel sigillare il fluido di lavoro; quindi questa soluzione non risulta essere piú percorribile [6]. I vantaggi di questa soluzione sono:

- struttura semplice;
- economico;
- É possibile lavorare anche nel caso si formi fluido bifase senza danneggiare i componenti.

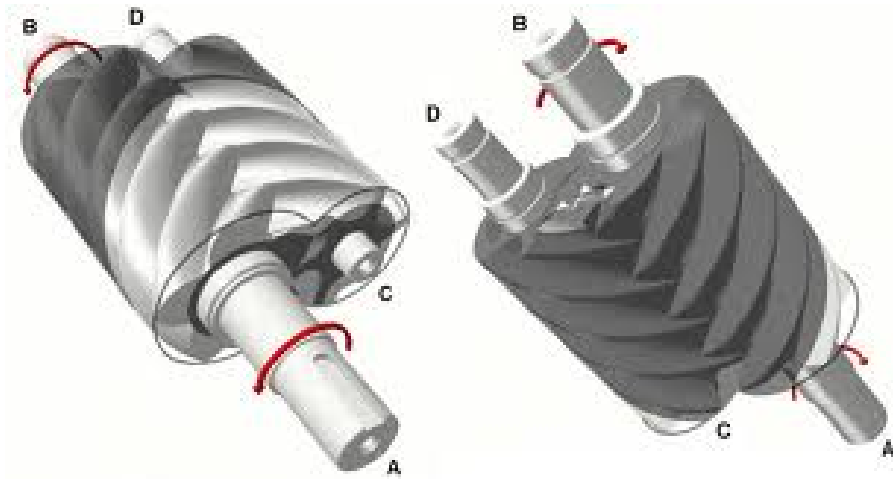


Figura 1.8: Espansore a vite

### 1.4.3 Espansore di tipo *scroll*

L'espansore a spirale é costituito da un involucro ermetico che contiene una spirale mobile e una fissa. Il fluido viene ammesso all'interno dell'espansore nel centro delle spirali e percorre un percorso tra le due in cui il suo volume aumenta, fino a raggiungere la zona periferica e uscire dall'espansore. A causa dell'aumento di volume si avrá un'espansione e quindi produzione di potenza. Questo tipo di espansore si ottiene tipicamente partendo da un compressore a spirale e invertendo in senso di rotazione [7]. I vantaggi di questo espansore sono:

- basso costo;
- l'espansione avviene in maniera molto uniforme;
- silenzioso;
- non ci sono valvole e quindi si evita il problema del piegamento delle valvole, frequente in altre tipologie di espansori;
- pochi componenti;

Questo tipo di espansore risulta applicabile in sistemi con basso output di potenza, attorno a 0.1-1 kW

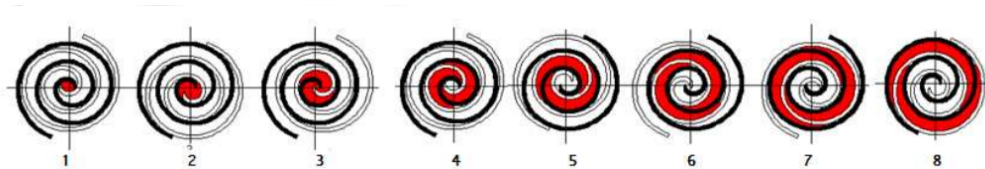


Figura 1.9: Espansore a spirale

### 1.4.4 Espansore a palette scorrevoli

L'espansore a palette scorrevoli é di tipo volumetrico. L'espansore é costituito da un rotore su cui sono calettate delle palette che sono libere di muoversi sia in maniera solidale con il rotore, sia lungo il loro asse a causa della forza centrifuga. Questa struttura é contenuta in uno statore ellittico. Il processo di espansione é ottenuto poiché il volume contenuto tra il rotore, lo statore e le palette aumenta durante la rotazione a causa della natura eccentrica dello statore. Il fluido quindi viene ammesso dalla porta di inlet, si espande poiché il volume della camera aumenta durante la rotazione producendo potenza e

infine esce dalla porta di outlet a espansione conclusa. L'aumento di volume del fluido nelle varie camere all'aumentare dell'angolo di rotazione provoca una differenza di pressione tra le camere, il che permette al rotore di continuare a girare [8], [9]. I vantaggi di questo espansore sono:

- semplicità costruttiva;
- affidabilità;
- compatto;
- economico.

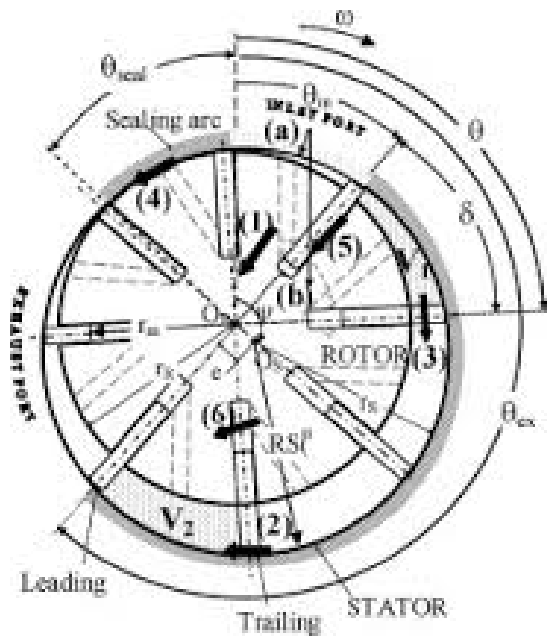


Figura 1.10: Espansore a palette scorrevoli

#### 1.4.5 Scelta dell'espansore piú adeguato

Quando si tratta di scegliere l'espansore piú adeguato all'applicazione di interesse l'efficienza e il costo sono certamente dei parametri fondamentali, ma bisogna tenere conto anche di altri fattori, quali le temperature e le pressioni di lavoro, le potenze in gioco, la rumorosità, la sicurezza, l'adeguato isolamento del fluido di lavoro. Dato che nel caso in questione le potenze in gioco risultano essere molto basse (0.3-0.5 kW) si possono fare le seguenti considerazioni:



- i turboespansori risultano essere poco efficienti nel campo delle basse potenze e inoltre producono un rumore inaccettabile in questo tipo di applicazioni. Gli espansori volumetrici risultano essere piú silenziosi e inoltre permettono l'eventuale formazione di miscela bifase senza particolari danni ai componenti;
- i turboespansori e gli espansori a vite, se scalati per ottenere basse potenze, perdono notevolmente in efficienza in quanto sono pensati per lavorare in grossi impianti e ad alte temperature e pressioni;
- gli espansori a spirale e quelli a palette sono la scelta piú adeguata nel campo delle basse potenze in quanto permettono di ottenere un elevato rapporto di espansione e buone performance in un ampio campo operativo, pur mantenendo la semplicitá costruttiva e bassi costi;
- gli espansori a spirale e quelli a palette sono facili da scalare per farli lavorare nel campo delle basse potenze (1-10 kW);
- gli espansori a palette risultano essere una buona opzione nel caso l'output di potenza richiesto sia minore di 2 kW.

Nel caso oggetto dello studio di questa tesi, il ciclo ORC viene utilizzato a valle di un motore a combustione interna (MCI) utilizzando il calore di scarto dei gas di scarico. Le potenze in gioco risultano quindi molto basse  $< 1$  kW e il rumore inaccettabile. É dunque assolutamente giustificata la scelta di utilizzare un espansore a palette scorrevoli, il cui studio é proprio il fulcro del seguente lavoro.

## Capitolo 2

### Equazioni della fluidodinamica

Per modellare il problema fluidodinamico sarà necessario accoppiare le equazioni di conservazione con le leggi costitutive che descrivono le proprietà del fluido di lavoro in questione. Nel continuo è possibile scrivere la generica equazione di conservazione di una proprietà intensiva come:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{\phi} + \nabla \cdot (\vec{F} - \vec{Q}_s) = \vec{Q}_v \quad (2.1)$$

dove  $Q_v$  e  $Q_s$  sono termini sorgenti rispettivamente di volume e superficie, mentre  $F$  è il flusso netto entrante e  $\phi$  una generica grandezza che si conserva.

I contributi del flusso possono essere di due tipi:

- convettivo: descrive il trasporto passivo della variabile conservata da parte del flusso

$$\vec{F}_c = \phi \vec{U} \quad (2.2)$$

- diffusivo: parte della proprietà intensiva che è trasportata dalla presenza del suo gradiente

$$\vec{F}_d = -\Gamma \rho \nabla \phi \quad (2.3)$$

Considerando entrambi i contributi, possiamo scrivere la seguente equazione:

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi + \nabla \cdot \phi \vec{U} = \nabla \cdot (\Gamma \rho \nabla \phi) + \vec{Q}_v + \nabla \cdot \vec{Q}_s \quad (2.4)$$

#### 2.1 Equazioni di conservazione

Partendo dal caso generale possiamo completamente determinare il comportamento di un sistema senza la necessità di nessun'altra legge di moto definendo la conservazione di tre grandezze fisiche:

- Equazione di continuità ( $\Phi = \rho$ )

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{U}) = 0 \quad (2.5)$$

- Equazione di conservazione della quantità di moto ( $\phi = \rho \vec{U}$ ,  $\overline{Q_s} = \overline{\sigma}$ ,  $\vec{Q}_V = \vec{f}$ )

$$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{U} \vec{U}) = \vec{f} + \nabla \overline{\sigma} \quad (2.6)$$

- Equazione di conservazione dell'energia ( $\phi = \rho E$ ,  $\overline{Q_s} = -\nabla \vec{q} + \nabla(\overline{\sigma} \vec{U})$ ,  $\vec{Q}_V = \dot{Q}$ )

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla(\rho E \vec{U}) = -\nabla \vec{q} + \nabla(\overline{\sigma} \vec{U}) + \dot{Q} \quad (2.7)$$

dove:

$$E = e + \frac{1}{2} \vec{U}^2 \quad (2.8)$$

Per quanto riguarda il flusso termico che compare nell'equazione dell'energia, per un fluido puro, si può scrivere la legge di Fourier e quindi:

$$\vec{q} = \lambda_t \nabla T \quad (2.9)$$

dove  $\lambda_t = \lambda_t(p, T)$

Per quanto riguarda il tensore degli sforzi è possibile utilizzare la legge di Newton con l'ipotesi di Stokes ( $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ ), la quale permette di correlare il tensore degli sforzi  $\overline{\sigma}$  al tensore delle deformazioni  $\overline{D}$ :

$$\overline{\sigma} = 2\mu \overline{D} - (p + \frac{2}{3}\mu \nabla \vec{U}) \overline{I} = (2\mu \overline{D} - \frac{2}{3}\mu \nabla \vec{U} \overline{I}) - p \overline{I} = \overline{\tau} - p \overline{I} \quad (2.10)$$

con

$$\overline{D} = \frac{1}{2} [\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T] \quad (2.11)$$

Utilizzando queste leggi è possibile scrivere le equazioni di Navier-Stokes:

- Equazione di continuità

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{U}) = 0 \quad (2.12)$$

- Equazione di conservazione della quantità di moto

$$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{U} \vec{U}) = \rho \vec{g} - \nabla(p + \frac{2}{3}\mu \nabla \vec{U}) + \nabla[\mu(\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T)] \quad (2.13)$$

- Equazione di conservazione dell'energia

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla(\rho E \vec{U}) = \rho \vec{g} \vec{U} - \nabla p \vec{U} - \nabla \left( \frac{2}{3} \mu (\nabla \vec{U}) \vec{U} \right) + \\ + \nabla [\mu (\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T) \vec{U}] + \nabla(\lambda \nabla T) + \rho \dot{Q} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Viste le incognite nel sistema di equazioni scritte precedentemente, è possibile notare come si renda necessario, nel caso comprimibile, avere un'equazione aggiuntiva. Tale equazione permette di legare tra loro tre delle quattro variabili in gioco per essere così in grado di risolvere il sistema. Tale informazione riguarda solitamente il legame tra P, T e  $\rho$  ed è fornita grazie all'adozione di un'equazione di stato che appunto mette in relazione tra loro le tre grandezze appena citate. Risulta inoltre necessario definire proprietà come la  $\mu$  con un modello adeguato. In particolare in OpenFoam è possibile utilizzare il modello newtoniano ( $\mu$  costante) e quello di sutherland ( $\mu = \frac{1.45T^{\frac{3}{2}}}{T+110} 10^{-6}$ ), ma sarà necessario implementare un modello che consideri l'effetto della realtà del gas sul calcolo della viscosità.

Tuttavia queste equazioni, scritte per il continuo, non sono risolvibili in forma chiusa se non per problemi estremamente semplici e di scarsa utilità pratica. Quando si ha a che fare con problemi più complessi sarà quindi necessario passare a un approccio numerico per giungere a una soluzione ragionevole. A tale scopo in OpenFoam viene utilizzato il metodo dei volumi finiti che, tramite una serie di discretizzazioni temporali e spaziali, risolve un problema approssimato di tipo algebrico. Di conseguenza la soluzione non sarà dipendente esclusivamente dal problema di partenza, ma anche dal tipo di discretizzazione fatta e dai metodi numerici risolutivi utilizzati. In particolare lo schema numerico dovrà soddisfare una serie di criteri. Detta  $D(U)$  l'equazione differenziale,  $N(U)$  l'equazione discretizzata,  $\tilde{u}$  la soluzione esatta dell'equazione differenziale e  $\tilde{u}_i$  la soluzione esatta dell'equazione discretizzata si può definire il metodo numerico:

- Stabile: l'errore dovuto all'approssimazione algebrica rimane al di sotto di un certo limite ad ogni iterazione

$$\bar{\epsilon}_i^n = u_n^i - \tilde{u}_n^i \quad (2.15)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\bar{\epsilon}_i^n| < K \quad (2.16)$$

- Consistente: lo schema numerico deve tendere all'equazione differenziale al tendere a zero della discretizzazione nello spazio e nel tempo

- Convergente: la soluzione numerica è una corretta rappresentazione della realtà, ovvero la soluzione numerica deve tendere alla soluzione esatta del problema matematico al tendere a zero della discretizzazione spaziale e temporale

$$\tilde{\epsilon}_i^n = \tilde{u}_n^i - \tilde{u}_n \quad (2.17)$$

$$\lim_{\Delta T, \Delta x \rightarrow 0} |\tilde{\epsilon}_i^n| = 0 \quad (2.18)$$

Si ricorda inoltre il *teorema di Lax*: per un problema ben posto con uno schema numerico consistente la stabilità è una condizione necessaria e sufficiente per la convergenza.

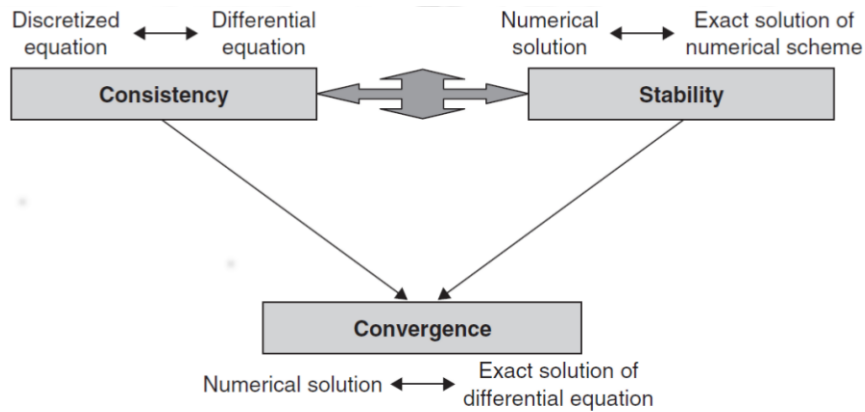


Figura 2.1: Condizioni per la convergenza

## 2.2 Metodo dei volumi finiti

Con il metodo dei volumi finiti si integrano le equazioni viste in precedenza in un volume di controllo tridimensionale di dimensioni finite per un certo intervallo temporale  $\Delta t$ . Ad esempio per la generica equazione di continuità si avrà:

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_V (\rho\phi) dV \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_V \nabla \cdot (\rho\phi\vec{U}) dV \right) dt = 0 \quad (2.19)$$

Ricordando il teorema di Gauss:

$$\int_V \nabla \phi dV = \int_S \vec{n}\phi dS \quad (2.20)$$

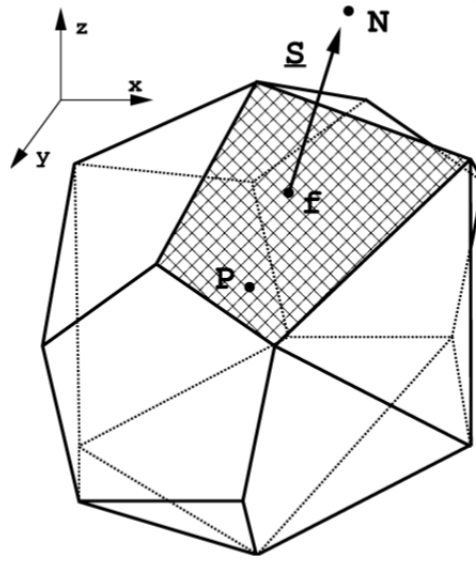


Figura 2.2: Volume di controllo

dove  $dS$  è la superficie infinitesima rappresentata da un vettore normale uscente dal volume  $dV$ .

L'equazione può dunque essere riscritta come:

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_V (\rho\phi) dV \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_S \vec{n} (\rho\phi\vec{U}) dS \right) dt = 0 \quad (2.21)$$

Una volta ottenuta questa equazione sarà necessario discretizzarla.

### 2.2.1 Discretizzazione del dominio

Nel metodo a volumi finiti si ha un dominio di calcolo scomposto in sottodomini che danno origine a una griglia di calcolo detta *mesh*. Ogni volume di controllo è composto da un numero di facce piane arbitrario. Il centroide di ogni cella  $\vec{x}_p$  e quello di ogni faccia  $\vec{x}_f$  possono essere definiti rispettivamente come:

$$\int_V (\vec{x} - \vec{x}_p) dV = 0 \quad (2.22)$$

$$\int_S (\vec{x} - \vec{x}_f) dS = 0 \quad (2.23)$$

Per ogni cella i valori di ogni campo saranno valutati nel centroide P. Se si ipotizza che il valore di ogni grandezza di interesse  $\phi$  vari linearmente all'interno di ogni cella, si può scrivere:

$$\phi = \phi_P + (\vec{x} - \vec{x}_P)(\nabla\phi)_P + o((\vec{x} - \vec{x}_P)^2) \quad (2.24)$$

e quindi quando si ha un integrale di volume questo può essere discretizzato nel dominio nel seguente modo:

$$\int_V \phi dV = \int_V \phi_P dV + \int_V (\vec{x} - \vec{x}_P) dV \nabla \phi + \int_V o(|\vec{x} - \vec{x}_P|^2) dV = \phi_P V_P + o(|\Delta x|^2) \quad (2.25)$$

Si potrà quindi approssimare l'integrale di volume della grandezza con il valore della grandezza valutato nel centroide della cella di interesse moltiplicato per il volume della cella stessa, ottenendo un'accuratezza del secondo ordine in quanto il primo termine dell'errore di troncamento è di secondo grado. Si discretizza inoltre anche nel tempo, ripetendo il calcolo ogni  $\Delta t$  assegnato, che può eventualmente essere modificato durante la simulazione, ad esempio per mantenere limitato il numero di Courant. Inoltre si ipotizza che il valore di una generica proprietà vari linearmente su ogni faccia interna (*Midpoint rule*)

$$\phi = \phi_f + (\vec{x} - \vec{x}_f)(\nabla \phi)_f + o((\vec{x} - \vec{x}_f)^2) \quad (2.26)$$

Quindi quando si ha un integrale di superficie questo può essere approssimato come:

$$\int_S \phi dS = \int_S \phi_f dV + \int_S (\vec{x} - \vec{x}_f) dV \nabla \phi + \int_S o(|\vec{x} - \vec{x}_f|^2) dS = \phi_f S + o(|\Delta x|^2) \quad (2.27)$$

ottenendo un'accuratezza del secondo ordine. È però necessario ricordare che in questo caso l'accuratezza non dipende soltanto dall'ordine del primo termine dell'errore di troncamento, ma anche da  $\phi_f$ , che deve essere a sua volta ottenuto per interpolazione (almeno del secondo ordine). Si possono inoltre utilizzare altre approssimazioni, come ad esempio la *Simpson rule*.

## 2.2.2 Discretizzazione delle equazioni

Una volta discretizzate il dominio nel tempo e nello spazio, per ottenere un'espressione algebrica è necessario passare al campo discreto, sostituendo gli integrali con delle sommatorie. In particolare data la generica equazione di conservazione:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho \phi dV + \int_S \rho \phi \vec{U} \vec{n} dS = \int_S \Gamma \nabla \phi \vec{n} dS + \int_V \vec{Q}_v dV + \int_S \overline{\overline{Q_s}} dS \quad (2.28)$$

che può anche essere scritta, utilizzando il teorema di Gauss, come:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho \phi dV + \int_V \nabla \rho \phi \vec{U} dV = \int_V \nabla \Gamma \nabla \phi dV + \int_V \vec{Q}_v dV + \int_S \nabla \overline{\overline{Q_s}} dS \quad (2.29)$$

dove:

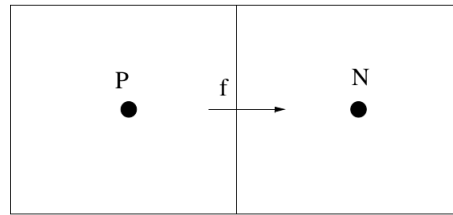


Figura 2.3: Modello upwind

- $\frac{\partial}{\partial t}\rho\phi$  è la derivata nel tempo di  $\phi$
- $\nabla\rho\phi\vec{U}\vec{n}$  è il termine convettivo
- $\nabla\Gamma\nabla\phi\vec{n}$  è il termine diffusivo
- $Q_s$  e  $Q_v$  sono i termini sorgente di superficie e volume

A questo punto è possibile discretizzare ogni termine dell'equazione di conservazione.

**Termine convettivo**

$$\begin{aligned} \int_V \nabla(\rho\phi\vec{U})dV &= \int_S (\rho\phi\vec{U})\vec{n}dS = \sum_f \vec{S}(\rho\vec{U}\phi)_f = \\ &= \sum_f \vec{S}(\rho\vec{U})_f\phi_f = \sum_f (S\rho U_n)_f\phi_f = \sum_f F\phi_f \end{aligned} \quad (2.30)$$

Dove  $\phi_f$ , ovvero il valore della proprietà di interesse al centro della faccia può essere determinato in modi diversi, a seconda dei quali varierà l'ordine di accuratezza del modello:

- *upwind*: approssima  $\phi_f$  con il valore del centroide della cella adiacente in funzione della direzione del flusso, ovvero
  - $\phi_f = \phi_P$  se  $\vec{U}\vec{n} > 0$
  - $\phi_f = \phi_N$  se  $\vec{U}\vec{n} < 0$

questo tipo di discretizzazione è di primo ordine dato che il primo termine dell'errore di troncamento è proporzionale a un flusso diffusivo:  $\epsilon_t = (x_f - x_p)(\frac{\partial\phi}{\partial x})_P$ . Questo termine è una sorta di viscosità artificiale che garantisce l'assenza di oscillazioni numeriche il che risulta positivo per quanto riguarda la stabilità del metodo ma va a discapito dell'accuratezza della soluzione. Bisogna inoltre tenere conto che se la mesh



è orientata obliquamente rispetto al flusso si avrà un termine diffusivo anche in direzione normale al flusso stesso.

- *interpolazione lineare* In questo caso si calcola il valore della proprietà di interesse sulla faccia andando a interpolare linearmente tra i valori dei centroidi di due celle adiacenti, ovvero:

$$\phi_f = \phi_N f_x + (1 - f_x) \phi_P \quad (2.31)$$

$$f_x = \frac{x_f - x_P}{x_N - x_P} \quad (2.32)$$

con questo tipo di approssimazione il primo termine dell'errore di troncamento risulta essere del secondo ordine e quindi il metodo risulterà più accurato (secondo ordine per mesh strutturate) a scapito della stabilità in quanto se il fenomeno è dominato da fenomeni di trasporto possono nascere delle oscillazioni spurie.

- vi sono poi altri metodi di ordine maggiore come il metodo *quick* dove si usa una parabola per approssimare il profilo tra i centroidi delle celle adiacenti oppure metodi di ordine superiore in cui vengono utilizzati dei polinomi.

### Termine gradiente

Per quanto riguarda il termine gradiente si può discretizzare l'integrale nel seguente modo:

$$\int_V \nabla \phi dV = \int_S \phi \vec{n} dS = \sum_f \vec{S}_f \phi_f \quad (2.33)$$

dove  $\phi_f$  viene calcolato interpolando linearmente tra due celle adiacenti.

### Termine diffusivo

Il termine diffusivo potrà essere scritto in forma discretizzata:

$$\int_V \nabla \Gamma \nabla \phi \vec{n} dS = \int_S \Gamma \nabla \phi \vec{n} dS = \sum_f \vec{S} (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi)_f = \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f (\vec{S} \nabla \phi)_f \quad (2.34)$$

dove il termine  $\rho \Gamma_\phi$  viene interpolato sulla faccia mentre il termine  $(\vec{S} \nabla \phi)_f$  dipende dal tipo di mesh considerata:  $(\vec{S} \nabla \phi)_f = |\vec{S}| \left( \frac{\phi_P - \phi_N}{|d|} \right)$  Questo tipo di approssimazione permette di raggiungere un'accuratezza del secondo ordine su mesh ortogonali e uniformi. Se invece la mesh non risulta essere ortogonale l'accuratezza risulta penalizzata. Infatti in questo caso il gradiente si calcola

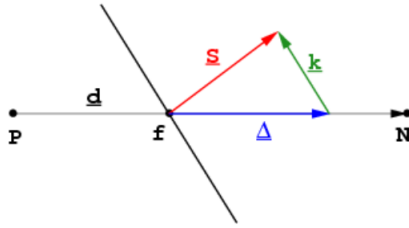


Figura 2.4: Termine diffusivo in caso di non ortogonalità

lungo la linea che connette i centri delle celle adiacenti, ma questa linea non risulta essere perpendicolare alla faccia di interesse. Sarà quindi necessario aggiungere una correzione  $\vec{k}$  per compensare la non ortogonalità della mesh, ovvero:

$$(\vec{S}\nabla\phi)_f = |\vec{S}|\frac{\phi_P - \phi_N}{|\vec{d}|} + \vec{k}(\nabla\phi)_f \quad (2.35)$$

### Derivata temporale

Ipotizzando una variazione della proprietà di interesse lineare nel tempo e quindi del secondo ordine è possibile scrivere:

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta t \left( \frac{\partial\phi}{\partial t} \right)^t \quad (2.36)$$

A questo punto si possono sintetizzare i contributi all'equazione di conservazione come:

- derivata nel tempo in cui il valore di  $\phi$  dipende dal valore al timestep precedente
- convezione: il valore di  $\vec{U}$  viene fornito, mentre  $\phi_f$  dipende dai valori di  $\phi_P$  (valore della grandezza nel centroide della cella con faccia  $f$ ) e dai valore di  $\phi_N$  (valore della grandezza nella cella *neighbour*)
- diffusione: il valore  $\vec{S}(\nabla\phi)_f$  dipende dai valori di  $\phi_P$  e  $\phi_N$

Di conseguenza per ogni punto si avrà un'equazione di questo tipo:

$$a_P\phi_P + \sum_N a_N\phi_N = R \quad (2.37)$$

Per quanto riguarda la derivata temporale si potrà fare un'approssimazione del primo o del secondo ordine:

- approssimazione del primo ordine:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\phi^n - \phi^0}{\Delta t} \quad (2.38)$$

e quindi l'integrale risulta essere:

$$\int_V \frac{\partial\phi}{\partial t} dV = \frac{\phi^n - \phi^0}{\Delta t} V_P \quad (2.39)$$

- approssimazione del secondo ordine:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^0 + \frac{1}{2}\phi^{00}}{\Delta t} \quad (2.40)$$

dove l'integrale diventa:

$$\int_V \frac{\partial\phi}{\partial t} dV = \frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^0 + \frac{1}{2}\phi^{00}}{\Delta t} V_P \quad (2.41)$$

In entrambi i casi, poichè  $\frac{\partial\phi}{\partial t}$  dipende solo da quello di  $\phi_P$ , si avrà solo un contributo diagonale e un contributo al termine sorgente. In particolare per l'approssimazione del primo ordine avremo:  $a_P = \frac{V_P}{\Delta t}$  e  $r_P = \frac{V_P\phi^0}{\Delta t}$ . Per quanto riguarda la derivata seconda avremo:

- approssimazione del primo ordine:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = \frac{\phi^n - 2\phi^0 + \phi^{00}}{\Delta t^2} \quad (2.42)$$

con  $\phi^n = \phi(t + \Delta t)$ ,  $\phi^0 = \phi^0 = \phi(t)$ ,  $\phi^{00} = \phi(t - \Delta t)$

- approssimazione del secondo ordine:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = \frac{2\phi^n - 5\phi^0 + 4\phi^{00} - \phi^{000}}{\Delta t^2} \quad (2.43)$$

Una volta discretizzati tutti i termini per ogni punto si ottiene un'equazione matriciale del tipo:

$$[A][\vec{\phi}] = [R] \quad (2.44)$$

con:

- $[A]$  → matrice sparsa
- $\phi$  → vettore dei termini associati a tutti i volumi di controllo

- $[R]$  vettore dei termini sorgente

A questo punto bisognerà decidere il criterio di avanzamento nel tempo. In particolare si potrà distinguere tra:

- metodo esplicito: il valore di  $\phi_P^n$  dipende dai *vecchi* valori della cella vicina  $\phi_N^0$ :

$$\phi_P^n = \frac{R - \sum_N a_N \phi_N^0}{a_P} \quad (2.45)$$

Questo schema garantisce un'accuratezza del primo ordine ma risulta instabile per  $\Delta t$  troppo piccoli. Infatti, detto *Numero di Courant* il seguente valore:

$$Cu = \frac{ud}{|d|^2 \Delta t} \quad (2.46)$$

il metodo risulterà instabile se  $Cu > 1$ .

- metodo implicito: il valore di  $\phi_P^n$  dipende dai *nuovi* valori della cella vicina  $\phi_N^0$ :

$$\phi_P^n = \frac{R - \sum_N a_N \phi_N^n}{a_P} \quad (2.47)$$

In questo caso è sempre garantita l'accuratezza del primo e la stabilità della soluzione anche per  $Cu > 1$ , il che permette di utilizzare timestep più grandi. Tuttavia in questo caso tutte le equazioni dovranno essere risolte simultaneamente dal momento che ogni valore nuovo di una cella dipenderà dai valori nuovi delle altre. Per farlo ogni termine sarà espresso in una matrice e il sistema risultante verrà risolto. Questo comporta la necessità di conservare in memoria i coefficienti della matrice, al contrario del metodo esplicito che risulta più rapido proprio per il fatto che non vi è necessità di memorizzare alcun valore.

## Capitolo 3

# Modelli Termodinamici di Gas Reale

### 3.1 Calcolo della densità

Una volta discretizzate le equazioni di conservazione, viste le incognite che compaiono è possibile osservare come si renda necessario, nel caso comprimibile, avere un'equazione aggiuntiva che leghi tra loro tre delle quattro variabili in gioco per essere così in grado di risolvere il sistema. In particolare tale informazione è una legge costitutiva che riguarda solitamente il legame tra  $P$ ,  $T$  e  $\rho$  ed è fornita grazie all'adozione di un'equazione di stato che metter in relazione le grandezze sopra citate. Nelle applicazioni classiche tale equazione di stato è l'equazione dei gas perfetti:

$$Pv = RT \quad (3.1)$$

Come già detto in precedenza in applicazioni come i cicli ORC, utilizzare tale equazione risulta un'approssimazione troppo grande. Infatti all'inizio dell'espansione il fluido nel diagramma T-s si trova in una zona molto vicina alla curva di saturazione (alte pressioni e alte temperature) dove gli effetti dovuti alla realtà del gas non sono più trascurabili. Risulterà dunque necessario utilizzare delle equazioni che considerino il fatto che le molecole non sono realmente puntiformi e che l'energia di interazione tra le molecole non è più trascurabile.

Durante il 20 °secolo svariati autori hanno suggerito diverse espressioni per la descrizione degli effetti di gas reale. Su basi empiriche, semi-empiriche o teoretiche sono state proposte numerose equazioni di stato.

La legge di Van der Waals è stata la prima ad approssimare il comportamento di gas reale migliorando la legge di gas ideale considerando il volume delle particelle e le loro interazioni.

$$\left(P + \frac{a}{v}\right)(v - b) \quad (3.2)$$

dove:

- $a = 3P_c V_c^2$
- $b = \frac{V_c}{3}$
- $\frac{8P_c V_c}{3T_c}$

Nel 1949 Redlich-Kwong migliorò l'accuratezza dell'equazione di Van der Walls considerando la dipendenza del termine attrattivo dalla temperatura. Questa equazione, benché superiore a quella di Van der Walls, non è molto precisa riguardo alla fase liquida, essa è adeguata per il calcolo delle proprietà dei gas in condizioni in cui il rapporto tra le pressioni e la pressione critica è minore della metà dei rapporti tra la temperatura e la temperatura critica ( $\frac{p}{p_c} < \frac{1}{2} \frac{T}{T_c}$ ).

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{\sqrt{T}v(v+b)} \quad (3.3)$$

dove:

- $a = \frac{0.42748R^2 T_c^{2.5}}{P_c}$
- $b = \frac{0.08664RT_c}{P_c}$

Soave migliorò l'equazione RK in maniera da prevedere correttamente la pressione di vapore degli idrocarburi. La nuova correlazione include un parametro dipendente dalla temperatura per riprodurre meglio la curva di vapor saturo che però ha una significativa deviazione nelle vicinanze del punto critico.

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a\alpha(T)}{v(v+b)} \quad (3.4)$$

dove:

- $a = \frac{0.42747R^2 T_c^{2.5}}{P_c}$
- $b = \frac{0.08664RT_c}{P_c}$
- $\alpha(T) = (1 + (0.48508 + 1.5517\omega - 0.15613\omega^2)(1 - T_r^{0.5}))^2$

L'equazione di Peng-Robinson è una delle più utilizzate nello studio delle sostanze pure. Essa rappresenta un miglioramento delle precedenti equazioni di stato, soprattutto nella previsione della densità vicino al punto critico, ed in particolare è definita dalla seguente equazione:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{\alpha(T)a}{v^2 + 2bv - b^2} \quad (3.5)$$

dove:

- $a = \frac{0.45724R^2T_c^2}{P_c}$
- $b = \frac{0.07780RT_c}{P_c}$
- $\alpha_{PR} = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$

I parametri necessari per definire questa equazione di stato sono parametri tipici per ogni fluido:

- $T_c$ =temperatura critica
- $P_c$ =pressione critica
- $\omega$ =fattore acentrico
- $MM$ =massa molare

In particolare nel caso in questione verranno utilizzate l'equazione RKS e l'equazione di Peng-Robinson [10].

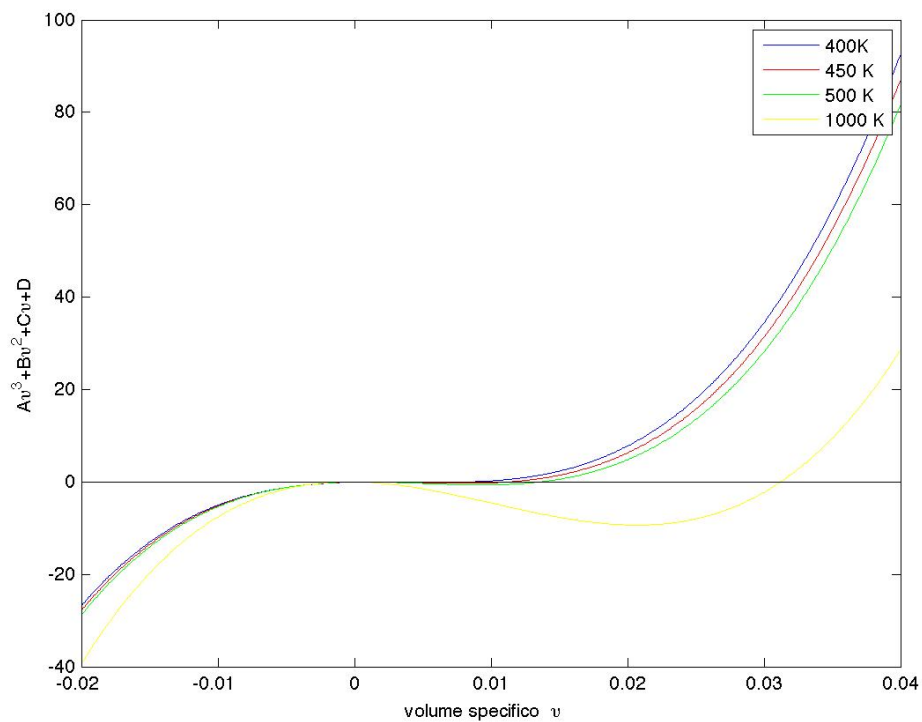


Figura 3.1: Funzione Peng-Robinson

Nella Figura 3.1 è possibile osservare alcuni esempi dell'aspetto assunto dalla funzione di Peng-Robinson, calcolata a pressione costante e pari a 2000000 Pa e a varie temperature. Ogni funzione interseca l'asse delle ascisse tre volte, ottenendo quindi tre soluzioni.

Si propongono dunque alcuni esempi di calcolo delle proprietà del fluido R245fa fissando la pressione e variando la temperatura. Tramite uno script MATLAB sono stati effettuati i calcoli utilizzando la legge di Peng-Robinson, quella di Redlich-Kwong-Soave e quella di gas perfetto. Infine confronteremo i risultati ricavati da entrambi i casi con i dati sperimentali forniti dal database NIST.

Calcolo con equazione di Peng-Robinson:

P [Pa]	T [K]	delta	v [ $\frac{m^3}{kg}$ ]	rho [ $\frac{kg}{m^3}$ ]	Z
2000000	400	$2,4591 \times 10^{-17}$	0,0084	119,5493	0,6743
2000000	450	$2,5299 \times 10^{-16}$	0,0113	88,4435	0,8102
2000000	500	$7,9173 \times 10^{-16}$	0,0136	73,4535	0,8780
2000000	1000	$-9,6364 \times 10^{-15}$	0,0312	32,0308	1,0067

Tabella 3.1: Calcolo di densità e fattore di comprimibilità con l'equazione di Peng-Robinson

Calcolo con equazione RKS:

P [Pa]	T [K]	v [ $\frac{m^3}{kg}$ ]	rho [ $\frac{kg}{m^3}$ ]	Z
2000000	400	0.0063	158.5514	0,5084
2000000	450	0,0101	98.2800	0,7291
2000000	500	0,0128	77.7563	0,8294
2000000	1000	0,0307	32,4981	0.9920

Tabella 3.2: Calcolo di densità e fattore di comprimibilità con l'equazione RKS

Calcolo con equazione di Gas Perfetto:

P [Pa]	T [K]	v [ $\frac{m^3}{kg}$ ]	rho [ $\frac{kg}{m^3}$ ]	Z
2000000	400	0,0124	80,6158	1.1
2000000	450	0,0139	71,6585	1
2000000	500	0,0155	64,4926	1
2000000	1000	0,0310	32,2463	1

Tabella 3.3: Calcolo di densità e fattore di comprimibilità con l'equazione di gas perfetto



$T [K]$	$P [Pa]$	$\rho [kg/m^3]$	$h [\frac{kJ}{mol}]$	$s [\frac{J}{molK}]$	$C_p [\frac{J}{molK}]$	$phase$
390.00	2.0000	1018.9	49.430	201.83	232.47	liquid
395.00	2.0000	988.37	50.618	204.86	243.36	liquid
395.19	2.0000	987.13	50.664	204.97	243.86	liquid
395.19	2.0000	123.95	65.465	242.43	205.97	vapor
400.00	2.0000	117.88	66.427	244.85	194.85	vapor
405.00	2.0000	112.74	67.381	247.22	187.25	vapor
410.00	2.0000	108.41	68.304	249.48	181.95	vapor
415.00	2.0000	104.66	69.203	251.66	178.11	vapor
420.00	2.0000	101.36	70.086	253.78	175.26	vapor
425.00	2.0000	98.412	70.957	255.84	173.1	vapor
430.00	2.0000	95.749	71.818	257.85	171.49	vapor
435.00	2.0000	93.320	72.673	259.83	170.26	vapor
440.00	2.0000	91.089	73.522	261.77	169.34	vapor
445.00	2.0000	89.026	74.367	263.68	168.68	vapor
450.00	2.0000	87.108	75.209	265.56	168.22	vapor
455.00	2.0000	85.316	76.049	267.42	167.92	vapor
460.00	2.0000	83.635	76.888	269.25	167.77	vapor
465.00	2.0000	82.053	77.727	271.07	67.73	vapor
470.00	2.0000	80.558	78.566	272.86	167.79	vapor
475.00	2.0000	79.142	79.405	274.64	167.93	vapor
480.00	2.0000	77.797	80.245	276.40	168.15	vapor
485.00	2.0000	76.516	81.087	278.14	168.43	vapor
490.00	2.0000	75.295	81.929	279.87	168.76	vapor
495.00	2.0000	74.127	82.774	281.58	169.14	vapor
500.00	2.0000	73.009	83.621	283.29	169.56	vapor

Tabella 3.4: Tabella dei dati NIST

Temperatura critica $T_c$	427.2 K
Pressione critica $p_c$	3.6400 MPa
Densità critica $\rho_c$	517 kg/m <sup>3</sup>
Fattore acentrico $\omega$	0.3724

Tabella 3.5: Proprietà del fluido fornite dal database NIST

Confrontando i dati sperimentali forniti dal NIST con i nostri risultati calcolati con le due diverse equazioni di stato si può notare che:

- per punti vicini alla curva di saturazione (basse temperature) le previsioni con le EOS di Peng-Robinson e Redlich-Kwong-Soave risultano molto più fedeli ai valori sperimentali rispetto a quelli calcolati con l'ipotesi di gas ideale

- per punti lontani dalla curva di saturazione (alte temperature) gli effetti legati alla non idealità del gas vengono a perdersi e le tre EOS tendono allo stesso valore (coincidente con i dati forniti dal database NIST).

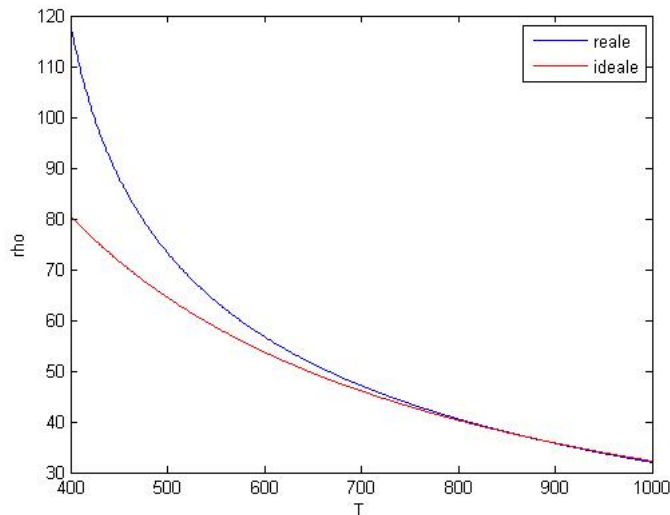


Figura 3.2: Plot delle soluzioni

### 3.2 Calcolo dell'entalpia

L'effetto di gas reale a cui è soggetto il fluido in questa applicazione non va ad influenzare solamente il calcolo della densità, ma anche quello di tutte le altre proprietà termodinamiche. In particolare, risulterà necessario individuare un modello per il calcolo dell'entalpia che sia il più accurato possibile. Il modello più semplice per calcolare l'entalpia  $h$  è quello di ipotizzare il gas termicamente perfetto il che comporta avere il calore specifico a pressione costante  $c_p$  non dipendente dalla temperatura. Sotto questa ipotesi l'entalpia può essere scritta come:

$$h = c_p T \tag{3.6}$$

Negli anni sono però stati sviluppati modelli per il calcolo delle proprietà termodinamiche che permettono di ottenere risultati più precisi. Inizialmente si erano sviluppate equazioni di stato e viriali a cui sono seguite le equazioni BWR (Benedict-Webb-Rubin) [11] e mBWR (BWR modificate) [12] e infine l'equazione di stato esplicita nell'energia di Helmonz. Quest'ultima forma,

che è quella che verrà utilizzata in questo caso specifico, risulta essere vantaggiosa in termini di accuratezza e semplicità. Una volta scritta l'equazione di stato sotto forma dell'energia di Helmonz, tutte le proprietà termodinamiche potranno essere calcolate come derivate dell'energia di Helmonz stessa. Negli ultimi 20 anni la maggior parte delle equazioni di stato per fluidi di utilizzo industriale come azoto, diossido di carbonio, R-134a, acqua (circa 30 fluidi), sono state sostituite con equazioni ad alta accuratezza ottenute interpolando i dati sperimentali per la densità, il calore specifico, la velocità del suono e l'equilibrio di fase. Rimane comunque la necessità di caratterizzare fluidi per i quali non sono disponibili dati sperimentali in modo da ottenere equazioni di stato di tipo tecnico, per le quali non è necessario avere accuratezza elevatissima. Per questo motivo, diversamente dalle equazioni ad elevata accuratezza che utilizzano 20-50 termini, le equazioni di interesse tecnico sono più snelle e utilizzano forme funzionali (il numero di termini e gli esponenti di densità e temperatura sono gli stessi per tutti i fluidi, solo i coefficienti vengono modificati). In particolare sono state sviluppate nel 2003 da Span e Wagner [13] delle equazioni fondamentali con forme funzionali fisse: una per sostanze non polari o leggermente polari e una per fluidi polari. Per sviluppare le forme funzionali e verificare l'accuratezza dei risultati sono stati utilizzati una serie di data set e di conseguenza i fluidi per cui sono state ottenute le equazioni sono sostanze che possiedono già le equazioni di stato ad elevata accuratezza. Le equazioni tecniche ottenute soffrono di una perdita in accuratezza ma sono costituite da forme molto più brevi che permettono di fare calcoli rapidi.

Nel lavoro del 2006 di Span e Lemmon [14] viene esteso il numero di fluidi per il quale si possono utilizzare le equazioni di stato tecniche per applicazioni industriali. Per alcuni fluidi queste equazioni sono il primo tentativo di prevedere le proprietà della sostanza con un'equazione a più parametri, mentre per altri fluidi queste equazioni vanno a sostituire le mBWR o altre formule che a volte mostravano comportamenti non fisici come ad esempio il calcolo di calori specifici negativi a basse temperature. Le equazioni ottenute sono costituite da 12 termini e permettono di ottenere buoni risultati anche a basse ed alte temperature. Nonostante il basso numero di termini presenti nell'equazione vada a ridurre la flessibilità della stessa e di conseguenza la sua abilità di rappresentare accuratamente le proprietà del fluido, la sua forma rigida risulta essere maggiormente applicabile a sostanze che posseggono un numero limitato di dati e quindi costituisce uno strumento per colmare le mancanze di dati sperimentali e per modellare nuovi fluidi. Vengono quindi sviluppate due forme, una per fluidi polari e una per fluidi non polari, e si sono poi ricavati i coefficienti tali da riprodurre le proprietà dei fluidi di interesse.

Queste equazioni rispettano i requisiti necessari per le applicazioni tecniche e mostrano la stabilità numerica desiderata.

	$\rho \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$	$a \left[ \frac{m}{s} \right]$	$c_p \left[ \frac{J}{kgk} \right]$	$p_v [Pa]$	$\rho_{ls} \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$	$\rho_{vs} \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$
$p \leq 30MPa$	0.2%	1% to 2%	1% to 2%	0.2%	0.2%	0.4%
$p \geq 30MPa$	0.5%	2%	2%	—	—	—

Tabella 3.6: Incertezze ottenute con le equazioni tecniche di Span e Wagner

In tabella 3.6 vengono mostrati i livelli di incertezza delle equazioni di Span e Wagner, anche se ci si aspettano incertezze maggiori nella regione critica (entro il 30% per la densità e fino al 5% per la temperatura critica). Le pressioni sopra i 100 MPa non sono state considerate a causa dello scarso interesse industriale. I valori di densità e temperatura sono due delle più importanti proprietà richieste per lo sviluppo dell'equazione di stato. Purtroppo in corrispondenza del punto critico risulta difficile ottenere delle misure affidabili, in particolare la densità critica risulta difficile da determinare a causa del valore infinito della compressibilità vicino al punto critico. In generale tali valori vengono presi da letteratura o in alcuni casi vengono ricavati dai valori disponibili di densità sature utilizzando la seguente equazione:

$$\frac{\rho_\sigma}{\rho_c} - 1 = N_1 \left( 1 - \frac{T_\sigma}{T_c} \right) \pm N_2 \left( 1 - \frac{T_\sigma}{T_c} \right)^\beta \quad (3.7)$$

dove  $T_c$  è la temperatura critica,  $\rho_c$  la densità critica,  $N_1, N_2, \beta$  sono parametri fissati,  $T_\sigma$  la temperatura di saturazione e  $\rho_\sigma$  è la densità di saturazione per il liquido o per il vapore. La densità e la temperatura critica per alcuni fluidi sono state interpolate simultaneamente ai coefficienti dell'equazione di stato, mentre la pressione critica viene generalmente determinata utilizzando l'equazione di stato note temperatura e densità critica. Per quanto riguarda invece le masse molari, queste vengono determinate a partire dai pesi atomici da Coplen [15]. Con questi dati è possibile scrivere l'equazione di stato espressa nella forma esplicita dell'energia di Helmonz. In questa formulazione le variabili indipendenti risultano essere la densità e la temperatura. Si può quindi scrivere:

$$a(\rho, T) = a^0(\rho, T) + a^r(\rho, T) \quad (3.8)$$

dove  $a(\rho, T)$  è l'energia di Helmonz,  $a^0(\rho, T)$  è il contributo del gas ideale all'energia di Helmonz e  $a^r(\rho, T)$  l'energia di Helmonz residua causata dalle forze intermolecolari. Tutte le proprietà termodinamiche possono essere calcolate come derivate dell'energia libera di Helmonz. Ad esempio la pressione

può essere calcolata come:

$$p = \rho^2 \left( \frac{\partial a}{\partial \rho} \right)_T \quad (3.9)$$

Nelle applicazioni pratiche si utilizza l'energia di Helmonz in forma adimensionale e funzione di densità e temperatura adimensionale, ovvero:

$$\frac{a(\rho, T)}{RT} = \alpha(\delta, \tau) = \alpha^0(\delta, \tau) + \alpha^r(\delta, \tau) \quad (3.10)$$

dove  $\delta = \frac{\rho}{\rho_c}$  e  $\tau = \frac{T_c}{T}$ . A questo punto sarà necessario ricavare un'espressione dell'energia di Helmonz per la parte ideale e per la parte reale. Per quanto riguarda la parte ideale avremo:

$$a^0 = h^0 - RT - Ts^0 \quad (3.11)$$

con l'entalpia ideale del gas che può essere scritta come:

$$h^0 = h_0^0 + \int_{T_0}^T c_p^0 dT \quad (3.12)$$

dove  $c_p^0$  è il calore specifico del gas ideale. Per quanto riguarda l'entropia del gas ideale possiamo scrivere:

$$s^0 = s_0^0 + \int_{T_0}^T \frac{c_p^0}{T} dT - R \ln \left( \frac{\rho T}{\rho_0 T_0} \right) \quad (3.13)$$

dove  $T_0, p_0$  sono costanti arbitrarie e  $\rho_0$  è la densità del gas ideale a  $T_0$  e  $p_0$ , ovvero  $\rho_0 = p_0/T_0 R$ .

Unendo queste espressioni è possibile ricavare l'espressione della parte reale dell'energia di Helmonz:

$$a^0 = h_0^0 + \int_{T_0}^T c_p^0 dT - RT - T \left[ s_0^0 + \int_{T_0}^T \frac{c_p^0}{T} dT - R \ln \left( \frac{\rho T}{\rho_0 T_0} \right) \right] \quad (3.14)$$

e in forma adimensionale come:

$$\alpha^0 = \frac{h_0^0 \tau}{RT_c} - \frac{s_0^0}{R} - 1 + \ln \frac{\delta \tau_0}{\delta_0 \tau} - \frac{\tau}{R} \int_{\tau_0}^{\tau} \frac{c_p^0}{\tau^2} d\tau + \frac{1}{R} \int_{\tau_0}^{\tau} \frac{c_p^0}{\tau} d\tau \quad (3.15)$$

con  $\delta_0 = \frac{\rho_0}{\rho_c}$  e  $\tau_0 = \frac{T_c}{T_0}$ . I valori di  $h_0^0$  e  $s_0^0$  sono scelti in base a delle convenzioni ben precise e, in particolare, per i refrigeranti, l'entalpia e l'entropia allo stato di liquido saturo a 0 °C sono rispettivamente  $200 \text{ kJ kg}^{-1}$  e  $1 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  mentre per gli idrocarburi l'entalpia e l'entropia vengono spesso settate a

zero per il liquido nel punto di ebollizione. Il calcolo delle proprietà termodinamiche a partire dalla forma ideale dell'energia di Helmonz necessita un'equazione per il calore specifico ideale a pressione costante  $c_p^0$ . Questa equazione viene tipicamente ottenuta interpolando i valori misurati dei calori specifici estrapolati a pressione zero, alla velocità del suono, o con metodi statistici. In particolare in questo caso si hanno a disposizione dati provenienti da tecniche statistiche (Marsh [16]) per temperature che variano tra i 50 K e i 5000 K. Questi valori vengono utilizzati per ottenere il  $c_p^0$ , comparandoli con informazioni sperimentali o calcolate per verificare l'accuratezza delle equazioni per il gas ideale.

I calori specifici di questi fluidi sono quindi stati ottenuti tramite la stessa forma funzionale:

$$\frac{c_p^0}{R_m} = c_0 + c_1(T/K)^{c_2} + \sum_{k=1}^5 \nu_k \left(\frac{u_k}{T}\right)^2 \frac{e^{u_k/T}}{[e^{u_k/T} - 1]^2} \quad (3.16)$$

con  $R_m = 8.314472 J mol^{-1} K^{-1}$  La forma dell'equazione di Helmonz ideale e adimensionale utilizzando le formule (3.75) e (3.74) risulta essere:

$$\alpha^0 = a_1 + a_2\tau + \ln\delta + (c_0 - 1)\ln\tau - \frac{c_1(T_c/K)^{c_2}}{c_2(c_2 + 1)}\tau^{-c_2} + \sum_{k=1}^5 \nu_k [1 - e^{-u_k\tau/T_c}] \quad (3.17)$$

dove  $a_1$  e  $a_2$  vengono determinati per corrispondere ai valori di  $h_0^0$  e  $s_0^0$ . I coefficienti che appaiono nell'equazione sovrastante dipendono dal fluido considerato e sono riportati in tabelle:

fluid	$v_1$	$u_1/K$	$v_2$	$u_2/K$	$v_3$	$u_3/K$	$v_4$	$u_4/K$
acetone	3.7072	310.0	7.0675	3480.0	11.012	1576.0		
carbon monoxide	1.0128	3089.0						
carbonyl sulfide	2.1651	768.0	0.93456	1363.0	1.0623	3175.0	0.34269	12829.0
decane	25.685	1193.0	28.233	2140.0	12.417	4763.0	10.035	10862.0
hydrogen sulfide	1.1364	1823.0	1.9721	3965.0				
isopentane	7.4056	442.0	9.5772	1109.0	15.765	2069.0	12.119	4193.0
neopentane	14.422	710.0	12.868	1725.0	17.247	3280.0	12.663	7787.0
isohexane	7.9127	325.0	16.871	1150.0	19.257	2397.0	14.075	5893.0
krypton								
nitrous oxide	2.1769	879.0	1.6145	2372.0	0.48393	5447.0		
nonane	24.926	1221.0	24.842	2244.0	11.188	5008.0	17.483	11724.0
sulfur dioxide	1.0620	775.0	1.9401	1851.0				
toluene <sup>a</sup>	1.6994	190.0	8.0577	797.0	17.059	1619.0	8.4567	3072.0
xenon								
R-116	2.4818	190.0	7.0622	622.0	7.9951	1470.0		
R-141b	6.8978	502.0	7.8157	1571.0	3.2039	4603.0		
R-142b	5.0385	473.0	6.8356	1256.0	4.0591	2497.0	2.8136	6840.0
R-218	7.2198	326.0	7.2692	595.0	11.599	1489.0		
R-245fa	5.5728	222.0	10.385	1010.0	12.554	2450.0		
R-41	5.6936	1841.0	2.9351	4232.0				

Figura 3.3: Coefficienti dei vari fluidi per l'equazione del calore specifico ideale

fluid	$c_0$	$c_1$	$c_2$	$a_1$	$a_2$
acetone	4.0			-9.4883659997	7.1422719708
carbon monoxide	3.5	$0.22311 \times 10^{-6}$	1.5	-3.3728318564	3.3683460039
carbonyl sulfide	3.5			-3.6587449805	3.7349245016
decane	19.109			13.9361966549	-10.5265128286
hydrogen sulfide	4.0	$0.14327 \times 10^{-5}$	1.5	-4.0740770957	3.7632137341
isopentane	4.0			2.5822330405	1.1609103419
neopentane	4.0			0.8702452614	1.6071746358
isoheaxane	4.0			6.9259123919	-0.3128629679
krypton	2.5			-3.7506412806	3.7798018435
nitrous oxide	3.5			-4.4262736272	4.3120475243
nonane	17.349			10.7927224829	-8.2418318753
sulfur dioxide	4.0	$0.72453 \times 10^{-4}$	1.0	-4.5328346436	4.4777967379
toluene	4.0			3.5241174832	1.1360823464
xenon	2.5			-3.8227178129	3.8416395351
R-116	4.0			-10.7088650331	8.9148979056
R-141b	4.0			-15.5074814985	9.1871858933
R-142b	4.0			-12.6016527149	8.3160183265
R-218	4.0			-15.6587335175	11.4531412796
R-245fa	4.0			-13.4283638514	9.8723653800
R-41	4.0	0.00016937	1.0	-4.8676441160	4.2527951258

Figura 3.4: Coefficienti dei vari fluidi per l'equazione dell'energia di Helmonz ideale adimensionale e del calore specifico ideale

Oltre a questo termine dovrà poi essere aggiunto il comportamento reale del fluido che verrà descritto utilizzando dei modelli di vario genere. Ad esempio in questo caso viene utilizzato un modello empirico che è solo in parte legato a informazioni teoriche. I coefficienti di tale modello dipendono soprattutto dai dati sperimentali che rappresentano le proprietà sperimentali di ogni fluido. La formula funzionale comunemente usata per la parte reale dell'energia di Helmonz è:

$$\alpha_r(\delta, \tau) = \sum n_k \delta^{i_k} \tau^{j_k} + \sum n_k \delta^{i_k} \tau^{j_k} e^{-\delta^{l_k}} \quad (3.18)$$

Dove ogni sommatoria tipicamente contiene tra i 4 e i 20 termini e l'indice  $k$  va ad indicare ogni termine dell'equazione. I valori  $i_k, j_k, l_k$  sono arbitrari, tuttavia in generale  $j_k$  è maggiore di zero e  $i_k, l_k$  sono interi maggiori di zero. Si avranno quindi due equazioni di 12 termini che rappresentano le proprietà termodinamiche dei fluidi non polari. L'equazione per fluidi non polari (o debolmente polari) può essere applicata a monossido di carbonio, solfuro di carbonile, decano, acido solfidrico, isopentano, isoexano, neopentano, krypton, nonano, toluene, xenon e esafluoroetano. La forma funzionale risulta essere:

$$\begin{aligned} \alpha^r(\delta, \tau) = & n_1 \delta \tau^{0.25} + n_2 \delta \tau^{1.125} + n_3 \delta \tau^{1.5} + n_4 \delta^2 \tau^{1.375} + \\ & n_5 \delta^3 \tau^{0.25} + n_6 \delta^7 \tau^{0.875} + n_7 \delta^2 \tau^{0.625} e^{-\delta} + n_8 \delta^5 \tau^{1.75} e^{-\delta} + n_9 \delta \tau^{3.625} e^{-\delta^2} + \\ & + n_{10} \delta^4 \tau^{3.625} e^{-\delta^2} + n_{11} \delta^3 \tau^{14.5} e^{-\delta^3} + n_{12} \delta^4 \tau^{12} e^{-\delta^3} \end{aligned} \quad (3.19)$$

L'equazione per fluidi polari può essere applicata per acetone, ossido di diazoto, 1,1-dichloro-1-fluoroethano (R-141b), 1-chloro-1,1-difluoroethane (R-142b), octafluoropropane (R-218), 1,1,1,3,3-pentafluoropropane (R-245fa) e

fluoromethane (R-41). La forma funzionale può essere scritta come:

$$\begin{aligned} \alpha^r(\delta, \tau) = & n_1\delta\tau^{0.25} + n_2\delta\tau^{1.25} + n_3\delta\tau^{1.5} + n_4\delta^3\tau^{0.25} + \\ & n_5\delta^7\tau^{0.875} + n_6\delta\tau^{2.375}e^{-\delta} + n_7\delta^2\tau^2e^{-\delta} + n_8\delta^5\tau^{2.125}e^{-\delta} + n_9\delta\tau^{3.5}e^{-\delta^2} + \\ & + n_{10}\delta\tau^{6.5}e^{-\delta^2} + n_{11}\delta^4\tau^{4.75}e^{-\delta^2} + n_{12}\delta^2\tau^{12.5}e^{-\delta^3} \end{aligned} \quad (3.20)$$

dove i coefficienti  $n_k$  sono tabulati per ogni fluido. Per esempio nel caso di fluidi polari:

$k$	acetone	nitrous oxide	sulfur dioxide	R-41
1	0.90041	0.88045	0.93061	0.85316
2	-2.1267	-2.4235	-1.9528	-2.6366
3	-0.083409	0.38237	-0.17467	0.69129
4	0.065683	0.068917	0.061524	0.054681
5	0.00016527	0.00020367	0.00017711	0.00012796
6	-0.039663	0.13122	0.21615	-0.37093
7	0.72085	0.46032	0.51353	0.33920
8	0.0092318	-0.0036985	0.010419	-0.0017413
9	-0.17217	-0.23263	-0.25286	-0.095417
10	-0.14961	-0.00042859	-0.054720	-0.078852
11	-0.076124	-0.042810	-0.059856	-0.030729
12	-0.018166	-0.023038	-0.016523	-0.011497

$k$	R-141b	R-142b	R-218	R-245fa
1	1.1469	1.0038	1.3270	1.2904
2	-3.6799	-2.7662	-3.8433	-3.2154
3	1.3469	0.42921	0.92200	0.50693
4	0.083329	0.081363	0.11360	0.093148
5	0.00025137	0.00024174	0.00036195	0.00027638
6	0.32720	0.48246	1.1001	0.71458
7	0.46946	0.75542	1.1896	0.87252
8	-0.029829	-0.007430	-0.025147	-0.015077
9	-0.31621	-0.41460	-0.65923	-0.40645
10	-0.026219	-0.016558	-0.027969	-0.11701
11	-0.078043	-0.10644	-0.18330	-0.13062
12	-0.020498	-0.021704	-0.021630	-0.022952

Figura 3.5: Coefficienti per la parte reale dell'equazione di stato per fluidi polari

Queste equazioni hanno un range di validità che dipende dal fluido considerato, ad esempio nel caso specifico del R245fa ci sarà un limite superiore di temperatura pari a 440 K e un limite superiore di pressione di 200 MPa. Un'alternativa a questo modello è quella di utilizzare il modello di Peng-Robinson anche nel calcolo della parte reale dell'energia di Helmonz e delle sue derivate. Una volta scritta la formulazione dell'energia libera di Helmonz come somma di una parte reale e una parte immaginaria è possibile esprimere tutte le proprietà termodinamiche del fluido come derivate dell'energia di Helmonz. In particolare:

$$Z = \frac{p}{\rho RT} = 1 + \delta \left( \frac{\partial \alpha^r}{\partial \delta} \right)_\tau \quad (3.21)$$



$$\frac{e}{RT} = \tau \left[ \left( \frac{\partial \alpha^0}{\partial \tau} \right)_\delta + \left( \frac{\partial \alpha^r}{\partial \tau} \right)_\tau \right] \quad (3.22)$$

$$\frac{h}{RT} = \tau \left[ \left( \frac{\partial \alpha^0}{\partial \tau} \right)_\delta + \left( \frac{\partial \alpha^r}{\partial \tau} \right)_\delta \right] + \delta \left( \frac{\partial \alpha^r}{\partial \delta} \right)_\tau + 1 \quad (3.23)$$

$$\frac{s}{R} = \tau \left[ \left( \frac{\partial \alpha^0}{\partial \tau} \right)_\delta + \left( \frac{\partial \alpha^r}{\partial \tau} \right)_\delta \right] - \alpha^0 - \alpha^r \quad (3.24)$$

$$\frac{g}{RT} = 1 + \alpha^0 + \alpha^r + \delta \left( \frac{\partial \alpha^r}{\partial \delta} \right)_\tau \quad (3.25)$$

$$\frac{c_v}{R} = -\tau^2 \left[ \left( \frac{\partial^2 \alpha^0}{\partial \tau^2} \right)_\delta + \left( \frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \tau^2} \right)_\delta \right] \quad (3.26)$$

$$\frac{c_p}{R} = \frac{c_v}{R} + \frac{\left[ 1 + \delta \left( \frac{\partial \alpha^r}{\partial \delta} \right)_\tau - \delta \tau \left( \frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \delta \partial \tau} \right) \right]^2}{\left[ 1 + 2\delta \left( \frac{\partial \alpha^r}{\partial \delta} \right)_\tau + \delta^2 \left( \frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \delta^2} \right)_\tau \right]} \quad (3.27)$$

Nello sviluppo delle seguenti equazioni di stato risulta fondamentale possedere più dati possibili. Infatti, poiché a partire da una singola equazione è possibile rappresentare molte proprietà, una bassa accuratezza in una proprietà può influenzare il comportamento di un'altra. In particolare è fondamentale possedere quante più informazioni sul calore specifico, viceversa le equazioni potrebbero inavvertitamente portare ad ottenere calori specifici negativi a basse temperature o mostrare una curvatura non realistica in alcune aree della superficie termodinamica. Nonostante la scarsa disponibilità di dati, basta avere qualche valore del calore specifico nella zona di fase liquida per ottenere un'equazione con forma funzionale fissa. Ricavare i coefficienti dell'equazione risulta quindi essere un processo che correla una serie di dati sperimentali con un modello che è generalmente empirico. Per trovare i coefficienti dell'equazione sono state utilizzate tecniche di data-fitting non lineare, dove i dati utilizzati per il tale operazione sono una serie di valori rappresentativi di quelli misurati con maggiore accuratezza. L'algoritmo non lineare utilizzato ricava dunque i coefficienti dell'equazione andando a rendere minima la somma dei quadrati delle deviazioni tra le proprietà calcolate e i dati di input e, inoltre, si sono poste a zero la derivata prima e seconda della pressione rispetto alla densità nel punto critico. Il set finale di coefficienti ottenuti e utilizzati nell'equazione non rappresenta solamente i dati che vengono utilizzati per il data-fitting, ma anche una consistente quantità di dati disponibili per ogni fluido.

### 3.3 Calcolo della viscosità

Per quanto riguarda le proprietà termodinamiche in letteratura sono disponibili molti modelli che ne permettono il calcolo in funzione di densità e temperatura e con i quali è possibile calcolare tutta l'estensione della zona termodinamica, compresi regimi di fluido sottoraffreddato, saturo, sovrariscaldato e supercritico. Invece per quanto riguarda il calcolo delle proprietà di trasporto non vi sono modelli altrettanto ben sviluppati, anche per le difficoltà nell'ottenere dati sperimentali in tutti i range di densità e temperatura. In particolare in letteratura sono presenti modelli basati su dati empirici, ma questi risultano limitati a un piccolo range di temperature e pressioni e sono utilizzabili solo nel caso di fluidi puri. Vi sono poi metodi con fondamenti teorici come quelli di Tham e Gubbins [17] o Doan e Brunet [18] ma essi risultano limitati alla fase liquida e richiedono la conoscenza di parametri che non sempre sono disponibili per il fluido di interesse.

Il metodo più avanzato per la previsione della viscosità consiste nel modello ECS (extended corresponding states) pubblicato nel 1981 da Ely e Hanley [19]. Questo approccio funziona molto bene per fluidi non polari in tutto il range di densità ma è limitato a pochi fluidi. Questo metodo non risulta però adeguato a idrocarburi fortemente legati e a fluidi polari in quanto non riesce a rappresentare i cambiamenti significativi di energia interna, forma e orientazione durante i processi di trasporto. In seguito sono state proposte svariate modifiche al modello di Ely e Hanley con lo scopo di migliorarne i risultati.

In particolare in questo caso si utilizza il modello di Klein, McLinden e Laesecke [20] lo si applica a fluidi puri (Huber, Laesecke, Perkins [21]) usati come refrigeranti al fine di calcolare la viscosità dell'R245fa, che è il fluido di nostro interesse. Questa modifica al metodo di Ely e Hanley elimina la possibilità di discontinuità nel punto critico per le miscele e migliora l'accuratezza ottenendo deviazioni medie dai dati sperimentali del 4%. Nello specifico, in questo modello si descrive la viscosità come funzione di densità e temperatura; scelta che risulta molto comoda dal punto di vista matematico in quanto la dipendenza dalla temperatura a densità costante è limitata mentre la pressione costante può essere molto grande. Per prima cosa è possibile calcolare la viscosità di un gas diluito utilizzando la teoria cinetica dei gas descritta da Reid, Prausitz [22]. Infatti se il gas si assume essere composto da particelle rigide di diametro  $\sigma$  si ottiene la seguente espressione per la viscosità:

$$\mu^{K.T.} = \frac{CT^{1/2}M^{1/2}}{\sigma^2} \quad (3.28)$$

Dove  $T$  è la temperatura assoluta,  $C$  una costante,  $M$  la massa molecolare. Questa teoria risulta essere applicabile solo a gas a bassa densità per i quali

le distanze intermolecolari sono grandi e di conseguenza l'interazione tra le molecole è trascurabile. Questo metodo si basa sull'approccio degli stati corrispondenti che esprime la viscosità in forma ridotta in modo che questa abbia valori simili per fluidi differenti nelle stesse condizioni ridotte. Le proprietà del punto critico possono essere utilizzate come valori di riferimento per ridurre le proprietà termodinamiche e si può fare analogamente con la viscosità:

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_c^{K.T.}} \quad (3.29)$$

Dalla teoria nella regione critica la viscosità di un fluido puro tende all'infinito in corrispondenza del punto critico, quindi quanto scritto nell'equazione 3.29 non ha significato fisico ma è utilizzata per arrivare al parametro teorico  $\mu_r$ . Dato inoltre che  $\sigma$ , detto parametro di Lennard-Jones, è la radice cubica del volume molecolare critico ( ovvero il volume specifico diviso per il numero di Avogadro) l'equazione 3.29 può anche essere scritta come:

$$\mu_r = \frac{\mu}{CN_A^{2/3} T_c^{1/2} M^{1/2} \rho_c^{2/3}} = f(T_R) \quad (3.30)$$

La teoria degli stati ridotti dice che la viscosità ridotta a una certa temperatura e densità ridotta deve essere uguale per ogni fluido, quindi applicando la precedente equazione a un fluido di riferimento e a quello di interesse è possibile scrivere:

$$\mu_j(T) = \mu_0 \left[ \frac{M_j}{M_0} \right]^{1/2} \left[ \frac{T_{c,j}}{T_{c,0}} \right]^{1/2} \left[ \frac{\rho_{c,j}}{\rho_{c,0}} \right]^{2/3} \quad (3.31)$$

dove  $j$  è il fluido di interesse e  $0$  il fluido di riferimento con viscosità nota su tutta la superficie termodinamica. La viscosità del fluido di riferimento  $\mu_0$  è valutata alla temperatura conforme  $T_0 = \frac{T_{c,0}}{T_{c,j}} T$  in modo da rappresentare lo stesso stato ridotto per tutti i fluidi. Quando però la densità aumenta le interazioni molecolari del fluido diventano importanti ed è quindi necessaria una correzione:

$$\mu(T, \rho) = \mu^*(T) + \Delta\mu(T, \rho) \quad (3.32)$$

Per quanto riguarda il termine di gas diluito è possibile scriverlo nella forma di Chapman-Enskog come:

$$\mu^*(T) = \frac{5\sqrt{\pi m k_b T}}{16\pi\sigma^2\Omega} \quad (3.33)$$

dove  $m$  è la massa molecolare,  $k_b$  è la costante di Boltzmann,  $T$  la temperatura assoluta e  $\Omega$  l'integrale di collisione che tiene conto delle iterazioni tra le forze intermolecolari e che risulta pari a:

$$\Omega = 1.16145(T^*)^{-0.14874} + 0.52487e^{-0.77320T^*} + 2.16178e^{-2.43787T^*} \quad (3.34)$$

con la temperatura adimensionale  $T^* = k_B T / \epsilon$ , dove  $\epsilon$  è la profondità della buca di potenziale. Il range di validità di tale correlazione empirica è  $0.3 < T^* < 100$ .

Il termine di Chapman-Enskog permette di ottenere ottimi risultati nel calcolo della viscosità per i refrigeranti in forma gassosa a bassa densità. Tuttavia per vapori densi e liquidi è necessario aggiungere il termine  $\Delta\mu(T, \rho)$ . Ipotizzando quindi che la viscosità rispetti la teoria degli stati corrispondenti:

$$\Delta\mu_j(T, \rho) = \Delta\mu_0 \left( T \frac{T_{c0}}{T_{cj}}, \rho \frac{\rho_{c0}}{\rho_{cj}} \right) \left[ \frac{M_j}{M_0} \right]^{1/2} \left[ \frac{T_{cj}}{T_{c0}} \right]^{1/2} \left[ \frac{\rho_{cj}}{\rho_{c0}} \right]^{2/3} \quad (3.35)$$

Vi sono poi una serie di autori tra cui gli stessi Ely e Hanley, Hwang e Whiting, Monnery, Huber e Ely, che raffinano questo approccio aggiungendo i rapporti ridotti equivalenti che vanno a sostituire i rapporti di temperatura e densità critica. Questi possono essere definiti come:

$$f = \frac{T_c}{T_{c0}} \theta \quad (3.36)$$

$$h = \frac{\rho_{c0}}{\rho_c} \phi \quad (3.37)$$

dove  $\theta$  e  $\phi$  sono detti fattori di forma. Si può quindi scrivere:

$$\mu(T, \rho) = \mu^*(T) + \Delta\mu(T, \rho) = \mu^*(T) + \Delta\mu_0 \left( \frac{T}{f}, \rho h \right) F_\mu \quad (3.38)$$

dove:

$$F_\mu = f^{1/2} h^{-2/3} \left( \frac{M}{M_0} \right)^{1/2} \quad (3.39)$$

con  $M$  massa molare del fluido di interesse e  $M_0$  massa molare del fluido di riferimento. Per migliorare il calcolo della viscosità può essere utilizzato un ulteriore fattore di correzione, nel caso siano disponibili dati sperimentali sulla viscosità. In tale caso si potrà valutare  $\rho_{0,v}$  invece di  $\rho_0$  dove:

$$\rho_{0,v}(T, \rho) = \rho_0(T, \rho) \psi(\rho_r) \quad (3.40)$$

e  $\psi$  è un polinomio funzione della densità ridotta:

$$\psi(\rho_r) = \sum_{k=0}^n c_k \rho_r^k \quad (3.41)$$

dove  $c_k$  sono delle costanti che possono essere ricavate fittando i dati sperimentali della viscosità.

In particolare per l'R245fa si avranno i seguenti coefficienti:

- $c_1 = 1.1529$
- $c_2 = -4.41540 \times 10^{-2}$
- $c_3 = 0$

I fattori di forma, in generale, sono funzione di densità e temperatura. Questi risultano avere valore unitario per molecole piccole, non polari e quasi-sferiche, mentre si discostano da 1 con altri tipi di fluidi. Nei fluidi reali infatti si ha una leggera deviazione dei fattori di forma perchè i potenziali intermolecolari non sono strettamente conformi come si teorizza con gli stati corrispondenti e inoltre la molecola può essere polare e non possedere una simmetria esattamente sferica.

Per determinare i fattori di forma sono stati utilizzati diversi approcci. Un primo approccio è quello di rappresentare i fattori di forma come funzioni di temperatura e densità ridotta, fattore acentrico e fattore di compressibilità critico (Leach 1967): questo approccio risulta però adeguato solo agli idrocarburi utilizzando il metano come fluido di riferimento. Vi sono poi altre approssimazioni come quella di Huber e Ely per refrigeranti alternativi e quella di Clarke per il sistema di ( $N_2 + Ar + O_2$ ) e aria [23]. Tuttavia questi approcci non risultano accurati a causa dell'eccessiva approssimazione nella rappresentazione dei fattori di forma. Vi è poi una recente formulazione di Estela-Uribe (2003) [24] che sfrutta il miglioramento nella quantità e nella qualità dei dati sperimentali per definire i fattori di forma di idrocarburi leggeri (dal metano all'n-pentano), etilene, nitrogeno, diossido di carbonio, monossido di carbonio, ossigeno e argon. Infine si può utilizzare l'approccio esatto per calcolare i fattori di forma; questi infatti possono essere determinati in maniera esatta per ogni fluido rispetto al fluido di riferimento risolvendo simultaneamente le due equazioni conformi:

$$\Delta a_j(T, \rho) = \Delta a_0(T/f, \rho h) \quad (3.42)$$

$$Z_j(T, \rho) = Z_0(T/f, \rho h) \quad (3.43)$$

dove  $\Delta a$  è l'energia libera residua ridotta di Helmonz:

$$\Delta a(T, \rho) = \frac{A(T, \rho) - A^*(T, \rho)}{RT} \quad (3.44)$$

dove  $A$  è l'energia libera di Helmonz, mentre  $A^*$  è l'energia libera di Helmonz che si avrebbe se il fluido seguisse la legge di gas ideale a quella temperatura e densità.  $Z$  è invece il fattore di comprimibilità:

$$Z = \frac{P}{RT\rho} \quad (3.45)$$

La soluzione di queste equazioni simultaneamente è molto semplice dal punto di vista teorico, ma risulta complicata dal punto di vista pratico. Per farlo sarebbe necessaria una procedura iterativa per determinare contemporaneamente  $h$  e  $f$ . Si creano inoltre delle complicazioni quando si è a basse e alte densità. Infatti a basse densità ci si avvicina al comportamento di gas ideale e quindi le equazioni conformi tendono alla singolarità, mentre man mano che la densità aumenta le equazioni diventano sempre più funzione di  $h$  e  $f$ , il che può complicare il metodo iterativo. Nel caso specifico dell'espansore a palette scorrevoli il valore di viscosità non influisce molto ai fini del calcolo della potenza ottenuta; di conseguenza con lo scopo di rendere il codice computazionalmente più leggero si pongono i fattori di forma pari a 1, accettando una leggera perdita di accuratezza nel calcolo della viscosità. Come detto in precedenza, per valutare la viscosità di un particolare fluido, è necessario avere il valore della viscosità residua del fluido di riferimento. Non è però necessario utilizzare lo stesso fluido per tutti i refrigeranti, ma è intuitivo che la scelta migliore sia quella di utilizzare un fluido chimicamente simile al fluido di interesse. Per questa ragione l'R134a risulta essere un buon candidato come fluido di riferimento per calcolare la viscosità di Clorofluorocarburi (CFC e HCFC) e Idrofluorocarburi (HFC), dato inoltre che le sue proprietà termodinamiche e di trasporto sono ben note. Bisogna però tenere conto che per stimare le proprietà di un particolare fluido a basse temperature ridotte, è necessario che l'equazione di stato del fluido di riferimento sia valida alle stesse temperature ridotte. L'R134a ha un campo relativamente ridotto  $0.45 < T/T_c < 1$ , il che limita la stima a basse temperature. Se però si utilizza la correzione empirica con il coefficiente  $\psi$ , il requisito di avere un fluido di riferimento chimicamente simile a quello di interesse non risulta essere poi così importante. In questo caso è allora possibile utilizzare il propano come fluido di riferimento per fluidi dove è necessario un campo ampio e per i quali è possibile ottenere il fattore  $\phi$ ; così il range risulta essere più ampio  $0.23 < T/T_c < 1$ .

In questo caso specifico, l'R134a risulta essere adeguato come fluido di riferimento per il calcolo della viscosità dell'R245fa. In particolare, il calcolo della viscosità dell' R134a è stato inizialmente sviluppato da Huber e Ely e Krauss per un ampio range di densità e temperature; tuttavia il calcolo non risulta essere affidabile in quanto basato su dati sperimentali molto limitati e soggetti a errori dovuti a impurità dei campioni, analisi dei dati incompleta ed errori sistematici. Klein [20] ha poi proposto un miglioramento nella correlazione della viscosità utilizzando dati più accurati e includendo un maggior numero di termini funzionali di base teorica, tuttavia la sua affidabilità rimane limitata a causa del range di densità non sufficientemente ampio. Negli anni successivi svariati autori hanno effettuato misure per colmare il divario

e ottenere dati più affidabili. Huber, Laesecke e Perkins(2003) sulla base di una revisione della letteratura e su dati sperimentali di vari autori hanno individuato una correlazione per la viscosità valida in un range che va da 213 a 438 K e fino a 30 MPa.

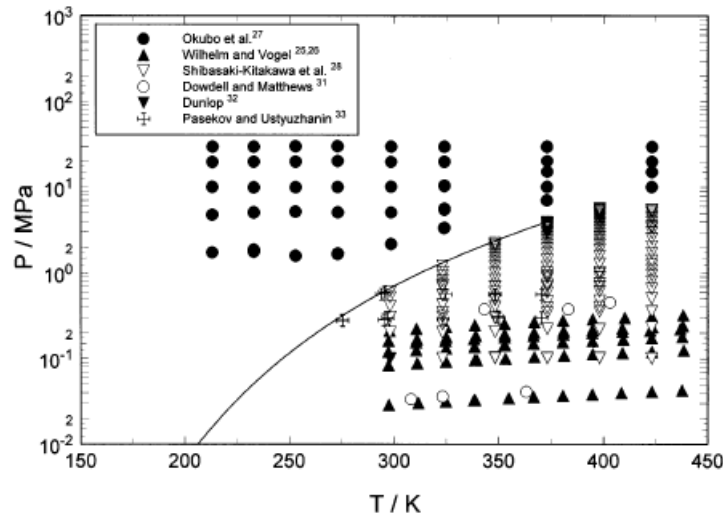


Figura 3.6: Distribuzione dei dati sperimentali per l'R134a utilizzati per lo sviluppo della correlazione

La forma funzionale sviluppata, e utilizzata in questo caso correla la viscosità  $\mu$ , funzione di temperatura  $T$  e densità  $\rho$ , utilizzando il concetto di residuo:

$$\mu(\rho, T) = \mu^*(T)[1 + B_\mu(T)\rho] + \Delta_H\mu(\rho, T) + \Delta_C\mu(\rho, T) \quad (3.46)$$

dove il primo termine  $\mu^*(T)$  rappresenta la viscosità a basse densità e la prima dipendenza lineare dalla densità la cui variazione con la temperatura è contenuta nel secondo coefficiente viriale  $B_\mu(T)$ . Termini con dipendenza dalla densità di ordine superiore sono rappresentati da  $\Delta_H\mu(\rho, T)$ , mentre l'aumento della viscosità in corrispondenza della regione critica è contenuto nel termine  $\Delta_C\mu(\rho, T)$ , dato che la viscosità di un fluido puro nel punto critico è teoricamente infinita.

Tuttavia l'aumento critico avviene in una zona notevolmente ristretta dove non si ha disponibilità di dati sperimentali e dove quindi non risulta possibile stabilire l'entità di  $\Delta_C\mu(\rho, T)$ ; si pone quindi il termine di aumento pari a zero. Per quanto riguarda la viscosità a bassa densità si può utilizzare la seguente forma:

$$\mu^*(T) = \frac{0.021357\sqrt{MT}}{\sigma_\mu^2\theta_\mu^*(T^*)} \quad (3.47)$$

dove la viscosità risulta essere in microPascal per secondi,  $M$  è la massa molare pari a  $102.031 \text{ kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$ , la temperatura  $T$  in Kelvin, il parametro  $\sigma$  in nanometri e  $T^* = K_B T / \epsilon$  con  $\frac{\epsilon}{k_B} = 299.363 \pm 6.98$ . Per quanto riguarda  $\theta_\mu^*$  si può scrivere:

$$\ln \theta_\mu^* = \sum_{i=0}^n a_i (\ln T^*)^i \quad (3.48)$$

dove i parametri  $a_i$  vengono ricavati dai dati sperimentali e in particolare in questo caso assumono i seguenti valori:

- $a_0 = 0.355404 \pm 0.14$
- $a_1 = -0.464337 \pm 0.54 \times 10^{-2}$
- $a_2 = 0.257353 \times 10^{-1} \pm 0.011$

A basse densità la dipendenza della viscosità dalla densità è inizialmente lineare.

La variazione con la temperatura di questa dipendenza dalla densità è rappresentata dal secondo coefficiente viriale:

$$B_\mu(T) = N_A \sigma^3 B_\mu^*(T^*) \quad (3.49)$$

dove  $N_A$  è il numero di Avogadro e  $B_\mu^*$  si può scrivere come:

$$B_\mu^*(T^*) = \sum_{i=0}^8 b_i (T^*)^{t_i} \quad (3.50)$$



dove i parametri  $b_i$  e  $t_i$  dipendono dal fluido considerato e sono tabulati:

$i$	$b_i$	$t_i$
0	-19.572881	0
1	219.73999	-0.25
2	-1015.3226	-0.50
3	2471.0125	-0.75
4	-3375.1717	-1.00
5	2491.6597	-1.25
6	-787.26086	-1.50
7	14.085455	-2.50
8	-0.34664158	-5.50

Tabella 3.7: Parametri per calcolare il secondo coefficiente viriale

Per quanto riguarda i termini di ordine superiore nell'equazione 3.46,  $\Delta_H\mu(\rho, T)$ , si ha una formulazione in funzione di densità ridotta  $\delta = \frac{\rho}{\rho_c}$  e temperatura ridotta  $\tau = \frac{T}{T_c}$  dove  $\rho_c = 511.9 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  e  $T_c = 374.21 \text{ K}$ .

$$\Delta_H\mu(\rho, T) = c_1\delta + \left( \frac{c_2}{\tau^6} + \frac{c_3}{\tau^2} + \frac{c_4}{\sqrt{\tau}} + c_5\tau^2 \right) \delta^2 + c_6\delta^3 + \frac{c_7}{\delta_0(\tau) - \delta} - \frac{c_7}{\delta_0(\tau)} \quad (3.51)$$

con:

$$\delta_0(\tau) = \frac{c_1\tau}{1 + c_8\tau + c_9\tau^2} \quad (3.52)$$

dove i parametri  $c_i$  sono stati individuati a partire dai dati sperimentali e sono tabulati per l'R134a.

$i$	$c_i$	$\pm s_i$
1	$-0.206900719 \times 10^{-1}$	$0.21 \times 10^{-2}$
2	$0.356029549 \times 10^{-3}$	$0.59 \times 10^{-4}$
3	$0.211101816 \times 10^{-2}$	$0.93 \times 10^{-3}$
4	$0.139601415 \times 10^{-1}$	$0.16 \times 10^{-2}$
5	$-0.456435020 \times 10^{-2}$	$0.73 \times 10^{-3}$
6	$-0.351593275 \times 10^{-2}$	$0.54 \times 10^{-3}$
7	0.214763320	$0.26 \times 10^{-1}$
8	$-0.890173375 \times 10^{-1}$	$0.47 \times 10^{-1}$
9	0.100035295	$0.23 \times 10^{-1}$
10	3.163695636	$0.52 \times 10^{-1}$

Tabella 3.8: Parametri per calcolare il termine ad con dipendenza di ordine superiore

Una volta calcolata la viscosità del fluido di riferimento è possibile calcolare la viscosità del fluido di interesse tramite la formula (3.46). Per applicare tale formula saranno necessari alcuni parametri specifici per il fluido. In particolare sarà possibile stimare i parametri di Lennard-Jones tramite le seguenti formule:

$$\frac{\epsilon}{k_B} = \frac{\epsilon_0}{K_B} \frac{T_c}{T_{c0}} \quad (3.53)$$

$$\sigma = \sigma_0 \left( \frac{\rho_c}{\rho_{c0}} \right)^{1/3} \quad (3.54)$$

dove  $\epsilon_0$  e  $\sigma_0$  sono i parametri del fluido di riferimento. Saranno inoltre necessari i parametri critici del fluido di interesse, tabulati per l'R245fa.

# Capitolo 4

## Implementazione dei Modelli

### 4.1 Il software OpenFOAM

Per simulare il comportamento dell'espansore volumetrico a palette scorrevoli nella maniera più realistica possibile risulta necessario utilizzare una simulazione CFD. A tale scopo si utilizza il software opensource *OpenFoam 2.2.x* (Open Source Field Operation and Manipulation) [25],[26]. Questo programma permette la creazione di oggetti nel linguaggio di programmazione C++ che, una volta compilati, vanno a generare delle librerie. Queste librerie potranno poi essere utilizzate dalle varie applicazioni con lo scopo di simulare adeguatamente il problema. La struttura generale di OpenFoam consiste in tre piattaforme:

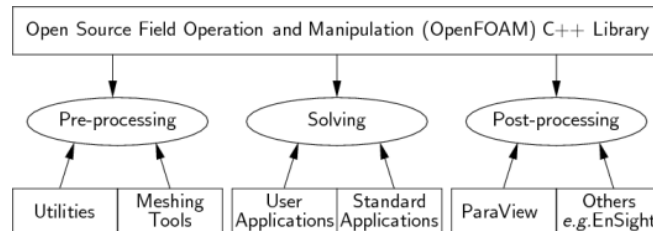


Figura 4.1: OpenFoam

- pre-processing: è la prima fase di risoluzione del problema. In questo stadio si utilizzano una serie di utilities per andare a definire il caso in oggetto. In particolare:
  - si definisce la geometria del problema, ovvero il *dominio* nel quale andranno risolte le equazioni che governano il problema;
  - si realizza la *mesh*, ovvero si suddivide il dominio in tanti sottodomini;

- si definiscono le proprietà del fluido;
  - si selezionano i modelli fisico-chimici da utilizzare nella modellazione del processo;
  - si specificano condizioni al contorno e condizioni iniziali.
- solving: si utilizza l’opportuno solutore per simulare il caso in esame. Durante questo processo si hanno diverse fasi:
    - si integrano le equazioni che governano il problema sui volumi di controllo del dominio di calcolo;
    - si discretizzano le equazioni con l’approssimazione più adeguata;
    - si risolvono le equazioni algebriche con metodi iterativi.
  - post-processing: si analizzano i risultati utilizzando varie utilities come ad esempio:
    - visualizzazione del dominio e della mesh;
    - generazione e visualizzazione di grafici e risultati.

Per la macchina rotativa oggetto di questa tesi, stata utilizzata una libreria specifica al caso sulle basi di *OpenFoam-2.x.x*. Questa libreria contiene tutte le classi, le utilities e le applicazioni necessarie alla simulazione ed è inoltre stata ampliata con i modelli necessari per tenere conto dell’effetto di gas reale e con i modelli di trafilamento. La libreria contiene al suo interno una serie di directory e la sua struttura può essere sintetizzata come segue:

- una directory contenente le classi necessarie allo sviluppo di solutori e utilities (*src*);
- una directory contenente i dati necessari per la compilazione e ulteriori informazioni come ad esempio le tabelle contenenti i dati termodinamici (*etc*);
- una directory contenente le utilities e i solutori necessari a tutte le fasi del processo risolutivo (*applications*);
- una directory contiene i tutorials per la risoluzione del problema con differenti strategie (*tutorials*).

In particolare nella directory contenente le classi utili ai solutori e alle utilities si possono distinguere due parti principali:

- una parte contenente tutte le classi necessarie per ridefinire il tempo da secondi ad angoli e per la gestione del movimento della mesh (*rotaryMachine*);
- una parte contenente tutti i modelli termodinamici necessari per la descrizione del gas. In particolare verranno implementati dei modelli che permetteranno il calcolo delle proprietà termodinamiche considerando gli effetti di gas reale dell'R245fa. Oltre all'implementazione dei modelli è anche contenuta una classe che, date le tabelle coi dati termodinamici contenute nell'apposita cartella, permette di leggere la proprietà di interesse per un certo valore di pressione e temperatura (*thermophysicalModels*).

Per quanto riguarda invece il solutore è stato creato uno ad hoc per il caso specifico. Tale solutore permette di risolvere le equazioni che governano il problema utilizzando le strategie di movimento della mesh che sono state sviluppate. Vi sono poi una serie di utilities che svolgono una serie di compiti specifici. Tra le più importanti possiamo ricordare:

- un'utility di pre-processing che crea dinamicamente la mesh al variare degli angoli del rotore, testando continuamente la qualità della mesh (*rotaryMachinedynamicSetup*);
- un'utility permette di lanciare il caso e rimappa automaticamente i campi ogni qualvolta avvenga il cambio da una mesh all'altra (*runMultiMeshCase*);
- un'utility di post-processing che permette di calcolare l'output di potenza della macchina (*postRotaryMachine*);
- un'utility muove la mesh finchè il controllo della qualità della stessa non fallisce (*moveRotaryMachine*).

Grazie a questo insieme di solutori e applicazioni è possibile lanciare il caso e andare a simulare il comportamento della macchina al variare delle condizioni operative.

In particolare per poter lanciare operativamente un caso sarà necessaria la presenza di due directory:

- una cartella che contiene tutte le mesh necessarie al calcolo, che vengono generate utilizzando l'apposita utility (*meshes*);
- la vera e propria cartella contenente il caso (*run0*). Nella subdirectory *0* verranno definite le condizioni iniziali e al contorno delle grandezze

di interesse; nella subdirectory *constant* verranno definite le proprietà termodinamiche del gas, i modelli utilizzati per calcolarle, l'eventuale modello di turbolenza, il numero di giri/min della macchina e la geometria del profilo; nella subdirectory *system* verranno definiti gli schemi risolutivi, il modo in cui si approssimano le equazioni, i coefficienti del modello di trafilamento e il tempo per cui si vuole fare durare la simulazione. Durante la risoluzione del caso verrà inoltre generata un'ulteriore directory di post-processing che conterrà alcune grandezze di interesse

## 4.2 Calcolo della densità nella libreria

Per quanto riguarda il calcolo della densità sono state implementate nella libreria in questione la legge di Peng-Robinson e la legge di Redlich-Kwong-Soave.

L'equazione di Peng-Robinson e l'equazione RKS come visto sono di tipo cubico e quindi per il teorema fondamentale dell'algebra ammettono tre soluzioni tra cui possono esservi anche risultati complessi a seconda del fatto che la quantità sotto radice sia positiva o negativa. Per trovare il corretto valore del volume specifico  $v$  ci si riferisce al seguente schema:

In generale un'equazione di terzo grado assume la forma:

$$Ax^3 + Bx^2 + Cx + D = 0 \quad (4.1)$$

prendendo a titolo di esempio l'equazione di Peng-Robinson i coefficienti A,B,C,D valgono rispettivamente:

$$A = P \quad (4.2)$$

$$B = Pb - RT \quad (4.3)$$

$$C = -3Pb^2 - 2bRT + \alpha(T)a \quad (4.4)$$

$$D = Pb^3 + b^2RT - \alpha(T)ab \quad (4.5)$$

Applicando adesso la seguente sostituzione:  $x = y - \frac{b}{3a}$

Ci si può ricondurre alla forma:

$$y^3 + py + q = 0 \quad (4.6)$$

dove:

$$p = \frac{c}{a} - \frac{b^2}{3a^2} \quad (4.7)$$

$$q = \frac{d}{a} - \frac{bc}{3a^2} + \frac{2b^3}{27a^3} \quad (4.8)$$

si ottiene così un'equazione nella forma precedentemente descritta le cui soluzioni sono  $y=u+v$  dove  $u$  e  $v$  sono le radici:

$$u = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \quad (4.9)$$

$$v = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \quad (4.10)$$

la formula per calcolare le radici è quindi:

$$y = u + v = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \quad (4.11)$$

Analizziamo ora come variano le radici al variare della quantità che sta sotto le radici quadrate, che chiameremo  $\Delta$ :

$$\Delta = \frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27} \quad (4.12)$$

**1° caso:**  $\Delta > 0$

In tal caso si hanno due soluzioni complesse e una reale:

$$\begin{aligned} y_1 &= u + v \\ y_2 &= u\left(-\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + v\left(-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \\ y_3 &= u\left(-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + v\left(-\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Tra queste l'unica accettabile per il nostro caso è quella reale

$$y = u + v$$

**2° caso:**  $\Delta < 0$

In tal caso si hanno tre soluzioni reali:

$$y_1 = 2\sqrt{\frac{p}{3}} \cos \frac{\theta}{3}$$

$$\begin{aligned}
 y_2 &= 2\sqrt{\frac{p}{3}} \cos \frac{\theta + 2\pi}{3} \\
 y_3 &= 2\sqrt{\frac{p}{3}} \cos \frac{\theta + 4\pi}{3}
 \end{aligned}
 \tag{4.14}$$

Dove  $\theta$  dipende dal segno di  $Q$

- se  $-\frac{q}{2} > 0$        $\theta = \arctan\left(\frac{-2\sqrt{-\Delta}}{q}\right)$
- se  $-\frac{q}{2} < 0$        $\theta = \arctan\left(\frac{-2\sqrt{-\Delta}}{q}\right) + \pi$

Tra queste, poiché si parla del volume specifico di un gas, si seleziona quella più grande

**3° caso:**  $\Delta = 0$

In tal caso si hanno tre soluzioni reali di cui due coincidenti

$$\begin{aligned}
 y_1 &= -2\sqrt[3]{\frac{q}{2}} \\
 y_2 &= y_3 = \sqrt[3]{\frac{q}{2}}
 \end{aligned}
 \tag{4.15}$$

Tra queste l'unica accettabile è quella positiva

Per quanto riguarda l'implementazione delle equazioni di stato si fa riferimento all'appendice A.

### 4.3 Calcolo dell'entalpia nella libreria

Una volta selezionato il modello da utilizzare risulta necessario implementarlo nella libreria al fine di poterlo utilizzare nelle simulazioni. Per quanto riguarda il procedimento pratico dell'implementazione si fa riferimento all'appendice A. Una volta implementate le funzioni e compilato il codice sarà possibile utilizzare il modello sopra descritto che può andare a sostituire il modello tipicamente utilizzato *hConst*. Si sono confrontati i risultati ottenuti da i due modelli implementati con i dati disponibili dal database online NIST e con quelli ottenuti dal software di calcolo *refprop* utilizzato dal NIST. Per tale confronto si è considerata una pressione di 20 bar e un range di temperatura di 400 - 500 K, in maniera da essere in una zona in cui gli effetti di gas reale sono rilevanti. In figura sono riportati i risultati ottenuti nel calcolo dell'entalpia sensibile  $h_s$  e del calore specifico a pressione costante  $c_p$ .



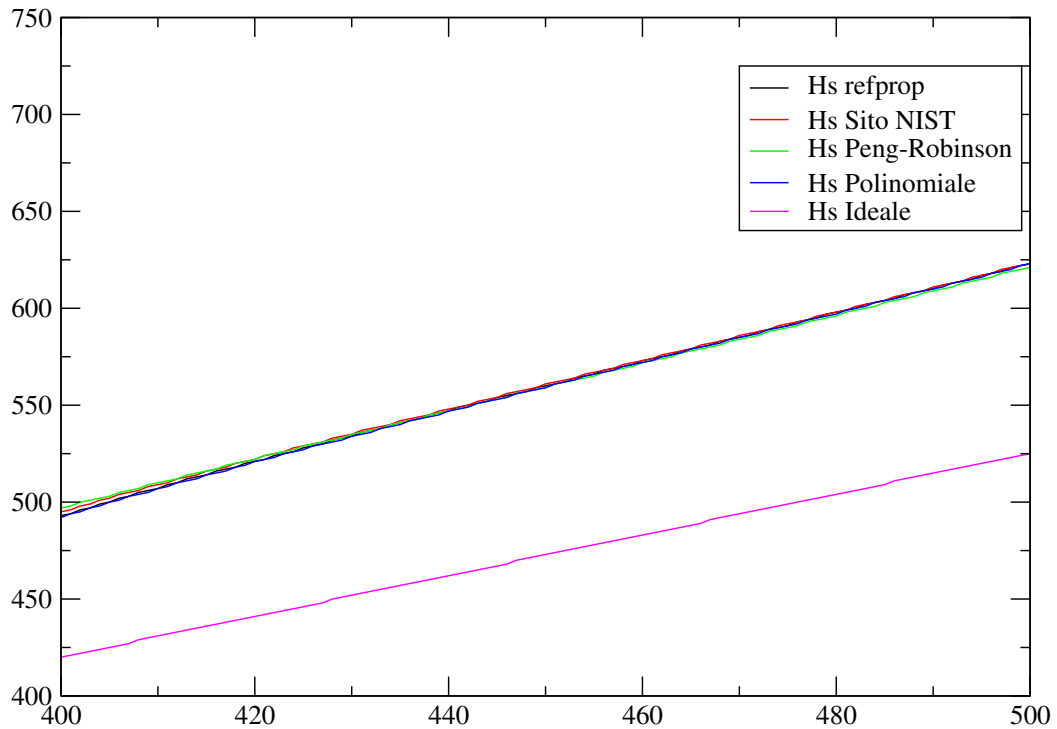


Figura 4.2: Confronto tra i valori dell'entalpia sensibile calcolato con vari modelli

Per quanto riguarda i valori ottenuti dal calcolo di entalpia sensibile in Figura 4.2 si può osservare come siano quasi coincidenti con quelli ottenuti dal sito NIST e dal *refprop* e che rappresentano un sensibile miglioramento rispetto al calcolo ottenuto con il modello a  $h$  costante.

Nel calcolo dei calori specifici in Figura 4.3 si può notare che la proprietà ricavata dal sito NIST e quella calcolata con il *refprop* differiscono probabilmente a causa di diverse versioni del software (rispettivamente 7.0 e 9.0). Il calcolo del calore specifico tramite il modello polinomiale risulta quello che si avvicina più ai dati del *refprop* e di conseguenza, sarà quello utilizzato nelle simulazioni del caso in esame.

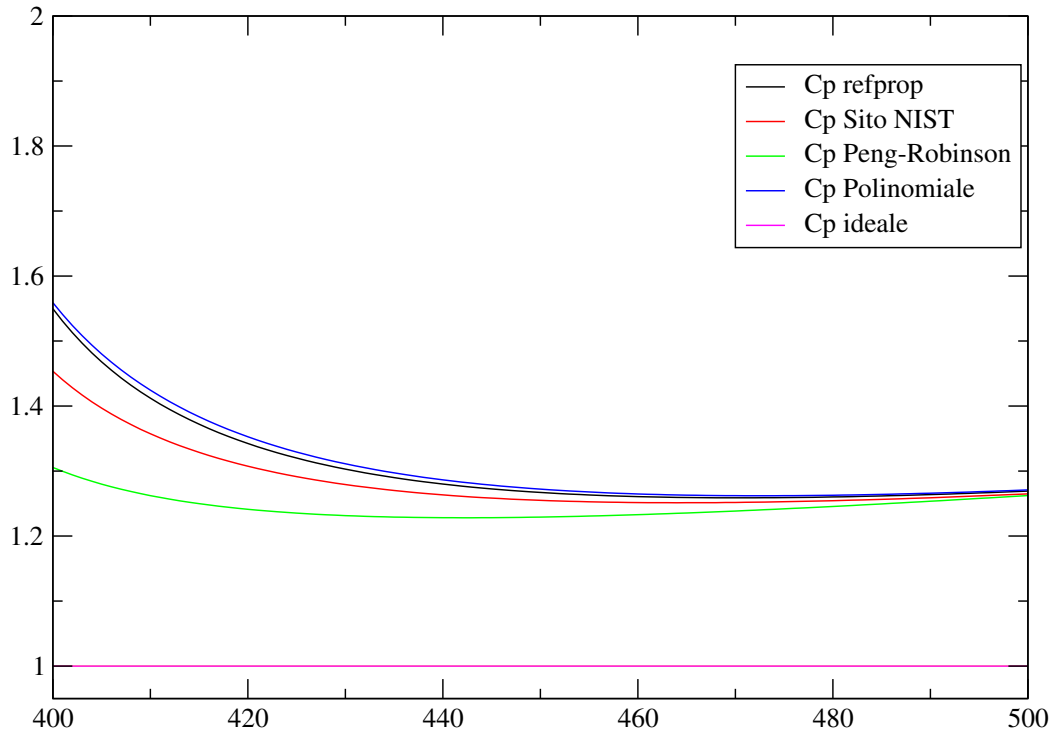


Figura 4.3: Confronto tra i valori del calore specifico a pressione costante calcolato con vari modelli

#### 4.4 Calcolo della viscosità nella libreria

Definito il modello che permette il calcolo della viscosità, lo si implementa nella libreria in modo da poterlo utilizzare nel caso dell'espansore a palette scorrevoli.

Il modello andrà ad affiancarsi a quelli già implementati in OpenFoam come ad esempio il modello a viscosità costante e il modello di Sutherland, che calcola la viscosità come dipendente dalla temperatura e da due parametri dipendenti dal fluido  $T_s$  e  $A_s$ , ovvero:  $\mu = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + T_s/T}$ . Per quanto riguarda il procedimento pratico di implementazione si fa riferimento all'appendice A. Una volta implementato e compilato il modello nella libreria è possibile utilizzarlo per il calcolo della viscosità.

Tale calcolo può essere confrontato con i valori ottenuti utilizzando la formula di Sutherland, con quelli ottenuti dal sito NIST e con quelli calcolati dal programma *refprop 9.0*.

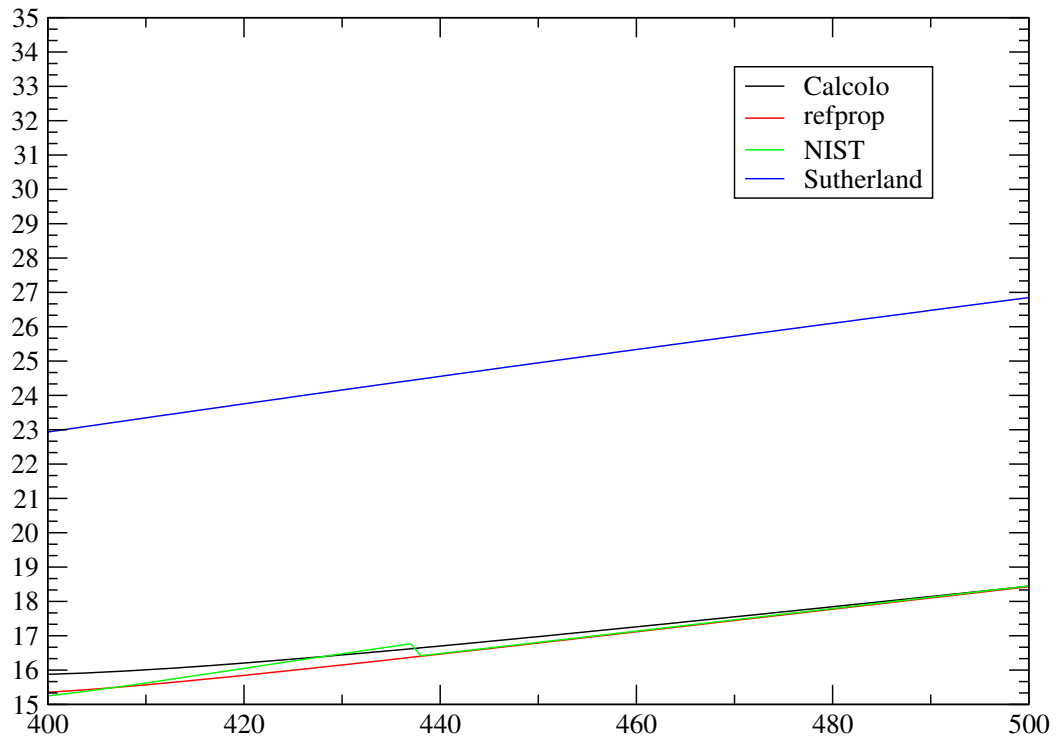


Figura 4.4: Calcolo della viscosità

Dalla Figura 4.4 è possibile notare come l'utilizzo della formula di Sutherland, data l'assenza di coefficienti specifici per il fluido, risulta sovrastimare notevolmente la viscosità. Per quanto riguarda i dati calcolati con il modello implementato in OpenFoam, esso risulta coerente con quanto ottenuto dal sito NIST e dal *refprop 9.0*, con qualche leggero scostamento a basse temperature.

# Capitolo 5

## Applicazione al caso di un espansore reale

Come anticipato in precedenza nel caso in esame si simulerà l'espansione di una macchina volumetrica utilizzata in un ciclo ORC. Tale macchina verrà modellata facendo particolare attenzione alla gestione del movimento e considerando gli effetti di gas reale e il trafilamento tra le estremità della pala e lo statore con opportuni modelli. Si effettueranno infine delle simulazioni a varie condizioni operative, che verranno poi confrontate con i risultati sperimentali.

### 5.1 Espansore a palette scorrevoli a doppio effetto

L'espansore oggetto dello studio di questa tesi è di tipo volumetrico a palette scorrevoli a doppio effetto, che risulta essere un buon compromesso tra efficienza e costo. Con lo scopo di rendere la macchina il più compatta possibile per poterla utilizzare in veicoli light-duty, l'espansore sarà di tipo assiale e composto da undici pale calettate in un rotore e contenute in uno statore ellittico. In questo modo si riesce ad ottenere un elevato rapporto di compressione e un'area di passaggio del flusso relativamente grande. Le pale si muovono sia in maniera solidale con il rotore, sia in direzione radiale in maniera da seguire il profilo dello statore. Ogni camera di espansione è formata da due pale successive, il rotore e lo statore. In direzione assiale la camera di espansione è sigillata con due piastre di copertura.

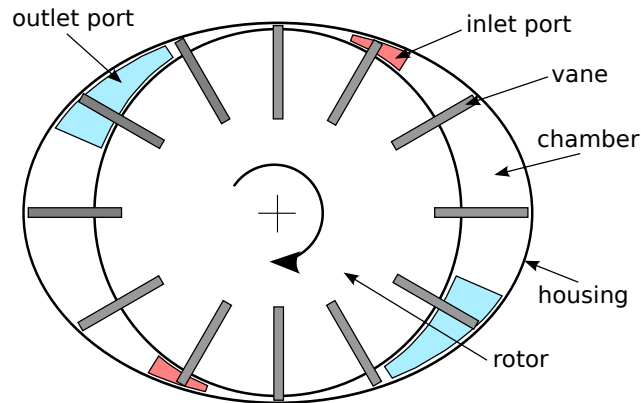


Figura 5.1: Espansore magnaSteyr

L'espansore possiede due porte di ingresso e due di uscita che si trovano opposte in modo da bilanciare le forze radiali agenti sui cuscinetti.

Il fluido ad alta pressione e temperatura entra nella camera attraverso le porte di ingresso e la camera viene riempita fino a che essa rimane collegata con la porta di ammissione. Durante la rotazione, a causa del profilo dello statore, il volume di ogni camera aumenta provocando una diversa pressione agente sulle varie pale. A causa di questo gradiente di pressione il rotore si mantiene in movimento. Poiché il volume delle camera aumenta all'aumentare dell'angolo di rotazione si avrà sempre che la pressione decresce dall'ingresso all'uscita facendo espandere il fluido e generando potenza meccanica che può essere estratta dall'albero. Una volta che il fluido nella camera raggiunge la stessa temperatura e pressione della porta di uscita l'espansione si può considerare conclusa e il fluido lascia la camera attraverso la porta di uscita. Dopo di che la camera viene riempita nuovamente e il processo ricomincia. Dato che la macchina è costituita da due cavità il processo di ammissione-espansione-espulsione avviene in  $180^\circ\text{C}$ , il processo si ripete per due volte ad ogni giro completo.

In questa applicazione la scelta aziendale è stata quella di utilizzare come fluido di lavoro il R245fa. Questo fluido è un HFC che risulta compatibile dal punto di vista ambientale rispetto agli HFC in quanto non danneggia lo strato di ozono dell'atmosfera. L'R245fa è però caratterizzato da grossi effetti di gas reale che si devono tenere in considerazione durante la simulazione. La modellazione CFD di tale di macchina risulta essere particolarmente difficoltosa in particolare sotto tre aspetti che verranno in seguito approfonditi:

- la gestione del movimento della mesh in modo da preservarne la qualità al variare dell'angolo;

- il trafilamento tra le pale rotoriche e lo statore;
- il calcolo delle proprietà termodinamiche del gas.

## 5.2 Generazione della mesh

Per quanto riguarda la mesh della sola macchina a palette scorrevoli, dato il tipo di macchina rotativa risulta necessario creare una mesh in grado di gestire la rotazione mantenendo la qualità della mesh. In particolare in questo caso si utilizzeranno una serie di mesh e si passerà da una all'altra quando risulta necessario, interpolando i campi delle grandezze ottenute dalla vecchia griglia a quella nuova. Ogni mesh verrà generata per un angolo specifico, dopo di che se ne imposta il movimento imponendo alle *patch* che costituiscono il contorno del rotore una composizione di rotazione rigida e traslazione radiale (dal momento che le palette sono libere di muoversi radialmente), mentre i punti interni della mesh si adatteranno al movimento del bordo. Durante questo processo la mesh verrà deformata e la sua qualità andrà peggiorando in termini di skewness e non-ortogonalità [27]. Questi parametri vengono monitorati fino a quando a causa dell'eccessiva deformazione, i valori di controllo non risultano più accettabili. A questo punto viene creata una nuova mesh corrispondente al nuovo angolo e la soluzione verrà mappata dalla vecchia mesh alla nuova interpolando i campi di interesse.

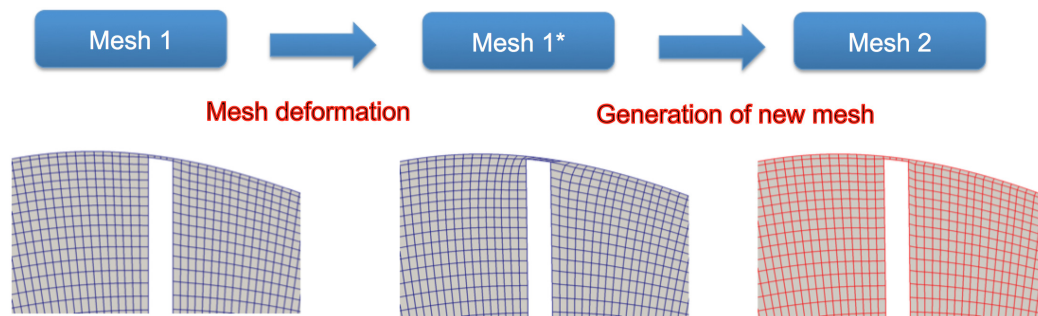


Figura 5.2: Gestione del movimento della mesh

Dato che la macchina è caratterizzata da una geometria molto piccola, l'angolo per il quale la mesh risulta valida è molto ridotto. Di conseguenza la mesh verrà generata automaticamente, mossa fino all'angolo per il quale i requisiti di qualità della mesh risultano soddisfatti e la posizione angolare per la quale si ha l'ultima mesh valida, diventa l'angolo di cambio mesh per il quale viene generata una nuova mesh. Per ridurre il tempo richiesto per generare la mesh è stata sviluppata una mesh di base parametrica che viene

utilizzata ogni volta che risulta necessario il cambio mesh. La mesh di base è di tipo strutturato in direzione radiale e viene creata in base all'angolo di rivoluzione utilizzando come base informazioni quali: il numero di pale, la dimensione della mesh e dei gap presenti. Tale mesh viene creata per ogni angolo al quale dovrà essere effettuato il cambio mesh, in modo da preservarne la qualità.

Una volta creata la mesh di base, a questa si sovrappone un file che descrive la geometria della macchina e tutte le celle che non rientrano in tale file vengono rimosse. Si va poi a raffinare la mesh in corrispondenza del tip della pala e degli angoli e infine si andranno a far combaciare i punti della mesh con la superficie reale tramite una deformazione, che andrà però a ridurre la qualità della mesh.

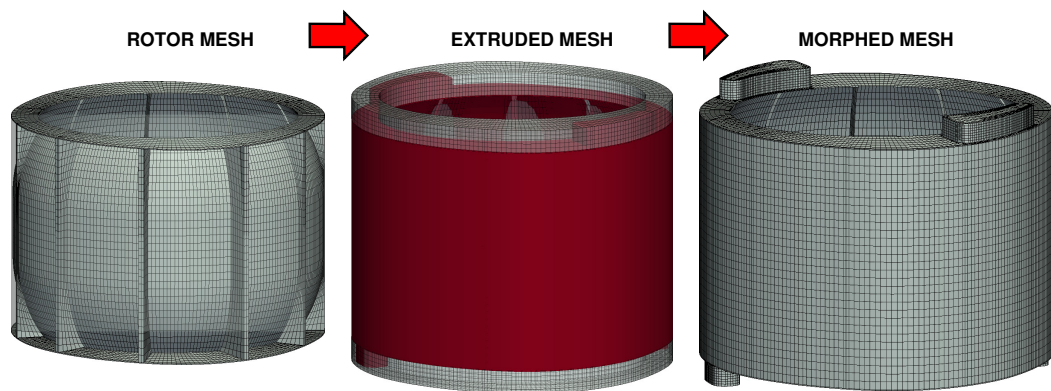


Figura 5.3: Passaggi per ottenere la mesh definitiva a partire dalla mesh di base

Durante questo processo vengono considerati sia i trafiletti tra il tip della pala e lo statore sia quelli della parte inferiore e superiore della macchina. Tuttavia in questo caso il trafiletto viene considerato sempre costante per una certa condizione operativa. Tale ipotesi risulta accettabile per il trafiletto tra la parte inferiore e superiore delle pale e la macchina, ma non è assolutamente realistico nel caso dello spazio compreso tra il tip della pala e lo statore. Infatti l'entità del trafiletto in questo caso dipende da una moltitudine di fattori che bisognerebbe considerare attraverso un bilancio di forze in direzione radiale. Tali forze a loro volta saranno dipendenti dalla velocità di rotazione (come ad esempio la forza centrifuga), dalla posizione angolare della pala e dall'inerzia.

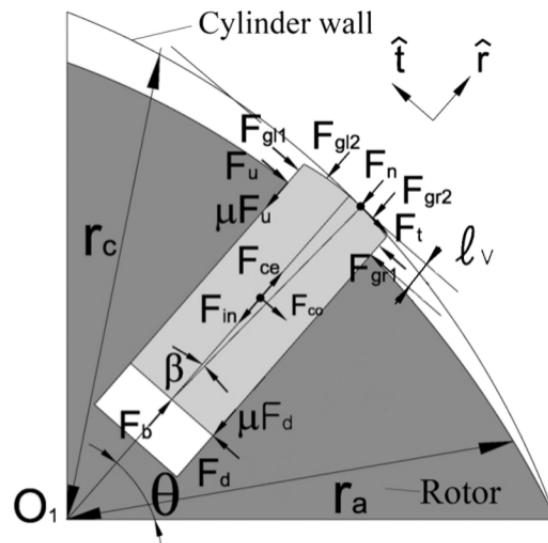


Figura 5.4: Bilancio in direzione radiale delle forze sulla pala

Per tener conto indirettamente del fatto che lo spazio tra tip della pala e statore è in realtà di dimensioni variabili, questo viene considerato di valore costante, ma si considera che le celle che fanno parte della zona di trafileamento possedano una porosità, in modo da poter calibrare il trafileamento per una certa velocità di rotazione. Con questa semplificazione è possibile evitare di tenere conto dell'interazione tra fluido e struttura, pur considerando in qualche modo il suo effetto sul trafileamento.

Per poter modellare il trafileamento la risoluzione della mesh deve essere adeguata, ovvero la mesh deve adattarsi anche alla più piccola dimensione della geometria. Questo però comporta una griglia di calcolo estremamente raffinata attorno alle pale che diventa sempre più lasca allontanandosi in maniera tale da non aumentare troppo il numero di celle. Il movimento viene imposto alle pale e all'albero; in particolare il movimento dell'albero risulta banale e consiste nel imporre una nuova posizione al bordo basandosi su una rotazione rigida di un certo angolo che viene calcolato in base allo step temporale considerato e alla velocità di rotazione.

Per quanto riguarda invece i punti appartenenti alle pale rotoriche, il loro movimento non dipende solamente dalla velocità di rotazione, ma anche dalla posizione angolare. Infatti, poiché lo statore possiede un profilo pseudo-ellittico, le pale rotoriche per adattarsi a tale profilo dovranno muoversi anche in direzione radiale. Dal momento che il profilo dello statore è un dato noto del problema che viene fornito come un diagramma in coordinate polari che



rappresenta la distanza radiale dei punti in funzione dell'angolo, con passo 1 grado. Con questo dato, la posizione dei punti della mesh tra due posizioni angolari potrà essere determinata tramite interpolazione lineare. Per quanto riguarda il tip della pale, questo non viene solamente spostato e ruotato rigidamente, ma verrà anche deformato per soddisfare la necessità di mantenere il trafilamento tra estremo della pala rotorica e statore costante durante la rotazione. I rimanenti punti a cui non è stato imposto il movimento dovranno adattarsi al movimento del contorno. Tipicamente l'algoritmo utilizzato per il movimento dei punti interni si basa sulla risoluzione di un'equazione di diffusione che determina il movimento dei punti. L'equazione solitamente assume la seguente forma:

$$\gamma \nabla x = 0 \quad (5.1)$$

dove il coefficiente  $\gamma$  rappresenta il coefficiente di diffusione, che viene valutato in base all'inverso della distanza dei vari punti rispetto al contorno; ovvero i punti vicini al contorno saranno mossi in maniera molto simile ai punti del bordo, mentre quelli lontani dal contorno verranno mossi meno. Dopo aver risolto l'equazione di diffusione la nuova posizione di ogni punto potrà essere calcolata nel seguente modo:

$$x_{new} = x_{old} + \Delta x \quad (5.2)$$

Una volta risolto il movimento della mesh, viene calcolato il flusso e si risolvono le equazioni di conservazione calcolando i campi per il nuovo time step. Tale procedura si ripete per una singola mesh fino a quando risulta soddisfatta la qualità della mesh. Una volta che tali criteri di qualità non sono più soddisfatti, si adatterà il cambio mesh e i campi verranno rimappati da una mesh all'altra.

### 5.3 Conservazione della massa

Il movimento della mesh e il passaggio da una mesh all'altra comporta la necessità di trasferire i campi di soluzione da una griglia all'altra. Questo processo viene detto *remapping* e avviene quando la mesh viene modificata durante il calcolo o quando viene generata la nuova mesh. Uno dei problemi di questo approccio sono gli errori di interpolazione. Idealmente il trasferimento dei campi da una mesh all'altra dovrebbe essere conservativo; tuttavia anche se i metodi di interpolazione risultano essere accurati, spesso non permettono di mantenere la conservazione di grandezze importanti per l'accuratezza fisica della soluzione (ad esempio la densità) e causano delle perturbazioni addizionali alla risoluzione dei campi oltre quelli dovuti all'errore di troncamento.

In questo caso si è verificato che la variazione di massa durante la simulazione risulta essere  $\simeq 10^{-3}\%$ . Tale valore risulta essere accettabile e si può dunque ritenere valida l'ipotesi che in questo caso la massa si conservi.

### 5.4 Modello di trafilamento

Come già anticipato in precedenza il trafilamento tra il tip della pala lo statore nella realtà non è costante e dipende da un bilancio di forze in direzione radiale che a loro volta dipendono da una serie di fattori come la posizione angolare e la velocità di rotazione. Inoltre per poter risolvere il flusso attraverso la zona di trafilamento risulterebbe necessaria una mesh estremamente rifinita in maniera tale da poter descrivere il campo di velocità tra pala e statore. Tutto ciò comporterebbe un notevole appesantimento computazionale per la simulazione.

Per questo motivo si è scelto di utilizzare un approccio semplificato che permette di tenere in conto degli effetti di trafilamento evitando calcoli troppo impegnativi. In particolare in questo caso viene utilizzato un modello di resistenza basato sull'approccio di mezzo poroso di Forchheimer che consiste nell'aggiungere un termine sorgente all'equazione del momento:

$$S = -f \frac{\rho |\vec{U}|}{2} \vec{U} \tag{5.3}$$

Questo termine sorgente viene applicato solamente alle celle che fanno parte della zona tra tip e statore e vi introduce una porosità, il che rende più difficoltoso il passaggio del flusso da una camera all'altra. In questo modo l'entità del trafilamento verrà direttamente controllata dal valore del coefficiente  $f$  che dovrà essere calibrato sulla base dei risultati sperimentali. In particolare possono essere utilizzati due differenti approcci per settare il coefficiente di trafilamento:

	VARIABILI DA FISSARE	VARIABILI FISSATE
1	Flusso di massa	Pressione totale in inlet e statica in outlet
2	Pressione statica in inlet	Flusso di massa e pressione statica in outlet

Tabella 5.1: Metodi per settare il coefficiente di trafilamento

Nel primo caso sono considerate note e quindi fissate le pressioni totali nelle due porte di ingresso e le pressioni statiche nelle due porte di uscita della macchina e si va quindi a trovare il corretto coefficiente di trafilamento cercando di ottenere un flusso di massa attraverso la macchina coincidente

con quello dei dati sperimentali. Nel secondo caso invece si fissa il flusso di massa e la pressione statica nelle due porte di uscita e si cerca di far coincidere la pressione di ingresso con quella fornita sperimentalmente. I risultati ottenuti dalle simulazioni mostrano che con entrambi gli approcci il coefficiente ottenuto è il medesimo. Infatti effettuando una prova a pari condizioni operative con i due differenti metodi, nel caso 1 si otterrà una portata massica coincidente a quella imposta nel caso 2, e viceversa nel caso 2 si otterrà una contropressione pari a quella imposta nel caso 1. In ogni caso si avrà lo stesso flusso di massa attraverso il trafilemento e gli stessi valori di coppia e potenza.

In questo modo risulta che il coefficiente di trafilemento più adeguato è pari a  $f = 3 \times 10^3$ , per ogni situazione operativa considerata indipendentemente dalle grandezze fissate e da fissare. Nella realtà però il fenomeno è molto più complesso e un approccio di tipo globale che considera solamente le grandezze in input e output non è sufficiente a garantire che l'evoluzione nel tempo del trafilemento venga descritta in maniera adeguata. Infatti la variazione della distanza tra estremità della pala e statore dipende dalla posizione radiale della pala stessa che è il risultato dell'equilibrio di forze agenti sulla pala, a loro volta dipendenti dalla posizione angolare [28].

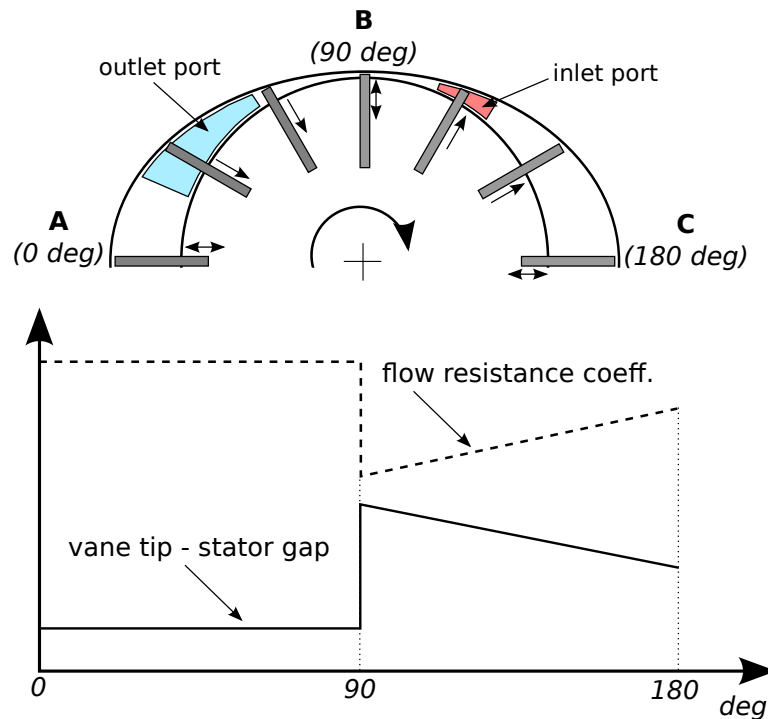


Figura 5.5: Variazione angolare del trafilemento

Infatti bisognerà considerare tre aspetti fondamentali (come si può osservare in figura):

- Durante il percorso della pala dalla zona più lontana dal centro A alla zona più vicina dal centro B la pala rotorica sta scorrendo verso l'interno e per effetto della forza centrifuga e della differenza tra pressione della camera e pressione del retro della pale il trafilemento risulta minimo
- Nel punto di minima distanza dal centro B inizia la fase di ammissione e il volume della camera inizia ad aumentare. Si avrà quindi bassa forza centrifuga e poca differenza di pressione tra pressione della camera e pressione del retro della pala. Come somma di questi effetti il trafilemento risulterà massimo.
- Avvicinandosi al punto C, nuovamente a distanza massima rispetto al centro la forza centrifuga andrà aumentando insieme alla differenza tra la pressione della camera, tuttavia la pala scorre verso l'esterno e quindi globalmente il trafilemento risulta una via di mezzo tra le due situazioni precedenti.

Al fine di considerare questi effetti si è andati a sviluppare un modello di trafilemento più raffinato, che possiede tre coefficienti per considerare la dipendenza della distanza tra pala e statore dall'angolo.

Con questo modello si avranno tre coefficienti e in particolare:

- Un coefficiente che considera il trafilemento contrario al senso di rotazione quando due camere adiacenti sono connesse una alla porta di uscita e una a quella di ingresso. In particolare più è alto questo coefficiente meno trafilemento all'indietro ci sarà e di conseguenza ci si aspetterà un output maggiore in termini di potenza
- Un coefficiente che considera il flusso attraverso la zona porosa quando si ha la minima forza centrifuga ( $90^\circ$ )
- Un coefficiente che considera il flusso attraverso la zona porosa quando si ha la massima forza centrifuga

Questo modello, seppur tenga conto di fenomeni più complessi, risulta più difficile da calibrare in quanto sarà necessario andare a settare adeguatamente tre coefficienti invece che solamente uno. Inoltre, per avere un'idea del flusso di massa attraverso la macchina in assenza di trafilemento, viene considerato anche il modello a un solo coefficiente a cui si impone un valore molto alto con lo scopo di simulare trafilemento nullo.

## 5.5 Condizioni operative

Per svolgere le simulazioni sul modello della macchina rotativa si sono prese in considerazione una serie di condizioni operative per le quali sono stati forniti i risultati sperimentali e che quindi permettono di confrontare i risultati ottenuti. In particolare si avranno cinque condizioni operative che si differenziano tra di loro per la variazione di tre parametri: velocità di rotazione, flusso di massa, temperatura del fluido di ingresso.

In particolare i parametri utilizzati durante la campagna di simulazione sono mostrati in tabella, in forma adimensionale:

	$\omega$ [rpm]	$p_{in}$ [-]	$T_{in}$ [-]	$\dot{m}$ [-]
OC0	1250	1.000	1.000	1.000
OC1	1000	1.063	0.998	1.021
OC2	750	0.938	1.003	0.821
OC3	1250	0.688	1.000	0.650
OC4	1000	0.688	1.001	0.618
OC5	750	0.688	1.006	0.563

Tabella 5.2: Condizioni operative

Le simulazioni quindi verranno effettuate per ogni condizione operativa, fissando alcuni dei parametri forniti sperimentalmente (flusso di massa e pressione in ingresso o pressioni in ingresso e uscita) cercando di far coincidere gli altri (contropressione in ingresso o flusso di massa) e confrontando la potenza e la coppia in uscita ottenute dalle simulazioni con quelli forniti dalla campagna sperimentale.

Per modellare il trafilamento si è utilizzato il modello di resistività che attribuisce una certa porosità alle celle interessate al trafilamento come mostrato in figura:

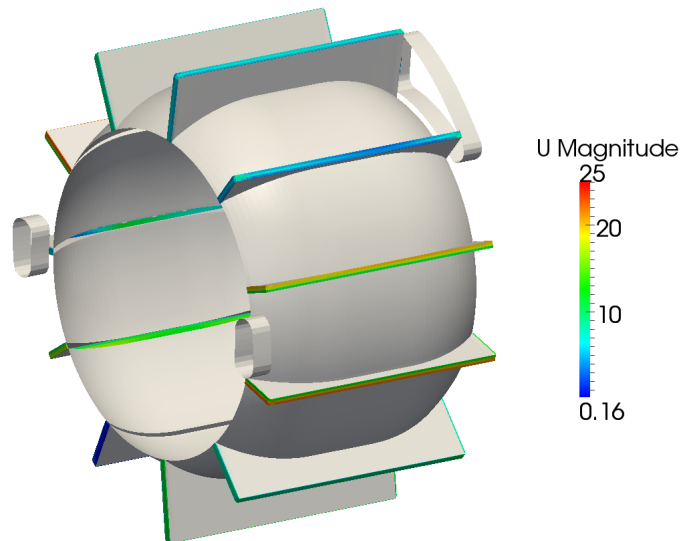


Figura 5.6: Celle a cui viene applicato il modello di resistività

Si può inoltre osservare che tali condizioni operative possono essere distinte in base al flusso di massa: le OC0, OC1 e OC2 sono caratterizzate da un alto flusso di massa (e alte pressioni in ingresso) e quindi da esse ci si aspetterà un output di potenza maggiore, mentre le OC3, OC4 e OC5 hanno un minore flusso di massa e quindi un output di potenza minore, come confermato dai risultati sperimentali forniti.

## Capitolo 6

# Descrizione delle prove e analisi dei risultati

Dal momento che sono stati forniti una serie di dati sperimentali rappresentativi di cinque diverse condizioni operative, le simulazioni effettuate si sono basate su tali condizioni con lo scopo di verificare dal punto di vista computazionale quanto ottenuto sperimentalmente e validare quindi il modello. Come primo approccio le simulazioni sono state effettuate considerando il solo corpo macchina, mentre in un secondo momento si è tenuto in considerazione anche il percorso del flusso attraverso i tubi di ingresso e uscita e la sua influenza sull'output ottenuto. In tutti i casi si è utilizzato un modello resistivo per simulare il trafilamento tra tip della pala e statore, in particolare si è simulata l'espansione con il modello a un coefficiente e con il modello più complesso a tre coefficienti. Per quanto riguarda i modelli termodinamici, per quanto detto in precedenza, nel caso specifico dell'espansione di fluidi organici in cicli ORC non è accettabile utilizzare il modello di gas perfetto per il calcolo della densità, né considerare  $h = c_p T$  con  $c_p$  costante (gas termodinamicamente perfetto); bisognerà quindi considerare gli effetti di realtà del gas. Per fare questo si sono utilizzati due differenti approcci:

- Utilizzo di tabelle: si è costruito un database in OpenFoam costituito da una serie di tabelle a differenti pressione. Per ogni pressione di interesse si avrà una tabella che fornisce le proprietà termodinamiche del fluido di interesse al variare della temperatura. In particolare le proprietà fornite sono: densità, volume specifico, energia interna, entalpia, entropia, calore specifico a volume costante, calore specifico a pressione costante, velocità del suono, coefficiente di Joule-Thompson, viscosità, conducibilità termica e fase. Tali tabelle sono state ottenute dal database NIST, che a sua volta utilizza il software *refprop* per calcolare le proprietà. Il range di pressioni presente nel database spazia tra  $0.1 \text{ bar}$  a  $50 \text{ bar}$ , per un range di temperature che va da  $205 \text{ K}$

a 500 K. Nel caso vengano richiesti dei valori che non sono presenti nelle tabelle si andrà ad adottare una interpolazione lineare che comporterà di conseguenza un'approssimazione nel calcolo delle proprietà termodinamiche:

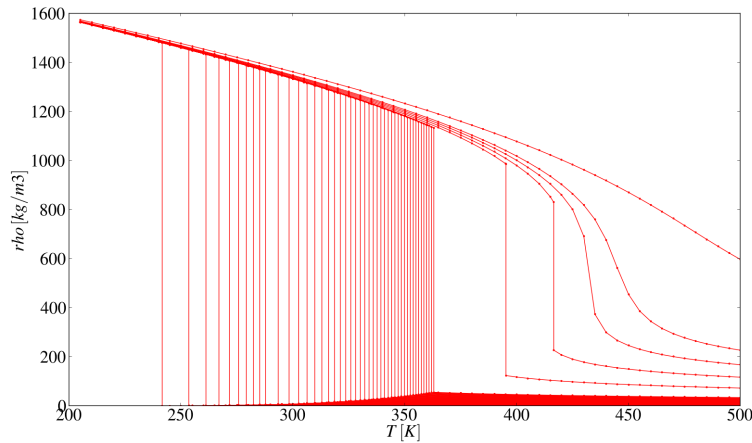


Figura 6.1: Tabella della densità al variare della temperatura per varie pressioni

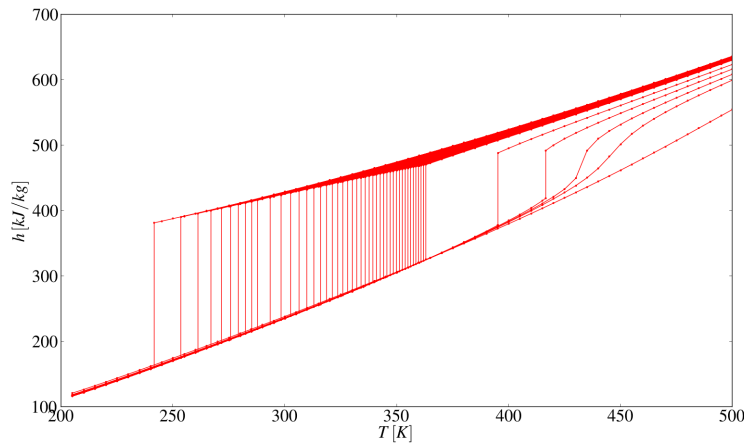


Figura 6.2: Tabella dell' entalpia al variare della temperatura per varie pressioni

- Utilizzo di modelli analitici: si utilizzano i modelli analitici precedentemente descritti per il calcolo di densità, entalpia e viscosità. Tali modelli sono stati implementati nella libreria e forniscono le proprietà di interesse a partire dai campi di pressione e temperatura.



## 6.1 Prove sul solo corpo macchina

Come primo approccio si è considerata nelle simulazioni la sola macchina volumetrica ( $\approx 85000$  *celle*) rappresentata in figura:

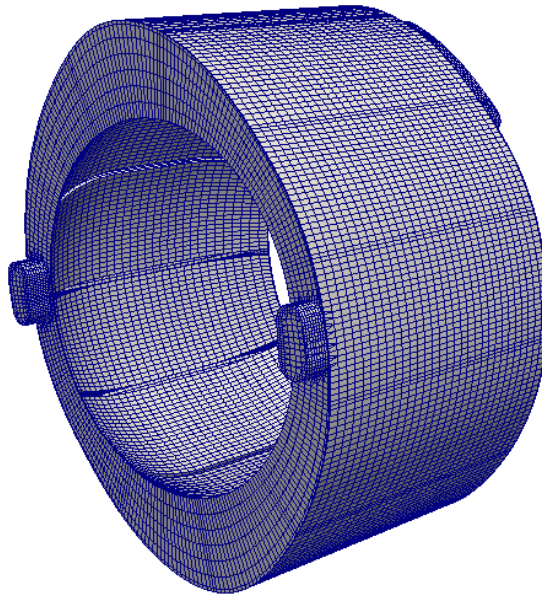


Figura 6.3: Espansore volumetrico rotativo utilizzato nelle simulazioni

Si sono effettuate simulazioni in tutte e cinque le condizioni operative, imponendo e andando a far coincidere le grandezze nelle porte di ingresso e di uscita con i dati sperimentali. In particolare si sono effettuate simulazioni imponendo la pressione alle due porte di uscita e il flusso di massa alle porte di ingresso andando a ottenere la pressione nella porta di ingresso pari a quella sperimentale o, viceversa, imponendo nelle porte di ingresso e uscita le pressioni e andando a calibrare il flusso di massa nella porta di ingresso. Dalle simulazioni risulta che l'output energetico è indipendente dal tipo di approccio utilizzato. In particolare è sempre possibile fare delle considerazioni sui i campi di pressione, velocità, temperatura e del fattore di compressibilità che risultano essere analoghe indipendentemente dalla condizione operativa considerata e dai modelli scelti.

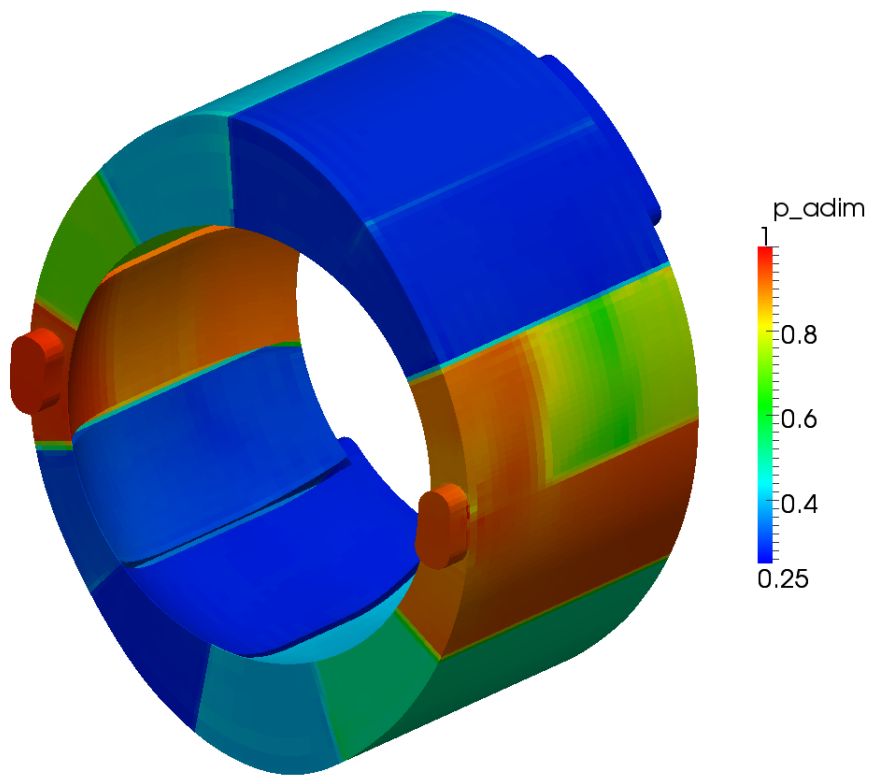


Figura 6.4: Campo di pressione in forma adimensionale

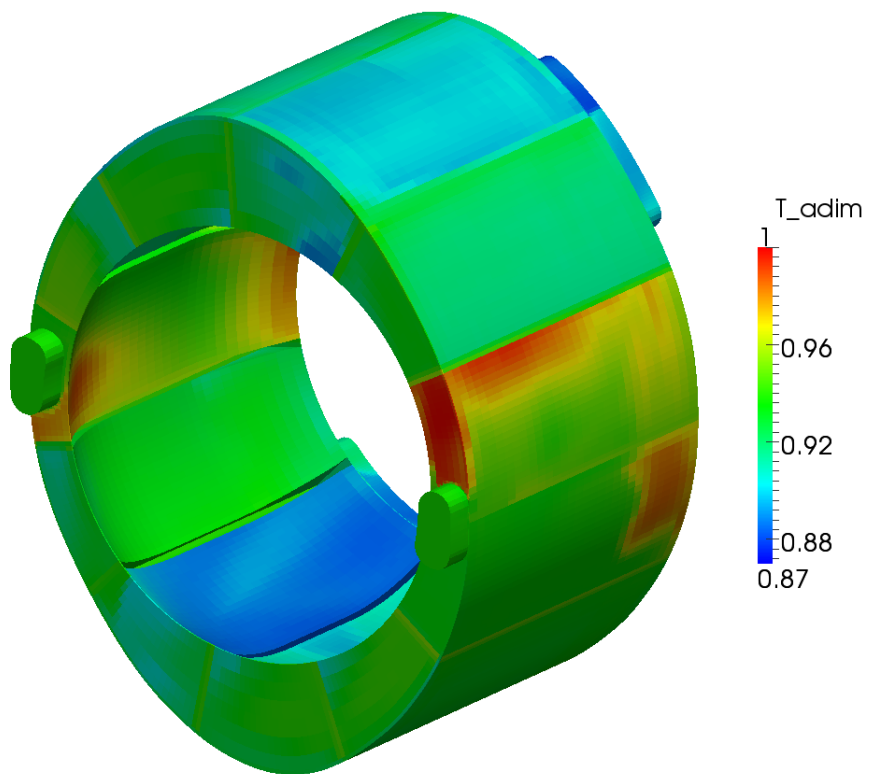


Figura 6.5: Campo di temperatura in forma adimensionale

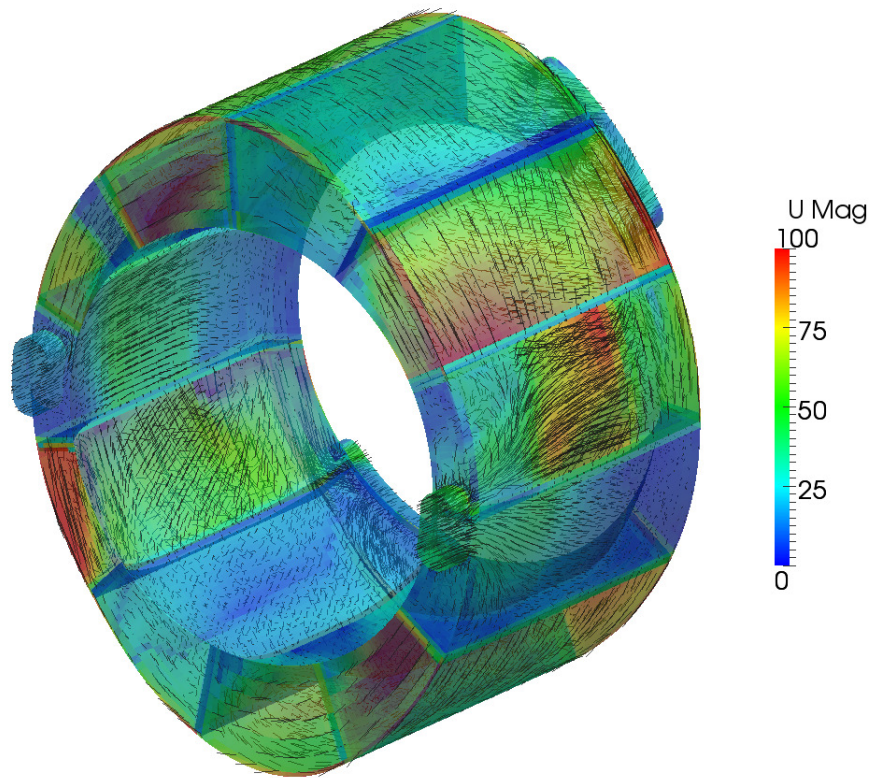


Figura 6.6: Campo di velocità

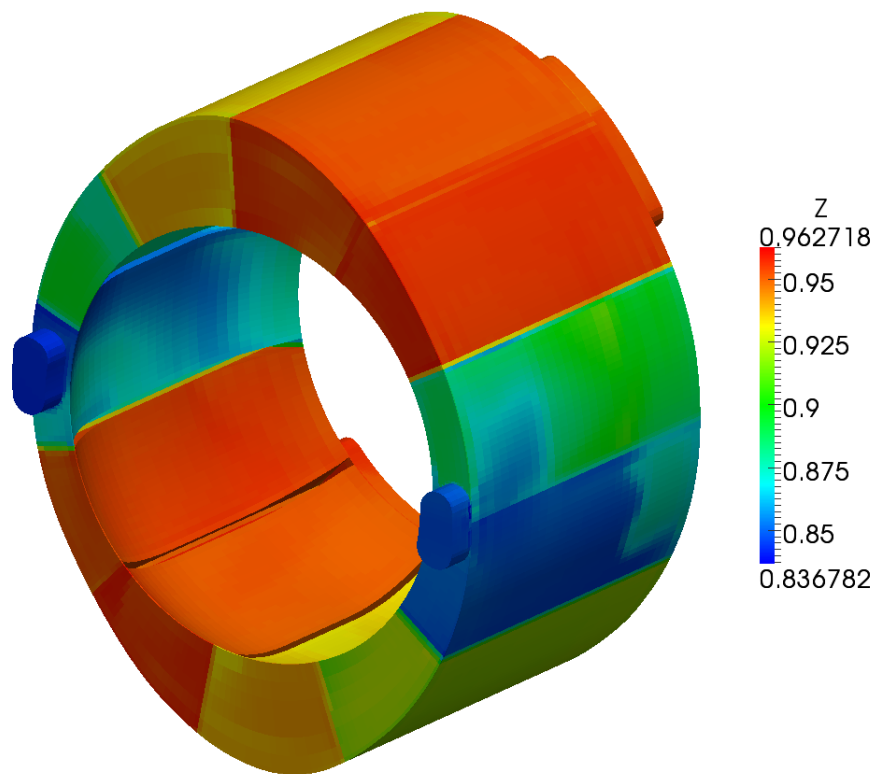


Figura 6.7: Fattore di comprimibilità

Considerando il campo di pressione in una generica condizione operativa si può osservare che il fluido viene espanso grazie alla rotazione delle pale rotoriche in senso antiorario dalle porte di ingresso a quelle di uscita.

Il campo di velocità mostra come si raggiungano i valori più alti in corrispondenza dell'entrata del flusso attraverso la porta di ingresso a causa del grande gradiente di pressione tra l'ingresso e la camera.

Per quanto riguarda il flusso di trafileamento tra il tip della pala e lo statore, si avrà che questo risulta guidato dalla differenza di pressione tra due camere adiacenti.

In particolare tale flusso può essere diretto sia in senso orario che in senso antiorario, in base alla posizione angolare della pala.

Più precisamente è possibile individuare un flusso di trafileamento in senso orario durante la fase di espansione dal momento che la pressione delle camere diminuisce progressivamente durante la rotazione. Al contrario, durante la fase in cui viene caricata la macchina è possibile osservare un flusso in senso antiorario. Questo fenomeno è dovuto all'alto gradiente di pressione che si verifica quando due camere adiacenti si trovano contemporaneamente collegate una alla porta di ingresso e una a quella di uscita.

Osservando il campo di temperatura si nota che questa diminuisce a causa dell'espansione dalla porta di ingresso a quella di uscita.

Infine è possibile osservare anche il campo del fattore di compressibilità, che da un'indicazione sull'incidenza dei fenomeni che fanno allontanare il fluido dall'ipotesi di flusso ideale. In particolare è possibile osservare deviazioni non trascurabili dall'idealità; tali deviazioni risultano più marcate quanto più la regione considerata è caratterizzata da alte densità e pressioni.

### **6.1.1 Confronto tra i modelli di trafileamento**

Come anticipato in precedenza, al fine di semplificare lo studio del flusso di massa attraverso il trafileamento tra tip della pala rotorica e statore, si è utilizzato un approccio tale per cui è possibile considerarne gli effetti senza andare a modellare tale zona. A tale scopo si è introdotta un termine che costituisce una porosità fittizia nelle celle comprese tra tip della pala e statore, che andrà quindi a ridurre il flusso di massa tra una camera e l'altra. La resistenza che questa porosità andrà a opporre al flusso dipenderà dal valore del coefficiente di Forchheimer  $f$  nell'equazione del termine sorgente.

### Modello a un coefficiente

Come primo approccio per la modellazione si è andati a utilizzare un coefficiente singolo che, andando ad aggiungere una porosità alle celle appartenenti alla zona di trafilamento, riduce il passaggio di flusso attraverso la zona porosa dalla camera a pressione più alta a quella a pressione più bassa, ovvero in senso concorde con la rotazione della macchina.

Al fine di valutare il valore di tale coefficiente è stata effettuata una campagna di simulazioni sulla singola macchina per tutte e sei le condizioni operative. Per ogni condizione operativa a parità di tutti gli altri parametri, si è andato a variare il coefficiente di Forchheimer per valutare per quale valore i risultati della simulazione vanno a coincidere con quelli forniti sperimentalmente.

Per quanto riguarda il calcolo delle grandezze termodinamiche le simulazioni sono state effettuate con:

- densità ed entalpia calcolate attraverso le tabelle termodinamiche fornite dal database NIST
- viscosità calcolata con il modello di Sutherland

Per quanto invece riguarda le condizioni al contorno si ha:

- flusso di massa fissato in ingresso
- pressione statica fissata in uscita
- temperatura fissata in ingresso

Si sono dunque considerati tre possibili valori del coefficienti di Forcheimer:  $3 \times 10^3$ ,  $5 \times 10^3$  e  $1 \times 10^4$ . Al variare di tali coefficienti si è valutato il valore della pressione in ingresso e si è fatto in modo di individuare il valore del coefficiente di Forchheimer che permettesse di far coincidere la pressione in ingresso risultante dalle simulazioni con quella fornita dai dati sperimentali.

E' possibile osservare i risultati di tale campagna di simulazione in un grafico semi logaritmico sull'asse delle ascisse e adimensionalizzato rispetto a una pressione di riferimento sulle ordinate:

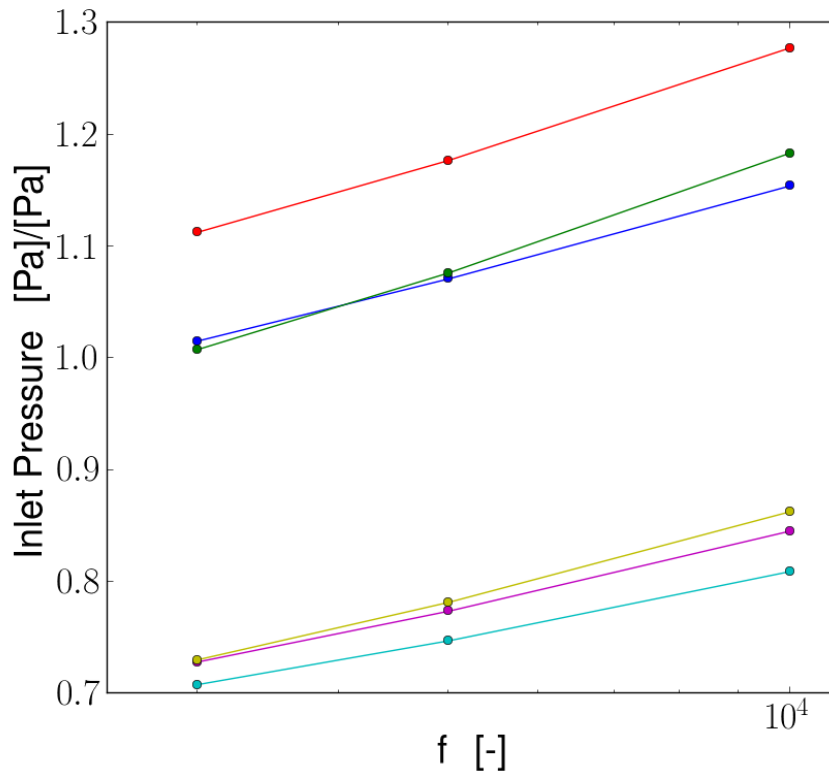


Figura 6.8: Pressioni in ingresso risultanti dalla campagna di simulazioni per le varie condizioni operative al variare del valore del coefficiente di Forchheimer

Da questo grafico è possibile osservare come l'andamento della pressione in ingresso sia pressoché lineare in scala semi logaritmica con il coefficiente di trafilamento. Inoltre, il coefficiente di trafilamento che permette di far coincidere la pressione in ingresso calcolata con quella sperimentale, risulta essere univoco e pari a  $3 \times 10^3$ .

Una volta effettuate le simulazioni è possibile calcolare la potenza ottenuta dall'espansione del fluido come la pressione risultante del fluido sulle pale rotoriche. La potenza ottenuta in questo modo risulta essere la potenza indicata, ovvero non tiene conto di nessuna perdita meccanica della macchina. Tale potenza potrà essere confrontata con quella fornita dai dati sperimentali che, però, viene misurata all'albero e quindi risulta essere comprensiva

di tutte le perdite organiche.

Dunque, per rendere confrontabili i due valori di potenza, sarà necessario sommare alla potenza misurata sperimentalmente un termine che indicativamente tiene conto delle perdite organiche ottenute sottraendo la potenza indicata calcolata dai risultati della simulazione ( $\dot{m}(h_{in} - h_{out})$ ) con la potenza sperimentale fornita.

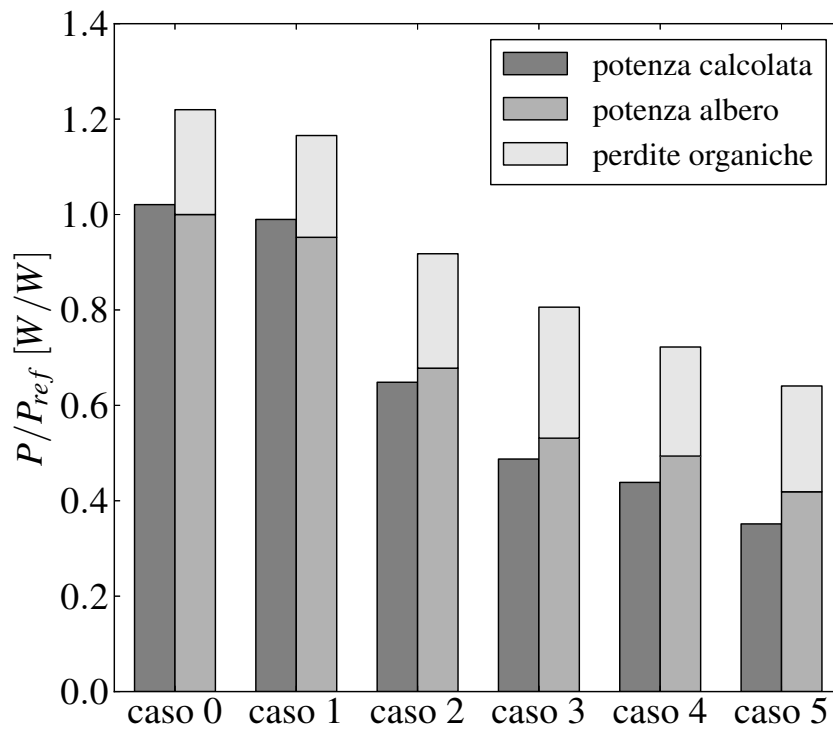


Figura 6.9: Confronto tra la potenza ottenuta dalle simulazioni e quella misurata sperimentalmente tenendo conto delle perdite meccaniche per le varie condizioni operative

Da tale istogramma è possibile osservare che le simulazioni effettuate con il modello a un coefficiente dove  $f = 3 \times 10^3$  riesce a individuare il corretto trend di potenza, ma in termini di valore assoluto va a sottostimarla.

La ragione di tale errore è in parte da ricercare nel fatto che l'approccio globale con un modello di trafilemento a un coefficiente risulta essere estremamente semplificato.

Per valutare l'effetto del trafilemento sulla potenza si sono inoltre effettuate due simulazioni sulle condizioni operative 0 e 1 imponendo un coefficiente di Forchheimer molto alto. Dal punto di vista fisico questo comporta ottenere

una porosità elevatissima delle celle appartenenti alla zona di trafileamento e, di conseguenza, un flusso di massa attraverso la zona tra estremità del rotore e statore praticamente nullo. Questa condizione è quella che si può considerare ideale dal punto di vista del rendimento volumetrico della macchina e inoltre rappresenta la condizione in cui si dovrebbe ottenere potenza massima.

### Modello a tre coefficienti

Il modello di trafileamento a un coefficiente, risulta essere estremamente semplificato in quanto non tiene conto di una serie di fattori:

- quando due camere adiacenti sono in contatto una con la porta di uscita e una con quella di ingresso è presente anche un trafileamento contrario al senso di rotazione
- il trafileamento varia al variare dell'angolo al quale si trova la pala

Per valutare questi effetti si è implementato un modello di trafileamento a tre coefficienti e sono state effettuate simulazioni sulle condizioni operative 0 e 1 al fine di poterle confrontare con gli altri modelli.

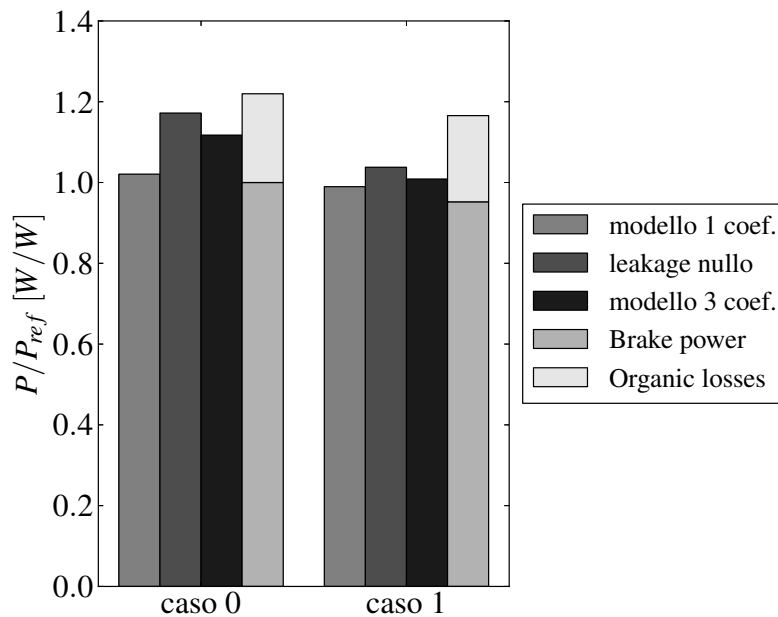


Figura 6.10: Confronto tra la potenza ottenuta dalle simulazioni con modello di trafileamento a uno e tre coefficienti e quella misurata sperimentalmente tenendo conto delle perdite meccaniche per le varie condizioni operative



Dalla figura 6.10 è possibile osservare come il modello di trafilamento a tre coefficienti permetta di prevedere l'output di potenza superiore al modello di trafilamento a un coefficiente, dove il coefficiente di Forchheimer è stato settato per ottenere la stessa contropressione sperimentale, mentre rimane inferiore all'output di potenza calcolato con il modello a un coefficiente, nel quale il valore di tale fattore è molto grande, ovvero a trafilamento nullo. Questo risultato può essere spiegato dal fatto che il modello a tre coefficienti è sicuramente più dettagliato di quello a un coefficiente in quanto tiene conto della variabilità del flusso di trafilamento al variare della posizione radiale e delle forze sulla pala. Infatti in questo modo è possibile modellare un flusso di massa attraverso la zona porosa che risulta differente per due pale consecutive, descrivendo un flusso di massa preferenziale per una certa condizione. Infatti nella fase di ammissione si avranno due pale che si muovono in direzione radiale opposta mentre nella fase di espulsione si avranno due pale con differente posizione radiale; in queste condizioni lo spazio tra l'estremità delle pale e lo statore cambia notevolmente, risultando in flussi di massa attraverso la zona porosa notevolmente differenti. Le diverse condizioni di trafilamento andranno a influenzare notevolmente l'output di potenza. A parità di zona di trafilamento si avranno risultati diversi a seconda della direzione del flusso di massa: se in flusso di massa è diretto nel senso di rotazione della macchina il trafilamento ha l'effetto di caricare ulteriormente le camere precedenti e da quindi un certo contributo al lavoro; se invece il trafilamento è diretto in senso opposto a quello di rotazione (come avviene durante la fase di ammissione) il flusso di massa non da alcun contributo al lavoro.

Il modello a tre coefficienti implementato è in grado di descrivere questi tre effetti, tuttavia rimane pur sempre un modello non predittivo e richiede il settaggio di tre parametri, anziché solamente uno.

### Modello On-Off

A valle di un'analisi dei componenti della macchina e della loro usura dopo diverse ore di funzionamento, si è considerato un terzo modello per il flusso di massa attraverso il trafilamento, costituito da due coefficienti.

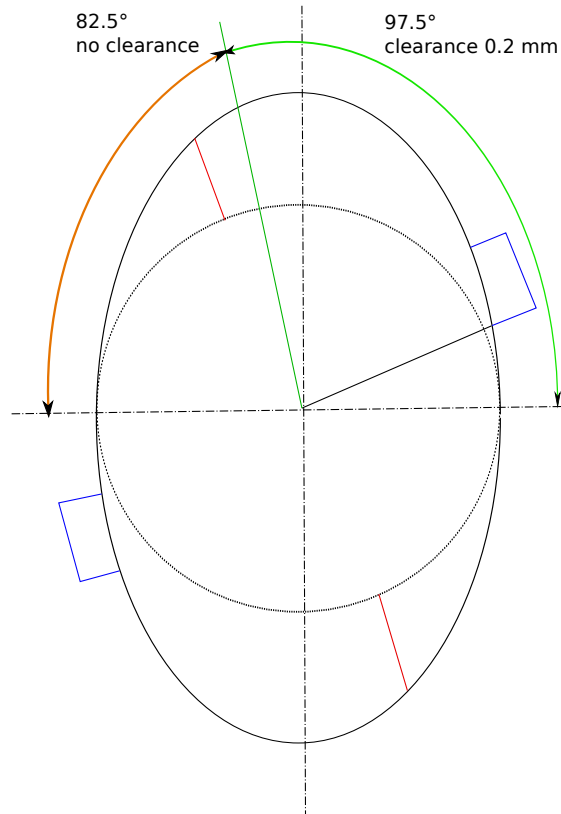


Figura 6.11: Schematizzazione delle zone di trafilamento nel caso di modello On-Off

In tale modello si distinguono due zone di trafilamento differenti. Nelle zone laterali della pala (nelle quali non ha influenza l'equilibrio radiale) si considera una distanza con lo statore costante, mentre nelle zone di trafilamento corrispondenti alla zona compresa tra estremità della pala della pala e statore si suppone che durante la rotazione si possano avere solamente due situazioni:

- per gli angoli compresi tra  $0$  e  $97.5^\circ$  e, in maniera simmetrica  $180$  e  $277.5^\circ$  si avrà trafilamento costante e pari a  $0.2mm$
- per gli angoli restanti il tip della pala sarà a contatto con lo statore e si avrà dunque trafilamento nullo

Con tale modellazione si avrà, nelle zone di trafilamento, una situazione di questo tipo:

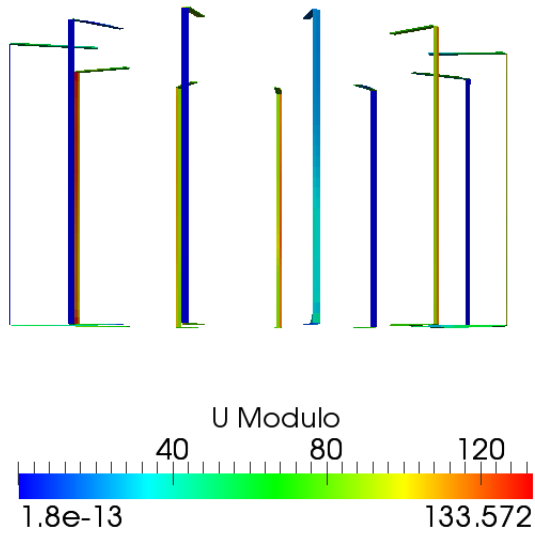


Figura 6.12: Andamento della velocità attraverso le zone di trafilamento appartenenti al tip della pala nel caso in cui si utilizzi il modello On-Off

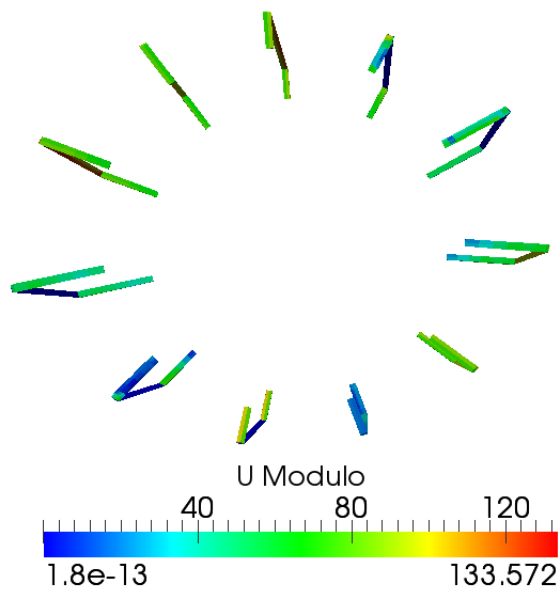


Figura 6.13: Andamento della velocità attraverso le zone di trafilamento laterali nel caso in cui si utilizzi il modello On-Off

E' possibile osservare nelle Figure 6.12 e 6.13 l'andamento della velocità del flusso attraverso la zona porosa. Negli angoli in corrispondenza dei quali lo spessore della distanza tra estremo della pala rotorica e statore è costante si avrà un flusso tra una camera e l'altra, mentre in corrispondenza degli angoli a trafileamento nullo non si ha flusso di massa e, di conseguenza, la velocità risulta essere nulla. In corrispondenza della zona porosa laterale si utilizza invece un unico coefficiente di porosità che permette il flusso da una camera all'altra, con basse velocità.

Al fine di utilizzare tale modello bisognerà dunque andare a settare i coefficienti di porosità. Il coefficiente relativo al trafileamento laterale, questo risulterà pari a  $1 \times 10^3$ .

Per quanto riguarda i coefficienti relativi alla zona porosa tra estremo pala e statore, si avrà un primo coefficiente di porosità che descrive la situazione in cui non vi è trafileamento, che verrà quindi settato a un valore molto alto di porosità ( $1 \times 10^{30}$ ), e un secondo coefficiente di Forchheimer che descrive la situazione di zona porosa a spessore costante, che andrà settato andando a far coincidere la contropressione con i dati sperimentali.

In particolare il secondo coefficiente che permette di ottenere risultati pari a quelli dei dati sperimentali, risulta essere pari a zero, ovvero non verrà imposta alcuna resistenza al flusso quando la pala si trova negli angoli in cui si ha trafileamento costante.

In tutti i casi, la simulazione della singola macchina non permette di ottenere un output di potenza coincidente con i dati sperimentali, il che può essere imputato al fatto che le simulazioni sono state effettuate imponendo delle condizioni stazionarie in ingresso e uscita, rappresentative delle grandezze misurate e mediate nel tempo.

Nella realtà la macchina si trova all'interno di un sistema molto più complesso nel quale il fluido è soggetto a oscillazioni di flusso di massa e pressione (ad esempio durante la fase di ammissione e scarico si avranno delle onde di pressione). Al fine di descrivere adeguatamente l'espansione bisognerà dunque estendere il modello CFD, includendo i componenti a monte e valle dell'espansore.

### 6.1.2 Confronto tra i modelli termodinamici

Come già anticipato in precedenza, il fluido R245fa è un fluido organico che nell'applicazione specifica dei cicli ORC presenta un forte effetto di gas reale che deve necessariamente essere considerato. Al fine di valutare l'impatto sull'output energetico di tale effetto si sono effettuate due simulazioni, che a parità di tutti gli altri elementi differiscono l'un l'altra per l'ipotesi con cui si modellano le proprietà termodinamiche. Inoltre al fine di validare l'implementazione effettuata in OpenFoam per il calcolo delle proprietà termodinamiche e di trasporto del fluido quali densità, entalpia, calore specifico e viscosità, si considerano gli effetti di gas reale, sia utilizzando i modelli termodinamici precedentemente implementati, sia utilizzando le tabelle fornite dal database NIST.

In particolare si avrà:

- Simulazione 1: la densità viene modellata con l'ipotesi di gas perfetto, il calore specifico a pressione costante viene considerato costante e l'entalpia viene calcolata come:  $h = c_p T$ . Per quanto riguarda il calcolo della viscosità viene utilizzato il modello di Sutherland, dove  $\mu = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + T_s/T}$ . Per quanto riguarda il valore dei parametri utilizzati per il calcolo si avrà:
  - *massa molecolare* = 134.0482 kg/kmol
  - $c_p = 857 \text{ J/kgK}$
  - $A_s = 1.4792e - 06 \text{ Pas}/\sqrt{K}$
  - $T_s = 116 \text{ K}$
- Simulazione 2: la densità, il calore specifico a pressione costante e l'entalpia verranno calcolate utilizzando le tabelle fornite dal database NIST che per una certa pressione forniscono le grandezze al variare della temperatura. Nel caso il valore richiesto sia compreso tra due valori di temperatura verrà effettuata un'interpolazione lineare. Infine per il calcolo della viscosità viene utilizzato il modello di Sutherland come descritto in precedenza.
- Simulazione 3: la densità viene calcolata utilizzando l'equazione di gas reale di Peng-Robinson la cui formulazione è quella scritta nell'equazione (3.5). Per quanto riguarda il calcolo di calore specifico a pressione costante e l'entalpia verrà utilizzato il modello precedentemente descritto nel capitolo 4, che partendo dalla formulazione dell'energia di Helmonz reale e ideale calcola le proprietà termodinamiche a partire dalle sue derivate. Anche in questo caso per il calcolo della viscosità

viene utilizzato il modello di Sutherland.

Per utilizzare tali modelli saranno necessari i seguenti parametri:

- *Temperatura cririca* = 427.2K
- *Pressione cririca* = 3.64e6Pa
- *Fattore acentrico* = 0.3724
- parametri necessari per l'utilizzo del modello termodinamico che calcola calore specifico e entalpia. In particolare nel caso del R245fa i coefficienti necessari per il calcolo dell'energia di Helmonz ideale sono i seguenti:

$\nu_1$	$u_1/K$	$\nu_2$	$u_2/K$	$\nu_3$	$u_3/K$	$\nu_4$	$u_4/K$
5.5728	222.0	10.385	1010.0	12.554	12.554	-	-

Tabella 6.1: Parametri per calcolare la parte ideale dell'energia di Helmonz per l'R245fa, da sostituire nel termine sommatoria della formulazione

$c_0$	$c_1$	$c_2$	$a_1$	$a_2$
4.0	-	-	-13.42836385	9.8723653800

Tabella 6.2: Parametri per calcolare la parte ideale dell'energia di Helmonz per l'R245fa

Per quanto riguarda invece i parametri necessari per il calcolo del contributo reale all'energia di Helmonz servirà fornire i seguenti valori:

$k$	$R245fa$
1	1.2904
2	-3.2154
3	0.50693
4	0.093148
5	0.00027638
6	0.71458
7	0.87252
8	-0.015077
9	-0.40645
10	-0.11701
11	-0.13062
12	-0.022952

Tabella 6.3: Parametri per calcolare la parte reale dell'energia di Helmonz per l'R245fa

Tali parametri verranno forniti tramite dizionario, nell'opportuno file presente nella directory del caso considerato.

In tali simulazioni i parametri fissati nelle condizioni al contorno sono:

- pressione di uscita pari a 0.947 in forma adimensionale
- flusso di massa in ingresso pari a 0.563 in forma adimensionale
- temperatura di ingresso pari a 1.006 in forma adimensionale

Per la velocità angolare si avrà:  $\omega = 750 \text{ rpm}$  ovvero si impone la condizione operativa 5. Infine per quanto riguarda il modello di traflamento in queste simulazioni è stato utilizzato il modello a un coefficiente con valore pari a  $3 \times 10^3$ . Poiché in questo caso le grandezze fissate sono pressione di uscita e flusso di massa si è andati a ottenere la pressione di ingresso, che dovrà essere pari a 0.688.

Una volta effettuate le simulazioni è possibile osservare e fare alcune considerazioni sulle grandezze di output. In particolare è possibile monitorare la temperatura di uscita del fluido, calcolare la coppia fornita dalla macchina come l'integrale delle pressioni sulla pala e di conseguenza l'output di potenza fornito come  $P = C\omega$ .

In figura sarà quindi possibile osservare il confronto tra le tre simulazioni:

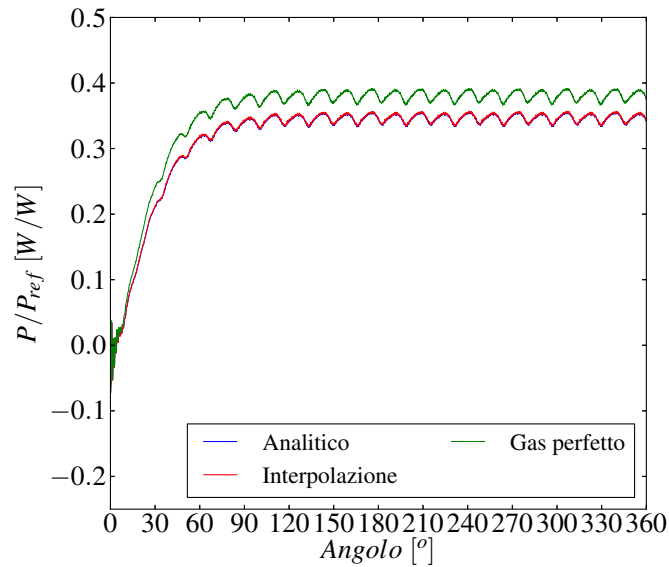


Figura 6.14: Potenza: confronto tra modello di gas ideale e gas reale con calcolo delle proprietà effettuato con interpolazione e con i modelli descritti nel capitolo 4

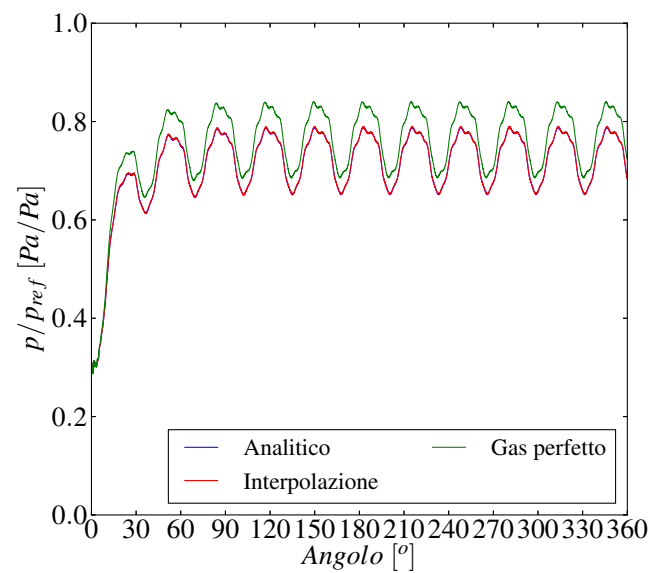


Figura 6.15: Pressione: confronto tra modello di gas ideale e gas reale con calcolo delle proprietà effettuato con interpolazione e con i modelli descritti nel capitolo 4



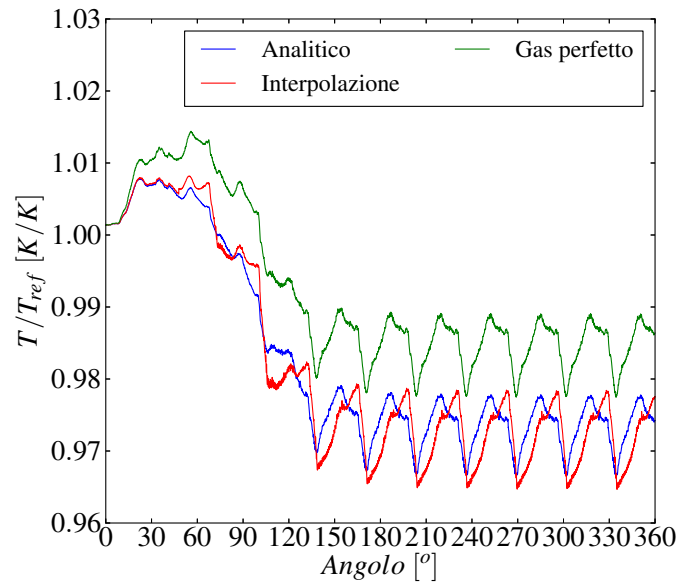


Figura 6.16: Temperatura: confronto tra modello di gas ideale e gas reale con calcolo delle proprietà effettuato con interpolazione e con i modelli descritti nel capitolo 4

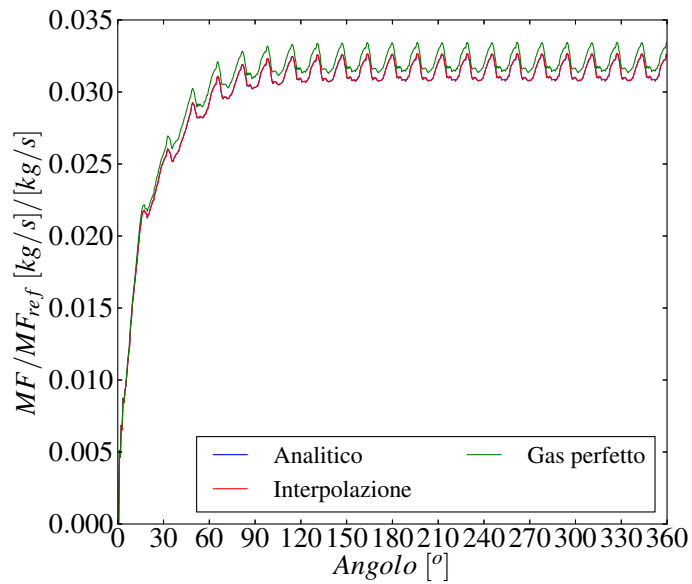
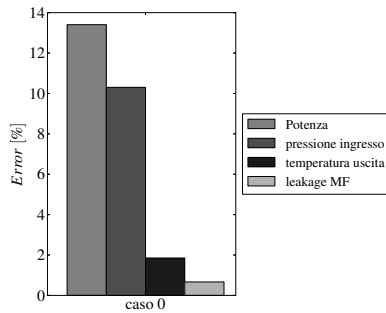


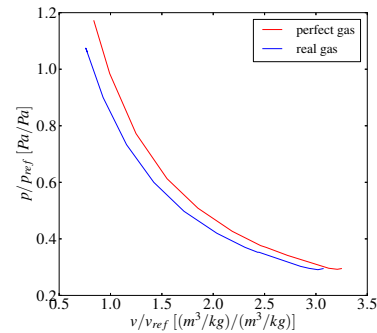
Figura 6.17: Trafilamento: confronto tra modello di gas ideale e gas reale con calcolo delle proprietà effettuato con interpolazione e con i modelli descritti nel capitolo 4

Da tali risultati è possibile fare le seguenti considerazioni:

- la simulazione nella quale si utilizza la legge dei gas ideali comporta una sovrastima della pressione e di conseguenza dell'output di potenza che comportano un errore compreso tra il 10 – 15%. Inoltre anche la temperatura di uscita e la massa attraverso il trafilemento risulteranno essere sovrastimate a causa delle differenti condizioni di pressione all'interno della macchina.



(a) Errore percentuale



(b) Andamento del volume

Figura 6.18: Errore commesso utilizzando un modello di gas ideale al posto di un modello di gas reale

- il calcolo delle proprietà termodinamiche utilizzando i modelli di gas reale e utilizzando le tabelle di interpolazione porta ad ottenere un risultato praticamente analogo, il che conferma la bontà dei modelli termodinamici implementati.

Tuttavia, in tutti e tre i casi è stato utilizzato il modello di Sutherland, presente di default in OpenFoam. Tale modello utilizza due coefficienti  $A_s$  e  $T_s$  che non sono specifici per il fluido in questione e che quindi vanno a comportare un notevole errore nel calcolo della viscosità, come si può osservare in figura 3.3. Per valutare l'effetto di tale errore nel caso considerato è stata effettuata un'ulteriore prova utilizzando, al posto del modello di Sutherland, il modello descritto nel capitolo 4 per il calcolo della viscosità.

Per l'utilizzo di tale modello saranno necessari una serie di parametri, che verranno definiti nel dizionario opportuno presente nella directory del caso: In particolare si dovranno fornire:

- i parametri per calcolare  $\rho_{0,v}$  :
- i parametri per calcolare  $ln\theta_{\mu}^*$ :

$c_1$	$c_2$	$c_3$
1.1529	$-4.4154 \times 10^{-2}$	0

Tabella 6.4: Parametri per calcolare  $\rho_{0,v}$

$a_0$	$a_1$	$a_2$
$0.355404 \pm 0.14$	$-0.464337 \pm 0.54 \times 10^{-2}$	$0.257353 \times 10^{-1} \pm 0.011$

Tabella 6.5: Parametri per calcolare  $\ln\theta_\mu^*$

- i parametri per calcolare  $B_\mu^*$ , forniti nella tabella 3.7;
- i parametri per calcolare  $\Delta_H\mu(p, T)$ , forniti nella tabella 3.8.

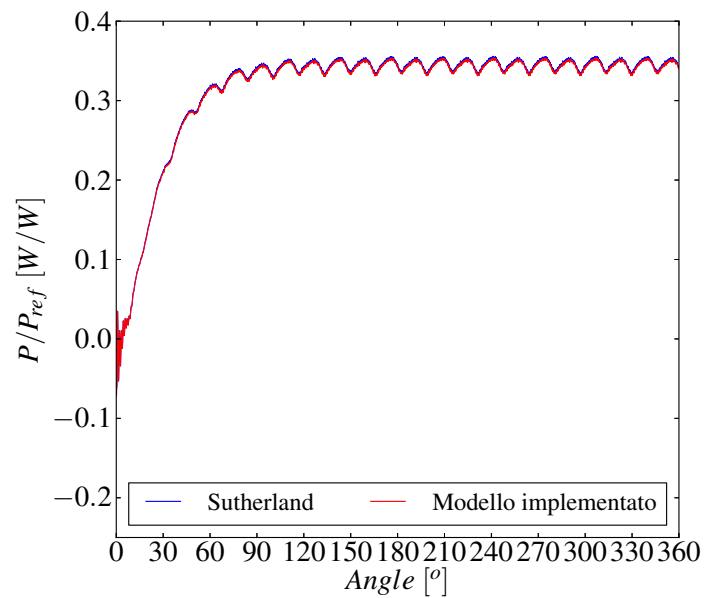


Figura 6.19: Potenza: confronto tra modello di gas reale con calcolo della viscosità effettuato con Sutherland e con il modello descritto nel capitolo 4

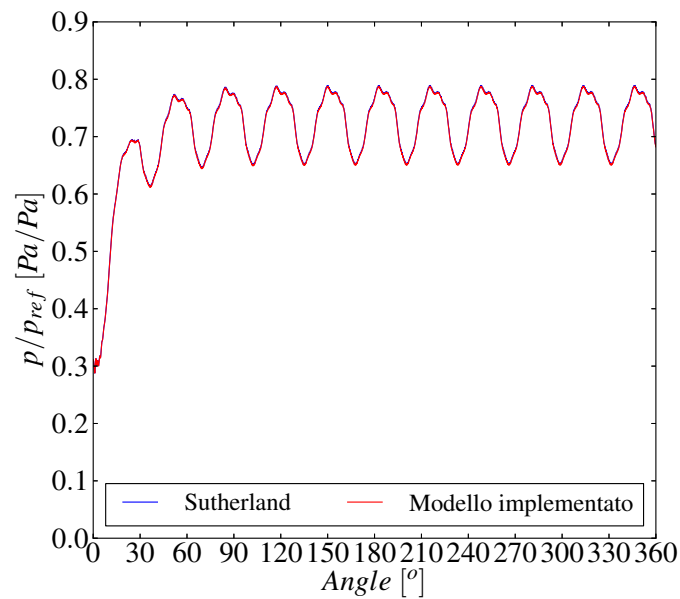


Figura 6.20: Pressione: confronto tra modello di gas reale con calcolo della viscosità effettuato con Sutherland e con il modello descritto nel capitolo 4

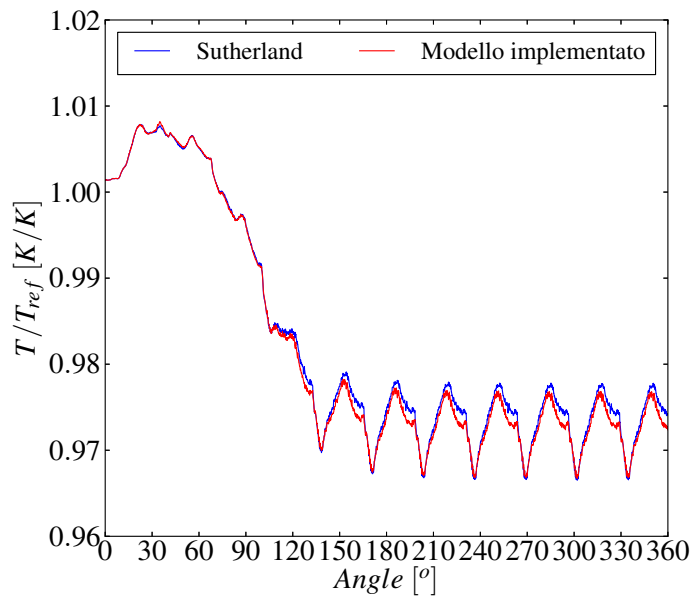


Figura 6.21: Temperatura: confronto tra modello di gas reale con calcolo della viscosità effettuato con Sutherland e con il modello descritto nel capitolo 4

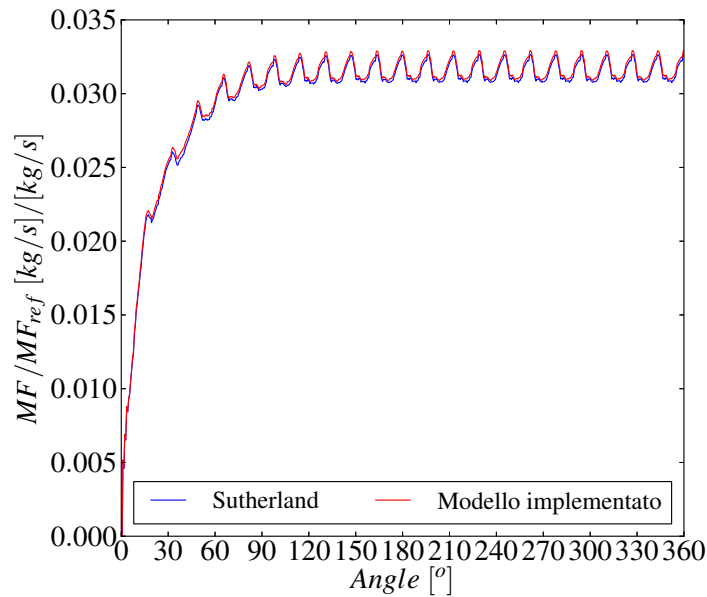


Figura 6.22: Trafilamento: confronto tra modello di gas reale con calcolo della viscosità effettuato con Sutherland e con il modello descritto nel capitolo 4: Leakage

Dai risultati si può osservare come il calcolo errato della viscosità con l'utilizzo del modello di Sutherland vada ad influire in maniera trascurabile sulle grandezze di output. Di conseguenza è possibile trascurare l'effetto della realtà del gas per quanto riguarda la viscosità al fine di ridurre lo sforzo computazionale necessario.

### 6.1.3 Confronto tra le varie condizioni operative

Sono inoltre state effettuate una serie di simulazioni che a parità di tutti gli altri parametri, variano le condizioni operative della macchina, in modo da poter valutare la variabilità delle grandezze di output di interesse al variare del flusso di massa, della temperatura di ingresso e del regime di rotazione. Per quanto riguarda i modelli termodinamici si è utilizzato il modello analitico di Peng-Robinson per il calcolo della densità, l'entalpia è stata calcolata con l'ipotesi di calore specifico  $c_p = const$  e quindi con l'espressione  $h = c_p T$  e la viscosità viene calcolata con l'ipotesi di Sutherland. Per il trafileamento si è utilizzato il modello a un coefficiente, con il coefficiente di Forchheimer settato ad un valore pari a  $3 \times 10^3$  in maniera da far coincidere la contropressione ottenuta con quella sperimentale delle varie condizioni operative. Sono quindi state effettuate sei simulazioni nelle quali sono state variate:

- il flusso di massa entrante

<i>OC0</i>	<i>OC1</i>	<i>OC2</i>	<i>OC3</i>	<i>OC4</i>	<i>OC5</i>
1.000	1.021	0.821	0.650	0.618	0.563

Tabella 6.6: Flusso di massa adimensionalizzato nelle varie condizioni operative

- la pressione alle porte di uscita

<i>OC0</i>	<i>OC1</i>	<i>OC2</i>	<i>OC3</i>	<i>OC4</i>	<i>OC5</i>
1.000	1.022	0.993	0.948	0.957	0.947

Tabella 6.7: Pressione di uscita adimensionalizzata nelle varie condizioni operative

- la temperatura in ingresso

<i>OC0</i>	<i>OC1</i>	<i>OC2</i>	<i>OC3</i>	<i>OC4</i>	<i>OC5</i>
1.000	0.998	1.003	1.000	1.001	1.006

Tabella 6.8: Temperatura in ingresso adimensionalizzata nelle varie condizioni operative

- il numero di giri

<i>OC0</i>	<i>OC1</i>	<i>OC2</i>	<i>OC3</i>	<i>OC4</i>	<i>OC5</i>
1250	1000	750	1250	1000	750

Tabella 6.9: Giri al minuto [*rpm*] nelle varie condizioni operative

E' dunque possibile visualizzare i risultati in tutte e sei le condizioni operative:

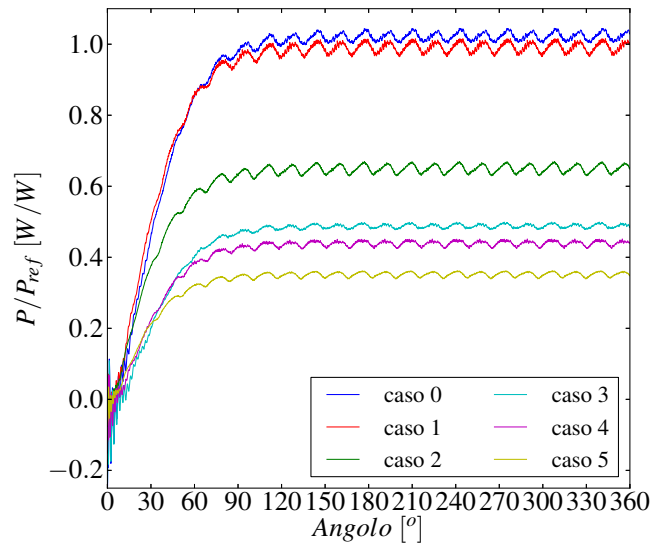


Figura 6.23: Potenza ottenuta adimensionalizzata per le sei condizioni operative considerate

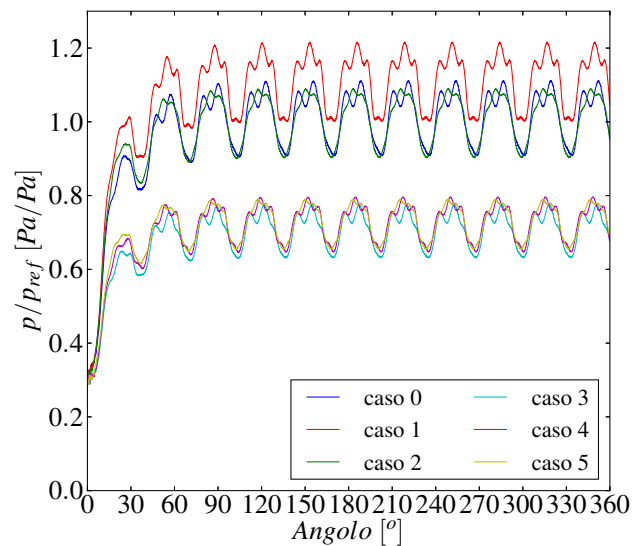


Figura 6.24: Pressione di ingresso adimensionalizzato per le sei condizioni operative considerate

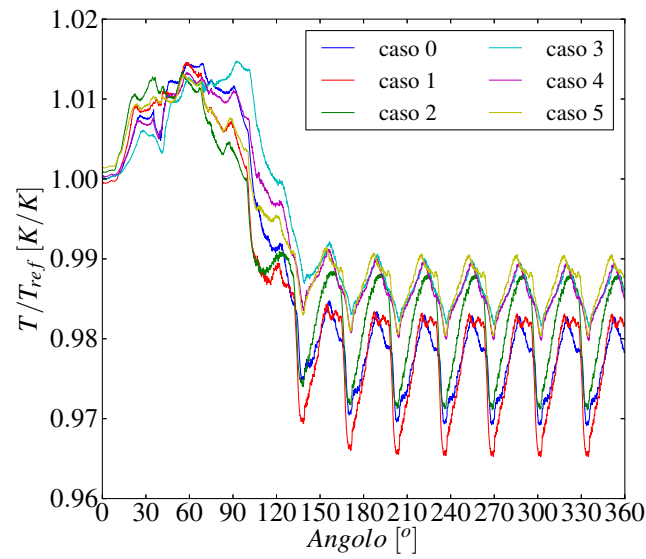


Figura 6.25: Temperatura di uscita adimensionalizzata nelle sei condizioni operative

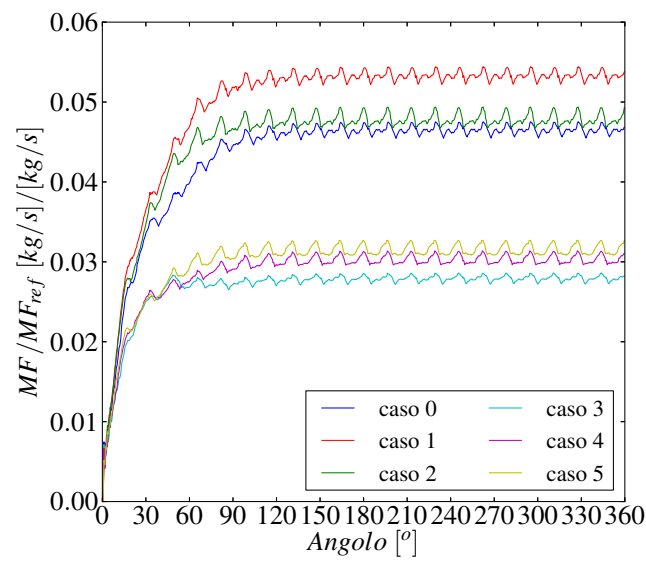


Figura 6.26: Trafilamento nelle sei condizioni operative



Dalla figura 6.23 è possibile osservare in tutti i casi la condizione di regime viene raggiunta dopo  $90^\circ$ , ovvero la distanza tra le porte di ingresso e uscita; sarà dunque l'intervallo angolare necessario a una pala per partire dalla porta di ingresso e arrivare a quella di uscita. Il valore della potenza ottenuta ha una dipendenza lineare con il flusso di massa, infatti raggiunge i valori più alti per le OC0 e OC1, mentre il valore più basso per la OC5.

In figura 6.24 sono mostrati i valori di contropressione: in questo caso tali valori sono stati utilizzati per far coincidere i dati ottenuti con quelli sperimentali e calibrare quindi il coefficiente di trafilemento.

In figura 6.25 si può osservare la temperatura in uscita da una delle sezioni di uscita. Si può notare che dopo  $90^\circ$  la temperatura inizia a diminuire in quanto è il tratto angolare necessario per il fluido che entra ad alta temperatura per espandere ed essere espulso a bassa temperatura. La condizione termica di regime viene raggiunta dopo  $180^\circ$ .

Infine in figura 6.26 è mostrato il flusso di massa attraverso il trafilemento, che varia al variare del rapporto di espansione della macchina.

In particolare per alti rapporti di espansione si avrà anche maggiore trafilemento attraverso la zona tra pala e statore (OC0 OC1 OC2), mentre all'abbassarsi del rapporto di espansione si abbassa anche il flusso di massa (OC3 OC4 OC5).

Infine è possibile mostrare l'andamento della pressione al variare del volume della camera:

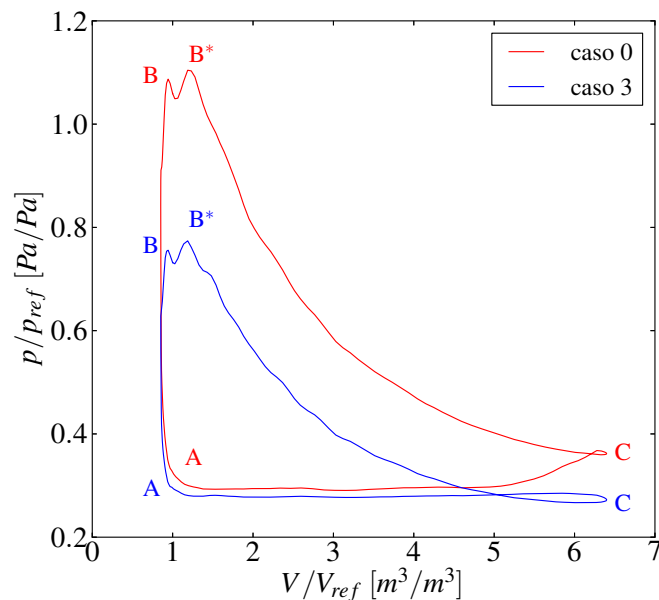


Figura 6.27: Diagramma pressione volume per le OC0 e la OC3

Dalla figura 6.27 è possibile notare che al variare delle condizioni operative possono verificarsi due differenti casistiche. Sarà infatti possibile distinguere tre fasi:

- ammissione A-B: durante questa fase la camera è connessa alla porta di ingresso e quindi la pressione aumenta rapidamente fino a raggiungere un massimo
- espansione B-C: il volume inizia ad aumentare, il che comporta una diminuzione della pressione. Durante la prima fase B-B' la camera è ancora connessa alla porta di ingresso e di conseguenza la pressione si mantiene molto vicina a quella massima. Una volta che la camera non è più connessa alla porta di ingresso si avrà un forte abbassamento di pressione dovuto all'aumento di volume. La fase di espansione termina quando la camera raggiunge il suo volume massimo e viene connessa alla porta di uscita. Una volta arrivato a questo punto il fluido può trovarsi in una condizione in cui è sottoespanso (come nel caso della OC0) o sovraespanso (come nel caso della OC3). Nel primo caso quindi il fluido espanderà diminuendo la sua pressione fino al raggiungimento della pressione di uscita. Nel secondo caso il fluido dovrà aumentare la sua pressione all'inizio della fase di scarico per raggiungere quella di uscita.
- la pressione rimane quella di uscita finché la porta di uscita viene scollegata.

#### 6.1.4 Effetto della turbolenza

Il fluido preso in considerazione in tale lavoro è caratterizzato da un flusso prettamente turbolento, ovvero è un flusso fortemente non stazionario, tridimensionale e con fluttuazioni delle grandezze considerate.

Inoltre la turbolenza ha l'effetto di aumentare la viscosità e la diffusività del fluido.

La teoria della turbolenza permette di identificare all'interno dei fluidi, delle strutture coerenti detti *eddies*. Tali strutture sono caratterizzati dall'aver diverse scale e dal trasferire energia dagli eddies con scala maggiore a quelli con scala minore, comportando una dissipazione di energia sotto forma di calore. In particolare è possibile individuare due scale caratteristiche:

- La macroscale  $L$ : rappresenta la dimensione dei vortici più grandi ed è coincidente con la scala del sistema
- La scala di Kolmogorov  $l_d$  che identifica la più piccola dimensione che i vortici possono assumere. Al di sotto di tale scala gli effetti viscosi

sopraffangono quelli inerziali e non è più possibile trasferire energia, ma solo dissiparla. La condizione per cui si avrà la scala di Kolmogorov, conseguentemente sarà:

$$Re = \frac{l_d u_d}{\nu} \simeq 1 \quad (6.1)$$

Come è noto, le equazioni di Navier-Stokes hanno validità generale; tuttavia nel momento in cui tali equazioni vengono discretizzate nel tempo e nello spazio, per poter considerare la turbolenza bisognerebbe discretizzarle in maniera tanto raffinata da poter risolvere il moto fino alla scala di Kolmogorov e ai tempi ad essa associati, il che comporterebbe un eccessivo sforzo computazionale. Per tener conto comunque della turbolenza si utilizzano quindi dei modelli che tipicamente scompongono la grandezza considerata in un componente medio e uno fluttuante.

Scrivendo le equazioni di conservazione, introducendo l'ipotesi di Boussinesq ( $\bar{a} = -2\mu_T \bar{D}$  dove  $\bar{a}$  è la componente deviatorica del tensore degli sforzi di Reynolds e  $\bar{D}$  è il tensore delle deformazioni) e un'ipotesi simile per la diffusività turbolenta ( $-\rho c \overline{T'v} = k_T \nabla \bar{T}$ ) è possibile ottenere le seguenti equazioni:

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \nabla(\vec{U} \times \vec{U}) = \vec{g} - \frac{\nabla P}{\rho} + \frac{\mu + \mu_t}{\rho} \nabla^2 \vec{U} \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \nabla(\bar{T} \vec{U}) = \frac{\bar{\epsilon}}{c\rho} + \frac{k + k_T}{c\rho} + \nabla^2 \bar{T} \quad (6.4)$$

Dove

- $\epsilon$  è la funzione di dissipazione che tiene conto della conversione di energia cinetica in energia interna;
- $\mu_T$  è la viscosità turbolenta che va ad aggiungersi a quella molecolare;
- $k_T$  è la diffusività turbolenta che va ad aggiungersi a quella molecolare.

Da tali equazioni è possibile notare come l'effetto della turbolenza venga drasticamente semplificato, riducendo i termini fluttuanti non lineari a termini diffusivi nell'equazione con una viscosità effettiva ( $\mu + \mu_T$ ) e una diffusività effettiva ( $k + k_T$ ) che vanno a rimpiazzare quelle molecolari. Poiché la turbolenza va ad accrescere la viscosità e la diffusività molecolare, un fluido turbolento sarà caratterizzato da maggiori dissipazioni dovute alla viscosità

e da un maggiore scambio termico.

Nel caso specifico preso in considerazione in questo lavoro, il fluido è fortemente turbolento ( $Re \gg 100000$ ) sia nei condotti di ammissione e scarico che all'interno della macchina.

I condotti di ammissione e scarico sono coibentati e di conseguenza è possibile ipotizzare che l'unico effetto della turbolenza siano le dissipazioni dovute a una maggiore viscosità, di cui si studierà l'entità nel paragrafo successivo (6.2).

Per quanto riguarda invece l'effetto della turbolenza all'interno della macchina si può considerare anch'essa isolata termicamente e quindi non considerare lo scambio termico tra la macchina e l'ambiente; vi saranno inoltre delle dissipazioni dovute alla turbolenza all'interno della macchina. Tuttavia, nel caso qui considerato, le dissipazioni dovute alla turbolenza non incidono significativamente sulla potenza meccanica totale sviluppata dalla macchina. Inoltre nella macchina è stato introdotto un modello di trafilamento, il cui coefficiente è stato calibrato andando a far coincidere la contropressione calcolata computazionalmente con quella fornita dai dati sperimentali. Tale modello considera delle grandezze globali e quindi si può ipotizzare che tenga conto intrinsecamente anche delle dissipazioni dovute alla turbolenza.

A seguito di tali considerazioni, tutte le simulazioni effettuate sul corpo macchina non utilizzano alcun modello di turbolenza, che viene invece considerato nei condotti a causa delle cadute di pressione che introduce (che risultano in ogni caso molto piccole a causa della forte inerzia del fluido).

## 6.2 Flussaggio

Come è stato mostrato in precedenza, effettuando simulazioni del processo di espansione l'output di potenza ottenuto risulta essere inferiore a quello fornito sperimentalmente.

Partendo da questa osservazione si può ipotizzare che tale discrepanza nei risultati sia dovuta al fatto che la presenza di elementi a monte e a valle del sistema non possa essere trascurata. Infatti, nelle simulazioni del solo corpo macchina le condizioni al contorno sono state imposte alle porte di ingresso e uscita, mentre nella realtà i dati sperimentali forniti sono stati ottenuti da misurazioni effettuate all'inizio del condotto di ammissione e alla fine del condotto di scarico. Con questa semplificazione non si è tenuto conto di due fenomeni:

- Durante il passaggio del fluido nei condotti si avranno necessariamente delle perdite di carico;

- Alla fine di ogni ciclo di espansione si scarica il gas espanso e se ne aspira di nuovo. I due flussi sono non-stazionari, così come il sistema di onde di pressione e di velocità che dalla macchina si propaga nei condotti; Questi fenomeni legati alla non stazionarietà del flusso nei condotti possono andare a influenzare sensibilmente il processo, modificando l'output ottenuto.

Inizialmente si è dunque andato a valutare l'effetto del primo fenomeno, ovvero della caduta di pressione dovuto al passaggio di fluido attraverso i tubi. Per fare questo si è andato a considerare il solo sistema di alimentazione e scarico e i suoi effetti sul flusso. Risulta chiaro che la presenza dei tubi comporterà una caduta di pressione che sarà la risultante delle perdite distribuite, di quelle legate ad eventuali discontinuità del percorso (come ad esempio delle curvature) ed eventualmente alla turbolenza. Andando a studiare i casi stazionari nel tubo di ingresso e di uscita sarà possibile valutare questi effetti in termini di campi di pressione e temperatura risultanti. Si sono dunque separati i tubi di alimentazione e si è andati a studiare come prima cosa il tubo di ammissione.

### 6.2.1 Condotto di ammissione

Il tubo di ingresso è costituito da una sezione di ingresso nella quale sono noti i dati sperimentali di pressione e temperatura, nelle varie condizioni operative considerate da due sezioni di uscita che corrispondono alle sezioni di entrata della macchina; tra la sezione di ingresso e quelle di uscita si avrà il condotto, che presenta ad un certo punto una curvatura molto marcata.

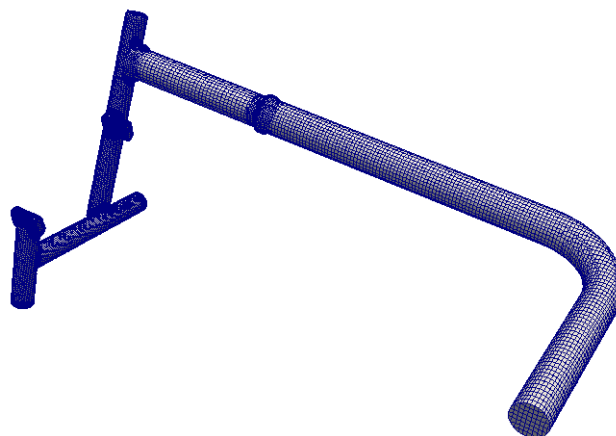


Figura 6.28: Condotto di ammissione: mesh

Sarà inoltre noto il flusso di massa passante attraverso i tubi nei vari casi. Per quanto riguarda le condizioni al contorno si avrà dunque:

- Temperatura imposta alla sezione di ingresso e pari a quella fornita dai dati sperimentali. I tubi risultano essere coibentati e, quindi, si può ipotizzare che non vi sia scambio di calore con l'ambiente;
- Flusso di massa imposto alla sezione di ingresso e pari a quello fornito dai dati sperimentali;
- Pressione totale imposta nelle due sezioni di uscita (ovvero le porte di ingresso della macchina). Tale pressione è stata variata iterativamente fino ad ottenere una pressione statica alla sezione di ingresso pari a quella sperimentale.

Al fine di valutare l'effetto della turbolenza sulla caduta di pressione tra sezione di ingresso e sezioni di uscita, si prende in considerazione il caso OC0 e si effettua la simulazione utilizzando tre differenti modelli:

- modello laminare, non si considera la turbolenza;
- modello k-Epsilon per considerare gli effetti turbolenti. Per imporre i valori necessari al modello si faranno le seguenti considerazioni:

- $k$  [ $J/kg$ ], ovvero l'energia cinetica turbolenta può essere scritta nel seguente modo:

$$k = \frac{1}{2} \left( U_x'^2 + U_y'^2 + U_z'^2 \right) \quad (6.5)$$

dove  $U_x'^2$ ,  $U_y'^2$  e  $U_z'^2$  sono le componenti della fluttuazione della velocità nelle direzioni x, y e z. Ipotizzando che la turbolenza sia isotropa inizialmente e pari al 5% della velocità del fluido, la formula si potrà ridurre a:

$$k = \frac{3}{2} \left( \frac{5}{10} U \right)^2 \quad (6.6)$$

- $\epsilon$  [ $J/s \cdot kg$ ], ovvero il coefficiente di dissipazione che può essere espresso con la seguente formulazione:

$$\epsilon = \frac{C_{\mu}^{0.75} k^{1.5}}{l} \quad (6.7)$$

dove  $C_{\mu}$  è una costante del modello  $k-\epsilon$  ed è pari a 0.09, mentre  $l$  è il 20% della lunghezza della sezione di ingresso.

- modello k-Omega per considerare gli effetti turbolenti. In tale modello la formulazione della k è identica a quella dell'equazione 6.6 mentre la  $\omega$  può essere scritta come:

$$\omega = \frac{\epsilon}{k} \quad (6.8)$$

Per quanto riguarda il modello laminare si possono osservare i seguenti risultati:

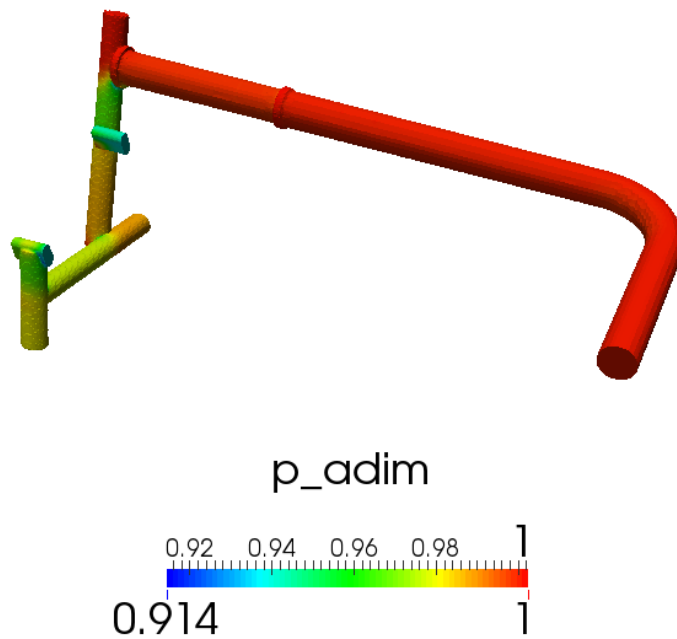


Figura 6.29: Condotto di ammissione: pressione adimensionalizzata nel caso senza turbolenza

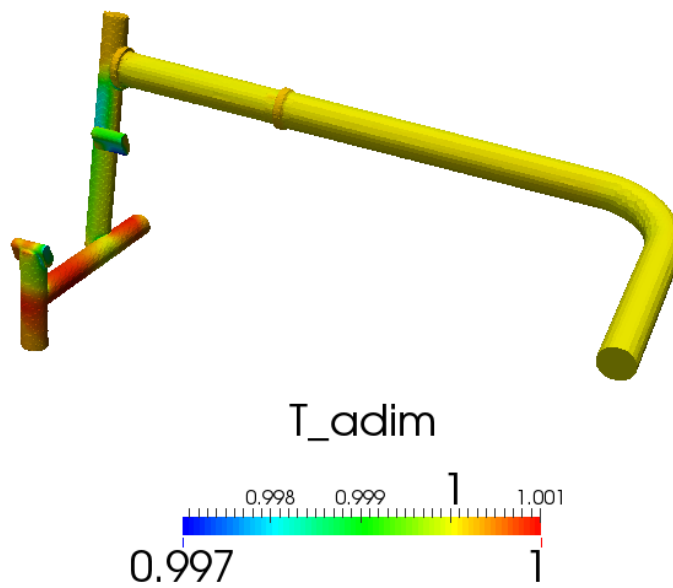


Figura 6.30: Condotto di ammissione: temperatura adimensionalizzata nel caso senza turbolenza

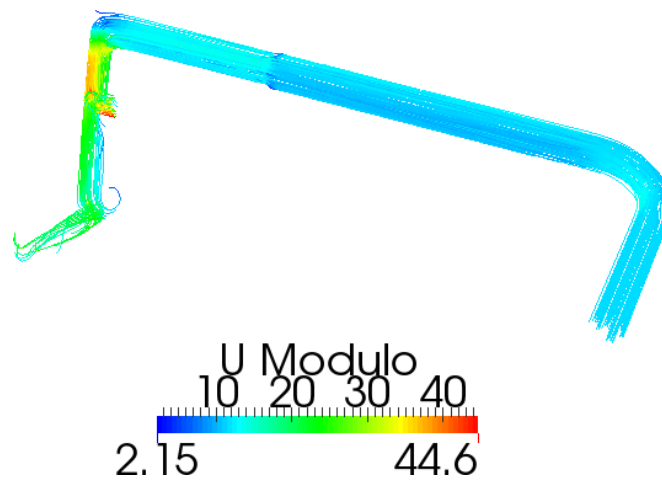


Figura 6.31: Condotto di ammissione: Linee di flusso della velocità nel caso senza turbolenza

Inoltre si possono utilizzare anche dei modelli di turbolenza RANS: il modello k-Omega e il modello k-Epsilon.



Utilizzando il modello k-Epsilon si otterrà:

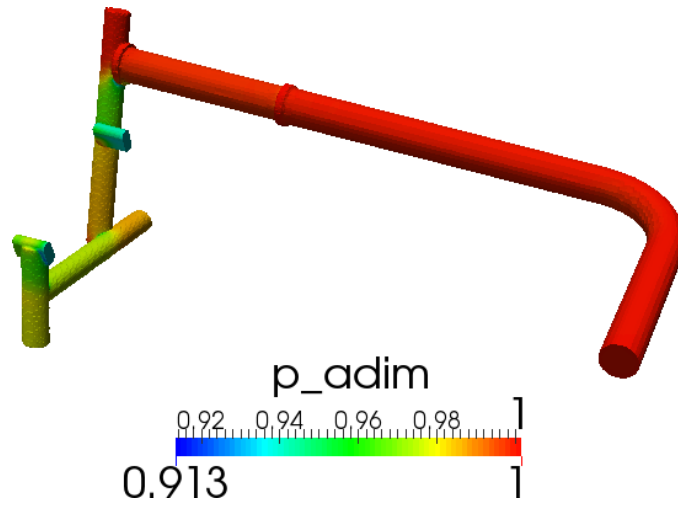


Figura 6.32: Condotto di ammissione: pressione adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellata con un k-Epsilon

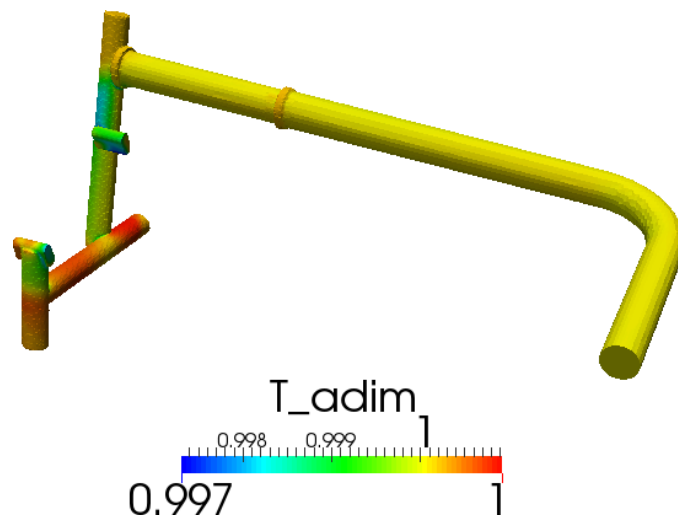


Figura 6.33: Condotto di ammissione: temperatura adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellata con un k-Epsilon

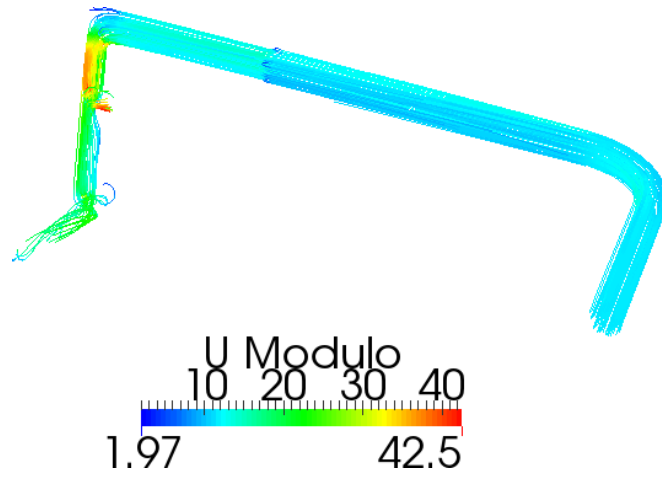


Figura 6.34: Condotto di ammissione: Linee di flusso della velocità nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Epsilon

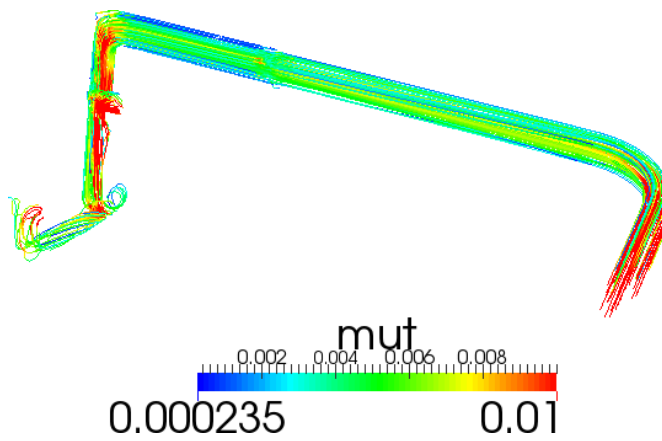


Figura 6.35: Condotto di ammissione: Linee di flusso della viscosità turbolenta nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Epsilon

Infine modellizzando la turbolenza con un k-Omega si avrà:

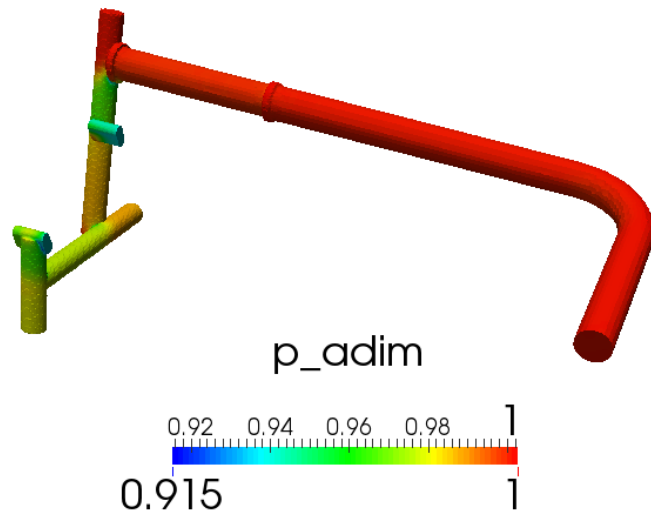


Figura 6.36: Condotto di ammissione: pressione adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega

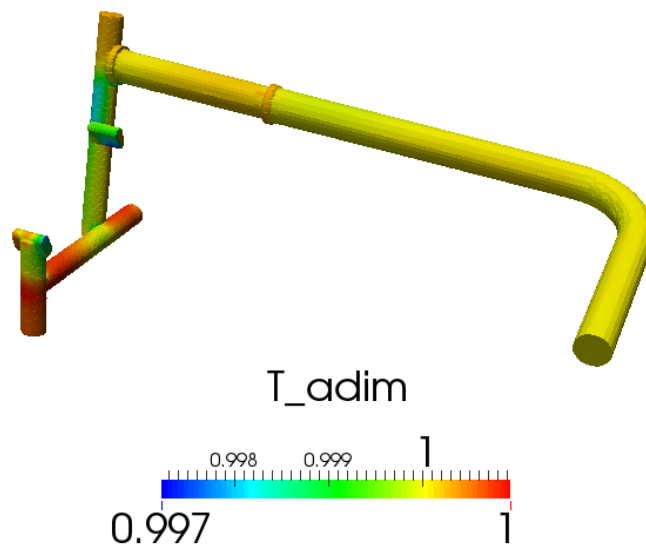


Figura 6.37: Condotto di ammissione: temperatura adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega

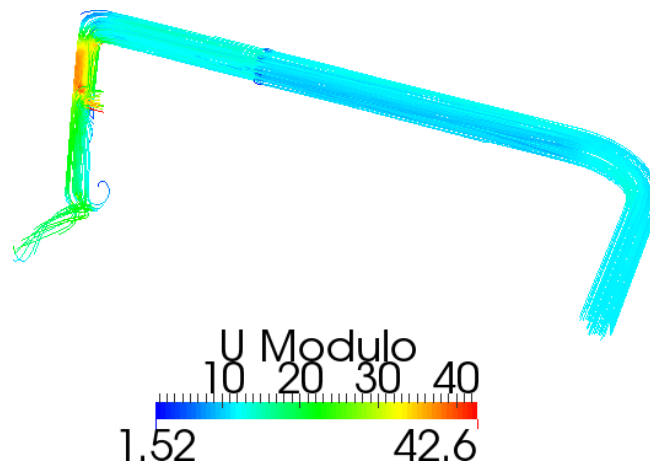


Figura 6.38: Condotto di ammissione: Linee di flusso della velocità nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega

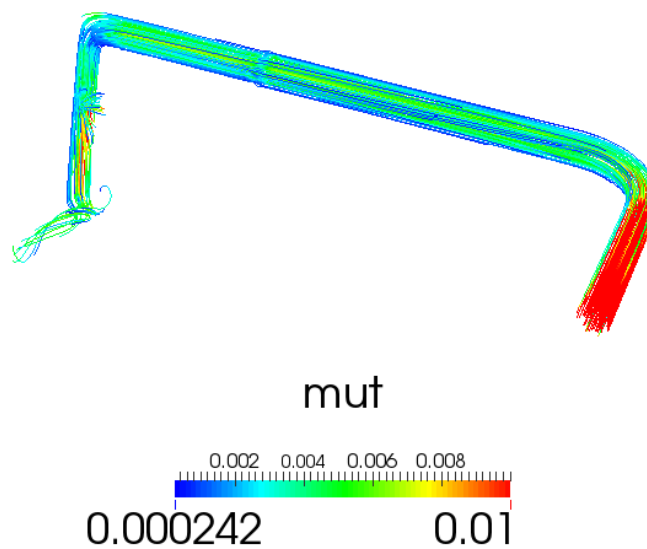


Figura 6.39: Condotto di ammissione: Linee di flusso della viscosità turbolenta nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega

Da questi risultati è possibile fare una serie di osservazioni. La caduta di pressione tra la sezione di ingresso e le in tutte e tre le simulazioni effettuate risulta molto simile e pari a circa  $0.5 \text{ bar}$ . In particolare è possibile osservare che nel primo tratto di tubo la caduta di pressione risulta trascurabile rispetto invece alla seconda parte di tubo. Da questa considerazione è

possibile ipotizzare che il  $\Delta p$  dovuto alle dissipazioni turbolente sia trascurabile rispetto a quello della perdita concentrata dovuta alla curvatura e al cambio di sezione, che risultano essere la causa fondamentale della caduta di pressione tra ingresso e uscita. Osservando inoltre le linee di flusso della velocità si può notare che il flusso curva in prossimità delle sezioni di uscita il che indica la possibile presenza di turbolenza, che può essere confermata sia secondo il modello k-Epsilon che nel k-Omega dall'andamento della viscosità turbolenta il cui valore aumenta in corrispondenza di tali zone.

Si può inoltre mostrare l'andamento della velocità all'interno del tubo nei tre casi:

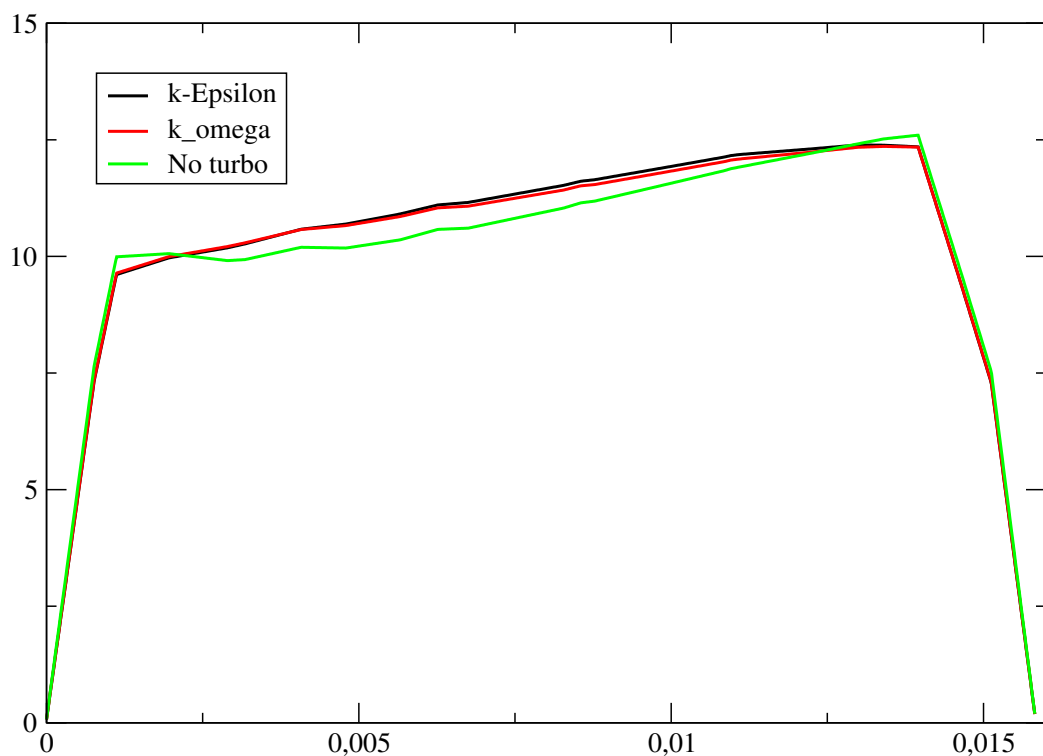


Figura 6.40: Tubo di inlet: Profilo di velocità all'interno del tubo nel caso laminare e turbolento con modellizzazione k-Epsilon e k-Omega

Da tale immagine si può notare come i profili di velocità nei due casi con modellazione della turbolenza siano coerenti e praticamente coincidenti tra loro. Nel caso laminare si avrà un leggero scostamento del profilo di velocità: vicino alla parete, dal momento che si considera solamente la viscosità molecolare del fluido si avranno velocità leggermente superiori a quelle calcolate con il modello di turbolenza, in cui si tiene conto anche della viscosità turbolenta. Il profilo rimane comunque molto simile a quello calcolato

utilizzando dei modelli di turbolenza. Sarà dunque possibile effettuare le simulazioni sul condotto di ammissione per tutte le condizioni operative della macchina e valutare la caduta di pressione tra la sezione di ingresso e quelle di uscita anche utilizzando un modello laminare. In particolare si avrà una caduta di pressione detta  $\Delta P_0$  tra la sezione di ingresso e la sezione di uscita più lontana, mentre una caduta di pressione detta  $\Delta P_1$  tra la sezione di ingresso e quella di uscita più vicina.

I risultati ottenuti possono essere sintetizzati nella seguente tabella:

	<i>OC0</i>	<i>OC1</i>	<i>OC2</i>	<i>OC3</i>	<i>OC4</i>	<i>OC5</i>
$\Delta P_0$	0.509bar	0.588bar	0.428bar	0.343bar	0.310bar	0.258bar
$\Delta P_1$	0.507bar	0.586bar	0.426bar	0.342bar	0.257bar	0.257bar

Tabella 6.10: Caduta di pressione tra la sezione di ingresso e le sezioni di uscita del condotto di ammissione, coincidenti con le sezioni di entrata della macchina

Come è possibile notare dai valori in tabella, a parità di condizione operativa la  $\Delta P_0$  risulta essere sempre maggiore della  $\Delta P_1$  in quanto tra le due vi è un tratto di condotto che comporta un'ulteriore caduta. Inoltre i valori di  $\Delta P$  vanno decrescendo al diminuire delle velocità medie all'interno del condotto, a loro volta dipendenti dalla portata massica e dal salto di pressione presi in considerazione.

### 6.2.2 Condotto di scarico

Il condotto di scarico della macchina è costituito da una sezione di uscita in corrispondenza della quale sono note pressione e temperatura in tutte le condizioni operative prese in considerazione, in quanto misurate sperimentalmente e da due sezioni di ingresso che corrispondono alle porte di uscita dell'espansore volumetrico. Sono inoltre noti i flussi di massa nelle varie condizioni operative, che saranno gli stessi del tubo di ammissione in quanto nel sistema completo tali condotti sono collegati dall'espansore e quindi il flusso in ingresso sarà lo stesso di quello in uscita.

Per effettuare le simulazioni si imporranno dunque le seguenti condizioni al contorno:

- Pressione totale imposta nelle due sezioni di entrata che viene fatta variare iterativamente in maniera da far coincidere la pressione statica alla sezione di uscita;
- Flusso di massa fissato uscente dalla sezione di uscita;

- Temperatura fissata alle due sezioni di ingresso e variata iterativamente per ottenere il valore alla sezione di uscita coincidente con quello sperimentale noto. I tubi inoltre sono coibentati e quindi si può ipotizzare che non vi sia scambio di calore con l'ambiente;
- Turbolenza modellata con il modello k-Omega, utilizzando come condizioni al contorno i valori di  $k$  e  $\omega$  risultanti dalle equazioni 6.6 e 6.8.

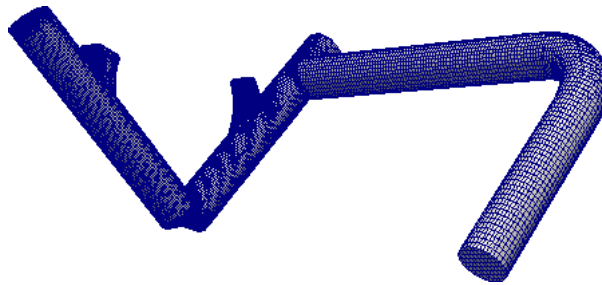


Figura 6.41: Condotto di scarico: mesh

Le simulazioni sono state effettuate per tutte le condizioni operative. A titolo esemplificativo si riportano i campi di pressione, temperatura, velocità e viscosità turbolenta per la OC0:

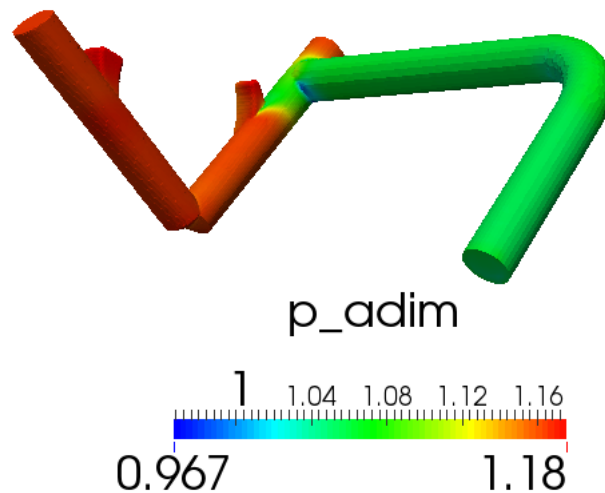


Figura 6.42: Condotto di scarico: pressione adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega

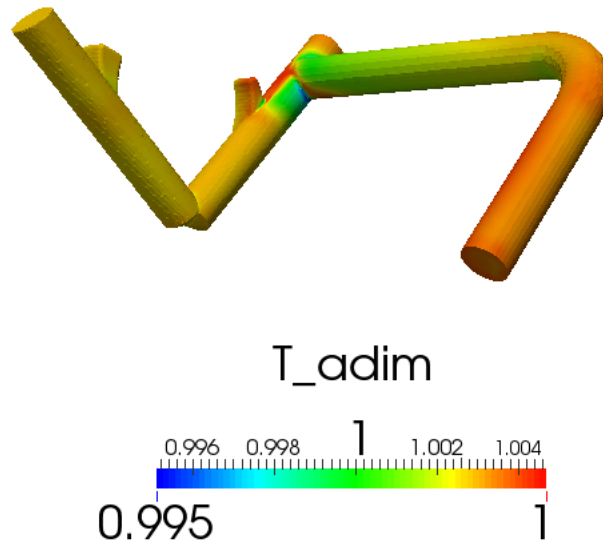


Figura 6.43: Condotto di scarico: temperatura adimensionalizzata nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega

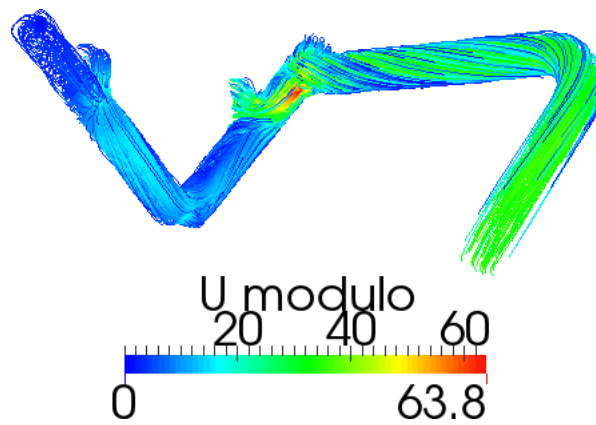


Figura 6.44: Condotto di scarico: linee di flusso della velocità nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega



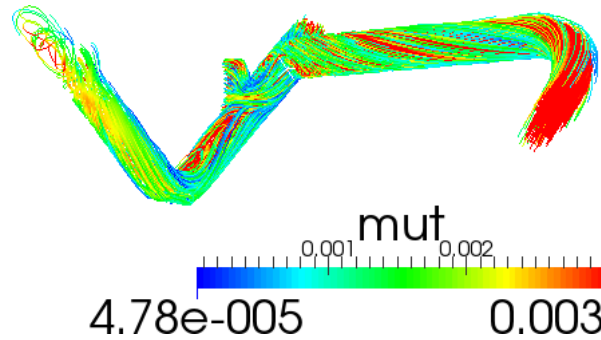


Figura 6.45: Condotto di scarico: linee di flusso della viscosità turbolenta nel caso in cui la turbolenza venga modellizzata con un k-Omega

Anche in questo caso è possibile fare una serie di osservazioni. Dal campo di pressione si può notare che nel primo tratto la caduta di pressione risulta limitata. In corrispondenza del gomito tra i due tubi si avrà una caduta di pressione dovuta all'aumento di velocità che nasce a causa della curvatura e in corrispondenza di tale zona si avrà la maggior parte del  $\Delta p$ ; infatti tale perdita concentrata risulta essere la principale causa della caduta di pressione lungo il condotto. Osservando il campo di velocità si può notare un movimento rotatorio organizzato del flusso sul piano circonferenziale, che risulta essere derivato dalla componente tangenziale della velocità del fluido che percorre il condotto. Si possono inoltre evidenziare elevati valori di viscosità turbolenta e quindi di dissipazioni dovute alla turbolenza in corrispondenza della curvatura e delle sezioni di uscita. Tali dissipazioni risultano comunque trascurabili.

Dai risultati delle simulazioni nelle varie condizioni operative è possibile valutare il  $\Delta P$  nei sei casi. La prima caduta di pressione  $\Delta P_0$  è quella tra la porta di uscita più vicina all'uscita e la sezione terminale del tubo, mentre  $\Delta P_1$  è quella compresa tra la porta più lontana dell'uscita e la sezione finale. I valori ottenuti sono riportati nella seguente tabella:

	<i>OC0</i>	<i>OC1</i>	<i>OC2</i>	<i>OC3</i>	<i>OC4</i>	<i>OC5</i>
$\Delta P_0$	0.214 bar	0.233 bar	0.156 bar	0.103 bar	0.092 bar	0.078 bar
$\Delta P_1$	0.214 bar	0.281 bar	0.189 bar	0.125 bar	0.112 bar	0.095 bar

Tabella 6.11: Caduta di pressione tra le sezioni di uscita e la sezione di uscita del condotto di scarico, coincidenti con le sezioni di uscita della macchina

Anche in questo caso la caduta di pressione risulta dipendente dalla distanza tra le sezioni di ingresso e quella di uscita e dalle velocità medie all'interno del condotto. In particolare, nel condotto di uscita si avrà la stessa

portata massica che si ha nel condotto di ingresso, tuttavia avendo pressioni più basse anche le velocità medie saranno minori, il che comporta delle cadute di pressione inferiori rispetto al condotto di ammissione, nonostante anche in questo caso vi sia una curvatura marcata che induce una perdita concentrata.

Una volta calcolate le cadute di pressione nei condotti è possibile considerare tale fattore e correggere quindi i dati sperimentali.

In particolare si può modellare la presenza del tubo e della conseguente caduta di pressione come una laminazione isoentalpica.

E' possibile dunque visualizzare nel diagramma T-s l'espansione della macchina volumetrica nel caso venga o meno considerata la caduta di pressione nei condotti :

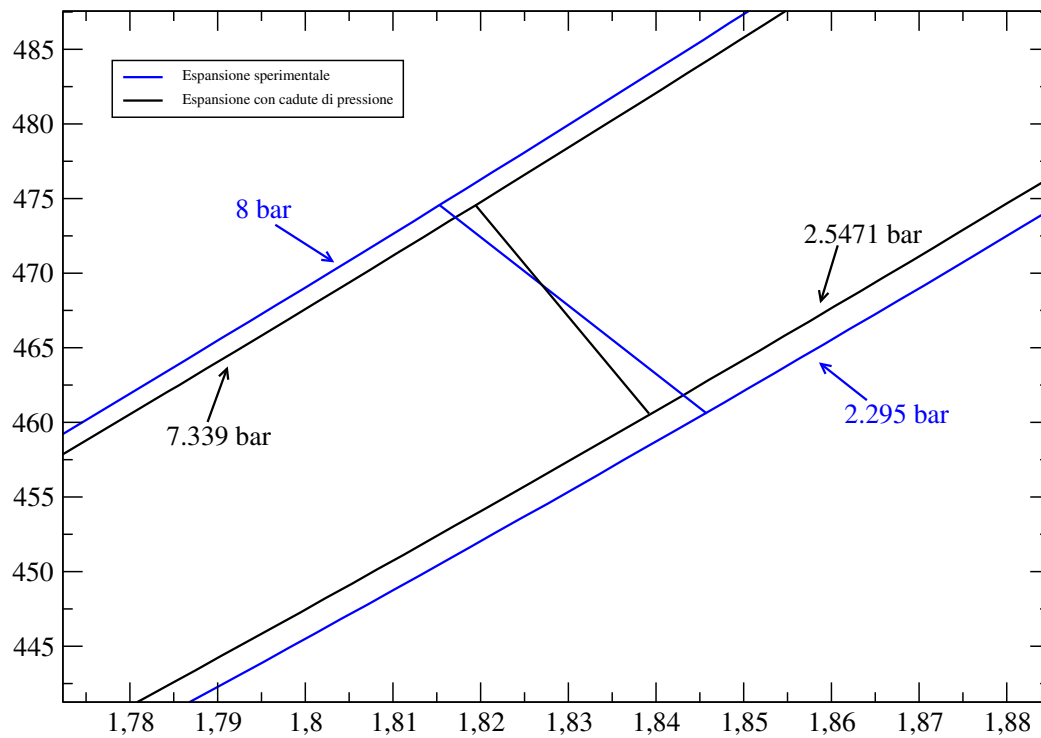


Figura 6.46: Espansione nel diagramma T-s considerando la caduta di pressione o meno

Inoltre è possibile calcolare il rendimento isoentropico dell'espansore, che risulterà maggiore nel caso venga tolta la caduta di pressione dovuta ai condotti.

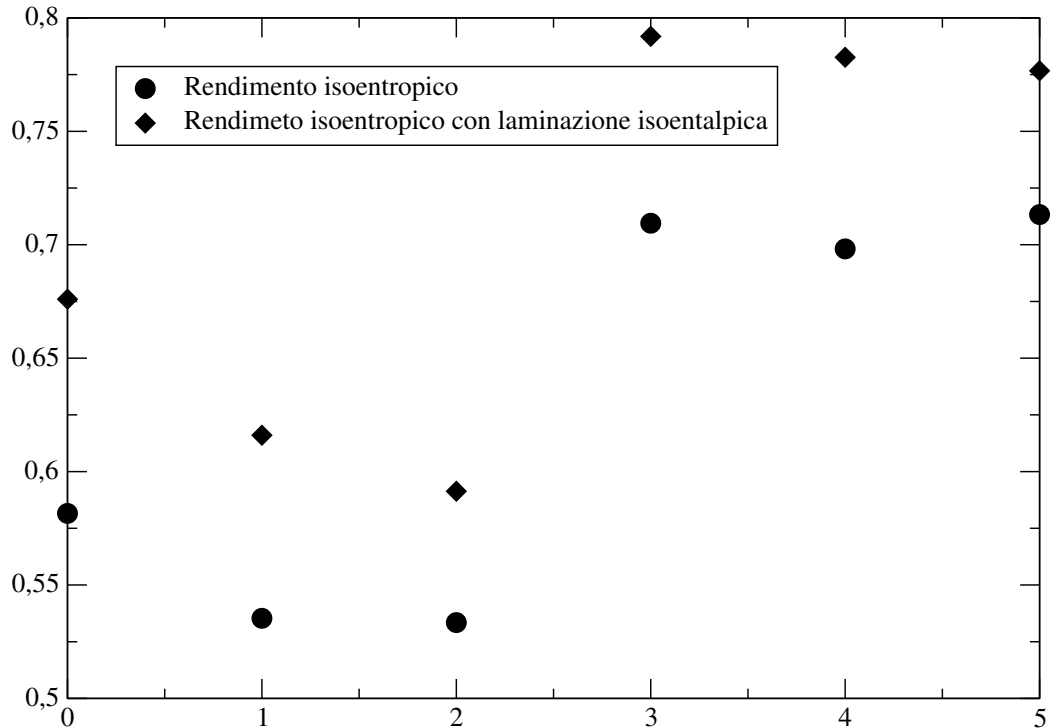


Figura 6.47: Rendimento isoentropico della macchina considerando la caduta di pressione o meno

### 6.3 Macchina completa

Come già detto nel paragrafo 6.1.3 le simulazioni effettuate sul solo corpo macchina risultano avere un output di potenza inferiore a quello ottenuto sperimentalmente in tutte e sei le condizioni operative. Questo risultato può essere giustificato dal fatto che le simulazioni del solo corpo macchina vengono effettuate imponendo o flusso di massa in ingresso e pressione statica in uscita o pressione totale in ingresso e pressione statica in uscita: in entrambi i casi si tratta di condizioni stazionarie.

In realtà il flusso dall'espansore volumetrico al condotto di scarico e da quello di ammissione all'espansore volumetrico è fortemente non-stazionario, così come il sistema di onde di pressione e di velocità che dalla macchina si propaga ai condotti. Infatti sia nel condotto di scarico che nel condotto di ammis-

sione si avrà la presenza di onde di pressione e di depressione.

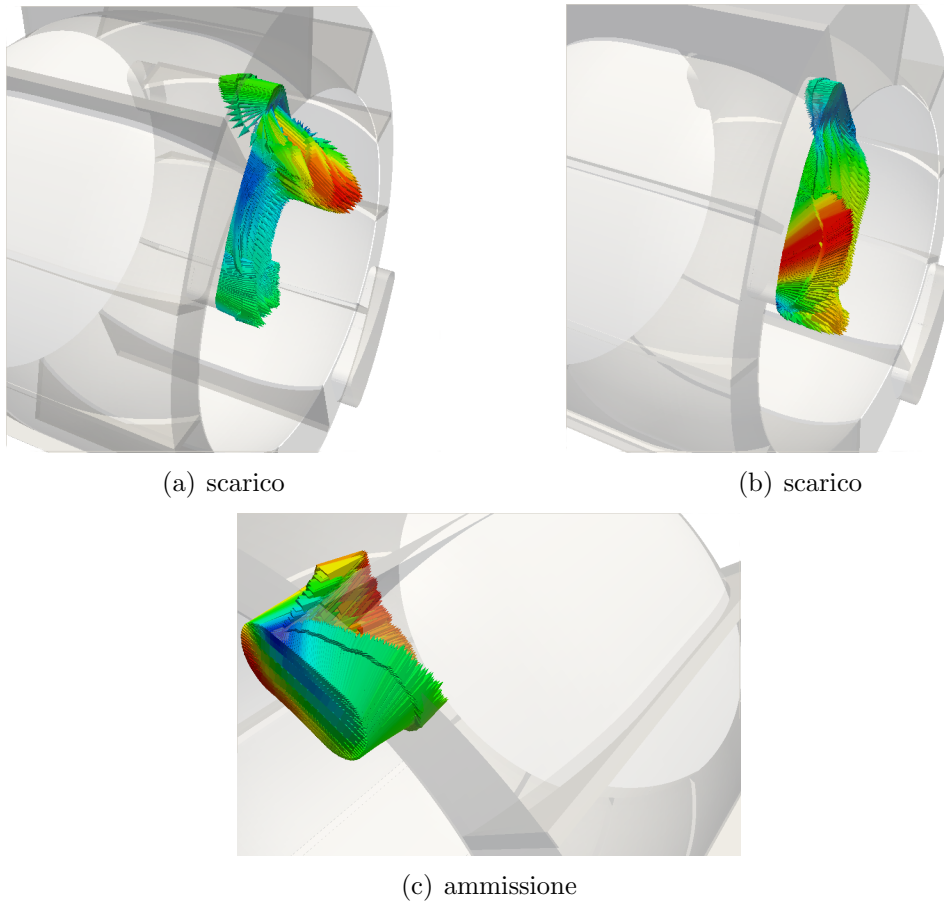


Figura 6.48: Andamento della velocità nelle sezioni di ingresso e uscita della macchina

Per quanto riguarda il condotto di scarico quando la pala rotorica raggiunge la sezione di uscita si avrà una situazione in cui la pressione all'interno della camera è diversa da quella del condotto. In particolare solitamente la pressione nella camera è massima, mentre nel condotto è molto inferiore. Si avrà quindi un salto di pressione e un' accelerazione del flusso. Man mano che la pala si muove e il volume della camera a contatto con la sezione di uscita aumenta, il salto di pressione va riducendosi perché la pressione della camera diminuisce per la fuoriuscita del gas. A causa di questo meccanismo nel tubo di scarico si produrranno una serie di onde di pressione che si propagano riflettendosi parzialmente ad ogni discontinuità ed interferendo con altre onde di pressione se presenti fino a raggiungere la sezione di estremità. Un meccanismo simile si verifica nel condotto di ammissione, dove si verificheranno delle onde di depressione nel condotto. Queste oscillazioni di

pressione andranno ad interferire con il processo di riempimento della camera: se la pala raggiunge la sezione di ingresso quando si ha un picco positivo di pressione si avrà un miglioramento nel riempimento della camera.

Oltre all'effetto delle onde di pressione si avrà un effetto legato all'inerzia del fluido. Infatti il fluido all'interno del condotto sarà attirato all'interno della camera dal movimento della pala con una certa frequenza. Se tale frequenza si accorda con la frequenza propria del fluido si ottiene un miglior riempimento della camera.

Tali effetti dinamici vanno certamente a influenzare l'espansione effettuata dalla macchina volumetrica. Al fine di studiarne l'effetto si è effettuata una comparazione, a parità di tutti i parametri, tra l'espansione considerando la sola macchina e quella considerando il sistema macchina, tubo di ammissione e tubo di scarico.

### 6.3.1 Sistema macchina-condotti

Per quanto riguarda la simulazione effettuata sulla macchina completa si è generata una mesh partendo da quella dell'espansore volumetrico e aggiungendo i condotti di aspirazione e scarico, per un totale di circa 700000 celle.

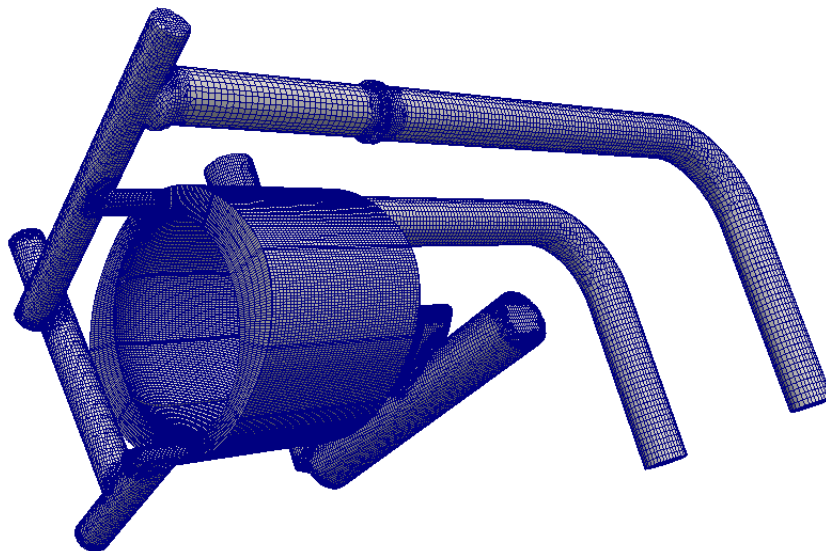


Figura 6.49: Mesh del sistema costituito da espansore volumetrico e condotti

Nella prova presa in considerazione le condizioni al contorno sono state imposte alla sezione di ingresso del condotto di ammissione e alla sezione di uscita del condotto di scarico. In particolare sono state imposte le seguenti condizioni:

- flusso di massa imposto alla sezione di ingresso del condotto e pari a  $\frac{m}{m_{ref}} = 0.864$ ;
- pressione statica imposta nella sezione di scarico pari a  $\frac{p}{p_{ref}} = 1.252$ ; adimensionalizzata
- temperatura imposta alla sezione di ingresso del condotto di ammissione pari a  $\frac{T}{T_{ref}} = 1$ ;
- regime di rotazione pari a 1252 rpm.

Per quanto riguarda le condizioni imposte alle porte di ingresso e uscita della macchina si utilizzerà una condizione di tipo ciclico (AMI) che viene utilizzata quando si vuole proiettare la geometria di una *patch* sull'altra. In questo modo due *patch* (non conformi) possono essere trattate come se fossero fisicamente connesse tra di loro. In particolare in questo modo sarà possibile accoppiare la griglia dei condotti che rimane sempre uguale, con quella della macchina che viene gestita con le opportune applicazioni di movimento della mesh.

Per quanto riguarda il modello di trafilamento si utilizza il modello a un coefficiente, come descritto nel paragrafo 6.1.1. In particolare in questo caso si impone il coefficiente di Darcy pari a  $10^{10}$  e il coefficiente di Forchheimer pari a  $10^5$  sulle celle appartenenti alla zona di trafilamento.

Non si è inoltre utilizzato alcun modello di turbolenza per i motivi anticipati nel paragrafo 6.1.4.

Infine per quanto riguarda i modelli termodinamici si è utilizza il modello RKS per il calcolo della densità, considerando quindi l'effetto di gas reale.

Per quanto riguarda il calcolo dell'entalpia si è imposto il calore specifico costante e pari a  $c_p = 857 \frac{J}{kg \cdot K}$ . Per quanto riguarda invece il calcolo della viscosità si è utilizzato il modello di Sutherland usando i seguenti valori:  $T_s = 116$  e  $A_s = 1.4792 \times 10^{-6}$ .

Effettuando la simulazione si può notare come sia necessario molto più tempo rispetto alle prove precedenti perché la macchina raggiunga la condizione di regime, a causa della presenza dei condotti.

Una volta raggiunta tale condizione sarà possibile visualizzare i campi di velocità pressione e temperatura.

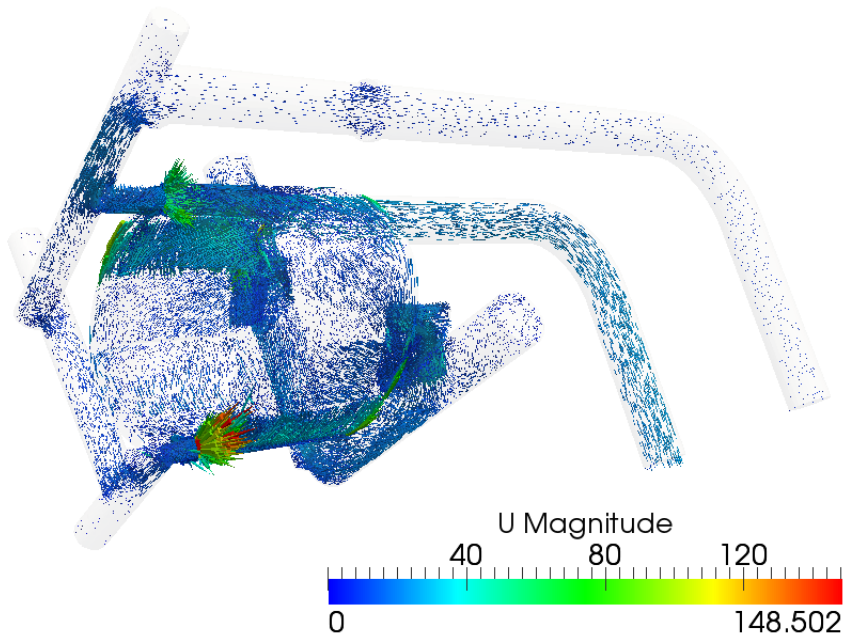


Figura 6.50: Campo di velocità nel sistema espansore-condotti

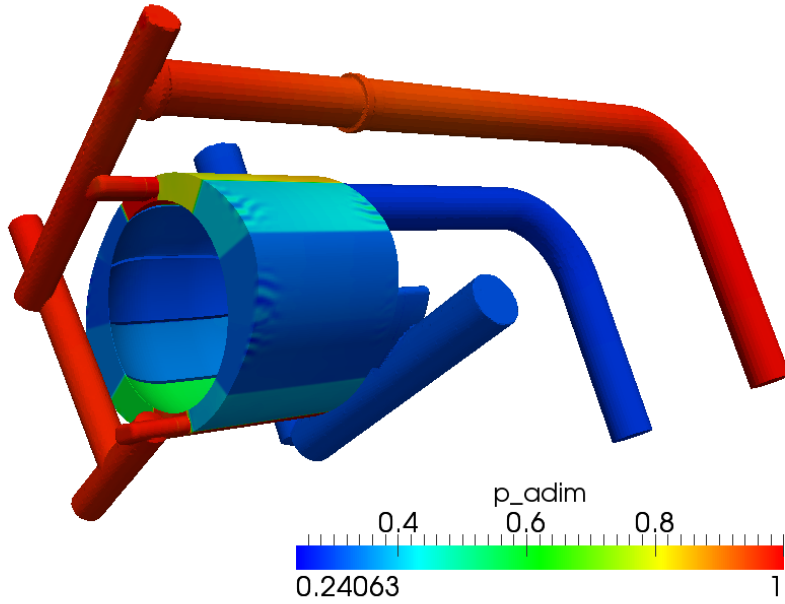


Figura 6.51: Campo di pressione adimensionalizzata nel sistema espansore-condotti

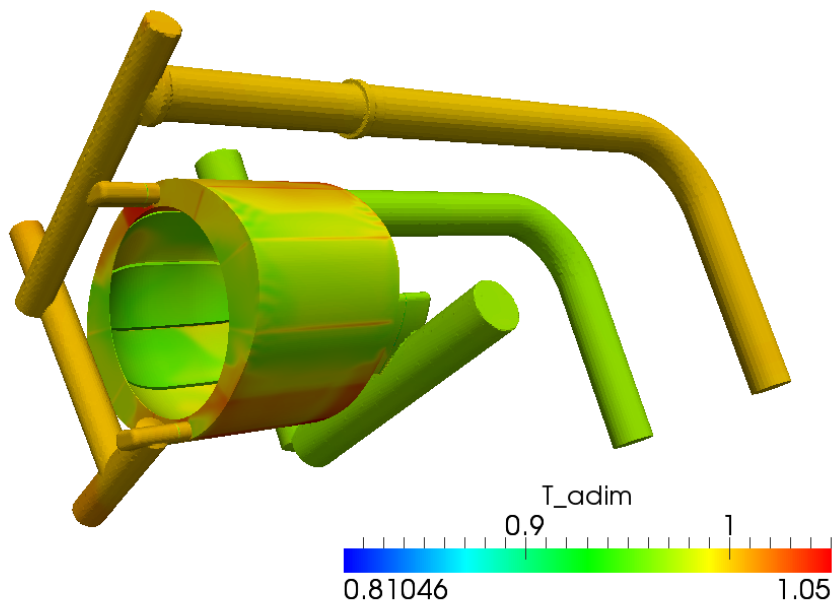


Figura 6.52: Campo di temperatura adimensionalizzata nel sistema espansore-condotti

Dai campi è possibile osservare che quando il fluido entra attraverso il condotto di ammissione si trova ad alta pressione ed alta temperatura. Lungo il tubo si avrà una piccola caduta di pressione, dopo di che il fluido entrerà nella camera dell'espansore che si trova connessa con il condotto in quel momento e andrà espandendo. Durante l'espansione pressione e temperatura diminuiranno finché la camera non raggiungerà la porta di uscita. A quel punto il fluido verrà scaricato dalla macchina e entrerà nel condotto di scarico dove subirà un'ulteriore caduta di pressione.



E' interessante inoltre osservare come vari la pressione dalla sezione di ingresso del tubo di ammissione a quelle di ingresso della macchina:

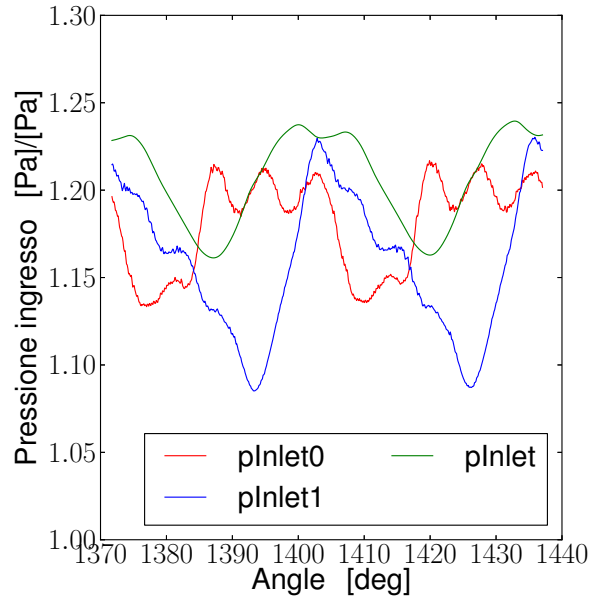


Figura 6.53: Confronto tra l'andamento della pressione sulla sezione di ingresso del condotto e sulle due sezioni di ingresso dell'espansore

Dalla Figura 6.53 è possibile osservare come le pressioni delle porte di ingresso della macchina siano inferiori a quella della sezione di ammissione del condotto a causa della caduta di pressione lungo il tubo. Inoltre confrontando l'andamento delle pressioni nelle due sezioni di ingresso della macchina è possibile notare un andamento notevolmente differente e una asimmetria degli andamenti dovuta al numero dispari delle palette della macchina e a una diversa lunghezza delle diramazioni del condotto che porta alle due porte di ammissione, il che comporterà un risultato diverso al sommarsi delle onde di pressione. Risulta quindi motivata l'ipotesi che gli effetti dinamici dovuti alle onde di pressione nei condotti possano andare ad influire nelle prestazioni della macchina. Considerazioni analoghe possono essere fatte confrontando le pressioni alle sezioni di uscita della macchina e alla sezione estrema del condotto.

Si può inoltre visualizzare il flusso di massa in ingresso nella macchina:

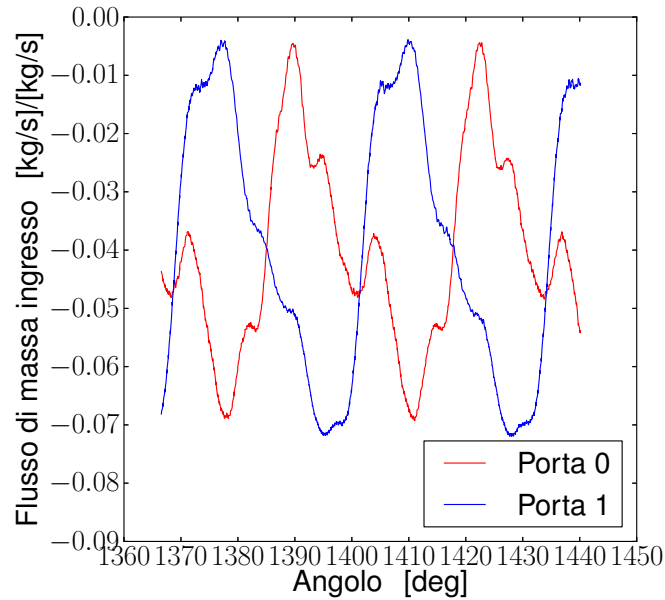


Figura 6.54: Confronto tra l'andamento della pressione sulla sezione di ingresso del condotto e sulle due sezioni di ingresso dell'espansore

Il flusso di massa risulterà oscillante, al contrario della sezione di ingresso del condotto dove risulta essere costante. Inoltre il flusso è sfasato tra le due porte di ingresso della macchina e, in particolare, laddove vi è una valle per una sezione vi sarà un picco per l'altra a causa del numero dispari di pari.

Tale condizione alle sezioni di ingresso risulta fortemente differente dal flusso di massa costante e imposto che si ha nelle prove del solo corpo macchina, il che andrà inevitabilmente a influire sulle grandezze globali di output della macchina.

Sarà infine possibile visualizzare la potenza prodotta, il cui valore medio adimensionalizzato risulta essere pari a  $\frac{P}{P_{ref}} = 1.205$ .

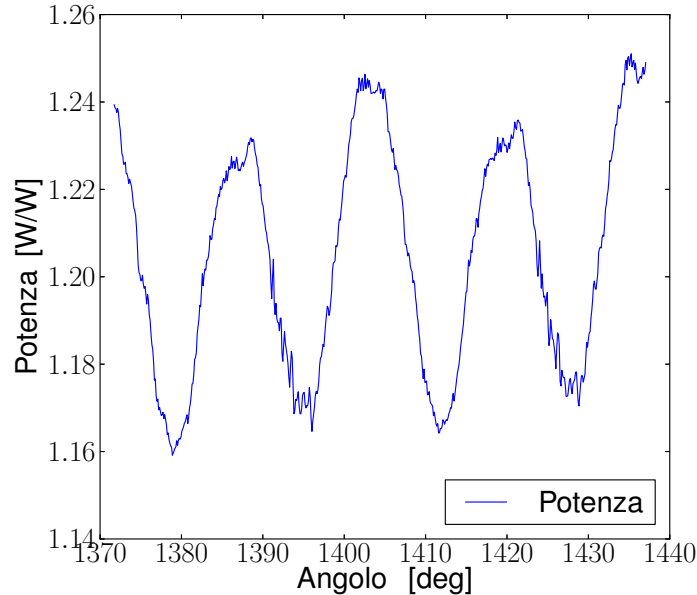


Figura 6.55: Potenza calcolata per il sistema espansore-condotti

### 6.3.2 Macchina singola

Al fine di valutare gli effetti dinamici dovuti alla presenza dei condotti di ammissione e scarico viene effettuata un'ulteriore simulazione sul solo espansore volumetrico.

Lo scopo di tale prova è quello di valutare, a parità di tutte le altre condizioni, la potenza prodotta dalla macchina, senza considerare alcun altro elemento. Per fare questo le condizioni al contorno verranno imposte in corrispondenza delle porte di ingresso e di uscita della macchina.

In particolare per poter ragionare a parità di condizioni si sono imposte come condizioni al contorno nelle sezioni di ingresso e uscita della macchina i valori medi su tali *patch* ottenuti dalla simulazione del sistema espansore-condotti:

- flusso di massa imposto alle porte di ingresso della macchina: per quanto riguarda la porta più vicina al condotto di ammissione si impone una portata pari al 50.151% della portata totale entrante nel sistema, mentre nell'altra sezione si impone il restante 49.849%

- pressione statica imposta alle porte di uscita della macchina: sulla sezione di uscita più vicina alla sezione terminale del condotto di scarico si impone una pressione adimensionalizzata pari a  $\frac{p}{p_{ref}} = 1.356$ , mentre sull'altra sezione si avrà  $\frac{p}{p_{ref}} = 1.376$
- temperatura imposta alle porte di ingresso della macchina, pari a un valore  $\frac{T}{T_{ref}} = 1$

Per quanto riguarda il modello di trafilemento, per analogia con la prova sul sistema completo si utilizza il modello a un coefficiente con coefficiente di Darcy pari a  $10^{10}$  e il coefficiente di Forchheimer pari a  $10^5$  sulle celle appartenenti alla zona di trafilemento.

Si utilizza inoltre la legge di Redlich-Kwong-Soave per il calcolo della densità, l'ipotesi  $h = c_p T$  per il calcolo dell'entalpia e il modello di Sutherland per il calcolo della viscosità, con i coefficienti indicati nel paragrafo 6.3.1. Da tale prova si potranno osservare, a regime, le grandezze in output.

Per quanto riguarda la pressione si può visualizzare il valore mediato sulla porta di ingresso più lontana della sezione di ingresso del condotto di ammissione. Tale grandezza assumerà un valor medio adimensionalizzato pari a  $\frac{p}{p_{ref}} = 1.227$  e avrà un andamento del tipo:

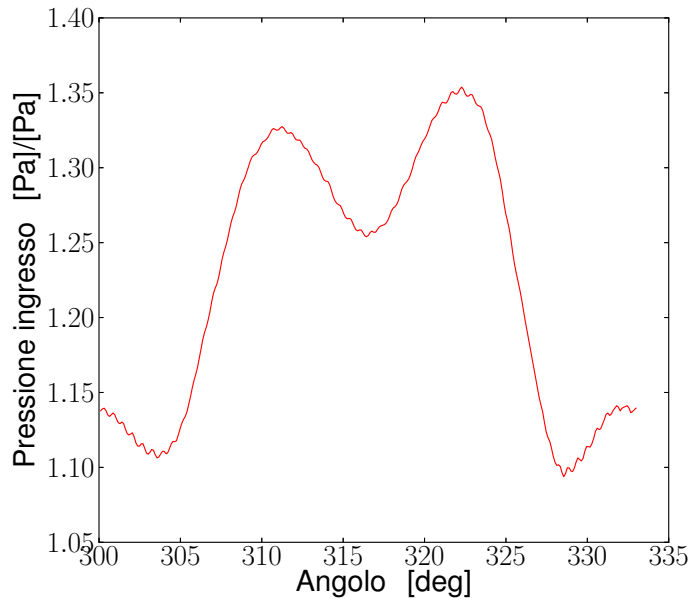


Figura 6.56: Pressione calcolata su un ciclo per il il solo espansore volumetrico

Per quanto riguarda la potenza in uscita dalla macchina questa avrà valor medio  $\frac{P}{P_{ref}} = 1.199$  pari a e un andamento del tipo:

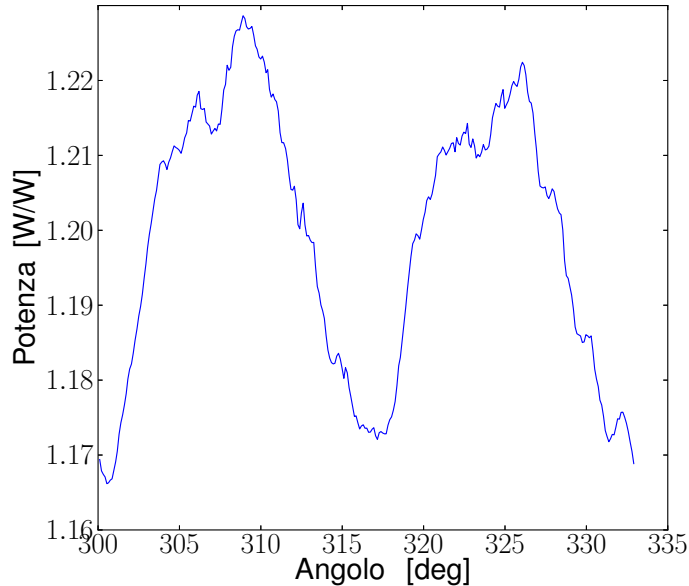


Figura 6.57: Potenza calcolata su un ciclo per il solo espansore volumetrico

Da tali risultati è possibile osservare come nella simulazione sulla sola macchina si abbia una potenza leggermente inferiore a quella ottenuta nel sistema macchina-condotti. Tuttavia il valore medio di pressione sulla porta di ingresso nella macchina singola ( $\frac{p}{p_{ref}} = 1.227$ ) risulta essere superiore rispetto a quello del sistema completo ( $\frac{p}{p_{ref}} = 1.180$ ) dato che nella simulazione della sola macchina il flusso di massa è stato imposto direttamente alle porte di ingresso dell'espansore.

Si può dunque concludere che, a parità di pressione alla porte di ingresso, la potenza ottenuta dalla simulazione sulla macchina isolata sarebbe decisamente inferiore a quella di uscita del sistema completo.

E' quindi possibile considerare verificata l'ipotesi secondo la quale gli effetti dinamici dei condotti di ammissione e scarico vadano a influenzare i parametri globali in uscita dalla macchina ed, in particolare, la potenza ottenuta. Questo risultato permette quindi di trovare una spiegazione ai valori di potenza ottenuti dalle simulazioni descritte nel paragrafo 6.1.3, che risultavano inferiori ai valori sperimentali.

Si può dunque concludere che effettuando le simulazioni sul sistema completo espansore-condotti alle varie condizioni operative, con un coefficiente di trafileamento opportunamente calibrare per fare coincidere la contropressione

in ingresso con quella fornita sperimentalmente e con dei modelli termodinamici adeguati, si otterrebbero dei valori di potenza in uscita dalla macchina maggiori di quelli ottenuti delle prove sull'espansore singolo e in accordo con i dati sperimentali.

## Conclusioni e sviluppi futuri

Questo lavoro descrive una l'implementazione di modelli termodinamici e la simulazione CFD di un espansore a palette che viene utilizzato per produrre potenza in un ciclo ORC per il recupero del calore di scarto proveniente dai fumi di un motore a combustione interna. Per avere la possibilità di simulare correttamente l'espansione sono state utilizzate delle tecniche per la generazione della mesh e per gestirne il movimento.

Per considerare gli effetti di gas reale, che risultano essere marcati nel fluido di lavoro considerato, sono state implementate all'interno della libreria delle leggi che permettono di calcolare densità, calore specifico, entalpia e viscosità. In alternativa all'utilizzo di metodi analitici per il calcolo delle proprietà termodinamiche si è utilizzato il database NIST costituito da una serie di tabelle a differenti pressioni che forniscono le proprietà termodinamiche di interesse al variare della temperatura. Dalle prove effettuate è stata confermata l'equivalenza dei due metodi nel calcolo delle proprietà e nell'output ottenuto. Si è inoltre verificata l'assoluta necessità di utilizzare una legge di gas reale, in quanto utilizzando l'ipotesi di fluido ideale si ha un scostamento del 30% dai valori reali delle proprietà (in particolare all'ingresso della macchina) e un errore di circa il 12% sulla previsione della potenza ottenuta.

Inoltre a causa della presenza di trafileamento tra le pale rotoriche e lo statore è stato necessario considerare il flusso di massa attraverso tale zona e di conseguenza l'influenza dell'efficienza volumetrica sulle performance della macchina. A tal fine sono stati implementati tre differenti modelli di trafileamento che permettono di modulare il flusso di massa attraverso il la distanza tra paletta e statore settando un coefficiente che introduce una porosità nelle celle appartenenti alla zona interessata. Un primo modello considera che il trafileamento sia costante per qualsiasi posizione della pala e quindi introduce un unico coefficiente per descrivere la porosità delle celle. Tuttavia, per prevedere correttamente la potenza in uscita dalla macchina, è necessario tenere conto della dipendenza del trafileamento dalla posizione radiale e dall'equilibrio dinamico di ogni pala. Per fare ciò si sono implementati due modelli a due e tre coefficienti che considerano il variare del coefficiente di Forchheimer al variare della posizione della pala. In particolare il modello

a tre coefficienti risulta essere quello che più si avvicina ai dati sperimentali forniti, anche se risulta più difficoltoso da calibrare. Questi modelli permettono di dare una prima stima delle performance della macchina, un possibile sviluppo potrebbe riguardare l'estensione di tali modelli per considerare l'equilibrio dinamico delle forze agenti sulla pala in modo da poter prevedere la distanza radiale istantanea tra pala e statore. Utilizzando il modello di trafileamento a un coefficiente e considerando le leggi di gas reale sono state svolte una serie di simulazioni sull'espansore volumetrico a sei differenti condizioni operative. In queste simulazioni sono state imposte delle condizioni al contorno stazionarie, in particolare il flusso di massa in ingresso e la pressione statica in uscita. Dai risultati è stato possibile osservare che la potenza risultante dal calcolo è sempre inferiore a quello fornito sperimentalmente, nonostante non tenga conto delle perdite organiche. Si è dunque presa in considerazione l'influenza dei condotti di ammissione e scarico della macchina. Dapprima si è studiato l'effetto di tali condotti solo per quanto riguarda la caduta di pressione lungo il percorso, considerando solamente i tubi di ammissione e scarico in condizioni stazionarie. Infine si sono considerati anche gli effetti dinamici dovuti all'inerzia del fluido e alle onde di pressione e si sono quindi svolte delle simulazioni su un sistema comprensivo di espansore e condotti. Confrontando i risultati con quelli ottenuti sulla singola macchina a parità di tutte le condizioni è possibile concludere che la non stazionarietà del fluido ed i conseguenti effetti dinamici che essa provoca sono rilevanti al fine della previsione della potenza risultante. Non è quindi possibile effettuare una simulazione predittiva del processo di espansione senza tenerne conto. In futuro sarà possibile effettuare le prove sulla macchina comprensiva di condotti per tutte le condizioni operative considerate, calibrando opportunamente gli eventuali coefficienti di trafileamento e confrontare i risultati con i dati sperimentali forniti.



# Appendice A

## A.1 Implementazione del calcolo della densità

Per implementare una nuova equazione di stato in OpenFoam è necessario creare una nuova directory nel seguente percorso della libreria:

*OpenFOAM/LibRotaryMachine-2.2.x/src/thermophysicalModels/specie/  
/equationOfState*, la quale deve contenere tre file (EOS.C, EOS.H, EOSI.H):

- Il file EOS.C contiene le proprietà da leggere da dizionario necessarie per utilizzare la legge selezionata, ovvero nel nostro caso  $T_c$  (temperatura critica),  $P_c$  (pressione critica) e  $\omega$  (fattore acentrico). In particolare nel dizionario *thermophysicalProperties* verrà creato un sottodizionario chiamato *equationOfState* nel quale, come visto in precedenza, verranno forniti i suddetti parametri.
- Il file EOS.H contiene la dichiarazione della classe pengRobinson o RKS e dei suoi membri. Vengono infatti definiti i costruttori, le funzioni membro e le proprietà fondamentali del fluido.
- il file EOSI.H contiene l'implementazione vera e propria dei membri della classe. In particolare vengono definite le funzioni che permettono di calcolare le varie proprietà del fluido; è dunque in questo file che si colloca nel nostro caso l'implementazione della soluzione di un'equazione cubica, come risultano essere quella di Peng-Robinson e la RKS, per ricavare la densità ( $\rho$ ) del fluido con cui dunque calcolare successivamente la compressibilità ( $\psi$ ) e il fattore di comprimibilità ( $Z$ ).

La nuova classe creata, inoltre, eredita i membri della classe *specie*, la quale oltre a contenere la definizione degli operatori e delle costanti termodinamiche  $R$ ,  $P_{std}$ ,  $T_{std}$ , possiede delle funzioni membro che hanno il compito di definire le proprietà del fluido (peso molecolare, numero di moli) che vengono lette da dizionario.

A partire da queste informazioni e dalle costanti necessarie per definire l'equazione di stato (letta da dizionario), la classe `pengRobinson` (e analogamente la `RKS`) definisce una serie di funzioni che prendono come input i valori di pressione e temperature e calcolano il volume specifico ( $\nu$ ), la densità ( $\rho$ ), il fattore di comprimibilità ( $Z$ ) e la compressibilità ( $\psi$ ) attraverso la soluzione analitica dell'equazione di stato di terzo grado.

Per compilare tali codici è sufficiente, dopo aver posizionato i file nel corretto percorso indicato, andare nel percorso:

`OpenFOAM/LibRotaryMachine-2.2.x/src/thermophysicalModels/basic` e digitare da terminale il comando `wmake libso`.

Riportiamo infine uno schema riassuntivo di dove e come si colloca all'interno della libreria l'implementazione dell'equazione di stato di Peng-Robinson.

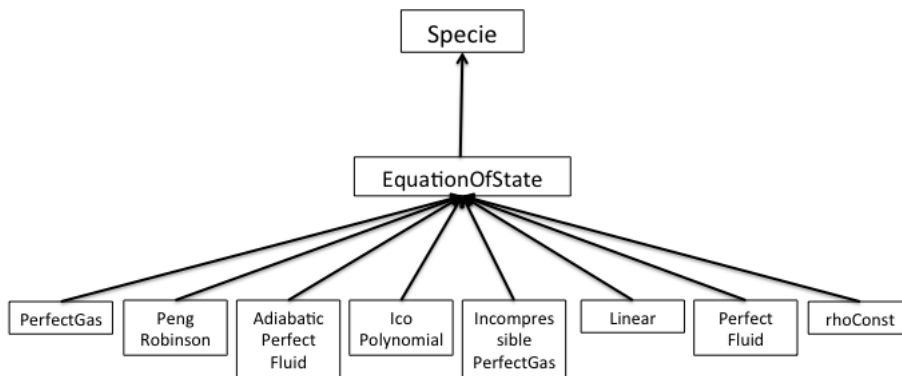


Figura A.1: Classe specie e sue derivate

Come si può osservare la nuova equazione di stato implementata si colloca in alternativa ad altre sette possibili equazioni di stato già implementate nella versione 2.2.x di *OpenFoam*, ovvero:

- PerfectGas
- AdiabaticPerfectFluid

- 
- IcoPolynomial
  - IncompressiblePerfectGas
  - Linear
  - PerfectFluid
  - rhoConst

Ognuna di queste leggi rappresenta una classe che eredita i membri della classe *specie*.

A titolo esemplificativo si mostra in seguito la definizione della funzione per il calcolo della densità con il modello di Peng-Robinson:

```
template<class Specie>
inline Foam::scalar Foam::PRGas<Specie>::rho(scalar p, scalar T) const
{
    scalar v = (this->R()*T)/p;
    scalar alphaT = pow((1.0+alphaPr_*(1.0-pow(T/Tc_, 0.5))), 2.0);

    scalar a0 = p*pow(b_,3.0) - a_*b_*alphaT + this->R()*T*pow(b_,2.0);
    scalar a1 = -3.0*p*pow(b_, 2.0) - 2.0*b_*this->R()*T + a_*alphaT;
    scalar a2 = p*b_ - this->R()*T;
    scalar a3 = p;

    if (analytical_)
    {
        scalar pi = Foam::constant::mathematical::pi;

        scalar P = a1/a3 - pow(a2, 2.0)/(3.0*pow(a3, 2.0));
        scalar Q = a0/a3 - a2*a1/(3.0*pow(a3, 2.0))
            + 2.0*(pow(a2,3.0))/(27.0*(pow(a3, 3.0)));

        scalar delta = pow(Q, 2.0)/4.0 + pow(P, 3.0)/27.0;

        if (delta > 0.0)
        {
            scalar u3 = -Q/2.0 + sqrt((delta));
            scalar v3 = -Q/2.0 - sqrt((delta));
        }
    }
}
```

```
    if (v3 > 0.0)
    {
        v = pow(u3, 1.0/3.0) + pow(v3,1.0/3.0) - a2/(3.0*a3);
    }
    else
    {
        if (u3 > 0.0)
        {
            v = pow(u3, 1.0/3.0) - pow(abs(v3),1.0/3.0) - a2/(3.0*a3);
        }
        else
        {
            v = -pow(abs(u3), 1.0/3.0) - pow(abs(v3),1.0/3.0)
                - a2/(3.0*a3);
        }
    }
}
else if (delta == 0.0)
{
    if (Q > 0.0)
    {
        v = pow((Q/2.0), 1.0/3.0) - a2/(3.0*a3);
    }
    else
    {
        v = 2.0*pow(abs(Q/2.0), 1.0/3.0) - a2/(3.0*a3);
    }
}
else
{
    scalar theta(0.0);
    if (Q < 0.0)
    {
        theta = atan (-2.0*sqrt(-delta)/Q);
    }
    else
    {
        theta = atan (-2.0*sqrt(-delta)/Q) + pi;
    }
}
```

---

```

        v = max
            (
                max
                    (
                        2.0*sqrt(-P/3.0)*cos(theta/3.0) - a2/(3.0*a3),
                        2.0*sqrt(-P/3.0)*cos((theta+2*pi)/3.0) - a2/(3.0*a3)
                    ),
                2.0*sqrt(-P/3.0)*cos((theta+4*pi)/3.0) - a2/(3.0*a3)
            );
    }

}
else
{

    scalar vOld = v;
    scalar vTol = v*tol_;
    int    iter = 0;

do
{

scalar F = a0 + a1*v + a2*pow(v, 2.0) + a3*pow(v, 3.0);
scalar dFdv = a1 + 2.0*a2*v + 3.0*a3*pow(v, 2.0);

vOld = v;
v = vOld - F/dFdv;

    if (iter++ > maxIter_)
    {
        FatalErrorIn
        (
            "PRGas<Specie>::rho(scalar p, scalar T"
            ") const"
        ) << "Maximum number of iterations exceeded"
        << abort(FatalError);
    }

} while (mag(v - vOld) > vTol);
}

```

```
return 1.0/v;  
  
}
```

## A.2 Implementazione del calcolo dell'entalpia

Il modello implementato andrà a collocarsi nella parte della libreria che si occupa del calcolo di entalpia ed energia interna:

*LibRotaryMachine-2.2.x/src/thermophysicalmodels/specie/thermo*

Si andrà quindi ad aggiungere una directory che contiene tre file:

- file *.C* in cui vengono lette dal dizionario del caso le proprietà necessarie per utilizzare il modello. Nel caso del modello polinomiale si andranno quindi a leggere dei vettori contenenti i coefficienti necessari alle equazioni che verranno inseriti nell'apposito sottodizionario del caso in base al fluido di interesse, mentre nel caso si voglia utilizzare il modello di Peng-Robinson si leggeranno i parametri necessari per costruire l'equazione di Helmonz e le sue derivate.
- file *.H* in cui viene definita la nuova classe e tutti i suoi membri: i coefficienti da leggere, i costruttori, gli operatori e le proprietà da calcolare. In particolare questa classe verrà derivata da *equationOfState*.
- file *I.H* in cui vengono implementati i membri della classe. In particolare in tale caso per poter utilizzare la funzione che calcola  $c_p$  e  $h$  sarà necessario implementare anche una serie di funzioni che calcolano la parte reale e ideale dell'energia di Helmonz e tutte le derivate che saranno poi necessarie nel calcolo delle proprietà di interesse.

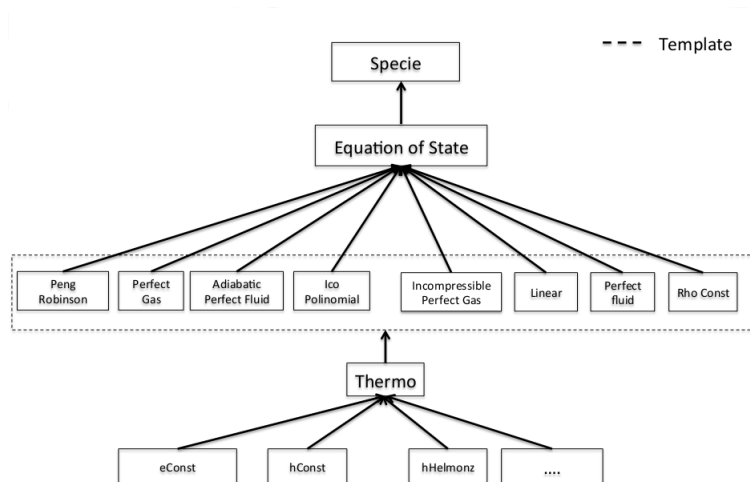


Figura A.2: Classe specie e sue derivate

### A.3 Implementazione del calcolo della viscosità

Si andrà ad aggiungere la directory contenente l'implementazione del modello all'interno del seguente percorso:

*LibRotaryMachine-2.2.x/src/thermophysicalModels/specie/transport*

All'interno di tale cartella si avranno tre file:

- file.H in cui si dichiarano gli operatori membro, i parametri necessari al modello, i costruttori e le funzioni membro.
- file.C: all'interno di tale file vi è la definizione dei costruttori che inizializzano serie di grandezze generiche che rimangono uguali anche al variare del tipo di fluido, come ad esempio i parametri del fluido di riferimento R145fa e le costanti utilizzate nel modello e inoltre vanno a leggere da dizionario i vettori contenenti i valori tipici del fluido di interesse che sono necessari al modello
- fileI.H vengono definiti i costruttori, gli operatori e le funzioni membro che sono il cuore dell'implementazione e che mi permettono di calcolare la viscosità

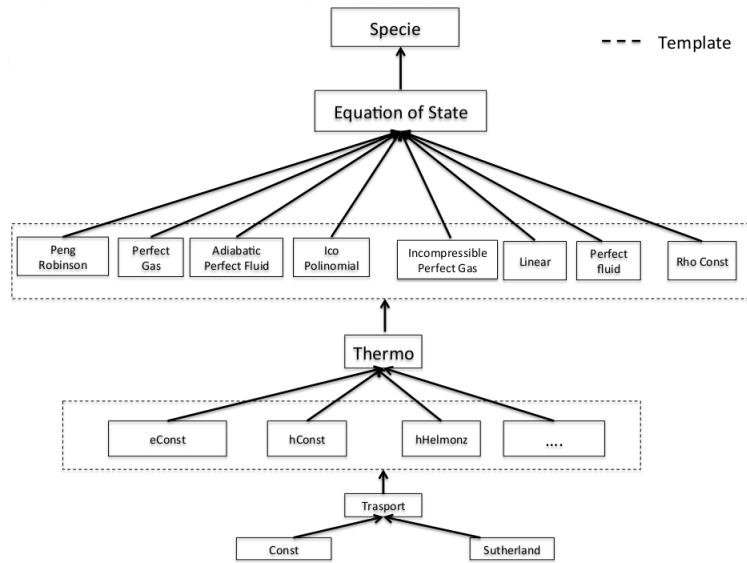


Figura A.3: Classe specie e sue derivate

In questo caso la nuova classe erediterà i suoi membri dal template *thermo* e andrà a definire gli oggetti e le funzioni necessarie per i modelli di trasporto.



## Bibliografia

- [1] Tian Hua, Shu Ge-Qun, Wei HaiQiao, Liang Xingyu, and Yu Guopeng. Thermodynamic analysis of a novel combined power and cooling cycle driven by the exhaust heat form a diesel engine. *SAE International*, 2013.
- [2] Musthafah b. Mohd. Tahir, Noboru Yamada, and Tetsuya Hoshino. Efficiency of compact organic rankine cycle system with rotary-vane-type expander for low-temperature waste heat recovery. *International Journal of Civil and Environmental Engineering*, 2010.
- [3] V. Macian, J.R. Serrano, V. Dolz, and J. Sanchez. Methodology to design a bottoming rankine cycle, as a waste energy recovering system in vehicles. study in a hdd engine. *Applied Energy*, 104:758–771, 2013.
- [4] Ryan Valentino, Matthew J. Hall, and Thomas Briggs. Simulation of organic rankine cycle electric power generation from light-duty spark ignition and diesel engine exhaust flows. *SAE International*, 2013.
- [5] V. Maizza and A. Maizza. Working fluids in non-steady flows for waste energy recovery systems. *Applied Thermal Engineering*, 16:579–590, 1996.
- [6] Saffa Riffat Guoquan Qiu, Hao Liu. Expanders for micro-chp systems with organic rankine cycle. *Applied Thermal Engineering*, 31:3301–3307, 2011.
- [7] Seok Hun Kang. Design and experimental study of orc (organic rankine cycle) and radial turbine using r245fa working fluid. *Energy*, 41:514–524, 2012.
- [8] Zbigniew Gnutek and Piotr Kolasinski. The application of rotary vane expanders in organic rankine cycle systems-thermodynamic description and experimental results. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2013.

- [9] Y. Inaguma and A. Hibi. Vane pump theory for mechanical efficiency. *J. Mechanical Engineering Science*, 2005.
- [10] J.M. Lujan, J.R. Serrano, V. Dolz, and J. Sanchez. Model of the expansion process for r245fa in an organic rankine cycle (orc). *Applied Thermal Engineering*, 40:248–257, 2012.
- [11] Manson Benedict, George B. Webb, and Louis C. Rubin. An empirical equation for thermodynamic properties of light hydrocarbons and their mixtures i. methane, ethane, propane and n-butane. *The Journal of Chemical Physics*, 8(4):334–345, 1940.
- [12] Richard T. Jacobsen and Richard B. Stewart. Thermodynamic properties of nitrogen including liquid and vapor phases from 63k to 2000k with pressures to 10,000 bar. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 2(4):757–922, 1973.
- [13] R. Span and W. Wagner. Equations of state for technical applications. i. simultaneously optimized functional forms for nonpolar and polar fluids. *International Journal of Thermophysics*, 24(1):1–39, 2003.
- [14] Roland Span Eric W. Lemmon. Short fundamental equations of state for 20 industrial fluids. *J.Chem.Eng*, 51:785–850, 2006.
- [15] T.B Coplen. Atomic weights of the elements. Technical report, IUPAC, 2001.
- [16] J.P.E. Grolier. *Solution Calorimetry. Experimental Thermodynamics*. Blackwell Scientific, 1994.
- [17] Tham M.J and Gubbins K.E. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 9:63, 1970.
- [18] Doan M.H. and J. Brunet. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 11:356, 1972.
- [19] J.F Ely and Hanley H.J.M. Prediction of transport properties.1. viscosity of fluids and mixtures. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 20:323, 1981.
- [20] S. A Klein, M.O. McLinden, and Laesecke A. An improved extended corresponding states method for estimation of viscosity of pure refrigerants. *Int. J. Refrig.*, 20:208, 1997.
- [21] Marcia L. Huber, Arno Laesecke, and Richard A. Perkins. Model for the viscosity and thermal conductivity of refrigerants, including a new correlation for the viscosity of r134a. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 42:3163–3178, 2003.

- [22] R.c. Reid, J. S. Prausnitz, and Sherwood T.K. *The properties of gases and liquids*. 1977.
- [23] M.L. Huber and J.F. Ely. A predictive extended corresponding states model for pure and mixed refrigerants including an equation of state for r134a. *Int. J. Refrig.*, 17:18, 1994.
- [24] J.F. Estela-Uribe and J. P.M. Trusler. Extended corresponding states models for fluids and fluid mixtures. shape factors models for pure fluids. *Fluid phase Equilib.*, 204:15, 2003.
- [25] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby. A Tensorial Approach to CFD using Object Orientated Techniques. *Computers in Physics*, Vol. 12(No. 6):620, 1998.
- [26] OpenFoam. *Programmer's Guide*, 2008.
- [27] Versteeg H.K. and Malalasekera. *An introduction to Computational Fluid Dynamics*. Longman Scientific and Technical, 1995.
- [28] Hyun Jin Kim, Woo Young Kim, Jong Min Ahn, and Sung Oug Cho. Numerical study on the performance improvement of a rotary vane expander for a  $co_2$  heat pump cycle. *International Journal of Air-Conditioning and Refrigeration*, 19:311–319, 2011.



## Lista dei simboli

### Lettere latine

$a$	velocità del suono $m/s$
$P$	potenza $W$
$Q$	calore $J$
$\dot{Q}$	potenza termica $W$
$p$	pressione $Pa$
$Z$	fattore di comprimibilità –
$v$	volume specifico $m^3/kg$
$R$	costante universale dei gas $J/kgK$
$T$	temperatura $K$
$\rho$	densità $kg/M^3$
$MM$	massa molare $kg/kmol$
$M$	massa molecolare $u$
$\overline{D}$	tensore delle deformazioni –
$e$	energia interna specifica del fluido $J/kg$
$Q_s$	termine sorgente di superficie
$Q_v$	termine sorgente di volume
$t$	tempo $s$
$\vec{U}$	velocità $m/s$
$\vec{f}$	forze di campo volumetriche $N/kg$
$E$	energia totale $J/kg$
$\vec{q}$	flusso termico $W/m$
$e$	energia interna $J/kg$
$\vec{g}$	accelerazione gravitazionale $m/s^2$
$g$	energia di Gibbs $J/kg$
$V$	volume $m^3$
$S$	superficie $m^2$
$n$	versore normale –
$x$	centroide $m$
$F$	Flusso
$A$	matrice sparsa
$R$	vettore dei termini sorgente

## Lettere latine

$d$	distanza tra due centri cella $m$
$a, b$	costanti delle equazioni di gas reale
$p_c$	pressione critica $Pa$
$p_v$	pressione di vapore $Pa$
$V_c$	volume critico $m^3/kg$
$T_c$	temperatura critica $K$
$k$	energia cinetica turbolenta $J/kg$
$h$	entalpia $J/kg$
$N_1, N_2$	parametri fissati per il calcolo dell'entalpia
$a$	energia di Helmonz $J/kg$
$s$	entropia $J/kgK$
$c_p$	calore specifico a pressione costante $J/kgK$
$c_v$	calore specifico a volume costante $J/kgK$
$T_0$	temperatura di riferimento $K$
$p_0$	pressione di riferimente $Pa$
$a_1, a_2$	costanti per il modello di calcolo dell'entalpia(parte ideale)
$c_0, c_1, c_2, u_k$	costanti per il modello di calcolo dell'entalpia(parte ideale)
$n_k, i_k, j_k, l_k$	costanti per il modello di calcolo dell'entalpia (parte reale)
$C$	costante per il calcolo della viscosità con la teoria cinetica
$N_A$	numero di Avogadro $g/u$
$k_B$	costante di Boltzmann $J/K$
$c_k, b_i, t_i$	costanti per il calcolo della viscosità
$l_d$	lunghezza caratteristica della scala di Kolmogorov $m$
$u_d$	velocità caratteristica della scala di Kolmogorov $m/s$
$k_t$	conducibilità turbolenta $W/mK$

## Lettere Greche

$\phi$	generica grandezza –
$\Gamma$	coefficiente di trasferimento di massa $m/s$
$\bar{\bar{\sigma}}$	tensore degli sforzi $N/m^2$
$\bar{\bar{\tau}}$	Parte viscosa del tensore degli sforzi $Pa$
$\mu$	viscosità dinamica $Pa\cdot s$
$\lambda_t$	coefficiente di conducibilità termica $W/mK$
$\lambda$	secondo coefficiente di viscosità $Pa\cdot s$
$\rho$	densità del fluido $kg/m^3$
$\Delta$	variazione –
$\Lambda$	coefficiente di diffusione massico $m^2/s^2$
$\alpha$	termine attrattivo –
$\beta$	parametro fissato per il calcolo dell'entalpia –
$\delta$	densità ridotta –
$\tau$	temperatura ridotta –
$\alpha^0$	energia di Helmonz in forma adimensionale (parte ideale) –
$\alpha^r$	energia di Helmonz in forma adimensionale (parte reale) –
$\nu_k$	costanti per il modello di calcolo dell'entalpia (parte ideale) –
$\sigma$	diametro della particella di gas $nm$
$\Omega$	integrale di collisione –
$\gamma$	coefficiente di diffusione $m^2/s$
$\Xi$	viscosità cinematica $m^2/s$
$\mu_T$	viscosità turbolenta $Pa\cdot s$
$\epsilon$	tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta $W/kg$

## Pedici

$in$	grandezza in ingresso
$out$	grandezza in uscita
$c$	contributo convettivo
$d$	contributo diffusivo
$s$	termine di superficie
$v$	termine di volume
$i$	componente del vettore in direzione x
$j$	componente del vettore in direzione y
$p$	grandezza nel centro della cella
$f$	grandezza sul centro faccia della cella
$N$	centro della cella neighbour
$ls$	liquido saturo
$vs$	vapor saturo
$\sigma$	grandezza di saturazione

## Apici

$T$	trasposta
$\sim$	soluzione esatta
$0$	ideale
$r$	reale
$K.T.$	Kinetic Theory

## Gruppi adimensionali e sigle

$ORC$	Organic Rankine Cycle
$R245fa$	1,1,1,3,3-pentafluoro-propano
$MCI$	Motore a combustione interna
$CFC$	Clorofluorocarburi
$HFC$	Idrofluorocarburi
$GWP$	Global Warming Potential
$Cu$	numero di Courant
$PR$	Peng-Robinson
$RKS$	Redlich-Kwong-Soave
$\omega$	fattore acentrico
$NIST$	National Institute of Standard Technology
$CFD$	Computation fluid dynamics
$EoS$	equation of state
$BWR$	Benedict-Webb-Rubin
$mBWR$	Benedict-Webb-Rubin modificate
$ECS$	Extended corresponding states
$Re$	Numero di Reynolds