

**SVILUPPO DI UN CODICE PER LA PREVISIONE DELLE PROPRIETÀ DI
FOULING E SLAGGING DI CARBONI: PARTE TERZA**

G. MURGIA, B. D'AGUANNO, L. PISANI, M. VALENTINI

CRS4

Centro di Ricerca, Sviluppo e Studi Superiori in Sardegna
Pula (CA) Italy

RAPPORTO INTERNO

INDICE

1. INTRODUZIONE	1
2. MODELLISTICA	1
2.1. Modello di impatto	1
2.2. Efficienza di appiccicamento (sticking)	2
2.3. Modello di erosione	3
2.4. Temperatura degli scambiatori di calore	3
2.5. Modello per l'accrescimento dei depositi	4
3. STRUTTURA DEL CODICE E ALGORITMI	5
3.1. Subroutines del codice globale	5
3.2. Struttura dei dati di input	6
3.3. Struttura dei dati di output	7
4. SOMMARIO E CONCLUSIONI	7
5. RINGRAZIAMENTI	8
Riferimenti bibliografici	9

1. INTRODUZIONE

Questo rapporto tecnico descrive il terzo e ultimo modulo del codice per la predizione delle proprietà di fouling di carboni. Le distribuzioni di grandezza e composizione chimica delle ceneri, ottenute come output del secondo modulo del codice, vengono utilizzate per valutare l'efficienza di impatto con le superfici degli scambiatori di calore, l'efficienza di adesione (sticking) alle stesse superfici e l'efficienza di erosione di depositi preesistenti. Sulla base di queste quantità, viene valutato l'accrescimento dei depositi (fouling). Il punto centrale di questo terzo modulo del codice è quindi il modello di accrescimento dei depositi che valuta l'evoluzione temporale delle frazioni di superficie dei tubi scambiatori di calore: la superficie pulita, la superficie coperta da depositi "appiccicosi" e la superficie coperta da depositi non appiccicosi. Queste frazioni di superficie sono infine usate per calcolare lo spessore medio dei depositi e la velocità di deposizione come funzione del tempo.

In questo documento viene inizialmente descritto il modello fisico-matematico su cui è basato l'algoritmo per la descrizione dell'evoluzione temporale dei depositi.

Nella seconda parte del documento viene presentata una descrizione dettagliata del codice numerico, delle strutture dei dati di input e output, e del suo utilizzo. Di ogni Subroutine viene data un'esplicita descrizione del suo ruolo con frequenti richiami alla parte modellistica, e del suo flusso di dati in input/output.

Nella sezione finale sono riportate le conclusioni e un breve sommario.

2. MODELLISTICA

2.1. Modello di impatto. La cenere può raggiungere la superficie degli scambiatori di calore per impatto inerziale. Le forze principali che agiscono sulle particelle trascinate dalla corrente di gas sono le forze inerziali e di trascinamento (drag). Le forze inerziali sono proporzionali alla massa della particella (e quindi al cubo del diametro) mentre le forze di drag sono proporzionali alla sezione d'urto della particella (e quindi al quadrato del diametro). Il rapporto fra forze inerziali e forze di drag è quindi proporzionale al diametro della particella: le particelle più piccole seguono le linee di corrente del gas attorno agli ostacoli mentre le particelle più grandi si staccano dalle linee di corrente e possono così impattare contro gli scambiatori di calore. Langmuir e Blodgett (1946) hanno risolto l'equazione del moto di goccioline d'acqua attorno ad un ostacolo cilindrico e hanno calcolato la dimensione limite delle goccioline per evitare l'impatto. Hanno anche calcolato l'efficienza di raccolta del cilindro, ovvero la probabilità di impatto per una particella che si avvicina al cilindro, come funzione di due costanti adimensionali: il numero di Stokes

$$(1) \quad Stk = \frac{\rho_p d_p^2 U}{9\mu_g d_t}$$

e il numero di Reynolds

$$(2) \quad Re_p^0 = \frac{U d_p \rho_g}{\mu_g}$$

Le variabili sono definite nella nomenclatura, e i suffissi p, g e t si riferiscono rispettivamente a particella, gas e tubo. Il numero di Stokes lega il tempo caratteristico di arresto della particella al tempo di percorrenza del flusso attorno al cilindro. Israel e Rosner (1983) hanno generalizzato l'espressione dell'efficienza di raccolta considerando anche la possibilità di un comportamento non-stokesiano della particella attraverso un fattore di correzione ψ :

$$(3) \quad Stk_{eff} = \Psi Stk$$

dove

$$(4) \quad \Psi = \frac{24}{Re_p^0} \int_0^{Re_p^0} \frac{dRe_p}{C_D(Re_p)Re_p}$$

e C_D e' il coefficiente di drag (per la legge di stokes: $C_D = 24/Re_p$)

Hanno poi determinato la funzione che lega l'efficienza di impatto al numero di Stokes generalizzato attraverso un'operazione di fitting dei risultati sperimentali ottenendo la seguente espressione]

$$(5) \quad \eta_{imp} = \left(1 - \frac{1.25}{Stk_{eff}-0.125} - \frac{0.014}{(Stk_{eff}-0.125)^2} + \frac{0.508 \cdot 10^{-4}}{(Stk_{eff}-0.125)^3} \right)^{-1}$$

$Stk_{eff} > 0.14$

La correlazione di Klyachko (1934) per il coefficiente di drag su una sfera e' una buona approssimazione per l'intervallo di valori del numero di Reynolds di interesse ($Re < 500$):

$$(6) \quad C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{1}{6} Re_p^{2/3} \right)$$

Con il coefficiente di drag in questa forma, l'equazione 4 puo' essere integrata analiticamente per ottenere:

$$(7) \quad \Psi = \frac{18\sqrt{6}}{Re_p^0} \left[\frac{(Re_p^0)^{2/3}}{\sqrt{6}} - \tan^{-1} \left(\frac{(Re_p^0)^{1/3}}{\sqrt{6}} \right) \right]$$

Nel nostro modello numerico, l'efficienza media di impatto della cenere volatile viene determinata dalla seguente espressione:

$$(8) \quad E(\eta) = \int_0^{\inf} \int_0^{\inf} \eta_{imp} f_m(\rho, x) d\rho dx$$

dove la distribuzione f_m e' un output del modulo precedente (modello di combustione) e l'efficienza di impatto η_{imp} e' descritto dall'equazione 5.

2.2. Efficienza di appiccamento (sticking). Le particelle di cenere che impattano contro la superficie degli scambiatori di calore, possono restare appiccicate o meno ad essi. Da un punto di vista fisico, la particella rimane appiccicata in forma di deposito sulla parete se la sua energia cinetica viene trasformata completamente nell'energia delle deformazioni viscosi; altrimenti rimbalza. Il fattore determinante per caratterizzare l'efficienza di sticking e' quindi la viscosita' delle particelle di cenere. Si puo' quindi definire un valore critico per la viscosita' μ_{crit} per cui, a seguito dell'impatto, le particelle con viscosita' inferiore a μ_{crit} si appiccicano alla parete mentre quelle con viscosita' superiore a μ_{crit} rimbalzano. L'efficienza di sticking sara' quindi data dall'equazione seguente:

$$(9) \quad \eta_{st} = Prob.\{\mu < \mu_{crit}\}$$

A una temperatura data, la viscosita' delle particelle di cenere varia da particella a particella a seconda della loro composizione chimica. La frazione di massa delle particelle con viscosita' inferiore a μ_{crit} e', per definizione, l'efficienza di sticking. L'efficienza di sticking dipende dalla temperatura perche', in generale, la viscosita' diminuisce all'aumentare della temperatura. Una distribuzione cumulativa di η_{st} puo' essere ottenuta calcolando la viscosita' di ogni particella usando una formula che leghi la viscosita' alla composizione chimica della particella e alla sua temperatura. La formula che abbiamo usato e' quella di Watt-Fereday:

$$(10) \quad \text{Log}(\mu) = \frac{10^7 m}{(T - 150)^2} + c$$

dove

$$(11) \quad \begin{aligned} m &= (0.835 * SiO_2 + 0.601 * Al_2O_3) / S - 0.109 \\ c &= (1.92 * Al_2O_3 + 4.15 * SiO_2 + 1.6 * CaO + 2.76 * FeO) / S - 3.92 \\ S &= MgO + Al_2O_3 + SiO_2 + CaO + FeO \end{aligned}$$

2.3. Modello di erosione. Le particelle di cenere che impattano le superfici degli scambiatori di calore senza appiccicarsi, possono erodere parte del deposito gia' presente sulle superfici stesse. La quantita' di deposito asportato in questo processo e' proporzionale all'energia cinetica delle particelle incidenti e quindi al quadrato della velocita' del flusso e alla massa delle particelle stesse.

Per semplificare il piu' possibile il modello per il calcolo dell'accrescimento dei depositi, analogamente all'efficienza di sticking, definiamo una efficienza di erosione media k come il numero medio di particelle di deposito asportate in seguito all'impatto di una particella di cenere volatile. In questo modo, la dipendenza dell'efficienza di erosione dalla massa delle singole particella viene eliminata.

2.4. Temperatura degli scambiatori di calore. La temperatura degli scambiatori di calore e' importante nel modello per il calcolo dell'accrescimento dei depositi perche' influisce sulla viscosita' della cenere depositata. Questa temperatura superficiale e' calcolata considerando condizioni stazionarie per l'estrazione di calore da parte del gas di raffreddamento. L'equazione che ne risulta e' la seguente:

$$(12) \quad T_s = T - \left(1 - \frac{K_1}{K_2}\right) (T - T_{air}) \exp - \frac{K_1 L}{m_{air} c_{air}}$$

dove

$$(13) \quad \begin{aligned} K_1 &= \left[\frac{1}{2\pi(r_{out}+H)h_{gas}} + \frac{1}{2\pi K_{dep} \log \frac{r_{out}+H}{r_{in}}} + \frac{1}{2\pi K_{tube} \log \frac{r_{out}}{r_{in}}} + \frac{1}{2\pi h_{air}} \right]^{-1} \\ K_2 &= \left[\frac{1}{2\pi K_{dep} \log \frac{r_{out}+H}{r_{in}}} + \frac{1}{2\pi K_{tube} \log \frac{r_{out}}{r_{in}}} + \frac{1}{2\pi h_{air}} \right]^{-1} \\ h_{gas} &= \frac{0.023 K_{gas}}{2(r_{out}+H)} Re_{gas}^{0.8} Pr_{gas}^{0.3} \\ h_{air} &= \frac{0.023 K_{air}}{2(r_{out}+H)} Re_{air}^{0.8} Pr_{air}^{0.3} \end{aligned}$$

2.5. Modello per l'accrescimento dei depositi. Questo modello considera tre diverse condizioni della superficie dei tubi scambiatori di calore:

- (1) Il tubo pulito
- (2) Il tubo sporco appiccicoso
- (3) Il tubo sporco non appiccicoso

Nelle condizioni 1 e 3 solo le particelle con viscosità inferiore a μ_{crit} si appiccicano in seguito all'impatto. Nella condizione 2 invece, sono le deformazioni viscosi dei depositi sul tubo ad assorbire l'energia cinetica delle particelle impattanti, e quindi tutte le particelle impattanti si appiccicano. Siccome la temperatura degli scambiatori di calore é inferiore a quella del gas, la viscosità della cenere depositata sugli scambiatori di calore é superiore a quella delle ceneri volatili. L'efficienza di sticking a questa temperatura é quindi inferiore (η_{st}^*) e una frazione delle particelle che si appiccicano dará luogo a un deposito non appiccicoso (condizione 3). Tenendo conto dei fenomeni di appiccicamento e di erosione possiamo descrivere allora lo sviluppo temporale delle frazioni di superficie per ognuna delle tre condizioni.

2.5.1. Tubo pulito.

– Aumento della massa di deposito:

$$(14) \quad \frac{A_t}{A} m \eta_{st} \eta_{imp} dN$$

– Diminuzione della superficie di tubo pulito:

$$(15) \quad \frac{A_t}{A} a \eta_{st} \eta_{imp} dN$$

– Aumento della superficie di tubo appiccicoso:

$$(16) \quad \frac{A_t}{A} a \eta_{st}^* \eta_{imp} dN$$

– Aumento della superficie di tubo non appiccicoso:

$$(17) \quad \frac{A_t}{A} a (\eta_{st} - \eta_{st}^*) \eta_{imp} dN$$

2.5.2. Tubo appiccicoso.

– Aumento della massa di deposito:

$$(18) \quad \frac{A_{st}}{A} m \eta_{imp} dN$$

– Aumento della superficie di tubo non appiccicoso:

$$(19) \quad \frac{A_{st}}{A} a (1 - \eta_{st}^*) \eta_{imp} dN$$

2.5.3. Tubo non appiccicoso.

– Aumento della massa di deposito:

$$(20) \quad \frac{A_{nst}}{A} m \eta_{st} \eta_{imp} dN (\eta_{st} - (1 - \eta_{st})k)$$

– Aumento della superficie di tubo appiccicoso:

$$(21) \quad \frac{A_{nst}}{A} a \eta_{imp} dN \left(\eta_{st}^* + (1 - \eta_{st})k \frac{A_{st}}{A_{st} + A_{nst}} \right)$$

2.5.4. *Equazioni differenziali complessive.* Mettendo insieme le evoluzioni descritte nei paragrafi precedenti, si ottengono le seguenti equazioni differenziali:

– Variazioni della massa di deposito:

$$(22) \quad dM = \frac{m}{A} \eta_{imp} [(A_t + A_{nst}) \eta_{st} + A_{st} - A_{nst} (1 - \eta_{st}) k] dN$$

– Variazioni della superficie di tubo pulito:

$$(23) \quad dA_t = -\frac{A_t}{A} a \eta_{st} \eta_{imp} dN$$

– Variazioni della superficie di tubo non appiccicoso:

$$(24) \quad dA_{nst} = \frac{a}{A} \eta_{imp} \left[A_t (\eta_{st} - \eta_{st}^*) + A_{st} (1 - \eta_{st}^*) - A_{nst} \left(\eta_{st}^* + (1 - \eta_{st}) k \frac{A_{st}}{A_{st} + A_{nst}} \right) \right] dN$$

– Variazioni della superficie di tubo appiccicoso:

$$(25) \quad dA_{st} = -dA_t - dA_{nst}$$

3. STRUTTURA DEL CODICE E ALGORITMI

Il codice, scritto in Fortran90, si articola nei seguenti punti: - Lettura in input delle distribuzioni di densità e viscosità delle ceneri - Calcolo dell'efficienza di impatto - Calcolo dell'efficienza di sticking - Risoluzione del sistema di equazioni differenziali che governa la variazione temporale della massa del deposito

3.1. Subroutines del codice globale.

3.1.1. *SUBROUTINE STICK_EFF* : calcolo dell'efficienza di appiccicamento delle ceneri (fly ash). L'efficienza di appiccicamento è determinata dalla frazione di massa delle particelle di cenere che hanno una viscosità inferiore a quella di una viscosità critica e fissata μ_{crit} .

Questa subroutine calcola la viscosità delle particelle di cenere implementando la relazione di Watt-Fereday, eq. (10), riportata in Sez. 2.2. Dalle viscosità così determinate, l'efficienza di sticking è ottenuta calcolando la seguente probabilità:

$$(26) \quad \eta_{st} = Prob.(\mu < \mu_{crit}).$$

3.1.2. *SUBROUTINE IMP_EFF* : calcolo dell'efficienza di impatto. L'efficienza di impatto determinata in questa subroutine è definita come la frazione di massa di particelle di cenere che incontrano l'area proiettata dei tubi scambiatori di calore. Le relazioni che sono implementate e usate in questa subroutine per il calcolo dell'efficienza di impatto delle fly ashes sono le seguenti

$$\eta_{imp} = \int_0^{\infty} f_{vol}(d_p) \eta_{imp}(d_p) dd_p$$

$$g = Stk_{eff}(d_p) - 0.125$$

$$\eta_{imp}(d_p) = \left[1 + \frac{1.25}{g} - \frac{0.014}{g^2} + \frac{0.508 \times 10^{-4}}{g^3} \right]^{-1}$$

$$Stk_{eff}(d_p) = \Psi \frac{\rho_p d_p^2 U}{\mu_{gas} d_t}$$

$$\Psi = \frac{18}{Re_0} (Re_0^{1/3} - \sqrt{6} \arctan(\frac{Re_0^{1/3}}{\sqrt{6}}))$$

$$Re_0 = \frac{\rho_{gas} d_p U}{\mu_{gas}}$$

La dipendenza dalla temperatura della densità del gas, ρ_{gas} , e della sua viscosità, μ_{gas} , anche se non esplicitata, è presa in considerazione e le due quantità sono calcolate alla temperatura di chiamata della subroutine.

3.1.3. *SUBROUTINE DEP_CALC* : *calcolo dell'accrescimento dei depositi*. Il calcolo dell'accrescimento dei depositi è effettuato a partire dalla conoscenza delle efficienze di impatto e di appiccicamento delle particelle di fly ashes. Esse sono usate insieme alle seguenti assunzioni:

- se una particella appiccicosa impatta la superficie del deposito, allora la particella si appiccica ad essa;
- se una particella non appiccicosa impatta la regione appiccicosa della superficie del deposito, allora la particella si appiccica ad essa;
- se una particella non appiccicosa impatta una particella non appiccicosa sulla superficie del deposito, allora la particella (i) rimbalza via o (ii) erode la superficie del deposito, facendo diminuire il numero k delle particelle non appiccicose. Dopo l'erosione, la superficie del deposito evidenziata sarà costituita da una miscela di superfici appiccicose e non appiccicose. La composizione di tale miscela sarà determinata dalla temperatura locale e dall'appiccicosità locale delle particelle di fly ashes depositate.

Le variazioni della massa di deposito, della superficie di tubo pulito, e della superficie di tubo non appiccicoso e appiccicoso sono determinate risolvendo le equazioni differenziali riportate nella sezione 2.5.4 che, per ragioni di spazio, non sono qui riscritte.

Le efficienze di appiccicamento delle particelle di fly ashes, η_{st} e η_{st}^* , sono calcolate, rispettivamente, alla temperatura del gas fluente e a quella della superficie del deposito. Mentre la temperatura del gas è un input di questa subroutine, la temperatura della superficie del deposito è calcolata dalle eq.i (12) e (13) riportate in sezione 2.4.

3.2. **Struttura dei dati di input.** I dati di input per questo terzo modulo del codice globale CARBCO sono ottenuti dagli output del secondo modulo. La loro struttura è quindi descritta nel rapporto tecnico relativo [2].

Sempre conservando la stessa struttura dei dati di input, i dati che è necessario supportare in input per i calcoli effettuati in questo terzo e conclusivo modulo del codice CARBCO sono i seguenti:

- velocità dell'aria di raffreddamento (per la stima iniziale della temperatura superficiale del tubo scambiatore);
- diametri interni ed esterno del tubo scambiatore;
- temperatura dell'aria di inlet;
- intervallo di temperatura ammesso e intervallo di divisione;
- velocità del gas trasportatore delle fly ashes;
- conducibilità termiche del deposito di fly ashes e del tubo scambiatore;
- lunghezza del tubo scambiatore;
- intervallo temporale per la risoluzione del sistema di equazioni differenziali governanti la crescita del deposito;
- tempo massimo a cui la velocità di accrescimento del deposito è calcolato;

- densità di bulk del deposito;
- fattore di erosione;
- viscosità critica.

3.3. Struttura dei dati di output. Tutti i file di output sono formattati ad accesso sequenziale. Il file di output specificato nella variabile di input `iot%fnout` contiene informazioni generiche sul sistema in esame e sul corretto funzionamento del programma. In questo file sono riportati anche tutti gli eventuali messaggi che il programma è in grado di generare in caso di errore.

L'output principale di questo modulo, che è dato dai valori (*i*) della velocità di accrescimento del deposito, (*ii*) della velocità di impatto delle fly ashes, (*iii*) della efficienza di impatto, (*iv*) dell'efficienza di appiccicamento e (*v*) della viscosità media del deposito, è scritto su distinti files sotto forma di due colonne di numeri floating points. La prima colonna è la temperatura del gas trasportante le particelle di fly ashes (l'ascissa), la seconda è la funzione in esame (l'ordinata).

4. SOMMARIO E CONCLUSIONI

Il codice globale CARBCO, sviluppato al CRS4, è un codice in grado di predire l'accrescimento dei depositi generati dalle fly ash sui tubi scambiatori di calore (fouling e, parzialmente, slagging). È un codice predittivo ed è basato sulla sola conoscenza della composizione delle inclusioni minerali nelle particelle di carbone (dati di composizione chimica e granulometrica dalla tecnica CCSEM), e della granulometria del carbone polverizzato. Il codice non ha la pretesa di essere quantitativo in tutti i suoi output ma permette di classificare carboni di varia provenienza in base alla loro tendenza al fouling e allo slagging. Una tale classificazione è estremamente importante per la pianificazione delle interruzioni nei bruciatori di potenza e, conseguentemente, nell'economia di gestione degli impianti di produzione di energia elettrica basati sulla combustione di carbone polverizzato.

Il codice, così come pensato e strutturato, è suscettibile di aggiornamenti continui sulla base di una modellistica sempre più realistica. In particolare, sviluppi futuri sono possibili ed aspettati per (*i*) il modello di combustione, per (*ii*) il modello fluidodinamico governante l'impatto delle particelle di fly ash sulle superfici interne del bruciatore, ed anche per (*iii*) i modelli di erosione e di appiccicamento.

Per quanto riguarda il modello di combustione miglioramenti sono aspettati dall'utilizzo di modelli basati su metodi Monte Carlo del tipo "Uniform Combustion" e "Diffusion Limited Combustion" [3]. In questi modelli, particelle di carbone virtuale vengono costruite sulla base dei dati CCSEM: ogni particella di carbone virtuale risulta composta da volumi elementari di carbonio e di specifiche impurezze. I volumi elementari di carbonio saranno "bruciati" da un "random flyer" che colpisce la superficie della particella virtuale.

Una descrizione molto più dettagliata dell'impatto delle particelle di fly ash è invece aspettata dall'utilizzo di modelli e codici fluidodinamici. In questo caso, e sulla base dell'assunzione di un contributo trascurabile delle particelle di fly ash al momento e all'energia della fase gassosa (assunzione basate sulla bassa densità della fase particellare), le risultanti equazioni di conservazione applicate alla fase gassosa sono risolte attraverso un codice di fluidodinamica computazionale (CFD)[4]. Questo disaccoppiamento, comunque, è solo limitato alla simulazione delle traiettorie delle particelle di fly ash, mentre le particelle sono completamente accoppiate al campo di flusso e di temperatura. Gli effetti di impatto e di accrescimento dei depositi saranno successivamente presi in considerazione dai modelli di appiccicamento e di erosione. L'utilizzo di un codice CFD presenta l'indubbio vantaggio di una descrizione dettagliata della geometria del bruciatore preso in considerazione.

I modelli di erosione e di appiccicamento possono essere migliorati a partire dalle considerazioni di Walsh et al.[5] e dalla loro successiva implementazione numerica.

5. RINGRAZIAMENTI

Questo lavoro è stato portato avanti con il contributo finanziario del Ministero dell'Università e della Ricerca Scientifica e Tecnologica nell'ambito del Cluster 11.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [1] G. Murgia, B. D'Aguanno, L. Pisani, M. Valentini, *Sviluppo di un codice per la previsione delle proprietà di fouling e slagging di carboni: parte seconda* CRS4 Technical Report 03
- [2] G. Murgia, B. D'Aguanno, L. Pisani, M. Valentini, *Sviluppo di un codice per la previsione delle proprietà di fouling e slagging di carboni: parte prima* CRS4 Technical Report 02/50
- [3] F. Miccio, P. Salatino, *Twenty-fourth Symposium (International) on Combustion*, 1145 (1992).
- [4] F.C.C. Lee, F.C. Lockwood, *Modelling ash deposition in pulverized coal-fired applications*, Prog. Ener. Comb. Sci., **25**, 117 (1999).
- [5] P.M. Walsh, J.M. Beer, A.F. Sarofim, *Estimation of Aerodynamic Effects on Erosion of a Tube by Ash*, EPRI Conference on Effects of Coal Quality on Power Plants, Atlanta, Georgia, October 13-15, 1987.