

**ENEA**

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



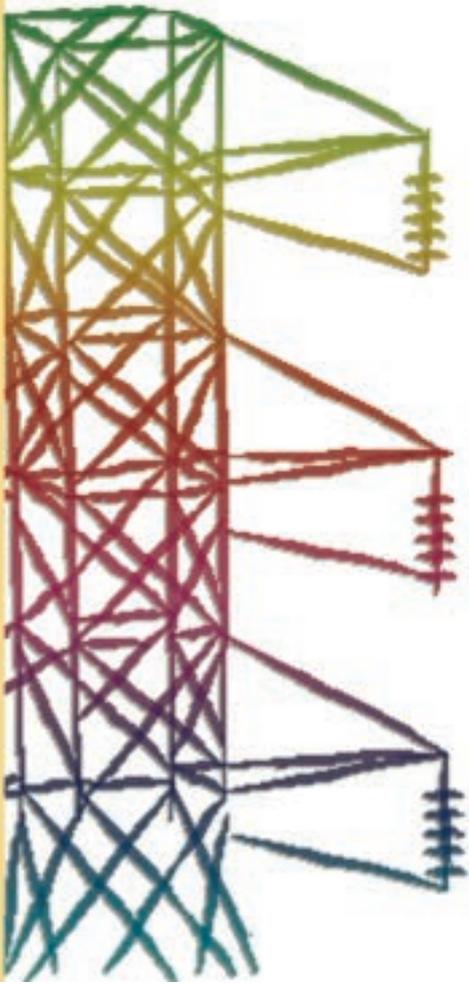
*Ministero dello Sviluppo Economico*

**RICERCA SISTEMA ELETTRICO**

---

## **Stato dell'arte sulla simulazione della combustione flameless**

**Alberto Pettinau, Caterina Frau**



**Report RSE/2009/111**



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



*Ministero dello Sviluppo Economico*

RICERCA SISTEMA ELETTRICO

Stato dell'arte sulla simulazione della combustione flameless

*Alberto Pettinau, Caterina Frau*

## STATO DELL'ARTE SULLA SIMULAZIONE DELLA COMBUSTIONE FLAMELESS

Alberto Pettinau, Caterina Frau (SOTACARBO)

Aprile 2009

Report Ricerca Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Area: Produzione e fonti energetiche

Tema: Tecnologie innovative per migliorare i rendimenti di conversione delle centrali a polverino di carbone - Sviluppo di un sistema di combustione di tipo "flameless" per impianti di produzione di elettricità con ridottissimi livelli di emissione di inquinanti e CO<sub>2</sub>

Responsabile Tema: Stefano Giammartini, ENEA

***Accordo di collaborazione tra ENEA e SOTACARBO per l'attività di ricerca dal titolo "Combustione flameless: sviluppo di codici di simulazione e verifiche sperimentali"***

*nell'ambito del tema di ricerca 5.2.2.2.*

*"Tecnologie innovative per migliorare i rendimenti di conversione delle centrali a polverino di carbone" dell'accordo di programma MSE-ENEA*

*Rapporto tecnico*  
*Attività 5.2.2.2.- A1*

**Stato dell'arte sulla simulazione  
della combustione flameless**

<b>Eseguito da:</b>	<b>Alberto Pettinau, Caterina Frau</b>	
<b>Verifica</b>	<b>Alessandra Madeddu</b>	
<b>Supervisione</b>	<b>Carlo Amorino</b>	

## Sommario

Premessa.....	3
1. Introduzione .....	4
2. Il processo di combustione Flameless .....	6
2.1. <i>Caratteristiche della combustione flameless</i> .....	7
2.2. <i>Problematiche relative alla separazione della CO<sub>2</sub></i> .....	16
3. Studi e sperimentazioni sulla tecnologia Flameless .....	17
3.1. <i>Principali applicazioni della tecnologia di combustione flameless</i> .....	18
3.1.1. <i>Bruciatori recuperativi</i> .....	18
3.1.2. <i>Bruciatori rigenerativi</i> .....	19
3.1.3. <i>Generazione di vapore</i> .....	20
3.1.4. <i>Ossidazione termica</i> .....	21
3.1.5. <i>Altre applicazioni</i> .....	21
3.2. <i>La combustione flameless per la generazione elettrica</i> .....	22
3.3. <i>Il processo ISOTHERM®</i> .....	23
4. Problematiche generali relative allo sviluppo dei modelli di simulazione.....	26
4.1 <i>La fluidodinamica computazionale e le equazioni di Navier-Stokes</i> .....	27
4.2 <i>Spettri di scala nella combustione turbolenta</i> .....	28
4.3 <i>I principi della simulazione dei processi di combustione</i> .....	29
5. Modelli di simulazione RANS.....	32
5.1. <i>Principi generali dei modelli RANS</i> .....	32
5.1.1. <i>Decomposizione di Reynolds</i> .....	32
5.1.2. <i>Media di Favre</i> .....	33
5.1.3. <i>Equazioni di Navier-Stokes mediate</i> .....	34
5.2. <i>La chiusura del sistema</i> .....	34
5.2.1. <i>Modello eddy viscosity</i> .....	35
5.2.2. <i>Modelli di chiusura a “zero equazioni”</i> .....	36
5.2.3. <i>Modello k-ε a due equazioni</i> .....	37
5.2.4. <i>Modelli per la cinetica delle reazioni chimiche</i> .....	38
5.3. <i>Applicazione ai processi di combustione di slurries di carbone</i> .....	40
5.3.1. <i>Riscaldamento</i> .....	41
5.3.2. <i>Vaporizzazione dell’acqua</i> .....	42
5.3.3. <i>Devolatilizzazione del carbone</i> .....	42
5.3.4. <i>Combustione del char</i> .....	43
5.4. <i>Implementazione dei modelli di tipo RANS</i> .....	43
6. Modelli di simulazione LES .....	45
6.1. <i>Teoria della modellazione LES</i> .....	45
6.1.1 <i>Modello eddy viscosity</i> .....	47
6.1.2 <i>Modello di equilibrio</i> .....	51
6.1.3 <i>Modelli di combustione</i> .....	53
6.2. <i>Implementazione dei modelli di tipo LES</i> .....	57
7. Possibili sviluppi dello studio .....	61
8. Riferimenti bibliografici.....	62

## **Premessa**

Il presente rapporto è stato sviluppato a fronte dell'Accordo di collaborazione tra ENEA e SOTACARBO S.p.A. stipulato il 26 marzo 2008, Prot. N. ENEA/2008/19022/TER, e del relativo allegato tecnico per l'attività di ricerca dal titolo "*Combustione flameless: sviluppo di codici di simulazione e verifiche sperimentali*". In particolare il lavoro riguarda l'attività A1. "*Stato dell'arte sulla simulazione della combustione flameless*" relativo al Tema di Ricerca Area Carbone n. 5.2.2.2 "*Tecnologie innovative per migliorare i rendimenti di conversione delle centrali a polverino di carbone*".

Obiettivo dell'attività è quello di esaminare i codici di simulazione applicabili al processo di combustione "flameless" al fine di impostare successivamente un modello mirato alla individuazione delle problematiche relative alla progettazione del bruciatore.

A tale scopo è stata effettuata una ricerca bibliografica che ha consentito l'individuazione di una vasta documentazione, relativa principalmente allo stato dell'arte della modellazione di tipo RANS e LES, che ha consentito la stesura del presente rapporto.

Il presente rapporto tecnico è stato articolato come segue:

- breve introduzione sulla tecnologia di combustione flameless;
- principali studi e sperimentazioni relativi allo sviluppo di tale tecnologia (con particolare riferimento al processo ISOTHERM);
- problematiche generali relative allo sviluppo dei modelli di simulazione di combustori flameless;
- principi generali e applicazioni della modellazione RANS (Reynolds Average Navier-Stokes) e della modellazione LES (Large Eddy Simulation);
- possibili sviluppi futuri dello studio.

## 1. Introduzione

La combustione flameless (FTO, Flameless Thermal Oxidation), le cui prime applicazioni risalgono agli anni '80, rappresenta al giorno d'oggi una tecnologia ormai diffusa e ben consolidata. Lo sviluppo di tale tecnologia è il risultato dei vari tentativi, nel corso degli anni, di ottimizzare i processi di combustione principalmente mediante interventi sul bruciatore, nella ricerca di una "fiamma ideale" che desse luogo a una combustione pulita e facilmente controllabile (Agrawal e Wood, 2002).

Il principio di base su cui si fonda la combustione flameless consiste nel ridurre le emissioni inquinanti uniformando il processo di combustione mediante l'eliminazione delle discontinuità generate da qualunque tipologia di fiamma o bruciatore.

Il grande interesse che tale tecnologia sta suscitando è giustificato dalle sempre più restrittive normative in materia di emissioni inquinanti, essendo tale tecnologia particolarmente efficace, soprattutto per ciò che riguarda inquinanti gassosi come NO<sub>x</sub> e incombusti, polveri e il problema dello smaltimento delle ceneri (che, nel caso dei combustori flameless, risultano essere vetrose e totalmente inerti).

Oltre a tali vantaggi, i sistemi flameless presentano, rispetto alle configurazioni impiantistiche convenzionali, indiscussi vantaggi dai punti di vista gestionale, funzionale ed economico (Pozzoli et al., 2002), soprattutto se a tale processo è associato un sistema di separazione e confinamento geologico della CO<sub>2</sub>.

Allo stato attuale, i processi di combustione flameless sono largamente impiegati in impianti per la distruzione di rifiuti pericolosi e, in particolare, nei settori farmaceutico e petrolchimico, nel settore della stampa e della carta e nell'industria della verniciatura. D'altra parte, la ricerca è oggi volta principalmente all'applicazione di tale tecnologia a processi di generazione elettrica, in particolare da combustibili di bassa qualità come i carboni di basso rango eventualmente miscelati con biomasse o scarti di varie lavorazioni.

L'obiettivo principale di tali ricerche riguarda principalmente l'ottimizzazione del processo di combustione, soprattutto mediante lo studio del comportamento fluidodinamico all'interno del combustore. È proprio in quest'ambito che rivestono un notevole interesse i modelli di simulazione dei processi di combustione flameless e, in particolare, quelli sviluppati al fine di analizzare l'ossidazione di combustibili solidi, come il polverino di carbone.

Oltre a tale settore di ricerca, risulta essere fondamentale lo sviluppo di opportuni sistemi di trattamento dei gas combusti, finalizzati ai seguenti aspetti:

- condizionamento dei fumi;
- eliminazione di quei composti inquinanti (come gli ossidi di zolfo e le micropolveri) che si formano comunque durante la combustione;
- individuazione delle tecnologie ottimali per il trattamento dei gas e per la valorizzazione dei sottoprodotti (come, ad esempio, la possibilità di produrre zolfo elementare o acido solforico dai composti dello zolfo separati dai fumi).

In tale ambito rientrano i materiali innovativi necessari per il trattamento dei gas ad alte temperature, a partire dalle leghe metalliche con cui realizzare le strutture, fino ai sorbenti e catalizzatori impiegati nel processo di trattamento.

Infine, risulta di fondamentale importanza, sempre nell'ambito degli impianti di generazione elettrica mediante combustione flameless, l'ottimizzazione del processo integrato nel suo insieme, con particolare attenzione a quelli che sono gli aspetti critici:

- unità di separazione dell'ossigeno dall'aria;
- generatore di vapore ultrasupercritico (esterno al combustore) ed eventuale turbina a gas (nel caso dei combustori ad alta pressione);
- recuperi energetici (scambiatori di calore ad alta temperatura).

## 2. Il processo di combustione Flameless

Gli obiettivi principali nel campo della ricerca sulla combustione sono lo sviluppo di sistemi ad elevata efficienza e la minimizzazione delle emissioni inquinanti. Inoltre, la sempre crescente attenzione alla qualità dell'aria, intesa come fondamentale componente della qualità della vita, ha determinato profondi cambiamenti nel ruolo della tecnologia, chiamata ad operare non solo a valle del ciclo produttivo, con i sistemi di depurazione, ma anche in tutte le fasi del ciclo stesso per prevenire la formazione degli inquinanti destinati a disperdersi nell'atmosfera (Capria, et al. 1992).

In questo senso i tentativi di ottimizzazione dei processi della combustione mediante interventi al bruciatore (Air/Fuel Staging, Swirl), sulla miscela combustibile/comburente, sulla camera di combustione (Burnout, Reburning) e sui prodotti della combustione (SNCR - Selective Non Catalytic Reaction, SCR - Selective Catalytic Reaction), pur avendo conseguito soddisfacenti risultati in numerosi ambiti applicativi, hanno spinto, per numerosi anni, i ricercatori e le aziende operanti nel settore alla ricerca di un sistema di combustione promosso da una "fiamma ideale", che desse luogo ad una combustione pulita e facilmente controllabile (Agraval et al., 2002). La chiave di volta che ha permesso di sviluppare e commercializzare innovativi sistemi di combustione è stata quella di indirizzare la ricerca dall'ottimizzazione dei bruciatori all'ottimizzazione dei processi in senso lato, fino alla scelta estrema di spegnere la fiamma stessa dei bruciatori in camera di combustione (Pozzoli et al., 2002)

L'incremento delle prestazioni energetiche dei bruciatori viene generalmente ottenuto con sistemi rigenerativi, che permettono di recuperare l'energia contenuta nei gas esausti, realizzando un preriscaldamento dell'aria comburente. Tuttavia ciò determina un innalzamento delle temperature massime nel sistema con conseguenze non trascurabili sulla formazione di NOx attraverso il meccanismo termico (Miller et Bowman, 1989). Negli ultimi anni, pertanto, l'attenzione dei ricercatori è stata volta allo sviluppo di sistemi di combustione che permettessero di conservare i benefici derivanti da una

maggior efficienza energetica, senza gli effetti avversi legati alla formazione di NOx.

I risultati di tali ricerche hanno evidenziato che una significativa ricircolazione dei gas esausti nella zona di combustione, associata ad un elevato preriscaldamento dei flussi entranti, permette di modificare profondamente la struttura tipica della fiamma, determinando il raggiungimento di uno stato di reattività diffusa ed estesa all'intero volume della camera di combustione. L'aria comburente è diluita per effetto del miscelamento con i gas esausti e la concentrazione di ossigeno nella zona di reazione risulta, pertanto, molto più bassa rispetto al valore atmosferico del 21%. L'innalzamento di temperatura del fluido conseguente alle reazioni di ossidazione è, pertanto, limitato a poche centinaia di Kelvin, rendendo trascurabile l'effetto di preriscaldamento dell'aria. La diminuzione dei gradienti di temperatura nel sistema permette di ridurre drasticamente le emissioni di ossidi di azoto, anche con temperature di preriscaldamento dell'aria superiori a 800-900 °C (Wunning et Wunning, 1997). Questa modalità di combustione è generalmente indicata come combustione senza fiamma, essendo caratterizzata dall'assenza di un fronte di fiamma definito (Cavalieri et al., 2004).

### ***2.1. Caratteristiche della combustione flameless***

L'ossidazione termica convenzionale, veicolata cioè da un bruciatore di qualsivoglia tecnologia, è un processo influenzato e governato da tre macrovariabili strettamente correlate tra loro in maniera non gerarchica: la Temperatura, il Tempo, e la Turbolenza (Parodi et al., 1998). Tra di esse vige una sorta di principio di indeterminazione dovuto all'incapacità sperimentale di fare chiarezza sulla loro intrinseca correlazione.

Inoltre, dal momento che i processi che avvengono all'interno di una camera di combustione sono il risultato di una serie di fenomeni interagenti di natura fluidodinamica, chimico-cinetica e di scambio termico radiativo e convettivo, è necessaria, anche a livello modellistico, la formulazione di differenti sottomodelli che descrivano i fenomeni coinvolti e che, scambiando informazioni fra di loro, diano forma al modello globale.

Le differenti condizioni locali che vengono a crearsi nelle varie zone della fiamma e della camera di combustione sono per l'appunto l'effetto di questa sovrapposizione di fenomeni. Nel contempo la formazione di molti composti inquinanti è, per l'appunto, legata a tali condizioni locali (temperature troppo alte o troppo basse, composizioni troppo ricche o troppo povere).

L'impiego di tecniche che prevedono la diluizione della fiamma associata ad un elevato preriscaldamento dei flussi entranti è alla base della tecnologia denominata MILD (dall'acronimo Moderate or Intense Low-Oxygen Dilution) o flameless, che consente di alterare profondamente la struttura tipica di un sistema di combustione raggiungendo uno stato di reattività diffusa ed estesa a tutto il volume della camera di combustione. I vantaggi di questa nuova tecnologia sono notevoli, sia in termini di riduzione delle emissioni inquinanti (NO<sub>x</sub>, soot ed elementi in tracce), che in relazione al rendimento termico dell'impianto.

La diluizione della fiamma è stata una delle strategie primarie introdotte per evitare la formazione di NO<sub>x</sub> e di particolato. Essa è ottenuta generalmente grazie all'impiego di miscele magre, di correnti ossidanti viziate o per mezzo del ricircolo dei fumi della combustione (Milani et al., 2000)

Nei bruciatori di tipo convenzionale la stabilizzazione della fiamma viene generalmente ottenuta mediante il ricorso a dispositivi quali "bluff-body" e "swirler". Essi determinano la formazione di zone di ricircolo interno dei gas di combustione, in cui la velocità del flusso eguaglia la velocità di fiamma. Ciò fornisce una sorgente di ignizione costante alla miscela reagente, la cui combustione si concentra nel fronte di fiamma, una discontinuità gasdinamica che separa i gas combustibili da quelli incombustibili. Tale regione è caratterizzata da gradienti termici e di concentrazione molto pronunciati. In uno spessore variabile da qualche decimo di millimetro a pochi millimetri si concentrano, infatti, le reazioni radicaliche che sono alla base del processo di combustione. L'innalzamento della temperatura conseguente all'ossidazione del combustibile risulta molto significativo e le temperature locali possono raggiungere valori prossimi alla temperatura adiabatica di fiamma (temperatura raggiunta dalla fiamma in condizioni adiabatiche) pari a 1800-

2000 °C. L'esistenza di elevati gradienti termici nel fronte di fiamma permette di migliorarne la stabilità, ma costituisce la causa principale di formazione degli ossidi di azoto.

L'incremento del ricircolo dei gas esausti alla radice della fiamma determina un aumento del contenuto di inerti nella miscela reagente. Il grado di ricircolazione dei fumi di combustione può essere quantificato utilizzando la relazione:

$$k_R = \frac{\dot{m}_E}{\dot{m}_A + \dot{m}_F} ;$$

dove  $\dot{m}_E$  è la portata dei gas riciccolati, mentre  $\dot{m}_A$  e  $\dot{m}_F$  rappresentano, rispettivamente, le alimentazioni fresche di aria e di combustibile.

I sistemi di combustione che adottano, per il controllo delle emissioni di NOx, la ricircolazione interna di gas esausti, utilizzano rapporti di ricircolo  $k_R$  inferiori al 50%. Gli studi condotti sulla combustione degli idrocarburi (Zabetakis, 1965) hanno evidenziato, come è mostrato nella Figura 2.1, che al di sopra di tale limite non è possibile ottenere miscele gassose infiammabili.

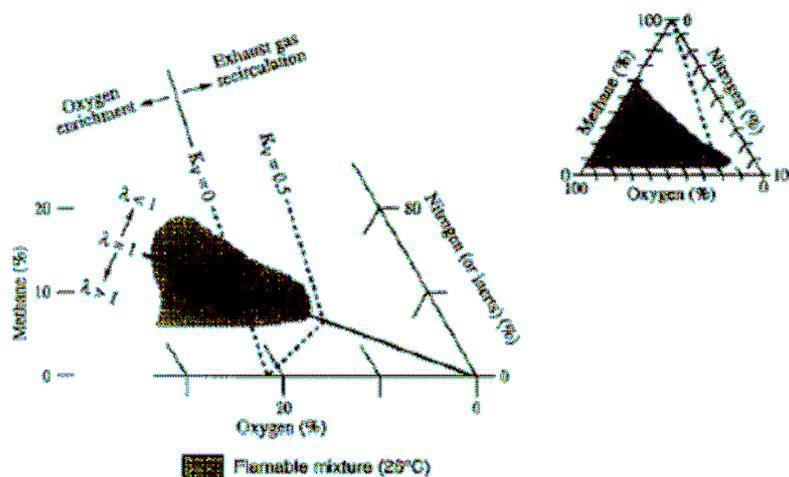


Figura 2.1: Limiti di infiammabilità per miscele CH<sub>4</sub>/aria (Zabetakis, 1965)

È stato verificato che, in particolari condizioni operative, è possibile realizzare un regime di combustione stabile con valori del rapporto di ricircolo  $k_R$  molto maggiori del 50%. Nel caso ideale, questa tipologia di combustione avviene senza alcuna fiamma visibile ed è pertanto indicata come ossidazione flameless.

La Figura 2.2 riporta un diagramma di stabilità per differenti regimi di combustione, in funzione della temperatura operativa e del rapporto di ricircolo. Si osserva che è possibile operare con fiamme convenzionali stabilizzate al bruciatore (A) per qualsiasi temperatura, ma con rapporti di ricircolo inferiori al 30%. L'incremento del grado di ricircolazione dei gas esausti determina una destabilizzazione della fiamma (B) che si distacca dal bruciatore e si estingue (blow-out), nel caso di temperature operative inferiori alla temperatura di autoignizione del combustibile. Se la temperatura all'interno del bruciatore è sufficientemente elevata, l'ossidazione del combustibile avviene in regime flameless (C). La Figura 2.2 evidenzia inoltre che non è possibile operare in modalità "flameless" in una camera di combustione fredda. Il bruciatore deve essere avviato, pertanto, in regime di combustione convenzionale per consentire il raggiungimento di temperature superiori a quella di autoignizione del combustibile.

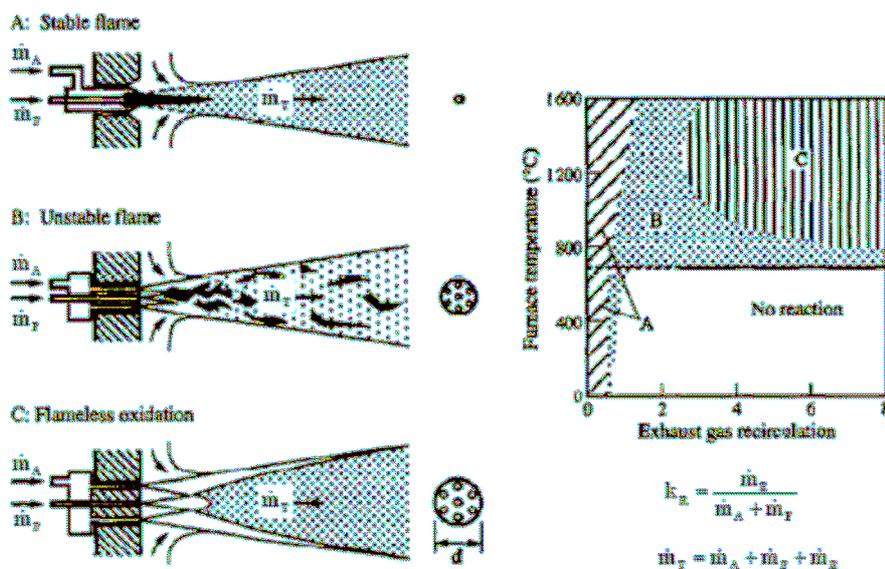
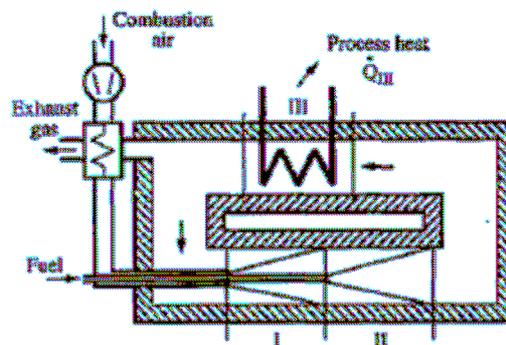


Figura 2.2: Regimi di combustione per differenti tipologie di miscelazione combustibile-comburente (Wunning et al., 1997)

Una rappresentazione ideale del processo di combustione senza fiamma è riportato in Figura 2.3. L'aria comburente viene inizialmente miscelata con i gas esausti (regione I). Quando il miscelamento può ritenersi completo viene alimentato il combustibile (regione II) ed ha luogo la combustione. Se la quantità di fumi ricircolata è sufficientemente elevata, l'innalzamento di temperatura conseguente alle reazioni di ossidazione risulta limitato a poche centinaia di Kelvin. Nella regione III si realizza un raffreddamento parziale dei fumi di combustione assicurando, comunque, che la temperatura dei gas sia tale da garantire la reazione nella regione II. L'aliquota di fumi che lascia il sistema può essere impiegata per il preriscaldamento dell'aria comburente, al fine di incrementare l'efficienza del processo.



*Figura 2.3: Schematizzazione del processo di combustione flameless ideale*

Particolari bruciatori sono stati recentemente sviluppati per poter operare alternativamente in condizioni di fiamma o flameless a seconda della velocità del getto d'uscita e della conseguente ricircolazione diretta dei gas combusti che vengono convogliati nella fiamma grazie al suo elevato momento, permettendo così l'accoppiarsi della nuova tecnologia a quelle già esistenti.

Le caratteristiche principali della combustione flameless sono da attribuirsi all'assenza di un fronte di fiamma ed alla presenza di un volume di reazione sostanzialmente omogeneo. Ciò consente, a livello modellistico, di schematizzare il processo mediante l'analogia con un reattore a miscelazione

completa WSR (Well Stirred Reactor). Tale analogia è ulteriormente rafforzata dai risultati di molti esperimenti che indicano una generale omogeneità della temperatura all'interno del reattore stesso. Alcuni studi teorici (Cavaliere et al., 1999) condotti per l'appunto impiegando un modello di reattore adiabatico perfettamente miscelato, hanno messo in evidenza la presenza di stati stazionari multipli che rappresentano un possibile problema di stabilità del sistema.

Le condizioni di preriscaldamento possono essere ottenute non necessariamente mediante una ricircolazione diretta dei fumi, ma anche mediante la sola ricircolazione del calore, attraverso un sistema di trasferimento del calore stesso dai prodotti ai reagenti. Tale sistema consente non solo di impiegare miscele combustibili a basso potere calorifico, ma anche di conseguire notevoli risultati in termini di efficienza e risparmio energetico. La storia termica di un sistema adiabatico a combustione premiscelata, rappresentata schematicamente nel diagramma superiore in Figura 2.4, sia in condizioni di assenza che di presenza di ricircolazione del calore, mostra come la massima temperatura raggiunta dipenda dalla quantità di calore riciclato e come quindi risulti indipendente sia dal potere calorifico del combustibile che dal rapporto stechiometrico con il comburente.

A temperatura ambiente un combustibile presenta un intervallo di infiammabilità più o meno esteso e centrato intorno alla composizione della miscela stechiometrica, i limiti di tale intervallo si ampliano al crescere della temperatura, come mostrato nel secondo diagramma di Figura 2.4. Per un combustibile a basso potere calorifico il dominio di combustione può addirittura essere nullo a temperatura ambiente e comparire soltanto al di sopra di una certa temperatura di soglia. Per questa ragione la tecnica del preriscaldamento diviene essenziale qualora si trattino miscele particolarmente magre o povere, che possono ad esempio provenire dall'industria di processo.

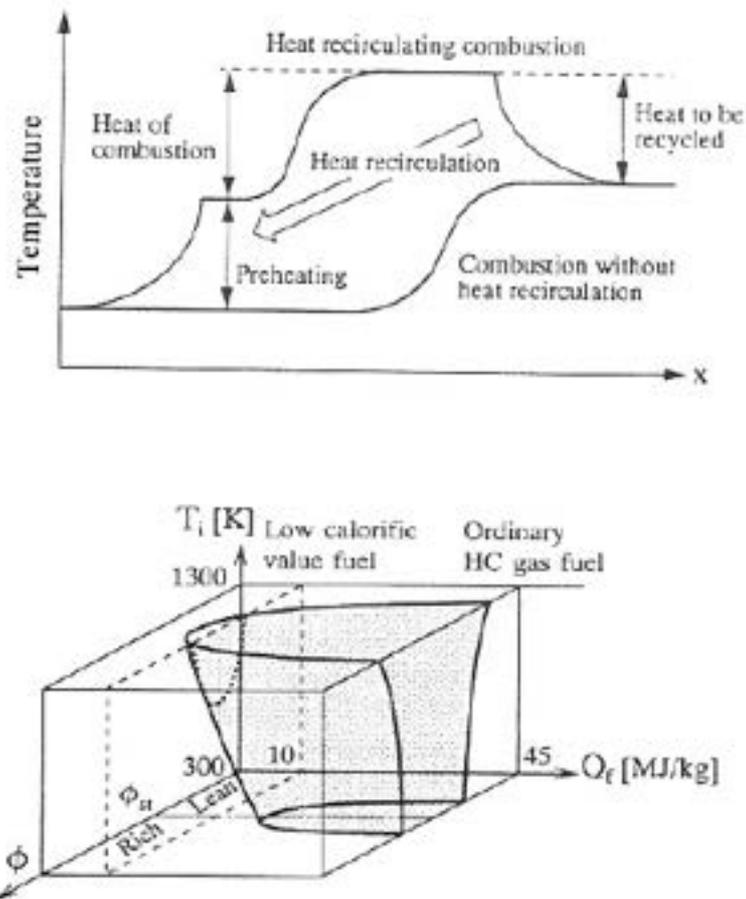
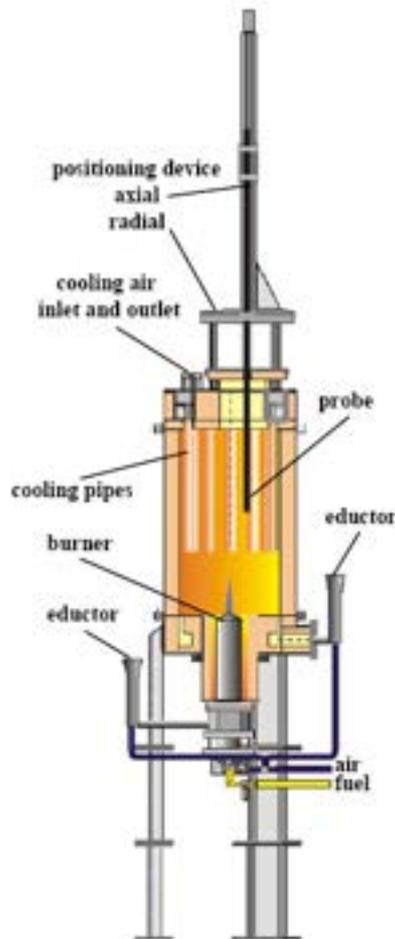


Figura 2.4: Piano e relativo spazio dei regimi di combustione (Katsuki et al., 1998)

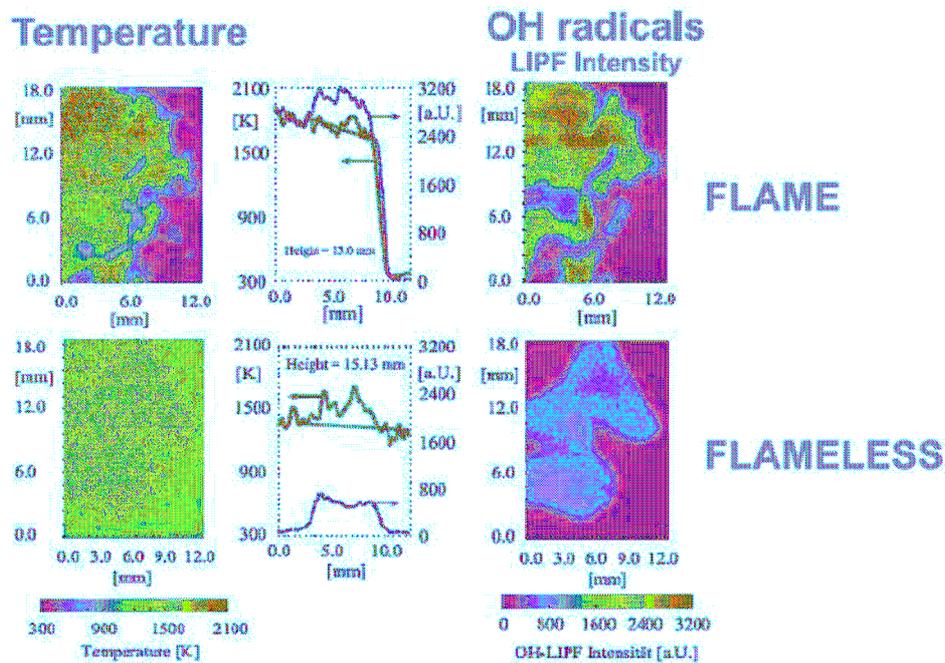
Il vantaggio principale derivante dall'impiego della combustione flameless consiste nel drastico abbattimento delle emissioni di NOx. L'assenza di picchi di temperatura tipici dei sistemi di combustione convenzionali permette, infatti, di limitare fortemente la formazione di NOx con il meccanismo termico, anche in presenza di preriscaldamenti significativi dell'aria comburente (Wunning et al., 1997), come messo in evidenza da studi sperimentali condotti sull'argomento (Figura 2.5). È stata inoltre affiancata all'analisi sperimentale la simulazione numerica del bruciatore operante in regime di combustione senza fiamma. I risultati numerici hanno evidenziato un buon grado di accordo con i valori di velocità e temperatura misurati, confermando che la combustione MILD può essere studiata utilizzando codici di calcolo CFD esistenti.

Nella figura 2.5 è presentato, a titolo di esempio, un apparato sperimentale utilizzato per la realizzazione delle misure di temperatura e velocità in regime di combustione “flame” e “flameless”. Il bruciatore è montato sul fondo della camera di combustione e presenta, al suo interno, una sezione di preriscaldamento (fino a 750°C) dell’aria comburente. La camera di combustione è raffreddata ad aria ed è dotata di un sistema automatico per il posizionamento del “probe”. Le misure di temperatura sono state effettuate con una termocoppia Pt-Rh di 0.5 µm, mentre le velocità sono state valutate dalla conoscenza della pressione dinamica del flusso (Wunning, 2003)



*Figura 2.5: Apparato sperimentale per la realizzazione delle misure di temperatura e velocità in regime di combustione flame e flameless (Wunning, 1997)*

Studi condotti recentemente (Plessing et al., 1998) hanno realizzato, con tecniche ottiche non intrusive, misure di temperatura e di concentrazione delle specie chimiche in una camera di combustione operante in modalità flame e flameless. La Figura 2.6 mostra un confronto tra le temperature e le concentrazioni di radicali OH misurate nei due casi. Si osserva che il passaggio al regime MILD determina una riduzione significativa delle temperature massime, che passano da circa 1900°C a 1650°C. La combustione avviene nel regime Well Stirred Reactor (Poinsot et al., 2005), e la formazione di NOx con il meccanismo termico viene, pertanto, inibita. La Figura 2.6 evidenzia, inoltre, che nel caso flameless i radicali OH sono presenti in concentrazioni minori e sono distribuiti più uniformemente rispetto al caso flame. Ciò permette di ridurre anche la quantità di NOx formata con il meccanismo prompt, contribuendo a limitare il contenuto di ossido nitrico nei fumi al di sotto di 10 ppm.



*Figura 2.6: Temperatura e concentrazione dei radicali OH in una camera di combustione operante in regime di combustione flame e flameless (Plessing et al., 1998)*

Lo stesso bruciatore è stato utilizzato (Özdemir et al., 2001) per la realizzazione di ulteriori misure di temperatura e concentrazione e per la valutazione delle velocità medie fluttuanti in camera di combustione. Tale analisi ha evidenziato l'importanza del meccanismo di ricircolazione dei gas esausti sull'innesco e l'avanzamento delle reazioni di combustione. Inoltre è stato confermato che, in regime flameless, i tempi caratteristici della cinetica chimica e della turbolenza risultano paragonabili e il numero di Dahmköler tende all'unità. Ciò determina un allargamento della zona di reazione, che non risulta più concentrata nel fronte di fiamma, ma si estende a gran parte del volume della camera di combustione.

## ***2.2. Problematiche relative alla separazione della CO<sub>2</sub>***

La tecnologia di combustione flameless si presta molto bene ad applicazioni di tipo "CO<sub>2</sub>-free". Utilizzando infatti ossigeno ad elevato grado di purezza (ovviamente miscelato successivamente con i fumi riciclati) come comburente, si ottengono, in uscita dal reattore, fumi composti da CO<sub>2</sub>, vapor d'acqua e tracce di composti chimici derivanti dal particolare tipo di combustibile. Tra questi, gli unici presenti in concentrazioni significative sono gli ossidi di zolfo (la cui concentrazione dipende fortemente dal contenuto in zolfo del combustibile utilizzato) e le polveri (presenti in concentrazioni bassissime), mentre è praticamente nullo il contenuto di ossidi di azoto, metalli pesanti (che rimangono intrappolati nelle ceneri) e composti organici.

Operando una purificazione di tali fumi, pertanto, si ottiene, in uscita, una miscela composta quasi esclusivamente da CO<sub>2</sub> e vapor d'acqua; la separazione dell'anidride carbonica si può dunque effettuare mediante una semplice condensazione del vapore presente nei fumi depurati, con conseguenti notevoli vantaggi di carattere energetico, economico e gestionale rispetto ai sistemi convenzionali di separazione della CO<sub>2</sub>.

### **3. Studi e sperimentazioni sulla tecnologia Flameless**

Nell'impiantistica industriale, la combustione flameless è utilizzata in tutte quelle applicazioni nelle quali è necessario il trattamento termico (incenerimento) di scarti di produzione o correnti inquinate (ad esempio nei settori farmaceutico e petrolchimico, della stampa e della carta, della verniciatura). La tecnologia flameless viene infatti impiegata quando la concentrazione degli inquinanti combustibili negli effluenti da trattare non è sufficiente per il raggiungimento della condizione di autosostentamento (o "autotermicità") delle camere di combustione. In altri casi, si impiega questa tecnologia di fronte a specifiche esigenze di processo, quali il recupero dell'energia chimica residua degli effluenti o l'imposizione di limitare ed abolire l'utilizzo di fiamme libere in zone antideflagranti, ma la si applica anche quando si renda necessario l'utilizzo di altri sistemi di apporto e/o recupero entalpico (Pozzoli et al., 2002).

Solo recentemente, invece, si stanno studiando applicazioni della combustione flameless per la generazione elettrica. Tale tecnologia, infatti, consente la combustione, con elevata efficienza, di una grande varietà di combustibili e garantisce emissioni inquinanti estremamente ridotte.

In generale, un impianto di combustione flameless è composto da tre sezioni principali: preparazione del combustibile, combustione vera e propria e trattamento fumi (Cavaliere e De Joannon, 2004). A queste, nel caso delle applicazioni alla generazione elettrica, si aggiunge l'isola di potenza. In particolare, l'unità di preparazione del combustibile comprende quelle apparecchiature necessarie per portare il combustibile dall'area di stoccaggio fino al sistema di iniezione in camera di combustione. Tale iniezione può avvenire, a seconda del sistema considerato, in fase solida, liquida, gassosa oppure anche come slurry. D'altra parte, il trattamento dei fumi ha la funzione di rimuovere da essi le sostanze inquinanti (fino a raggiungere i limiti di emissione previsti dalle normative) ed eventualmente la CO<sub>2</sub>.

### ***3.1. Principali applicazioni della tecnologia di combustione flameless***

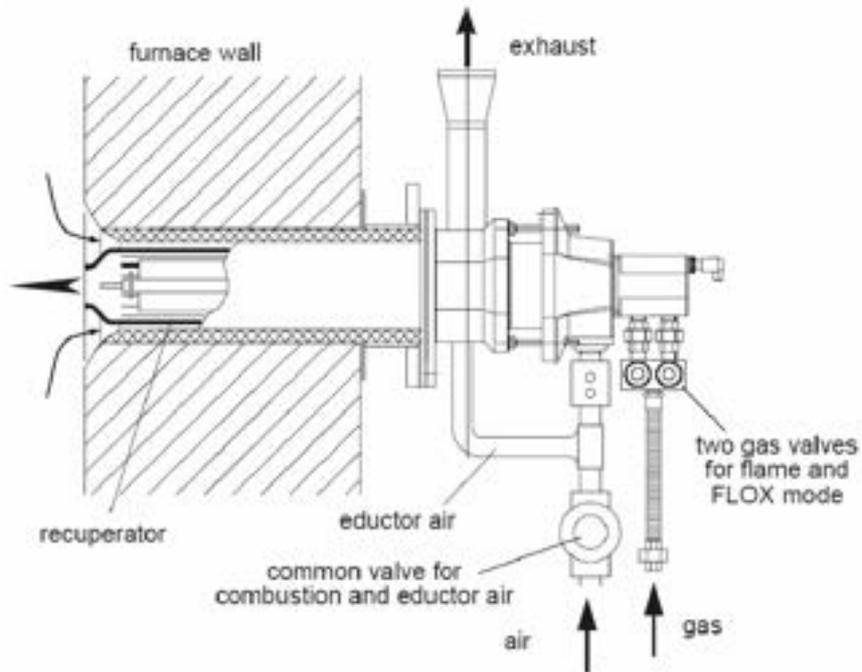
La combustione flameless è principalmente impiegata in applicazioni ad alta temperatura (850-1300 °C) in cui sia necessario assicurare una buona efficienza energetica senza gli effetti avversi derivanti dalla formazione degli ossidi di azoto. Tali esigenze hanno portato ad uno sviluppo di bruciatori in grado di operare in regime di combustione flameless, dotati di sistemi di recupero per il trasferimento dell'energia termica contenuta nei gas esausti all'aria comburente.

A tale proposito, si fa distinzione tra quattro tipologie di bruciatori flameless (Parente, 2004):

- bruciatori recuperativi;
- bruciatori rigenerativi;
- generatori di vapore;
- ossidazione termica.

#### *3.1.1. Bruciatori recuperativi*

I bruciatori recuperativi sono ampiamente utilizzati nell'industria siderurgica per il riscaldamento diretto e indiretto (in combinazione con tubi radianti) delle fornaci. Tali sistemi (che possono operare sia in regime di combustione flame che flameless) permettono di ottenere elevati gradi di preriscaldamento dell'aria (650 °C) con emissioni di ossidi di azoto inferiori a 20 ppm (Telger e Roth, 1995).

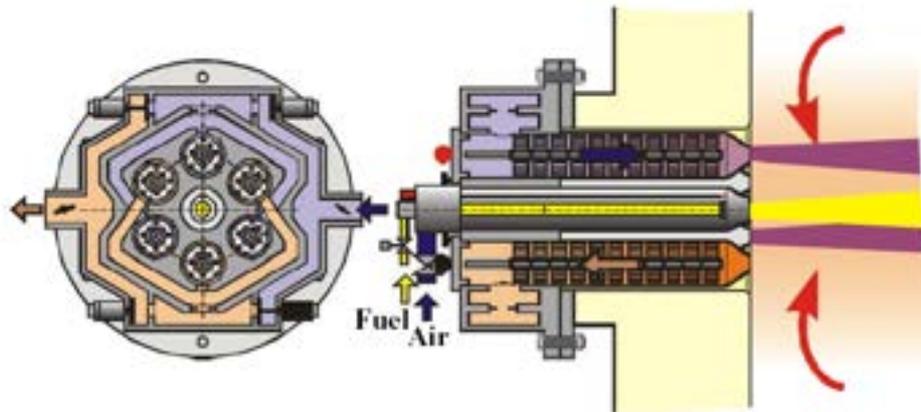


*Figura 3.1: esempio di bruciatore recuperativo operante in modalità flame e flameless (Wüning, 2003)*

Il preriscaldamento dell'aria comburente viene realizzato facendo passare i fumi caldi attraverso la sezione anulare compresa tra il recuperatore di calore e il mantello esterno. Inoltre le due valvole di alimentazione del combustibile consentono di variare la modalità di alimentazione passando dal regime flame (in avviamento) a quello flameless.

### *3.1.2. Bruciatori rigenerativi*

I bruciatori rigenerativi sono generalmente impiegati nell'industria del vetro per garantire temperature di ingresso dell'aria superiori a 1200°C. Anche tali bruciatori possono operare nei regimi di combustione flame e flameless, variando semplicemente la modalità di iniezione dei reagenti.



*Figura 3.2: esempio di bruciatore rigenerativo (Wünning, 2003)*

I rigeneratori, realizzati in materiale ceramico, sono disposti concentricamente rispetto all'ugello centrale per l'alimentazione del combustibile. Essi funzionano alternativamente come preriscaldatori dell'aria comburente e come recuperatori dell'energia termica contenuta nei gas esausti. In ciascun ciclo temporizzato, della durata tipica di 20 secondi, metà dei rigeneratori operano come preriscaldatori dell'aria e i rimanenti sottraggono calore dai fumi di combustione.

Il ricorso a strutture ceramiche tridimensionali permette di incrementare notevolmente la superficie di scambio termico rispetto ai bruciatori recuperativi, consentendo di raggiungere, con una struttura assai compatta, un elevato preriscaldamento del comburente (Parente, 2004).

L'accoppiamento del principio di recupero termico con la tecnologia di combustione MILD permette di ottenere efficienze energetiche molto elevate (superiori all'80%) e di ridurre le emissioni di NO a valori inferiori a 30 ppm (Wünning e Wünning, 1997).

### *3.1.3. Generazione di vapore*

La combustione flameless può essere utilizzata efficacemente anche in impianti di generazione elettrica, mediante l'applicazione in generatori di vapore avanzati. Ciò permetterebbe, infatti, di conseguire una riduzione significativa della formazione di NOx e particolato, con limitate emissioni di incombusti e microinquinanti organici. Inoltre, l'assenza di un fronte di fiamma definito e l'esistenza di un esteso volume di reazione consentirebbe di

operare anche con combustibili di basso rango (carboni di bassa qualità, oli pesanti, biomasse e rifiuti).

Dell'applicazione della combustione flameless alla generazione elettrica si parlerà in maniera più dettagliata nel seguente paragrafo 3.2.

#### *3.1.4. Ossidazione termica*

La combustione flameless viene impiegata per l'ossidazione termica quando il potere calorifico della corrente in ingresso (principalmente effluenti liquidi o gassosi contenenti sostanze combustibili) non è sufficiente per autosostenere il processo di combustione.

In tali casi, infatti, i sistemi di combustione convenzionali (inceneritori, torce, combustori e post-combustori) richiedono l'utilizzo di bruciatori ausiliari (operanti generalmente con gas naturale, propano o GPL); ciò determina una penalizzazione del rendimento energetico dell'impianto e un incremento dei costi di gestione (dovuto principalmente alla necessità di sistemi di controllo appositi per i bruciatori ausiliari).

Iniettando invece i combustibili ausiliari nella corrente da trattare, è possibile raggiungere la condizione di autotermicità dei forni ovviando agli inconvenienti tecnico-economici suddetti. In tali casi, il combustore viene avviato mediante l'utilizzo di bruciatori o di termoresistenze, che vengono disattivate una volta raggiunto il regime di combustione flameless. In tal modo, è possibile limitare il consumo di combustibile ausiliario al solo deficit energetico rispetto alla condizione autotermica degli effluenti da trattare (Parente, 2004).

#### *3.1.5. Altre applicazioni*

Sono attualmente in fase di sviluppo altre possibilità di applicazione dei processi di combustione flameless, con particolare riferimento alla microgenerazione combinata di energia termica ed elettrica.

Inoltre sono in fase di studio e sperimentazione particolari combustori flameless per applicazioni in impianti turbogas, in motori a combustione interna e in particolari sistemi ibridi basati sulle celle a combustibile; tali

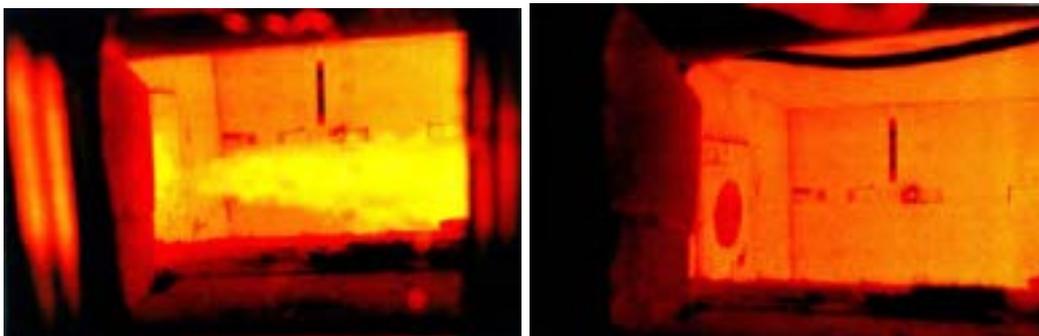
applicazioni sembrano essere piuttosto vantaggiose soprattutto per ciò che riguarda la riduzione delle emissioni di NO<sub>x</sub> e delle vibrazioni (Parente, 2004).

### **3.2. La combustione flameless per la generazione elettrica**

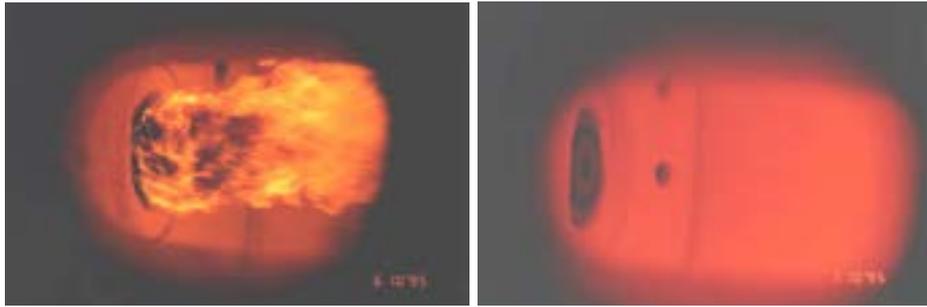
Come accennato, sono in fase di studio impianti di generazione elettrica basati su processi di combustione flameless. Particolarmente interessanti, a tale proposito, sono i sistemi che utilizzano l'ossigeno, anziché l'aria, come comburente, in quanto consentono di ottenere, in uscita, una corrente composta quasi esclusivamente da CO<sub>2</sub> e vapor d'acqua, facilmente separabili.

In tali impianti, i fumi di combustione possono essere utilizzati, previa depurazione in sistemi ad alta temperatura, per l'alimentazione di caldaie ultrasupercritiche, che producono vapore successivamente inviato in turbina.

Tali impianti si prestano molto bene ad applicazioni di tipo "zero emissions" in quanto la produzione di inquinanti solidi, liquidi e gassosi è estremamente limitata e, inoltre, possono essere facilmente integrati con sistemi di separazione e confinamento geologico della CO<sub>2</sub>. I fumi depurati sono infatti costituiti principalmente da CO<sub>2</sub> e vapor d'acqua, per cui si può effettuare una separazione pressoché totale dell'anidride carbonica mediante una semplice condensazione del vapore.



*Figura 3.3: esempio di combustione in modalità flame (sinistra) e flameless (destra) in un combustore da 1,5 MW a metano (Milani e Saponaro, 2001)*



*Figura 3.4: combustione in modalità flame (sinistra) e flameless (destra) in un combustore da 100 kW a olio combustibile (Milani e Saponaro, 2001)*

### **3.3. Il processo ISOTHERM<sup>®</sup>**

Il processo ISOTHERM<sup>®</sup> nasce da un accordo di collaborazione tra ENEL, ENEA e ITEA (società del gruppo Sofinter) finalizzato a dimostrare la fattibilità di impianti “zero emissions” di ossicombustione, con tecnologia di combustione flameless, mediante un impianto dimostrativo da 50 MW termici.

Il processo di combustione si basa su un reattore pressurizzato (1-6 bar relativi) e rivestito in materiale refrattario, che può essere alimentato con gas naturale, gasolio, e combustibili solidi (varie tipologie di carbone e anche rifiuti).

Il processo di combustione flameless è stato testato per molte ore presso un impianto pilota da 5 MW termici situato presso ITEA S.p.A. a Gioia del Colle.

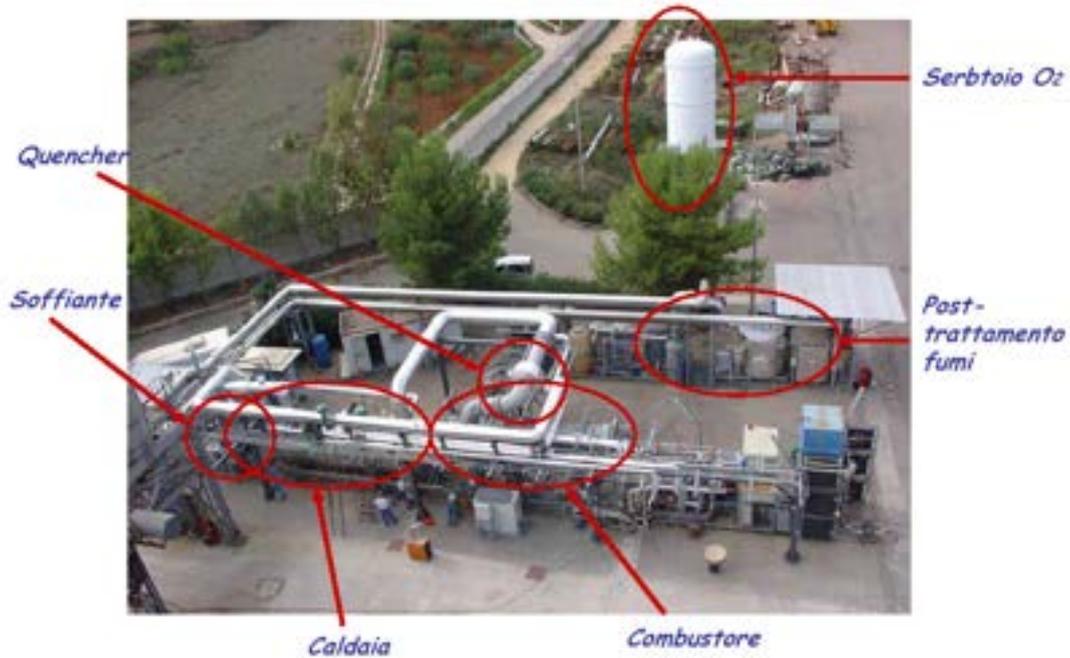


Figura 3.5: impianto pilota da 5 MW presso ITEA S.p.A. (Benelli et al., 2007)

Il processo di combustione può essere facilmente integrato con sistemi avanzati di generazione elettrica comprendenti un generatore di vapore ultrasuper critico, e il sistema di separazione della CO<sub>2</sub>.

Il processo ISOTHERM<sup>®</sup> produce energia termica, fumi contenenti una bassissima concentrazione di inquinanti e ceneri inerti, con un contenuto di carbonio pressoché nullo (Saponaro et al., 2001).

Il combustore opera ad una temperatura, pressoché costante nell'intero volume, compresa tra 1300 e 1500 °C circa; a tali temperature si ha la distruzione di gran parte dei composti organici e la fusione delle ceneri che, in uscita dal combustore, vengono repentinamente raffreddate diventando vetrose e quindi completamente inerti.

L'ossigeno comburente è diluito mediante un ricircolo di gas combustibili, al fine di avere una temperatura in ingresso dell'agente ossidante dell'ordine dei 900 °C. In tal modo non è necessario alcun preriscaldamento esterno dell'ossidante.

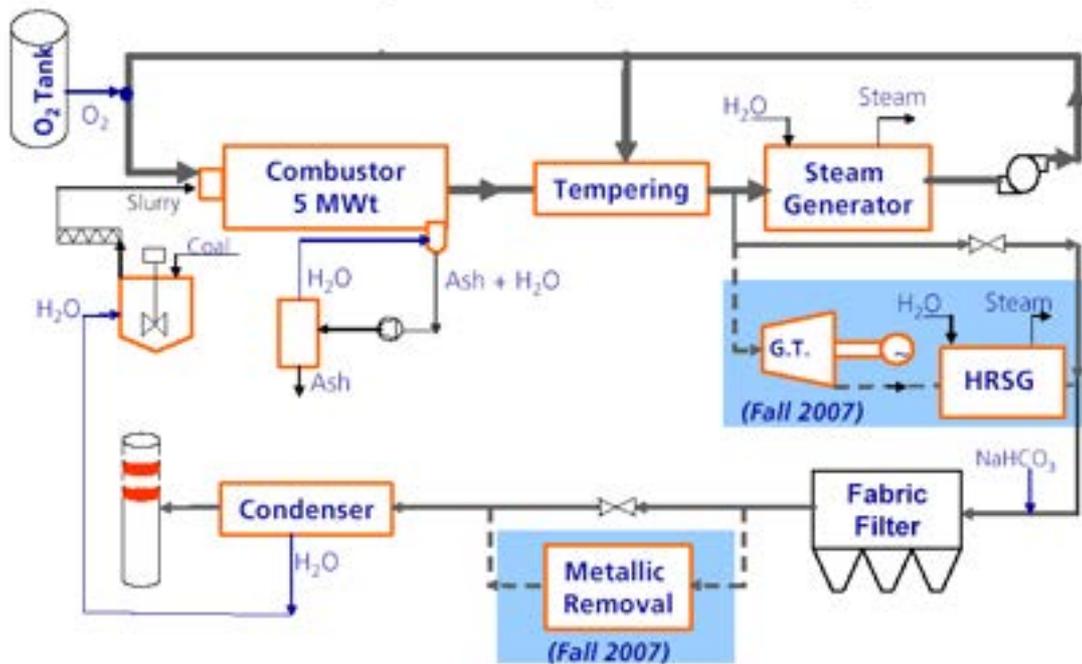


Figura 3.6: schema impiantistico del processo ISOTHERM. (Benelli et al., 2007)

Alla fase di sperimentazione sul citato impianto pilota da 5 MW termici seguirà una seconda fase che prevede la realizzazione e l'esercizio di un impianto dimostrativo da circa 50 MW termici presso gli impianti ENEL di Brindisi.

## **4. Problematiche generali relative allo sviluppo dei modelli di simulazione**

Le società avanzate sono oggetto, in questi anni, di una radicale trasformazione determinata dallo sviluppo esplosivo e dalla diffusione pervasiva delle tecnologie di calcolo e di comunicazione. In ambito scientifico la disponibilità e l'uso di tali strumenti hanno modificato le metodologie di indagine, affiancando agli approcci classici, teorico e sperimentale, l'approccio di indagine computazionale. La generazione di sistemi di calcolo ad alte prestazioni sono uno strumento indispensabile per l'avanzamento delle conoscenze scientifiche e tecnologiche nei settori più disparati. La disponibilità di calcolatori più veloci, tuttavia, non è necessariamente garanzia di risoluzione di problemi più complessi, poiché l'utilizzo efficace di sistemi di calcolo ad alte prestazioni richiede sviluppi e progressi sostanziali in tutte le fasi del processo di *Problem Solving*, dalla modellistica allo sviluppo di nuovi metodi, algoritmi risolutivi e software.

Questo è particolarmente evidente nel settore energetico, dove l'importanza della ricerca deve essere funzionale alle scelte nazionali e internazionali volte a soddisfare una domanda di energia sempre crescente, sviluppando altresì tecnologie in grado di impiegare i combustibili in maniera efficace efficiente ed ecocompatibile.

In generale un problema conoscitivo legato ad un processo controllato di conversione energetica come la combustione, può essere affrontato coordinando i due approcci conoscitivi legati alla via sperimentale da un lato e la simulazione numerica dall'altro, entrambi accompagnati da un approfondimento sui fenomeni fisici in gioco. La coordinazione di potenzialità e risultati da essi forniti garantirà una sintesi produttiva volta ad aprire nuove strade per il controllo dei processi combustivi ed il miglioramento della loro efficienza.

La combustione presenta problematiche notevoli, soprattutto dovute alla velocità delle reazioni interessate, quali fenomeni di instabilità sia fluidodinamiche (dovute a strutture coerenti) che termoacustiche (dovute all'accoppiamento pressione – rilascio di calore). Al fine di poter attuare

dunque strategie attive o passive di controllo di queste instabilità e sviluppare geometrie e tecnologie di combustione efficienti, è necessario riuscire a comprendere la fisica di tali processi cercando di simulare le fenomenologie fisico-chimiche più realisticamente possibile.

#### **4.1 La fluidodinamica computazionale e le equazioni di Navier-Stokes**

La CFD, Computational Fluid Dynamics, è uno dei mezzi con cui viene indagata la fluidodinamica. In particolare la CFD risolve per via numerica le equazioni che governano la fluidodinamica. Nell'ambito della meccanica del continuo il moto di un fluido è regolato dalle equazioni di Navier-Stokes, che modellano il trasporto e la conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia (Batchelor, 1970). Si tratta di equazioni alle derivate parziali, che possono essere discretizzate e risolte con tecniche numeriche su un dominio (o griglia) computazionale (Anderson, 1984). La maggior parte dei problemi fluidodinamici sono caratterizzati dalla coesistenza di più scale caratteristiche. Il concetto di scala è puramente matematico ed usato per indicare la decomposizione spettrale di un segnale nelle sue componenti di Fourier.

Come accennato, una corrente fluida non stazionaria è descritta dalle equazioni di Navier-Stokes per la conservazione della massa, della quantità di moto, dell'energia e delle specie chimiche, a cui si aggiunge, per la chiusura del sistema, l'equazione di stato del sistema fisico. In particolare, le equazioni di Navier-Stokes sono quelle di seguito riportate.

Equazione di conservazione della massa:

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$

Bilancio della quantità di moto:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x_i} \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \sum_{k=1}^{NS} (Y_k f_k)_i$$

Conservazione dell'energia:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{D\rho}{Dt} + \rho \sum_{k=1}^{NS} \overline{Y_k f_k} \cdot \bar{u}_k + \Phi - \bar{\nabla} \cdot \left( -k \bar{\nabla} T + \rho \sum_{k=1}^{NS} h_k Y_k \bar{V}_k + \Re T \sum_{k=1}^{NS} \sum_{l=1}^{NS} \frac{X_l}{W_k} \frac{\alpha k}{D_{kl}} (\bar{V}_k - \bar{V}_l) \right)$$

Conservazione delle specie:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial(\rho Y_i V_i)}{\partial x_i} + \omega_i$$

Equazione di stato:

$$\rho = \rho \Re T \sum_{k=1}^{NS} \frac{Y_k}{W_k}$$

## 4.2 Spettri di scala nella combustione turbolenta

Il tema multiscala per eccellenza è la turbolenza, e di gran lunga importante a questo proposito risulta essere quello della combustione turbolenta.

Essa è caratterizzata dalla coesistenza ed interazione di due spettri di scale, quelle fluidodinamiche e quelle chimiche (Arpaci, 1995). Tutte le scale in gioco devono essere risolte adottando adeguati passi temporali e spaziali tali da essere rappresentativi della scala dei fenomeni che avvengono. La griglia di calcolo da utilizzare dovrebbe avere maglie le cui dimensioni siano inferiori a quelle della più piccola scala della turbolenza (scala di Kolmogorov), che risulta essere proporzionale a  $Re^{3/4}$ . Per quanto concerne

la discretizzazione temporale il tempo caratteristico è inversamente proporzionale a  $Re^{1/2}$ , e, per flussi reagenti, devono inoltre essere considerate anche le scale dei tempi delle reazioni chimiche che sono generalmente di parecchi ordini di grandezza più piccole delle precedenti.

### ***4.3 I principi della simulazione dei processi di combustione***

Una simulazione numerica diretta o DNS (Direct Numerical Simulation) consiste nel risolvere numericamente le equazioni di Navier-Stokes ricorrendo ad uno dei metodi numerici disponibili, quali ad esempio: differenze finite, volumi finiti, metodi spettrali, elementi finiti (Fletcher, 1991). In questo caso non è presente nessuna tipologia di modellistica a nessun livello e gli unici errori che si introducono sono quelli derivanti dalla approssimazione numerica. Di sicuro è il metodo più accurato per lo studio della turbolenza, ma è estremamente oneroso in termini di tempi di calcolo e di risorse computazionali richieste. Nel caso della combustione, dunque, è evidente che l'approccio DNS risulta al momento improponibile, in quanto adatta alla risoluzione dei problemi legati a correnti semplici ed a numeri di Reynolds bassi.

Opposta alla tecnica DNS è la RANS (Reynolds Average Navier-Stokes equations) con cui è possibile risolvere numericamente le equazioni mediate, che risulta molto più economica dal punto di vista delle risorse computazionali da impiegarsi. Questa tecnica fornisce informazioni limitatamente alla corrente media e stazionaria. Inoltre in essa è necessario l'utilizzo di modelli di turbolenza che devono rappresentare l'influenza di tutte le strutture turbolente sulla corrente media. Tali modelli non sono assolutamente generali (ad esempio, un modello che rappresenta bene una corrente vicino ad una parete potrebbe essere inadeguato per la descrizione di una scia turbolenta).

Nell'approccio RANS, infatti, le variabili delle equazioni che descrivono il sistema sono decomposte in una parte media ed in una di fluttuazione e le equazioni vengono mediate nel tempo (media di Reynolds). In particolare, dall'operazione di media applicata al termine non lineare delle equazioni di

Navier-Stokes nascono termini incogniti, talvolta difficilmente interpretabili fisicamente. La modellazione di questi termini è nota come problema della “chiusura turbolenta” (Launder et al., 1972; Mohammadi et al., 1994; Patel et al., 1985). Appare dunque evidente che, avendo a che fare con equazioni medie, lo spettro di scale della turbolenza non è integralmente risolto, perché tutte le scale turbolente sono ridotte ad un'unica scala, quella media. Il modello di turbolenza introdotto per la chiusura deve rappresentare, come accennato sopra, gli effetti dell'intero range di scale del problema in esame. In questo risiede la debolezza dei metodi RANS, perché le grandi e le piccole scale turbolente, che hanno caratteristiche diverse, non sono fisicamente distinte nel modello. Le piccole scale dipendono dalla viscosità in modo quasi esclusivo, al contrario le grandi scale sono fortemente dipendenti dalle condizioni iniziali e al contorno. Di conseguenza è impossibile rappresentare l'effetto delle grandi scale in problemi diversi con lo stesso modello: sulla base di misure sperimentali è però possibile operare degli aggiustamenti di opportuni parametri caratteristici del particolare modello adottato e del problema considerato. Una volta tarato su una classe di problemi, un modello RANS può fornire buoni risultati in termini di valori medi delle principali grandezze fluidodinamiche.

Una via di mezzo tra le due tecniche sopra descritte è la Large Eddy Simulation (LES), con cui è possibile risolvere direttamente le strutture più grandi della turbolenza e modellare solamente le strutture più piccole. Le strutture a livello delle scale dissipative (piccole scale) sono indipendenti dalla corrente media ed hanno un carattere universale. Di conseguenza anche i modelli di turbolenza hanno carattere generale e non vanno calibrati sul tipo di corrente media. Questa tecnica permette di ottenere anche informazioni locali ed istantanee sui fenomeni turbolenti di una corrente, in geometrie complesse, a numeri di Reynolds elevati e con un forte risparmio di risorse di calcolo rispetto alla DNS. Lo studio dei modelli adottato in questa tecnica richiede la comprensione del comportamento delle strutture non risolte, dette anche di sottogriglia (SGS, SubGrid Scale) perché di scala inferiore alla griglia di calcolo, e della loro interazione con le scale risolte.

Infatti, nell'approccio LES (Poinot et al, 2005), considerato che l'energia di un vortice di larga scala è maggiore di quella di uno stesso vortice di piccola scala, vengono eliminate le piccole scale mediante una operazione di filtraggio spaziale delle equazioni di Navier-Stokes, previa decomposizione delle variabili in una parte filtrata (o risolta) e una di sottogriglia (o non risolta). Anche in questo caso, analogamente a quanto accade utilizzando il metodo RANS, nascono termini aggiuntivi, relativi alle piccole scale: questi effetti di sottogriglia devono essere modellati. Il modello SGS usato per la chiusura ha lo scopo di riprodurre, nella maniera più realistica possibile, il trasferimento di energia dalle grandi alle piccole scale in modo accurato, almeno in senso statistico, senza produrre effetti numerici alla frequenza di taglio. La LES, dunque, fornisce una soluzione tridimensionale, non stazionaria, delle equazioni di Navier-Stokes, proprio come la DNS.

## 5. Modelli di simulazione RANS

La tecnica di simulazione RANS (Reynolds Average Navier-Stokes equations) consente di studiare un processo fluidodinamico (compresi i processi di combustione) risolvendo numericamente le equazioni di Navier-Stokes mediate e stazionarie. Rispetto alla simulazione numerica diretta (DNS, Direct Numerical Simulation) tale tecnica è ovviamente approssimata (non essendo in grado di fornire informazioni sulle condizioni istantanee non stazionarie della corrente esaminata) ma, essendo molto più economica dal punto di vista computazionale, consente di simulare correnti turbolente caratterizzati da geometrie complesse e numeri di Reynolds elevati (Abbà et al., 2003; Zimont e Battaglia, 2007). Un tale approccio è principalmente finalizzato a identificare le caratteristiche principali della camera di combustione, oppure come studio preliminare per ottenere le informazioni iniziali da utilizzare per altre tipologie di simulazioni; infatti, nelle simulazioni RANS, nonostante, fisicamente, le grandi scale della turbolenza hanno un comportamento abbastanza omogeneo e isotropo, tutte le scale (grandi e piccole) sono modellate allo stesso modo (Ingenito, 2005).

### 5.1. Principi generali dei modelli RANS

#### 5.1.1. Decomposizione di Reynolds

La metodologia RANS, in generale, è basata su una media temporale delle equazioni istantanee di Navier-Stokes, effettuata mediante la decomposizione di Reynolds, che consiste nel suddividere la generica variabile di sistema  $\Psi$  nella sua componente media temporale ( $\overline{\Psi}$ ) e nella componente fluttuante ( $\Psi'$ ):

$$\Psi(\vec{x}, t) = \overline{\Psi}(\vec{x}) + \Psi'(\vec{x}, t)$$

essendo  $\vec{x}$  (x, y, z) il vettore posizione; in particolare, il valor medio  $\overline{\Psi}$  è definito dalla relazione

$$\bar{\Psi}(x) = \int_{-\Delta t/2}^{\Delta t/2} \Psi(x, t + \tau) d\tau$$

mentre la componente fluttuante è definita come

$$\Psi' = \Psi - \bar{\Psi}$$

### 5.1.2. Media di Favre

Risolvendo le equazioni di Navier-Stokes decomponendo ogni grandezza secondo la suddetta decomposizione di Reynolds e mediandole nel tempo, si ottengono diversi termini aggiuntivi, per cui il sistema non risulta essere più chiuso. Per evitare tale inconveniente, è possibile utilizzare la media di Favre, pesata con la densità  $\rho$ , in cui ogni grandezza viene decomposta in una parte mediata con la densità

$$\tilde{\Psi} = \frac{\overline{\rho\Psi}}{\bar{\rho}}$$

e in una fluttuazione rispetto al valor medio:

$$\Psi'' = \Psi - \bar{\Psi}$$

Operando tale decomposizione, il termine convettivo diventa:

$$\rho u_i u_j = \rho(\tilde{u}_i + u''_i) \cdot (\tilde{u}_j + u''_j) = \rho\tilde{u}_i\tilde{u}_j + \rho u''_i \tilde{u}_j + \rho\tilde{u}_i u''_j + \rho u''_i u''_j$$

E, una volta mediato, tale termine assume, a sua volta, la forma seguente:

$$\overline{\rho u_i u_j} = \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j + \overline{\rho u''_i u''_j}$$

Il termine  $\overline{\rho u''_i u''_j}$  è il tensore degli sforzi di Reynolds ed è responsabile di un trasporto turbolento di quantità di moto il cui unico effetto è quello di promuovere una redistribuzione spaziale della quantità di moto.

### 5.1.3. Equazioni di Navier-Stokes mediate

Il sistema di equazioni mediate è il seguente (Ingenito, 2005):

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{u}_i})}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{\partial(\overline{\rho u''_i u''_j})}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho u_j \tilde{h}_i})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ -\frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \tilde{h}_i}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u''_i u''_j}) + \bar{\Phi}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{Y}_i}}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) + \bar{w}_i$$

## 5.2. La chiusura del sistema

In tali equazioni, rispetto alle corrispondenti equazioni non mediate, compaiono diversi termini addizionali (gli sforzi e i flussi di Reynolds) che rappresentano incognite aggiuntive del problema. Inoltre, nel caso della combustione (in cui si è in presenza di reazioni chimiche), è necessario tener conto anche della comparsa e scomparsa delle specie chimiche, con una ulteriore aggiunta delle incognite del sistema.

Per la chiusura del sistema è quindi necessario avvalersi di un modello, ossia di una descrizione semplificata del comportamento del flusso che possa descrivere l'effetto della turbolenza sul campo medio. Nella simulazione RANS i principali modelli di chiusura si basano sul concetto di eddy viscosity.

### 5.2.1. Modello eddy viscosity

Gli sforzi di Reynolds possono essere valutati come sforzi apparenti che permettono di considerare il moto medio come il moto reale di un fluido sottoposto ai gradienti di una densità media e a sforzi molecolari e turbolenti medi.

Il modello si basa sull'analogia di Boussinesq, ovvero sul concetto che i vortici ("eddies") si comportino come le molecole, trasportando massa, quantità di moto ed energia. Pertanto, a seguito di tali assunzioni, è possibile considerare una viscosità turbolenta  $\mu_t$  che tenga conto dell'aumentata diffusività e, conseguentemente, modellare gli sforzi di Reynolds con una legge di trasporto che leghi i termini fluttuanti con le grandezze medie del campo di moto:

$$\overline{\rho u''_i u''_j} = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \overline{\rho k} + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}$$

Sostituendo tale espressione nell'equazione di conservazione della quantità di moto si ottiene:

$$\frac{\partial (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \mu_t) \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} (\mu + \mu_t) \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{2}{3} \overline{\rho k} \delta_{ij} \right] + \overline{\rho f_i}$$

L'ipotesi di eddy viscosity ha pertanto introdotto due nuove incognite che devono essere modellate: l'energia cinetica turbolenta  $k$  e la viscosità turbolenta  $\mu_t$ .

Una delle ipotesi più semplici di chiusura per la viscosità turbolenta è l'ipotesi di Prandtl, secondo cui  $\mu_t$  è proporzionale al prodotto della densità del fluido per una lunghezza caratteristica del problema in esame, detta lunghezza di mescolamento  $l_m$ , e una velocità di fluttuazione  $u''$ :

$$\mu_t = \overline{\rho} \tilde{u}'' l_m$$

Per chiudere il problema è pertanto necessario ottenere una chiusura sia per la velocità di fluttuazione che per la lunghezza di mescolamento.

La chiusura può essere sviluppata sia integrando modelli semplici a “zero equazioni”, sia modelli più complessi tipo k-ε, k-ω, eccetera (Ingenito, 2005).

### 5.2.2. Modelli di chiusura a “zero equazioni”

Nei modelli a “zero equazioni”, applicabili per flussi semplici, le grandezze caratteristiche della turbolenza (velocità di fluttuazione e lunghezza di mescolamento) sono determinate senza l'introduzione di ulteriori equazioni.

La lunghezza di mescolamento  $l_m$  può essere espressa in funzione delle grandezze dei vortici di grande scala; in particolare, partendo dall'osservazione fisica che tali vortici sono i principali responsabili del trasporto, si può assumere  $l_m$  circa pari alla lunghezza del combustore.

La velocità caratteristica della turbolenza viene invece assunta proporzionale al prodotto della lunghezza di mescolamento per il gradiente di velocità:

$$\tilde{u}'' = l_m \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right|$$

Pertanto, la viscosità turbolenta può essere definita come:

$$\mu_t = \bar{\rho} \cdot l_m^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right|$$

Un tale modello non è adatto a descrivere geometrie complesse in quanto per esse non è possibile definire una lunghezza di mescolamento (Ingenito, 2005).

### 5.2.3. Modello $k$ - $\varepsilon$ a due equazioni

Nel modello a due equazioni, la velocità caratteristica della turbolenza  $\tilde{u}''$  e la lunghezza di mescolamento  $l_m$  sono calcolate introducendo una equazione per l'energia cinetica turbolenta  $\tilde{k}$  e una per la dissipazione viscosa dell'energia cinetica turbolenta  $\tilde{\varepsilon}$ .

La velocità caratteristica della turbolenza può essere espressa in funzione dell'energia cinetica turbolenta per mezzo della relazione

$$\tilde{u}'' = \sqrt{\tilde{k}}$$

D'altra parte, la lunghezza caratteristica può essere determinata come:

$$l_m = \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{\tilde{\varepsilon}}$$

Con riferimento alla succitata ipotesi di Prandtl, sostituendo le precedenti assunzioni e introducendo una costante  $C_\mu$  (determinata sperimentalmente e, in genere, pari a 0,09), si ottiene, per la viscosità turbolenta, la seguente espressione:

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \cdot l_m^2 \tilde{u}'' = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}}$$

L'energia cinetica turbolenta  $k$  e il suo tasso di dissipazione viscosa  $\varepsilon$  sono quindi determinate risolvendo le seguenti equazioni di conservazione:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{k})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k} \right] + \bar{\rho}P - \rho\tilde{\varepsilon}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{\varepsilon})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_k} \right] + C_1 \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} P - C_2 \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}$$

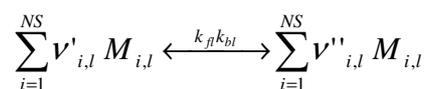
In tali equazioni,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  sono i numeri di Prandtl turbolenti, mentre  $C_1$  e  $C_2$  sono costanti di calibrazione del sistema; inoltre il termine  $\bar{\rho}P$  è esprimibile nella forma:

$$\bar{\rho}P = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \left( \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \bar{\rho} \tilde{k} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i}$$

#### 5.2.4. Modelli per la cinetica delle reazioni chimiche

Come precedentemente accennato, nel caso dei flussi reattivi (e quindi anche nel caso della combustione) è necessario introdurre un modello che consideri, oltre la turbolenza, anche la cinetica delle reazioni chimiche. Il problema della chiusura termochimica deriva dal fatto che la densità e il termine di produzione  $w_i$  delle specie chimiche dipendono in modo non lineare dalla temperatura, dalla pressione e dalle frazioni molari delle specie chimiche stesse.

Un sistema caratterizzato da un numero NR di reazioni chimiche che coinvolgono un numero NS di specie, può essere descritto dalla seguente espressione:



dove, per la reazione l-esima ( $l = 1, \dots, NR$ ),  $\nu_{i,l}$  e  $M_{i,l}$  rappresentano rispettivamente il coefficiente stechiometrico e la frazione molare della specie i-esima, mentre  $k_{fl}$  e  $k_{bl}$  sono le costanti di reazione in avanti e all'indietro, esprimibili dalla relazione di Arrhenius:

$$k_{i,l} = A_{i,l} T^{b_{i,l}} e^{-E_{a_{i,l}}/RT}$$

Il grado  $w_i$  di comparsa e scomparsa della specie chimica  $i$ -esima può essere definito come:

$$w_i = \sum_{l=1}^{NR} (v''_{i,l} - v'_{i,l}) w_l = \sum_{l=1}^{NR} (v''_{i,l} - v'_{i,l}) \left\{ k_{fl} \prod_{i=1}^{NS} [M_{i,l}]^{v'_{i,l}} - k_{bl} \prod_{i=1}^{NS} [M_{i,l}]^{v''_{i,l}} \right\}$$

dove  $w_l$  è la velocità della  $l$ -esima reazione.

Dalla precedente espressione, è evidente che il grado di scomparsa delle specie chimiche è fortemente non lineare, per cui l'operazione di media di tale relazione da luogo alla formazione di ulteriori incognite del problema. Per la chiusura termochimica del sistema, pertanto, è necessario introdurre, anche in questo caso, opportuni modelli di combustione.

A tale proposito, uno dei modelli più frequentemente adottati nella modellazione RANS consiste nell'introdurre una variabile di progresso  $c$  che esprime il rapporto tra la miscela "fresca" e quella "bruciata"; in funzione di tale variabile vengono quindi espresse la densità e la temperatura. L'introduzione di tale variabile comporta la necessità di risolvere una ulteriore equazione mediata di conservazione:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_k} \right] + \bar{w}$$

dove  $\sigma_c$  è il numero di Schmidt turbolento.

Per la modellazione del termine  $\bar{w}$  si può assumere, ad esempio, che le reazioni chimiche avvengano in strati sottili, per cui la camera di combustione è occupata prevalentemente da zone di miscela "fresca" e zone di miscela "completamente bruciata". Se il volume della miscela reagente è molto limitato, è ragionevole ipotizzare che il termine di produzione  $w$  sia proporzionale alla probabilità di interazione tra zone di miscela "fresca" e miscela "completamente bruciata", moltiplicato per la frequenza di tali iterazioni; in altre parole, si può ipotizzare che la combustione sia controllata dal mescolamento. Sulla base di tali ipotesi, è possibile esprimere  $w$  mediante la seguente relazione:

$$\bar{w} = C\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}$$

in cui  $\tilde{c}$  e  $(1-\tilde{c})$  indicano rispettivamente la frazione di miscela “completamente bruciata” e di miscela “fresca”, per cui il loro prodotto rappresenta la probabilità di interazione; la frequenza di tali interazioni è rappresentata dal termine  $\tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$  (Ingenito, 2005).

### **5.3. Applicazione ai processi di combustione di slurries di carbone**

Nel caso dello studio di processi di combustione di slurries di acqua e carbone, è necessario effettuare particolari assunzioni per tener conto delle tre fasi, solida, liquida e gassosa, che entrano in gioco nel processo.

La dispersione delle particelle di slurry può essere determinata secondo un modello stocastico, calcolando la traiettoria per un numero sufficiente di particelle rappresentative (Di Nardo et al., 2007).

La traiettoria può essere descritta nella forma seguente:

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + \frac{g_x(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_x$$

dove  $g_x$  è l'accelerazione gravitazionale,  $F_x$  è il termine addizionale di accelerazione (forza per unità di massa); inoltre  $F_D$  è la resistenza (sempre per unità di massa), definita come:

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24}$$

dove  $u$  e  $u_p$  sono rispettivamente la velocità del fluido e delle particelle,  $\rho$  e  $\rho_p$  sono la densità del fluido e delle particelle,  $\mu$  è la viscosità del fluido e  $d_p$  è il diametro delle particelle.

Il numero di Reynolds  $Re$  è definito come

$$\text{Re} = \frac{\rho d_p |u_p - u|}{\mu}$$

mentre il termine CD può essere definito come:

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{\text{Re}} + \frac{a_3}{\text{Re}^2}$$

Lungo la traiettoria, ogni singola particella di slurry attraversa varie trasformazioni, che si possono sintetizzare nel modo seguente: riscaldamento, vaporizzazione dell'acqua, devolatilizzazione del carbone, combustione del char residuo. Nel seguito vengono descritti i modelli adottati per descrivere tali fasi (Di Nardo et al., 2007).

### 5.3.1. Riscaldamento

La temperatura delle particelle di slurry è calcolata mediante un bilancio termico che tiene conto degli scambi di calore sensibile e latente e degli scambi per convezione e per irraggiamento tra particella e fluido. Tale bilancio può essere espresso nella forma seguente:

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \frac{dm_p}{dt} h_{fg} + A_p \epsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4)$$

in cui  $T_p$  e  $T_\infty$  sono rispettivamente le temperature della particella e del sistema,  $m_p$  e  $A_p$  sono la massa e la superficie della particella,  $c_p$  è il calore specifico,  $h$  il coefficiente convettivo,  $h_{fg}$  il calore latente,  $\epsilon_p$  l'emissività delle particelle,  $\sigma$  la costante di Stephan-Boltzmann e  $\theta_R$  la temperatura radiante (Di Nardo et al., 2007).

### 5.3.2. Vaporizzazione dell'acqua

Il grado di evaporazione  $N_i$  dell'acqua costituente lo slurry è proporzionale alla variazione della concentrazione di vapore tra la superficie della goccia e il bulk gassoso:

$$N_i = k_c (C_{i,s} - C_{i,\infty})$$

Il coefficiente di trasferimento di massa  $k_c$  può essere calcolato dalla relazione seguente (Ranz e Marshall, 1952a e 1952b, citato in Di Nardo et al., 2007):

$$Nu_{AB} = \frac{k_c d_p}{D_{i,m}} = 2,0 + 0,6 Re_d^{1/2} Sc^{1/3}$$

L'ebollizione delle particelle è governata dall'equazione seguente (Kuo, 1986, citato in Di Nardo et al., 2007):

$$\frac{d(d_p)}{dt} = \frac{4k_\infty}{\rho_p c_{p,\infty} d_p} (1 + 0,23\sqrt{Re_d}) \ln \left[ 1 + \frac{c_{p,\infty} (T_\infty - T_p)}{h_{fg}} \right]$$

### 5.3.3. Devolatilizzazione del carbone

Per il grado di devolatilizzazione della particella, si può considerare una dipendenza del prim'ordine dalla quantità di volatili rimanenti nella particella:

$$-\frac{dm_p}{dt} = k [m_p - (1 - f_{v,0})(1 - f_{w,0})m_{p,0}]$$

dove  $m_p$  e  $m_{p,0}$  sono la massa effettiva e la massa iniziale della particella,  $f_{v,0}$  e  $f_{w,0}$  le frazioni massiche iniziali di volatili e acqua presenti nella particella e  $k$  il coefficiente cinetico, espresso dalla legge di Arrhenius.

#### 5.3.4. Combustione del char

Indicando con  $A_p$  la superficie della particella e con  $p_{ox}$  la pressione parziale della specie ossidante, il grado di combustione del char può essere calcolato mediante la reazione seguente (Di Nardo et al., 2007):

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p p_{ox} \frac{D_0 \mathfrak{K}}{D_0 + \mathfrak{K}}$$

dove  $D_0$  è il coefficiente di diffusione e  $\mathfrak{K}$  è il coefficiente cinetico, rispettivamente definiti come:

$$D_0 = C_1 \frac{\left( \frac{T_p + T_\infty}{2} \right)^{0,75}}{d_p}$$

$$\mathfrak{K} = C_2 e^{-\frac{E}{RT_p}}$$

#### 5.4. Implementazione dei modelli di tipo RANS

L'implementazione dei modelli di tipo RANS può essere effettuata utilizzando diversi Software presenti in commercio, sviluppati per simulazioni di fluidodinamica computazionale (CFD, Computational Fluid Dynamics).

Nel caso dei processi di combustione, l'implementazione del modello di simulazione si può suddividere nelle seguenti fasi:

- definizione della geometria del combustore;
- discretizzazione del combustore;
- definizione delle condizioni al contorno;
- risoluzione delle equazioni mediate di Navier-Stokes;
- elaborazione dei risultati.

La prima fase consiste nella definizione della geometria del combustore, necessaria per poter definire le condizioni al contorno del sistema. Una volta definita la geometria, il sistema viene discretizzato e suddiviso in una serie di elementi finiti, generalmente di forma tetraedrica. Per tali fasi, si utilizzano

generalmente degli specifici software di computer aided design, che operano automaticamente la discretizzazione, eventualmente rendendola più fitta nelle zone critiche del combustore e meno fitta nelle zone in cui ci si aspetta una certa uniformità del moto.

Una volta definita la geometria del sistema ed effettuata la discretizzazione, si definiscono le condizioni al contorno; particolarmente significative sono le condizioni in prossimità dell'iniettore e della superficie del combustore.

Infine, per ogni cella considerata, si risolvono le equazioni di Navier-Stokes mediate, ottenendo così una rappresentazione del moto e dell'andamento della combustione in ogni zona del reattore.

Uno dei software più comunemente utilizzati è Fluent, recentemente acquisito dalla Ansys Inc.; tale software si basa sul metodo di analisi agli elementi finiti e opera generalmente in integrazione con altri software quali Gambit e TGrid per la generazione automatica delle griglie di calcolo.

## **6. Modelli di simulazione LES**

Molte delle ricerche che attualmente hanno luogo nel campo della CFD riguardano lo studio di flussi turbolenti. Nel contesto naturale, infatti, la turbolenza è il fenomeno riscontrabile nella maggior parte delle situazioni che comportano un flusso, come ad esempio nel caso delle correnti marine, dei fiumi, dell'atmosfera. Anche nel campo della tecnologia è il regime turbolento che descrive il naturale modo di essere dei fluidi.

Da queste brevi considerazioni si evince dunque come sia importante riuscire a descrivere il fenomeno della turbolenza in maniera accurata. A tal fine, diverse metodologie di studio sono state prese in considerazione per fornire una rappresentazione più realistica possibile: la Large Eddy Simulation è semplicemente una di queste metodologie.

Questa tecnica di indagine, che è stata originariamente implementata negli anni '70 per la descrizione dei fenomeni atmosferici e meteorologici, è utilizzata in tutti i campi della ricerca ingegneristica.

La metodologia adottata con la LES si propone di risolvere direttamente le scale spaziali più grandi (come la DNS) e di modellare le scale più piccole. Ciò nasce da due importanti considerazioni: la prima è che le grandi scale posseggono la maggior parte dell'energia. Il secondo punto nasce dall'osservazione che le piccole scale hanno carattere universale, e quindi sono più facilmente modellate. La metodologia risultante è dunque un metodo ibrido, e comporta il filtraggio delle equazioni di Navier–Stokes per separare le scale che devono essere modellate (SubGrid Scale) da quelle che invece sono risolte in maniera diretta.

### **6.1. Teoria della modellazione LES**

In una corrente turbolenta sono presenti strutture caratterizzate da una ampia gamma di scale, comprendenti le scale più grandi, dipendenti dalla geometria della regione i cui si studia il fluido, fino alle scale più piccole (o di “sottogriglia”), dove dominano i fenomeni dissipativi.

Per separare le grandi scale dalle piccole scale si introduce una operazione di filtro: tale operazione separa gli eddies la cui scala è superiore alle dimensioni della cella da quelli di dimensione inferiore.

L'operazione di filtro è espressa tramite un integrale di convoluzione:

$$\bar{f}(x) = \int_D f(x') G(x, x') dx'$$

dove D è l'intero dominio e G è la funzione filtro che determina l'ampiezza delle scale degli eddies risolte. Le funzioni filtro possono essere di due tipi: definite nello spettro (come numero d'onda) o nello spazio.

Nel caso in cui venga utilizzato un metodo spettrale per la risoluzione numerica delle equazioni, è necessario applicare esplicitamente un filtro "sharp-cutoff" definito nello spazio di Fourier definito da:

$$G = \begin{cases} 1 & \text{se } k \leq \frac{\pi}{\bar{\Delta}} \\ 0 & \text{se } k > \frac{\pi}{\bar{\Delta}} \end{cases}$$

I filtri definiti nello spazio più comunemente utilizzati sono:

1. il filtro gaussiano, definito come :

$$G(x) = \sqrt{\frac{6}{\pi \bar{\Delta}^2}} \exp\left(-\frac{6x^2}{\bar{\Delta}^2}\right)$$

2. il filtro "top-hat", definito come:

$$G(x) = \begin{cases} \frac{1}{\bar{\Delta}} & \text{se } |x| < \frac{\bar{\Delta}}{2} \\ 0 & \text{se } |x| > \frac{\bar{\Delta}}{2} \end{cases}$$

Ai filtri dello spazio fisico è associata una parziale sovrapposizione tra le scale risolte e quelle non risolte, mentre con il filtro cut-off la separazione è netta.

Nell'operazione di filtraggio ogni generica variabile  $f$  viene dunque decomposta come segue:

$$f = \bar{f} + f'$$

dove  $\bar{f}$  è la parte risolta, mentre  $f'$  è la grandezza relativa alle strutture fini.

Ipotizzando che l'operazione di derivata e di filtro siano commutabili ed applicando l'operazione di filtro alle equazioni di Navier-Stokes per fluidi incomprimibili, si ottiene la seguente equazione per la quantità di moto:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}$$

L'effetto delle scale non risolte è contenuto nel tensore degli sforzi sottogriglia, la cui origine è legata alla presenza dei termini non lineari nell'equazione di partenza, e definito come:

$$\tau_{ij} = (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j)$$

che dovrà essere modellato. Attualmente si sono sviluppati sia modelli di tipo "eddy viscosity" sia modelli di equilibrio, in cui i prodotti di velocità presenti nell'espressione di  $\tau_{ij}$  vengono espressi in funzione di opportune velocità di riferimento.

### 6.1.1 Modello eddy viscosity

La maggior parte dei modelli sottogriglia si basano, come in RANS, sull'idea di eddy viscosity in cui il tensore degli sforzi di sottogriglia è messo in

relazione alle grandezze di larga scala per mezzo di una legge di trasporto di tipo gradiente:

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk} = -2\nu_t \overline{S_{ij}}$$

Il problema della chiusura è ora spostato alla viscosità turbolenta, che deve essere opportunamente modellata.

### Modello di Smagorinsky–Lilly

Il modello di Smagorinsky–Lilly è il progenitore della maggior parte dei modelli di sottogriglia. La viscosità turbolenta, dimensionalmente, è il prodotto, secondo una costante di proporzionalità, tra una lunghezza ed una velocità caratteristica, secondo la:

$$\nu_t = C_l u' l'$$

In tale modello la lunghezza di riferimento è assunta proporzionale alla lunghezza caratteristica del filtro  $\overline{\Delta}$ ; la velocità di riferimento è invece ottenuta assumendo l'ipotesi di equilibrio, la quale si basa sulla considerazione che le scale non risolte siano in equilibrio e che la produzione di energia  $P = 2\nu_t \overline{S_{ij} S_{ij}}$  e la dissipazione  $\epsilon_{SGS}$  siano anche esse in equilibrio: tale assunzione implica la presenza di un range inerziale in cui l'energia è generata a larga scala e trasmessa a scale sempre più piccole fino ad arrivare alle scale dissipative. Esprimendo la dissipazione viscosa come:

$$\epsilon_{SGS} = \frac{u'^3}{\Delta}$$

per l'ipotesi di equilibrio:

$$2C_l u' \overline{\Delta S_{ij} S_{ij}} = \frac{u'^3}{\Delta}$$

Ricavando dall'espressione del tensore degli sforzi SGS un'espressione per la velocità caratteristica, e sostituendola nell'espressione della viscosità turbolenta  $\nu_t$ :

$$\nu_t = (C_s \bar{\Delta})^2 |\bar{S}|$$

Nel caso incomprimibile si giunge quindi all'espressione del tensore di sottogriglia SGS:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = -2\nu_t \left( \bar{S}_{ij} - \frac{1}{3} \bar{S}_{kk} \right) \delta_{ij}$$

Tale relazione chiude il sistema di equazioni di Navier-Stokes filtrate. La debolezza del modello di Smagorinsky-Lilly risiede nel fatto che, per le ipotesi adottate, tale modello è estremamente dissipativo. Inoltre, l'energia dissipata  $\epsilon_s$  è sempre minore di zero, il che significa che il trasferimento di energia avviene solo dalle grandi scale alle strutture fini. Sebbene questo comportamento sia generalmente verificato, si può avere localmente un fenomeno di cascata inversa, in cui si ha il trasferimento di energia dalle piccole alle grandi scale (fenomeno di backscatter) che questo modello non può predire. La costante di Smagorinsky  $C_s$ , inoltre, è scelta a priori e non si adatta a quelle zone del campo in cui i gradienti sono molto alti, in cui si ha transizione tra flusso laminare e turbolento, in cui si hanno bassi numeri di Reynolds. In tali zone il modello di Smagorinsky è troppo dissipativo ed è necessario introdurre delle funzioni che contemplino tutti questi effetti. Modelli alternativi a Smagorinsky sono riportati nel seguito.

### Modello dinamico

L'introduzione del modello dinamico (Germano et al., 1991) ha apportato significativi progressi nei modelli di sottogriglia di flussi non stazionari. In tale modello, infatti, i coefficienti vengono calcolati dinamicamente e non scelti a

priori come nel modello di Smagorinsky. Questo modello si basa sull'introduzione nelle equazioni di Navier-Stokes di un ulteriore filtro  $\hat{G}$ , detto "filtro test", di ampiezza  $\hat{\Delta} > \bar{\Delta}$ , ottenendo così un tensore degli sforzi subtest espresso come:

$$T_{ij} = \overleftrightarrow{u_i u_j} - \overleftrightarrow{u_i} \overleftrightarrow{u_j}$$

Il calcolo dinamico dei coefficienti si basa sull'identità:

$$\overleftrightarrow{L_{ij}} = T_{ij} - \overleftrightarrow{\tau_{ij}}$$

nota come "identità di Germano", che relaziona le scale degli stress turbolenti

$$L_{ij} = \overleftrightarrow{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \overleftrightarrow{u_i} \overleftrightarrow{u_j}$$

con il tensore degli sforzi di sottogriglia ed il tensore di subtest.

Per modellare sia  $\tau_{ij}$  che  $T_{ij}$  viene adottato un modello di tipo eddy viscosity:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} = -2\nu_t \overline{S_{ij}} = -2C \overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S_{ij}}$$

$$T_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} = -2\nu_t \overline{S_{ij}} = -2C \overleftrightarrow{\Delta}^2 |\overleftrightarrow{S}| \overleftrightarrow{S_{ij}}$$

Sostituendo le espressioni per  $\tau_{ij}$  e  $T_{ij}$  nella relazione di Germano, si ottengono 5 equazioni nel coefficiente incognito C: il sistema ottenuto è quindi sovradeterminato e per essere risolto deve essere contratto. Tra i diversi metodi di contrazione, Lilly ha proposto l'uso di una tecnica di minimi quadrati (Lilly, 1992) per ottenere una espressione dinamica del coefficiente di Smagorinsky del tipo:

$$C(y,t) = -\frac{1}{2} \frac{\langle \vec{L}_{ij} M_{ij} \rangle}{M_{ij} M_{ij}}$$

dove

$$M_{ij} = \overline{\Delta^2} \left| \overline{S} \right| \overline{S}_{ij} - \overline{\Delta^2} \left| \overline{S} \right| \overline{S}_{ij}$$

Il modello dinamico descritto ha costituito un rilevante balzo in avanti per la tecnica LES perché il calcolo dinamico del coefficiente di Smagorinsky permette di rappresentare meglio i fenomeni locali e non stazionari della corrente, nelle zone a bassi numeri di Reynolds, in particolare dove il fluido tende a rilaminizzarsi. Al modello sono ancora però intrinsecamente legati alcuni difetti:

- Il coefficiente C, funzione dello spazio e del tempo, può assumere valori negativi; ciò è corretto perché si può rappresentare meglio il fenomeno del backscatter; talvolta è però necessario limitare i valori negativi al fine di evitare instabilità numeriche;
- Sempre al fine di evitare instabilità numeriche, il coefficiente deve essere mediato nello spazio e/o nel tempo;
- L'ipotesi di isotropia delle scale non risolte, ereditata dal modello di Smagorinsky, porta ad un allineamento forzato del tensore degli sforzi SGS con il tensore velocità di deformazione delle scale risolte. Inoltre l'ipotesi di isotropia delle piccole scale non è realistica poiché anche nel caso di turbolenza omogenea ed isotropa sono presenti strutture dette "worms" che provocano localmente uno scostamento dalla condizione isotropa.

### 6.1.2 Modello di equilibrio

Il modello di equilibrio (Moin et Jimenez, 1993) si basa sull'ipotesi che la dissipazione dell'energia

$$\varepsilon = \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$$

sia costante. Ciò significa che è possibile scrivere una relazione che leghi la dissipazione di sottogriglia a quella del filtro test, ottenendo:

$$T_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$$

Sfruttando nuovamente l'identità di Germano ed introducendo l'ipotesi di eddy viscosity si ottiene per il tensore degli sforzi SGS una espressione del tipo:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} u^2 = -2\nu_t \bar{S}_{ij} = -2C \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij}$$

Ipotizzando che la costante C possa essere portata fuori dall'operazione di filtro, si ottiene:

$$2C \bar{\Delta}^2 = \frac{L_{ij} \bar{S}_{ij}}{|\bar{S}| \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij} - |\bar{S}| \overline{\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}}}$$

Il vantaggio introdotto con il modello di equilibrio rispetto a quello dinamico è che, pur calcolandosi di volta in volta la costante C, questa viene computata tramite un'equazione scalare e non tensoriale come nel caso del modello precedente. Si ha dunque una sola incognita da risolvere: il problema della contrazione viene aggirato.

Tutti i modelli esposti si basano sull'ipotesi di eddy viscosity, cioè, assumendo analogia tra il comportamento dei vortici e quello delle molecole (che trasportano quantità di moto, energia e specie) modellizzano il tensore degli sforzi di Reynolds con una legge di tipo trasporto. La viscosità turbolenta diventa dunque una proprietà del flusso turbolento.

### 6.1.3 Modelli di combustione

La necessità di introdurre un modello per il termine sorgente delle specie chimiche da introdurre come chiusura nell'equazione dell'energia filtrata, deriva dal fatto che le reazioni chimiche avvengono a livello delle strutture fini. Anche se l'approccio LES consente di risolvere le grandi scale, occorre introdurre un modello che tenga conto che il volume reagente ha dimensioni molto minori del volume della cella di filtro. È lecito pensare, infatti, che le reazioni avvengano in un volume la cui grandezza caratteristica (in due direzioni) sia quella di Kolmogorov ovvero lì dove il mescolamento avviene a livello molecolare.

Il modello "Eddy Dissipation Concept" (EDC) (Magnussen,1989; Lilleheie,1992) consente di trattare l'interazione esistente fra i fenomeni di turbolenza e di combustione.

Partendo dalla considerazione che le reazioni chimiche abbiano luogo in zone in cui si ha mescolamento a livello molecolare, l'EDC ipotizza che le reazioni avvengano all'interno di un reattore perfettamente miscelato (Perfectly Stirred Reactor). Si considera che tale reattore abbia una forma tubolare, sottile e allungata, in cui il raggio abbia come dimensione caratteristica la scala di Kolmogorov  $\eta$  e l'altezza abbia invece una dimensione  $L \gg \eta$ .

All'interno di tale reattore si fanno le seguenti assunzioni:

- le condizioni sono stazionarie;
- il reattore è omogeneo;
- il reattore è adiabatico;
- i reagenti si trovano a temperatura sufficientemente alta da poter reagire;
- c'è equilibrio tra pressione interna ed esterna al reattore.

Queste ipotesi sono accettabili solo nel caso di Fast-Chemistry o di equilibrio chimico, ma conducono a risultati inaccettabili nel caso in cui l'inerzia chimica non possa essere trascurata.

In particolare, con tale assunzione, sia la dinamica delle strutture fini caratterizzata da tempi corti, che l'espansione delle scale reattive dovuta alla combustione, non sono prese in considerazione nella formulazione del modello. Tali ipotesi sono, inoltre, molto limitative anche nel caso di flussi comprimibili, in cui l'assunzione che la pressione interna ed esterna al reattore siano uguali deve essere adeguatamente giustificata.

Sulla scia delle assunzioni fatte, l'EDC stima sia la frazione di volume  $\gamma^*$  delle strutture fini che il loro tempo di vita  $\tau^*$ .

La frazione di volume viene calcolata sfruttando l'assunzione che il volume di ciascuna struttura è approssimativamente pari a  $\eta^2 L$ , mentre il volume della cella che la contiene è pari a  $\eta L^2$ , da cui si ricava (a meno di opportune costanti di proporzionalità):

$$\gamma^* \approx \frac{\eta^2 L}{\eta L^2} = \frac{\eta}{L} = \left( \frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{3/4}$$

in cui  $\varepsilon$  è la dissipazione turbolenta di energia, e  $k$  è l'energia cinetica turbolenta.

Il tempo di vita  $\tau^*$  del reattore (a meno di opportune costanti di proporzionalità) si assume essere corrispondente al tempo caratteristico della scala di Kolmogorov, ovvero il tempo di mescolamento, quindi:

$$\tau^* \approx \frac{\tau_L}{\text{Re}_L^{1/2}} \left( \frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}$$

Si osservi che tale valore è l'inverso della grandezza  $\beta^*$  che rappresenta il trasferimento di massa tra strutture fini e il flusso esterno.

A meno di opportune costanti di calibrazione del modello, il trasferimento di massa tra "fine structures" e "surroundings", per unità di massa è espresso da:

$$\bar{m} = \bar{m}^* \gamma^* \approx \left( \frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \frac{\varepsilon}{k}$$

Poiché il rateo di reazione è una funzione lineare di  $\bar{m}$ , si è ottenuta in questo modo una chiusura del problema dell'accoppiamento tra chimica e turbolenza.

Per calcolare le grandezze medie delle celle  $\tilde{\Psi}$ , si assume (Magnussen,1989; Lilleheie,1992) che tali grandezze siano legate a quelle interne  $\Psi^*$  ed esterne  $\Psi^0$  al reattore attraverso una operazione di media pesata con la frazione di volume occupata dalle strutture fini:

$$\tilde{\Psi} = \chi \gamma^* \Psi^* + (1 - \chi \gamma^*) \Psi^0$$

dove  $\chi$  è la frazione di volume delle strutture a temperatura sufficientemente elevata da poter reagire.

Sulla base delle precedenti ipotesi è possibile ottenere una espressione per la frazione in massa e per la temperatura all'interno ed all'esterno del reattore:

$$Y^*_i = \tilde{Y}_i + \frac{(1 - \chi \gamma^*) \tau^*}{\rho^*} w^*_i$$

$$Y^0_i = \tilde{Y}_i - \frac{\chi \gamma^* \tau^*}{\rho^*} w^*_i$$

$$T^* = \tilde{T} + \frac{(1 - \chi \gamma^*) \tau^*}{\rho^* C_p^* V^*} Q^*$$

$$T^0 = \tilde{T} - \frac{\chi \gamma^* \tau^*}{\rho^* C_p^* V^*} Q^*$$

dove  $Q^*$  è il calore di reazione definito dalla:

$$\dot{Q}^* = V^* \sum_{i=1}^{NS} w_i^* \Delta h_{fi}^0$$

Avendo adottato l'ipotesi di chimica infinitamente veloce, si può assumere che la velocità di comparsa delle specie chimiche sia controllata dalla velocità del trasferimento di massa tra le strutture fini ed il "surrounding fluid".

Si ottiene dunque per il termine sorgente da inserire come chiusura delle equazioni di Navier-Stokes, la seguente espressione:

$$\bar{w} = \frac{\rho \chi \gamma^*}{\tau (1 - \gamma^*)} Y_{Fmin}$$

dove  $Y_{Fmin}$  è la quantità minima di combustibile in grado di reagire stechiometricamente. Questa equazione permette di ottenere una chiusura per l'accoppiamento tra la cinetica chimica e la turbolenza.

Il modello EDC presenta alcune limitazioni:

- si basa sull'assunzione di "Fast chemistry", ovvero assume che i tempi della cinetica chimica siano molto più veloci di quelli di mescolamento. L'ipotesi di Fast chemistry comporta che, dati i reagenti, i prodotti sono ottenuti solo sulla base della stechiometria: non vengono predette le specie intermedie. Molti codici commerciali di CFD (esempio: FLUENT) danno la possibilità di confrontare il tempo di mescolamento calcolato con EDC con i tempi chimici calcolati con Arrhenius e passare dall'uno all'altro a seconda di quale sia il fenomeno che controlla il processo fisico;
- il modello EDC, inoltre, stima la frazione di volume reagente all'interno della cella di calcolo ed il tempo di vita del reattore, quindi calcola temperatura e specie chimiche all'interno della cella. In questo modo non viene contemplato l'effetto diretto del reattore sul campo fluidodinamico: l'effetto della combustione viene risentito solo attraverso l'incremento di temperatura la variazione di specie chimiche.

In flussi comprimibili tali approssimazioni sono troppo limitative: è necessario dunque, introdurre un modello in cui gli effetti della comprimibilità possano direttamente influenzare il campo fluidodinamico.

## **6.2. Implementazione dei modelli di tipo LES**

I codici commerciali, quali FLUENT ad esempio, che implementano modellistica LES sono basati su modelli consolidati in letteratura che consentono di simulare geometrie molto complesse e problemi di vario tipo. D'altro canto, però, oltre a non essere ancora adeguati allo studio di questo tipo di fenomenologie, sono poco flessibili, in quanto difficilmente modificabili, e spesso sono caratterizzati da bassa acutezza numerica.

Da ciò nasce la necessità di sviluppare dei codici proprietari, preformati allo studio di flussi turbolenti complessi. Questi, generalmente, consentono di simulare una classe ristretta di problemi e geometrie più semplici, limitate a quelle di interesse dello sviluppatore, ma sono anche dotati di una modellistica (sia numerica che fisica) più avanzata ed accurata.

ENEA ha investito sull'approccio LES, sia utilizzando codici commerciali, sia sviluppando un proprio codice denominato HeaRT (Heat Release and Turbulence). Il codice HeaRT è un codice di ricerca in continua evoluzione per quanto riguarda la modellistica fluidodinamica e di combustione, gli schemi numerici e la struttura software. Attualmente il codice è in grado di simulare flussi turbolenti reattivi e non reattivi a bassi numeri di Mach in geometrie 3D cilindriche e cartesiane multiblocco ed utilizzando griglie strutturate. A differenza di FLUENT o di altri codici commerciali, HeaRT utilizza un modello di sottogriglia originale, denominato Fractal Model, nato dalla collaborazione tra ENEA e Dipartimento di Meccanica ed Aeronautica dell'università di Roma "La Sapienza". Lo schema numerico adottato, formulato alle differenze finite, è esplicito, al terzo ordine nel tempo ed al secondo nello spazio. L'integrazione delle equazioni nel tempo è stata realizzata in modo esplicito e ricorrendo al metodo di Shu-Osher, appartenente alla famiglia dei Runge-Kutta. Lo schema a tre passi ha un'accuratezza del terzo ordine ed ottime proprietà di stabilità lineare. Le

condizioni di stabilità che accompagnano lo schema esplicito impongono intervalli di integrazione temporale molto piccoli ( $10^{-7}$  secondi), indispensabili anche per il trattamento di problemi reattivi. L'integrazione nello spazio è al secondo ordine. Le derivate spaziali sono trattate con formule centrate che consentono di trattare nodi non uniformemente distribuiti. Il codice, essendo centrato, non è particolarmente robusto per cui i gradienti spaziali non possono essere intensi e ciò implica l'utilizzo di griglie molto fitte per non avere una soluzione oscillante.

Il codice HeaRT è stato usato per creare un modello di simulazione di un combustore che opera in regime MILD di idrogeno e aria. La formulazione adottata per l'accoppiamento di fenomeni chimici e di turbolenza nella simulazione della camera di combustione, è basata su EDC (Magnussen, et al., 1976) e assume che le reazioni chimiche abbiano luogo nelle strutture turbolente di piccola scala e che il tempo di evoluzione delle concentrazioni delle specie chimiche in tali strutture siano calcolate a ciascun passo. Stante l'importanza del fenomeno della radiazione nella combustione MILD, a causa delle difficoltà computazionali che una descrizione accurata del fenomeno può generare, è stato usato un modello macroscopico, chiamato M1. Un calcolo a posteriori fornisce informazioni sulla concentrazione dei NOx formati in seguito alla combustione.

L'attività di ricerca che ENEA intende portare avanti riguarda lo sviluppo di modellistica fluidodinamica e chimica relativa al processo di gassificazione di combustibili fossili ed al processo di combustione di H<sub>2</sub> con approccio LES, in particolare la caratterizzazione del processo di gassificazione, con la definizione di schemi cinetici per reazioni solido-gas, a tutt'oggi ancora in fase di studio.

Il CRS4 (Centro per gli Studi Avanzati, Ricerca e Sviluppo della Sardegna) ed in particolare l'area CCT, nell'ambito delle attività di modellazione della fenomenologia legata alla combustione nei suoi vari aspetti, sta conducendo una attività di implementazione di modelli su software esistenti, commerciali e non, e di applicazione di modelli per la risoluzione di problematiche di natura industriale ed ambientale. In particolare è stato

sviluppato il modello “Turbolent Flame speed Closure” TFC (Zimont, 1979; 2000), in cui il problema fondamentale della modellazione, la “questione della combustione turbolenta”, è stata risolta nel contesto dell’ipotesi di Kolmogorov di equilibrio statistico delle strutture turbolente di piccola scala generalizzato alla zona di reazione e dunque al caso della combustione turbolenta. Questo modello, utilizzato per simulazioni RANS di combustione in turbina a gas (Zimont et al., 1998; Biagioli et al., 2001), è ora implementato nei codici commerciali FLUENT e CFX.

Il fatto che i risultati forniti da una simulazione RANS sono importanti, ma non sufficienti a caratterizzare un flusso instazionario, ha portato molti studiosi al tentativo prematuro di sostituire la simulazione RANS con la LES.

È stato a tal proposito introdotto un approccio unitario RANS/LES (Zimont et al., 2005), basato sul modello di combustione TFC, in cui i campi turbolenti principali sono simulati attraverso un tool RANS, mentre i corrispondenti campi non stazionari sono simulati attraverso tecnica LES utilizzando per la modellazione alcune informazioni della precedente simulazione RANS. La linea guida dell’approccio combinato consiste in un processo a due stadi. Il primo step consiste nella simulazione del modello TFC accoppiato con il modello di turbolenza  $\kappa-\varepsilon$  con la tecnica RANS per ottenere il campo delle grandezze di flusso medio. Il secondo step coinvolge la simulazione LES, ancora basata sul modello TFC, che fa uso della velocità media di dissipazione turbolenta ottenuta attraverso la RANS per stimare la turbolenza di sottogriglia, proponendo il campo istantaneo del flusso. Il LES offre l’immagine non stazionaria della simulazione RANS. Speciale attenzione è posta al problema della consistenza dei risultati delle sotto-problematiche RANS e LES: un buon accordo tra è stato ottenuto utilizzando lo stesso modello di combustione in entrambi. Le versioni RANS e LES del modello TFC insieme con un modello di turbolenza a due parametri RANS e un modello di turbolenza LES forniscono un modello consistente.

L’approccio combinato RANS-LES è stato validato con i dati ottenuti sperimentalmente su un apparato di prova standard conosciuto come bruciatore di Moreau (Moreau, 1977), e usato per condurre studi di simulazione di applicazioni industriali di combustione premiscelata, come

turbine a gas e bruciatori flameless. Il confronto tra dati sperimentali e dati ottenuti dalla simulazione ha in tutti i casi in esame mostrato un buon accordo.

## 7. Possibili sviluppi dello studio

Di seguito sono presentati alcuni aspetti che potrebbero essere affrontati in una seconda fase dello studio:

- individuazione delle tecnologie ottimali di trattamento dei gas combustibili;
- sviluppo di modelli di simulazione delle sezioni di depurazione del syngas (rimozione polveri ad alta temperatura, desolforazione, recupero dello zolfo);
- ipotesi di configurazione dell'impianto integrato e ottimizzazione delle efficienze energetiche;
- sviluppo di modelli generali per lo studio e l'ottimizzazione dell'impianto integrato;
- valutazioni tecnico-economiche su impianti zero emissions basati sulla combustione flameless;
- studio del ciclo di vita degli impianti.

## 8. Riferimenti bibliografici

- A. Abbà, C. Cercignani, L. Valdetaro (2003)**, "Modelli e simulazione LES di correnti turbolente e applicazione alla combustione", Politecnico di Milano, Dipartimento di Matematica "F. Brioschi", 2003
- R. K. Agrawal, S. C. Wood (2002)**, "Innovative solutions for cost-effective NOx control", Pollution Engineering, June 2002
- D. A. Anderson (1984)**, Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer", New York, 1984.
- V. S. Arpaci (1995)**, "Microscales of turbulent combustion", Progress in Energy and Combustion Science, 21:153-171, 1995
- G. K. Batchelor (1970)**, Introduction of Fluid Dynamics", Cambridge, 1970
- G. Benelli, M. Malavasi, G. Girardi (2007)**, "Innovative oxy-coal combustion process suitable for future and more efficient zero emission power plants", proceedings of Coal-Gen Europe 2007, Madrid, Spain, June 26-28, 2007
- F. Biagioli, V. L. Zimont, K. J. Syed (2001)**, "Modelling and numerical simulation of turbulent combustion in DLE burners based on a turbulent flame speed approach", Proceedings of Conference, June 4-7, New Orleans, Louisiana, USA, pp. 1-14, 2001
- A. Capria, A. L. De Cesaris, M. Dubini, M. Giugliano, (1992)** "Controllo delle emissioni in atmosfera da Impianti industriali", Istituto per l'Ambiente, 1992
- A. Cavaliere, M. de Joannon (1999)**, Italian Flames Days, Rome, pp. 337-344, 1999
- A. Cavaliere, M. de Joannon (2004)**, "Mild combustion", Progress in Energy and Combustion Science, Elsevier, vol. 30: 329-366, 2004
- A. Di Nardo, G. Calchetti, L. Mongibello, C. Mongiello (2007)**, "Approach to coal combustion modelling in a well stirrer reactor", proceedings of the Third International Clean Coal Technologies for Our Future, Cagliari (Italy), 15-17 May 2007
- C. A. J. Fletcher (1991)**, "Computational Techniques for Fluid Dynamics." Series in Computational Physics. San Diego, 2nd edition, 1991.
- M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, H. Cabot (1991)** "A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model", Phys. Fluids A, 3(7):1760-1765, July 1991
- P. Glarborg, N. I. Lilleheie, S. Bygstad, B. F. Magnussen, P. Kilpinen, M. Hupa, (1992)**, "Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion", The Combustion Institute, Pittsburgh, 1992, pp. 889--898
- A. Ingenito (2005)**, "Modellistica della combustione in regime supersonico", Università di Roma "La Sapienza", Dottorato di Ricerca in Meccanica Teorica e Applicata, XVIII ciclo, tesi finale, 2005
- M. Kastuki, T. Hasegawa (1998)**, 27<sup>th</sup> International Symposium (Int.) on Combustion, pp. 3135-3146, 1998
- K. K. Y. Kuo (1986)**, "Principles of Combustion", John Wiley and Sons, New York, 1986
- B. E. Launder, D. B. Spalding (1972)**, "Mathematical Models of Turbulence", London and New York, 1972
- D. K. Lilly (1992)**, "A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method", Phys. Fluids A, 4(3):663-665, March 1992
- B. F. Magnussen, B. H. Hjertager, (1976)**, „proceedings of Combustion Institute“, vol. 16, 1976
- B. F. Magnussen (1989)**, "Eighteenth International Congress on Combustion Engines", International Council on Combustion Engines, Tianjin, 1989
- A. Milani, A. Saponaro (2000)**, "Tecnologie di Combustione senza Fiamma", La Termotecnica, gennaio/febbraio, 87-94, 2000
- A. Milani, A. Saponaro (2001)**, "Diluted combustion technologies", IFRC Combustion Journal, February 2001
- J. A. Miller, C. T. Bowman (1989)**, "Mechanism and Modelling of Nitrogen Chemistry in Combustion", Progress in Energy and Combustion Science, 15, 287-338, 1989
- B. Mohammadi, O. Pironneau (1994)**, "analysis of the k- $\epsilon$  Turbulence Model", Chichester, 1994
- P. Moin and J. Jimenez (1993)**, "Large Eddy Simulation of Complex Turbulent Flows", AIAA Paper 93-3099, July 1993

- P. Moreau (1977)**, "Turbulent Flame Development in a High Velocity Premixed Flow" AIAA paper No. 77-49, 1977
- B. I. Özdemir, N. Peters (2001)** "characteristics of the Regions Zone in a Combustor Operating at Mild Combustion", Experiments in Fluid, 30, 683-695, 2001
- A. Parente (2004)**, "Combustione flameless di metano e idrogeno: impiego della fluidodinamica computazionale per lo sviluppo di bruciatori industriali a basso impatto ambientale", Università di Pisa, Facoltà di Ingegneria, tesi di Laurea Specialistica, 2004
- E. Parodi, A. Rolla (1998)**, "Impianti di combustione per la termodistruzione delle sostanze organiche volatili", la Rivista dei Combustibili, 52, 81-92, 1998
- V. C. Patel, W. Rodi, G. Scheuerer (1985)**, "turbulence models for near-wall and low Reynolds number flows", AIAA Journal, 23(9):1308-1319, 1985
- T. Plessing, N. Peters, J. G. Wunning (1998)**, "Laser Optical Investigation of Highly Preheated Combustion with Strong Exhaust Gas Recirculation", 27<sup>th</sup> Symposium (international) on Combustion, The Combustion Institute, 3197-3204, 1998
- T. Poinsot, D. Veynante (2005)**, "Theoretical and Numerical Combustion", Edwards, Philadelphia, 2<sup>nd</sup> edition, 2005
- A. Pozzoli, G. Migliavacca, E. Parodi, M. Perini (2002)**, "La combustione senza fiamma: aspetti teorici e applicazioni tecnologiche nell'impiantistica di processo", La Rivista dei Combustibili, vol. 56, n° 6, 2002
- W. E. Ranz, W. R. Marshall (1952a)**, "Evaporation from drops, Part I". Chem. Eng. Prog., vol. 48, March 1952
- W. E. Ranz, W. R. Marshall (1952b)**, "Evaporation from drops, Part II". Chem. Eng. Prog., vol. 48, April 1952
- A. Saponaro, S. M. Camporeale, F. Canalini (2001)**, "An HFO innovative combustion mode for low environmental impact", proceedings of the 4th International Symposium on High Temperature Air Combustion and Gasification, Rome, Italy, 2001
- K. Telger, W. Roth (1995)**, "Betriebserfahrungen beim Einsatz von Brennern mit flammloser Oxidation", Gas Wärme International, 44, 332-337, 1995
- J.A. Wunning, J.G. Wunning (1997)**, Progress in Energy Combustion Science, Vol. 23, pp. 81-94, 1997
- J. G. Wunning (2003)**, "Flox ® - flameless combustion", Thermoprocess Symposium, 2003
- J. A. Wunning, J. G. Wunning (2007)**, Flameless oxidation to reduce thermal NO formation", Progress in Energy and Combustion Science, vol. 23, 81-94, 2007
- V.L. Zimont (1979)**, "A theory of turbulent premixed combustion at high Reynolds numbers", Combust. Expl. and Shock Waves 15, 305-311, 1979
- V. L. Zimont (2000)**, "Gas premixed combustion at high turbulence. Turbulent Flame Closure combustion model", Experimental Thermal and Fluent Science 21, 179-186, 2000
- V. L. Zimont, W. Polifke, M. Bettelini, W. Weisenstein (1998)**, "An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure", Journal of Engineering for Gas Turbines and Power (Transactions of ASME), Vol. 120, pp 526-532, 1998
- V. L. Zimont, V. Moreau, V. Battaglia, R. Modi (2006)**, "RANS and LES modelling of GE!= Combustor", Biblioteca Termotechnica, (Proceeding of ASME ATI Conference "Energy: production. Distribution and conservation", Milan Italy, 2006) n. 34, Vol. 2, 923-932, 2006
- V. L. Zimont, V. Battaglia (2007)**, "Joint RANS/LES simulation of a flameless burner", proceedings of the MCS 5, Monastir (Tunisia), September 9-13, 2007