



Ricerca di Sistema elettrico

Simulazioni CFD di un combustore convenzionale per turbogas in regime di ossicombustione

A. Di Nardo, G. Calchetti, M. Rufoloni

SIMULAZIONI CFD DI UN COMBUSTORE CONVENZIONALE PER TURBOGAS, IN REGIME DI OSSICOMBUSTIONE

A. Di Nardo, G. Calchetti, M. Rufoloni (ENEA)

Settembre 2014

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico – ENEA

Piano Annuale di Realizzazione 2013

Area: PRODUZIONE DI ENERGIA ELETTRICA E PROTEZIONE DELL'AMBIENTE

Progetto: CATTURA E SEQUESTRO DELLA CO₂ PRODotta DA COMBUSTIBILI FOSSILI

PARTE A

Obiettivo b2: Simulazioni CFD con metodi RANS

Responsabile del Progetto: Ing. Stefano Giammartini, ENEA

Indice

SOMMARIO.....	4
1 INTRODUZIONE.....	5
2 DESCRIZIONE ATTIVITA'.....	5
3 IL COMBUSTORE.....	6
4 LE SIMULAZIONI.....	6
4.1 CALCOLI DI CINETICA CHIMICA.....	7
4.2 CALCOLI CFD.....	13
5 CONCLUSIONI.....	17
6 RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI.....	18

Sommario

Vengono qui illustrati i risultati di uno studio condotto su un bruciatore convenzionale per turbogas. Il bruciatore è stato progettato per funzionare con miscele classiche metano/aria. Qui ne viene simulato il comportamento in modalità ossicombustione (oxy-combustion). Sono state effettuate simulazioni CFD e Calcoli Cinetici, determinandone il comportamento in diverse condizioni operative. L'indicazione che se ne può ricavare è che l'applicazione della oxy-combustion è possibile. Il problema è che le temperature all'interno della camera di combustione tendono ad assumere valori molto elevati, essendo quindi necessario mettere in atto accorgimenti al fine di evitare di danneggiare le palette della turbina.

1 Introduzione

Il carbone ha svolto finora, nel contesto internazionale, un ruolo chiave nelle politiche energetiche dei vari paesi, quasi esclusivamente per la produzione di energia elettrica. La situazione si avvia ad un sostanziale cambiamento nei prossimi anni e decenni per l'esigenza di abbattere drasticamente le emissioni di anidride carbonica per contenere e controllare le alterazioni climatiche. Comunque la transizione verso una economia non più basata sul carbonio non sarà breve, e comunque impone di affrontare il tema dell'impiego sostenibile dei fossili, che verranno ancora ampiamente utilizzati nei prossimi decenni. Per il conseguimento degli obiettivi climatici, sempre più condivisi a livello globale, la UE punta a una quasi totale decarbonizzazione dei processi di generazione elettrica, con il ricorso massiccio a efficienza energetica e fonti rinnovabili, e l'adozione di tecnologie di cattura e stoccaggio della CO₂ per gli impianti a fossili. E' necessario quindi un grande sforzo di ricerca sui sistemi di cattura e sequestro dell'anidride carbonica, per evitare di incidere negativamente sulle emissioni di CO₂ in atmosfera.

Le attività relative al presente rapporto tecnico sono proprio incentrate sulla problematica della cattura della CO₂ attraverso l'ossicombustione. Il lavoro è relativo all'Obiettivo C del Progetto B.2 CATTURA E SEQUESTRO DELLA CO₂ PRODOTTA DA COMBUSTIBILI FOSSILI facente parte dell' Area PRODUZIONE DI ENERGIA ELETTRICA E PROTEZIONE DELL'AMBIENTE dell'Accordo di programma ENEA-MISE. In particolare trattasi del punto B2.2 del PAR2013.

2 Descrizione attività

I combustibili fossili, come ad esempio il gas naturale, hanno caratteristiche di efficienza e convenienza. Il gas naturale è utilizzato, come sorgente di energia, nel riscaldamento, nell'industria, nelle centrali elettriche, solo per citare alcuni esempi. Tuttavia uno dei maggiori problemi nell'utilizzo dei combustibili fossili, in generale, è la produzione di sostanze inquinanti. La combustione di gas naturale in aria produce ossidi di azoto che impattano sulla qualità dell'aria. L'emissione di NO_x aumenta rapidamente all'aumentare della temperatura. Inoltre durante il processo di combustione vengono prodotte grandi quantità di anidride carbonica che contribuisce, aumentando l'effetto serra, a fenomeni di cambiamento del clima su larga scala. I cambiamenti climatici globali sono uno dei problemi più grandi che l'umanità deve affrontare. Infatti il contributo maggiore ai cambiamenti su larga scala è dovuto per la maggior parte ai gas serra e tra questi principalmente alla CO₂. Per contribuire alla riduzione della emissione di anidride carbonica, sono stati e sono attualmente allo studio diversi approcci come ad esempio la cattura in fase di pre-combustione, di post-combustione e la combustione oxy-fuel. Tra queste, la combustione di idrocarburi in presenza di atmosfera ricca di ossigeno ed anidride carbonica (cioè in condizioni di oxy-combustione) sta suscitando un crescente interesse in relazione alla problematica della cattura e sequestro della CO₂ (CCS: Carbon Capture and Storage), anche perché può essere adottata sia su impianti già esistenti che su impianti di nuova realizzazione. La cattura della CO₂ è resa più agevole dal fatto che i prodotti della combustione sono, praticamente, solamente H₂O e CO₂ (non vengono prodotti NO_x in quanto non c'è la presenza di azoto). In questo modo la CO₂ può essere catturata per condensazione dell'acqua. Il processo di oxy-combustione prevede che il combustibile venga fatto reagire con ossigeno puro, in aggiunta ad una frazione dei gas di scarico fatta ricircolare, oppure in aggiunta a vapore al fine di controllare la temperatura all'interno della camera di combustione. La combustione in atmosfera ricca di ossigeno ed anidride carbonica prevede che si operi con concentrazioni di O₂ intorno al 30% (in aria siamo al 21%). L'alta concentrazione di CO₂ ed H₂O contribuiscono poi ad un maggiore scambio radiativo ed ad una omogeneizzazione della temperatura all'interno della camera di combustione. Lo scopo dello studio riportato in questo rapporto è quello di indagare il comportamento di un combustore per turbogas convenzionale, in modalità di oxy-combustione.

3 Il Combustore

Il combustore oggetto di indagine è stato originariamente progettato per funzionare in modalità di combustione ‘classica’, cioè in aria. Ha una potenza termica di 300 kW e sostanzialmente è formato da un “outer flame tube” che racchiude il volume ricavato per il passaggio dell’aria. All’interno di questo è disposto “l’inner flame tube”, che contiene effettivamente la fiamma. Nella parte finale dell’inner flame tube si trovano nove fori di diluizione allo scopo di diminuire la temperatura di uscita dei fumi in modo da non arrecare danno alle pale della turbina che vengono investite dal flusso di gas caldi e abbassare il valore delle emissioni di CO e NO_x completando le reazioni di ossidazione. L’alimentazione del combustibile avviene lungo due linee differenti: gli ugelli della linea pilot sono coassiali alla camera di combustione e introducono il combustibile nella primary zone, mentre la linea main introduce il combustibile in una camera toroidale palettata prima dell’ingresso nella secondary zone. Qui si miscelano l’aria e il combustibile proveniente dal condotto main. L’aria entra nel combustore in controcorrente rispetto al flusso dei gas di combustione attraversando l’intercapedine tra outer e inner flame tube. Parte dell’aria in ingresso viene deviata verso i fori di diluizione, mentre la rimanente parte percorre tutta la camera di combustione esternamente all’inner flame tube fino ad alimentare il pilota ed il flusso principale. Nella fig.1 è mostrata una vista di insieme del combustore.

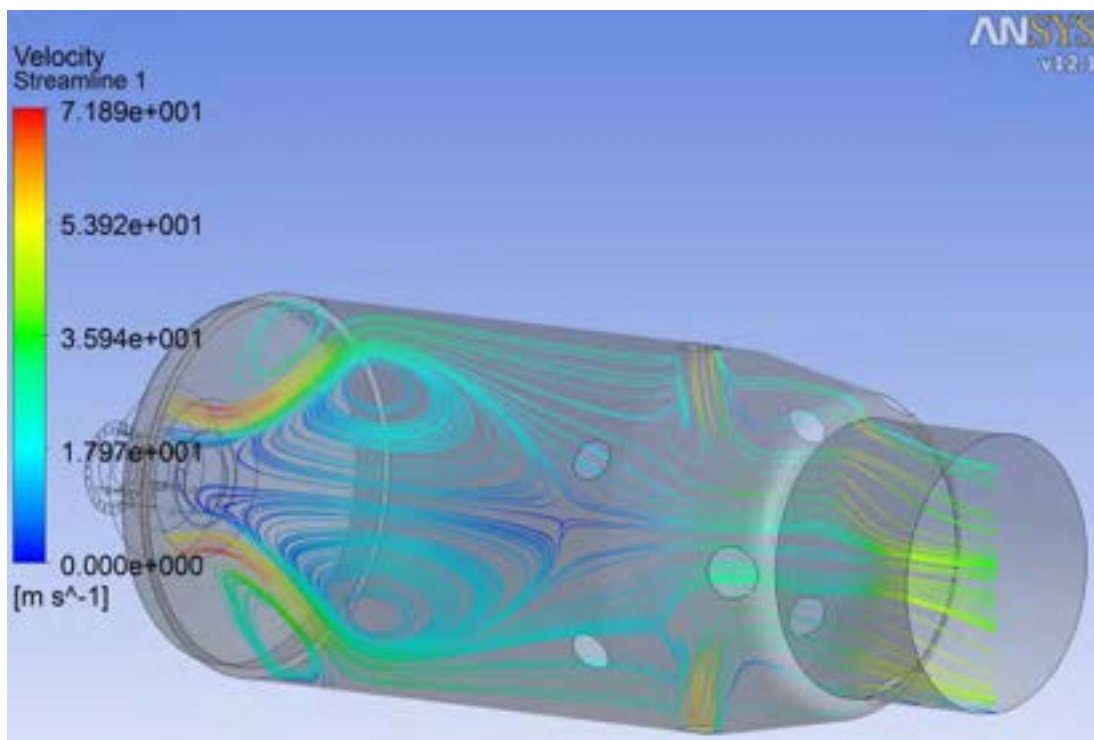


Figura 1. Il combustore

4 Le Simulazioni

Le simulazioni CFD sono state effettuate mediante il codice di calcolo ANSYS-FLUENT su una griglia di calcolo di tipo ibrido: in prossimità del pilota e vicino alle pareti della camera di combustione è di tipo tetraedrico, mentre nella parte centrale è di tipo esaedrico. In totale abbiamo una griglia di circa 1.300.000 celle. In fig.2 si mostra una vista di insieme di tale griglia. Il modello di turbolenza adottato è il k-ε, mentre per le reazioni chimiche è stato adottato il modello EDC congiuntamente ad uno schema cinetico ridotto (SMOKE), consistente in 17 specie chimiche e 46 reazioni. Questo ultimo punto, relativo alla scelta dello

schema cinetico, merita un approfondimento particolare e nel prosieguo del rapporto illustreremo le modalità che hanno portato alla scelta dello schema SMOOKE. La pressione operativa è di 409025 Pa.

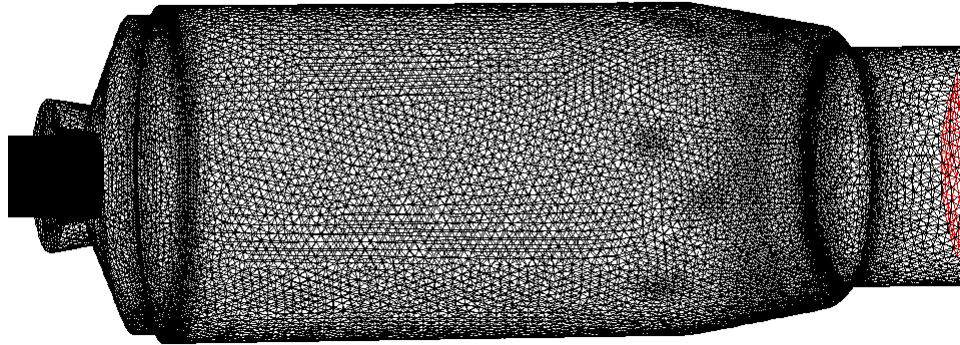


Figura 2. Griglia di calcolo

4.1 Calcoli di Cinetica Chimica

La oxy-combustione è una tecnica molto promettente per quanto riguarda la problematica CCS e le simulazioni CFD possono darci preziose indicazioni circa il comportamento di tale regime di combustione. Tuttavia i calcoli CFD di combustori industriali richiedono notevoli risorse computazionali. Per tale motivo spesso si ricorre a modelli di combustione molto semplificati, come ad esempio il modello “mixed-is-burned”, nei quali si presuppone una cinetica infinitamente veloce, oppure si assume una situazione di equilibrio chimico. Approcci di questo tipo generalmente sono utilizzati per una previsione dei campi termici e per la stima delle specie chimiche principali, come O_2 e CO_2 . Per contro questi modelli così semplificati spesso falliscono nel calcolare specie importanti, come ad esempio il CO e i radicali.

Una alternativa a questo tipo di approccio è quella di utilizzare una cinetica “finite-rate”, utilizzando schemi cinetici globali o ridotti. In ogni caso questi schemi semplificati possono essere usati in relazione alle specie principali (solo quelle contenute esplicitamente nel meccanismo scelto) ed alla temperatura. C’è poi da considerare il fatto che tali schemi, pensati per la combustione convenzionale, non possono essere applicati in regime di oxy-combustione senza prevedere modifiche.

La sostituzione dell’ N_2 con la CO_2 , che è una specie chimicamente reattiva almeno ad alte temperature, cambia il contributo di alcune reazioni elementari nel processo di combustione. Questo rende necessario modificare e testare gli schemi per verificare la loro applicabilità in condizioni oxy.

In questa fase del lavoro ci siamo quindi concentrati nello studio di alcuni schemi cinetici, al fine di individuare uno schema semplificato (ma non troppo) da poter utilizzare nelle simulazioni CFD.

Questi meccanismi sono stati messi a confronto con alcuni schemi cinetici dettagliati.

I calcoli cinetici sono stati effettuati ipotizzando un modello Plug Flow Reactor (PFR) isoterma.

I meccanismi semplificati individuati sono:

* Westbrook and Dryer (WD) [Westbrook, C. K.; Dryer, F. L. *Combust. Sci. Technol.* 1981, 27, 31–44] modificato come indicato in J.Andersen et alii [Jimmy Andersen, Christian Lund Rasmussen, Trine Giselsson, and Peter Glarborg *Energy & Fuels* 2009, 23, 1379–1389] ;

*Jones and Lindstedt (JL) [Jones, W. P.; Lindstedt, R. P. *Combust. Flame* 1988, 73, 233–249] modificato come indicato in Lin Wang et alii [Lin Wang, Zhaohui Liu, Sheng Chen, and Chuguang Zheng. *Combust. Sci. Technol.*, 184: 1–18, 2012]

*SMOOKE [Smooke, M.D.; Puri, I.K.; Seshadri, K. Proc. Combust. Inst., 21, (1986) 1783-1792].

Gli schemi dettagliati sono:

*Meccanismo cinetico dettagliato proposto da Glarborg e Bentzen (G&B)[Glarborg, P.; Bentzen, L. L. B. *Energy Fuels* 2007, 22, 291–296.] che, dalle indicazioni della letteratura, fornisce un buon accordo con dati sperimentali acquisiti in condizioni di oxy-combustione

*GRI-MECH 3.0 [Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Q, in http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/]

*Schema cinetico dettagliato (DKM), sviluppato e validato per idrocarburi fino a 16 atomi di carbonio [Ranzi, E., T. Faravelli, A. Frassoldati, and S. Granata, *Wide range kinetic modeling study of the pyrolysis, partial oxydation and combustion of heavy n-alkanes*, Industrial and Engineering Chemistry Research, 2005, 44, p. 5170-5183],

Per quanto riguarda i criteri relativi alla modifica degli schemi semplificati WD e JL si rimanda alla bibliografia citata [J.Anderson et al.], [Lin Wang et al.]

In tabella 1 riportiamo lo schema WD modificato .

Tabella 1.

Modified Multi Step Methane Combustion Mechanisms with Kinetic Rate Data - units in cm, s, cal, mol						
reaction number	reactions	A	β	E_a	reaction orders	
WD1	$\text{CH}_4 + 1.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2\text{O}$	1.59×10^{17}	0	47.8×10^3	$[\text{CH}_4]^{0.7}[\text{O}_2]^{0.8}$	
WD2(modified)	$\text{CO} + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	3.98×10^6	0	10.0×10^3	$[\text{CO}][\text{O}_2]^{0.25}[\text{H}_2\text{O}]^{0.5}$	
WD3(modified)	$\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + 0.5 \text{O}_2$	6.16×10^{11}	-0.97	78.4×10^3	$[\text{CO}_2][[\text{H}_2\text{O}]^{0.1}[\text{O}_2]^{-0.25}]$	

Nella tabella 2 riportiamo lo schema JL modificato. Le reazioni sono quelle indicate con C1, C2, C4, C8 e sono le seguenti:

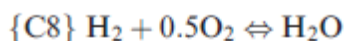
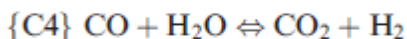
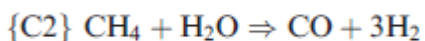
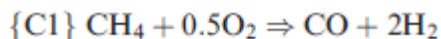


Tabella 2.

Different global combustion mechanisms with kinetic rate data

No.	A	β	E_a/R	Reaction orders	Ref.
{C1}	4.40×10^{11}	0	15095	$[\text{CH}_4]^{0.5}[\text{O}_2]^{1.25}$	Jones and Lidstedt, 1988
{C2}	3.00×10^8	0	15095	$[\text{CH}_4][\text{O}_2]$	Jones and Lidstedt, 1988
{C3}	5.03×10^{11}	0	24056	$[\text{CH}_4]^{0.7}[\text{O}_2]^{0.8}$	Westbrook and Dryer, 1981
{C4 _r }	2.75×10^9	0	10065	$[\text{CO}][\text{H}_2\text{O}]$	Jones and Lidstedt, 1988
{C4 _r }	6.71×10^{10}	0	13688	$[\text{CO}_2][\text{H}_2]$	Calculated in present work
{C5 _r }	2.24×10^{12}	0	20484	$[\text{CO}][\text{O}_2]^{0.25}[\text{H}_2\text{O}]^{0.5}$	Westbrook and Dryer, 1981
{C5 _r }	5.00×10^8	0	20484	$[\text{CO}_2]$	Westbrook and Dryer, 1981
{C6 _r }	2.24×10^6	0	5032	$[\text{CO}][\text{O}_2]^{0.25}[\text{H}_2\text{O}]^{0.5}$	Andersen et al., 2009
{C6 _r }	1.10×10^{13}	-0.97	39452	$[\text{CO}][\text{O}_2]^{-0.25}[\text{H}_2\text{O}]^{0.5}$	Andersen et al., 2009
{C7 _r }	5.69×10^{11}	0	17609	$[[\text{H}_2][\text{O}_2]^{0.5}$	Marinov et al., 1996
{C7 _r }	2.51×10^{14}	0	47859	$[\text{H}_2\text{O}]$	Calculated in present work
{C8 _r }	7.91×10^{10}	0	17609	$[[\text{H}_2][\text{O}_2]^{0.5}$	Marinov et al., 1996
{C8 _r }	3.48×10^{13}	0	47907	$[\text{H}_2\text{O}]$	Calculated in present work

Units in kmol, m³, K, s, KJ.

Dove necessario è stato riportato tutto alle unità di misura utilizzate dal modello PFR.

Nella tabella 3 è mostrato il meccanismo SMOOKE.

Per quanto riguarda le simulazioni cinetiche, come si è detto in precedenza, sono state effettuate prendendo in considerazione un modello di tipo Plug Flow Reactor (PFR) isoterma. Tenendo conto delle temperature che mediamente si ottengono all'interno della camera di combustione del bruciatore, abbiamo studiato il comportamento alla temperatura di 1600K. Per quanto riguarda la percentuale di ossigeno abbiamo considerato due situazioni: 20% e 30% in volume. Il rapporto di equivalenza è stato fissato su tre valori: $\Phi=0.8$, $\Phi=1.0$, $\Phi=1.2$.

Le prove effettuate sono riassunte nel seguente schema.

caso	Φ	%O ₂	T
1	0.8	30	1600
2	1.0	30	1600
3	1.2	30	1600
4	0.8	20	1600
5	1.0	20	1600
6	1.2	20	1600

Nelle figure 3 e 4 riportiamo una serie di grafici che illustrano i risultati ottenuti dalle simulazioni PFR. In particolare è riportato l'andamento della frazione molare (%) in funzione del tempo di residenza (s).

Tabella 3.

SPECIES			
CH4 CH3 H O2 HO2 H2 O OH H2O CH2O HCO CO CO2 CH3O N2 H2O2 N			
REACTIONS	CAL/MOLE		
!Units are moles, cubic centimeters, seconds, Kelvins, cal/mole.			
CH ₄ +M=CH ₃ +H+M	1.E+17	0.00	86000.0
CH ₄ +O ₂ =CH ₃ +HO ₂	7.9E+13	0.00	56000.0
CH ₄ +H=CH ₃ +H ₂	2.2E+04	3.00	8750.0
CH ₄ +O=CH ₃ +OH	1.6E+06	2.36	7400.0
CH ₄ +OH=CH ₃ +H ₂ O	1.6E+06	2.10	2460.0
CH ₃ O+OH=HCO+H ₂ O	7.53E+12	0.00	167.0
CH ₃ O+H=HCO+H ₂	3.31E+14	0.00	10500.0
CH ₃ O+M=HCO+H+M	3.31E+16	0.00	81000.0
CH ₃ O+O=HCO+OH	1.81E+13	0.00	3082.0
HCO+OH=CO+H ₂ O	5.E+12	0.00	0.0
HCO+M=H+CO+M	1.6E+14	0.00	14700.0
HCO+H=CO+H ₂	4.E+13	0.00	0.0
HCO+O=OH+CO	1.E+13	0.00	0.0
HCO+O ₂ =HO ₂ +CO	3.E+12	0.00	0.0
CO+O+M=CO ₂ +M	3.2E+13	0.00	-4200.0
CO+OH=CO ₂ +H	1.51E+07	1.30	-758.0
CO+O ₂ =CO ₂ +O	1.6E+13	0.00	41000.0
CH ₃ O+O=CH ₂ O+O	7.E+12	0.00	25652.0
CH ₃ O+M=CH ₂ O+H+M	2.4E+13	0.00	28812.0
CH ₃ O+H=CH ₂ O+H ₂	2.E+13	0.00	0.0
CH ₃ O+OH=CH ₂ O+H ₂ O	1.E+13	0.00	0.0
CH ₃ O+O=CH ₂ O+OH	1.E+13	0.00	0.0
CH ₃ O+O ₂ =CH ₂ O+HO ₂	6.3E+10	0.00	2600.0
CH ₃ O+O=CH ₂ O+OH	5.2E+13	0.00	34574.0
CH ₃ O+O=CH ₂ O+H	6.8E+13	0.00	0.0
CH ₃ +OH=CH ₂ O+H ₂	7.5E+12	0.00	0.0
HO ₂ +CO=CO ₂ +OH	5.8E+13	0.00	22934.0
H ₂ +O ₂ =2OH	1.7E+13	0.00	47780.0
OH+H ₂ =H ₂ O+H	1.17E+09	1.30	3626.0
H+O ₂ =OH+O	2.2E+14	0.00	16800.0
O+H ₂ =OH+H	1.8E+10	1.00	8826.0
H+O ₂ +M=HO ₂ +M	2.1E+18	-1.00	0.0
H ₂ O/21./ H ₂ /3.3/ N ₂ /0./ O ₂ /0./			
H+O ₂ +O ₂ =HO ₂ +O ₂	6.7E+19	-1.42	0.0
H+O ₂ +N ₂ =HO ₂ +N ₂	6.7E+19	-1.42	0.0
OH+HO ₂ =H ₂ O+O ₂	5.E+13	0.00	1000.0
H+HO ₂ =2OH	2.5E+14	0.00	1900.0
O+HO ₂ =O ₂ +OH	4.8E+13	0.00	1000.0
2OH=O+H ₂ O	6.E+08	1.30	0.0
H ₂ +M=H+H+M	2.23E+12	0.50	92600.0
H ₂ O/6./ H/2./ H/3./			
O ₂ +M=O+O+M	1.85E+11	0.50	95560.0
H+OH+M=H ₂ O+M	7.5E+23	-2.60	0.0
H ₂ O/20./			
H+HO ₂ =H ₂ +O ₂	2.5E+13	0.00	700.0
HO ₂ +HO ₂ =H ₂ O ₂ +O ₂	2.E+12	0.00	0.0
H ₂ O ₂ +M=OH+OH+M	1.3E+17	0.00	45500.0
H ₂ O ₂ +H=HO ₂ +H ₂	1.6E+12	0.00	3800.0
H ₂ O ₂ +OH=H ₂ O+HO ₂	1.E+13	0.00	1800.0

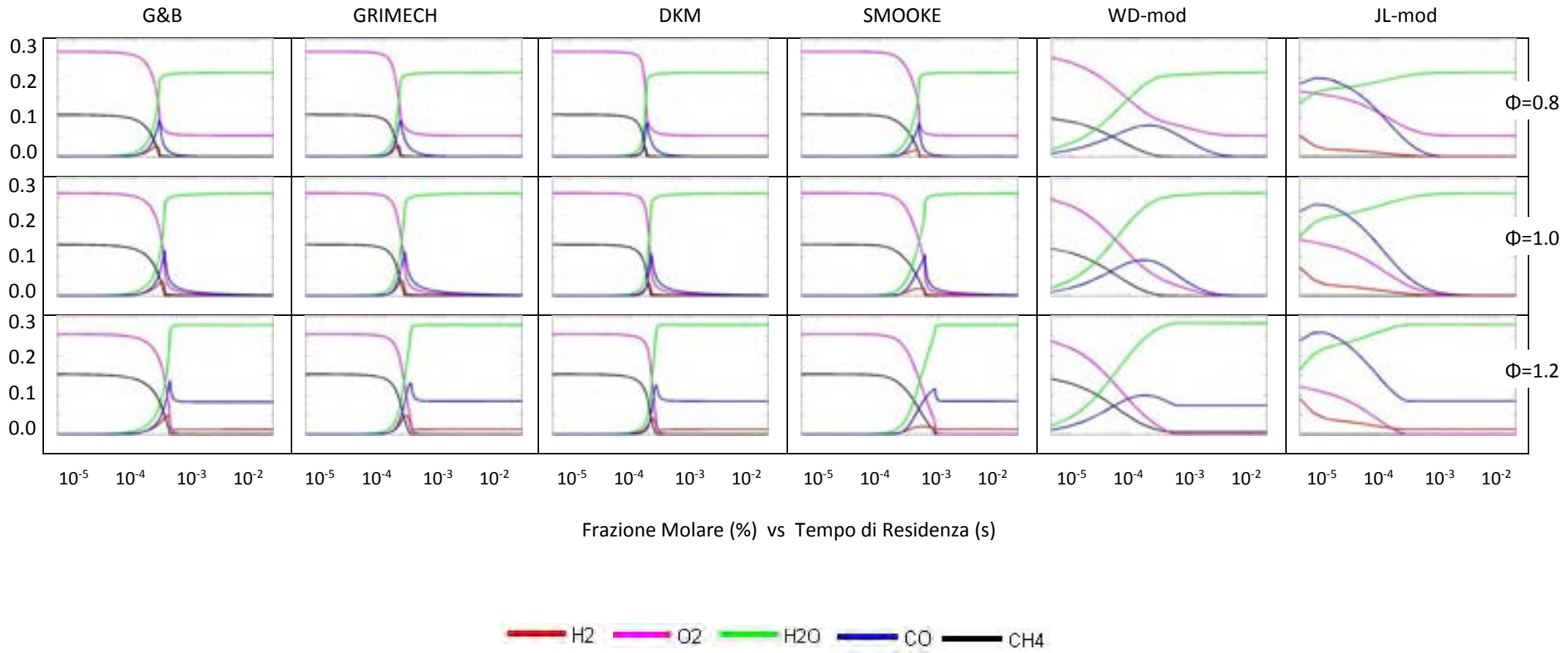


Figura 3. Andamento delle frazioni molari in funzione del tempo di residenza – Condizioni operative: concentrazione_ossigeno=30%; Temperatura=1600K

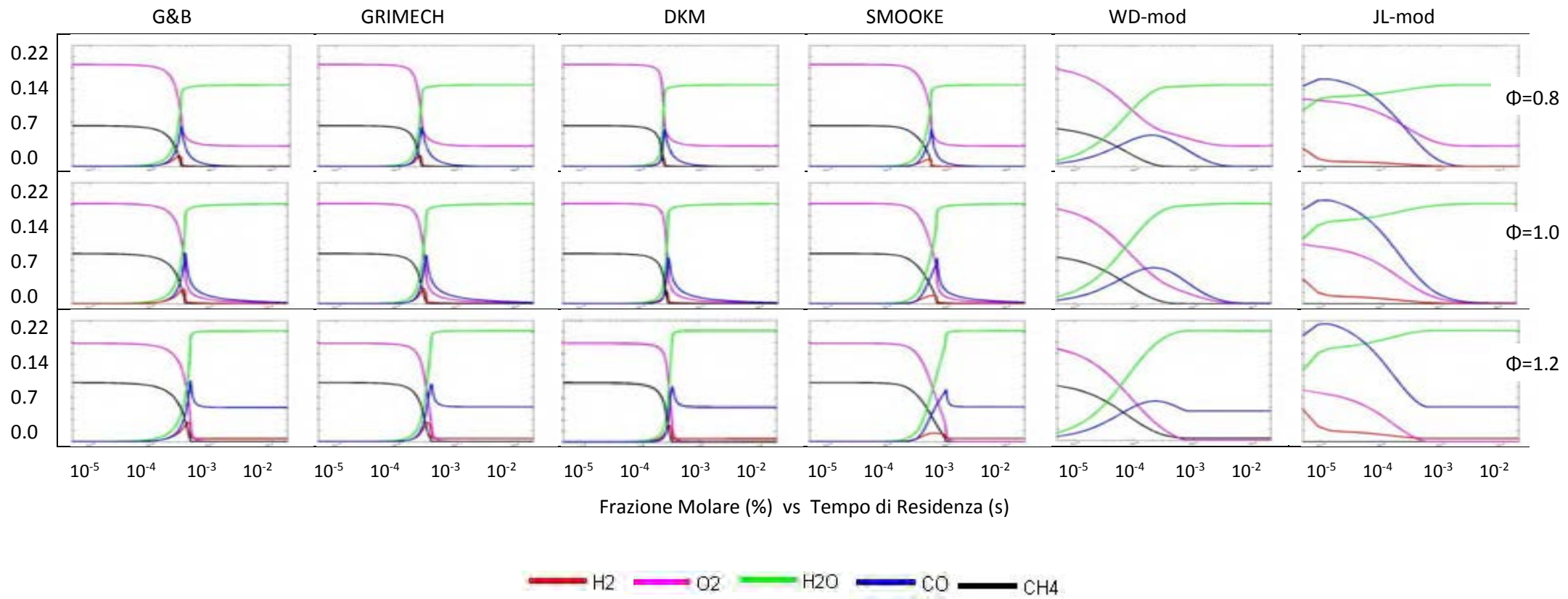


Figura 4. Andamento delle frazioni molari in funzione del tempo di residenza – Condizioni operative: concentrazione_ossigeno=20%; Temperatura=1600K

Dalla analisi degli andamenti delle frazioni molari in funzione del tempo di residenza si può dedurre che: gli andamenti per le varie specie chimiche, per quanto riguarda i meccanismi cinetici dettagliati sono molto simili tra loro.

I risultati mostrano chiaramente, come era da aspettarsi, che i meccanismi globali falliscono nella predizione del ritardo di ignizione. Solo i modelli dettagliati e gli schemi ridotti possono prevedere l'andamento dei radicali che sono presenti nella zona di ignizione della miscela nel reattore PFR. Inoltre non è facile predire in modo quantitativo l'impatto che questa mancanza di accuratezza può avere sulle simulazioni CFD, dove sono presenti altri fenomeni che possono influire come l'interazione cinetica-turbolenza o lo scambio termico. Dall'esame dei grafici suddetti si possono poi osservare altre differenze nel comportamento dei vari schemi. Per esempio il rateo di ossidazione del metano predetto dallo schema JL-mod è molto rapido ed addirittura la curva relativa al metano non è quasi visibile nei grafici, mentre lo schema WD-mod fornisce, da questo punto di vista, dei risultati in maggiore accordo con quelli degli schemi dettagliati. Nella fisica della combustione, la ossidazione del CH_4 e la formazione delle specie come il CO, avviene attraverso molti passi intermedi, di tipo fondamentale. Gli schemi dettagliati e quelli ridotti contengono al loro interno le reazioni relative a tali step e quindi predicono con una accuratezza assai maggiore l'andamento delle specie, nel caso dell'esempio CH_4 e CO, anche all'interno del reattore, di quanto non facciano gli schemi globali. Anche se tali schemi globali alla fine prevedono lo stesso livello di concentrazione, sovrastimano o sottostimano la formazione del CO e dell' H_2O . Per contro lo schema ridotto SMOOKE fornisce dei risultati molto più in linea con quelli degli schemi dettagliati. Quindi tra i meccanismi, che abbiamo definito semplificati, quello di SMOOKE è quello che sia qualitativamente che quantitativamente è più simile degli altri due agli andamenti dei suddetti schemi dettagliati.

Possiamo quindi affermare che la scelta dello schema SMOOKE rappresenta una buona scelta, in quanto è abbastanza semplificato rispetto agli schemi dettagliati, riducendo così l'onere computazionale nelle simulazioni CFD, ma allo stesso tempo fornisce risultati che sono in buon accordo con gli stessi schemi.

4.2 Calcoli CFD

Le simulazioni CFD sono state effettuate in diverse condizioni operative. Partendo dalle condizioni operative di riferimento, riportate in tabella 4, sono stati fatte variare le concentrazioni delle specie coinvolte, i loro rapporti ed il rapporto di equivalenza, così come indicato in tabella 5. In totale sono stati studiati 11 casi.

Tabella 4. Condizioni operative di riferimento

CO_2/O_2	
MAIN	0.3050 kg/s 870 K
PILOT	0.0226 kg/s 870 K
DILUIZIONE	0.4379 kg/s 870 K
CH_4	
MAIN	0.005942
PILOT	0.001025 kg/s 300 K

Tabella 5. Matrice delle simulazioni effettuate

	F	CO ₂ /O ₂ %	Φ	DIL
CASO 1	1.2	75/25	0.47	CO ₂ /O ₂
CASO 2	1.5	75/25	0.60	CO ₂ /O ₂
CASO 3	1.5	65/35	0.40	CO ₂ /O ₂
CASO 4	1.5	75/25	0.60	CO ₂
CASO 5	1.7	79/21	0.82	CO ₂
CASO 6	2	79/21	1	CO ₂
CASO 7	2	79/21	1	-
CASO 8	2	77/23	0.90	CO ₂
CASO 9	2	75/25	0.83	CO ₂
CASO 10	2.4	74/26	1	CO ₂
CASO 11	2.4	70/30	0.83	CO ₂

Dal punto di vista fluidodinamico il campo di moto è caratterizzato dalla presenza di uno stretto vortice toroidale in prossimità dell'uscita del bruciatore, tipico dei sistemi swirlati. E' presente anche una zona di ricircolo, più grande della precedente ed una zona di ristagno tra il primo vortice e la zona relativa ai getti di diluizione. Il tempo di residenza medio è dell'ordine di 2×10^{-2} s.

In figura 5 possiamo vedere un esempio di campo termico con sovrapposte le linee di corrente.

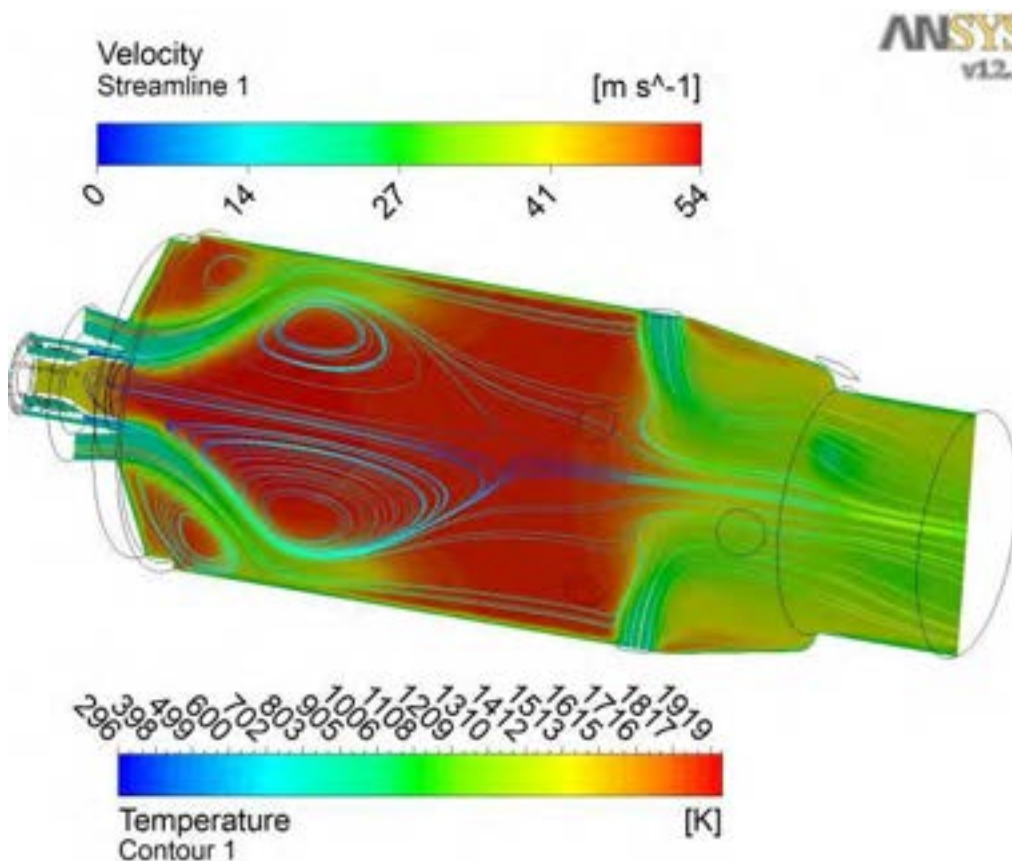


Figura 5. Linee di flusso e Campo di Temperature

Nelle figure 6 e 7 è mostrato l'andamento della distribuzione spaziale della concentrazione delle specie OH e CO rispettivamente. Le figure danno una idea delle distribuzioni delle specie ma, naturalmente, i campi sono diversi per le diverse condizioni operative simulate e quindi le distribuzioni sono tra loro diverse nei diversi casi.

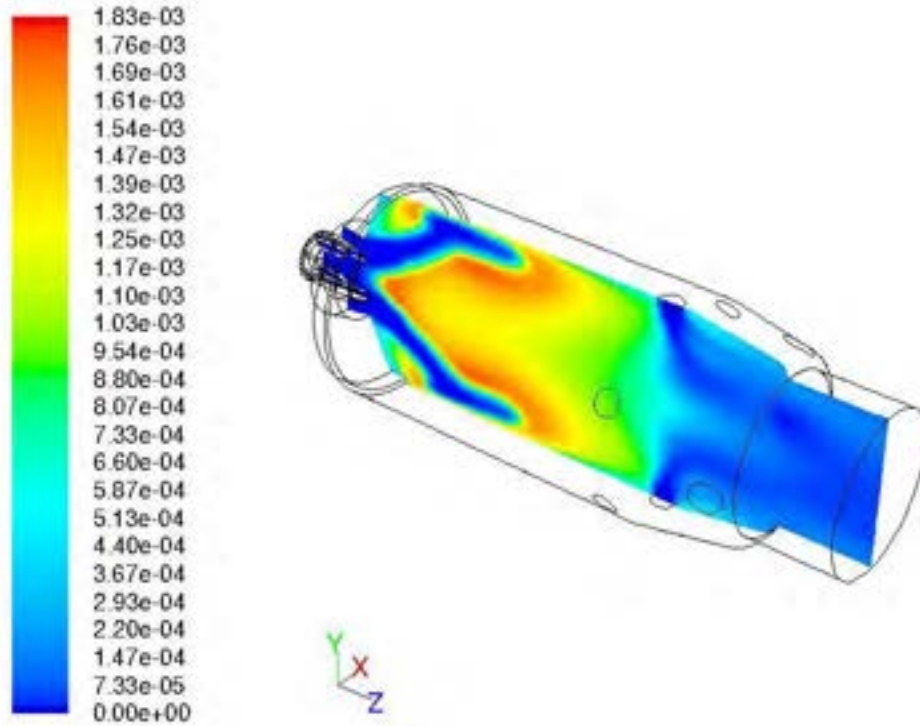


Figura 6. Distribuzione della specie OH (frazione di massa)

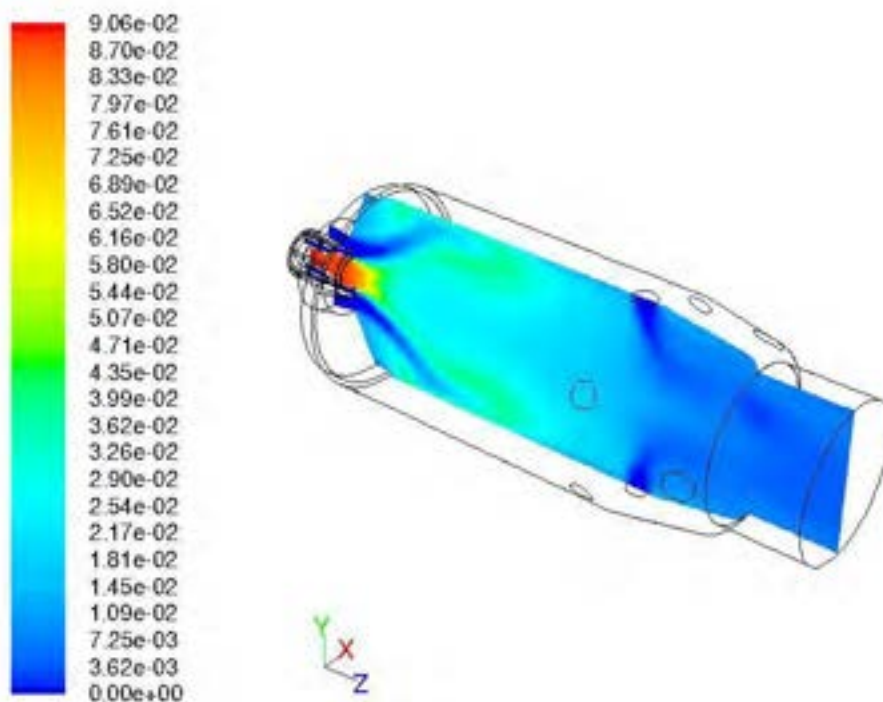


Figura 7. Distribuzione della specie CO (frazione di massa)

Nell’ottica di ottenere una combustione il più possibile completa, senza cioè troppi incombusti in uscita, evitando nel contempo di “sprecare” ossigeno, si è scelto come indice di bontà per la combustione l’indice di emissione (EI) del CO, cioè EICO dato dal rapporto tra i grammi di CO in uscita per kg di combustibile.

La prima simulazione, non indicata nella tabella relativa alla figura 6, è stata effettuata nelle stesse condizioni di portate del caso di riferimento, semplicemente sostituendo l’azoto con l’anidride carbonica: in questa situazione si è registrato lo spegnimento della fiamma. Per gli altri casi si è ridotta la portata di CO₂ di un fattore F per diverse concentrazioni di O₂ mantenendo fissa la potenza.

Si è quindi proceduto a studiare il comportamento del combustore per tutti gli undici casi illustrati nella suddetta tabella.

In figura 8 è riportato un grafico che riassume i risultati ottenuti nelle simulazioni CFD.

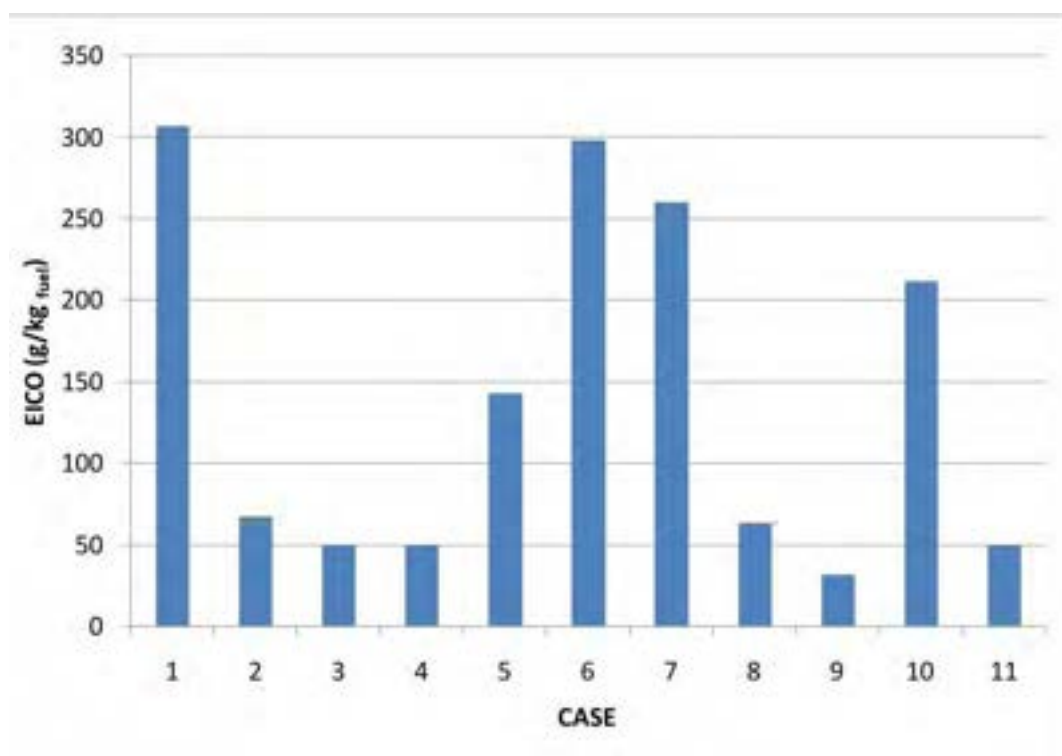


Figura 8. Indice di Emissione del CO (EICO)

Le considerazioni che seguono sono state fatte analizzando i risultati delle simulazioni in termini di campi termici e campi di concentrazione delle specie chimiche.

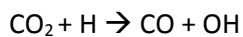
Per F=1.2, la concentrazione minima di ossigeno è intorno al 25%. In questo caso la temperatura media nella camera di combustione è abbastanza bassa e si registrano molti incombusti in uscita.

Anche per F=1.5 non è stato possibile raggiungere concentrazioni di O₂ inferiori al 25%. In questo caso però le temperature sono risultate più alte del caso precedente.

Per F=1.7 è stato possibile ridurre l’ossigeno fino a circa il 21% con un rapporto di equivalenza pari a 0.8.

Per prevenire l’estinzione della fiamma ed avere nel contempo condizioni quasi stechiometriche, è necessario arrivare ad F=2. In questo caso, come si può vedere dalla figura 8, si hanno delle alte concentrazioni di CO in uscita. Tuttavia questo non è dovuto alla CO₂ di diluizione. Infatti nel seguente caso numero 7, dove la diluizione è del tutto assente, il risultato è simile.

Anche nel caso $F=2.4$, per il quale in camera di combustione si hanno temperature medie alte, la situazione non migliora. Tutto ciò dipende dal fatto che all'interno del combustore la concentrazione di CO_2 è comunque alta. Questo porta ad una concentrazione di CO all'equilibrio alta e ad un basso rateo di reazione del CO stesso. Dal punto di vista della cinetica chimica la CO_2 compete con l' O_2 per quanto riguarda l'idrogeno atomico (H), portando alla formazione di CO mediante la reazione:



Anche la reazione della CO_2 con radicali del tipo CH_x gioca un ruolo importante. La competizione della CO_2 per i radicali H con la reazione:



Riduce in modo sostanziale la concentrazione dei radicali O, H ed OH.

Da questa analisi possiamo osservare che per avere dei livelli di CO in uscita non troppo elevati, è necessario aumentare il rapporto di equivalenza, che comporta di lavorare in eccesso di ossigeno.

5 Conclusioni

Nella presente attività è stato studiato il comportamento di un combustore convenzionale, in modalità oxy-combustion. Nello studio non sono state, in questa fase, proposte modifiche alla configurazione geometrica, ma solo alle condizioni operative, proprio per indagare la risposta del combustore stesso alla nuova modalità di combustione. L'indicazione che se ne può ricavare è che l'applicazione della oxy-combustione è possibile. Il problema è che le temperature all'interno della camera di combustione tendono ad assumere valori molto elevati, essendo quindi necessario mettere in atto accorgimenti al fine di evitare di danneggiare le palette della turbina. La CFD è indispensabile per testare il comportamento del turbogas in varie condizioni operative senza, per così dire, danneggiare nulla. Sono stati implementati una serie di meccanismi cinetici sia con un elevato numero di reazioni e specie chimiche, che di tipo ridotto e globale. Dall'esame dei risultati si può dire che il meccanismo SMOOKE rappresenta un buon compromesso per quanto riguarda l'accuratezza dei risultati ed il tempo di calcolo. E' quindi stato studiato il comportamento termo fluidodinamico del combustore al variare dei parametri operativi di processo, mediante l'analisi dell'indice di emissione di CO. In conclusione, da quanto emerso dallo studio illustrato nel presente rapporto tecnico, possiamo dire che per sostenere la fiamma è necessario, a parità di combustibile bruciato, ridurre la quantità di anidride carbonica rispetto all'equivalente di azoto della combustione in aria, a causa della maggiore capacità termica. Modeste riduzioni comportano la necessità di operare con concentrazioni di ossigeno relativamente alte, decisamente superiori allo stechiometrico, pena lo spegnimento della fiamma, ma con inevitabile spreco di ossigeno. Riduzioni più consistenti consentono di ridurre maggiormente la concentrazione di ossigeno, fino a poter operare vicino alle condizioni stechiometriche, per una portata di CO_2 dimezzata rispetto a quella di riferimento. Un certo eccesso di ossigeno è comunque necessario in ogni caso per contenere le emissioni di CO.

6 Riferimenti bibliografici

1. Westbrook and Dryer (WD) [Westbrook, C. K.; Dryer, F. L., "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames", *Combust. Sci. Technol.* 1981, 27, 31–44;
2. Jimmy Andersen, Christian Lund Rasmussen, Trine Giselsson, and Peter Glarborg, "Global Combustion Mechanisms for Use in CFD Modeling under Oxy-Fuel Conditions" *Energy & Fuels* 2009, 23, 1379–1389;
3. Jones, W. P.; Lindstedt, R. P., "Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion", *Combust. Flame* 1988, 73, 233–249;
4. Lin Wang, Zhaohui Liu, Sheng Chen, and Chuguang Zheng, "Comparison of different Global Combustion Mechanisms under Hot and Diluted Oxidation Conditions", *Combust. Sci. Technol.*, 184: 1–18, 2012;
5. Smooke, M.D.; Puri, I.K.; Seshadri, K., "A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air", *Proc. Combust. Inst.*, 21, (1986) 1783-1792;
6. Glarborg, P.; Bentzen, L. L. B., "Chemical effects of a high CO₂ concentration in oxy-fuel combustion of methane." *Energy Fuels* 2008, 22, 291–296;
7. Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Q, in http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/;
8. Ranzi, E., T. Faravelli, A. Frassoldati, and S. Granata, "Wide range kinetic modeling study of the pyrolysis, partial oxydation and combustion of heavy n-alkanes", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2005, 44, p. 5170-5183;