



Ricerca di Sistema elettrico

Simulazione di un bruciatore per turbine a gas orientato alla "load and fuel flexibility"

Calchetti Giorgio, Chiocchini Stefano, Di Nardo Antonio

SIMULAZIONE DI UN BRUCIATORE PER TURBINE A GAS ORIENTATO ALLA "LOAD AND FUEL FLEXIBILITY"

Calchetti G., Di Nardo A. (ENEA)

Chiocchini S. (Università degli Studi Roma TRE)

Settembre 2015

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Piano Annuale di Realizzazione 2014

Area: Produzione di energia elettrica e protezione dell'ambiente

Progetto: Cattura e sequestro della CO₂ prodotta da combustibili fossili

Obiettivo: Ampliamento del range operativo di sistemi turbogas sottoposti a variabilità del carico e della composizione del combustibile

Responsabile del Progetto: Stefano Giammartini, ENEA

Indice

SOMMARIO.....	4
1 INTRODUZIONE	5
2 OBIETTIVI	6
3 DESCRIZIONE DEI RISULTATI E DELLA GEOMETRIA OTTENUTA	7
4 CONCLUSIONI.....	15
5 APPENDICE	16
5.1 MODELLI E EQUAZIONI CFD	16
5.2 PERFECTLY STIRRED REACTOR.....	19
6 RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI	21

Sommario

Nel presente lavoro, partendo dalle geometrie e dagli accorgimenti tecnici già discussi nel report riferito alle attività della precedente annualità (Report RdS/Par2013/257), si è proceduto, attraverso simulazioni CFD e Reactor-Network analysis, alla definizione di una geometria ottimizzata del bruciatore. Il sistema, costituito da un vortificatore per l'adduzione della miscela combustibile-comburente, inserito in una doppia camera di combustione provvista di cavità laterali, dovrebbe promuovere l'instaurarsi di un regime di combustione distribuita, favorevole alla flessibilità di carico dell'impianto.

Nel merito sono stati perfezionati l'accoppiamento fluidodinamico tra il vortificatore e la cavità di intrappolamento della fiamma principale, al fine di massimizzare la penetrazione dei gas combusti e della miscela fresca entro la cavità stessa, nonché di esaltare il ricircolo interno dei gas combusti dalla camera verso i vani interpallari del vortificatore, a scopo di auto ignizione in forma distribuita.

1 Introduzione

La "*load flexibility*" e la "*fuel flexibility*" fanno parte degli interventi finalizzati al miglioramento dell'efficienza degli impianti di produzione di energia elettrica. Per quanto riguarda il primo aspetto, nel medio e lungo periodo la produzione elettrica da combustibile fossile continuerà a rappresentare un contributo vitale, che tuttavia dovrà adattarsi a coesistere con le fonti energetiche rinnovabili. Le criticità derivano soprattutto dall'intrinseca impossibilità di pianificare l'andamento della produzione per alcune di queste e si manifestano nella difficile gestione della rete elettrica.

Gli eventi internazionali, il costo e la disponibilità dei combustibili sono fattori essenziali nelle scelte legate alla progettazione degli impianti e sottolineano l'importanza che svolgono i combustibili nella produzione di energia. Di conseguenza, la capacità di bruciare una vasta gamma di combustibili continua ad essere di primaria importanza. In passato, la maggior parte delle turbine a gas terrestri hanno utilizzato gas naturale o combustibili distillati. Nel futuro, sempre di più, le macchine saranno chiamate a gestire combustibili di qualità inferiore, derivati per esempio dal carbone. I progettisti di combustori per turbine a gas si trovano quindi ad affrontare la sfida di soddisfare i sempre più stringenti requisiti ambientali, con combustibili di composizione variabile e suscettibili di modificare l'accensione, l'ancoraggio, la posizione della fiamma e portare ad instabilità di combustione.

Nei bruciatori convenzionali il marcato gradiente di temperatura permette l'attivazione di reazioni a catena di radicali che sono alla base della combustione. Questa condizione viene normalmente raggiunta nella regione del fronte di fiamma che separa reagenti e prodotti. La stabilità di questo fronte, mantenuta grazie ad un equilibrio stabile tra velocità di fiamma e portata, rispetto alle fluttuazioni legate alla turbolenza, è un requisito essenziale. La combustione volumetrica distribuita si riferisce ad una tecnica di combustione che utilizza elevate diluizioni della miscela reagente con gas combust, in combinazione con temperature elevate di preriscaldamento. La forte diluizione fa sì che la composizione della miscela sia al di fuori dei limiti di infiammabilità, da qui la necessità di preriscaldamento del flusso in ingresso al di sopra della temperatura di autoaccensione e determina bassi gradienti di temperatura, che limitano la produzione di NO_x . Inoltre la formazione di soot è inibita a causa delle condizioni magre che si instaurano nella camera di combustione. La presenza di un fronte di fiamma non è necessaria se i reagenti sono preriscaldati al di sopra della loro temperatura di autoaccensione, perché l'intero volume di reazione è in condizioni di reagire e sostenere il processo. Quindi tutte le reazioni avvengono in un volume più ampio, in assenza di fenomeni di accensione e di estinzione, a causa della piccola differenza di temperatura tra gas combust e incombusti, e la fiamma non è più visibile. Per questo motivo la combustione volumetrica è chiamata anche 'MILD' [1], 'flameless' [2] o 'colorless' [3] da diversi autori. L'omogeneità della temperatura nella camera di combustione può anche favorire il controllo di trasferimento di calore. La diluizione con gas di scarico può essere ottenuta internamente alla camera di combustione da una corretta progettazione dell'intero sistema. L'assenza di un fronte di fiamma rimuove una delle possibili fonti di instabilità termoacustiche.

Se la combustione volumetrica ha trovato molte applicazioni per fornaci su scala industriale, esistono solo esempi su scala di laboratorio per turbine a gas, dove in realtà non ha trovato piena applicazione e ci sono ancora diverse questioni aperte. Esistono infatti alcune complicazioni in più. Poiché nelle turbine a gas i bruciatori lavorano in forte eccesso d'aria, i fumi contengono ancora una elevata concentrazione di ossigeno, che rende difficile diluire la miscela ai livelli desiderati. Al contrario, il forte trasferimento di calore presente nelle fornaci, con la conseguente riduzione delle temperature, consente di lavorare in condizioni quasi stechiometriche. Inoltre, le pressioni di esercizio e le temperature più elevate intensificano la velocità di reazione e abbreviano il tempo di reazione, favorendo la presenza di un fronte di fiamma. Inoltre, la densità di potenza è molto maggiore, con tempi di permanenza più brevi, ciò significa meno spazio e tempo per raggiungere la diluizione richiesta prima dell'inizio delle reazioni.

La soluzione qui proposta, consiste appunto in un bruciatore che permetta di superare i limiti degli esemplari concepiti secondo la tecnologia nota, in ordine all'obiettivo di ottenere stabilmente regimi di combustione volumetrica nelle turbine a gas, con i vantaggi conseguenti: 1) alta efficienza di combustione; 2) omogeneità di temperatura della fiamma; 3) ridotte ed emissioni inquinanti; 4) superiore resistenza di fiamme ultramagre all'innesco di pericolose oscillazioni termoacustiche; 5) assenza d'interazione della

fiamma col campo di accelerazioni all'uscita del combustore (Acoustic-entropy combustion instabilities); 6) ridotti stress da dilatazione termica differenziale sull'ugello terminale del combustore e dei primi stadi di turbina; 7) elevata stabilità nelle manovre di variazione del carico termico.

Il regime di combustione distribuita estende il campo d'esistenza delle fiamme premiscelate verso miscele più magre (povere di combustibile) a basso rapporto di equivalenza e può quindi essere sfruttato per bruciare in forma *premiscelata* ed omogenea anche nell'esercizio in regolazione, ai più bassi carichi parziali. Questa prerogativa della combustione distribuita assume un fondamentale ruolo nel quadro delle attuali strategie di gestione dei grandi impianti combinati. Quando infatti le energie rinnovabili, il cui sfruttamento non può essere differito, giungono a coprire anche parte del carico base, i gruppi gas-vapore debbono essere eserciti per alcune ore alla minima potenza compatibile con il rispetto dei vincoli di tutela ambientale.

Il ricircolo interno dei gas combusti rappresenta quindi una delle possibili strategie per ottenere un regime di combustione volumetrica. Questo infatti aumenta la temperatura dei reagenti e diminuisce la concentrazione di ossigeno nel caso di un rapido mescolamento dei reagenti prima che inizino le reazioni. Il ricircolo interno dei gas di scarico è la caratteristica fondamentale di un bruciatore a vortice intrappolato (TVC). Nei sistemi convenzionali la stabilizzazione della fiamma è ottenuta mediante sistemi di swirl. Nei bruciatori basati sul principio del Trapped Vortex [4-8], il ricircolo viene garantita da vortici generati utilizzando cavità. Se il sistema è progettato correttamente, il vortice è stabile all'interno della cavità o "intrappolato". L'adozione di cavità per la stabilizzazione della fiamma rende l'intero dispositivo meno sensibile alle variazioni delle condizioni di iniezione dei reagenti, quindi capace di adattarsi anche a variazioni della tipologia di combustibile ("*fuel flexibility*"), o delle condizioni di funzionamento ed adatto ad operare in condizioni di combustione magra.

2 Obiettivi

Rispetto agli accorgimenti individuati nella precedente annualità e riportati nel report Report RdS/PAR2013/257, nel presente lavoro si è deciso di indagare ulteriormente su quelli ritenuti più efficaci. In particolare si è cercato di ottimizzare:

- 1) l'accoppiamento tra il vortizzatore e la cavità al fine di massimizzare la penetrazione dei gas combusti e della miscela fresca verso la cavità stessa. In particolare per il vortizzatore è stata ideata una geometria elicoidale capace di minimizzare l'interferenza tra il flusso di miscela fresca che dovrebbe 'intrappolarsi' nella cavità, con il flusso di gas combusti uscente;
- 2) il ricircolo dei gas combusti all'interno del vortizzatore, prevedendo la realizzazione di un certo numero di fori opportunamente posizionati, che mettono in comunicazione i gas combusti provenienti dalla cavità con la miscela fresca immessa attraverso il vortizzatore. Ciò al fine di massimizzare sia la diluizione della miscela non reagita che il suo preriscaldamento e di conseguenza minimizzare il rapporto di equivalenza di blow-out, che rappresenta una delle strategie per conseguire la "*load flexibility*".
- 3) l'alimentazione finemente distribuita della cavità, che dovrebbe assolvere al compito di distribuire parte della miscela reagente e al tempo stesso di attenuare le instabilità, in quanto smorza le oscillazioni acustiche per effetto dissipativo e frammenta le scale turbolente.

Partendo dal combustore di primo tentativo descritto nel report suddetto, nel quale erano stati effettuati una serie di studi esplorativi, attraverso simulazioni preliminari si è arrivati alla definizione di una geometria di partenza, descritta di seguito, ed oggetto di successive analisi. I modelli utilizzati nelle simulazioni sono riportati in appendice. Per le simulazioni è stato utilizzato il software ANSYS-FLUENT™.

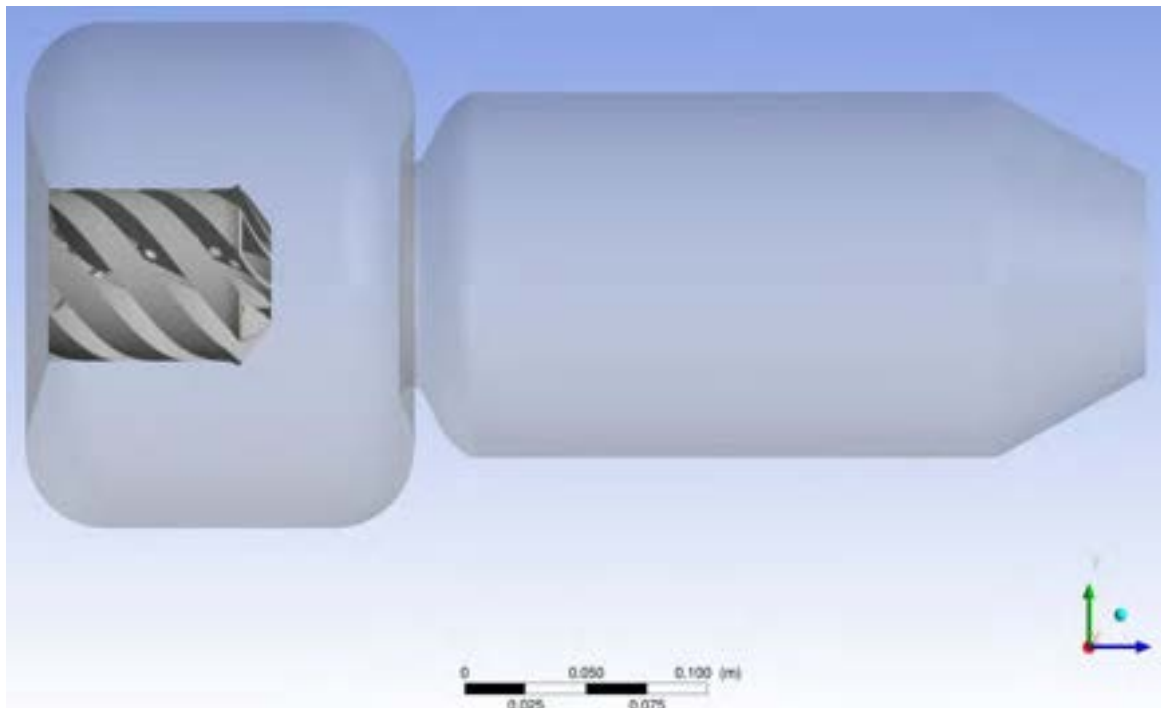


Figura 3.1. Assieme del vortizzatore e della doppia camera di combustione

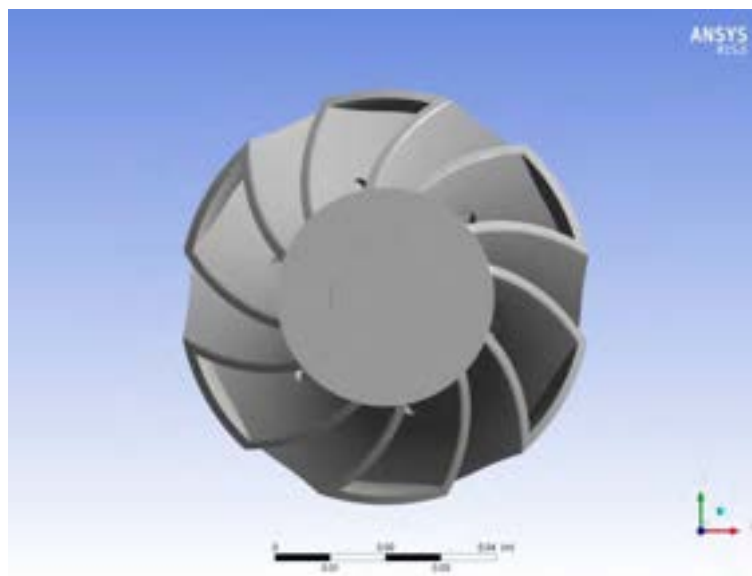


Figura 3.2. Vista frontale del vortizzatore

3 Descrizione dei risultati e della geometria ottenuta

Il sistema si compone di un vortizzatore elicoidale (fig. 3.1-3.3) inserito in una camera di combustione costituita essenzialmente da due parti (fig. 1). Una prima zona che viene a realizzare la cavità per l'intrappolamento del vortice ed una zona più a valle per il completamento della reazione di combustione. Nei risultati illustrati di seguito, la potenza è di circa 50 kW, la miscela è alimentata a 700 K a circa 40 m/s, il rapporto di equivalenza vale 0.67 e la pressione è atmosferica.

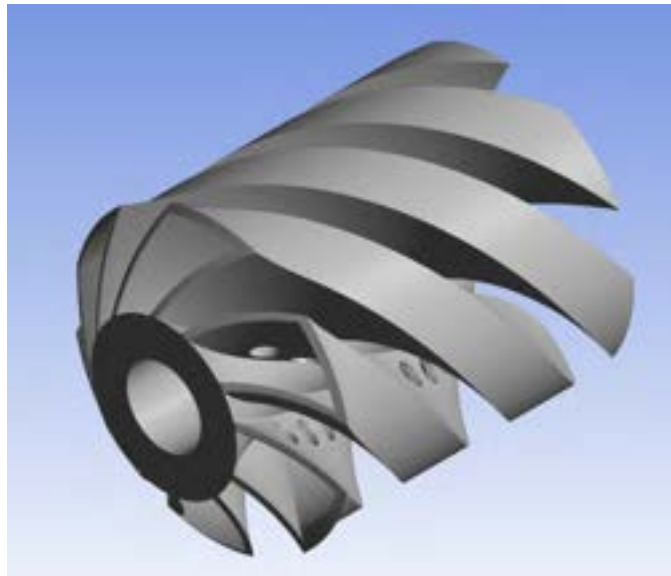


Figura 3.3. Vista assonometrica del vorticatore

Il vorticatore è formato da sei vani elicoidali “chiusi” dal lato rivolto verso la cavità di intrappolamento, nei quali scorre la miscela reagente di combustibile ed aria, intervallati da altrettanti vani “aperti” che favoriscono l’incanalamento elicoidale dei gas combusti presenti nella cavità. In questo modo il verso di rotazione del flusso reagente uscente dal vorticatore che ricircola all’indietro verso la cavità si accoppia perfettamente con il flusso presente nella cavità, creando un unico vortice toro-elicoidale, secondo un’alternanza azimutale d’ingressi ed uscite (fig. 3.4). La parte terminale di sbocco del vorticatore è sagomata in maniera da imprimere una componente radiale al flusso reagente, che favorisce il riempimento della cavità. L’azione combinata della depressione lato vani elicoidali chiusi, ma comunicanti con la cavità (fig. 3.5), dell’azione centrifuga prodotta dallo swirl impresso dal vorticatore e della forma terminale dello stesso, dovrebbero promuovere e massimizzare il riempimento e lo svuotamento della cavità.

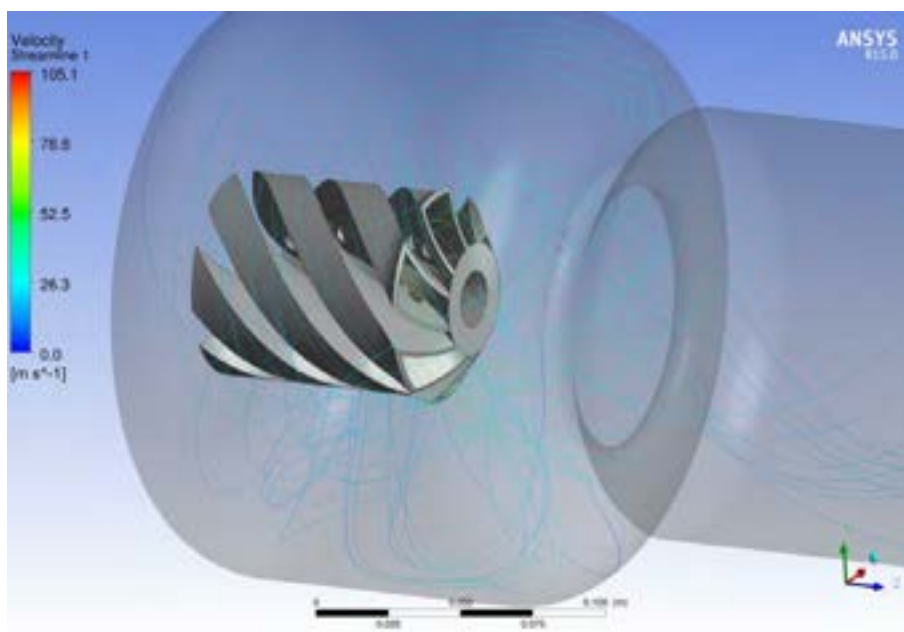


Figura 3.4. Linee di flusso tridimensionali

Sulle pareti dei vani “chiusi” sono stati ricavati dei fori (fig. 3.5) posizionati tutti sul lato dove lo scorrimento del fluido all’interno e la forma del condotto determinano una depressione additiva, in rapporto all’effetto venturi vano-cavità, da sfruttare per il supplementare richiamo dei gas combusti verso il condotto stesso. I fori si trovano cioè sul lato del dorso, in depressione, di quella che sarebbe una pala del vortizzatore, di fatto sostituita dalle pareti laterali del vano “aperto”. Il diametro ed il numero di tali fori è stato progressivamente incrementato, fino ad ottenere la massima portata di gas combusti entranti, compatibilmente con i vincoli dimensionali del dispositivo.

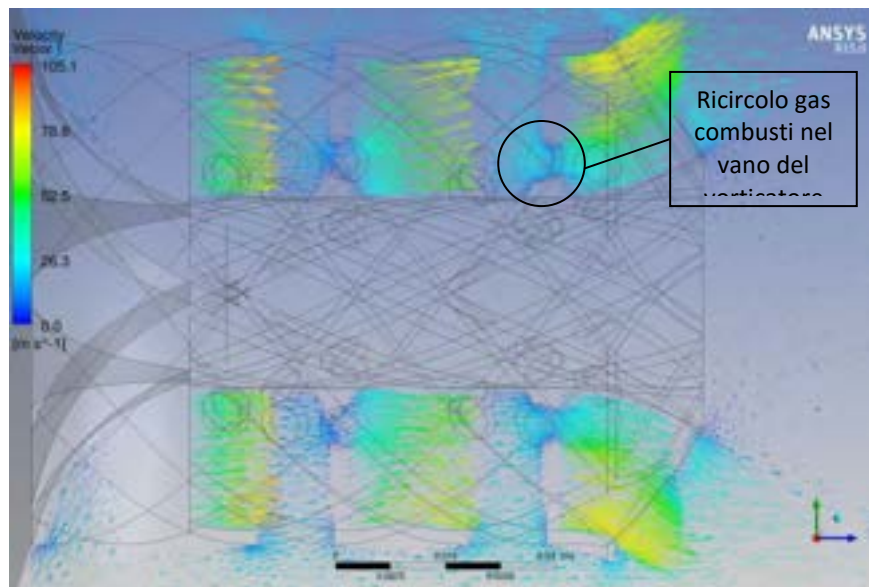


Figura 3.5. Vettori velocità su un piano di sezione longitudinale

Anche le dimensioni della cavità sono state via via aumentate con l’obiettivo di massimizzare il richiamo della miscela non reagita. Nelle prime versioni, così come risulta dal report dello scorso anno, la cavità era alimentata da una serie di fori disposti in modo da non interferire ma anzi incoraggiare lo sviluppo del vortice. Si è tuttavia notato come la presenza di alimentazioni della cavità, pur se collocate con il criterio suddetto, provocasse l’incremento della pressione regnante nella cavità stessa, ostacolando quindi un sufficiente penetrazione e ricircolo interno di miscela fresca, seppur favorendo il ricircolo nei vani dello swirler. Alla luce di questo importante risultato e dopo scrupolosa analisi, si è deciso di sacrificare questo accorgimento tecnico a favore di un più efficace ricircolo, che costituisce il fulcro ed il fondamento dell’idea di base. È tuttavia allo studio una soluzione, o meglio una nuova variante geometrica, che, permettendo di separare meccanicamente le aree di penetrazione dello swirl nella cavità e di fuoriuscita dei gas combusti dalla cavità stessa, consentirebbe di preservare l’alimentazione periferica ed il relativo effetto di sovralimentazione dinamica sul ricircolo interno dei gas combusti. In altre parole, evitando che le due portate debbano competere nello spartirsi l’area di accesso principale alla cavità, offrendosi mutua ostruzione, si può forzare il riempimento della camera dalla periferia, esaltando l’effetto di sfiato attraverso i condotti di ricircolo interno dei gas combusti e le supplementari luci di scarico appositamente predisposte. In questo modo è possibile evitare di spingere il processo di sintesi geometrica fino ad ottenere l’assoluto controllo delle forme di corrente “libere”, e nella fattispecie l’ottimale alternanza azimutale di ingressi ed uscite lungo l’accesso alla cavità. Ciò tuttavia non nega la possibilità di una siffatta ottimizzazione, che, evitando la separazione meccanica dei flussi entrante ed uscente, si presta a contenere le perdite di carico interne al bruciatore, per urto ed attrito di parete.

Successivamente è stata condotta un’analisi parametrica sulle dimensioni della strozzatura che separa la cavità dalla camera di combustione. Il diametro di questo restringimento risulta infatti essere importante sia per ciò che riguarda l’entità del ricircolo, attraverso i vani del vortizzatore ed all’interno della cavità, che

per la morfologia della fiamma. Sono stati confrontati tre casi con strozzature man mano più ampie. Nel caso con la strozzatura più stretta la percentuale di gas combusti riciclati nel vorticolatore risulta pari a circa il 7.5 % con un incremento di temperatura di circa 120 K. Nel caso intermedio invece il ricircolo è pari al 7 % con un incremento termico di 84 K. Infine nel caso con strozzatura più larga il ricircolo è del 3.7 % con un incremento di 93 K. Come si nota la portata aumenta con il restringersi della strozzatura, che induce una maggiore sovrappressione nella cavità.

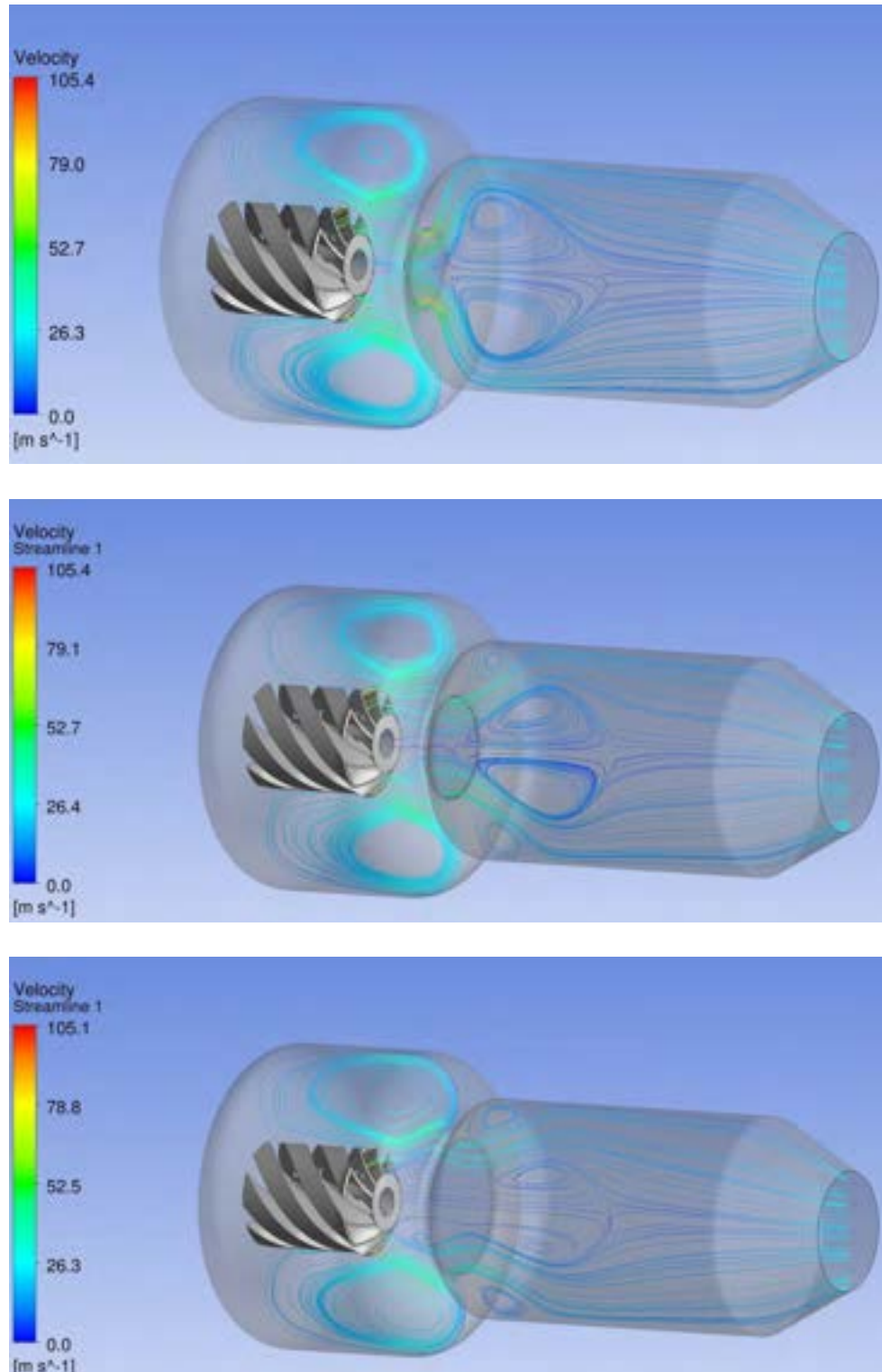


Figura 3.6. Linee di flusso su un piano longitudinale

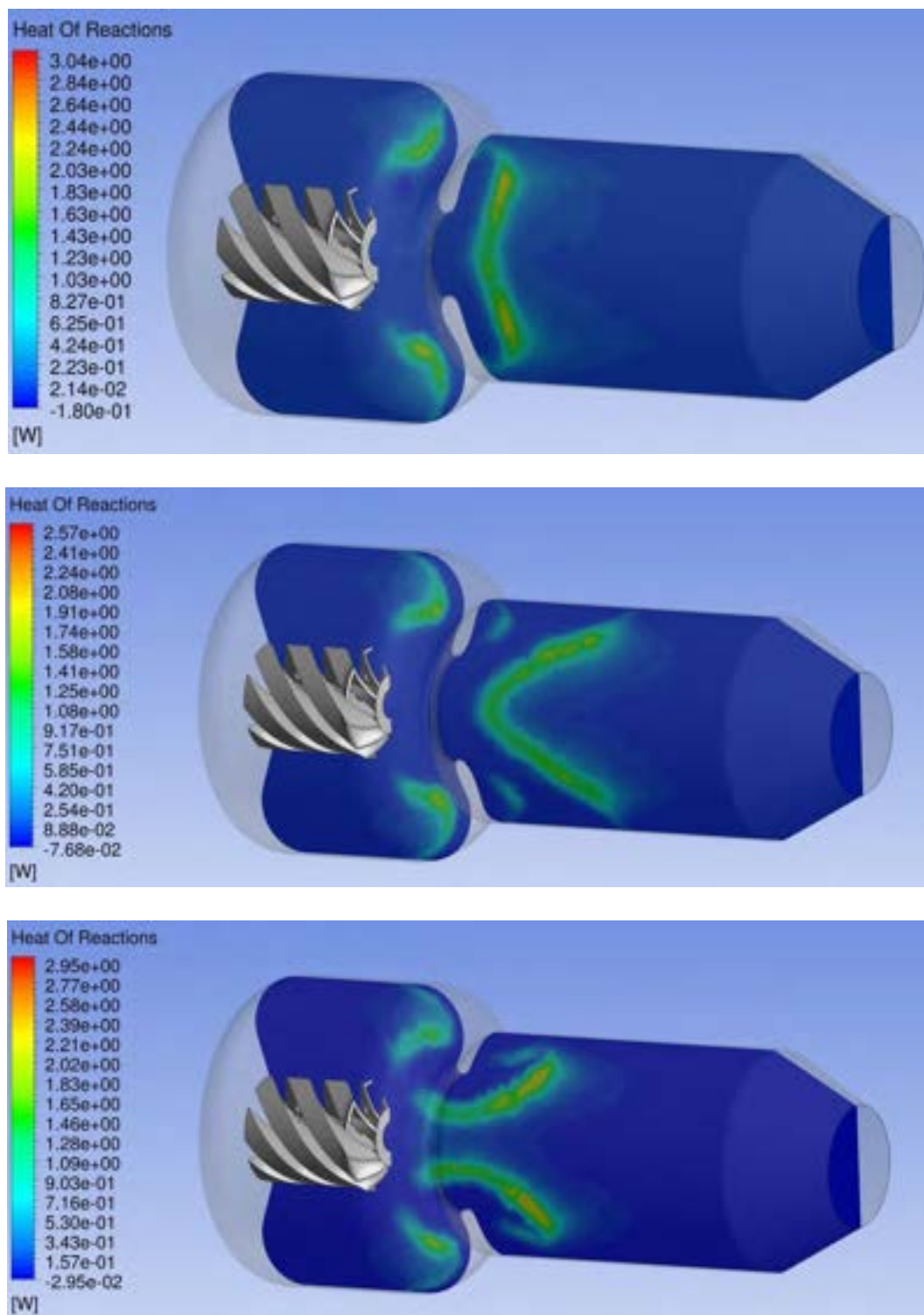


Figura 3.7. Mappa del rilascio di calore rappresentato su un piano longitudinale

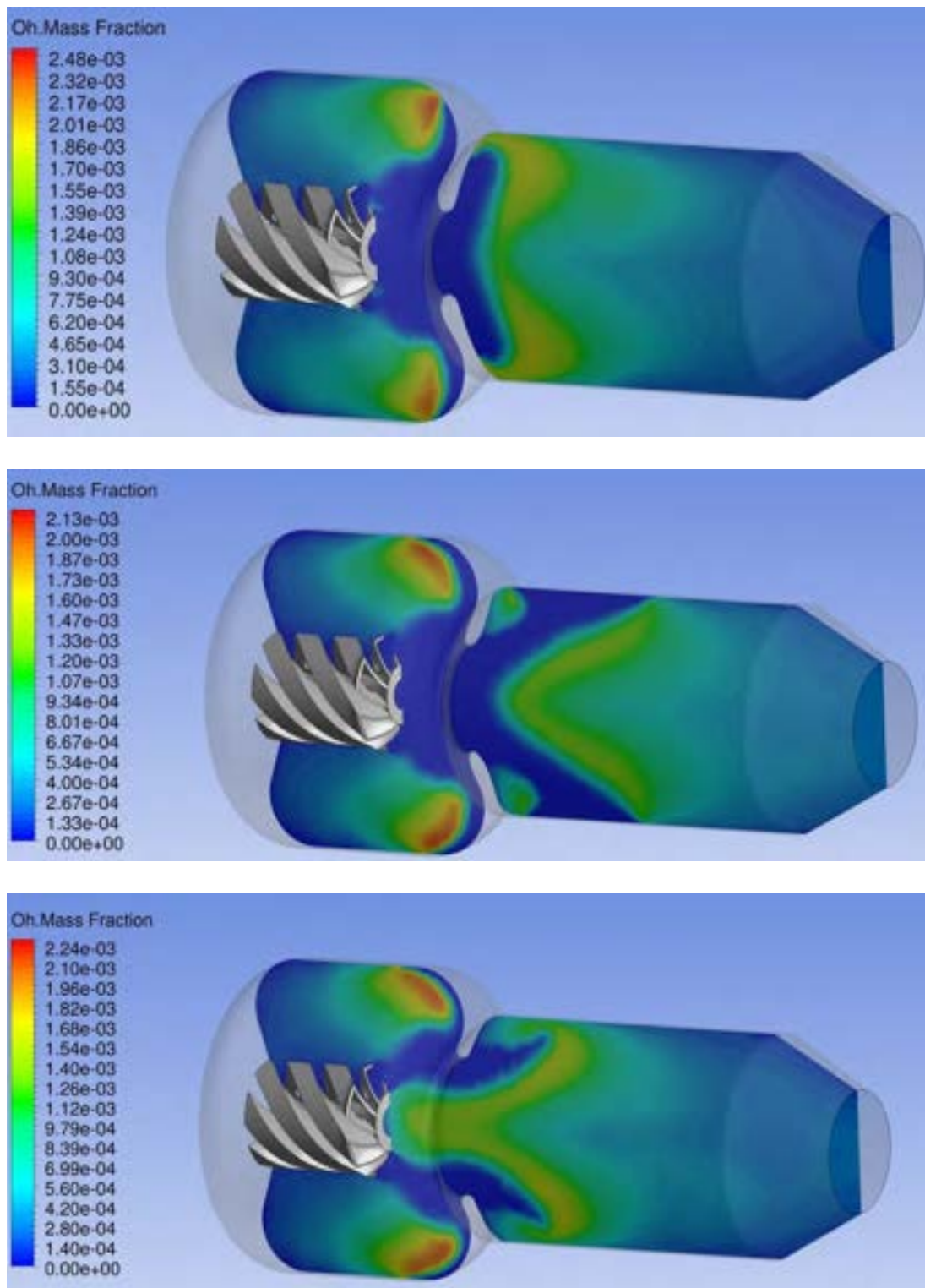


Figura 3.8. Mappa della frazione di massa di OH rappresentata su un piano longitudinale

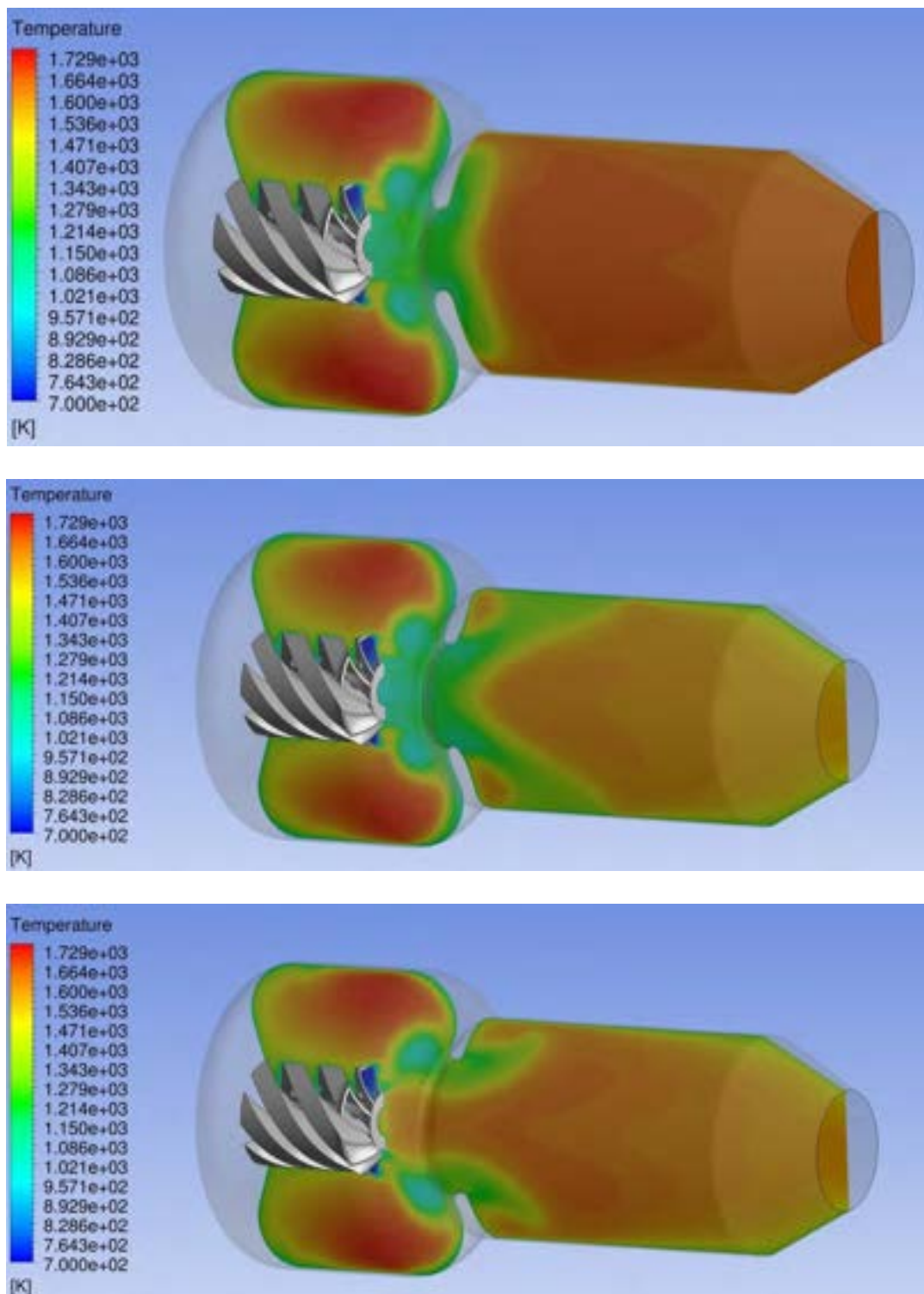


Figura 3.9. Mappa di temperatura rappresentata su un piano longitudinale

In presenza dei fori di alimentazione periferica della cavità, poi soppressi per i motivi suesposti, ancor prima di allocare l'intera area di passaggio per il ricircolo dei gas combusti (fori di Fig. 3.5), si erano ottenute percentuali di ricircolo del 16%. La nuova geometria poc'anzi citata avrebbe appunto lo scopo di conciliare questa più elevata percentuale con una sufficiente e profonda penetrazione della miscela che il vorticatore proietta nella cavità.

L'incremento di temperatura sembra essere in controtendenza con l'entità del ricircolo negli ultimi due casi, in realtà ciò è probabilmente attribuibile al fatto che la maggiore portata di gas combusti entrante nei vani del vortizzatore, si trova ad una temperatura inferiore.

Dall'esame delle figure 3.6-3.9 si può notare come la differente strozzatura determini, all'interno della camera di combustione, un diverso comportamento fluidodinamico. In particolare, nel caso di maggiore strozzatura, il vortice toroidale nella seconda camera prodotto dallo swirl, risulta maggiormente esteso radialmente. Inoltre al diminuire della strozzatura compare un vortice in prossimità della base, verso l'esterno, nella seconda camera di combustione. Nel caso di strozzatura minore, compare un ulteriore vortice immediatamente a valle dell'uscita del vortizzatore.

Tutto questo produce degli evidenti effetti sulla conformazione della fiamma, la quale risulta più schiacciata verso la base della camera di combustione nel caso di strozzatura maggiore, rispetto a quello intermedio. Nel caso di strozzatura minore, si può notare che la fiamma inizia già immediatamente all'uscita del vortizzatore, il che è dovuto al fatto che la maggiore apertura disponibile facilita il richiamo di gas caldi verso il vortizzatore stesso. Questo fenomeno è confermato anche dai campi del calore di reazione, della concentrazione di OH, di temperatura ed ha effetti anche sulle emissioni di CO. Infatti nel primo caso, nel quale la reazione di combustione è più intensa e si completa più a monte, si registra un emission index EICO di circa 0.5 g/kg fuel, mentre negli altri due, dove si protende per buona parte della camera, è di circa 5.

La CFD è comunemente impiegata nello studio tridimensionale della combustione in sistemi complessi. Se da un lato si riesce a trattare con buona accuratezza la complessità geometrica, tipicamente non si è capaci di trattare con la stessa accuratezza i fenomeni chimici coinvolti, se non con meccanismi che con poche reazioni, per ragioni di onere computazionale. In molti casi pertanto si riscontrano errori significativi associati all'uso di meccanismi ridotti, che portano ad errate previsioni, in particolare per quel che riguarda la formazione di specie inquinanti. La realtà è quindi molto più complessa e la decomposizione del combustibile con la conseguente formazione dei prodotti avviene in centinaia o migliaia di steps che coinvolgono più di mille specie, ognuna delle quali gioca il proprio fondamentale ruolo. Le reazioni e le specie che arricchiscono un meccanismo dettagliato sono quindi necessarie alla previsione di importanti fenomeni quali l'ignizione, la propagazione della fiamma e la formazioni di inquinanti (NO_x, CO, incombusti e soot).

Molti gruppi di ricerca a livello internazionale lavorano allo sviluppo di meccanismi dettagliati e che sono riportati in letteratura. È per questo necessario procedere con cautela nella scelta di quello che sia il più adatto alle condizioni specifiche. D'altro canto l'utilizzo di strumenti di simulazione basati sulla rappresentazione dei sistemi oggetto di studio con uno o più reattori ideali, tipo PSR (Perfectly stirred reactor, vedi appendice), che possono usufruire di una chimica dettagliata con tempi di calcolo molto ridotti, hanno il difetto di non tenere in debito conto la complessità fluidodinamica.

Negli ultimi anni si è venuta quindi affermando l'idea di unire le potenzialità di ciascuno dei due approcci, per sfruttarne contemporaneamente i relativi vantaggi. La tecnica consiste nel modellare il sistema con un certo numero di reattori, le cui caratteristiche e relative interconnessioni si possono desumere da una simulazione CFD preliminare non molto spinta. La risoluzione della rete di reattori (Reactor Network Analysis-RNA) comporta tempi di calcolo sicuramente modesti se paragonati ad una CFD realizzata a partire da una mesh con molte celle computazionali e meccanismi a più steps. Il primo passo nella procedura sopra sommariamente descritta consiste nel suddividere il volume da simulare in un certo numero prefissato di zone omogenee, ognuna delle quali verrà modellata con un reattore. Partendo dalla simulazione CFD la suddivisione può essere fatta per esempio per range di temperatura, di concentrazione di specie, etc. Ovviamente il risultato finale è tanto più accurato quanti più sono i reattori. Individuate topologicamente le zone è possibile anche valutarne i reciproci scambi di massa, dato che il campo di velocità è stato risolto dalla CFD.

Nel caso in esame è stato aumentato il numero dei reattori fino a quando non sono state più riscontrate differenze nei risultati. Il meccanismo di reazione utilizzato è il meccanismo completo GRI 3.0 che prevede 325 reazioni e 53 specie [9]. I livelli di temperatura, i campi delle specie principali e la morfologia della fiamma ottenuti per esempio con 1000 reattori, si dimostrano perfettamente in linea con le simulazioni mostrate in precedenza, basti confrontare per esempio le figure 3.8-centrale con la figura 3.10-superiore

per l'OH e la figura 3.9-centrale con la figura 3.10-superiore per la temperatura. Pertanto, l'utilizzo della tecnica RNA, che ha permesso di adottare una chimica molto più dettagliata, conferma i risultati e le considerazioni discusse sopra.

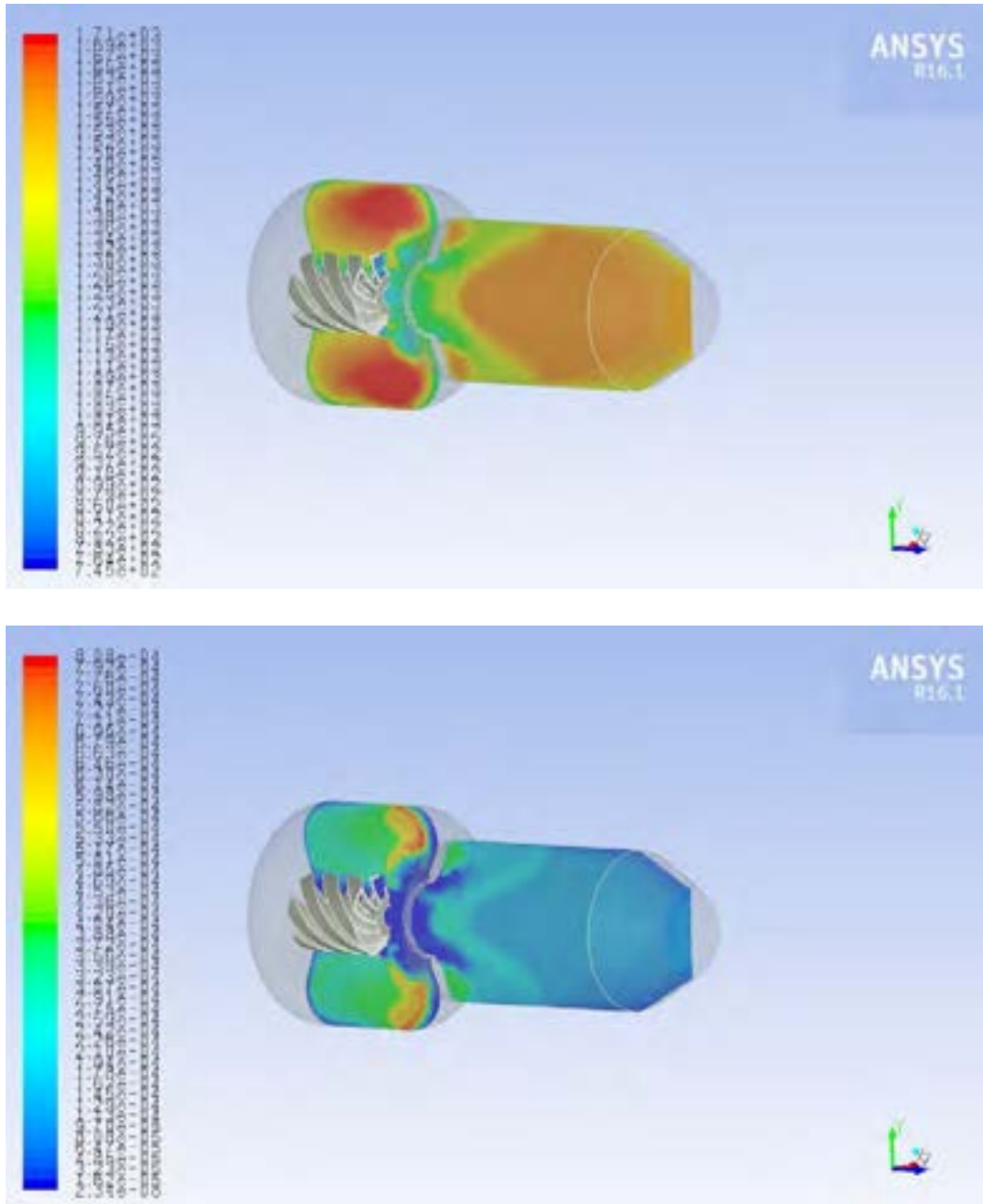


Figura 3.10. Mappa di temperatura ed OH su un piano longitudinale ricavate con la RNA.

4 Conclusioni

Nel funzionamento in regolazione a carico parziale, il regime di combustione volumetrica mette in condizione di poter bruciare miscele a basso rapporto di equivalenza, senza ottenere lo spegnimento della fiamma. Non esistono attualmente, se non su scala da laboratorio, applicazioni di questo tipo per quanto riguarda le turbine a gas, date le maggiori complicazioni che sussistono in questo caso.

Nella soluzione ideata, il sistema si compone di un vortizzatore elicoidale inserito in una doppia camera, di cui la prima serve all'intrappolamento di un vortice di ricircolo e la seconda per il completamento della

combustione. Nel presente lavoro si è cercato di migliorare l'accoppiamento fluidodinamico tra il vorticatore e la cavità ed il ricircolo interno dei gas combusti dalla camera verso il vorticatore.

L'aderenza tra i risultati della CFD reattiva e della RNA confermerebbe l'ottenimento di una zona di reazione sufficientemente diluita e distribuita e basse emissioni inquinanti.

5 Appendice

5.1 Modelli e equazioni CFD

In questa sezione è riportata una breve descrizione dei modelli numerici utilizzati.

Per la pressione è stato utilizzato l'algoritmo SIMPLE, che risulta appropriato per flussi incomprimibili, nel quale il campo di pressione è calcolato come termine correttivo nelle equazioni di continuità e quantità di moto:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_i u'_j}) \quad (5.2)$$

Dove u è la velocità media, u' la fluttuazione di velocità, p è la pressione statica, μ è la viscosità molecolare e ρ è la densità. Usando l'approccio di Boussinesq, gli stress di Reynolds possono essere scritti come:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (5.3)$$

Dove k è l'energia cinetica turbolenta e μ_t la viscosità turbolenta.

Per quanto riguarda la turbolenza è stato utilizzato il modello RNG k- ϵ [10], che rappresenta un miglioramento del semplice k- ϵ [11], garantendo rispetto a questo numerosi vantaggi, per quanto riguarda l'accuratezza delle predizioni di flussi rotanti ed in presenza di forti ricircoli come è nel caso in studio. Rispetto al modello standard RNG k- ϵ include un termine aggiuntivo nella equazione della dissipazione turbolenta ϵ , che migliora le performance del modello standard k- ϵ .

Le equazioni per k ed ϵ nel modello RNG sono le seguenti:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_\epsilon \mu_{eff} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} - R_\epsilon \quad (5.5)$$

Dove:

$$k = \overline{u'_i u'_i} / 2 \quad (5.6)$$

$$\epsilon = \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \quad (5.7)$$

$$G_k = -\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (5.8)$$

$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho Pr_t} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (5.9)$$

μ_{eff} è la somma della viscosità molecolare e turbolenta, G_k and G_b rappresentano la generazione della energia cinetica turbolenta dovuta al gradiente medio di velocità e ad effetti del galleggiamento rispettivamente, Y_M è legato agli effetti di comprimibilità e g_i è la componente dell'accelerazione di gravità.

$C_{1\varepsilon}=1.52$ $C_{2\varepsilon}=1.68$, $C_{3\varepsilon}$ è calcolato e esprime l'influenza del galleggiamento sulla dissipazione ε . α_k and α_ε sono gli inversi dei numeri di Prandtl per k ed ε .

La viscosità turbolenta si ricava dalla seguente equazione:

$$d\left(\frac{\rho^2 k}{\sqrt{\varepsilon \mu}}\right) = 1,72 \frac{\hat{v}}{\sqrt{\hat{v}^3 - 1 + C_v}} d\hat{v} \quad (5.10)$$

dove:

$$\hat{v} = \mu_{eff} / \mu \quad C_v = 100 \quad (5.11)$$

Per alti numeri di Reynolds diviene:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.12)$$

dove $C_\mu=0.0845$.

L'effetto dello swirl è tenuto in conto modificando la viscosità mediante la seguente equazione:

$$\mu_t = \mu_{t0} f\left(\alpha_s, \Omega, \frac{k}{\varepsilon}\right) \quad (5.13)$$

dove μ_{t0} è la viscosità in assenza di swirl, Ω rappresenta il numero di swirl e α_s dipende dalla intensità dello swirl. Gli inversi dei numeri di Prandtl α_k e α_ε sono ricavati da:

$$\left| \frac{\alpha - 1,3929}{\alpha_0 - 1,3929} \right|^{0.6321} \left| \frac{\alpha + 2,3929}{\alpha_0 + 2,3929} \right|^{0.3679} = \frac{\mu}{\mu_{eff}} \quad (5.14)$$

con $\alpha_0=1.0$.

La differenza principale con il modello standard è il termine extra:

$$R_\varepsilon = \frac{C_\mu \rho \eta^3 \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right)}{1 + \beta \eta^3} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (5.15)$$

$\eta = Sk/\varepsilon$, $\eta_0=4.38$ $\beta=0.012$.

S è il modulo del tensore degli sforzi:

$$S = \sqrt{S_{ij} S_{ij}} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (5.16)$$

L'equazione per le specie è:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_k) = \frac{\partial J_j^k}{\partial x_j} + R_k \quad (5.17)$$

dove Y_k è la frazione di massa della specie k -esima, J_{jk} è il flusso diffusivo turbolento:

$$J_j^k = - \left(\rho D_k + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (5.18)$$

dove Sc_t è il numero di Schmidt turbolento, D_k il coefficiente di diffusività molecolare, R_k è il termine sorgente dovuto alle reazioni.

L'equazione per l'energia totale E è:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} [u_i (\rho E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_j} + u_i (\tau_{ij})_{eff} \right) + S \quad (5.19)$$

Dove T è la temperature, S un termine sorgente che tiene conto delle reazioni e dello scambio radiativo, τ_{ij} è il tensore degli sforzi e k_{eff} la conducibilità termica effettiva:

$$(\tau_{ij})_{eff} = \mu_{eff} \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (5.20)$$

$$k_{eff} = \alpha c_p \mu_{eff} \quad (5.21)$$

Per quanto riguarda la modellistica chimica, è stato utilizzato il modello EDC (Eddy Dissipation Concept) [12] unitamente allo schema cinetico Smooke (46 reazioni e 17 specie chimiche) [13].

La combustione MILD è un processo che avviene per bassi numeri di Damköhler (tempo di mescolamento/tempo di reazione), per i quali i tempi di reazione sono bassi se paragonati ai tempi di mescolamento, rendendo perciò necessario utilizzare dei meccanismi di tipo 'finite rate', nei quali la velocità di reazione è importante.

Inoltre con il modello EDC è possibile implementare schemi cinetici dettagliati.

Il modello assume che le reazioni chimiche avvengano alle stesse scale della dissipazione turbolenta, chiamate 'strutture fini' (fine structures), alle quali i reagenti vengono miscelati a livello molecolare. Queste strutture fini hanno lo stesso ordine di grandezza della scala di Kolmogorov:

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \mathcal{E}}{k^2} \right)^{1/4} \quad (5.22)$$

$$C_\xi = 2.1377,$$

Con un volume uguale a ξ^{*3} . I tempi caratteristici di reazione sono:

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\mathcal{E}} \right)^{1/2} \quad (5.23)$$

dove $C_\tau = 0.4082$ e la zona di reazione è modellata come un PSR.

Il termine sorgente R_k nelle equazioni per le specie si ricava da:

$$R_k = \frac{\rho (\xi^*)^2}{\tau^* [1 - (\xi^*)^3]} (Y_k^* - Y_i) \quad (5.24)$$

dove Y_k^* è la frazione di massa dopo la reazione.

Per lo scambio termico radiativo è stato utilizzato il modello P1 [14, 15], e il coefficiente di assorbimento è stato calcolato mediante il modello 'weighted sum of gray gas model' (WSGGM) [16, 17].

Il modello P1 prevede il calcolo di una sola equazione, essendo quindi meno oneroso computazionalmente rispetto ad altri modelli.

Si basa sull'idea che lo scambio radiativo può essere calcolato esprimendo l'intensità di radiazione in una serie di funzioni angolari e spaziali. Se si considerano i primi quattro termini, il flusso radiativo si può diventa:

$$q_r = - \frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \cdot \nabla G \quad (5.25)$$

dove a è il coefficient di assorbimento, G è la radiazione incidente, σ_s il coefficiente di scattering e C è un coefficiente legato all'anisotropia dello scattering.

Definendo:

$$\Gamma = \frac{1}{(3(a + \sigma_s) - C\sigma_s)} \quad (5.26)$$

L'equazione per q_r diventa:

$$q_r = -\Gamma \cdot \nabla G \quad (5.27)$$

L'equazione di trasporto per G is:

$$\nabla(\Gamma \cdot \nabla G) - aG + 4a\sigma T^4 = 0 \quad (5.28)$$

dove σ è la costante di Stefan-Boltzmann.

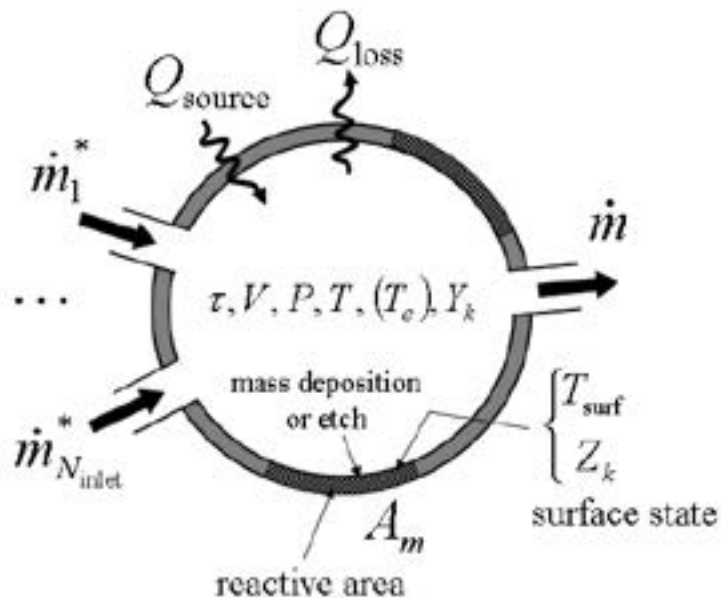
Combining the previous equations si ottiene:

$$-\nabla q_r = aG - 4a\sigma T^4 \quad (5.29)$$

Che rappresenta il termine sorgente nella equazione per l'energia.

5.2 Perfectly Stirred Reactor

L'ipotesi alla base di un reattore ideale PSR è che il suo contenuto sia uniforme a causa della elevata diffusività delle specie o del miscelamento turbolento. In altre parole il tasso di conversione dei reagenti in prodotti è controllato dal tasso di reazione chimica e non dal miscelamento. Quindi tutti i fenomeni coinvolti sono regolati dalla cinetica chimica ed il reattore può essere descritto da grandezze medie. Il principale vantaggio delle assunzioni fatte risiede nel modesto costo computazionale. Oltre all'assunzione di miscelamento infinitamente veloce sono necessarie altre ipotesi. In particolare il flusso attraverso il reattore deve essere caratterizzato da un tempo di residenza nominale, che può essere dedotto dalle portate e dal volume. La rappresentazione concettuale è riportata in figura. È possibile risolvere anche sistemi in regime transitorio, adiabatici e non. Le equazioni che regolano il reattore sono riportate di seguito:



Perfectly stirred reactor

Conservazione della massa

$$\frac{d}{dt}(\rho V)^{(j)} = \sum_{i=1}^{N_{inlet}^{(j)}} \dot{m}_i^{*(j)} + \sum_{r=1}^{N_{PSR}} \dot{m}^{(r)} R_{rj} - \dot{m}^{(j)} + \sum_{m=1}^M A_m^{(j)} \sum_{k=1}^{K_g} \dot{s}_{k,m}^{(j)} W_k \quad j = 1, N_{PSR} \quad (5.30)$$

Conservazione delle specie

$$\begin{aligned} (\rho_k V)^{(j)} \frac{dY_k^{(j)}}{dt} = & \sum_{i=1}^{N_{inlet}^{(j)}} \dot{m}_i^{*(j)} (Y_{k,i}^* - Y_k) + \sum_{r=1}^{N_{PSR}} \dot{m}^{(r)} R_{rj} (Y_k^{(r)} - Y_k^{(j)}) \\ & - Y_k^{(j)} \sum_{m=1}^M A_m^{(j)} \sum_{k=1}^{K_g} \dot{s}_{k,m}^{(j)} W_k + (\dot{\omega}_k V)^{(j)} W_k + \sum_{m=1}^M A_m^{(j)} \dot{s}_{k,m}^{(j)} W_k \end{aligned} \quad (5.31)$$

Il tempo di residenza è valutato come:

$$\tau = \frac{\rho V}{\left[\sum_{i=1}^{N_{inlet}^{(j)}} \dot{m}_i^{*(j)} + \sum_{r=1}^{N_{PSR}} \dot{m}^{(r)} R_{rj} \right]} \quad (5.32)$$

Energia

$$\begin{aligned} (\rho V)^{(j)} \left[\bar{c}_p (1 - Y_e) \frac{dT}{dt} + Y_e c_{pe} \frac{dT_e}{dt} \right]^{(j)} = & \sum_{i=1}^{N_{inlet}^{(j)}} \dot{m}_i^{(j)} \sum_{k=1}^{K_g} Y_{k,i}^* (h_{k,i}^* - h_k)^{(j)} + \sum_{r=1}^{N_{PSR}} \dot{m}^{(r)} R_{rj} \sum_{k=1}^{K_g} Y_k^{(r)} (h_k^{(r)} - h_k^{(j)}) \\ & - V^{(j)} \sum_{k=1}^{K_g} (h_k \dot{\omega}_k)^{(j)} W_k - \sum_{m=1}^M A_m^{(j)} \sum_{k=1}^{K_{tot}} (h_k \dot{s}_k)^{(j)} W_k - Q_{loss}^{(j)} + Q_{source}^{(j)} + V^{(j)} \frac{dP^{(j)}}{dt} \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\bar{c}_p = \sum_{k=1; k \neq e}^{K_g} Y_k c_{pk} \quad (5.34)$$

Simbologia

A	Area
a	Superficie interna
c_p	Calore specifico
F	Forza d'attrito
h	Entalpia
m	Portata massica
P	Pressione
R	Fattore di ricircolo
s	Tasso di produzione superficiale
T	Temperatura
u	Velocità
V	Volume
W	Peso molecolare
Y	Frazione massica
ρ	Densità
ω	Tasso di produzione

6 Riferimenti bibliografici

1. A. Cavaliere, M. De Joannon. Mild combustion. Progress in Energy and Combustion Science, 30:329-366, 2004.
2. J. A. Wunning, J. G. Wunning. Flameless oxidation to reduce thermal NO formation. Prog. Energy Combust Sci., 23:81-94, 1997.
3. A. E. E. Khalil, V. K. Arghode, A. K. Gupta. Novel mixing for ultra-high thermal intensity distributed combustion. Applied Energy, 105: 327-334, 2013.
4. K.K. Hsu, C. Carter, V. Katta, W. Roquemore, "Characteristics of Combustion Instability Associated with Trapped-Vortex Burner", 37th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA 99-0488, January 11-14 / 1999, Reno, NV.
5. R.C. Steele, "Trapped Vortex Combustion", senza indicazioni tipografiche.
6. D.T. Shouse, "Trapped Vortex Combustion Technology", slides projected at MITE Workshop, 4-5 Dec. 2000.
7. G.J. Sturgess, J. Zelina, D.T. Shouse, W.M. Roquemore, "Emissions Reduction Technologies for Military Gas Turbine Engines", Journal of Propulsion and Power, vol. 21 (2005), issue 2, pp. 193-217.
8. J. Haynes, D. Micka, B. Hojnacki, C. Russel, J. Lipinski, B. Shome, M. Huffman, "Trapped Vortex Combustor Performance for Heavy-Duty Gas Turbines", ASME GT2008-50134, June 9-13, 2008.
9. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
10. V. Yakhot, S. A. Orszag. Renormalization group analysis of turbulence: I. Basic theory. Journal of Scientific Computing, 1(1):1-51, 1986.
11. B. E. Launder, D. B. Spalding. Lectures in Mathematical Models of Turbulence. Academic Press, London, England, 1972.
12. B. F. Magnussen. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. Nineteenth AIAA Meeting, St. Louis, 1981.
13. M. D. Smooke, I. K. Puri, K. Seshadri. A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air. Proc. Comb. Inst., 21:1783-1792, 1986.
14. P. Cheng. Two-dimensional radiating gas flow by a moment method. AIAA Journal, 2:1662-1664, 1964.

15. R. Siegel, J. R. Howell. Thermal Radiation Heat Transfer. Hemisphere Publishing Corporation, Washington DC, 1992.
16. A. Coppalle, P. Vervisch. The total emissivities of high-temperature flames. Combust. Flame, 49:101-108, 1983.
17. T. F. Smith, Z. F. Shen, J. N. Friedman. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model. J. Heat Transfer, 104:602-608, 1982.