



Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia
e lo sviluppo economico sostenibile



Ministero dello Sviluppo Economico

RICERCA DI SISTEMA ELETTRICO

Implementazione in ambiente ChemCad di un modulo per la simulazione
di un reattore a letto fluidizzato

Stefano Stendardo, Pier Ugo Foscolo



UNIVERSITA' DEGLI STUDI
DELL'AQUILA

Report RdS/2012/185

IMPLEMENTAZIONE IN AMBIENTE CHEMCAD DI UN MODULO PER LA SIMULAZIONE DI UN REATTORE A
LETTO FLUIDIZZATO

Stefano Stendardo (ENEA)

Pier Ugo Foscolo (Università degli Studi dell'Aquila)

Settembre 2012

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Area: Produzione di energia elettrica e protezione dell'ambiente

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

Responsabile del Progetto: Stefano Giammartini, ENEA

Indice

Sommario	4
<i>Introduzione</i>	<i>5</i>
Richiamo generale della teoria delle due fasi	5
<i>Il modello di un reattore a letto fluido.....</i>	<i>5</i>
Implementazione del modulo in CC6	6
Il modello CC6.....	7
Conclusioni	9
Riferimenti bibliografici	9
Abbreviazioni ed acronimi	10
Appendice	11

Sommario

Il simulatore di processo ChemCad versione 6 (CC6) offre una vasta libreria di moduli per la simulazione di impianti chimici e di potenza. Obiettivo di questo lavoro è espandere la già elevata capacità di simulazione e calcolo di questo ambiente attraverso l'implementazione e l'inserimento di un modulo 'customizzato' per la simulazione di un reattore a letto fluidizzato per la separazione di CO₂ e produzione di H₂. In maniera analoga, le funzionalità del modello verranno ampliate potendo fruire del vasto database di componenti chimici utilizzato da CC6. Attraverso l'uso di particolari moduli di CC6 si può portare avanti la costruzione di flowsheet per il controllo e l'ottimizzazione di un impianto per la produzione di energia elettrica e idrogeno. Il modulo implementato in CC6 è basato su un modello a letto fluidizzato precedentemente sviluppato. Il simulatore scelto è un ambiente software per la modellazione e la simulazione dei processi dell'ingegneria chimica, dell'ingegneria meccanica e più in generale di processi energetici; risulta costituito da un insieme di moduli operanti all'interno di un singolo ambiente ma ognuno dotato di una propria licenza d'uso. Per poter implementare un modulo, CC6 mette disposizione tre diversi metodi: Parser, Excel/Visual Basic, C++. In questo lavoro si è fatto uso del terzo metodo: in particolare sono state progettate due dynamic link libraries (DLL) da un progetto sviluppato in ambiente C++ attraverso un uso estensivo della OOP (*object-oriented programming*).

Introduzione

L'impianto energetico comunque complesso viene modellato in CC6 attraverso l'impiego di moduli (*UnitOp*) che costituiscono l'ampia libreria di utilizzo del codice. Per ogni *UnitOp* vengono specificati i principali parametri di ingresso che caratterizzano il singolo processo e le connessioni (*Stream*) con gli altri *UnitOps* utilizzati nelle simulazioni di sistemi complessi. Una volta definito il sistema da calcolare e verificata la coerenza delle caratteristiche degli *UnitOps* e degli *Streams*, CC6 calcola sequenzialmente i bilanci di massa ed energia per tutti i componenti che costituiscono l'impianto fino alla convergenza delle condizioni termodinamiche e delle caratteristiche dei componenti calcolate a ciascuna iterazione. CC6 consente all'utente di implementare uno *UnitOp* e di 'customizzarlo' in modo tale da simulare un componente non contemplato nella libreria di calcolo. Il modulo in esame simula il comportamento dinamico di un reattore a letto fluido modellato secondo la teoria delle due fasi. In particolare è in grado di calcolare le concentrazioni del syngas opportunamente decarbonizzato riportando l'evoluzione temporale delle bolle all'interno del letto fluidizzato. Il principale risultato di questo lavoro è quello di poter ampliare le funzionalità del modello precedentemente sviluppato grazie all'utilizzo del vasto database di componenti chimici utilizzato dal CC6.

Richiamo generale della teoria delle due fasi

Il modello di un reattore a letto fluido

La separazione della CO₂ per mezzo di sorbenti solidi ad alta temperatura coinvolge una reazione gas-solido tra l'anidride carbonica e un sorbente che generalmente è composto da CaO (fase attiva del sorbente) e da una parte inerte che agisce da supporto alla fase attiva. Se nel reattore a letto fluidizzato avviene contemporaneamente la reazione steam methane reforming (SMR) e water gas shift (WGS), otterremo, nello stesso volume, reazioni eterogenee e reazioni catalitiche per la produzione di idrogeno. Il letto viene essenzialmente diviso in due fasi. Una prima fase rappresentata dalle bolle di gas (*bg*) ed una seconda costituita da una emulsione di gas e solido. Quest'ultima fase viene a sua volta modellata come composta da una fase gas (*eg*) che viaggia ad una velocità inferiore alle bolle e una fase di materiale solido, *ep*, (sorbente di CO₂ e catalizzatore di SMR e WGS). Il grado di vuoto nella fase emulsione è approssimata a quello che si può ottenere in condizioni di minima fluidizzazione quando vengono usati solidi che rientrano nella categoria B della mappa di Geldart. Per completezza vengono riportate, sinteticamente, le ipotesi fondamentali del reattore a letto fluidizzato modellato secondo la teoria a due fasi [1]:

1. Il gas attraverso l'emulsione viaggia alla velocità di minima fluidizzazione e si muove attraverso il letto in regime di 'pistone' (PF);
2. Le reazioni gas-solido e le reazioni catalitiche avvengono nella sola fase emulsione: si trascura la presenza della fase solida all'interno delle bolle. La fase composta dai solidi viene supposta essere in regime di 'mescolatore perfetto' (PM);
3. Le bolle risalgono lungo il letto ad una velocità $U_b = 0.711(gd_b)^{\frac{1}{2}} + U_s - U_{mf}$ in regime PF;
4. i reagenti gassosi vengono trasportati attraverso la il gas presente nelle bolle e nell'emulsione;
5. Il diametro delle bolle è espresso come: $d_b = 0.54(U_s - U_{mf})^{0.4}(z + 4\sqrt{A_0})^{0.8} / g^{0.2}$.

Il bilancio di materia per ogni singolo *i*-esimo componente chimico preso in considerazione (CH₄, CO, H₂O, H₂, N₂, CO₂) nelle varie fasi (*bg*, *eg*, *ep*) di cui si suppone essere composto il letto fluidizzato, conduce al seguente sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali [1]:

Bubble Gas phase

$$\frac{\partial N_{bg,i}}{\partial \tau} = \frac{\partial F_{bg,i}}{\partial z} - k_{bg,eg}(C_{bg,i} - C_{eg,i}) \frac{\epsilon}{d_b} \delta \quad (1)$$

Condizioni al contorno:

$$z = 0; \forall t > 0: F_{bg,i} = F_{i,0} \frac{u_{s0} - u_{mf}}{u_{s0}} \quad (1a)$$

Condizioni iniziali:

$$t = 0; \forall z \in (0, L) F_{bg,i} = F_{bg,i,0} \quad (1c)$$

Emulsion Gas phase

$$\varepsilon_{mf} \frac{\partial N_{eg,i}}{\partial t} = - \frac{\partial F_{eg,i}}{\partial z} - k_{bg,eg} (C_{bg,i} - C_{eg,i}) \frac{\varepsilon}{d_b} \delta + k_{bg,ep} (C_{ep,i} - C_{eg,i}) \frac{\varepsilon}{d_b} (1 - \varepsilon_{mf})(1 - \delta) \omega \quad (2)$$

$\omega = 1$ quando $i = CO_2$ altrimenti $\omega = \beta_{cat}$

Condizione al contorno

$$z = 0; \forall t > 0: F_{eg,i} = F_{i,0} \frac{u_{mf}}{u_{s0}} \quad (2a)$$

Condizioni iniziali:

$$t = 0; \forall z \in (0, L) F_{eg,i} = F_{eg,i,0} \quad (2b)$$

Emulsion Particle phase

$$\frac{\partial N_{ep,i}}{\partial t} = \frac{\varepsilon}{d_b} (1 - \varepsilon_{mf}) \beta_{cat} \left[\frac{1}{L} \int_0^L k_{eg,ep} (C_{eg,i} - C_{ep,i}) (1 - \delta) dz \right] - \rho_{cat} \beta_{cat} (1 - \varepsilon_{mf}) \left[\frac{1}{L} \int_0^L r_i (1 - \delta) dz \right] - \varphi (1 - \beta_{cat}) (1 - \varepsilon_{mf}) \left[\frac{1}{L} \int_0^L r_{c,bn} (1 - \delta) dz \right] \quad (3)$$

$\varphi = 1$ quando $i = CO_2$ altrimenti $\varphi = 0$

e condizioni iniziali:

$$t = 0; \forall z \in (0, L) N_{ep,i} = N_{ep,i,0} \quad (3a)$$

Per lo schema cinetico impiegato si rimanda a [1]. Il modello presentato consiste, quindi, di equazioni alle derivate parziali (PDE) con le relative condizioni iniziali e al contorno. Per integrare tale sistema di equazioni accoppiate con le condizioni al contorno viene proposto il metodo delle linee, una tecnica di risoluzione numerica in cui una sola delle variabili viene discretizzata, nel nostro caso la coordinata z . In tale modo vengono ottenute delle approssimazioni numeriche delle variabili $F_{bg,i}$, $F_{eg,i}$ e delle loro derivate ed il sistema di PDE viene convertito in un sistema di equazioni differenziali ordinarie (ODE) che può essere risolto usando un pacchetto software di integrazione. Nel caso esaminato è stato implementato un modulo basato sulla tecnica Runge–Kutta. Una tecnica consolidata per poter discretizzare il modello lungo una coordinata è il metodo di collocazione ortogonale. Una subroutine è già stata implementata e verificata in un altro lavoro [3] e viene, quindi, usata in questo lavoro per discretizzare assialmente il reattore attraverso 10 punti di collocazione. La soluzione viene, in particolare, calcolata utilizzando le radici di un polinomio di Legendre.

Implementazione del modulo in CC6

CC6 è estremamente flessibile per quanto riguarda l'ampliamento della libreria di calcolo attraverso opportuni *Unitops* a tutti i processi dell'ingegneria chimica, meccanica ed energetica in generale consentendo una simulazione puntuale di sistemi energetici complessi. Per poter implementare un modulo, CC6 mette disposizione tre diversi metodi: Parser, Excel/Visual Basic, C++. In questo lavoro si è fatto uso del terzo metodo: in particolare sono state progettate due dynamic link libraries (DLL) da un progetto sviluppato in ambiente C++ attraverso un uso estensivo della OOP (*object-oriented programming*). Questo ha consentito la creazione di una classe C++ (denominata *profileConcentrationDLL*) e la successiva implementazione di un 'oggetto' denominato *flub* in cui sono state compilate le equazioni del modello. Per

poter consentire all'oggetto così creato di accedere alle routines utilizzate in CC6 sono stati creati i seguenti files: (i) *usradd.dll* – la DLL che contiene l'algoritmo di inizializzazione del modello; (ii) *add.my* – il file che consente l'immissione dei parametri di ingresso del modello attraverso opportuna interfaccia grafica; (iii) *add.map* – in questo file vengono definite le variabili di ingresso al modello (*uspec*); (iv) *add.lab* – consente la gestione del report finale in cui vengono riportate i risultati delle simulazione secondo un format deciso dallo sviluppatore. Creato l'oggetto *flub*, questo può accedere alle varie funzioni di libreria definite in ambiente CC6. Questa libreria può essere divisa in (a) funzioni generali per l'accesso ad altri moduli e *streams* e funzioni di stampa dei risultati ottenuti; (b) funzioni per la conversione di unità di misure; (c) funzioni per il calcolo delle proprietà generali dei componenti chimici: come la densità, il calore specifico a volume e pressione costante; (d) funzioni per il calcolo delle proprietà termodinamiche: ad esempio entalpia ed entropia delle correnti gassose. Oltre questi files è stato creato anche una ulteriore DLL in cui viene riportata la classe *profileConcentrationDLL* in cui vengono definiti variabili e metodi dell'oggetto *flub*. Ad esempio, all'interno di tale classe è stato implementato un metodo per la discretizzazione secondo l'asse del reattore della derivata prima per ogni componente chimico CH_4 , CO , H_2O , H_2 , N_2 , CO_2 e per ogni fase presente nel reattore (*bg*, *eg*, *ep*); inoltre sono state costruite funzioni esterne alla classe in grado di integrare le equazioni del modello attraverso la tecnica di Runge–Kutta. L'inserimento dell'oggetto *flub* consente inoltre di utilizzare funzioni termodinamiche o cinetiche e di scambiare dati con altri programmi. In particolare è stata utilizzata la funzione *addrxn0* che consente l'implementazione del modello cinetico di Langmuir–Hinshelwood che è l'espressione standard usata da CC6. Inoltre, con l'ausilio di funzioni native è possibile leggere i dati degli *streams* in ingresso al modulo attraverso l'oggetto SINP; leggere i parametri di ingresso al modulo per mezzo del vettore *uspec* precedentemente definito durante l'inizializzazione del modulo; riportare negli *streams* di uscita dal modulo i risultati della simulazione attraverso l'ausilio di un ulteriore oggetto SOUT. Altra funzionalità interessante in CC6 è la possibilità di calcolare diverse proprietà delle correnti in ingresso e in uscita dal modulo utili per portare avanti la simulazione del reattore in esame. Ad esempio può essere agevolmente calcolato la densità, la viscosità del gas da decarbonizzare e utili alla definizione del numero di Reynolds delle singole particelle che compongono il letto e quindi del regime di fluidizzazione ivi instaurato. Infine il modello può essere potenziato attraverso l'utilizzo di un modello modificato Benedict Webb Ruben Starling (BWRS) per lo studio della compressione del trasporto e stoccaggio della CO_2 . La necessità di costruire ed implementare un modulo di un reattore a letto fluido risiede nel fatto che all'interno della libreria di CC6 non è previsto un reattore cinetico che tenga conto di una eventuale reazione gas–solido come la separazione della CO_2 attraverso un sorbente solido a base di CaO. Nella classe *profileConcentrationDLL* di cui *flub* è un'istanza è stato implementato un metodo che tiene conto della contemporanea diffusione e reazione della CO_2 attraverso la particella di sorbente solido (Eq. 4). Infine, è possibile calcolare il campo di velocità che si viene a instaurare nella fase bolle e quindi i vari regimi di fluidizzazione del letto.

$$r_{cbn} = N_{CaO} \frac{dX}{dt} = \frac{k_{cbn} \sigma_{CaO} (1-X)^{\frac{2}{3}} (C_{CO_2} - C_{CO_2,e})}{1 + \frac{k_{cbn}}{2D_{pl}} \delta_{CaO} \sqrt[3]{1-X} \left[1 - \sqrt[3]{\frac{1-X}{1+X(Z-1)}} \right]}$$

Il modello CC6

Il comportamento dinamico del reattore a letto fluidizzato è stato studiato per mezzo del modulo *Dynamics* messo a disposizione da CC6; in particolare il modulo *Dynamics* è in grado di fornire a video i valori calcolati attraverso la classe implementata e controllare l'andamento della simulazione istante per istante, individuando quindi, possibili errori durante la convergenza delle equazioni. In Fig. 1 viene riportato il modulo del reattore a letto fluidizzato in un semplice flowsheet di ChemCad. È stato utilizzato il modulo rampa per potere simulare lo start-up del reattore attraverso l'aumento graduale di portata e/o temperatura della corrente in ingresso. All'uscita del reattore, invece, sono stati previsti due streams che contengono i risultati dell'integrazione del modello l'uno della fase bolle (*bg*) l'altro del gas nell'emulsione

(eg). Facendo confluire queste due correnti ideali in un modulo mixer (non rappresentato nel flowsheet) otteniamo la composizione media della corrente in uscita dal letto fluidizzato.

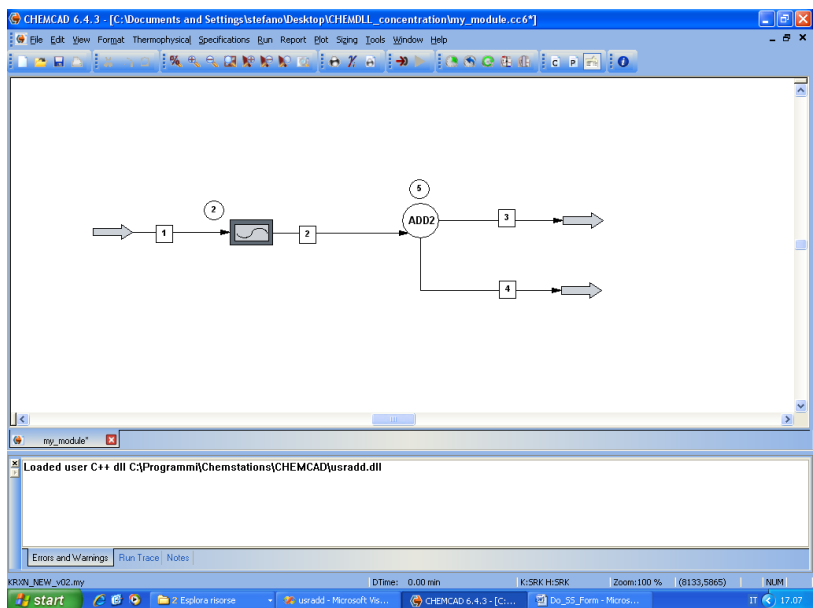


Figura 1 Modulo *flub* in foglio di calcolo ChemCad 6

L'evoluzione della concentrazione dei singoli componenti chimici può essere letta attraverso l'uso di variabili I/O del modulo *flub*. L'interfaccia grafica del modulo implementato è riportata in Fig.2. Come si può notare questa interfaccia è costituita da due schede.

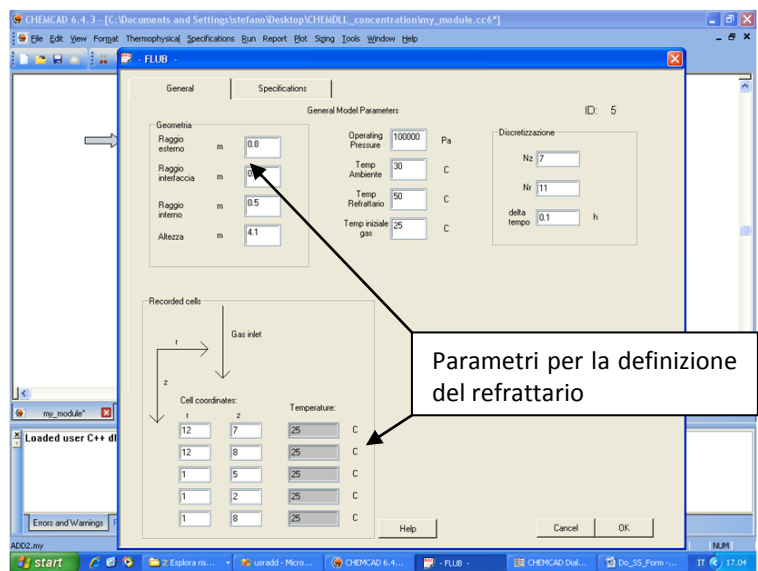


Figura 2 Interfaccia grafica del modulo *flub*: (a) scheda 'General' (b) scheda 'Specifications'

Attraverso la prima scheda 'General' si possono inserire i parametri principali del reattore (temperatura, pressione) e dello schema numerico adottato (passo temporale e numero di intervalli lungo l'asse del reattore). L'interfaccia consente di inserire anche le grandezze geometriche più interessanti (diametro interno e altezza del reattore). Inoltre il modulo è stato predisposto per il calcolo dell'evoluzione della temperatura all'interno del guscio cilindrico di refrattario che avvolge il letto di particelle. A tal proposito possono essere inseriti lo spessore del refrattario ed il numero di celle in cui può essere discretizzato consentendo, quindi, il calcolo dell'evoluzione temporale in tutto il volume del refrattario. Attraverso la seconda scheda 'Specifications' di cui è composta l'interfaccia possono essere inseriti le condizioni iniziali

del modulo in termini di frazioni molari dei singoli composti chimici che costituiscono la miscela gassosa da decarbonizzare.

Attraverso l'interfaccia è possibile anche inserire il numero di reazioni catalitiche che avvengono nella fase emulsione in particolare sulla superficie del catalizzatore. La velocità di reazione di ogni singolo componente chimico i -esimo nella reazione j -esima viene descritto secondo la relazione riportata in Eq. 5:

$$r_i = \sum_{j=1}^{nr} \left[\left(Y_{i,j} A_j e^{\frac{-E_j}{RT}} \prod_{k=1}^{nr} C_k^{a_{k,j}} \right) \left(1 + \sum_k \phi_{k,j} e^{\frac{-E_{k,j}}{RT}} C_k^{b_{k,j}} \right)^{-\beta_j} \right] \quad (5)$$

Completato l'inserimento dei parametri per l'inizializzazione del modulo, viene richiamata l'interfaccia per il passaggio dei vari parametri (Fig. 3) che definiscono la velocità di reazione delle varie specifiche. Una volta completato questo passaggio, il modulo è pronto per essere utilizzato all'interno di CC6 in modo dinamico.

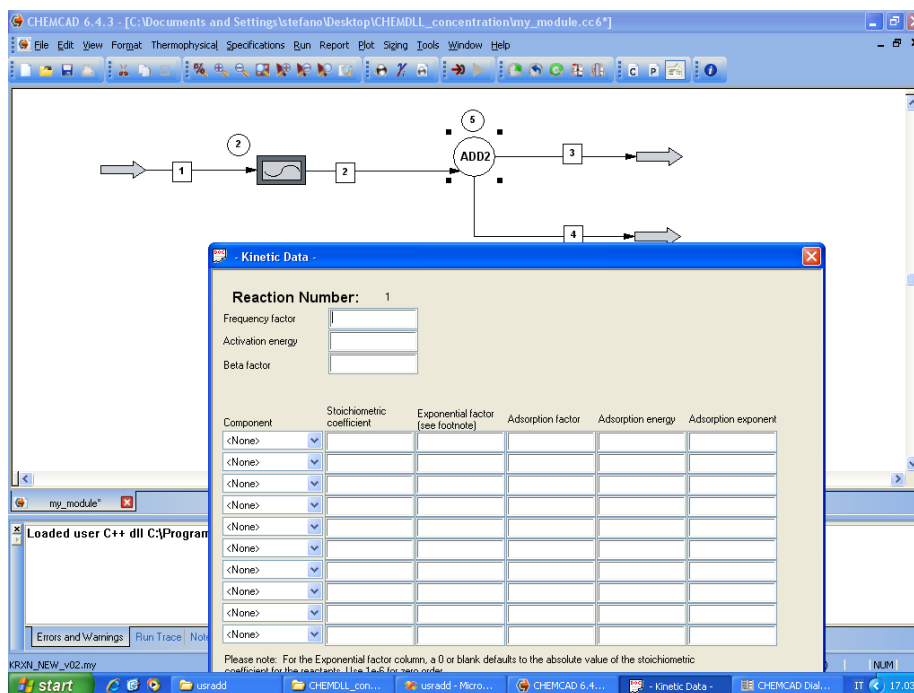


Figura 3 Interfaccia per l'inserimento dei parametri cinetici

Conclusioni

Il modello di un letto fluido per la separazione della CO_2 è stato implementato in ambiente CC6. Le potenzialità di tale modello si sono ampliate grazie all'accesso di un vasto database presente in CC6 sui componenti chimici puri. I risultati da questo lavoro sono i primi passi verso la completa integrazione del modulo *flub* con altri che si stanno progettando: simulatore di un gassificatore e di una turbina. L'obiettivo di questo lavoro di più ampio respiro è la costruzione di una piattaforma comune per la simulazione di impianti di potenza e per il controllo del processo di produzione di H_2 con separazione integrata della CO_2 .

Riferimenti bibliografici

1. S. Stendardo, A. Calabrò, P.U. Foscolo "Modellazione di un reattore eterogeneo fluido-solido per la produzione di idrogeno e la cattura della CO_2 ." (2011) Report RdS/2011/213;
2. AA.VV Chemstations, Inc. CHEMCAD CC6 Version 6 User Guide;
3. S. Stendardo, P.U.Foscolo "Carbon Dioxide Capture with Dolomite: a Model for Gas-Solid Reaction within the Grains of a Particulate Sorbent", (2009) Chem. Eng. Sci. 64, 2343–2352.

Abbreviazioni ed acronimi

A_0	catchment area
A_j	Frequancy factor nella reazione j-esima
$a_{k,j}$	fattore esponenziale per il gas k-esimo nella reazione j-esima
$b_{k,j}$	fattore esponenziale di adsorbimento per il gas k-esimo nella reazione j-esima
C_k	concentrazione molare del gas k-esimo
D	coefficiente di diffusione
d	diametro
E_j	energia di attivazione nella reazione j-esima
F	flusso molare
g	accelerazione di gravità
i	i-esimo componente $i \in \{CH_4, H_2O, CO, H_2, CO_2, N_2\}$
j	j-esima reazione chimica
k	coefficiente di trasferimento di material tra due fasi, costante cinetica
L	lunghezza del letto
N	numero di moli per unità di volume
PF	flusso a pistone
PM	mescolatore perfetto
R	costante universale dei gas
r	velocità di reazione dell'i-esimo componente
T	temperatura
t	tempo
U	velocità superficiale
X	conversione locale del CaO
z	coordinate spaziale
Z	rapporto tra il volume molare del $CaCO_3$ e del CaO

Lettere greche

β	fattore beta per la reazione j-esima
δ	diametro medio del grano, frazione di bolle presenti nel letto
ε	frazione di vuoto
$\gamma_{i,j}$	coefficiente stechiometrico del componente i-esimo nella reazione j-esima
$\phi_{k,j}$	costante di adsorbimento del componente k-esimo nella reazione j-esima
σ	superficie specifica per unità di volume dei grani di CaO

Pedice

0	ingresso, valore iniziale
b	bolle
bg	bubble gas
CaO	ossido di calcio
cat	catalizzatore
cbn	reazione di carbonatazione dell'ossido di calcio
e	equilibrio
eg	emulsion gas
ep	emulsion particle
mf	minima fluidizzazione
pl	strato solido del prodotto
S	superficiale

Appendice

Curriculum del gruppo di ricerca

Il gruppo di ricerca di Reattori Chimici e Fluidodinamica presso l'Università degli studi dell'Aquila, di cui è responsabile il Prof. Pier Ugo Foscolo, è attivo nella ricerca sulla gassificazione della biomassa a letto fluidizzato da circa 15 anni. Progetti in laboratorio e su scala pilota sono stati condotti a livello internazionale, finanziati dall'Unione Europea e accordi bilaterali. Questo gruppo è anche membro di reti permanenti di ricerca su "biomass for energy" e "sustainable development" (ARCUS, GDRI, ICTP / TRIL; CIRBE, CIRPS). Diverse aree tematiche relative sono stati coltivate e attivamente sviluppate, in particolare, l'elenco che segue riporta le principali aree di competenza:

- gassificazione catalitica della biomassa con vapore;
- progettazione di impianti chimici, petrolchimici ed energetici;
- comportamento fluidodinamico di reattori chimici a letto fluido, ad alta temperatura e pressione;
- Simulazione CFD di apparecchiature a letto fluido e sistemi di reazione eterogenei.

Tra le collaborazioni internazionali più durature e consolidate di questo gruppo di ricerca, va menzionata quella con il Laboratorio dei Materiali, Superfici e Processi per la Catalisi dell'Università di Strasburgo (UMR 7515 - ECPM), attiva da oltre quindici anni.

Questa cooperazione ha ricevuto diversi riconoscimenti formali attraverso contratti di ricerca europei (4°, 5° e 7° PQ) in cui figuravano entrambi i partners:

- JOR3-CT95-0037 "Production of hydrogen-rich gas by biomass gasification: application to small-scale, fuel cell electricity generation in rural areas."
- JOR3-CT97-0196 "Hydrogen-rich gas from biomass steam gasification". Questo secondo contratto ha consentito la realizzazione di un impianto pilota da 500kW, basato sulla tecnologia a letto fluidizzato circolante, e situato nel centro di ricerca di ENEA Trisaia.
- ENK5-CT2000-00314 "Biomass-gasification and fuel-cell coupling via high-temperature gas clean-up for decentralised electricity generation with improved efficiency." Il terzo contratto ha permesso di aggiungere al reattore esistente in Trisaia, l'unità di pulizia ad alta temperatura dei gas prodotti.
- UNIQUE N° 211517 (2008-2010) FP7-ENERGY - Advanced gas cleaning technologies for biomass - "Integration of particulate abatement, removal of trace elements and tar reforming in one biomass steam gasification reactor yielding high purity syngas for efficient CHP and power plants." Questo quarto contratto, appena concluso, ha portato alla validazione di una tecnologia che combina in un solo reattore, la gassificazione della biomassa e la pulizia dei gas prodotti. Il coordinamento generale è stato affidato all'Università degli Studi di L'Aquila.
- UNIFHY (2012-2015) - "UNIQUE gasifier for hydrogen production"(Proposal N. 299732) Call FCH-JU-2011-1; Topic SP1-JTI-FCH.2011.2.3 «Biomass-to-hydrogen thermal conversion process» attualmente in fase di negoziazione e coordinato nell'ambito del CIRPS - Centro Interuniversitario di Ricerca Per lo Sviluppo sostenibile, a cui l'Università dell'Aquila aderisce.

Tra le collaborazioni nazionali di questa Unità di Ricerca c'è da annoverare la collaborazione con l'ENEA (Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia e lo sviluppo economico sostenibile), sia in quanto partner nei progetti europei sopra menzionati, sia nell'ambito di progetti di ricerca nazionali. Tra questi, il progetto TEPSI, finanziato dal MIUR (D.M. 1757/Ric. del 28 luglio 2005) con 6,7 milioni di Euro, e coordinato da ENEA con la partecipazione di Ansaldo Ricerche e Consorzio Universitario CIRPS, nel cui ambito è stato impegnato anche questo gruppo di ricerca. In questo quadro rientrano anche le attività condotte in ambito CSLF (Carbon Sequestration Leadership Forum), a livello europeo e nazionale, in particolare in forte raccordo con il MAP (Ministero delle Attività Produttive) ma anche con il Ministero dell'Ambiente. Dal 2008 è stata ulteriormente rafforzata la rete di collaborazioni, in particolare in ambito CSLF. Tra i temi di interesse sono gli impianti IGCC (*integrated gasification combined cycle*), e più in generale gli impianti a combustibili fossili con "zero emission". Particolare attenzione è stata rivolta all'esigenza di stringere rapporti con i Paesi in via di Sviluppo, che si identificano essenzialmente nella Repubblica Popolare Cinese.

Le tematiche sviluppate in queste collaborazioni fanno riferimento alle diverse fasi di processo relative al sistema integrato ZECOMIX (Zero Emission Coal Mixed Technology) orientato alla produzione di H₂ e/o energia elettrica dal carbone con alte efficienze (valore netto attorno al 50%) ed emissioni nulle.

Questo gruppo di ricerca ha progettato le unità di gassificazione e di decarbonizzazione dell'impianto pilota "TEPSI" realizzato presso il Centro Ricerche Casaccia dell'ENEA. L'impianto produce energia elettrica mediante conversione del carbone nel vettore idrogeno, con sequestro di CO₂ e combustione in microturbina attraverso le seguenti fasi:

1. produzione di syngas da carbone mediante gassificazione a vapore ed ossigeno in reattore a letto fluido;
2. produzione di idrogeno da syngas e separazione della CO₂ mediante reazione di assorbimento della CO₂ da parte di opportuno sorbente a base di ossido di calcio all'interno di un reattore a letto fluido;
3. produzione di elettricità in microturbina a gas equipaggiata con camera di combustione sperimentale per combustione "diluita" H₂-O₂.