



Agenzia Nazionale per le Nuove Tecnologie,
l'Energia e lo Sviluppo Economico Sostenibile



Ministero dello Sviluppo Economico

RICERCA DI SISTEMA ELETTRICO

Simulazione di un combustore con tecnologia ISOTHERM

F. Donato, G. Calchetti, A. Di Nardo, B. Favini

Report RdS/2011/208

SIMULAZIONE DI UN COMBUSTORE CON TECNOLOGIA ISOTHERM

F. Donato¹, G. Calchetti¹, A. Di Nardo¹, B. Favini²

¹ ENEA, Casaccia, UTTEI-COMSO

² Università "La Sapienza" di Roma, Dipartimento di Ingegneria Meccanica ed Aerospaziale

Settembre 2011

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico – ENEA

Area: Produzione di energia elettrica e protezione dell'ambiente

Progetto: Studi sull'utilizzo pulito dei combustibili fossili, cattura e sequestro della CO₂

Responsabile Progetto: Antonio Calabrò, ENEA



Pag. di
Copia di

Unità UTTEI – COMSO		Classificazione UTTEI-COMSO COMSO/2011/007EL /		Distribuzione:			
Progetto CERSE- Ricerca di Sistema Elettrico AdP Ministero dello Sviluppo Economico – ENEA Area: Produzione e fonti energetiche Tema: 5.2.2.2 Tecnologie innovative per migliorare i rendimenti di conversione delle centrali a polverino di carbone				Parole chiave - MILD Combustion - Simulazione numerica - Flussi multifase			
Attività Aumento dell'efficienza delle tecnologie di cattura della CO2 con produzione di elettricità "zero emission"							
Titolo Simulazione di un combustore con tecnologia ISOTHERM							
Autori F. Donato, G. Calchetti, A. Di Nardo ENEA/UTTEI/COMSO B. Favini, Dipartimento Ingegneria Meccanica ed Aerospaziale (DIMA) Univ. "Sapienza" di Roma							
Sommario La presente attività di ricerca ha per obiettivo lo sviluppo di un sistema di combustione ad elevata efficienza di conversione energetica, a basse emissioni di macro e micro inquinanti e di CO2, da impiegare in impianti per produzione di elettricità, che utilizzi polverino di carbone e aria arricchita in Ossigeno, applicando la tecnologia avanzata di combustione senza fiamma flameless, già sperimentata su scala pilota. L'attività è incentrata prevalentemente nella modellistica LES per la simulazione di flussi multifase (gas-solido nel caso di processi di gassificazione, solidoliquido-gas nel caso di processi di combustione del carbone, sia standard che tipo MILD). Il documento descrive le implementazione modellistiche inserite nel codice CFD HeaRT, di proprietà ENEA, per poter simulare processi con <i>slurry</i> di carbone, ed i risultati ottenuti da una simulazione LES di un combustore di tipo ISOTHERM utilizzando il codice commerciale FLUENT.							
4		F. Donato				S.Giammartini	
3		G. Calchetti					
2		A.Di Nardo					
1		B.Favini	9/2011				
0							
Rev	Descrizione	Redazione	Data	Convalida	Data	Approvazione	Data

Simulazioni di un combustore con tecnologia ISOTHERM

F. Donato[×], B. Favini⁺, G. Calchetti[×], A. Di Nardo[×]

[×]ENEA Casaccia, UTTEI-COMSO,
Via Anguillarese 301, 00060, S.M. Galeria (Roma)

⁺Dip. di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale, Università "Sapienza",
Via Eudossiana 18, 00184, Roma

20 settembre 2011

Indice

Introduzione	2
1 Sviluppo codice HeaRT	5
1.1 Modello matematico	5
1.1.1 Trattamento scalari passivi condensati	5
1.1.2 Modello fase dispersa con capacità termica variabile	7
1.2 Modello numerico	10
2 Simulazione del combustore ISOTHERM	13
2.1 Definizione del dominio, griglia di calcolo e condizioni al contorno	13
2.2 Modello adottato	14
2.3 Risultati ottenuti	16
Conclusioni	24
Appendice	26
Bibliografia	27

Introduzione

La presente attività di ricerca ha per obiettivo lo sviluppo di un sistema di combustione ad elevata efficienza di conversione energetica, a basse emissioni di macro e micro inquinanti e di CO₂, da impiegare in impianti per produzione di elettricità, che utilizzi polverino di carbone e aria arricchita in Ossigeno, applicando la tecnologia avanzata di combustione senza fiamma flameless, già sperimentata su scala pilota.

L'attività è incentrata prevalentemente nella modellistica LES per la simulazione di flussi multifase (gas-solido nel caso di processi di gassificazione, solido-liquido-gas nel caso di processi di combustione del carbone, sia standard che tipo MILD). Di particolare interesse, data la sua complessità e l'interesse industriale, sono i processi di oxi-combustione del carbone in condizioni MILD. Il processo ISOTHERM, reattore pilota da 5 MWt operante in modalità oxyflame, viene preso come riferimento in quanto presenta fenomenologie fisico-chimiche e problematiche riscontrabili su qualunque apparato all'interno del quale si realizzi un processo di combustione multifase. In questo caso il combustibile è una miscela trifase, costituita da vapore di spinta e *slurry*, a sua volta composto di acqua allo stato liquido e particelle di carbone con una certa granulometria, che poi si mescola con prodotti caldi di combustione sia per ricircolazione esterna che interna. La fisica coinvolta è complicata: si va dal problema termofluido dinamico dell'iniezione del getto *slurry*/vapore, a quello dell'evoluzione termochimica della particella di carbone (con le sue fasi di essiccazione, devolatilizzazione, ossidazione e gassificazione), alla combustione in fase gas, presumibilmente di tipo MILD. A questi aspetti che riguardano la fluidodinamica, si aggiungono poi problemi legati alla fusione delle ceneri, alla presenza dello zolfo e di metalli pesanti, fino ad arrivare a problemi legati alla resistenza dei materiali ed al pompaggio di alimentazione. Il tutto è poi accompagnato dai diversi effetti prodotti da alcuni parametri fondamentali, quali la pressione operativa, la granulometria del carbone, il tipo di carbone, la percentuale di eccesso di ossigeno nei gas ricircolati.

La modellistica per la simulazione CFD dei processi coinvolti deve dunque riguardare flussi multi fase (in particolare, trifase), l'interazione della turbolenza in fase gas con le particelle e con le reazioni chimiche in gioco, l'irraggiamento termico. Mentre gli aspetti macroscopici del processo ISOTHERM possono essere colti con tecniche RANS (Reynolds Averaged NavierStokes), come dimostrato in un precedente studio [1], le fenomenologie relative all'iniezione del getto vapore/*slurry* coinvolgono talmente tante scale da dover essere affrontate con un approccio computazionalmente più oneroso, quello LES (Large Eddy Simulation).

Una accurata predizione delle caratteristiche termofluidodinamiche dell'iniezione comporta una migliore predizione dell'estensione della zona relativa all'iniezione ed alla gassificazione delle particelle di carbone. Ciò implica anche una migliore predizione della distribuzione di specie chimiche e di temperatura a monte della successiva zona di combustione.

Nell'anno di riferimento si è proceduto su due principali linee di attività: la prima ha previsto l'implementazione nel codice HeaRT di nuove caratteristiche necessarie per poter procedere a simulazioni di *slurry* di carbone; la seconda è consistita nella simulazione LES di un combustore di tipo ISOTHERM utilizzando il codice commerciale FLUENT.

Per quanto riguarda le nuove caratteristiche implementate nel codice HeaRT queste sono consistite, per la fase continua, nell'aver introdotto tecniche di controllo delle oscillazioni nell'equazione di trasporto degli scalari passivi, delle specie chimiche e dell'energia; per la fase dispersa si è invece sostituita l'equazione in termini di temperatura della fase dispersa con un'equazione in termini di entalpia sensibile. Si sono inoltre messi a punto gli opportuni limitatori sui termini sorgente che tengono in conto le interazioni tra le fasi, al fine di non indurre instabilità nel calcolo.

L'introduzione del controllo delle oscillazioni si è resa necessaria al fine di limitare la tendenza del calcolo a divenire instabile. Le equazioni per gli scalari passivi sono state infatti implementate per simulare la dispersione dell'acqua contenuta nello *slurry* di carbone come dei composti non volatili (tar) rilasciati nella fase di devolatilizzazione. Questo senza appesantire eccessivamente il calcolo introducendo un'ulteriore fase dispersa. La simulazione dell'evoluzione dell'acqua nebulizzata dallo *slurry* in particolare, ha presentato notevoli problemi. Nelle condizioni di pressione e temperatura tipiche del processo ISOTHERM ($p=4$ atm e $T=1600$ K in camera) l'acqua nebulizzata subisce un repentino cambio di fase. Dal punto di vista della soluzione numerica questo si traduce nella presenza di termini di scambio di massa particolarmente elevati, che accoppiati ad una numerica non sufficientemente robusta portano la soluzione a divergere rapidamente. Inoltre, la procedura di avvio del calcolo ha messo in evidenza la criticità del trattamento della discontinuità di contatto presente tra il vapore iniettato in equilibrio con la fase nebulizzata ($T^{ev}=412$ K) ed i prodotti di combustione ($T=1600$ K). L'introduzione della tecnica del controllo delle oscillazioni nell'equazione degli scalari passivi condensati, in quella delle specie chimiche ed in quella dell'energia ha stabilizzato questo aspetto.

Per quanto riguarda la fase dispersa, la sostituzione dell'equazione in termini di temperatura con quella in termini di entalpia sensibile ha permesso di introdurre, nella maniera più semplice possibile, un legame costitutivo più complesso per quanto riguarda la capacità termica del carbone. Questa varierà ora in funzione dell'evoluzione della composizione chimica della particella di carbone, espressa in termini di frazione in massa dei gruppi funzionali presenti.

Data la necessità di implementare nuove tecniche numeriche nel codice HeaRT e alla conseguente impossibilità di effettuare il calcolo con tale strumento nel periodo inizialmente previsto, al fine di avere quanto meno una simulazione LES di

riferimento, si è provveduto a simulare il combustore ISOTHERM con tale approccio per mezzo del codice commerciale FLUENT. Nell'ottica di minimizzare il costo computazionale, tale simulazione è stata condotta su una geometria semplificata. Sebbene l'accuratezza di tale simulazione sia da verificare, in mancanza di dati sperimentali accurati, con nuove soluzioni da ottenersi su griglie di calcolo maggiormente raffinate, il risultato ottenuto può essere considerato un primo termine di paragone per le future attività da completare con il codice HeaRT.

Capitolo 1

Sviluppo codice HeaRT

1.1 Modello matematico

1.1.1 Trattamento scalari passivi condensati

Al fine di poter simulare il processo ISOTHERM con il codice HeaRT senza appesantire il già elevato costo computazionale, si è fatto ricorso ad alcune ipotesi semplificative. In particolare si è supposto che sia l'acqua componente lo *slurry* subito a valle dell'iniettore che i composti non volatili rilasciati dal carbone in fase di devolatilizzazione si muovano all'interno del combustore come gocce di dimensioni molto piccole ($d_p < 10\mu m$). Nel caso dell'acqua in uscita dal sistema d'iniezione, quest'ipotesi è avvalorata dalle alte differenze di velocità ($O \simeq 300m/s$) tra gas ed acqua. Se si definisce il numero di Weber critico We^c come il numero di Weber caratteristico per le particelle di dimensioni d_p^{st} stabili per le condizioni considerate, è noto che per l'acqua tale valore è circa 12, e quindi

$$We^c = \frac{\rho_g \|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_f\|^2 d_p^{st}}{\sigma^s} = 12 \quad (1.1)$$

dove ρ_g è la densità del gas, \mathbf{u}_p la velocità della fase dispersa, \mathbf{u}_f la velocità del gas e σ^s è la tensione superficiale. Il diametro delle particelle d_p^{st} stabili alle condizioni date sarà pertanto

$$d_p^{st} = \frac{We^c \sigma^s}{\rho_g \|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_f\|^2} \simeq 3\mu m \quad (1.2)$$

Le dimensioni ridotte hanno un impatto sul tempo di rilassamento della particella τ_p , che rappresenta il tempo impiegato dalla particella immersa in una corrente di gas a ridurre la differenza di velocità ad un terzo del valore iniziale. Nel caso in esame sarà

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \simeq 3 \cdot 10^{-5} \div 1.3 \cdot 10^{-4} \quad (1.3)$$

e pertanto tale parametro è confrontabile con il tempo di attraversamento di una cella di calcolo delle dimensioni del millimetro. Poichè l'errore è limitato, così

come il tempo di vita di tali gocce, che tenderanno ad evaporare in prossimità dell'iniezione, possiamo ritenere accettabile l'errore introdotto sulla struttura del flusso nell'assumere che le gocce d'acqua siano in equilibrio termico e di quantità di moto con il flusso di gas. Tale assunzione consente di risolvere il sistema trifase con l'aggiunta di una sola equazione per ogni specie scalare introdotta (e non delle sei equazioni necessarie a trattare una classe dispersa in modo maggiormente dettagliato).

L'equazione di trasporto per gli scalari passivi è data da

$$\frac{\partial \bar{\rho}_f \tilde{P}_{s,q}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f \tilde{P}_{s,q}) = -\Gamma_{P_{s,q}} + \Gamma_{P_{s,q}}^{dev} \quad q = 1..NPs \quad (1.4)$$

dove $P_{s,q}$ è il rapporto tra la massa per unità di volume della q-esima specie scalare trasportata e la densità del gas e $\Gamma_{P_{s,q}}$ rappresenta la massa per unità di volume che abbandona la fase condensata nell'unità di tempo mentre $\Gamma_{P_{s,q}}^{dev}$ rappresenta il tar prodotto in fase di devolatilizzazione. L'equazione è del tutto simile alla corrispondente conservazione della massa per la fase gas, e la quantità di moto $\bar{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f$ che compare nel termine convettivo è esattamente quella calcolata per la fase gas.

La presenza degli scalari trasportati impone di modificare la definizione dell'energia totale trasportata E_t , che sarà data da

$$E_t = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s H_s - R_g T + \frac{u_f^2}{2} + \sum_{q=1}^{NPs} P_{s,q} \left(H_q + \frac{u_f^2}{2} \right) = H_t - R_g T + \sum_{q=1}^{NPs} P_{s,q} \left(H_q + \frac{u_f^2}{2} \right) \quad (1.5)$$

dove Y_s è la frazione in massa della s-esima specie in fase gas, H_s la sua entalpia (sensibile e di formazione) per unità di massa, H_t l'entalpia totale delle miscela gassosa e H_q l'entalpia per unità di massa della specie liquida trasportata.

A fronte di tale semplificazione è stato necessario modificare la corrispondente equazione dell'energia totale che è ora data da

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_f \tilde{E}_t}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ \bar{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f \left[\tilde{H}_t + \sum_{q=1}^{NPs} P_{s,q} \left(H_q + \frac{u_f^2}{2} \right) \right] \right\} = \\ -\nabla \cdot (\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{q}^{SGS}) + \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\tau}^{SGS}) \tilde{\mathbf{u}}_f + \bar{\rho}_f \left(1 + \sum_{q=1}^{NPs} P_{s,q} \right) \tilde{\mathbf{u}}_f \cdot \mathbf{g} \\ + \dot{Q} + \Gamma_h + Q_{fp} - \Pi_p \end{aligned} \quad (1.6)$$

dove \mathbf{q} è il flusso di calore dovuto sia alla conduzione che alla diffusione delle specie chimiche, $\boldsymbol{\tau}$ è il tensore degli sforzi viscosi \dot{Q} è il calore entrante per unità di volume. Γ_h , Q_{fp} e Π_p rappresentano gli scambi di energia e di lavoro con la fase dispersa (le particelle di carbone) conseguenti agli scambi di massa, al lavoro delle forze aerodinamiche ed alla convezione. I termini contrassegnati con *SGS* rappresentano i flussi dovuti agli effetti di sottogriglia. I modelli utilizzati per tali flussi e

le definizioni delle restanti grandezze sono stati presentati altrove [2] e non saranno oggetto del presente lavoro. Da notare come gli scambi di massa tra fase gas e scalari condensati trasportati non implicino la comparsa nell'equazione dell'energia di termini sorgente. Questo perchè la fase condensata è tenuta in conto nella definizione dell'energia totale e pertanto il cambio di fase non induce variazioni in tale grandezza. Si richiama qui di seguito anche l'equazione di trasporto delle specie chimiche in fase gas. Sebbene questa non sia stata modificata nella sua formulazione, nel presente lavoro è stato tuttavia cambiato il modo di discretizzarne il termine convettivo.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}_f \tilde{Y}_s) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_f \tilde{Y}_s \tilde{\mathbf{u}}_f) = -\nabla \cdot (\bar{\rho}_f \tilde{Y}_s \tilde{\mathbf{V}}_s) + \bar{\rho}_f \tilde{\omega}_s - \nabla \cdot \mathbf{J}_s^{SGS} + \Gamma_{p,s} + \sum_{q=1}^{NP_s} \Gamma_{P_s,q,s} \quad (1.7)$$

Nella precedente relazione \mathbf{V}_s è la velocità di diffusione della specie s-esima, \mathbf{J}_s^{SGS} è il flusso della specie s-esima dovuta al trasporto turbolento, ω_s il termine sorgente dovuto alle reazioni chimiche, $\Gamma_{p,s}$ quello dovuto alla massa proveniente dalla fase dispersa e $\Gamma_{P_s,q,s}$ rappresenta invece la massa per unità di volume e di tempo che passa in fase gas dagli scalari condensati.

1.1.2 Modello fase dispersa con capacità termica variabile

Per quanto riguarda la fase dispersa, la composizione delle particelle di carbone è modellizzata tramite frazioni in massa di gruppi funzionali, ciascuno dei quali può evolvere secondo una propria costante cinetica, trasformandosi in un altro gruppo o passando in fase gassosa o tar. La struttura implementata nel codice è pertanto generale e permette di utilizzare tutti i principali modelli di devolatilizzazione presente in letteratura. Le prime prove di funzionamento sono state eseguite adottando un modello sviluppato al Politecnico di Milano [3], che prevede l'adozione di 16 gruppi funzionali per il carbone più uno per tener conto dell'acqua adsorbita nei pori dello stesso.

Si richiamano qui di seguito le equazioni di trasporto per la fase dispersa. Esse fanno riferimento al *Formalismo Mesoscopico* introdotto da Février et al. [4]. La procedura per ottenere le equazioni prende spunto dai risultati della Teoria Cinetica dei Gas [5] e può essere approfondita in [2].

$$\frac{\partial}{\partial t} n_p + \frac{\partial}{\partial x_j} n_p u_{p,j} = 0 \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_p \rho_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_p \rho_p u_{p,j} = - \left(\Gamma_p + \Gamma_{Ps,q}^{dev} \right) \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_p \rho_p u_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_p \rho_p u_{p,i} u_{p,j} = \frac{\alpha_p \rho_p}{\tau_p} (u_{f@p,i} - u_{p,i}) - \left(\Gamma_p + \Gamma_{Ps,q}^{dev} \right) u_{p,i} \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_p \rho_p H_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_p \rho_p H_p u_{p,j} = \Pi_p - \Gamma_h^s \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_p \rho_p Y_m + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_p \rho_p u_{p,j} Y_m = -\Gamma_m \quad (m = 1..Ng) \quad (1.12)$$

Nelle precedenti equazioni, per le quali si è fatto ricorso alla convenzione degli indici ripetuti, n_p è il numero di particelle per unità di volume, α_p la frazione volumetrica della fase dispersa, ρ_p la densità del materiale che compone le particelle (allo stato attuale considerata costante), $u_{p,i}$ la componente i -esima della velocità delle particelle, H_p la loro entalpia sensibile, Y_m è la frazione di massa delle particelle relativa al gruppo funzionale m -esimo. Per quanto riguarda i termini sorgente, Γ_p rappresenta la quantità di massa per unità di volume che passa dalla fase dispersa a quella gassosa, Γ_m quella che abbandona il gruppo funzionale m -esimo mentre Γ_h^s tiene in conto la variazione di entalpia sensibile della fase dispersa per effetto del cambio di fase. Da notare che Γ_h^s differisce dal termine corrispondente Γ_h che compare nella (1.6) a causa della diversa definizione di energia: sensibile in questo caso e totale nella (1.6).

Nella versione precedente al presente lavoro la capacità termica della fase dispersa era assunta costante ed uguale per tutti i gruppi funzionali. Questo imponeva un limite sulla capacità da parte del codice di rappresentare correttamente il rilascio di calore che avviene durante la fase di devolatilizzazione, una volta che la decomposizione delle strutture molecolari maggiormente complesse sia iniziata. Nell'anno di riferimento del progetto CERSE si è provveduto a rilassare questo vincolo; ciascun gruppo funzionale è caratterizzato da proprie entalpia di formazione ΔH_m^o e capacità termiche C_{sm} assunte costanti rispetto alla temperatura. Entrambe sono date in funzione della composizione in termini di frazioni atomiche del gruppo funzionale secondo Merrick [6]. Man mano che le macromolecole presenti nella particella di carbone si decomporranno, anche in assenza di cambio di fase ma per la sola variazione di struttura della materia, la capacità termica delle particelle varierà e con essa anche la temperatura. Questo avrà un impatto sulla seguente dinamica del processo.

Nel caso del carbone occorre ricordare la presenza di ceneri nelle particelle. Tale massa non abbandonerà mai la fase dispersa nel presente modello e sarà

$$Y_{ash} = 1 - \sum_{m=1}^{Ng} Y_m \quad (1.13)$$

pertanto l'entalpia sensibile della fase dispersa sarà data da

$$H_p = \sum_{m=1}^{Ng+1} Y_m C_{s_m} (T_p - T^o) \quad (1.14)$$

dove il +1 come estremo della sommatoria indica appunto il contributo dato dalla cenere e T^o è la temperatura di riferimento alla quale sono collegate le entalpie di formazione.

A questo punto è possibile esprimere i termini sorgente che compaiono nelle equazioni dell'energia come

$$\Gamma_h^s = - \sum_{r=1}^{Nr} \sum_{m=1}^{Ng} \Gamma_{rm} \Delta H_m^o + \sum_{r=1}^{Nr} \left(\Gamma_{p,r} + \sum_{q=1}^{NPs} \Gamma_{Ps,rq}^{dev} \right) (h_r^o + h_r^s) \quad (1.15)$$

$$\Gamma_h = \sum_{r=1}^{Nr} \left(\Gamma_{p,r} + \sum_{q=1}^{NPs} \Gamma_{Ps,rq}^{dev} \right) \left(h_r^o + h_r^s + \frac{u_p^2}{2} \right) \quad (1.16)$$

dove r è l'indice della reazione (sia essa di devolatilizzazione, ossidazione, gasificazione o vaporizzazione), Γ_{rm} è la massa per unità di tempo e di volume che abbandona il gruppo funzionale m -esimo a causa della reazione r , $\Gamma_{p,r}$ esprime il flusso di massa che passa dalla fase dispersa al gas a causa della reazione r , $\Gamma_{Ps,rq}^{dev}$ rappresenta invece il flusso verso il q -esimo scalare condensato. Tra questi flussi di massa, assunti positivi se in uscita dalla fase dispersa o dal rispettivo gruppo funzionale, sussiste la relazione

$$\sum_{m=1}^{Ng} \Gamma_{rm} = \Gamma_{p,r} + \sum_{q=1}^{NPs} \Gamma_{Ps,rq}^{dev} \quad (1.17)$$

e sommando su tutte le reazioni

$$\sum_{m=1}^{Ng} \Gamma_m = \Gamma_p + \sum_{q=1}^{NPs} \Gamma_{Ps,q}^{dev} \quad (1.18)$$

h_r^o e h_r^s sono invece le entalpie di formazione e sensibili medie in uscita dalla fase dispersa a causa della reazione r . Esse sono espresse da

$$h_r^o = \frac{\sum_{m=1}^{Ng} [\max(0, \Gamma_{rm}) \Delta H_m^o]}{\sum_{m=1}^{Ng} \max(0, \Gamma_{rm})} \quad (1.19)$$

$$h_r^s = \frac{\sum_{m=1}^{Ng} [\max(0, \Gamma_{rm}) C_{s_m} (T_p - T^o)]}{\sum_{m=1}^{Ng} \max(0, \Gamma_{rm})} \quad (1.20)$$

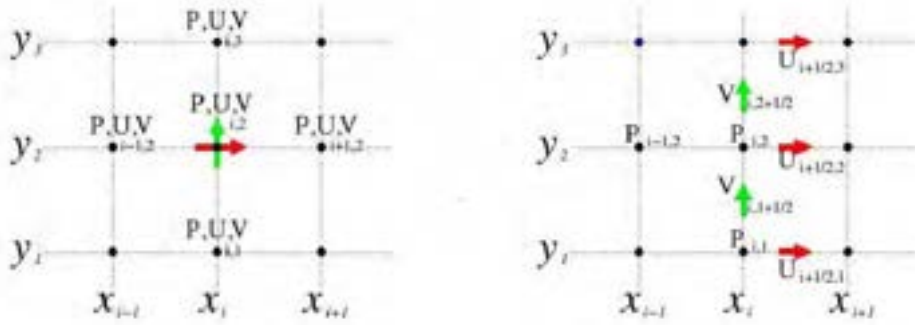


Figura 1.1: a) griglia collocata; b) griglia sfalsata.

È stato già detto che la devolatizzazione è modellata secondo Sommariva et al. []. Per quanto riguarda il modello di gassificazione/ossidazione si è stato invece implementato quanto riportato in Hobbs et al.[7]. Entrambi i modelli andrebbero poi validati con simulazioni 0D sui adeguati esperimenti compiuti con il carbone effettivamente utilizzato nel reattore.

1.2 Modello numerico

Le equazioni della fase continua e degli scalari trasportati sono risolte su una griglia strutturata sfalsata. In Fig. 1.1 è riportato uno schema che mette in evidenza, per una griglia cartesiana, bidimensionale e ortogonale, la differenza tra griglie collocate e sfalsate. Nel primo caso, tutte le variabili sono collocate per ogni cella nel medesimo punto, centroide del volume di controllo associato. Nel caso di griglie sfalsate invece, le componenti della quantità di moto non sono collocate nello stesso punto dove sono collocati gli scalari (P), bensì nei centroidi delle facce normali alle componenti stesse che delimitano il volume di controllo relativo agli scalari. Questo permette di ridurre il numero di interpolazioni necessarie a costruire i flussi convettivi. In Fig. 1.2 è mostrata la collocazione delle variabili per una griglia sfalsata in un riferimento cilindrico.

Data una generica variabile ϕ , il termine convettivo, che compare in forma di divergenza nelle equazioni riportate nel precedente paragrafo, viene calcolato come espresso dalla seguente relazione per il caso monodimensionale

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f \tilde{\phi}) = \frac{\left[(\bar{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f)_j \phi_{j+\frac{1}{2}} - (\bar{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f)_{j-1} \phi_{j-\frac{1}{2}} \right]}{\Delta x_j} \quad (1.21)$$

con

$$\Delta x_j = x_j - x_{j-1} \quad (1.22)$$

Nella versione del codice HeaRT antecedente al presente lavoro, la ricostruzione del valore di ϕ all'interfaccia ($\phi_{j+\frac{1}{2}}$) era ottenuta, come mostrato in Fig. 1.3 per la frazione in massa delle specie chimiche, attraverso un'interpolazione lineare con supporto contratto sull'interfaccia stessa. Ne risulta uno schema accurato al

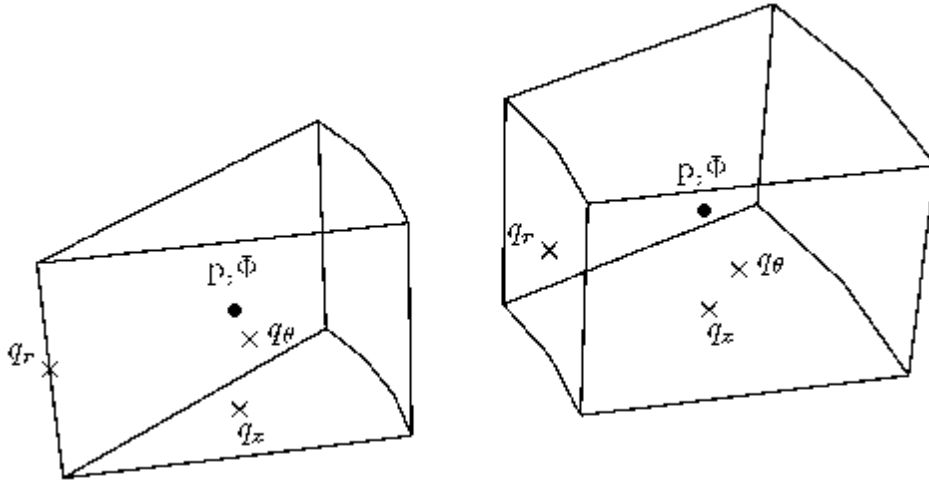


Figura 1.2: Example of a cylindrical staggered grid.

Il ordine nello spazio. Questo tipo di ricostruzione tende tuttavia a produrre una soluzione oscillante [8], a danno sia della robustezza del codice che dell'affidabilità del risultato. Al fine di migliorare questi aspetti si è scelto di modificare i termini convettivi delle equazioni delle specie chimiche, dell'energia e degli scalari condensati, introducendo una ricostruzione upwind con controllo delle oscillazioni per specie chimiche e scalari. Nel caso delle specie chimiche, così come per gli scalari passivi, l'informazione viaggia con la velocità del flusso. È pertanto ragionevole pensare ad una ricostruzione *upwind* anziché ad una centrata. L'algoritmo per la ricostruzione è graficamente illustrato in Fig. 1.4. Essendo la velocità del flusso già collocata all'interfaccia, è sufficiente considerare il suo segno per decidere se estrapolare i valori da sinistra o da destra. A questo punto occorre segnalare un aspetto: la somma delle frazioni in massa delle specie chimiche deve sempre chiudere ad 1. L'estrapolazione delle stesse all'interfaccia non può pertanto avvenire in maniera indipendente specie per specie. Il modo più semplice per garantire che questa condizione sia sempre rispettata è quello di utilizzare lo stesso supporto, con gli stessi pesi per tutte le variabili Y_s . A tale fine si è scelto di calcolare supporto e pesi come se la variabile da trasportare fosse il peso molecolare medio W della miscela. La pendenza con la quale estrapolare sarà poi scelta applicando il limitatore *minmod* [8]. Ne risulterà

$$W_{j+\frac{1}{2}} = \sum_{k=-1}^{+2} \chi_k W_{j+k} \quad (1.23)$$

A questo punto i valori delle frazioni in massa all'interfaccia saranno ottenuti applicando gli stessi pesi χ_k per tutte le specie chimiche, ovvero

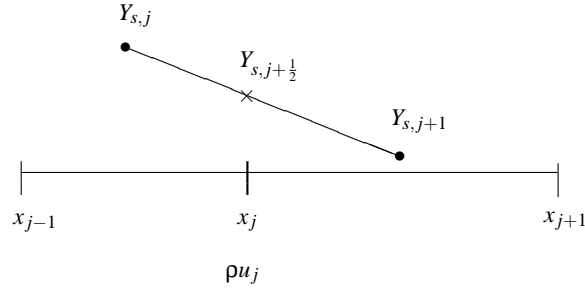


Figura 1.3: Ricostruzione del peso molecolare all'interfaccia

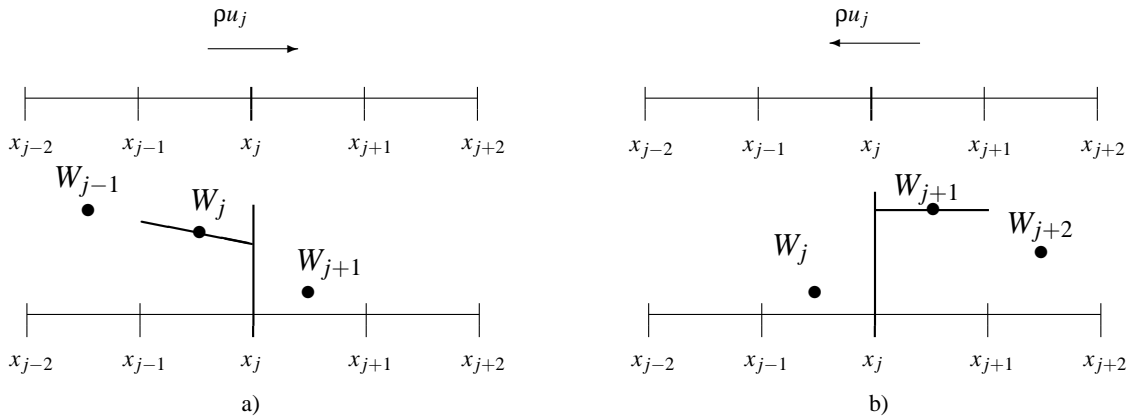


Figura 1.4: Ricostruzione del peso molecolare all'interfaccia

$$Y_{s,j+\frac{1}{2}} = \sum_{k=-1}^{+2} \chi_k Y_{s,j+k} \quad s = 1..Ns \quad (1.24)$$

A differenza di quanto avviene per le frazioni in massa, gli scalari condensati non sono vincolati l'un l'altro, poichè si suppone che in ciascuna goccia esista una specie soltanto. La ricostruzione avverrà pertanto scalare per scalare, .

Nota la composizione della miscela all'interfaccia, sarà sufficiente stimarvi la temperatura $T_{j+\frac{1}{2}}$ per poter calcolare il flusso convettivo che compare nella (1.6). Al momento nel codice HeaRT è stata implementata una ricostruzione centrata analoga a quella illustrata in Fig. 1.3. Le entalpie delle specie gassose saranno ricavate per mezzo di polinomi NASA mentre quelle degli scalari condensati per mezzo di polinomi di ordine variabile, i cui coefficienti sono facilmente inseribili in input al codice. Per il tar sono al momento utilizzati i dati riportati in [6].

Capitolo 2

Simulazione del combustore ISOTHERM

Nel presente studio è stata effettuata una prima simulazione con tecnica LES del combustore ISOTHERM al fine di indagarne, con un dettaglio maggiore rispetto ad un calcolo RANS, il comportamento. Data la carenza di dati sperimentali di confronto, lo scopo che tale attività si prefigge è quello di verificare la possibilità di effettuare una simulazione LES multifase, nelle condizioni proprie del combustore ISOTHERM, per mezzo di un codice commerciale, in modo da avere un termine di confronto col codice HeaRT, una volta che sia possibile ottenere la soluzione con quest'ultimo. Pertanto, al fine di ridurre il costo computazionale, sono state apportate alcune semplificazioni sia dal punto di vista geometrico che dal punto di vista modellistico.

2.1 Definizione del dominio, griglia di calcolo e condizioni al contorno

Rispetto alla geometria originaria (si veda ad esempio il rapporto EHE-09019) sono state fatte alcune modifiche, con lo scopo di semplificare il calcolo. In particolare l'uscita del combustore è stata posta in fondo al combustore stesso, ciò ha permesso di ottenere una configurazione simmetrica per rotazione. Il combustore è lungo 5 m ed ha un diametro di di circa 1.10 m

Il calcolo è stato effettuato su un settore di 90 gradi. La griglia di calcolo è di tipo strutturato, con circa 750000 celle, e presenta un infittimento nella zona centrale sul lato d'ingresso dei reagenti. La risoluzione che ne risulta, ben lontana da garantire l'affidabilità della soluzione da un punto di vista quantitativo, permette tuttavia la soluzione di una parte dello spettro di frequenze proprie del campo turbolento. In Fig. 2.1 è mostrata una vista globale della griglia di calcolo, con l'outlet evidenziato in rosso, mentre in Fig. 2.2 è mostrato un dettaglio della griglia nella zona dell'ingresso dei reagenti in camera (lato sinistro della figura), dove è visibile l'infittimento. Le condizioni al contorno adottate nel piano d'ingresso sono riportate in Fig. 2.3 mentre per il resto del combustore sono presentate

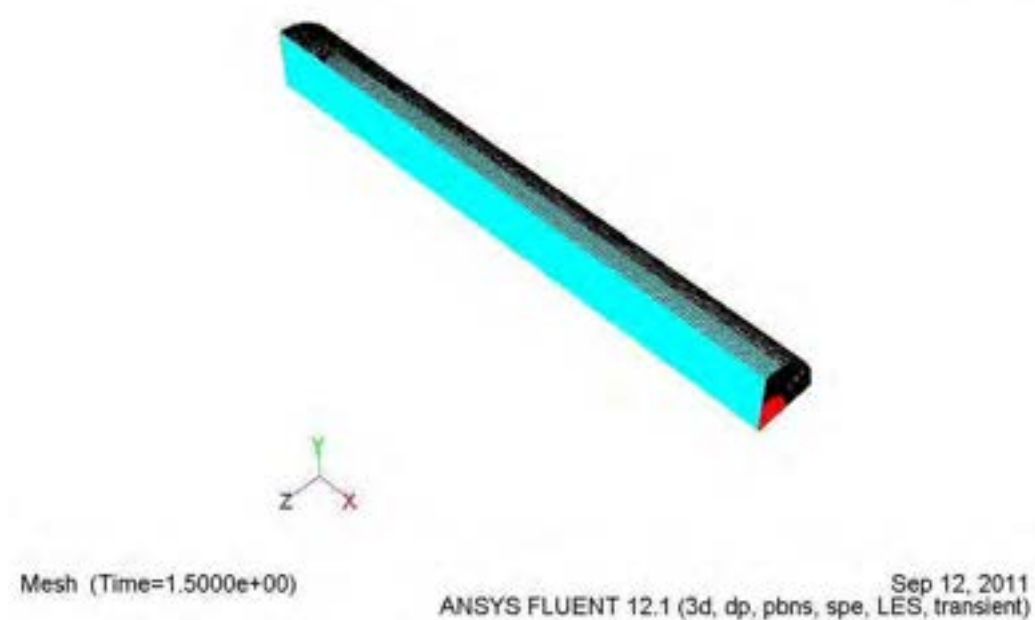


Figura 2.1: Griglia di calcolo

in Fig.2.4. Attraverso la sezione denominata *inlet-fuel* entrano in camera di combustione lo slurry di carbone, con una portata di 0.02 kg/s ed acqua liquida, con una portata di 0.016 kg/s. Dallo stesso ingresso viene pure iniettato vapore che funge da fluido vettore.

Il comburente, costituito da una miscela formata dai gas riciclati ed arricchita in ossigeno, è suddivisa in due parti: una parte viene immessa nella camera di combustione con una componente di swirl mentre l'altra parte è non swirlata.

Le pareti del combustore sono considerate adiabatiche

La forza di gravità agisce nella direzione dell'asse del combustore (asse x) verso l'uscita.

2.2 Modello adottato

La simulazione oggetto del presente capitolo è stata condotta risolvendo le equazioni di Navier-Stokes per flussi incompressibili. Il modello di turbolenza è lo Smagorinsky-Lilly per simulazioni LES (Large Eddy Simulation). Gli scambi di calore per radiazione sono tenuti in conto attraverso il modello P1.

Le particelle di carbone sono iniettate dall'ingresso ad ogni passo d'integrazione della fase gas e la loro evoluzione integrata lungo la loro traiettoria fino alla combustione completa o finchè non venga raggiunta la sezione d'uscita. Esse vedono

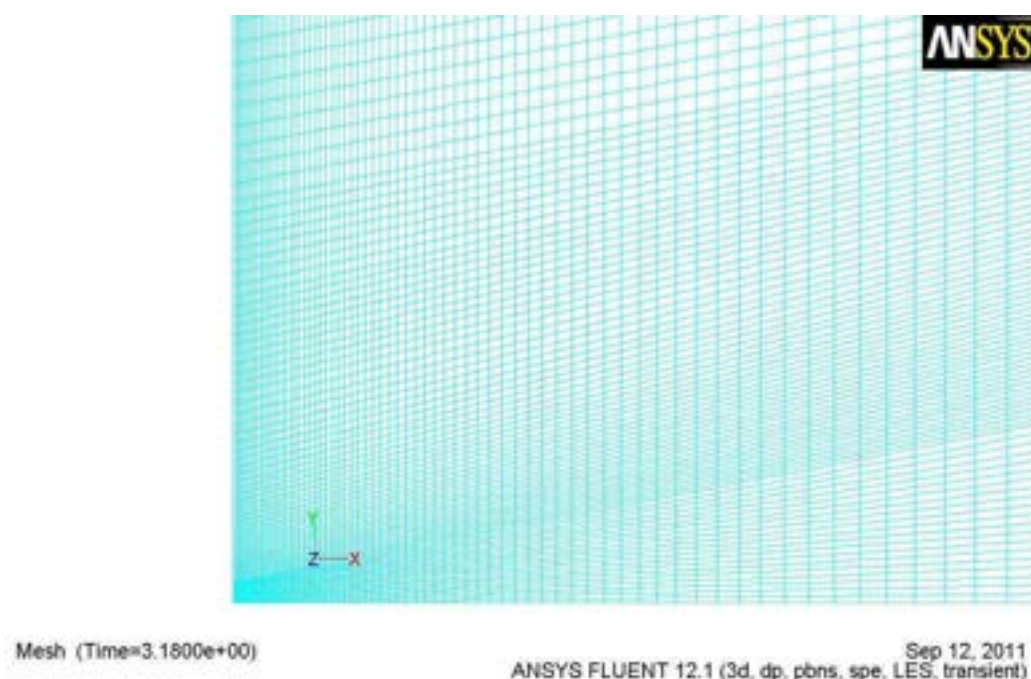


Figura 2.2: Griglia di calcolo - dettaglio zona ingresso

<i>Boundary name</i>	<i>Fluent option</i>
exit	pressure-outlet
periodiche	periodic
inlet-vapour	mass-flow-inlet
lateral-wall	wall
wall-burner-end	wall
wall-burner-head	wall
inlet-non-swirled-air	mass-flow-inlet
inlet-swirled-air	mass-flow-inlet

Tabella 2.1: Opzioni selezionate per le condizioni al contorno

pertanto un campo di moto congelato e la soluzione ha in realtà valore puramente statistico.

La miscela reagente è composta da sei specie mentre il meccanismo cinetico è riportato in Tab. 2.2. Il modello di combustione adoperato è di tipo finite-rate/eddy-dissipation. È da sottolineare come nel precedente studio riportato in RSE/2009/105 [1], per il quale si era simulato il combustore con tecnica RANS, era stato adottato uno schema cinetico più complesso, con 46 reazioni e 17 specie chimiche (Smooke) ed il modello EDC per l'interazione chimica-turbolenza. Tale modellistica risulterebbe assai onerosa dal punto di vista computazionale in un calcolo LES, per cui in questa prima fase si è preferito adottare una modellistica semplificata. Per quanto riguarda le particelle di carbone i dati utilizzati sono

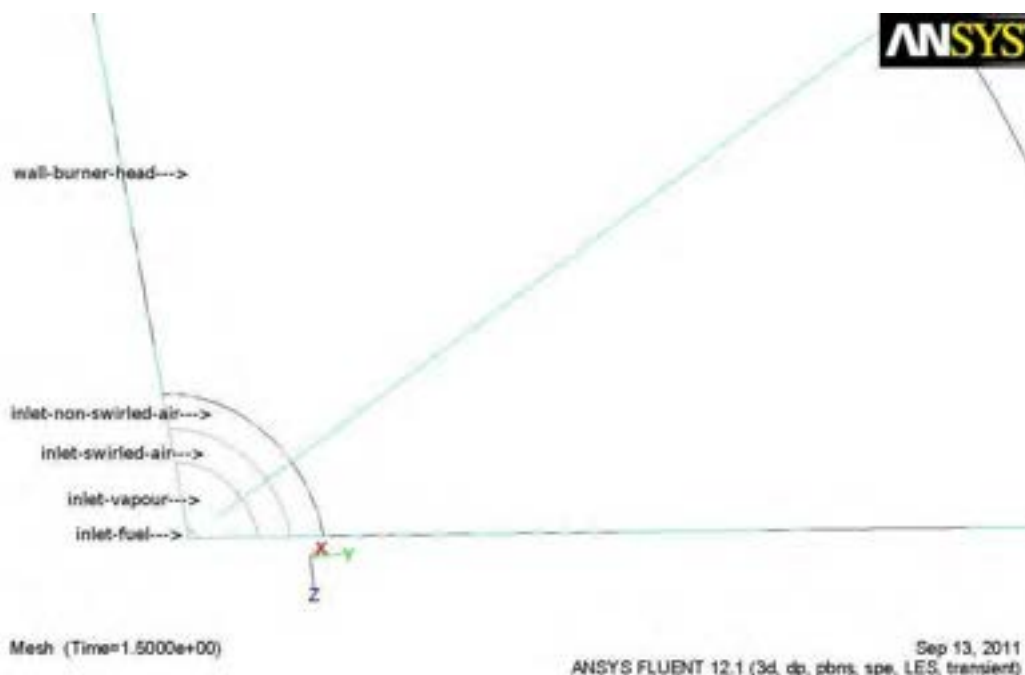


Figura 2.3: Condizioni al contorno nel piano d'ingresso dei reagenti

riportati in fondo a questo documento. Sottolineamo qui che per la devolatilizzazione si è assunto che dal carbone si liberino CH_4 e CO con il medesimo tasso di devolatilizzazione.

2.3 Risultati ottenuti

La simulazione è stata effettuata con il codice Ansys-Fluent versione 12.1, utilizzando la piattaforma CRESCO dell'ENEA.

In Fig.2.5 è possibile osservare le traiettorie delle particelle di slurry. Siccome le particelle non hanno tutte le stesse dimensioni, ma hanno diametri che variano nel range $80 \div 850$ micron, ci saranno alcune particelle che arrivano all'uscita del combustore avendo subito una piccola variazione della loro massa, mentre altre saranno completamente bruciate. Questo problema è enfatizzato dalla scelta di

REACTION	A	E $\left[\frac{J}{\text{kgmol}} \right]$
$\text{CH}_4 + 1.5 \text{ O}_2 \Rightarrow \text{CO} + 2 \text{ H}_2\text{O}$	$5.12 \cdot 10^{11}$	$2 \cdot 10^8$
FORD O2 1		
$\text{CO} + 0.5 \text{ O}_2 \Rightarrow \text{CO}_2$	$2.239 \cdot 10^{12}$	$1.7 \cdot 10^8$
FORD O2 1		

Tabella 2.2: Schema cinetico utilizzato



Figura 2.4: Condizioni al contorno nel piano d'ingresso dei reagenti

aver semplificato la geometria iniziale (vedi RSE/2009/105 [1]) ponendo l'uscita di fronte all'ingresso. Nella configurazione adottata per i calcoli RANS fatti in precedenza, le particelle impattavano la parete finale del combustore e lì terminavano la combustione. In questo caso escono dal combustore alterando di fatto la potenza fornita al combustore. Nelle Figg. 2.6 e 2.7 sono mostrate nuovamente le traiettorie delle particelle, separate per la granulometria più fine e per quella più grossa rispettivamente. Il colore indica il tempo di residenza. Come si può apprezzare, le particelle più piccole sono deviate dalla loro traiettoria iniziale dalle strutture turbolente ed i loro tempi di residenza arrivano fino a circa 5 s, allorchè la combustione è completa. Per quanto riguarda le particelle più grandi, invece, si può vedere come la loro inerzia sia troppo grande perchè le strutture turbolente presenti nel combustore possano deviarne la traiettoria. Esse procedono pertanto praticamente in linea retta fino a raggiungere l'uscita, con tempi di residenza inferiori agli 0.2 s. Questo è compatibile con il tempo di rilassamento di queste particelle di diametro $d_p = 8.5 \cdot 10^{-4} \mu m$, pari a $\tau_p \simeq 2.4s$.

In Fig. 2.8 è riportato un dettaglio del combustore nel quale è evidenziato l'andamento del processo di evaporazione dell'acqua contenuta nello slurry mentre in Fig. 2.9 è riportata la portata in massa di CH_4 liberata a causa della devolatilizzazione. Essendo anche il CO liberato con lo stesso tasso l'immagine è perfettamente sovrapponibile alla Fig. 2.9 ed è pertanto omessa. Prima che il carbone cominci a bruciare è necessario che l'acqua di preparazione dello slurry evapori completamente. Se si osserva la Fig. 2.8 si nota come la maggior parte dell'evaporazione avvenga nella prima parte del reattore. Una volta evaporata l'acqua assorbita nelle particelle può iniziare il rilascio dei componenti volatili. La diversità di

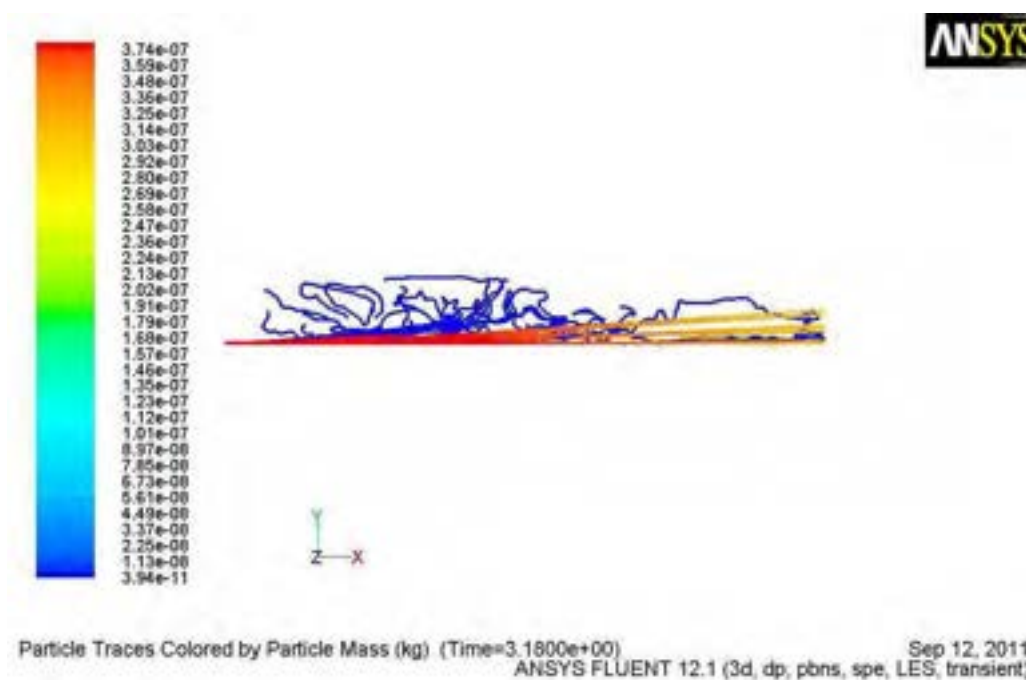


Figura 2.5: Traiettorie particelle di slurry (il colore indica la massa delle particelle)

granulometria del carbone comporta una differente crescita della temperatura per particelle con diametri diversi: più lenta per quelle grandi e più veloce per quelle piccole. Tutto ciò è mostrato in Fig. 2.9, in cui si vede chiaramente che il rilascio dei volatili avviene in modo disuniforme, con un andamento a spot. Risulta altresì evidente come i picchi di rilascio per devolatilizzazione siano disposti lungo le traiettorie delle particelle di granulometria intermedia. Questo perchè le più piccole non hanno una massa sufficientemente grande da risultare rilevanti, mentre le più grandi non hanno il tempo di riscaldarsi a sufficienza prima di raggiungere la sezione d'uscita. In Fig. 2.10 è mostrato un campo istantaneo del modulo della velocità mentre in Fig. 2.11 è presentato il campo medio. Da queste due figure è possibile constatare come la penetrazione del getto dal punto di vista della quantità di moto arrivi all'incirca fino a metà combustore.

Il campo di temperatura è presentato nelle Figg. 2.12 e 2.13 dove sono presentati una realizzazione istantanea del flusso ed il campo medio rispettivamente. Le temperature sono ovunque più basse rispetto al caso simulato con tecnica RANS e riportato in RSE/2009/105 [1]. Questo è tuttavia compatibile con il fatto che le particelle più grandi escono dal dominio prima di arrivare alla combustione completa. Questo è anche dovuto al fatto che l'estensione della zona fredda al centro del combustore, dovuta al getto entrante, si estende fin quasi a due terzi della lunghezza del combustore. Poichè le particelle più grandi sono concentrate in questa zona, ne deriva la difficoltà per queste di iniziare la combustione. Confrontando il campo medio con il campo istantaneo si può inoltre notare come i picchi di temperatura sia localizzati nei medesimi punti, sebbene con valori diversi. Questo perchè essi coincidono con i punti in cui bruciano le particelle di

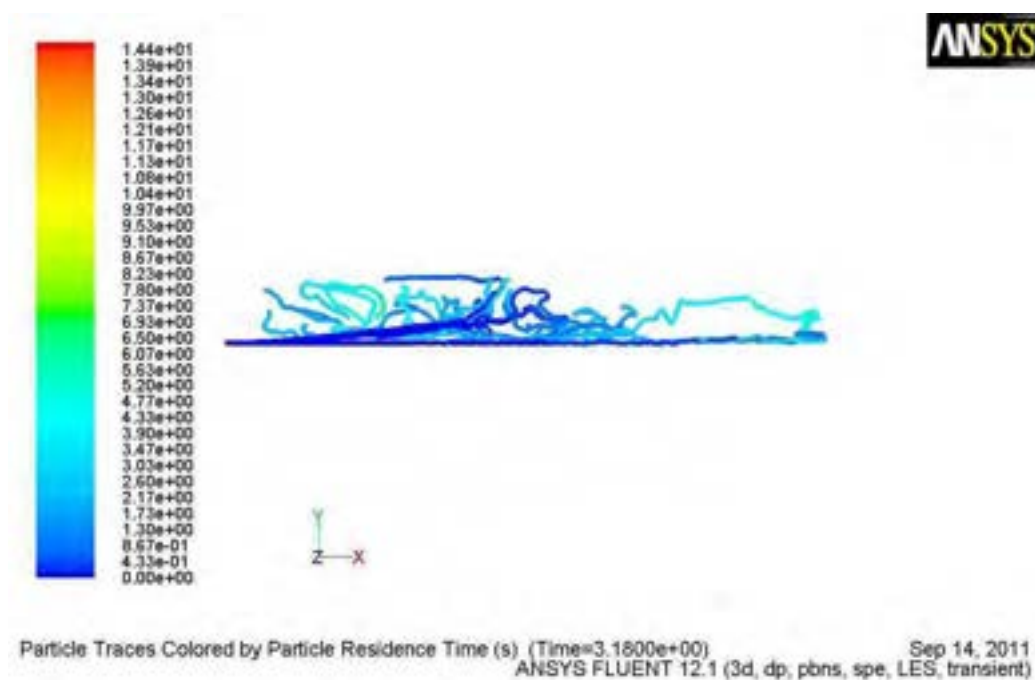


Figura 2.6: Traiettorie particelle di slurry - granulometria fine (il colore indica il tempo di residenza)

grandezza intermedia. Queste sembrano essere ancora troppo grandi per essere deviate dal campo turbolento, e una volta deviate dal getto iniziale, procedono anch'esse in linea retta fin quasi alla combustione completa. É pertanto evidente che per una migliore affidabilità della soluzione occorrerebbe iniettare un maggior numero di particelle, variandone in maniera casuale (ovviamente in un dato intervallo) velocità e posizione nella sezione d'ingresso.

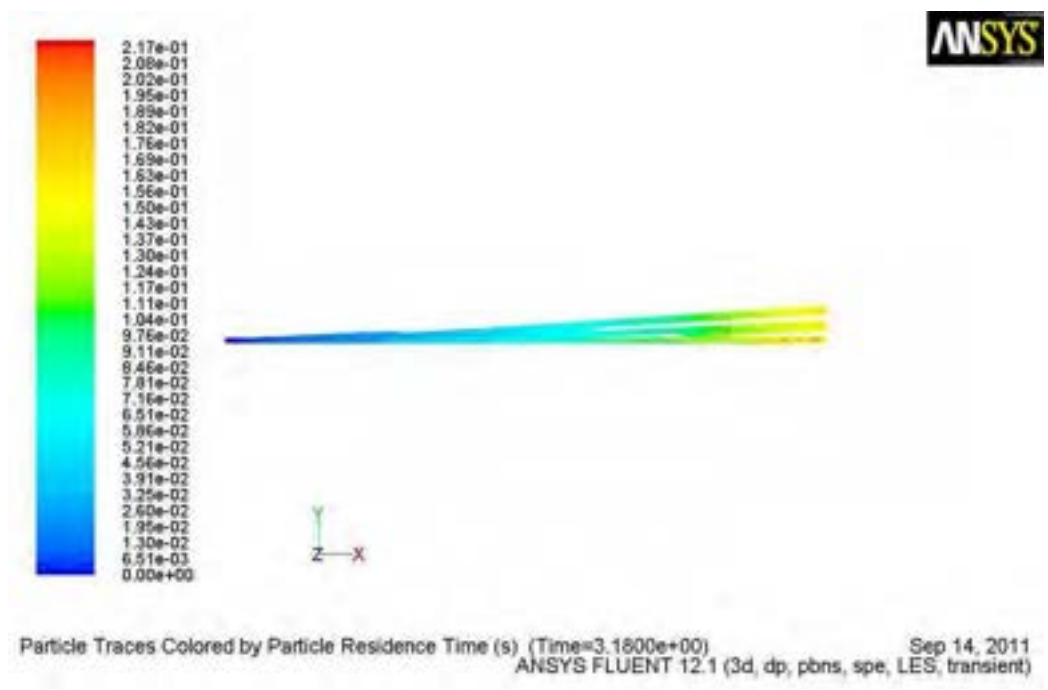


Figura 2.7: Traiettorie particelle di slurry - granulometria grossa (il colore indica il tempo di residenza)

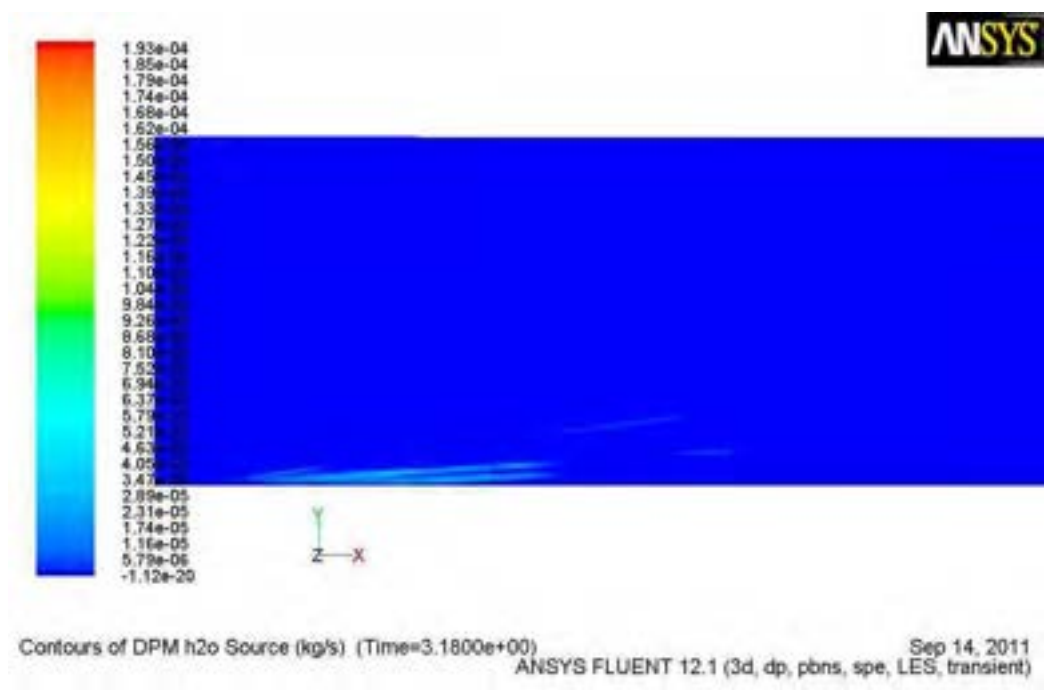


Figura 2.8: Tasso di evaporazione dell'acqua dello slurry - Dettaglio della zona d'ingresso del combustore

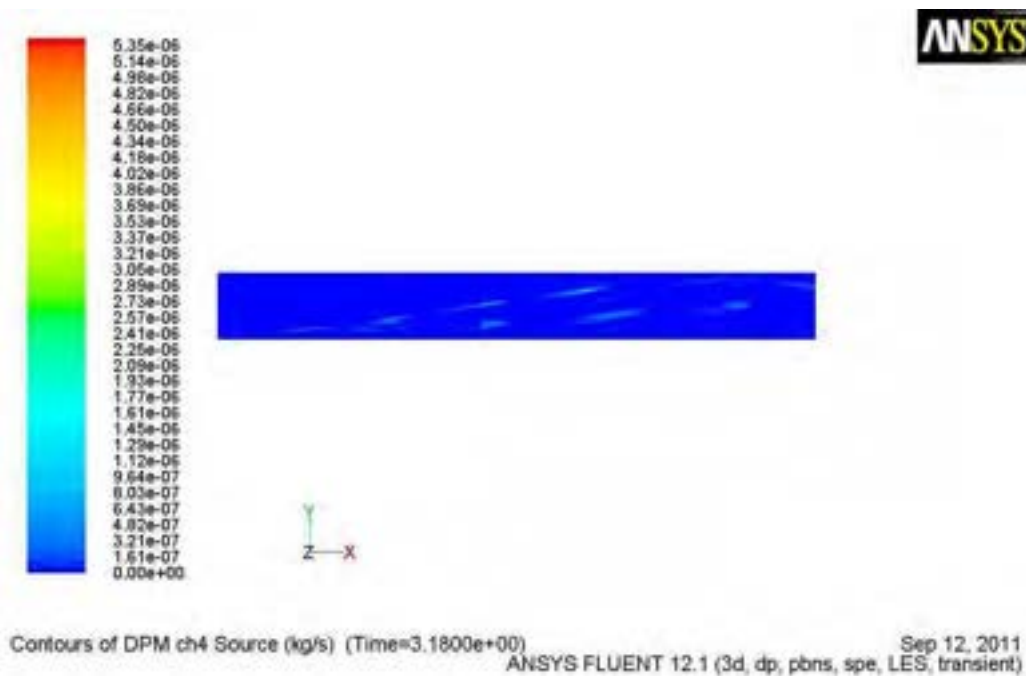


Figura 2.9: Tasso di devolatilizzazione del CH4

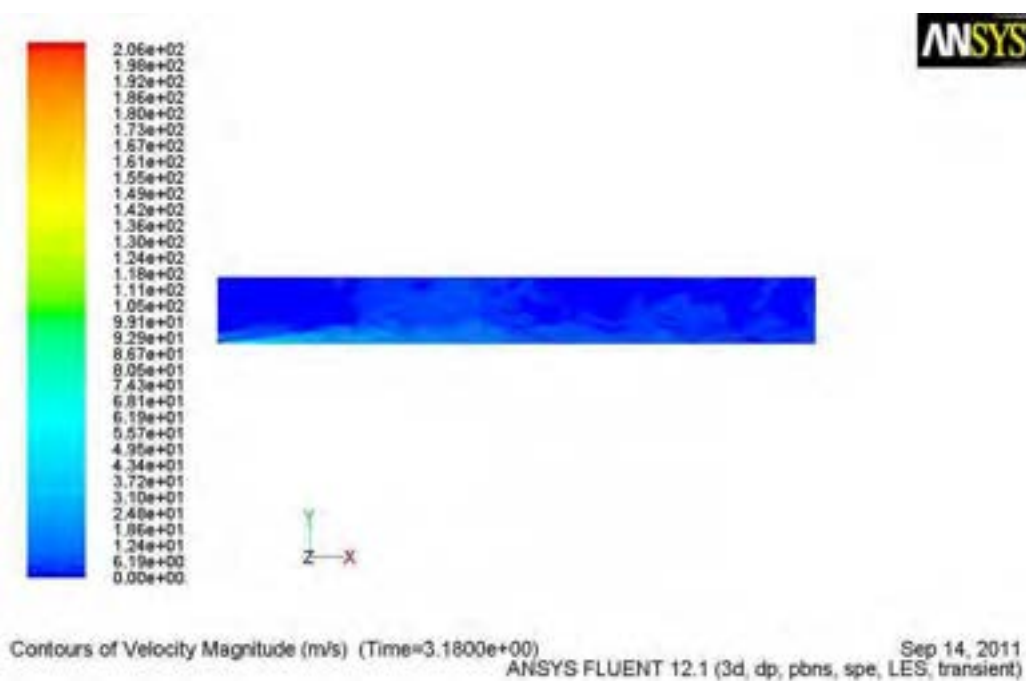


Figura 2.10: Campo istantaneo del modulo della velocità

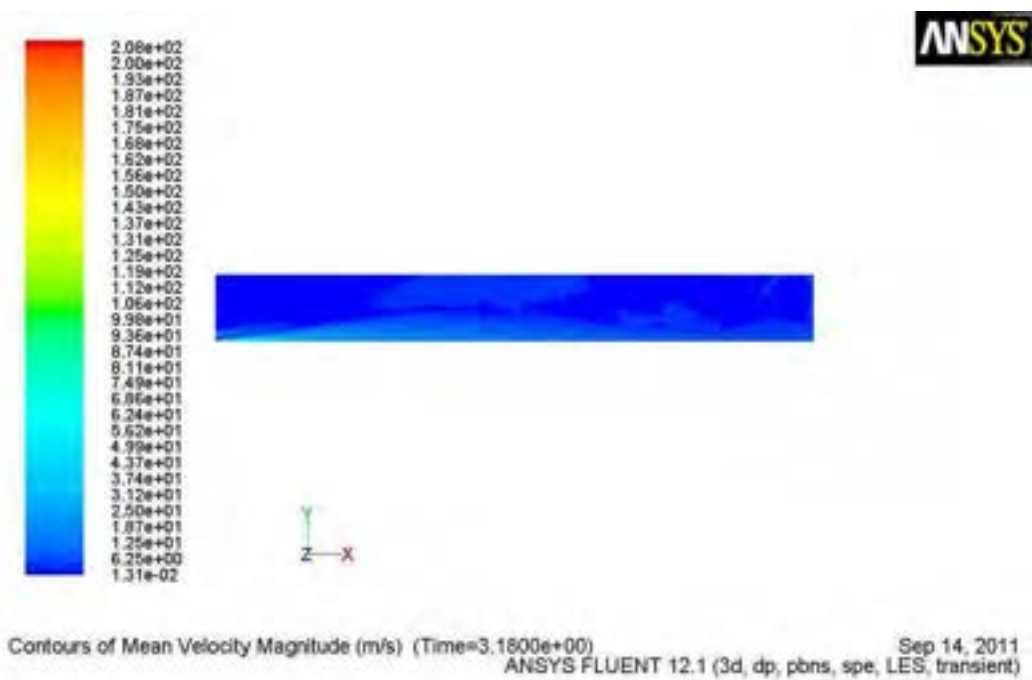


Figura 2.11: Campo medio del modulo della velocità

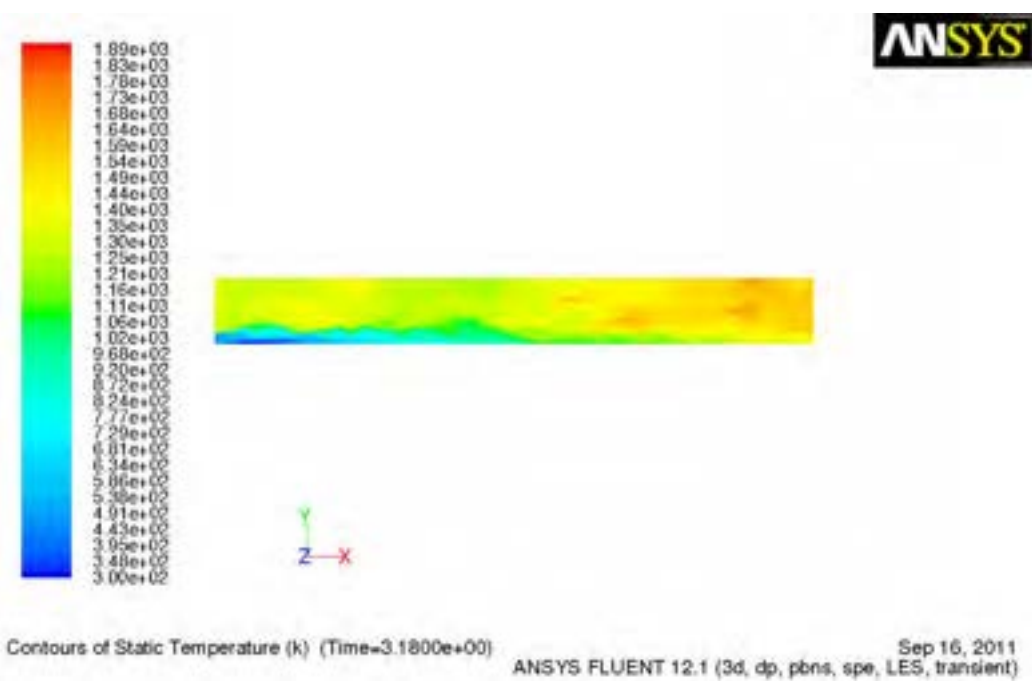


Figura 2.12: Campo istantaneo di temperatura

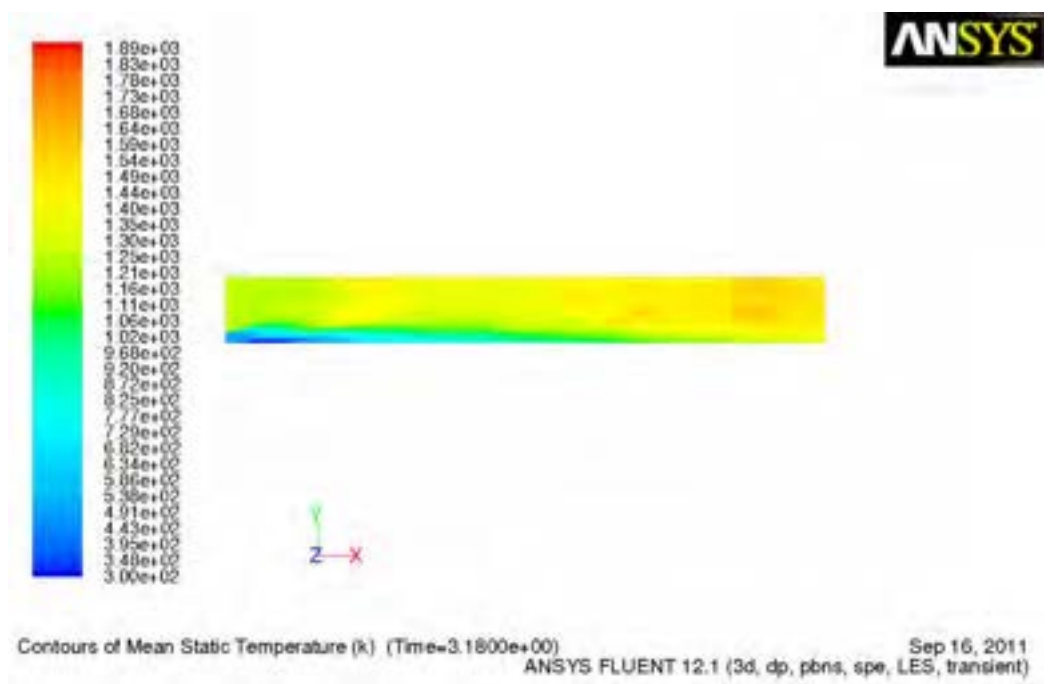


Figura 2.13: Campo medio di temperatura

Conclusioni

Nell'anno di riferimento è proseguita l'attività d'implementazione nel codice HeaRT di modelli e tecniche numeriche necessarie a simulare con modellistica LES i processi di combustione di *slurry* di carbone. In particolare, allorchè si è tentato di simulare il getto di *slurry* nelle condizioni del processo ISOTHERM, si è evidenziata la necessità di modificare le strategie di soluzione numerica di alcune equazioni. In particolare si è scelto di modellizzare l'evoluzione dell'acqua contenuta nello *slurry*, tramite l'equazione di trasporto di uno scalare passivo, in equilibrio termico e meccanico con la fase gas. Tale scelta permette un notevole risparmio in termini di costo computazionale rispetto alla soluzione di un set completo di sei equazioni differenziali, necessario per descrivere l'evoluzione di una fase dispersa. Essa è inoltre giustificata dalle piccole dimensioni delle gocce attese a valle del sistema d'iniezione a causa delle alte velocità in gioco, oltre che dal fatto che tale fase rimarrà confinata nelle immediate vicinanze dell'iniettore, evaporando poco a valle di esso.

Il notevole vantaggio in termini di costo computazionale richiede tuttavia di modificare l'equazione dell'energia per tener conto del contributo dell'acqua presente come scalare. Inoltre, l'assunzione di equilibrio termico tra le fasi rende molto delicata la soluzione dell'equazione dell'energia. Le oscillazioni spurie caratteristiche dello schema centrato implementato precedentemente a questo lavoro nel codice HeaRT portano a fluttuazioni di energia che però, in presenza dell'equilibrio tra due fasi, comportano istantanee variazioni di densità, che a loro volta causano instabilità nel codice. Si è pertanto reso necessario modificare l'algoritmo di soluzione delle equazioni dell'energia, delle specie e degli scalari condensati trasportati, introducendo un controllo delle oscillazioni nell'estrapolazione dei flussi alle interfacce necessari a costruire i termini convettivi di dette equazioni. Tale tecnica numerica è stata implementata nel codice HeaRT e si sta procedendo con la validazione. Non è stato tuttavia possibile portare a termine l'implementazione e la validazione in tempo utile a simulare il processo ISOTHERM.

Contemporaneamente si è proceduto a modificare l'equazione dell'energia delle particelle in fase dispersa, in modo da poter tener conto dell'effetto della variazione della composizione in termini di gruppi funzionali sulla temperatura. Questo è importante in fase di devolatilizzazione.

Si è infine provveduto, nell'impossibilità di procedere nella simulazione LES del combustore ISOTHERM con il codice HeaRT, alla sua simulazione con tecnica LES utilizzando il codice commerciale FLUENT. La simulazione è stata ef-

fettuata su una geometria semplificata ed utilizzando un griglia di calcolo troppo poco raffinata perchè il calcolo possa essere considerato affidabile. È tuttavia un utile esercizio che ha permesso da una parte di verificare la fattibilità dell'utilizzo del codice commerciale FLUENT, pur con le sue rigidità, per ottenere un soluzione LES del combustore. Dall'altro lato la simulazione ha messo in luce gli aspetti che un calcolo maggiormente dettagliato dovrebbe poter cogliere, come ad esempio una migliore e più uniforme distribuzione spaziale dei termini di scambio di massa tra le fasi. Inoltre, la simulazione LES ha ulteriormente evidenziato come la scelta della granulometria del carbone sia un aspetto chiave del processo. Particelle troppo grandi tenderanno ad attraversare il dominio senza avere il tempo di bruciare completamente.

Appendice

Material: coal (combusting-particle)

Property Value(s)	Units	Method
Density 1200	kg/m ³	constant
Cp (Specific Heat) 1100	j/kg-k	constant
Thermal Conductivity 0.0242	w/m-k	constant
Latent Heat 0	j/kg	constant
Vaporization Temperature 300	k	constant
Volatile Component Fraction 43.68	%	constant
Binary Diffusivity 2.9999999e-05	m ² /s	constant
Swelling Coefficient 2		constant
Burnout Stoichiometric Ratio 2.6700001		constant
Combustible Fraction 41.279998	%	constant
Heat of Reaction for Burnout 32828000	j/kg	constant
React. Heat Fraction Absorbed by Solid 0	%	constant
Devolatilization Model (312000 74000000)	1/s	single-rate
Combustion Model	diffusion-limited	#f

Bibliografia

- [1] A. Di Nardo, G. Calchetti, S. Giammartini, C. Mongiello, and M. Rufoloni. Modelli avanzati di combustione del carbone e della produzione di inquinanti. simulazioni cfd del reattore isotherm-itea alimentato con carbone sulcis. Ricerca sistema elettrico - report rse/2009/105, ENEA - Ministero dello Sviluppo Economico, 2009.
- [2] F. Donato. Numerical modelling of two-phase reacting flows. Phd thesis in energetics, xxii cycle, Dept. of Electric Engineering, Univ. Sapienza, Rome, 2009.
- [3] S. Sommariva T. Maffei G. Migliavacca T. Faravelli E. Ranzi. A predictive multi-step kinetic model of coal devolatilization.
- [4] P. Février, O. Simonin, and K.D. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech*, 533:1–46, 2005.
- [5] S. Chapman and T.G. Cowling. *The mathematical theory of non-uniform gasses*. Cambridge University Press, Cambridge, 1958.
- [6] D. Merrick. Mathematical model of thermal decomposition of coal. *Fuel*, 62(4):534–546, 1983.
- [7] M.L. Hobbs P.T. Radulovic and L.D. Smoot. Modeling fixed bed coal gasifiers. *AIChE Journal*, 38(5):681–702, 1992.
- [8] C. A. J. Fletcher. *Computational techniques for fluid dynamics*. Second Edition, Springer-Verlag, Berlin, 1991.