



UNIUNEA EUROPEANĂ



GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI,
PROTECȚIEI SOCIALE ȘI
PERSONELOR VĂRSTNICE
AMPOSDRU



Fondul Social European
POSDRU 2007-2013



Instrumente Structurale
2007-2013



MINISTERUL
EDUCAȚIEI
NAȚIONALE
OIPOSDRU



UNIVERSITAS
GALATIENSIS

Universitatea „Dunărea de Jos” din Galați
Școala doctorală de inginerie



REZUMAT TEZĂ DE DOCTORAT

STUDIUL NUMERIC AL PROCESELOR FIZICO-CHIMICE ASOCIATE COMBUSTIEI BIOMASEI

Doctorand,

Ing. Răzvan A. MAHU

Conducător științific,

Prof. univ. dr. ing. Florin POPESCU

Seria I6: Inginerie Mecanică Nr. 13

GALAȚI

2013



UNIUNEA EUROPEANĂ



GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI,
PROTECȚIEI SOCIALE ȘI
PERSOANELOR VÂRSTNICE
AMPOSDRU



Fondul Social European
POSDRU 2007-2013



Instrumente Structurale
2007-2013



MINISTERUL
EDUCAȚIEI
NAȚIONALE
OIPOSDRU



UNIVERSITAS
GALATIENSIS

Universitatea „Dunărea de Jos” din Galați
Școala doctorală de inginerie



REZUMAT TEZĂ DE DOCTORAT

STUDIUL NUMERIC AL PROCESELOR FIZICO-CHIMICE ASOCIATE COMBUSTIEI BIOMASEI

Doctorand,

Ing. Răzvan A. MAHU

Conducător științific:

Prof. univ. dr. ing. Florin POPESCU

Referenți științifici:

Prof. univ. dr. ing. Radu M. DAMIAN
Prof. univ. dr. ing. Paul D. STĂNESCU
Conf. univ. dr. ing. Ion V. ION

Seria I6: Inginerie Mecanică Nr. 13

GALAȚI

2013

Mulțumiri

Cu siguranță cea mai dificilă încercare a vieții mele de până acum, această lucrare nu ar fi văzut lumina zilei fără contribuția și ajutorul neprețuit al unor persoane dragi mie.

Cel fără de care nici măcar nu aș fi apucat pe acest drum și căruia țin să îi mulțumesc în mod deosebit aici este domnul profesor dr. ing. Florin POPESCU. Fiind în primul rând un om de caracter și cu o ținută morală deosebită, domnia sa întruchipează ceea ce eu numesc un adevărat dascăl, așa cum rar mai există astăzi. Arătându-mi tot timpul calea de urmat și oferindu-mi cele mai bune sfaturi, domnul profesor m-a ghidat negreșit către finalizarea cu succes a acestui studiu, chiar și atunci când sorții au părut potrivnici.

În același timp, o contribuție foarte importantă a avut și domnul conferențiar dr. ing. Ion V. ION, căruia îi adresez de asemenea mulțumiri. Pe lângă discuțiile tehnice purtate, meritul dumnealui este acela de a fi fost, la rândul său, mereu încrezător în capacitatea mea de a-mi duce demersul până la capăt.

Fără ajutorul domnului lector dr. fiz. Gabriel MURARIU, care cu toată răbdarea m-a sprijinit, activitatea mea nu s-ar fi putut desfășura astfel. De aceea îi port un deosebit respect și îi mulțumesc.

Cu toată considerația, mulțumesc doamnei dr. ing. Cristina OPREA, care dând dovadă de multă înțelegere și totodată de o remarcabilă apreciere pentru efortul meu, m-a susținut neîncetat, din toate punctele de vedere.

Cele mai calde mulțumiri le datorez părinților mei, a căror bucurie și, de ce nu, mândrie pentru isprava fiului lor, a constituit o motivație deosebită. Fratelui meu îi mulțumesc pentru încurajările sincere și pentru suportul moral neprețuit de-a lungul acestor ani.

Iar nu în cele din urmă, doresc să-mi exprim recunoștința pentru sprijinul partenerei mele de viață, Ionela, care mi-a fost alături atât la bine cât și la greu și m-a ajutat să depășesc toate obstacolele acestui drum anevoios, la al cărui capăt n-aș fi ajuns fără ea.

Această lucrare a fost realizată în cadrul proiectului POSDRU “*Calitatea și continuitatea formării în cadrul ciclului de studii doctorale – TOP ACADEMIC*” 107/1.5/S76822.

Galați, 2013

Ing. Răzvan A. MAHU

CUPRINS

Introducere	XI
Notății și abrevieri	XVII
Lista figurilor	XIX
Lista tabelelor	XXIII
1. STADIUL ACTUAL AL CERCETĂRII ÎN DOMENIU	1
1.1. Problema energiei la nivel mondial.....	1
1.2. Biomasa: posibilități de valorificare, potențial energetic	5
1.3. Structura, compoziția și proprietățile biomasei	7
1.3.1. Celuloza	10
1.3.2. Hemiceluloza	11
1.3.3. Lignina	12
1.4. Conversia termochimică a biomasei	13
1.4.1. Piroliza	14
1.4.2. Gazificarea	15
1.4.3. Combustia	15
1.5. Factori ce influențează descompunerea termică a biomasei	17
1.5.1. Conținutul de apă	17
1.5.2. Compoziția	17
1.5.3. Frația anorganică	18
1.5.4. Proprietăți fizice, temperatura și viteza de încălzire	19
1.5.5. Forma și dimensiunile biomasei	19
1.6. Modelarea descompunerii termice a biomasei – scurt istoric și stadiul actual	20
1.6.1. Modelarea cinetică a descompunerii biomasei	21
1.6.2. Modelarea descompunerii particulei izolate	33
1.6.3. Modelarea descompunerii biomasei la scară industrială	38
1.7. Concluzii	39
2. MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR FIZICO-CHIMICE ASOCIATE COMBUSTIEI BIOMASEI	41
2.1. Prezentarea generală a modelului de combustie	41

2.2. Modelarea proprietăților fizice ale biomasei	46
2.2.1. Densitatea biomasei și fenomenul de contracție	47
2.2.2. Conductivitatea termică	50
2.2.3. Căldura specifică	55
2.2.4. Difuzivitatea volatilelor și permeabilitatea biomasei	59
2.3. Modelarea uscării și devolatilizării biomasei	61
2.3.1. Modelarea evaporării umidității inițiale	61
2.3.2. Modelarea devolatilizării biomasei	63
2.4. Modelarea gazificării și combustiei rezidului carbonos	68
2.5. Modelarea combustiei volatilelor	71
2.6. Prezentarea detaliată a modelului cinetico-chimic de piroliză	74
2.6.1. Componentele modelului cinetico-chimic	75
2.6.2. Etapele modelării cinetico-chimice a descompunerii biomasei	76
2.7. Concluzii	96
3. MODELAREA NUMERICĂ A PROCESELOR FIZICO-CHIMICE ASOCIATE COMBUSTIEI BIOMASEI	99
3.1. Funcția externă de implementare a modelului	99
3.2. Modelarea numerică a curgerii	103
3.2.1. Modelul Navier-Stokes. Mediarea în sensul lui Reynolds (RANS)	103
3.2.2. Modelarea turbulenței	106
3.2.3. Modelarea reacțiilor chimice	107
3.2.4. Modelarea radiației	108
3.3. Simularea numerică	110
3.3.1. Domeniul de calcul. Grila de discretizare spațială	110
3.3.2. Condiții pe granițe	112
3.3.3. Solver numeric CFD. Scheme numerice de discretizare spațială și temporală	113
3.4. Concluzii	115
4. VERIFICAREA ȘI VALIDAREA MODELULUI NUMERIC DE COMBUSTIE A BIOMASEI	117
4.1. Prezentarea experimentului utilizat pentru validare	117
4.2. Verificarea și validarea modelului de uscare și devolatilizare	120
4.2.1. Modelarea CFD 2D vs. modelarea CFD 3D	120
4.2.2. Rezultatele simulărilor efectuate pe modele CFD bidimensionale	122

4.2.3. Rezultatele simulărilor efectuate pe modele CFD tridimensionale	124
4.3. Verificarea și validarea modelului de combustie	127
4.4. Concluzii	136
5. STUDIU DE CAZ – SIMULAREA COMBUSTIEI BIOMASEI ÎNTR-UN CAZAN CU FLACĂRĂ ÎNTOARSĂ	139
5.1. Configurația cazanului cu flacără întoarsă	139
5.1.1. Structura cazanului, funcționare, caracteristici	140
5.1.2. Rezultate experimentale	143
5.2. Modelul numeric al cazanului	144
5.2.1. Modelarea incintelor cazanului	144
5.2.2. Introducerea aerului de combustie	147
5.2.3. Modelarea biomasei	149
5.3. Simularea numerică a arderii în șarjă	149
5.3.1. Particularități ale simulării numerice CFD în regim nestaționar	150
5.3.2. Resurse de calcul	150
5.4. Rezultatele simulării numerice a procesului de combustie	151
5.4.1. Rezultate numerice	152
5.4.2. Posibilități de îmbunătățire a funcționării cazanului	161
5.5. Concluzii	162
6. CONCLUZII GENERALE, CONTRIBUȚII PERSONALE ȘI PERSPECTIVE	163
6.1. Concluzii generale	163
6.2. Contribuții personale	164
6.3. Perspective	165
Lista lucrărilor publicate și prezentate	167
Bibliografie	169
ANEXE	175

INTRODUCERE

Biomasa este una dintre cele mai importante resurse regenerabile de energie. Utilizată progresiv încă de la începuturile societății umane, biomasa a contribuit în mod esențial la dezvoltarea acesteia. Până la momentul descoperirii cărbunelui și, ulterior, a celorlalte resurse fosile de energie (petrolul și gazele naturale), biomasa a fost unica modalitate de a genera energie termică, care la rândul ei a fost aplicată în numeroase moduri, de la simpla încălzire a locuinței sau hranei, până la tehnologiile metalurgice specifice acelor vremuri. Astăzi, biomasa încă reprezintă o sursă de energie primară pentru o mare parte din populația Terrei, mai mult de două treimi din consumul de energie obținută din biomasă la nivel mondial fiind utilizat în mod tradițional, prin ardere directă.

Pentru societatea modernă, rolul biomasei capătă din nou importanță, pe măsură ce potențialul acesteia este recunoscut și exploatat, însă la un alt nivel. Tehnologiile moderne de valorificare a biomasei, spre deosebire de metodele tradiționale caracterizate prin pierderi foarte mari, beneficiază de randamente mult superioare. De exemplu, un cazan modern de dimensiuni mici, folosit pentru producerea de apă caldă și căldură pentru o locuință prin arderea biomasei sub diverse forme, poate atinge un randament termodinamic de 80–85 [%]. Modalitățile de convertire a biomasei în forme de energie secundare (energie termică și electrică) sunt multiple, cele mai utilizate sunt însă metodele termochimice și cele bi-chimice, din care rezultă în primul rând diverși produși intermediari, ce pot fi ulterior folosiți pentru obținerea directă a energiei și, eventual, o anumită fracție de energie termică sub forma unui produs secundar. Totuși, mai mult de 80 [%] din energia extrasă din biomasă este energie termică consumată direct în aplicații casnice sau industriale. Din acest motiv, cea mai importantă metodă de conversie este și va continua să fie așa pentru încă multă vreme, combustia biomasei.

Cu toate aceste tehnologii deja existente, ce sunt capabile să valorifice biomasa mult mai bine decât era posibil în trecut, descompunerea termică a biomasei este un domeniu de studiu încă insuficient explorat. Explicația pentru acest fapt este probabil interesul redus acordat acestei forme de energie, comparativ cu alte forme precum energia fosilă sau cea nucleară. Deși modelarea matematică a fenomenelor ce însoțesc transformările biomasei în condiții de temperatură înaltă a fost începută încă de la jumătatea secolului trecut, practic prea puțin s-a schimbat de atunci în acest domeniu. Este adevărat că și în cazul acestei forme de studiu teoretic progresul a depins într-o mare măsură de introducerea sistemelor de calcul electronice, însă nici măcar acestea nu au putut aduce o revoluție. Principalul motiv este complexitatea extraordinară a procesului. Lăsând la o parte fizica atomului, practic toate tipurile de procese fizice și chimice se regăsesc sub diferite forme în descompunerea termică a biomasei. Numai transformările chimice ale constituenților biomasei, celuloza, hemiceluloza și lignina, presupun mecanisme de reacție care nici teoretic și nici experimental nu au putut fi încă pe deplin lămurite.

În aceste condiții, modelarea matematică s-a rezumat la adoptarea unor metode simple, bazate pe ipoteza că descompunerea termică a biomasei poate fi aproximată prin câteva reacții globale, ai căror parametri pot fi determinați pe cale experimentală. Aceste metode sunt cunoscute sub denumirea de metode de modelare cinetice. Chiar și din această clasă de metode, în timp s-au remarcat unele forme, precum metodele bazate pe distribuția energiei de activare (DEA), al căror potențial este deosebit, dar care sunt total dependente de măsurătorile experimentale, iar aplicabilitatea modelelor rezultate este foarte restrânsă. Modelarea clasică, cu scheme cinetice conținând câteva reacții approximate cu relații de tip Arrhenius, constituie încă o formă de modelare cinetică intens utilizată, mai ales datorită disponibilității schemelor cinetice consacrate și ușurinței de implementare a acestora.

Fiind doar un prim pas din partea autorului în această direcție, scopul acestui studiu a fost acela de a identifica și pune în valoare la maximum posibilitățile reale ale acestor scheme de modelare cinetică, printr-o metodă originală, pentru simularea arderii biomasei. Pentru realizarea modelării procesului de ardere a biomasei este necesar un model care să

poată simula toate fazele descompunerii, începând cu uscarea biomasei și continuând cu devolatilizarea și arderea volatilor și finalizând cu arderea cărbunelui. Un astfel de model trebuie să conțină atât submodele pentru transformarea biomasei în produși primari, ceea ce implică calcularea transferului termic, calcularea vitezei de descompunere a biomasei și estimarea fracțiilor și compoziției chimice a produșilor, cât și submodele pentru transportul produșilor volatili în interiorul particulei de biomasă și difuzia lor în mediul înconjurător, arderea lor efectivă și oxidarea reziduului carbonos. Includerea tuturor acestor aspecte într-un singur model matematic este excesiv de dificilă, ideea acestui studiu fiind cuplarea unui program pentru simularea dinamicii fluidelor (CFD) cu un model de descompunere a biomasei, creat într-un mod care să permită integrarea acestuia în program. Rolul modelului de descompunere ar fi acela de a rezolva problema până la nivelul compoziției chimice a amestecului de volatili, urmând ca programul CFD să se ocupe de transportul speciilor și simularea combustiei.

În primul capitol al lucrării este prezentat stadiul actual al modelării descompunerii termice a biomasei, cu accentul pe schemele cinetice publicate în literatură. Acestea sunt prezentate în ordinea complexității, mergând până la schemele cinetice cele mai complicate existente la acest moment. Dintre acestea, schema lui Miller și Bellan (1997) este identificată ca cea mai potrivită scopului propus, pe baza validărilor experimentale și a caracterului de generalitate pe care schema îl deține. Un alt motiv este faptul că schema M-B este suficient de simplă pentru a putea fi implementată într-un program CFD, ceea ce nu se poate afirma despre alte scheme, mult mai complexe. În finalul capitolului se realizează o discuție a modelelor de descompunere a biomasei publicate de diverși autori, acestea fiind tratate conform gradului de simplificare a problemei. Cea mai importantă concluzie care se desprinde din această discuție este faptul că, la acest moment, practic nu există niciun model complet, tridimensional, care să poată simula toate aspectele combustiei biomasei.

Cel de-al doilea capitol introduce conceptul modelului numeric de combustie ce a fost realizat în cadrul acestui studiu, printr-o descriere generală a funcționalității și structurii sale. În continuare, se descriu modalitățile prin care au fost rezolvate diferite probleme legate de modelarea proprietăților de material ale biomasei. Apoi se trece la prezentarea metodelor de modelare matematică a etapelor de descompunere a biomasei, respectiv a uscării și devolatilizării biomasei, a gazificării și combustiei reziduului carbonos și a combustiei volatilor. Toate metodele alese, ipotezele simplificatoare sau elementele originale sunt justificate temeinic. Printre elementele originale este și conceperea modelului de gazificare și combustie a cărbunelui, care consideră cărbunele un amestec de carbon, hidrogen și oxigen cu compoziție dependentă de temperatură. Modelarea arderii volatilor este realizată cu un mecanism de reacție simplificat, datorită constrângerilor legate de efortul de calcul asociat simulării numerice a procesului global, fără a pierde însă din vedere esențialul. Un alt aspect original este tratarea separată a arderii gudroanelor, care sunt mai întâi descompuse termic în specii mai simple. În finalul capitolului 2 este prezentată în detaliu prima parte a modelului numeric de combustie, respectiv modelul cinetico-chimic. Exceptând schema cinetică (căreia oricum i s-au adus unele modificări), întreaga abordare descrisă este originală. Pornind de la ipotezele de bază ale schemei cinetice Miller-Bellan, respectiv (1) posibilitatea descrierii compoziției biomasei ca un amestec de celuloză, hemiceluloză, lignină, cenușă și apă și (2) ipoteza superpoziției efectelor descompunerii individuale a celor trei componente principale, se dezvoltă un întreg raționament matematic, simplu și eficient. Din acest raționament rezultă, în final, fracțiile produșilor primari de descompunere, compoziția chimică a volatilor și proprietățile termodinamice ale tuturor produșilor, toate ca funcții numai de temperatură. Dintre acestea, cea mai importantă realizare este obținerea compoziției chimice a gazelor atât a celor primare, cât și a celor secundare (rezultate din descompunerea gudroanelor), fără de care simularea arderii propriu-zise nu este posibilă.

Capitolul al treilea prezintă celelalte două componente ale modelului numeric de combustie, respectiv funcția de implementare a modelului de descompunere a biomasei și modelul de simulare a dinamicii fluidelor. Aceste două componente constituie modelul dinamic, cu ajutorul căruia se efectuează simularea efectivă a procesului de descompunere termică și de ardere a volatilor. Se descrie modalitatea de concepere și realizare a funcției

de implementare care, în esență, este un program complex redactat în limbajul C și compilat într-o librărie dinamică atașată modelului numeric. Acest program conține toate rutinele cu ajutorul cărora sunt calculate vitezele de generare a diferitelor fracții de produși de descompunere, compoziția chimică volatilelor și bilanțul termic al procesului. Pe lângă acestea, mai sunt incluse și rutine de calcul a proprietăților de material pentru biomasa brută și rezidul solid și un model pentru calculul coeficientului de absorbție a radiației de concepție originală. Modelarea CFD este prezentată strict la obiect, respectiv doar elementele relevante pentru problema simulării combustiei biomasei.

În capitolul al patrulea este tratată problema verificării și validării modelului de combustie. Rezultatele experimentale pe baza cărora s-a realizat validarea au fost obținute prin descompunerea termică în atmosferă neutră și în atmosferă oxidantă a unor particule de biomasă, într-un reactor special proiectat și construit în acest sens de către Ip (2005) și utilizat de Lu pentru realizarea experimentelor (2006). Comparația dintre datele măsurate și cele calculate cu modelul numeric este foarte favorabilă, demonstrând potențialul modelului și acuratețea acestuia. Se poate susține chiar faptul că rezultatele modelului sunt printre cele mai precise dintre cele publicate în literatură, în legătură cu experimentul lui Lu. Acuratețea modelului este probată nu numai în cazul descompunerii pirolitice, în absența oxigenului, dar și pentru cazul arderii particulei experimentale, corespondența cu datele măsurate fiind remarcabilă. Faptul că rezultatele acestea au fost obținute fără a introduce măcar un singur parametru ajustabil în model, certifică formularea fundamental corectă a acestuia.

Pentru a demonstra și utilitatea practică a modelului conceput în acest studiu, într-al cincilea capitol este prezentată aplicarea acestuia la modelarea și simularea numerică a unei probleme complexe, respectiv arderea brichetelor de biomasă într-un cazan cu flacăra întoarsă de mici dimensiuni. Rezultatele simulării numerice nestăționare a combustiei în cazan sunt foarte încurajatoare, avantajul deosebit pe care îl demonstrează modelul fiind posibilitatea de a studia în cele mai mici amănunte procesul simulat, dincolo de posibilitățile oferite de orice metodă experimentală existentă. Cel mai important aspect este faptul că aceasta este una dintre foarte puținele încercări la nivel mondial de a modela și simula o astfel de problemă, la un asemenea nivel de complexitate. Acest lucru se poate explica și prin faptul că abordarea problemei prezentate poate fi realizată numai printr-un model numeric care să cuprindă toate aspectele prezentate în capitolele 1 și 2, respectiv cuplarea strânsă a ambelor probleme, descompunerea termică a biomasei, pe de o parte, și dinamica fluidelor și transferul termic și de masă, pe de cealaltă parte. Inclusiv efortul de calcul deosebit pe care îl presupune simularea numerică a problemei stă mărturie pentru dificultatea acesteia.

Modelarea tradițională a descompunerii biomasei s-a realizat prin construirea unor modele matematice mult simplificate, aplicabile numai pentru forme geometrice regulate și numai în anumite condiții. Cele mai frecvente modele de descompunere sunt modelele unidimensionale de piroliză, care pot simula doar transformarea biomasei brute în produși primari, respectiv volatile și reziduu carbonos, în absența oxigenului. Unii autori au dezvoltat modele mai elaborate, în care au inclus, de exemplu, transportul speciilor și efecte structurale precum contracția particulei de biomasă, însă majoritatea covârșitoare a acestora s-a limitat la aproximarea proceselor interne. Modelul prezentat în această lucrare depășește cea mai mare parte dintre limitările modelelor anterioare, putând fi aplicat chiar și în forma actuală pentru probleme de modelare și simulare a arderii biomasei de mare complexitate. Totuși, după cum este prezentat și în cadrul lucrării, modelul poate fi încă mult îmbunătățit, structura modelului fiind realizată într-un mod care permite modificarea oricărei componente. Mai mult chiar, modelul poate fi transpus într-o formă mai simplă de utilizat, ceea ce deschide posibilitatea adoptării lui în practica inginerescă. Aplicarea modelului pentru rezolvarea problemelor curente de proiectare a instalațiilor de ardere a biomasei, în scopul creșterii randamentului și performanțelor acestora, va conduce la valorificarea superioară a acestei resurse, ceea ce trebuie luat în considerare, chiar dacă biomasa este o resursă regenerabilă de energie.

1. STADIUL ACTUAL AL CERCETĂRII ÎN DOMENIU

Menirea acestui capitol este aceea de a oferi cititorului în primul rând o imagine generală cât mai relevantă pentru subiectul lucrării de față a stadiului în care se află la acest moment studiul problemelor legate de folosirea biomasei în scopuri energetice. În al doilea rând, problematica abordată va lămuri unele aspecte referitoare la metodele de studiu și direcția în care acestea au fost aplicate, respectiv utilitatea finală a efortului de cercetare depus.

1.1. Problema energiei la nivel mondial

Pe fondul creșterii interesului la nivel mondial pentru promovarea și utilizarea formelor de energie așa-numite „regenerabile”, motivate în primul rând de continua creștere a prețurilor de producție pentru combustibilii fosili datorată disponibilității în scădere a acestora, iar în al doilea rând de efectele potențiale pe termen lung ale folosirii la scară globală asupra mediului înconjurător, cota de piață a energiilor regenerabile a atins în anul 2010 un procent de 16,7 [%] (sursa: [1]). Figura 1.1 prezintă situația globală a pieței energiei, așa cum este prezentată în aceeași sursă (REN21: *Renewables 2012 Global Status Report*). Energia obținută din combustibilii fosili domină categoric (80,6 [%]), iar această stare de fapt se va menține probabil pentru încă multă vreme. Este de remarcat faptul că procentul realizat prin utilizarea energiei nucleare reprezintă doar 2,7 [%] din totalul energiei consumate în acest moment.

Utilizările moderne ale energiilor regenerabile acoperă 8,2 [%] din consumul mondial, respectiv energia provenită din surse eoliene, hidro, solare, biomasă și geotermale, folosită pentru obținerea căldurii, apei calde și electricității, la care se adaugă sectorul aflat în continuă creștere al biocombustibililor. Restul, respectiv 8,5 [%] (mai mult de jumătate din totalul energiei regenerabile) aparține încă formelor tradiționale de utilizare a biomasei.

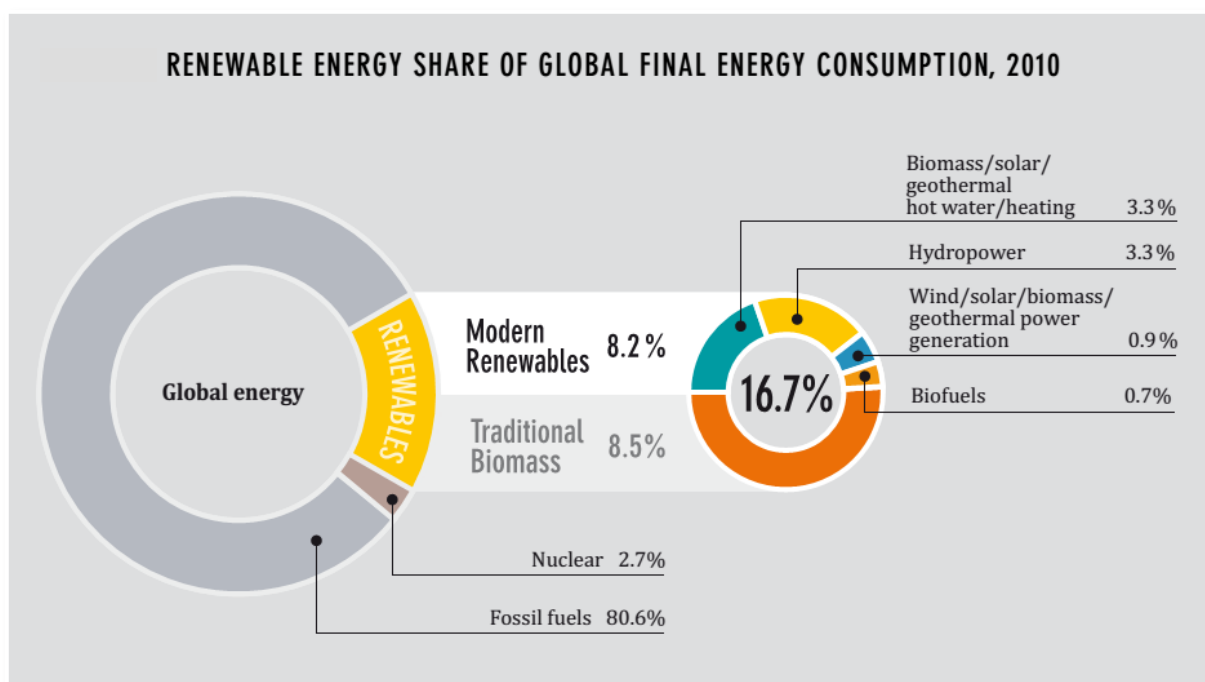


Fig.1.1: Situația consumului de energie la nivel mondial la nivelul anului 2010 (sursa: [1]) Energia regenerabilă acoperă 16,7 [%] din totalul consumului, ceva mai mult de jumătate (8,5 [%]) fiind realizat prin metode tradiționale

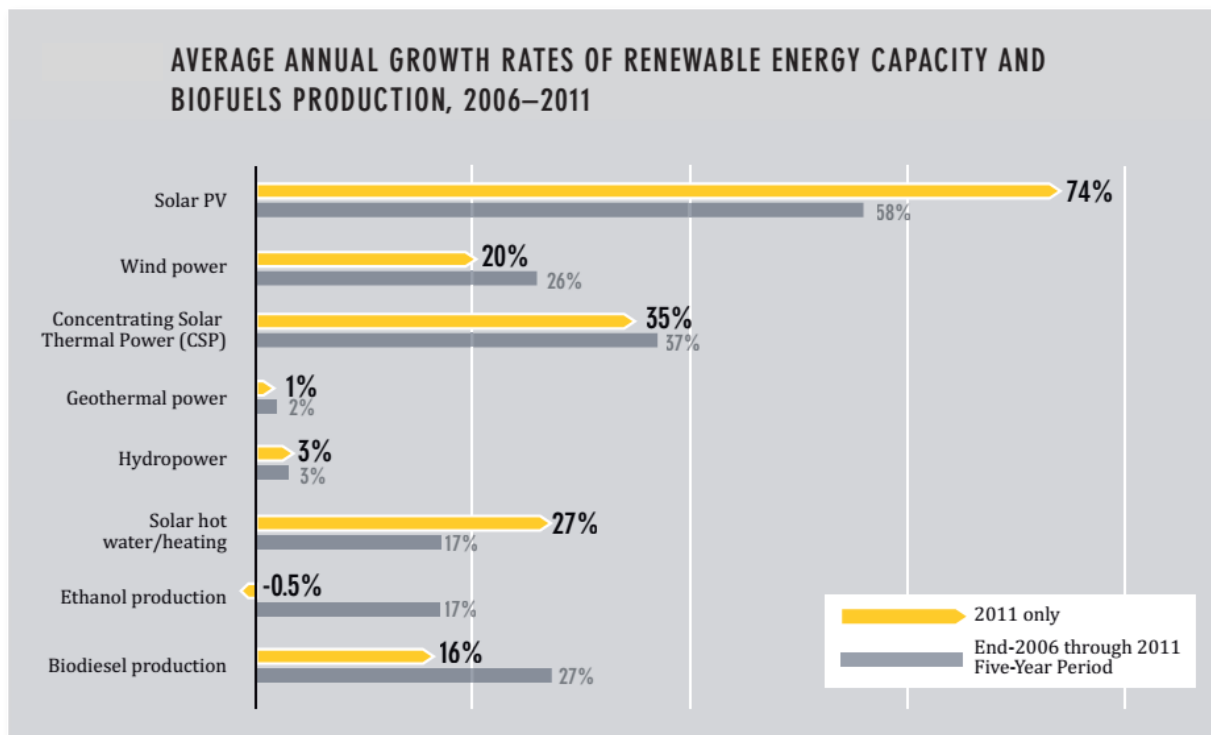


Fig.1.2: Creșterea medie anuală a capacității energiei regenerabile și producției de biocombustibili în perioada 2006 – 2011 (sursa: [1])

Având cel mai mare potențial de dezvoltare pe o importantă porțiune din suprafața Terrei, energia solară utilizată pentru producerea energiei electrice, extrasă atât cu ajutorul sistemelor de tip fotovoltaic (FV), dar și a celor bazate pe principiul concentrării energiei termice solare, a înregistrat în perioada 2006–2011 o creștere medie anuală de 58 [%] și respectiv 37 [%] (a se vedea Figura 1.2). În acest interval, doar în 2011, producerea apei calde și căldurii prin captarea energiei solare a cunoscut de asemenea o creștere importantă, de aprox. 17 [%], respectiv 27 [%]. De asemenea, considerând doar anul 2011, creșterea datorată sistemelor fotovoltaice a însumat nu mai puțin de 74 [%].

Dintre celelalte forme de energie regenerabilă, doar energia eoliană a mai demonstrat o creștere substanțială, cu o medie de 26 [%] în perioada mai sus menționată, în ușoară scădere în anul 2011 (20 [%]). Formele consacrate, precum energia hidro și cea geotermală, deși în creștere ușoară (1–3 [%]), practic par să se apropie de limita superioară a potențialului lor. Merită de asemenea menționată creșterea deosebită manifestată în cazul biocombustibililor (etanol și biodiesel), cu medii de 17 [%] și respectiv 27 [%].

1.2. Biomasa: posibilități de valorificare, potențial energetic

Posibilități de valorificare a biomasei

Exceptând cazurile în care arderea directă este potrivită, biomasa brută necesită transformarea în combustibili solizi, lichizi sau gazoși care pot fi folosiți pentru producerea de căldură, electricitate și drept combustibil pentru autovehicule. Această conversie se realizează prin procese mecanice, termochimice sau biochimice.

Procesele mecanice nu sunt strict de transformare deoarece ele nu schimbă natura biomasei. Exemple de astfel de procese sunt: sortarea și compactarea deșeurilor,

procesarea reziduurilor de lemn în baloți, peleți și brichete, tocarea paielor și cocenilor, presarea semințelor oleaginoase. Astfel de procese sunt folosite pentru pretratarea biomasei.

Arderea, gazificarea și piroliza sunt exemple de procese termochimice. Ele produc căldură, combustibil gazos, cărbune și gudron (ulei de piroliză). Combustibilul gazos poate fi folosit pentru alimentarea unui motor cu ardere internă sau a unei pile de combustie. Uleiul de piroliză poate fi transformat mai departe în combustibili lichizi sau gazoși.

Fermentația și digestia sunt exemple de procese biochimice. Acestea se bazează pe activitatea microbiană sau enzimatică de transformare a zahărului în etanol, sau a biomasei în combustibili solizi sau gazoși. În Figura 1.5 sunt schematizate principalele direcții de conversie a biomasei.

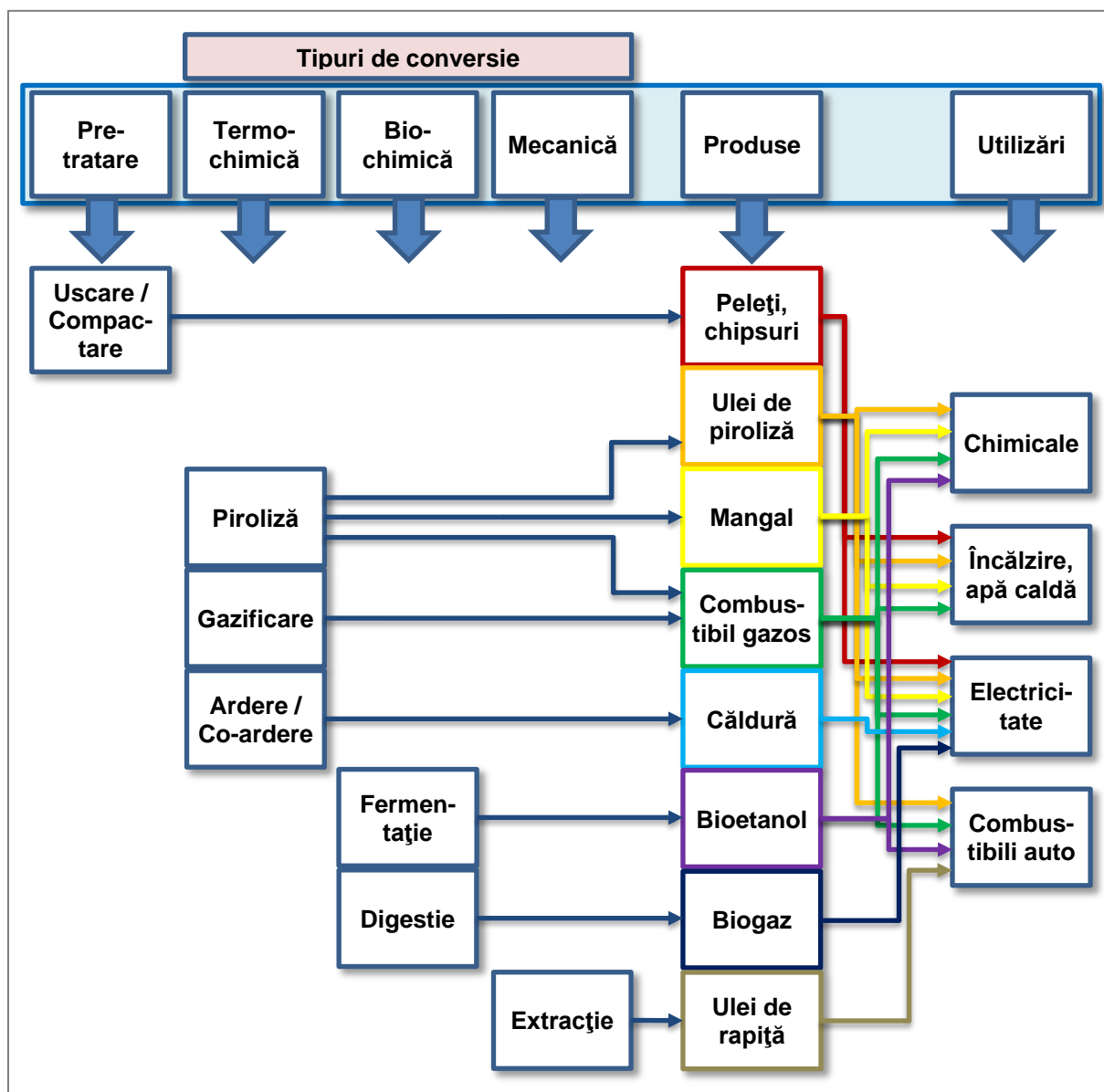


Fig.1.5: Căile de conversie a biomasei (sursa: [2])

1.4. Conversia termochimică a biomasei

1.4.1. Piroliza

Piroliza este, prin definiție, procesul de degradare termică a materialelor carbonoase (organice) în absența unui agent oxidant / reducător introdus din exterior. Producții de piroliză sunt reziduul solid sau cărbunele (diferențierea se realizează în principal prin conținutul de resturi organice, respectiv H și O, în proporție mult mai mare în cazul reziduului solid), fracția volatilă condensabilă, lichidă la temperatura camerei, denumită generic „gudron” și fracția volatilă necondensabilă, respectiv speciile gazoase. Pentru un tip de biomasă dat (origine, dimensiuni ale particulelor), proporțiile relative ale diferitelor fracții depind în mod hotărâtor de condițiile de operare, respectiv viteza de încălzire, temperatura, presiunea și timpul de rezidență al fracției volatile în incinta instalației. În consecință, uneori se practică răcirea forțată a fracției volatile imediat după ieșirea din zona de reacție.

Tab.1.7: Tipuri de piroliză (sursa: [3])

Tip de piroliză	Temperatură [°C]	Timp de rezidență	Frații produși [%]		
			Reziduu solid / cărbune	Gudroane	Gaze
Lentă	280 – 300	10 – 60 min	80 (r.s.)	0	20
	400	≈ zile	35 (c.)	30	35
Intermediară	400 – 600	10 – 30 s	25 (c.)	50	25
Rapidă	400 – 600	1 s	12 (c.)	75	13

1.4.2. Gazificarea

În procesul de gazificare, biomasa este supusă degradării termice la viteze de încălzire asemănătoare pirolizei intermediare – rapide, însă la temperaturi semnificativ mai mari (a se vedea Tabelul 1.6), în prezența unui flux bine controlat de agent oxidant (aer sau oxigen pur) sau reducător (abur). Spre deosebire de piroliză, căldura necesară procesului de gazificare provine chiar din reacțiile exoterme ce au loc în faza gazoasă, introducerea de căldură din exterior fiind necesară doar la început. Această proprietate oferă posibilitatea realizării de instalații cu flux continuu (gazificare în strat fix / circulant / fluidizat), mărind astfel randamentul global (în esență, piroliza este un proces intermitent).

Produsul principal al procesului de gazificare este un amestec de gaze („gaz de sinteză”) ale cărui componente sunt monoxidul de carbon (CO), hidrogenul (H₂), metanul (CH₄), dioxidul de carbon (CO₂, în proporție redusă), apa (H₂O) și eventual azotul (N₂) în cazul utilizării aerului. Fluxul de gaze conține inevitabil și impurități, particule solide în suspensie și resturi de volatile necondensabile (gudroane). Proporțiile speciilor chimice și ale impurităților sunt desigur dependente de condițiile de operare ale instalației de gazificare, similar cu piroliza.

1.4.3. Combustia

Deși convențional combustia nu este încadrată ca proces de conversie a biomasei, se poate argumenta faptul că procesul de combustie conține implicit piroliza și gazificarea

sub forma unor subprocesse ce se petrec simultan, relativ bine delimitate spațial, cu mențiunea că oxidarea completă a amestecului de gaze are loc în aceeași incintă, iar produsul final este, de fapt, chiar energia termică conținută în gazele de ardere. Altfel spus, combustia poate fi considerată o formă de gazificare avansată (în sensul transformărilor chimice ce au loc la nivelul amestecului de gaze generat).

Similar cu procesul de gazificare, temperatura gazelor de ardere poate fi ajustată prin intermediul debitului de aer de ardere. În general însă, se utilizează (1) un exces relativ mare de aer și (2) introducerea acestuia în mod controlat în camera de ardere, pentru a se putea menține în limite acceptabile emisiile de poluanți (monoxid de carbon, CO, oxizi de azot, NO_x, pulberi în suspensie, aerosoli). Energia termică generată se poate utiliza fie pentru generarea apei calde și încălzire, fie pentru producerea aburului (energie electrică).

Tabelul 1.8 prezintă fazele principale ale procesului de combustie, cu caracteristicile aferente.

Tab.1.8: Etapele combustiei biomasei

Etapa		Caracteristici
1.	Evaporarea apei	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Temperatura biomasei crește ca urmare a fluxului termic din exterior; ▪ Apa conținută începe să se evapore aprox. la atingerea temperaturii locale de 100 [°C] (în realitate, fracția de umiditate adsorbită în fibra lemnoasă părăsește structura peretelui celular la temperaturi ușor mai mari, procesul de desorbție absorbind o cantitate suplimentară de energie, denumită „căldură de desorbție”); ▪ Volumul total al biomasei se reduce cu aprox. 10 [%].
2.	Devolatilizarea (piroliza)	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Temperatura biomasei crește în continuare până la valori de ordinul a 200–300 [°C], unde procesul de devolatilizare se inițiază; ▪ Descompunerea componentelor biomasei generează fracțiile volatile (gaze și gudron), care părăsesc progresiv matricea solidă a particulei; ▪ La finalul procesului, reziduul solid rămas (cărbunele) prezintă o structură extrem de poroasă, al cărei volum total, în general (există anumite excepții), este egal cu aprox. 50 [%] din volumul inițial; ▪ Temperatura biomasei crește în continuare pe măsură ce devolatilizarea se desfășoară, datorită conducției termice, însă într-un ritm mai lent (transformările fizico-chimice ce au loc sunt global endotermice).
3.	Combustia volatilelor	<ul style="list-style-type: none"> ▪ În general, dar mai ales în condițiile specifice combustiei, oxidarea volatilelor are loc abia la exteriorul volumului biomasei, produșii finali fiind dioxidul de carbon (CO₂) și apa (H₂O); ▪ Căldura de combustie se transferă parțial prin convecție și conducție termică în masa de biomasă.
4.	Reducerea / combustia cărbunelui	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Reziduul carbonos, pe lângă C, H și O, conține C/H și C/O într-un raport variabil și direct proporțional cu temperatura de formare. Acesta este supus unui

		<p>proces foarte complex de descompunere lentă (raportat la viteza oxidării) prin reacții de reducere, în care sunt implicate în principal specii chimice precum oxizii carbonului și apa;</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Din momentul în care fluxul de volatile nu mai este suficient de intens, difuzia oxigenului către suprafața cărbunelui permite inițierea reacțiilor de oxidare; ▪ Reziduul final conține exclusiv materii minerale (cenușă).
--	--	--

La scări dimensionale foarte reduse (≈ 1 [mm]) aceste etape au loc practic secvențial, în întreaga masă a particulei de biomasă. În condițiile specifice combustiei finalizarea descompunerii are loc în intervale extrem de scurte (de ordinul secundelor). La scări mai mari (> 1 [cm]), transformările fizico-chimice descrise mai sus se petrec aproape simultan, însă în straturi aprox. concentrice, dispuse în ordine inversă, de la exterior către interiorul particulei.

1.6. Modelarea descompunerii termice a biomasei – scurt istoric și stadiul actual

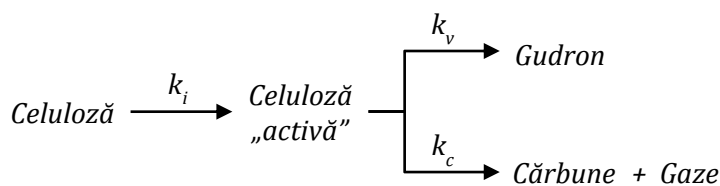
1.6.1. Modelarea cinetică a descompunerii biomasei

Scheme cinetice reprezentative

În continuare se vor prezenta câteva scheme cinetice de descompunere ce au fost utilizate în mare parte dintre studiile numerice efectuate în ultimele trei decenii, sub diverse forme și de către diverși autori. Majoritatea acestor scheme au cunoscut multiple variante datorită ajustării anumitor parametri cinetici, sau adăugării altora în scopul îmbunătățirii rezultatelor obținute în diferite situații de modelare, mai mult sau mai puțin particulare.

Broido-Shafizadeh (1979)

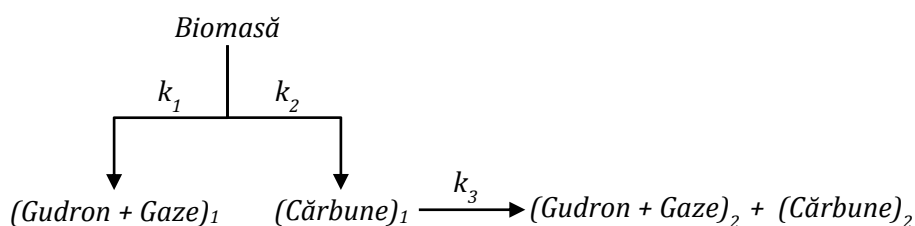
Schema mecanismului cinetic Broido-Shafizadeh este prezentată mai jos:



(sch.4)

Koufopoulos (1989)

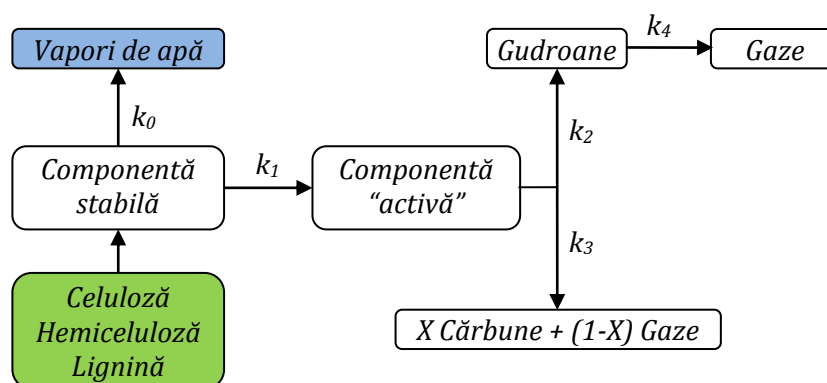
Mai jos este prezentată schema mecanismului Koufopoulos (versiunea îmbunătățită):



(sch.5)

Miller-Bellan (1997)

Pornind de la o abordare similară cu cea utilizată de Koufopoulos, respectiv aceea că descompunerea oricărui material biomasic poate fi tratată ca fiind rezultatul descompunerii independente a componentelor sale, în cazul acesta celuloza, hemiceluloza și lignina (principiul superpoziției efectelor), Miller și Bellan au publicat în 1997 unul dintre puținele mecanisme de descompunere pirolitică a biomasei cu aplicabilitate generală [4]. Examinând structura modelului, devine evident faptul că mecanismul propus este de fapt un hibrid între un mecanism de tip reacții paralele (cele trei reacții principale cu pas intermediar) și unul de tip reacții concurente (câte două subreacții simultane, concurente, pentru fiecare reacție principală). În acest mod, modelul propus de Miller și Bellan combină avantajele fiecărui tip în parte, fiind inclusiv capabil de a realiza estimarea raportului fracțiilor de produși în condiții de descompunere variabile. Modelul original nu ia în considerare efectul umidității. În lucrarea de față însă, prezența umidității inițiale este introdusă printr-o reacție separată (k_0). Schema cinetică completă este prezentată în cele ce urmează:



(sch.6)

Parametrii cinetici publicați în [4] sunt prezentați în Tabelul 1.12:

Tab.1.12: Parametrii cinetici ai modelului Miller&Bellan (sursa: [4])

Tip reacție	Celuloză	Hemiceluloză	Lignină
k_1	$2,80 \times 10^{19} \exp(-242,4/RT)$	$2,10 \times 10^{16} \exp(-186,7/RT)$	$9,60 \times 10^8 \exp(-107,6/RT)$
k_2	$3,28 \times 10^{14} \exp(-196,5/RT)$	$8,75 \times 10^{15} \exp(-202,4/RT)$	$1,50 \times 10^9 \exp(-143,8/RT)$
k_3	$1,30 \times 10^{10} \exp(-150,5/RT)$	$2,60 \times 10^{11} \exp(-145,7/RT)$	$7,70 \times 10^6 \exp(-111,4/RT)$
X	0,35	0,6	0,75
k_4	$4,28 \times 10^6 \exp(-108,0/RT)$		

Deși departe de a fi perfect, modelul lui Miller și Bellan, chiar în forma sa originală, rămâne o referință în domeniu, după cum afirmă și unii autori recunoscuți (Di Blasi, într-o recenzie deosebit de vastă a stadiului modelării pirolizei biomasei la nivelul anului 2008, [5]). Ținând cont de toate avantajele pe care le oferă, schema cinetică Miller-Bellan a fost selectată pentru a fi implementată în modelul numeric de combustie a biomasei dezvoltat ca parte a acestui studiu.

1.6.2. Modelarea descompunerii particulei izolate

Cele mai multe modele de descompunere termică a biomasei publicate se leagă de studiul modului de desfășurare a fenomenelor fizico-chimice asociate, la nivel de particulă

izolată. Motivele care stau la baza acestui fapt sunt probabil multiple, unul dintre ele fiind acela că studiul experimental al particulei izolate este semnificativ mai ușor abordabil decât studiul reactoarelor. Din punct de vedere științific însă, se poate găsi și o altă justificare, respectiv faptul că înțelegerea și stăpânirea deplină a fenomenologiei și modelării acesteia la nivel de particulă vor conduce implicit la îmbunătățirea inclusiv a metodelor de calcul destinate aplicațiilor industriale, precum reactoarele cu strat fix sau cele cu strat fluidizat.

Presupunând (deocamdată) că evoluția produșilor de descompunere termică a biomasei în exteriorul particulei este neglijabilă, problema modelării procesului începe cu transferul termic. După cum am menționat deja în Cap.1.5.5., în funcție de anumite proprietăți ale particulei considerate, în mod deosebit dimensiunea acesteia și conductivitatea termică a materialului solid, raportate la condițiile de încălzire exterioară, se pot diferenția cel puțin două situații principale:

- A. fluxul termic exterior este suficient de redus, astfel încât conducția internă a particulei practic realizează uniformizarea câmpului termic intern, particula aflându-se în echilibru termic (aproximativ) la orice moment (altfel spus, gradientul termic între suprafața exterioară și miezul particulei este redus);
- B. conducția internă este redusă comparativ cu flux termic pe suprafața exterioară, ceea ce duce la un gradient termic semnificativ și o distribuție spațială a câmpului termic la interior.

Criteriul adimensional pe baza căruia se face distincția între cele două regimuri de descompunere este numărul Biot, definit astfel: $Bi = \frac{\alpha L}{\lambda}$, unde α este coeficientul de transfer termic la exterior [$W/m^2/K$], L este o dimensiune caracteristică a particulei (de ex. raza) [m], iar λ este conductivitatea termică internă [$W/m/K$]. Pentru numere $Bi \ll 1$ se regăsește situația A, identificată ca *regimul termic convectiv*, unii cercetători propunând denumirea de *micro-particule* pentru acest caz. La numere $Bi > 1$, aceiași autori utilizează termenul de *macro-particule* pentru a descrie caracteristicile particulelor ce se identifică cu situația B. Pentru simplificare, vom adopta aceste formulări.

Din punctul de vedere al efortului de modelare (și implicit de simulare numerică), micro-particulele sunt cazul cel mai simplu posibil. Ipoteza uniformității câmpului termic intern introduce o serie de simplificări în formularea matematică, reducând modelul la simple expresii zero-dimensionale de bilanț termic și masic, ușor de rezolvat numeric. Cazurile în care se poate aplica această metodă de modelare sunt însă puține, de cele mai multe ori fiind limitate la piroliza / gazificarea / combustia cărbunelui și biomasei în stare pulverizată, ceea ce face obiectul subcapitolului următor.

Majoritatea celorlalte cazuri de interes practic se încadrează în situația macro-particulelor. Studiarea descompunerii termice a macro-particulelor presupune în primul rând reprezentarea corectă a câmpului termic intern și a transferului de căldură, la exteriorul particulei (convecție și radiație) dar și la interior.

Transferul termic extern se realizează prin convecție și radiație, forma dominantă depinzând de condițiile exterioare: temperatura gazelor și a pereților incintei, viteza gazelor, presiunea de lucru, etc. De asemenea, forma și dimensiunile particulei, starea suprafeței, gradul de conversie al biomasei, fluxul de volatile, etc., sunt alți factori care influențează intensitatea transferului termic la exterior.

Transferul de căldură intern este deosebit de complex, practic regăsindu-se în toate formele posibile:

- *conducția termică* atât în matricea solidă a biomasei inițiale, cât și a rezidului carbonos, ale căror proprietăți de material, în speță căldura specifică și conductivitatea termică, variază nu numai cu temperatura, dar și cu orientarea fibrelor, iar pentru fracția biomasei umede, cu conținutul de apă (liberă sau adsorbită); conducția în faza gazoasă (volatile) este redusă, însă poate fi luată în considerare;

- *convecția căldurii* datorată în principal transportului volatilelor de la interior către exterior prin structura poroasă, pe seama gradientului de presiune intern, și secundar difuziei apei atât sub formă de vapori, în ambele sensuri (inclusiv către interiorul particulei), cât și lichidă, prin fibra lemnoasă (datorită gradientului concentrației);
- *radiația termică* în interiorul structurii poroase, în mod deosebit în lungul fibrei (micro-canalele fiind așezate paralel cu fibra), ce transportă căldură către interior.

Modelul de transfer termic trebuie să țină cont nu numai de *transformările fizice* ale diverselor componente ale biomasei și produșilor de descompunere (de ex. vaporizare și eventual condensare), dar și de *transformările chimice* care definesc procesele de devolatilizare și ulterior de combustie a volatilelor și rezidului carbonos.

Din cele de mai sus reiese faptul că modelarea corectă și completă a transferului termic necesită modelarea simultană a *transportului convectiv și difuziv al fazelor și speciilor chimice*, atât la exterior, în stratul limită și zona adiacentă, cât și la interiorul particulei.

Iar nu în ultimul rând, este evidentă necesitatea includerii în modelul matematic al particulei și a problemei dependenței *proprietăților de material* de temperatură, atât pentru biomasa ca atare, cât și pentru produșii de descompunere termică ai acesteia (cărbune, gaze și gudron).

Desigur, realizarea unui model matematic complet, care să cuprindă în structura sa toate cele enumerate mai sus, este departe de a fi trivială. Chiar și presupunând că această problemă ar fi rezolvabilă cu un efort rezonabil, aplicarea efectivă a modelului necesită implementarea într-o structură numerică (solver numeric) pentru simularea numerică prin metode specifice (diferențe finite, elemente sau volume finite). Realizarea unui asemenea solver numeric este, în sine, o provocare, cu atât mai mult cu cât complexitatea dimensională a problemei este mai mare. Iar rezolvarea propriu-zisă, deși astăzi mai puțin problematică (deși există formulări mai recente, precum modelele bazate pe metoda distribuției energiei de activare, sau scheme cinetice de mare complexitate, care solicită resurse importante de calcul), datorită evoluției sistemelor de calcul, în trecut constituia un factor de importanță capitală. Astfel, nu este de mirare faptul că, încă de la începuturile modelării numerice a descompunerii termice a biomasei, s-a recurs la multiple simplificări, prin neglijarea anumitor aspecte ale fenomenelor reale.

1.7. Concluzii

Biomasa este o sursă de energie regenerabilă a cărei importanță a crescut în ultimii ani și probabil va continua să crească. Tehnologiile moderne de conversie a biomasei există deja, iar una dintre căile de creștere a gradului de valorificare a potențialului actual este implementarea acestor tehnologii la scară cât mai largă, respectiv reducerea procentului de utilizare tradițională, cu pierderi mari.

Chiar și tehnologia existentă poate fi îmbunătățită, prin creșterea randamentului global și reducerea efectelor secundare nedorite, cum ar fi producerea de poluanți. Limitându-ne la conversia termică, la acest moment cea mai importantă direcție de utilizare a biomasei, pentru obținerea unui real progres tehnologic este necesară în primul rând o mai bună înțelegere a caracteristicilor detaliate ale proceselor de transformare fizico-chimică a biomasei. În al doilea rând, aceste cunoștințe trebuie puse în valoare prin aplicarea lor la proiectarea instalațiilor de conversie, la orice scară, nu doar a celor industriale.

Cercetarea experimentală constituie un aspect foarte important în atingerea acestui scop. Totuși, în ultimele două decenii, modelarea matematică și simularea numerică a diverselor aspecte legate de conversia termică a biomasei au luat un avânt deosebit, concentrându-se mai mult pe descompunerea termică a biomasei solide la nivel de particulă. Deoarece uscarea și devolatilizarea biomasei sunt etapele inițiale ale oricărui proces de

conversie termică, fie piroliză, gazificare sau ardere, majoritatea cercetărilor s-au axat pe aceste aspecte.

Datorită limitărilor impuse de complexitatea extraordinară a compoziției biomasei brute și, implicit, a proceselor de transformare fizice și chimice asociate descompunerii sale, modelarea cinetică este practic unica metodă aplicabilă deocamdată. Totuși, comparând schemele cinetice simple care au dominat primii 30 de ani de cercetare în domeniu cu realizările recente și analizând stadiul actual, este evident nu numai faptul că progresul a fost continuu, dar și că potențialul cercetărilor este departe de a se fi epuizat.

Din multitudinea de tipuri de modele matematice cu diverse grade de complexitate disponibile, după părerea autorului lucrării de față, direcțiile cele mai promițătoare sunt:

- 1) modelarea cinetică generalizată, utilizând scheme suficient de simple, dar robuste, aplicabile în condițiile cerințelor de modelare industrială prin implementarea în programe de simulare numerică CFD;
- 2) dezvoltarea schemelor cinetice complexe, a căror aplicabilitate limitată este impusă pentru moment doar de puterea sistemelor de calcul și
- 3) perfecționarea modelelor bazate pe metoda distribuției energiei de activare și crearea de scheme generalizate după modelul schemelor cinetice clasice, sau alternativ a unor modele specializate pentru aplicații particulare, dată fiind precizia deosebită ce poate fi obținută cu acest tip de model.

În final, se remarcă faptul că foarte puține studii numerice au tratat și fenomenele și procesele ce au loc în exteriorul particulei, acest lucru fiind oricum greu de realizat în cadrul matematic impus de formularea generală a modelelor de piroliză. În acele cazuri, autorii au apelat la programe dedicate dinamicii fluidelor. În rest, s-a preferat aplicarea unor condiții la limită pe suprafața exterioară a particulei, inevitabil introducând simplificări care, nu de puține ori, constituie o sursă de limitare a preciziei globale a modelului.

Datorită avantajelor pe care le oferă (simplitate, robustețe, grad de generalitate), dintre schemele cinetice prezentate în Cap.1.6.1. a fost selectată schema Miller-Bellan pentru implementarea în modelul de combustie dezvoltat în cadrul acestui studiu.

2. MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR FIZICO-CHIMICE ASOCIATE COMBUSTIEI BIOMASEI

Acest capitol descrie modalitatea în care au fost tratate diversele aspecte specifice modelării matematice a descompunerii termice a biomasei, respectiv abordarea și rezolvarea lor în cadrul modelului numeric de combustie – scopul acestei lucrări. Pentru început se realizează o descriere a fundamentelor și structurii conceptuale a modelului de combustie, pe baza căreia a fost dezvoltat și implementat. În continuare se detaliază modelarea matematică a principalelor proprietăți fizice ale biomasei, apoi modelarea uscării și devolatilizării biomasei, modelarea combustiei rezidului carbonos și a volatilelor, iar în final, se prezintă în amănunt componenta statică a modelului de combustie, respectiv modelul cinetico-chimic de piroliză.

2.1. Prezentarea generală a modelului de combustie

După cum se poate observa și din exemplificările schemelor cinetice de descompunere termică a biomasei prezentate în Cap.1.6.1., acestea furnizează în principal ca date de ieșire doar proporțiile produșilor primari de piroliză (gaze, gudron, cărbune), doar unele dintre scheme încercând specificarea unei compoziții chimice (a se vedea paragraful *Scheme cinetice complexe*). Totuși, modul de deducere și conținutul acestor scheme în general, reduc foarte mult posibilitățile de a estima cu un oarecare grad de precizie și consistență compoziția chimică, distribuția spațială și temporală a produșilor primari și secundari, etc., ceea ce limitează serios utilitatea lor în activitatea de cercetare și proiectare inginerescă.

Studiul de față își propune depășirea acestor neajunsuri prin formularea unui model, pe cât posibil mai complet și mai general, al procesului de descompunere termică a biomasei. Ideea de bază a modelului de combustie este următoarea: *pornind de la o schemă cinetică de descompunere termică generalizată, să se asigure posibilitatea de a estima în orice condiții parametrii mai sus menționați, folosind ca date de intrare doar compoziția inițială a biomasei, respectiv proporțiile elementelor constitutive de bază: celuloză, hemiceluloză, lignină, cenușă și apă, la care se adaugă densitatea biomasei în stare uscată.*

Modelarea tridimensională și nestaționară a proceselor de piroliză și combustie a biomasei presupune un efort de calcul deosebit. Complexitatea fenomenelor și transformărilor fizice și chimice prin care trec componentele biomasei face practic imposibilă, cel puțin deocamdată (la nivelul resurselor de care se dispune în general), abordarea problemei fără a apela la simplificări. În concordanță cu aceste constatări, pentru construcția modelului numeric s-au formulat și aplicat două ipoteze principale:

- (I1) Indiferent de proveniență, orice biomasă poate fi reprezentată ca fiind un amestec bine definit de celuloză, hemiceluloză, lignină (cu trei forme principale), cenușă și apă. Această idee este susținută de datele analizelor tehnice efectuate pentru majoritatea surselor de biomasă de interes practic;
- (I2) Ideea ce stă la baza modelului Miller-Bellan este ipoteza *superpoziției efectelor* descompunerii principalelor componente ale biomasei, respectiv celuloza (CL), hemiceluloza (HCL) și lignina (LG). Cele trei seturi de reacții se produc în paralel, fără a se influența reciproc, indiferent de condițiile în care are loc piroliza. Tocmai această presupunere, respectiv independența descompunerii termice a elementelor constitutive ale biomasei, a fost preluată și extinsă în modelul prezentat aici, întreaga dezvoltare ulterioară a modelului numeric de combustie fiind fundamentată pe această ipoteză.

Pe lângă cele două ipoteze s-au formulat și trei obiective ce ar trebui atinse în final de modelul global de combustie, după cum urmează:

- (O1) Modelul să posede un grad de generalitate cât mai mare cu putință, prin generalitate înțelegându-se posibilitatea aplicării acestuia pentru o clasă cât mai extinsă de surse de biomasă, cu o precizie acceptabilă, fără a-i aduce modificări structurale / conceptuale;
- (O2) Flexibilitatea modelului, în ansamblul său, să atingă un nivel care să permită modelarea suficient de facilă și rapidă a oricărui tip de biomasă, eliminând sau, cel puțin, reducând necesitatea intervenției utilizatorului;
- (O3) Ținând cont de complexitatea modelării abordate (3D), modelul să fie astfel conceput încât efortul de calcul să fie rezonabil, păstrând aplicabilitatea modelului inclusiv în domeniul proiectării industriale.

Cele trei obiective enumerate mai sus sunt într-o bună măsură contradictorii, iar la finalul acestui studiu, îndeplinirea lor a fost realizată doar parțial. Efortul depus s-a concentrat îndeosebi în direcția primului și celui de-al treilea obiectiv, despre care se poate afirma că au fost în cea mai mare parte atinse. Problema utilizării facile a modelului va rămâne eventual ca un posibil scop al dezvoltării pe viitor a modelului.

Modelarea completă a proceselor asociate combustiei biomasei implică, pe lângă necesitatea calculării ratelor de piroliză a componentelor biomasei, posibilitatea obținerii compoziției chimice detaliate a volatilelor. Aceasta condiție nu este îndeplinită de majoritatea schemelor cinetice prezentate în Cap.1.6.1., modelul lui Miller și Bellan nefăcând excepție. Rezultă de aici necesitatea conceperii unei metode, nu doar suficient de simplă și eficientă pentru a putea fi aplicată într-un model CFD tridimensional, dar și corect fundamentată d.p.d.v. fizic și chimic, astfel încât rezultatele obținute să fie acceptabile din toate punctele de vedere. Șirul raționamentelor, ipotezele simplificatoare și modalitatea efectivă de determinare a compoziției fracției volatile se vor detalia în cele ce urmează.

În continuare, se prezintă în Tabelul 2.1 schema funcțională pe baza căreia a fost construit modelul numeric de combustie dezvoltat și utilizat în cadrul acest studiu. Această schemă nu este singura soluție posibilă a problemei, însă datorită faptului că celui de-al treilea obiectiv (O3) i s-a acordat cea mai mare pondere, varianta curentă este cea care se apropie cel mai mult de minimul posibil de efort de calcul.

Tab.2.1: Schema funcțională a modelului numeric de combustie

	Denumire	Descriere
1.	Model cinetico-chimic de piroliză	<p>Rol funcțional:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Calculul descompunerii componentelor biomasei (CL, HCL & LG) în fracții principale: cărbune, gaze, gudron; ▪ Calculul compoziției amestecului de gaze rezultat din descompunerea primară și a produșilor de descompunere secundară a gudroanelor, în ipoteza echilibrului chimic; ▪ Estimarea proprietăților termodinamice ale tuturor fracțiilor de descompunere ca funcții de temperatură și compoziție. <p>Componente:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ <i>Program Mathcad</i> ce realizează calculul descompunerii și al proprietăților termodinamice; ▪ <i>Script Matlab (1)</i> cu ajutorul căruia se evaluează compoziția gazelor, pe baza principiului minimizării energiei libere Gibbs; ▪ <i>Script Matlab (2)</i> prin care se estimează coeficienții funcțiilor de interpolare pentru compoziția rezultată din (1).

2.	Funcție macro de implementare (UDF)	<p>Rol funcțional:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Implementarea directă a surselor de specii chimice pentru volatile în modelul CFD; ▪ Modelarea descompunerii termice a gudroanelor; ▪ Calculul și impunerea surselor de energie corespondente schimburilor de masă, atât în interiorul, cât și în exteriorul biomasei, sub forma unor funcții de compoziție și temperatură ai căror coeficienți sunt calculați în modelul de inițializare; ▪ Calculul proprietăților de material (fizice și termodinamice) ale tuturor speciilor (solide & volatile); ▪ Modelarea tuturor reacțiilor eterogene de gazificare și oxidare ale cărbunelui (primare). <p>Componente:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Program C++ (a cărui structură este descrisă în detaliu în Cap.3).
3.	Model numeric CFD	<p>Rol funcțional:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Rezolvarea problemei curgerii gazelor (aerul de combustie, difuzia fracțiilor gazoase din interiorul biomasei către exterior și a oxigenului în sens invers); ▪ Calculul transferului termic convectiv, conductiv și prin radiație atât în exteriorul cât și în interiorul biomasei, pentru toate fazele, respectiv specii solide sau amestecuri de gaze; ▪ Modelarea tuturor reacțiilor chimice omogene în fază gazoasă (secundare) folosind un mecanism de reacție simplificat. <p>Componente:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Discretizarea domeniului de calcul (grilă spațială); ▪ Model de curgere (RANS – modelul Navier-Stokes, mediat în sensul lui Reynolds) cu modelarea aferentă a turbulenței; ▪ Model de material (solid + volatile); ▪ Model fizic pentru medii poroase; ▪ Model de transfer termic conjugat; ▪ Model de radiație; ▪ Model de transport și reacții volumetrice pentru specii chimice; ▪ Solver numeric (pentru integrarea în timp și spațiu a tuturor ecuațiilor de conservare, constitutive, etc. ale modelului global).

Schema funcțională a modelului numeric poate fi transpusă în algoritmul prezentat în Figura 2.1, ce ilustrează pe de o parte ordinea operațiilor, iar pe de altă parte relațiile de dependență între diversele componente ale modelului global.

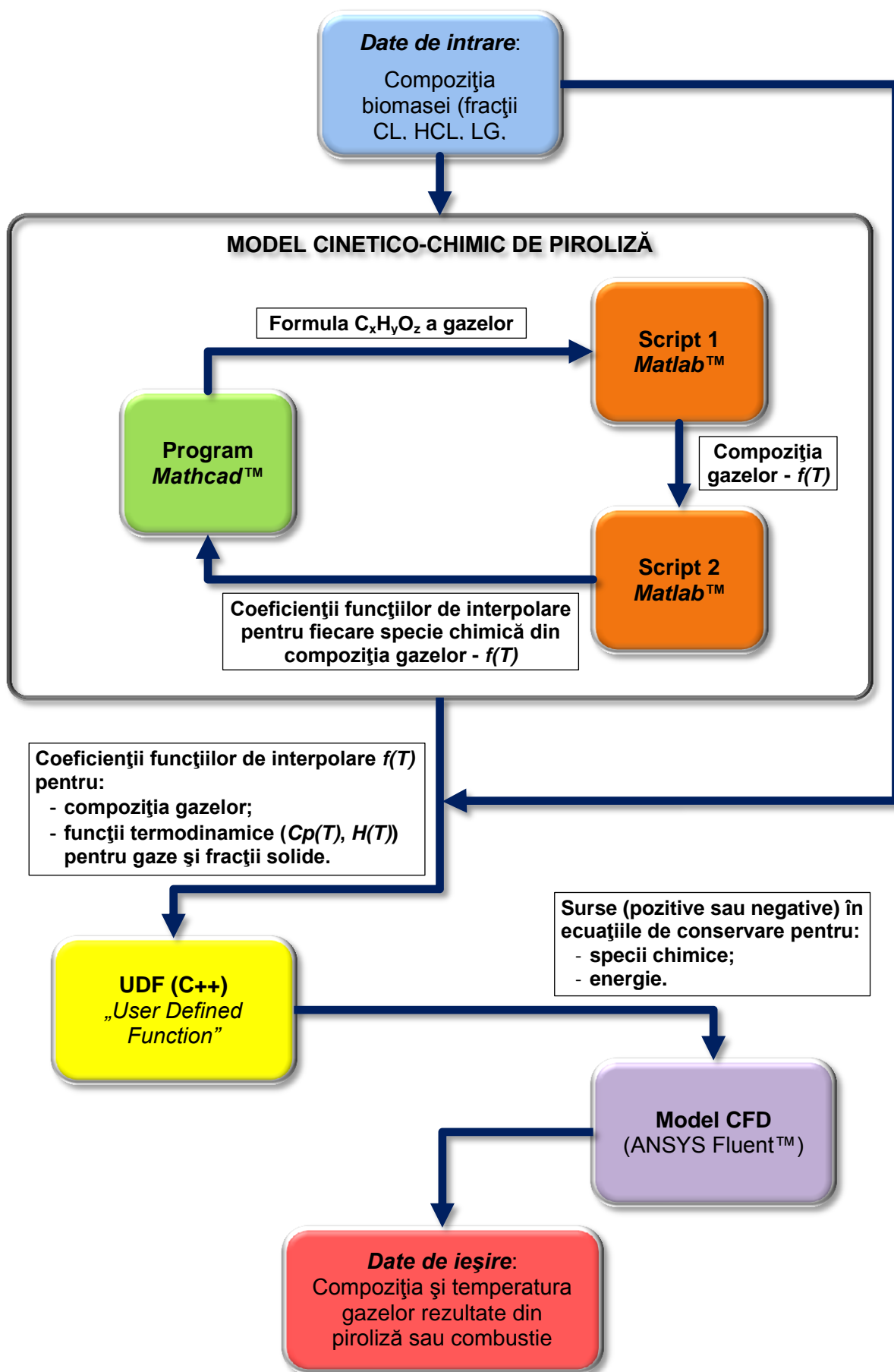


Fig.2.1: Schema funcțională transpusă în algoritmul modelului global de combustie

2.3. Modelarea uscării și devolatilizării biomasei

Conform celor discutate în Capitolul 1, uscarea și devolatilizarea sunt primele etape din procesul de descompunere termică a biomasei. În funcție de dimensiunile particulei de biomasă și de caracteristicile transferului de căldură, modul de desfășurare al etapelor de descompunere diferă între micro- și macro-particule. Deosebirea esențială constă în faptul că pentru micro-particule uscarea și devolatilizarea se petrec succesiv și în întreaga masă a particulei, pe când la macro-particule aceste fenomene sunt simultane, dar se petrec în locații diferite. Considerând un volum de control infinitezimal, chiar și în cazul macro-particulei etapele se succed la nivel local. Din acest motiv, din punct de vedere matematic, fenomenele de evaporare și devolatilizare pot fi tratate separat, în ipoteza că la nivel fizic procesele nu sunt cuplate, respectiv nu se influențează reciproc.

2.3.1. Modelarea evaporării umidității inițiale

Conceptul modelării cinetice a vaporizării este bazat pe formularea unei relații de tip Arrhenius ai cărei parametri sunt astfel aleși încât viteza de vaporizare crește rapid în apropierea temperaturii de 100 [°C]. Alegând valori foarte agresive se poate restrânge intervalul de temperatură pe care are loc vaporizarea oricât de mult.

Ținând cont de aceste observații, am ales varianta modelării cinetice inclusiv pentru faza de evaporare a umidității, incluzând în schema cinetică Miller-Bellan o reacție suplimentară cu rata k_0 (a se vedea Cap.1.6.1, Schema 6 și Tabelul 1.12). Ecuația modelului de vaporizare este următoarea:

$$\frac{d\rho_U}{dt} = -k_0 \rho_U \quad (\text{ec.2.29})$$

Cea mai frecventă formulare a ratei de evaporare k_0 întâlnită în literatură și utilizată inclusiv în modelul de combustie este următoarea:

$$k_0 = 5,13 \times 10^{10} \exp\left(\frac{88.000}{RT}\right) \quad (\text{ec.2.30})$$

2.3.2. Modelarea devolatilizării biomasei

După cum am menționat deja, schema cinetică selectată pentru implementarea în modelul de combustie realizat în cadrul acestui studiu este schema creată de Miller și Bellan [4]. Motivele principale ce au stat la baza acestei alegeri ar fi următoarele, nu neapărat în ordinea importanței lor:

- Deși este una dintre cele mai complexe scheme încadrate la categoria schemelor „obișnuite”, schema M-B este totuși suficient de simplă pentru a fi introdusă într-un model numeric, fără un efort de programare exagerat;
- Schema cinetică M-B a fost suficient validată prin testarea chiar de către autori pentru diverse seturi de date experimentale independente, preluate în condiții variate, robustețea și consistența modelului fiind remarcabile considerând simplitatea acesteia raportată la complexitatea fenomenului real;
- Schema se bazează pe diferențierea descompunerii compușilor de bază ai biomasei, respectiv celuloza, hemiceluloza și lignina, ceea ce permite introducerea factorului reprezentat de proveniența sau tipul biomasei în ecuația generală a modelului de combustie, rezultând de aici un caracter de generalitate binevenit;

- d) Ipoteza superpoziției efectelor, care stă de fapt la baza diferențierii descompunerii componentelor biomasei, este foarte elegant exploatată mai departe în crearea modelului de combustie (ceea ce se va prezenta detaliat în Cap.2.6.), rezultând într-o formulare suficient de simplă și foarte eficientă, ce permite modelarea și simularea oricărui tip de biomasă care poate fi reprezentată ca un amestec de CL, HCL, LG, cenușă și apă (indiferent de proporție, chiar și nulă).

Expresiile ratelor de reacție k și valorile parametrilor modelului X au fost deja prezentate în Tabelul 1.12, nu le mai reluăm. Forma generală a ecuațiilor diferențiale ce constituie modelul de devolatilizare, formulate conform schemei cinetice M-B, este reprezentată mai jos, pentru componenta x a biomasei:

$$\frac{d\rho_x}{dt} = -k_{1x} \rho_x \quad (\text{ec.2.32})$$

$$\frac{d\rho_{xA}}{dt} = k_{1x} \rho_x - (k_{2x} + k_{3x}) \rho_{xA} \quad (\text{ec.2.33})$$

$$\frac{d\rho_C}{dt} = \sum_x X_x k_{3x} \rho_{xA} \quad (\text{ec.2.34})$$

$$\frac{d\rho_{Gx}}{dt} = \sum_x (1 - X_x) k_{3x} \rho_{xA} + k_4 \rho_{Tx} \quad (\text{ec.2.35})$$

$$\frac{d\rho_{Tx}}{dt} = \sum_x k_{2x} \rho_{xA} - k_4 \rho_{Tx} \quad (\text{ec.2.36})$$

În sistemul de ecuații de mai sus s-au utilizat următoarele notații: U = umiditate, x = CL, HCL, LG, A = componentă în stare activă, C = cărbune, G = gaze, T = gudron.

Ultimul termen din ecuațiile 2.35 și 2.36, reprezintă descompunerea termică a gudronului care nu este limitată la zona biomasei. Din acest motiv, s-a introdus o ecuație suplimentară, formulată astfel:

$$\frac{d\rho_{Tx}}{dt} = -k_4 \rho_{Tx} \quad (\text{ec.2.37})$$

care permite continuarea calculării descompunerii gudronului și după ce acesta a părăsit volumul biomasei.

Entalpia de piroliză

Modelarea efectului termic al devolatilizării este un subiect îndelung dezbătut între specialiștii din domeniu. În majoritatea studiilor numerice efectuate de alți autori, descompunerea termică a biomasei brute în produși primari de piroliză este presupusă a avea loc printr-o serie de reacții *endotermă*, iar cracarea gudroanelor, adică reacțiile secundare, este considerată *exotermă*. Mai mult chiar, de multe ori se presupune că entalpia tuturor reacțiilor primare este identică.

Concluzia esențială este însă următoarea: alegerea unei soluții similare pentru modelul de combustie nu este calea corectă, în esență datorită faptului că și în cazul în care am fi reușit calibrarea valorii entalpiei de piroliză pentru setul de date experimentale utilizat în etapa de verificare și validare, nu exista nicio garanție că valoarea găsită ar fi fost valabilă și pentru alte condiții de descompunere. Astfel, generalitatea modelului ar fi putut fi pusă la îndoială în mod justificat.

Din punct de vedere conceptual, descompunerea termică a biomasei poate fi privită ca o singură reacție globală în care reactanții sunt chiar componentele biomasei, iar produșii reacției sunt evident produșii de descompunere. Astfel, entalpia de piroliză poate fi asimilată cu entalpia reacției globale, care conform însăși definiției, nu este nimic altceva decât diferența dintre suma entalpiilor produșilor și suma entalpiilor reactanților.

Ecuția energiei se poate scrie astfel:

$$[\rho_B C p_B + \rho_C C p_C + \varepsilon(\rho_G C p_G + \rho_T C p_T)] \frac{\partial T}{\partial t} + u(\rho_G C p_G + \rho_T C p_T) \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + S \quad (\text{ec.2.39})$$

unde:

$$S \equiv \Delta H_r = H_B \frac{\partial \rho_B}{\partial t} + H_B \frac{\partial \rho_{BA}}{\partial t} + H_G \frac{\partial \rho_G}{\partial t} + H_T \frac{\partial \rho_T}{\partial t} + H_C \frac{\partial \rho_C}{\partial t} \quad (\text{ec.2.40})$$

respectiv entalpia de piroliză scrisă în forma generală, care prin dezvoltarea termenilor neglijând descompunerea secundară a gudronului, devine:

$$\begin{aligned} \Delta H_r = & H_B (-k_1 \rho_B) + \\ & + H_B (k_1 \rho_B - (k_2 + k_3) \rho_{BA}) + \\ & + H_G [(1 - X) k_3 \rho_{BA}] + \\ & + H_T (k_2 \rho_{BA}) + \\ & + H_C [X k_3 \rho_{BA}] \end{aligned} \quad (\text{ec.2.41})$$

care în forma restrânsă se poate scrie astfel:

$$\Delta H_r = \underbrace{\rho_{BA} \{k_3 [(1 - X) H_G + X H_C] + k_2 H_T\}}_{\Sigma H_{\text{produși}}} - \underbrace{\rho_{BA} [(k_2 + k_3) H_B]}_{\Sigma H_{\text{reactanți}}} \quad (\text{ec.2.42})$$

din care reiese în mod natural formularea teoretică a entalpiei de reacție.

Termenii capacitiv, conductiv și convectiv sunt rezolvați utilizând modelul numeric CFD, proprietățile termodinamice ale speciilor ($Cp(T)$, $\lambda(T)$) fiind furnizate de funcția externă (UDF), iar termenul corespunzător căldurii de piroliză trebuie implementat separat, tot prin intermediul funcției de transfer (UDF) sub forma unei surse de energie în modelul CFD, semnul acesteia rezultând din calcul.

Din relațiile de mai sus, singurele necunoscute sunt entalpiile totale (H) ale reactanților ($B = \text{CL} + \text{HCL} + \text{LG}$) și produșilor de reacție (G, T, C , pentru fiecare componentă a biomasei). Entalpia totală a fiecărei specii s-a calculat astfel:

$$H(T) = \Delta H_f^0 + \int_{T_{ref}}^T Cp(T) dT = \Delta H_f^0 + (H(T) - H(T_{ref})) \quad (\text{ec.2.43})$$

2.4. Modelarea gazificării și combustiei rezidului carbonos

Experimental se constată existența a trei regimuri de conversie a cărbunelui, caracterizate după cum urmează:

- I. Regimul controlat cinetic
- II. Regimul controlat de transferul de masă intern

III. Regimul controlat de transferul de masă la exterior

Modelul numeric de combustie realizat în cadrul acestui studiu poate reproduce oricare dintre cele trei regimuri de conversie a rezidului carbonos. După cum se va vedea în analiza rezultatelor validării modelului, arderea cărbunelui, care în acel caz se găsește în regimurile II și III, conduce la contractia zonei delimitate de concentrația de reziduu carbonos către centrul particulei, însă volumul poros rămâne practic fixat datorită stratului de cenușă care se acumulează continuu la exterior.

În Tabelul 2.8 sunt prezentate cele patru reacții eterogene ce corespund modelului de conversie termică a rezidului carbonos. În toate reacțiile unitatea de măsură pentru presiunea parțială este [Pa].

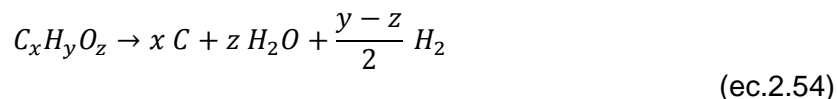
Tab.2.8: Reacțiile modelului de conversie termică a rezidului carbonos (sursa: [6])

Nr. reac.	Reacția	ΔH_{298K}^0 [kJ/mol]	Parametrii cinetici		
			A [-]	E [kJ/mol]	B [-]
1.	$C + CO_2 \rightarrow 2 CO$	+172,6	2,600E+02	122,0	$[p_{CO_2}/10^{5,0,38}]$
2.	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	+131,4	2,620E+08	237,0	$[p_{H_2O}/10^{5,0,57}]$
3.	$C + 2 H_2 \rightarrow CH_4$	-75	1,640E+01	94,8	$[p_{H_2}/10^{6,0,93}]$
4.	$C + 0,5 O_2 \rightarrow CO$	-110,5	1,112E+01	131,0	$[p_{O_2}]$

Cărbunele este considerat ca fiind un compus solid cu o compoziție chimică complexă, formula chimică echivalentă stabilită în cadrul studiului fiind de forma $C_xH_yO_z$, unde $x = 1$, iar y și z se determină din relațiile preluate din [7], afișate mai jos, care reprezintă numărul de moli de H și O ce corespunde unui mol de C, funcție de temperatură:

$$H_c(T) = \frac{1}{0,55 \exp[0,0032(T - 273)]}, \quad O_c(T) = \frac{1}{1,7 \exp[0,0035(T - 273)]} \quad (\text{ec.2.53})$$

Modelul clasic de descompunere a cărbunelui nu ia în considerare prezența acestor fracții de H și O. Soluția implementată a constatat în introducerea unei a cincea reacții fictive, formulată astfel:



2.5. Modelarea combustiei volatilelor

Modelul de combustie a volatilelor cuprinde în principal reacțiile speciilor chimice din componența acestora cu oxigenul, în faza gazoasă (omogene). Modelul este astfel construit încât nu limitează reacțiile la o zonă anume a domeniului de calcul, de exemplu la zona exterioară particulei, ci permite desfășurarea acestora în orice punct. În acest mod se asigură posibilitatea ca reacțiile să aibe loc inclusiv în interiorul stratului de reziduu carbonos, care după cum am arătat în capitolul anterior, conform modelului propus, generează un amestec de monoxid de carbon, apă, hidrogen și metan, ce poate fi oxidat mai departe.

Mecanismul de reacție

Mecanismul de reacție adoptat în final conține cele șase specii chimice menționate mai sus, care participă în șapte reacții. Acestea sunt cele mai importante și mai des utilizate reacții pentru speciile chimice considerate. Tabelul 2.9 prezintă varianta finală a mecanismului de reacție în faza gazoasă.

Tab.2.9: Mecanismul de reacție în fază gazoasă (surse: [8], [6], [9])

Nr. reac.	Reacția	ΔH_{298K}^0 [kJ/mol]	Parametrii cinetici		
			A [-]	E [kJ/mol]	-
1.	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2$	+206,4	9,100E+10	131,0	$[\text{CH}_4]^1 [\text{H}_2\text{O}]^1$
2.	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	-47,7	2,500E+08	138,0	$[\text{CO}]^1 [\text{H}_2\text{O}]^1$
3.	$\text{CH}_4 + 1,5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2\text{O}$	-607,2	5,012E+11	200,0	$[\text{CH}_4]^{0,7} [\text{O}_2]^{0,8}$
4.	$\text{H}_2 + 0,5 \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$	-241,8	9,870E+08	31,0	$[\text{H}_2]^1 [\text{O}_2]^1$
5.	$\text{CO} + 0,5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	-283,0	2,240E+12	170,0	$[\text{CO}]^1 [\text{O}_2]^{0,25} [\text{H}_2\text{O}]^{0,5}$
6.	$\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + 0,5 \text{O}_2$	+283,0	5,000E+08	170,0	$[\text{CO}_2]^1$
7.	$\text{C}_2\text{H}_4 + 3 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$	-1306,1	1,125E+10	125,6	$[\text{C}_2\text{H}_4]^{0,1} [\text{O}_2]^{1,65}$

2.6. Prezentarea detaliată a modelului cinetico-chimic de piroliză**2.6.2. Etapele modelării cinetico-chimice a descompunerii biomasei****Etapa I: Stabilirea formulei echivalente a biomasei**

Punctul de plecare pentru modelul cinetico-chimic este compoziția în fracții masice a biomasei analizate, de altfel singurele date de intrare necesare. Cunoșcându-se această compoziție se calculează o formulă atomică echivalentă a biomasei, pe baza formulelor atomice ($\text{C}_x\text{H}_y\text{O}_z$) ale componentelor principale afișate în Tabelul 2.10, care au fost determinate prin normalizarea numărului de atomi de carbon ($x = 6$).

Tab.2.10: Formulele atomice echivalente pentru componentele principale ale biomasei

Componentă		Formula atomică echivalentă		
		C	H	O
Celuloză	CL	6	10	5
Hemiceluloză	HCL	6	12	6
Lignină	LG-HW	6	8	3,4
	LG-SW	6	6,8	2,3
	LG-G	6	7	1,9

Etapa a II-a: Calculul fracțiilor de produși primari de descompunere funcție de temperatură

Pornind de la schema cinetică a modelului (schema 6, Tabelul 1.12) din care se neglijează reacțiile corespunzătoare evaporării umidității (k_0) și descompunerii secundare a gudroanelor (k_4), se formulează ecuațiile diferențiale ale modelului de devolatilizare, care sunt aproape identice cu ecuațiile 2.32–2.36, cu deosebirea că termenii corespunzători crăcării gudroanelor din ecuațiile 2.35 și 2.36 lipsesc. Ecuațiile se trec în forma discretă, iar variațiile concentrațiilor și ratele de descompunere se notează ca funcții de temperatură:

$$\Delta\rho_{xA}(T) = k_{1x}(T) \rho_x \Delta t \quad (\text{ec.2.57})$$

$$\Delta\rho_{Cx}(T) = X_x k_{3x}(T) \rho_{xA}(T) \Delta t \quad (\text{ec.2.58})$$

$$\Delta\rho_{Gx}(T) = (1 - X_x) k_{3x}(T) \rho_{xA}(T) \Delta t \quad (\text{ec.2.59})$$

$$\Delta\rho_{Tx}(T) = k_{2x}(T) \rho_{xA}(T) \Delta t \quad (\text{ec.2.60})$$

unde $x = CL, HCL, LG$.

Ne reamintim faptul că ρ_x este concentrația componentei x , care poate fi calculată inițial folosind densitatea biomasei și fracția masică a componentei, însă considerând scopul final acest exercițiu matematic, se poate atribui absolut orice valoare pentru densitate, chiar și $\rho_B = 1$, rezultatul final al calculului fiind același. Rezultă că:

$$\rho_x = Y_x \quad \text{unde} \quad \sum_x Y_x = 1 \quad (\text{ec.2.61})$$

Presupunând o descompunere la temperatură constantă pe întregul volum de control, pe un interval de timp Δt unitar, din ecuațiile 2.58–2.60 se pot obține direct cantitățile de cărbune, gaze și gudron rezultate din descompunerea termică a biomasei în intervalul de timp considerat. Astfel, se pot calcula fracțiile masice ale produșilor de descompunere primară, pentru fiecare componentă a biomasei în parte:

$$Y_{C,x}(T) = \frac{\Delta\rho_{Cx}(T)}{\Delta\rho_{Cx}(T) + \Delta\rho_{Gx}(T) + \Delta\rho_{Tx}(T)} \quad (\text{ec.2.62})$$

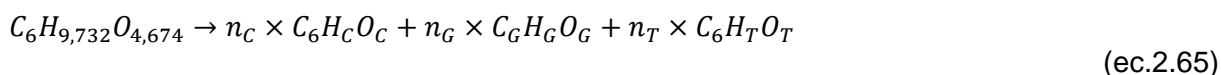
$$Y_{G,x}(T) = \frac{\Delta\rho_{Gx}(T)}{\Delta\rho_{Cx}(T) + \Delta\rho_{Gx}(T) + \Delta\rho_{Tx}(T)} \quad (\text{ec.2.63})$$

$$Y_{T,x}(T) = \frac{\Delta\rho_{Tx}(T)}{\Delta\rho_{Cx}(T) + \Delta\rho_{Gx}(T) + \Delta\rho_{Tx}(T)} \quad (\text{ec.2.64})$$

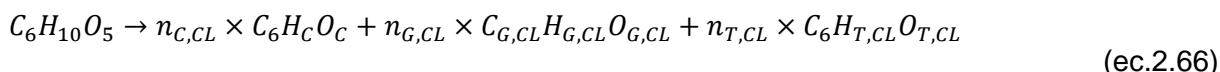
Etapa a III-a: Modelarea descompunerii produșilor primari de piroliză

Cunoscându-se fracțiile de produși primari de descompunere pentru orice temperatură, mai trebuie determinate compozițiile fracției gazoase primare și, ulterior, ale fracțiilor gazoase rezultate din descompunerea gudroanelor. Mai întâi se stabilesc ecuațiile de descompunere pentru biomasă și componente, în condiții de piroliză (în absența oxigenului):

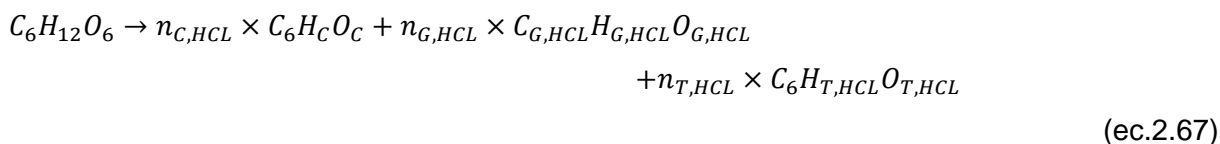
- Ecuația generală de descompunere termică a biomasei:



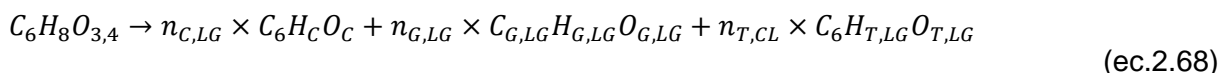
- Ecuația pentru descompunerea termică a celulozei:



- Ecuația pentru descompunerea termică a hemicelulozei:



- Ecuația pentru descompunerea termică a ligninei (LG-HW):



unde $n_{C,x}$, $n_{G,x}$, $n_{T,x}$ sunt numărul de moli de cărbune, gaze și gudron pentru componenta x .

Numărul total de necunoscute din sistemul de ecuații este $10 \times 3 = 30$. Pentru a putea rezolva sistemul, trebuie aplicate câteva ipoteze.

Prima componentă este cărbunele, pentru care s-au aplicat următoarele ipoteze:

1. *Indiferent de proveniență, cărbunele se presupune că are aceeași compoziție;*
2. *Compoziția cărbunelui este dependentă de temperatură.*

Calcularea compoziției cărbunelui se face utilizând ecuațiile 2.53, care furnizează numărul de moli de hidrogen atomic și respectiv oxigen atomic la un mol de carbon. O a treia ipoteză este utilizată pentru stabilirea compoziției gudronului:

3. *Formula echivalentă a gudronului nu depinde de temperatura de formare.*

Formulele finale adoptate în model sunt afișate în Tabelul 2.11.

Tab.2.11: Formulele echivalente ale gudronului pentru fiecare componentă a biomasei

Componentă	Celuloză	Hemiceluloză	Lignină
Formula echivalentă calculată	$C_6H_{11,07}O_{6,59}$	$C_6H_{8,44}O_{5,71}$	$C_6H_{9,6}O_{3,1}$
Formula utilizată în model	$C_6H_{10}O_5$	$C_6H_{12}O_6$	$C_6H_{8,6}O_{3,2}$

Numărul de moli de cărbune și numărul de moli de gudron pot fi imediat calculate din următoarele relații:

$$n_{C,x}(T) = Y_{C,x}(T) \frac{M_x}{M_C(T)} \quad (\text{ec.2.69})$$

$$n_{T,x}(T) = Y_{T,x}(T) \frac{M_x}{M_{T,x}} \quad (\text{ec.2.70})$$

Fracțiile masice de cărbune și gudron sunt disponibile din ecuațiile 2.62 și 2.64, iar masele moleculare ale componentelor biomasei, cărbunelui și gudroanelor pot fi ușor calculate cu informațiile curente.

Ultimele 4 necunoscute din fiecare ecuație sunt numărul de moli de amestec de gaze (unde numărul de moli se referă la compoziția ipotetică $C_{G,x}H_{G,x}O_{G,x}$) și numărul de atomi de C, H și O din formulele atomice echivalente ale amestecurilor de gaze. Aplicând condiția conservării numărului de atomi, rezultă:

$$C_{G,x}(T) = C_x - n_{C,x}(T)C_C - n_{T,x}(T)C_{T,x} \quad (\text{ec.2.71})$$

$$H_{G,x}(T) = H_x - n_{C,x}(T)H_C - n_{T,x}(T)H_{T,x} \quad (\text{ec.2.72})$$

$$O_{G,x}(T) = O_x - n_{C,x}(T)O_C - n_{T,x}(T)O_{T,x} \quad (\text{ec.2.73})$$

unde C_x, H_x, O_x sunt numărul de atomi de C, H, O în componenta x , iar $C(H, O)_C, C(H, O)_G$ și $C(O, H)_T$ reprezintă numărul de atomi de C, H, O în cărbune, gaze și respectiv gudron.

În final, se poate calcula și numărul de moli de amestec gazos nedefinit, dar acesta rezultă oricum întotdeauna egal cu 1, prin însăși construcția modelului.

Compoziția detaliată a gazelor

Cunoscând compoziția atomică a fracției gazoase pentru fiecare dintre cele trei componente principale ale biomasei, următoarea problemă este stabilirea unei compoziții chimice probabile. Presupunând existența echilibrului chimic în orice moment și la orice temperatură de formare a gazelor, se poate aplica principiul minimizării energiei libere Gibbs a amestecului pentru a obține compoziția, plecând de la o sumă de specii chimice considerate reprezentative. Din punct de vedere numeric, problema minimizării energiei libere Gibbs a amestecului este o problemă de optimizare condiționată. Fiind o problemă neliniară, pentru rezolvarea ei trebuie apelat la un solver numeric iterativ cuplat cu un algoritm de căutare potrivit. Aplicațiile specializate disponibile în *Matlab*TM s-au dovedit a fi adecvate scopului propus, în consecință realizându-se un script dedicat.

Script-ul utilizează algoritmul „SQP” implementat în funcția *Matlab*TM „fmincon” pentru a minimiza funcția obiectiv:

$$f = \sum_i n_i \left(\frac{\Delta G^0(T)}{RT} + \ln \left(\frac{n_i}{n} \right) \right) \quad (\text{ec.2.75})$$

unde n_i este numărul de moli al speciei i , iar n este numărul total de moli, supusă următoarelor constrângeri:

$$n_i \geq 0 \quad (\text{numărul de moli nu poate fi negativ})$$

$$An_i = b \quad (\text{conservarea numărului de atomi})$$

unde A este matricea atomică a amestecului de gaze, iar b este vectorul ce stochează numărul total de atomi de C, H și O al amestecului (furnizat de programul *Mathcad*TM, ca funcție de temperatură).

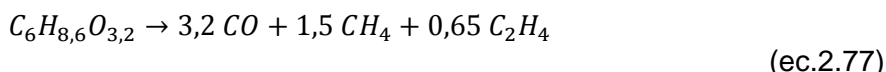
Prin rularea acestui script pentru un număr suficient de mare de valori ale temperaturii, astfel alese încât să fie cuprins întreg intervalul de valori posibil a fi atinse în timpul calculului numeric, se generează o matrice ce conține numărul de moli de CO, CO₂, H₂O, H₂ și CH₄ la echilibru chimic, corespunzător compoziției atomice calculată la pasul anterior. Pentru a simplifica utilizarea acestor rezultate, atât în programul *Mathcad*TM, cât și în funcția de implementare a modelului (UDF), în locul valorilor discrete este preferabil transferul unor funcții continue.

Determinarea compoziției gazelor secundare rezultate din cracarea gudroanelor

Aplicând exact aceeași metodologie ca în cazul compoziției gazelor primare (respectiv estimarea compoziției la echilibru chimic pe baza principiului minimizării energiei libere Gibbs) pe un interval de temperatură suficient de larg (500–1500 [K]), s-a obținut compoziția în fracții masice pentru cracarea termică a gudroanelor rezultate din celuloză și hemiceluloză.

Pentru gudronul rezultat din descompunerea ligninei nu a fost posibilă identificarea unei combinații de oxizi de carbon, hidrogen și metan care să satisfacă condițiile impuse, astfel că s-a reintrodus etilena (C₂H₄). În această nouă configurație, s-a remarcat faptul că prezența hidrogenului devine notabilă doar la temperaturi înalte (peste 1000 [K]), dar oricum

în cantități foarte reduse, iar dioxidul de carbon și apa lipsesc, descompunerea gudronului din lignină (LG-HW) fiind practic constantă, putându-se aproxima foarte bine cu ecuația:



din care rezultă compoziția în fracții masice: 0,68 CO, 0,182 CH₄, 0,138 C₂H₄.

Etapa a IV-a: Calcularea proprietăților termodinamice ale biomasei și ale produșilor de piroliză

Entalpiile de formare standard pentru componentele biomasei s-au determinat presupunând o reacție de ardere completă, stoechiometrică, ai cărei produși sunt exclusiv dioxidul de carbon și apa.

$$\Delta H_{f,B}^0 = \left(x \Delta H_{f,CO_2}^0 + \frac{y}{2} \Delta H_{f,H_2O}^0 \right) + \left(Q_s - \frac{y}{2} \Delta H_{vap} \right) \quad (\text{ec.2.79})$$

unde ΔH_{vap} este entalpia de vaporizare a apei. Aplicând ecuația 2.79 s-au obținut valorile afișate în Tabelul 2.13.

Tab.2.13: Entalpiile de formare standard pentru componentele biomasei și gudroanele lor

Comp. biomasă	Puterea calorifică superioară [kJ/kg]	Entalpia de formare [kJ/kg]	
		Comp. brută	Gudron
CL	17.394	-7.260	-5.188,9
HCL	17.787	-7.404	-3.522,2
LG	26.657	-9.748	-1.484,1

Pentru calculul entalpiei de formare a cărbunelui s-a utilizat corelația:

$$\Delta H_{f,C}^0(T) = -3,4 \times 10^4 \exp(-0,0028 T) - 9,8 \times 10^2 \quad \left[\frac{\text{kJ}}{\text{kg}} \right] \quad (\text{ec.2.83})$$

Entalpia de formare pentru amestecurile de gaze rezultate din descompunerea primară este calculată prin însumarea entalpiilor de formare standard ale speciilor. Cunoscând componența gazelor la orice temperatură, se aplică relația:

$$\Delta H_{f,amestec}^0(T) = \sum_i Y_i(T) \Delta H_{f,i}^0 \quad (\text{ec.2.85})$$

unde $i = \text{CO}, \text{CO}_2$, etc., conform compoziției determinate anterior.

Variația entalpiei, respectiv termenul $\int_{T_{ref}}^T C_p(T) dT$ din ecuația 2.43, se poate scrie și $H(T) - H(T_{ref})$, deci se poate calcula imediat dacă se cunoaște expresia entalpiei, sau integrând mai întâi expresia căldurii specifice pentru a obține expresia entalpiei. Deoarece toate expresiile căldurilor specifice au fost alese în așa fel încât integrarea analitică să fie posibilă, evaluarea integralelor pentru biomasă, cărbune și gudron este facilă:

$$\Delta H_B(T) = 2,508 \times 10^5 (T - T_{ref})^{-1,2} + 2,35 (T - T_{ref}) \quad [\text{kJ}/\text{kg}] \quad (\text{ec.2.86})$$

$$\Delta H_C(T) = 0,45 (T - T_{ref}) + 9,7 \times 10^{-4} (T - T_{ref})^2 - 1,667 \times 10^{-7} (T - T_{ref})^3 \quad [\text{kJ}/\text{kg}] \quad (\text{ec.2.87})$$

$$\Delta H_T(T) = 1,744 \times 10^5 (T - T_{ref})^{-1,2} + 1,825 (T - T_{ref}) \quad [\text{kJ}/\text{kg}] \quad (\text{ec.2.88})$$

În Figura 2.25 este reprezentată entalpia de piroliză separat pentru fiecare componentă și în ansamblu pentru biomasa considerată la începutul acestui calcul:

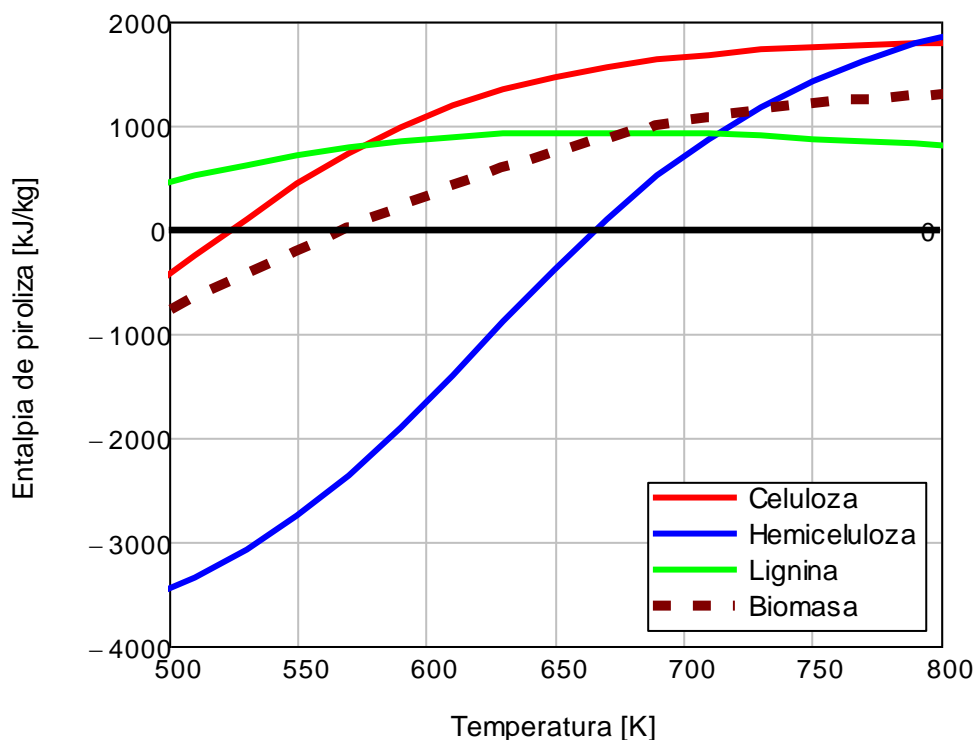


Fig.2.25: Entalpia de piroliză a componentelor și a biomasei în ansamblu, funcție de temperatură

Toate funcțiile de interpolare și corelațiile empirice asociate mărimilor termodinamice au fost transferate în funcția de implementare a modelului și au fost utilizate pentru calcularea dinamică a proprietăților de material relevante și a surselor de masă și energie pentru componentele biomasei și produșii de descompunere, la nivelul fiecărui volum de control.

2.7. Concluzii

În acest capitol s-a realizat o prezentare succintă a organizării modelului global de combustie, cu ipotezele fundamentale și obiectivele cu ajutorul cărora s-au conturat structura și schema funcțională. Avantajele utilizării unei cuplări bidirecționale între modelul dezvoltat extern și un solver numeric CFD performant sunt evidente: pe lângă scurtarea masivă a timpului necesar implementării propriu-zise, programul CFD oferă un cadru matematic și numeric excelent pentru testarea, validarea și ulterior îmbunătățirea modelului de combustie.

Proprietățile termodinamice ale biomasei constituie un subiect foarte important, mai ales având în vedere impactul preciziei cu care acestea sunt definite asupra calității

rezultatelor numerice. Totuși, descrierea corectă și amănunțită a acestor proprietăți nu este întotdeauna posibilă. Complexitatea deosebită a compoziției chimice a biomasei în stare brută și a transformărilor fizice și chimice pe care aceasta le suferă în timpul conversiei termice, ridică obstacole aproape insurmontabile. Abordările curente implică utilizarea de corelații empirice, determinate pe baza unor măsurători experimentale. Chiar și așa, dificultățile generate pe de o parte de diversitatea biomasei ca atare, dar și de imposibilitatea determinării cu acuratețe a dependenței de temperatură a proprietăților unui material care supus încălzirii își modifică continuu starea fizică și chimică, pun la grea încercare validitatea și generalitatea acestor corelații. În lipsa unor alternative superioare calitativ, s-au analizat și ulterior selectat anumite corelații din multitudinea celor existente în literatura de specialitate.

Dintre proprietățile fizice discutate, cel mai sensibil subiect este densitatea. O caracteristică a biomasei, contracția din timpul uscării, devolatilizării și, în final, arderii reziduului carbonos, este doar parțial reprodusă în forma actuală a modelului. Considerând efectul acestui fenomen inclusiv asupra proprietăților termodinamice și a celor de transport în mediul solid poros, în dezvoltarea viitoare a modelului efortul principal se va axa în această direcție. Deocamdată, problema este mai mult sau mai puțin corectată prin scalarea anumitor corelații, în speță a conductivității termice a fracției solide, ajustând valorile obținute pentru conductivitatea aparentă, chiar și în absența contracției.

Modelarea evaporării umidității inițiale a biomasei și a devolatilizării acesteia sunt realizate separat. Pentru evaporare s-a ales o metodă simplă dar eficientă (modelarea cinetică) și cu rezultate foarte bune pentru regimul de descompunere avut în vedere. Devolatilizarea este descrisă de schema cinetică Miller-Bellan, din care s-a eliminat ecuația corespunzătoare descompunerii secundare a gudroanelor, aceasta fiind implementată separat. Producția de descompunere se determină separat, pentru fiecare componentă a biomasei în parte, deși în majoritatea studiilor numerice nu se realizează această diferențiere. Entalpia procesului, identificată în literatură sub denumirea de „entalpie de piroliză” este formulată termodinamic corect, ca o funcție de temperatură, și nu ca o constantă sau chiar un parametru ajustabil, așa cum s-a procedat în foarte multe studii anterioare.

Combustia reziduului carbonos este realizată utilizând un model propriu implementat în funcția externă (UDF), bazat pe date disponibile în literatură, ce consideră reziduul carbonos ca un compus complex, nu doar carbon pur. Datorită acestui aspect particular, descompunerea corectă a cărbunelui se face prin considerarea inclusiv a unor specii chimice probabile, captive în structura carbonoasă până la momentul degradării. Mecanismul pentru arderea volatilelor conține șase specii chimice și șapte reacții, fiind minimum posibil în acest caz. Deocamdată, aplicarea unor mecanisme mai elaborate nu a fost posibilă datorită efortului de calcul deosebit asociat utilizării acestora în simulări CFD tridimensionale.

În finalul capitolului se prezintă modelul cinetico-chimic pe baza căruia s-a dezvoltat întregul model numeric de combustie. Etapele principale ale procesului de modelare a biomasei sunt: (1) stabilirea formulei chimice echivalente pentru biomasă și componentele acesteia, (2) calculul fracțiilor de produși primari de descompunere ca funcții de temperatură, (3) modelarea descompunerii acestor produși primari și (4) calcularea proprietăților termodinamice ale biomasei și ale produșilor de descompunere. Abordarea este complet originală, ideea esențială fiind aceea că ipoteza superpoziției efectelor poate fi extinsă la toate nivelele modelării, inclusiv la oricare dintre etapele menționate. Scopul final al metodei de modelare prezentate este generarea unor funcții pentru reprezentarea numerică a tuturor mărimilor necesare în modelul dinamic, al căror singur parametru este temperatura. Caracterul de independență al reprezentării mărimilor conferit de aceste funcții conduce la simplificarea deosebită a implementării numerice, iar diferențierea lor pe componente ale biomasei le asigură proprietatea de *invariabilitate* sau *unică determinare*. Acest ultim aspect permite construcția modelului global prin crearea unei macro-funcții – o combinație a tuturor funcțiilor individuale, ai cărei singuri parametri sunt *fracțiile masice ale componentelor inițiale și temperatura*.

3. MODELAREA NUMERICĂ A PROCESELOR FIZICO-CHIMICE ASOCIATE COMBUSTIEI BIOMASEI

Acest al treilea capitol prezintă componentele modelului dinamic cu ajutorul căruia se efectuează simularea efectivă a procesului de descompunere termică și de ardere a volatilelor, respectiv funcția externă de implementare (UDF) și modelul numeric CFD. Pentru început se detaliază structura și funcționalitatea rutinelor ce compun funcția de implementare, rutine care realizează calculele pentru vitezele de generare a diferitelor fracții de produși de descompunere, compoziția chimică a volatilelor și bilanțul termic al procesului. Pe lângă acestea, mai sunt incluse și rutine de calcul a proprietăților de material pentru biomasa brută și reziduul solid și un model pentru calculul coeficientului de absorbție a radiației în faza gazoasă. În partea a doua se prezintă câteva elemente de modelare numerică a curgerii, în primul rând modelul Navier-Stokes mediat în sensul lui Reynolds, cu modelarea aferentă a turbulenței. Deoarece sunt componente esențiale ale modelului global, sunt prezentate și modelarea reacțiilor chimice și modelarea transferului termic prin radiație. În finalul capitolului sunt discutate anumite chestiuni legate de procesul de simulare numerică a modelului de combustie, și anume modelarea și discretizarea domeniului de calcul, condiții pe granițe (la limită), problematica solverelor numerice și schemele de discretizare spațială și temporală.

3.1. Funcția externă de implementare a modelului

Structura funcției de implementare a modelului

În continuare se prezintă structura detaliată a funcției de implementare, cu rutinele incluse grupate conform funcționalității lor. Datorită complexității și dimensiunilor mari ale codului sursă (≈ 3200 linii), în lucrarea de față sunt incluse doar anumite părți în secțiunea Anexe, pentru exemplificare (funcția pentru calculul coeficientului de absorbție și funcția utilizată în calculul sursei de energie datorată cracării gudroanelor). Sintaxa funcțiilor macro standard specificate în Tabelul 3.2 în coloana de observații este disponibilă în [8].

Tab.3.2: Structura funcției de implementare (UDF)

Componente		Obs.
1.	Secțiunea de inițializare	
1.1.	Declararea variabilelor principale	
	Variabile globale generale - de ex.: R = constanta universală a gazelor, T_{ref} = temperatura de referință, etc.	Standard C
	Masele molare ale speciilor volatile	Standard C
	Variabilele modelului cinetico-chimic: <ul style="list-style-type: none"> • Variabilele modelelor cinetice de uscare și devolatilizare; • Umiditatea biomasei; • Densitatea biomasei; • Frațiile masice în biomasa umedă (calculate din datele de mai sus); • Parametrii modelului cinetic pentru evaporarea apei; • Parametrii modelului cinetic de devolatilizare; 	Standard C

Componente		Obs.
	<ul style="list-style-type: none"> Parametrii modelului de gazificare și oxidare a cărbunelui. 	
	Concentrațiile locale ale componentelor biomasei, produșilor de piroliză, etc.	Discretizate utilizând UDM (<i>User Defined Memory</i>)
1.2.	Funcția de inițializare a concentrațiilor componentelor <ul style="list-style-type: none"> se execută o singură dată, la inițializarea soluției numerice 	Macro: DEFINE_ON_DEMAND ()
2. Secțiunea de calcule curente		
2.1.	Declarații de funcții globale	
	Funcțiile de calcul a vitezelor de evaporare a umidității și descompunere a componentelor biomasei: <ul style="list-style-type: none"> Funcție ce returnează viteza de evaporare a apei din biomasă $f(T)$; Funcții ce returnează parametrii cinetici ai modelului de devolatilizare $f(T)$; Funcții pentru calculul compoziției cărbunelui $f(T)$; Funcții pentru calculul vitezelor de conversie a cărbunelui $f(T,p)$. 	Standard C
	Funcțiile de calcul ale fracțiilor amestecurilor de gaze rezultate din biomasă în descompunerea primară și din gudron în faza secundară	Standard C
2.2.	Calculul proprietăților fizice ale biomasei și amestecurilor de fluide rezultate din devolatilizare	
	Funcții pentru calculul entalpiilor: <ul style="list-style-type: none"> Entalpia amestecurilor de gaze rezultate direct din descompunerea primară a componentelor biomasei $f(T)$; Entalpia amestecurilor de gaze rezultate din descompunerea secundară a gudroanelor $f(T)$. 	Standard C
	Funcții pentru calculul proprietăților mediului solid <ul style="list-style-type: none"> Funcție pentru calculul porozității locale; Funcție pentru calculul coeficientului de rezistență vâscoasă; Funcție pentru calculul conductivității termice a biomasei $f(T)$; Funcție pentru calculul căldurii specifice a biomasei $f(T)$. 	Macro: DEFINE_PROFILE () DEFINE_SPECIFIC_HEAT ()
	Funcții pentru calculul proprietăților volatilelor: <ul style="list-style-type: none"> Funcție pentru calculul căldurii specifice a gudroanelor $f(T)$; Funcție pentru calculul coeficientului de absorbție a radiației în mediul fluid. 	Macro: DEFINE_PROFILE () DEFINE_SPECIFIC_HEAT ()
2.3.	Calculul surselor de masă (funcții de temperatură)	
	Funcție pentru calculul sursei de masă globală	Macro: DEFINE_SOURCE

Componente		Obs.
	Funcții pentru calculul surselor de specii chimice: <ul style="list-style-type: none"> • Funcție pentru calculul sursei de vapori din umiditatea inițială; • Funcție pentru calculul sursei globale de CO; • Funcție pentru calculul sursei globale de CO₂; • Funcție pentru calculul sursei globale de H₂O; • Funcție pentru calculul sursei globale de H₂; • Funcție pentru calculul sursei globale de CH₄; • Funcție pentru calculul sursei globale de C₂H₄; • Funcție pentru calculul sursei globale de O₂; • Funcții pentru calculul surselor de gudron (vapori) <ul style="list-style-type: none"> - interior = în interiorul volumului ocupat de biomasă; - exterior = în restul volumului fluid. 	Macro: DEFINE_SOURCE
2.4	Calculul surselor de energie (depind de sursele de masă)	
	Funcție pentru calculul sursei de energie datorată uscării + devolatilizării	Macro: DEFINE_SOURCE
	Funcție pentru calculul sursei de energie datorată gazificării + oxidării cărbunelui	Macro: DEFINE_SOURCE
	Funcție pentru calculul sursei de energie datorată absorbirii radiației la suprafața particulei	Macro: DEFINE_SOURCE
	Funcție pentru calculul sursei de energie datorată cracării gudroanelor	Macro: DEFINE_SOURCE
3.	Secțiunea de calcule de închidere	
3.1.	Funcție pentru recalcularea concentrațiilor fracțiilor solide (în funcție de sursele de masă)	Macro: DEFINE_EXECUTE_ AT_END ()
3.2.	Funcție pentru recalcularea intensității radiației incidente (necesară datorită modificării condițiilor)	Macro: DEFINE_EXECUTE_ AT_END ()
3.3.	Funcție pentru calcularea masei curente a particulei <ul style="list-style-type: none"> - rezultatul calculului este înregistrat într-un fișier text special creat în acest scop. 	Macro: DEFINE_EXECUTE_ AT_END ()

3.3. Simularea numerică

3.3.1. Domeniul de calcul. Grila de discretizare spațială

Dimensiunile exterioare ale domeniului de calcul au fost modelate considerând caracteristicile camerei experimentale a cuptorului, descris în Cap.4.1. (Figurile 4.1 și 4.2). Înălțimea totală pentru domeniul 2D/3D este 114 și respectiv 172 [mm], lățimea domeniului 2D este 114/2 [mm], iar diametrul domeniului de calcul cilindric 3D este 114 [mm]. Particulele de biomasă au fost amplasate în centrul domeniului, având aceeași orientare ca în experimente, respectiv cu axa cilindrului paralelă cu direcția orizontală (axa Z din modelul numeric CFD 3D). În cazurile de modelare și simulare bidimensionale, domeniul de calcul a fost redus la o simplă secțiune în planul XY a domeniului original.

În cazurile 3D s-a folosit exclusiv tehnica clasică de discretizare structurată multibloc, care deși presupune un efort de construcție mai mare, are o serie întreagă de avantaje, cel mai important fiind precizia superioară a rezultatelor pentru o densitate nodală de referință, ceea ce a permis reducerea dimensiunilor totale ale grilei și, implicit, a efortului de calcul. Mai mult chiar, profitând de cele două plane de simetrie geometrică ale particulelor, domeniul de calcul al modelelor tridimensionale a fost redus la o pătrime, după cum se poate observa din Figurile 3.2 și 3.3. Dimensiunile finale ale grilelor de discretizare 3D sunt de aprox. 135.000 de volume finite pentru prima particulă ($L/D = 1$) și de aprox. 175.000 de volume finite pentru cea de-a doua ($L/D = 4$).

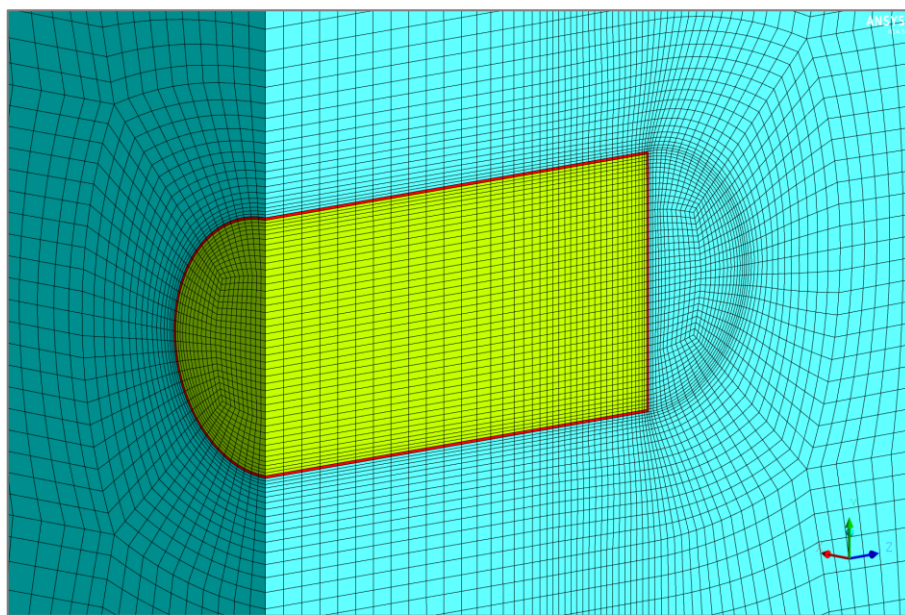


Fig.3.3: Discretizarea utilizată în simulările 3D ale particulei cu raportul $L/D = 4$

3.4. Concluzii

În acest capitol s-au prezentat mai întâi structura funcției macro de implementare a modelului cinetico-chimic și funcționalitatea rutinelor pe care aceasta le încorporează. Funcția de implementare este un program în limbajul C, ale cărui subfuncții sunt realizate astfel încât comunicarea dintre modelul cinetico-chimic și modelul numeric CFD să fie posibilă în ambele sensuri. Programul efectuează cu ajutorul unor subrutine dedicate calcularea (1) a surselor de masă și energie pentru toate procesele de transfer de masă asociate descompunerii termice a biomasei și (2) a proprietăților de material și a celor de transport în interiorul volumului solid, preluând din solverul numeric CFD toate datele necesare. Pe lângă aceste subrutine, programul mai conține și anumite elemente adiționale, subrutine specializate, al căror scop este îndeplinirea unor operațiuni de inițializare sau postprocesare.

Numărul de operații efectuate de subrutine a fost redus la minimum, datorită faptului că majoritatea funcțiilor programului sunt apelate de solverul numeric CFD la nivel de celulă a grilei, pentru fiecare pas de timp al simulării numerice. Orice îmbunătățire adusă în acest sens se reflectă direct în efortul de calcul global și, respectiv, în timpul necesar realizării simulărilor numerice.

În continuare au fost descrise succint modelarea numerică a curgerii, cu modelul Navier-Stokes mediat în sensul lui Reynolds și modelarea aferentă a turbulenței, modul de

realizare a modelării reacțiilor chimice și al transferului termic prin radiație, cu prezentarea modelului propriu de calcul al coeficientului de absorbție a radiației în mediul fluid.

În final, s-au trecut în revistă tehnicile de construcție a domeniilor de calcul și grilelor de discretizare pentru cazurile de simulare numerică folosite pentru verificarea și validarea modelului numeric de combustie, condițiile la limită utilizate în toate cazurile, inclusiv în cel al cazanului cu flacără întoarsă (subiectul Capitolului 5) și solverul numeric utilizat pentru rezolvarea problemelor, cu schemele de discretizare spațială și temporală a ecuațiilor de conservare ale modelului.

Împreună cu Capitolul 2, acest capitol definitivează descrierea modelului numeric de combustie a biomasei. În capitolele următoare se vor prezenta verificarea și validarea modelului și, ulterior, aplicarea acestuia la rezolvarea unei probleme complexe.

4. VERIFICAREA ȘI VALIDAREA MODELULUI NUMERIC DE COMBUSTIE A BIOMASEI

Capitolul al IV-lea prezintă rezultatele modelărilor și simulărilor numerice efectuate cu scopul verificării și validării modelului numeric de combustie, a cărui componentă este prezentată pe larg în capitolele 2 și 3. Descrierea instalației experimentale și testelor fizice din care au rezultat datele utilizate în evaluarea performanțelor modelului numeric este urmată de prezentarea rezultatelor numerice și comparația acestora cu cele experimentale, pentru setul de măsurători corespunzător condițiilor de piroliză. Aceste teste sunt relevante pentru aprecierea caracteristicilor modelului legate strict de uscarea și devolatilizarea particulelor de biomasă, fiind realizate pentru diverse nivele de umiditate inițială și viteze de curgere a gazelor în exterior. În final, se prezintă rezultatele obținute considerând o atmosferă oxidantă, în aceleași condiții de încălzire termică, analizând de această dată performanțele modelului de combustie, atât în cazul unor particule de biomasă cilindrice cu raportul dintre lungime și diametru unitar, cât și egal cu patru. Ambele teste de combustie au fost rulate utilizând modele tridimensionale.

4.1. Prezentarea experimentului utilizat pentru validare

Cuptorul experimental a fost realizat din materiale refractare (SiC) și a fost proiectat și construit să asigure viteze de încălzire mari și temperaturi maxime constante, de către Ip [10]. Înălțimea totală a cuptorului este de 305 [mm], diametrul exterior de 152 [mm], iar cel interior de 114 [mm]. Cuptorul este dotat cu șase ferestre de vizitare, așezate pe trei direcții ortogonale, câte două pe fiecare direcție. Așezarea perechilor de ferestre de vizitare se poate observa în Figura 4.1. Pe fiecare direcție spațială se montează o cameră de luat vederi cu senzor CCD, care poate prelua imagini video, dar poate fi utilizată și pentru măsurători de pirometrie. Încălzirea cuptorului se face cu patru elemente electrice rezistive, temperatura de lucru maximă posibilă fiind de 1400 [°K]. Un debit de gaze fierbinți traversează cuptorul în timpul experimentelor, pătrunzând pe la partea inferioară și ieșind prin partea opusă. Încălzirea acestor gaze se realizează cu un dispozitiv de preîncălzire controlată (detalii în Figura 4.2), care ridică temperatura gazelor până la valori aproximativ egale cu ale cuptorului.

Experimentele au fost efectuate pe probe de biomasă cu diferite forme și dimensiuni. Practic toate probele au fost de formă cilindrică, însă datorită variației mari a raportului dintre lungimea axei și diametrul secțiunii circulare, Lu a împărțit particulele în discuri (L/D între 0,125 și 0,2), particule aproape sferice ($L/D = 1$) și particule cilindrice (L/D între 4,0 și 8,0). Diametrul probelor variază între 3 și 12 [mm]. Materialul utilizat la fabricarea probelor este lemnul de plop. Autorul nu a publicat informații referitoare la analiza tehnică a biomasei, astfel că datele efectiv utilizate în model au fost obținute prin medierea valorilor fracțiilor principalelor componente (CL, HCL, LG, cenușă și apă) pentru mai multe specii de plop, preluate din literatură [11].

Descompunerea termică a tuturor particulelor a fost măsurată în câte patru situații distincte, diferența constând în conținutul de umiditate inițială al probei și prezența oxigenului în gazele introduse în cuptor. În cazul umidității, pe de o parte s-a procedat la uscarea forțată a particulelor până la o valoare măsurată de 6 [%] apă, iar pe de altă parte, particulele au fost rehidratate prin introducerea în apă pentru cel puțin 24 ore, cantitatea de apă conținută la final fiind uniformizată la 40 [%]. Din datele publicate de Lu nu reiese dacă umiditatea probelor de biomasă este raportată la masa uscată sau cea umedă. Prin urmare, în modelarea numerică am folosit ambele modalități de impunere a umidității inițiale, după cum se observă și din rezultatele prezentate.

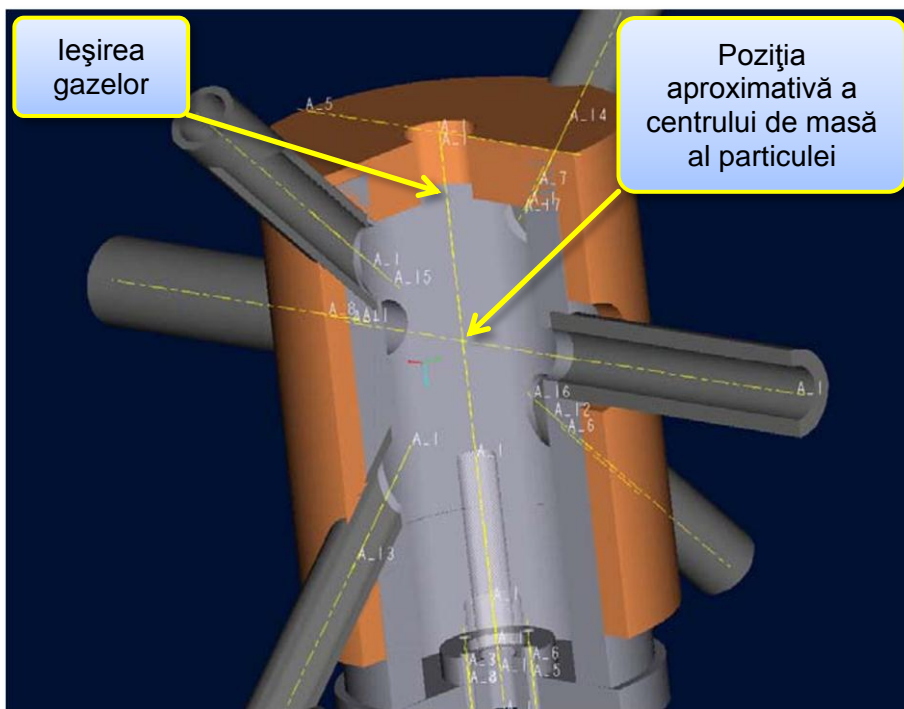
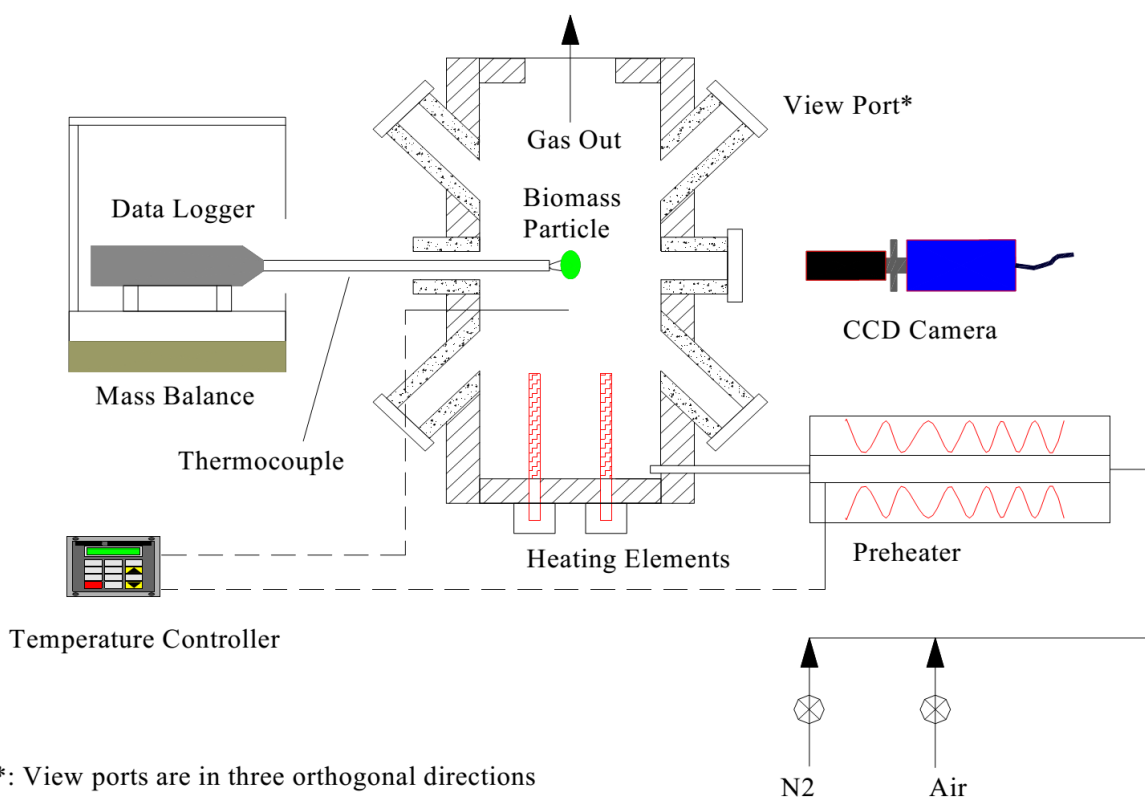


Fig.4.1: Model CAD al cuptorului experimental proiectat și construit de Ip [10] și utilizat ulterior de Lu [12] (sursa: [10])



*: View ports are in three orthogonal directions

Fig.4.2: Schema instalației experimentale utilizată în experimentele lui Lu (sursa: [12])

4.2. Verificarea și validarea modelului de uscare și devolatilizare

4.2.2. Rezultatele simulărilor efectuate pe modele CFD bidimensionale

Rezultatele experimentale (reprezentate în toate imaginile cu simboluri pătrate roșii) sunt de fapt media valorilor măsurate în cel puțin două experimente distincte (în unele cazuri trei, chiar și patru experimente).

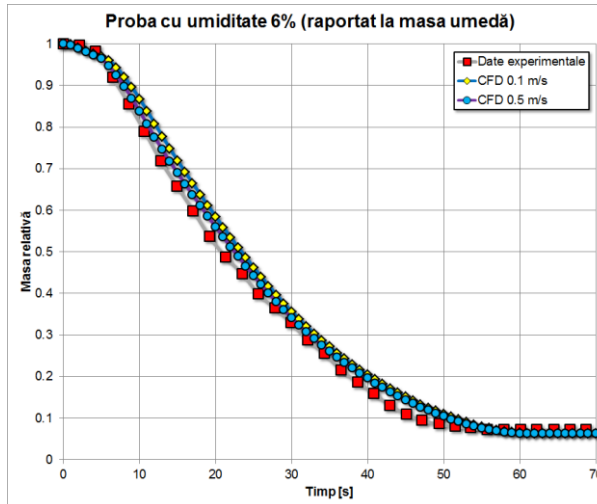


Fig.4.5: Comparație între rezultatele numerice și cele exp. (sursa [12]) pentru piroliza probei cu umiditate inițială de 6 [%] 2D

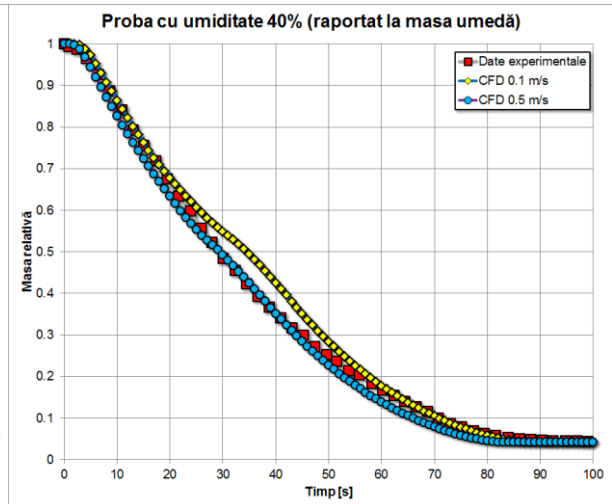


Fig.4.7: Comparație între rezultatele numerice și cele exp. (sursa [12]) pentru piroliza probei cu umiditate inițială de 40 [%] 2D

4.2.3. Rezultatele simulărilor efectuate pe modele CFD tridimensionale

După cum am arătat în capitolele anterioare, modelarea simplificată 2D a avut doar scopul verificării funcționării modelului numeric. Modelarea 3D este singura cale pentru a valida corectitudinea modelului numeric de descompunere a biomasei.

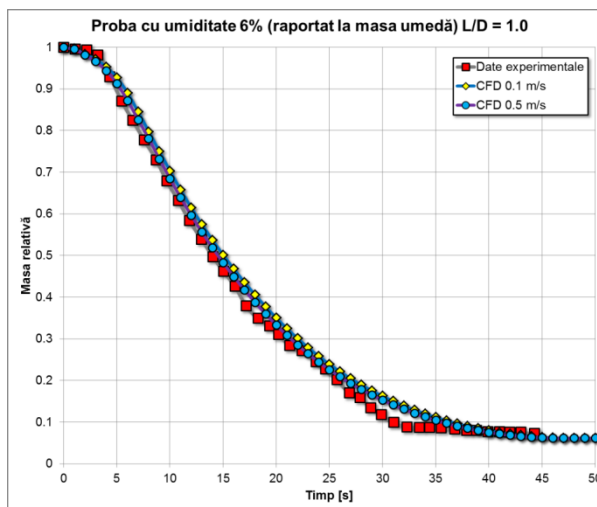


Fig.4.8: Comparație între rezultatele num. și cele exp. (sursa [12]) pentru piroliza probei cu umiditate inițială de 6 [%] L/D = 1, 3D

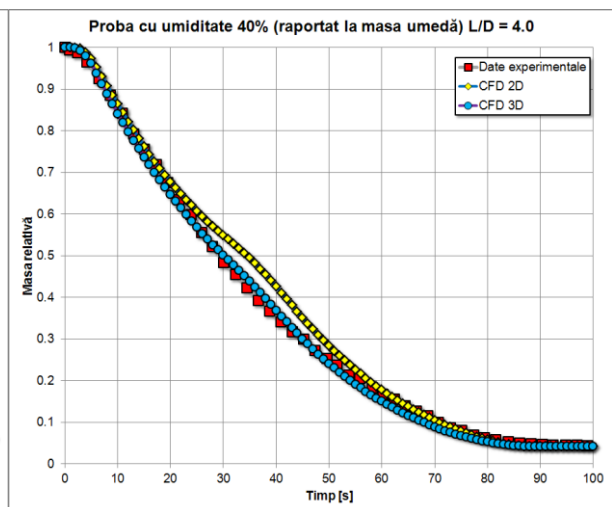


Fig.4.10: Comparație între rezultatele num. și cele exp. (sursa [12]) pentru piroliza probei cu umiditate inițială de 40 [%] L/D = 4, 3D

Un aspect extrem de important pentru aprecierea calității modelului este faptul că acesta a fost definitivat din toate punctele de vedere în etapa de dezvoltare, unde s-au utilizat exclusiv modele CFD bidimensionale. În etapa de modelare și simulare tridimensională s-a făcut efectiv doar validarea modelului numeric, fără a se aduce vreo modificare de orice fel, în încercarea de a corecta sau calibra rezultatele! Toate modelele 3D din această lucrare au fost rulate o singură dată, iar datele numerice sunt prezentate exact așa cum au fost obținute.

4.3. Verificarea și validarea modelului de combustie

Din datele publicate de Lu [12] se pot identifica doar două cazuri de combustie. Măsurătorile experimentale în atmosferă oxidantă s-au efectuat pentru o probă cilindrică cu lungimea egală cu diametrul (9,5 [mm]), al cărei nivel de umiditate inițială a fost de 6 [%] și respectiv 40 [%] (raportat la masa umedă) însă numai pentru particula cu umiditate mare sunt disponibile date legate de evoluția masei particulei în timp. Deși nu există date experimentale publicate de Lu pentru acest caz, am realizat modelarea și simularea combustiei inclusiv pentru o particulă cu raportul $L/D = 4$, toți ceilalți parametri fiind identici.

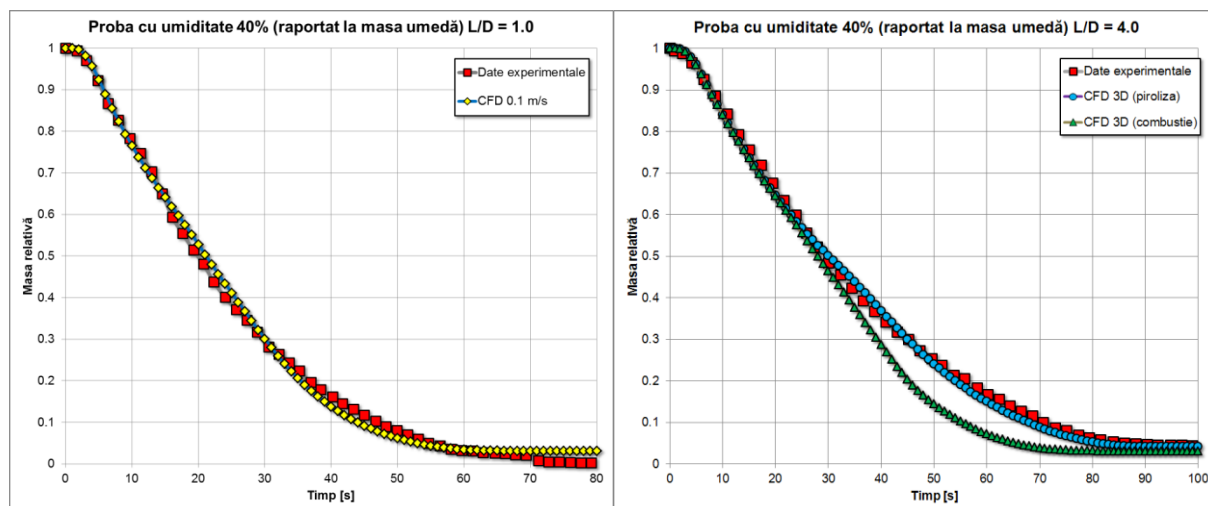


Fig.4.12: Comparație între rezultatele num. și cele exp. (sursa [12]) pentru combustia probei cu umid. inițială de 40 [%] $L/D = 1$, 3D

Fig.4.19: Comparație între rezultatele num. și cele exp. (sursa [12]) pentru combustia probei cu umid. inițială de 40 [%] $L/D = 4$, 3D

În continuare se prezintă câteva rezultate obținute prin simularea combustiei probelor cu raportul L/D egal cu 1 (stânga) și 4 (dreapta). Imaginile arată distribuțiile anumitor mărimi calculate, la diferite stadii din evoluția procesului.

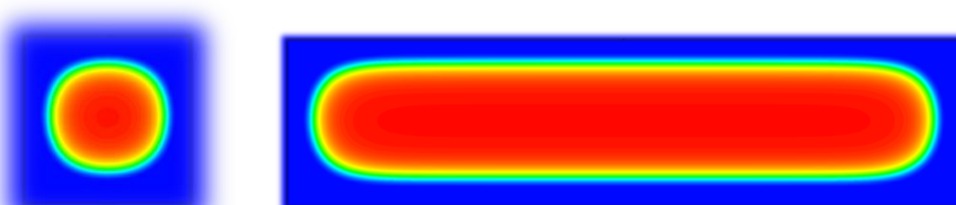


Fig.4.13: Concentrația umidității inițiale la $t = 15$ [s]

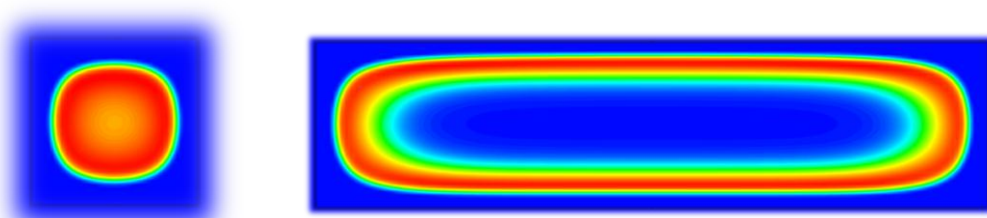


Fig.4.14: Concentrația celulozei „active” la $t = 35$ [s]

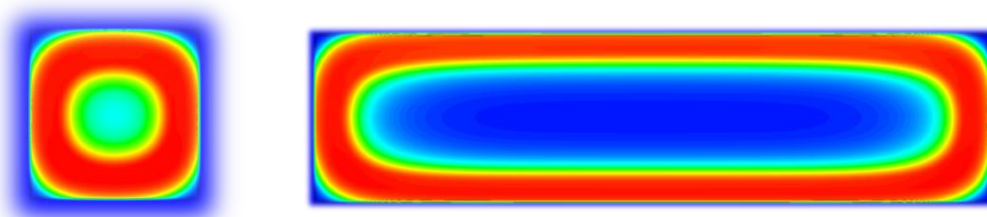


Fig.4.15: Concentrația cărbunelui la $t = 40$ [s]

Cu toate că temperatura curentului de gaze la exterior este $T = 1050$ [K], aprinderea amestecului combustibil de gaze rezultate din descompunerea probei de biomasă cu $L/D = 1$ are loc abia după aprox. 15 [s]. Temperatura maximă a flăcării (≈ 1700 [K]) se atinge spre finalul etapei de uscare. După $t = 25$ [s] flacăra pierde continuu din intensitate, atingând un minimum la 55 [s] ($T = 1300$ [K]), după care, odată cu accelerarea descompunerii rezidului carbonos, ajunge la finalul procesului la ≈ 1500 [K]. Din Figura 4.18 se vede cum flacăra cuprinde spre final întreaga particulă, arderea cărbunelui făcând tranziția de la regimul II către regimul I de descompunere (a se vedea Cap.2.4.).

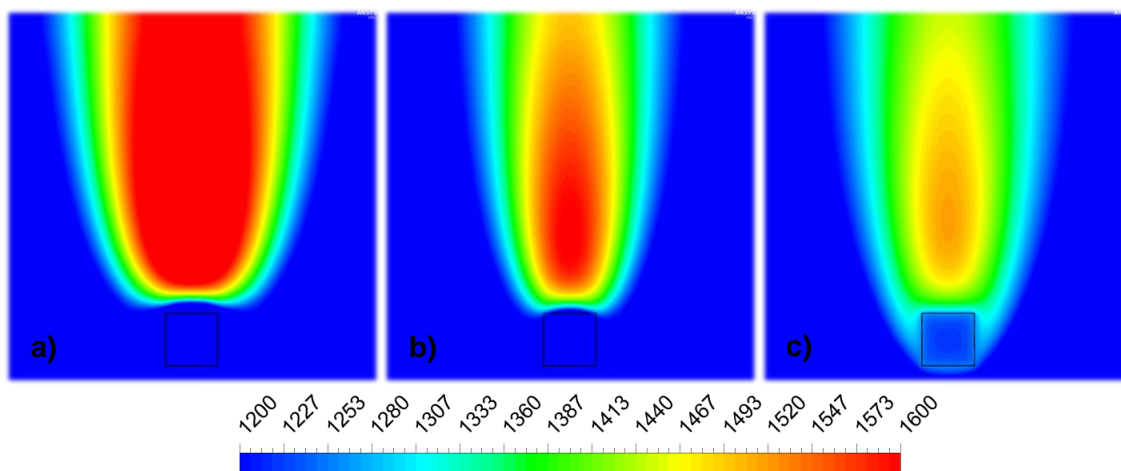


Fig.4.18: Distribuția temperaturii la $t = 25$ (a), 40 (b) și 75 (c) [s] [K]

Pentru proba cu $L/D = 4$, din nou, aprinderea amestecului combustibil de gaze rezultate din descompunere are loc cu întârziere, abia după aprox. 18 [s]. Temperatura maximă a flăcării (≈ 2200 [K]) se atinge de această dată în timpul arderii rezidului carbonos. În etapa de ardere a volatilor temperatura maximă atinge 1800 [K]. Reducerea intensității arderii se observă și în cazul celei de-a doua particule, minimum atingându-se la $t = 65$ [s], când valoarea temperaturii este de cca. 1550 [K]. Din Figura 4.25 se observă faptul că nu doar evoluția temperaturii de-a lungul arderii este diferită, ci și forma flăcării. Arderea este

mai intensă spre extremitățile particulei, flacăra având forma unui con dublu. La $t = 40$ [s] se remarcă atât reducerea lungimii flăcării, cât și creșterea temperaturii față de 15 [s] mai devreme, una dintre cauze fiind și încheierea etapei de uscare. În timpul arderii reziduumul carbonos flacăra revine la forma simplu-conică, procesul de oxidare fiind mult mai intens comparativ cu prima particulă (judecând nu numai după forma flăcării, ci și după valoarea temperaturii).

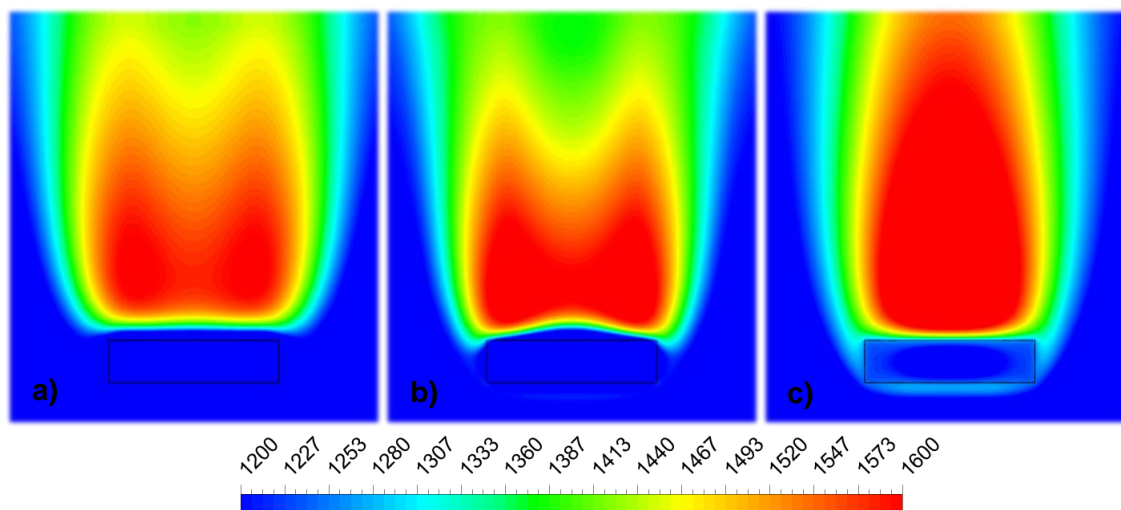


Fig.4.25: Distribuția temperaturii la $t = 25$ (a), 40 (b) și 75 (c) [s] [K]

4.4. Concluzii

Capitolul 4 prezintă rezultatele modelărilor și simulărilor numerice efectuate pentru câteva cazuri de descompunere termică a unor particule de biomasă cilindrice cu diametrul de 9,5 [mm], supuse încălzirii simultan printr-un flux de radiație (mecanismul principal) și un flux termic convectiv datorat unui curent de gaz cu temperatură ridicată. Modelele realizate reproduc experimentele efectuate de Lu [12] pentru o serie de probe de biomasă (lemn de plop), descompuse termic într-un cuptor special proiectat și fabricat pentru acest scop. Instalația experimentală a permis măsurarea cu o balanță a evoluției în timp a masei particulei, temperatura fiind determinată în câte două puncte distincte ale probelor utilizând termocuple. Modelele numerice utilizate au simulat condițiile experimentale pentru două tipuri dimensionale de probe de biomasă, o particulă cilindrică cu lungimea egală cu diametrul și o alta cu lungimea de patru ori mai mare. Fiecare dintre acestea au fost simulate având două fracții inițiale de apă, 6 [%] și respectiv 40 [%]. De asemenea, pentru simularea condițiilor de piroliză s-a utilizat o atmosferă neutră (azot) iar pentru combustie s-a introdus în cuptor aer atmosferic.

În prima parte sunt prezentate rezultatele simulărilor numerice realizate pe modele CFD bidimensionale, care au fost utilizate pentru verificarea comportamentului modelului numeric de combustie în faza de dezvoltare, strict pentru problema pirolizei. Aceste rezultate nu sunt lipsite de relevanță, după cum arată și comparațiile efectuate cu măsurători experimentale compatibile (prelevate cu particule de lungime mult mai mare decât diametrul). Încă din aceste comparații este evident potențialul modelului, corespondența dintre rezultatele numerice și cele măsurate fiind foarte bună pentru particulele cu umiditate redusă, iar în cazul particulelor cu umiditate mare observându-se anumite deviații de la măsurători spre finalul fazei de descompunere dominată de evaporarea apei. Modelele au demonstrat sensibilitatea rezultatelor numerice la condițiile exterioare, în particular pentru etapa de uscare, particulele cu umiditate mare fiind vizibil mai puternic influențate de variația vitezei de curgere a gazelor la exterior.

Validarea modelului numeric dezvoltat în acest studiu s-a realizat pe baza unor simulări numerice efectuate cu modele CFD tridimensionale. Mai întâi s-a reluat problema pirolizei, respectiv s-au modelat și simulat, iar apoi comparat cu măsurătorile experimentale cazurile de descompunere termică în atmosferă neutră, ce aproximează piroliza biomasei. În niciunul dintre aceste cazuri nu s-a aplicat vreo corecție modelului numeric, cu scopul calibrării sau îmbunătățirii rezultatelor acestuia. După cum demonstrează comparațiile, nici nu a fost nevoie, modelul comportându-se excelent în toate situațiile, cu precădere în cazurile cu umiditate redusă. Frația de reziduu solid este bine calculată în toate cazurile.

Validarea combustiei s-a efectuat prin simularea singurului caz experimental pentru care au fost disponibile și măsurători ale evoluției masei particulei ($L/D = 1$, 40 [%] umiditate). Curbele de pierdere de masă, cea numerică și cea experimentală, sunt în foarte bună concordanță, singurul aspect unde rezultatele nu coincid constând în masa finală a particulei, care în modelul numeric este ceva mai mare. Această deviație a modelului se datorează cel mai probabil diferențelor posibile dintre compoziția biomasei folosită experimental și cea modelată numeric, la care se adaugă dezintegrarea particulei reale, nereprodusă în modelul numeric. Valorile temperaturilor calculate de model pentru etapa de ardere a volatilelor sunt practic aceleași cu cele măsurate (≈ 1700 [K]), iar pentru faza de ardere a cărbunelui temperatura calculată (≈ 1500 [K]) se încadrează foarte bine în intervalul măsurătorilor (1400–1600 [K]). Ceea ce nu este clar la acest moment este motivul scăderii temperaturii în faza de tranziție de la arderea volatilelor la cea a cărbunelui (până la ≈ 1300 [K]), care se observă și experimental, însă nu la fel de intensă ca în modelul numeric.

În final s-au prezentat și câteva rezultate obținute prin modelarea și simularea combustiei pentru un cilindru cu raportul L/D egal cu patru, la același conținut inițial de apă (40 [%]) și în aceleași condiții, fără a avea date experimentale pentru comparație. Rezultatele numerice indică faptul că procesul de ardere al acestei particule este diferit, într-o proporție semnificativă, pe lângă durata mai mare a întregului proces înregistrându-se temperaturi mai mari (1800 [K] pentru volatile și 2200 [K] în etapa de ardere a cărbunelui), dar și o evoluție în timp modificată. Și în acest caz se observă reducerea temperaturii de ardere la trecerea de la combustia volatilelor la cea a reziduuului carbonos, valoarea minimă fiind totuși superioară (1550 [K]). Din aceste constatări se trage concluzia că forma particulei de biomasă poate avea un impact major asupra modului de desfășurare a proceselor de descompunere în condiții de combustie.

Performanța globală a modelului numeric de combustie dezvoltat în cadrul acestui studiu este deosebită, mai ales prin prisma comparării acesteia cu rezultatele numerice obținute de alți cercetători, pentru aceeași problemă (un prim exemplu ar fi rezultatele numerice obținute cu propriul model 1D, publicate chiar de autorul măsurătorilor, Lu). Modelul numeric prezentat în această lucrare poate fi utilizat cu succes nu doar pentru estimarea cu precizie a duratei procesului de conversie, fie că este vorba despre piroliză sau despre combustie, sau estimarea masei reziduale (respectiv a cărbunelui), ci la fel de bine poate fi aplicat și pentru determinarea temperaturilor de ardere, în ambele faze principale (arderea volatilelor, urmată de arderea reziduuului carbonos). Ținând cont de precizia oferită pentru aceste aspecte ale problemei, este foarte posibil ca inclusiv compoziția chimică a gazelor de ardere să fie corect evaluată, însă acest lucru rămâne să fie eventual confirmat în cercetările viitoare.

Cea mai importantă concluzie ce se desprinde din analiza tuturor datelor numerice și a corespondenței dintre acestea și măsurătorile experimentale este faptul că studierea corectă și amănunțită a multor cazuri aparent simple, se poate face numai utilizând metode de simulare numerică tridimensionale și nestaționare, care să fie nu doar corect formulate din punct de vedere fizic și chimic, dar și cât mai detaliat, respectiv mai apropiate de fenomenologia reală. Realizarea unor modele numerice de înaltă fidelitate și precizie nu se poate baza doar pe aspectele legate de transformările fizico-chimice prin care trece biomasa în timpul descompunerii termice, modelarea completă a fenomenelor de transport a căldurii și, mai ales, a masei, se dovedește a fi cel puțin la fel de importantă.

5. STUDIU DE CAZ – SIMULAREA COMBUSTIEI BIOMASEI ÎNTR-UN CAZAN CU FLACĂRĂ ÎNTOARSĂ

Scopul acestui capitol este acela de a prezenta aplicarea modelului numeric de combustie dezvoltat în cadrul acestui studiu pentru o problemă de modelare și simulare numerică cu un grad de complexitate mult mai ridicat, la nivelul utilizării într-un mediu de proiectare inginerescă. Problema avută în vedere este arderea brichetelor de diametru mare (70 [mm]) realizate dintr-un amestec de rumeguș din lemn de esență tare și reziduuri agricole măcinate, într-un cazan destinat producerii de apă caldă și căldură, cu puterea nominală de 40 [kW].

Datorită complexității constructive și funcționale a cazanului, modelarea și simularea s-a limitat la procesul de ardere în sine, aspectele legate de transferul termic la circuitul de apă al cazanului, respectiv preluarea energiei termice a gazelor de ardere, au fost neglijate. Astfel, din ansamblul cazanului s-au modelat doar circuitul de alimentare cu aer, camerele de ardere primară și secundară și căile convective, cu evacuarea gazelor de ardere către colectorul de fum. Față de configurația originală, cazanul a fost anterior acestui studiu dotat cu o izolație din cărămidă refractară pe pereții laterali ai camerei de ardere superioară, ceea ce a constituit un avantaj pentru modelarea numerică, permițând obținerea unor rezultate numerice acceptabile pentru procesul de ardere în sine (camera de ardere superioară, duzele de legătură între cele două camere și camera de ardere inferioară) chiar și în ipoteza absenței transferului termic către exterior.

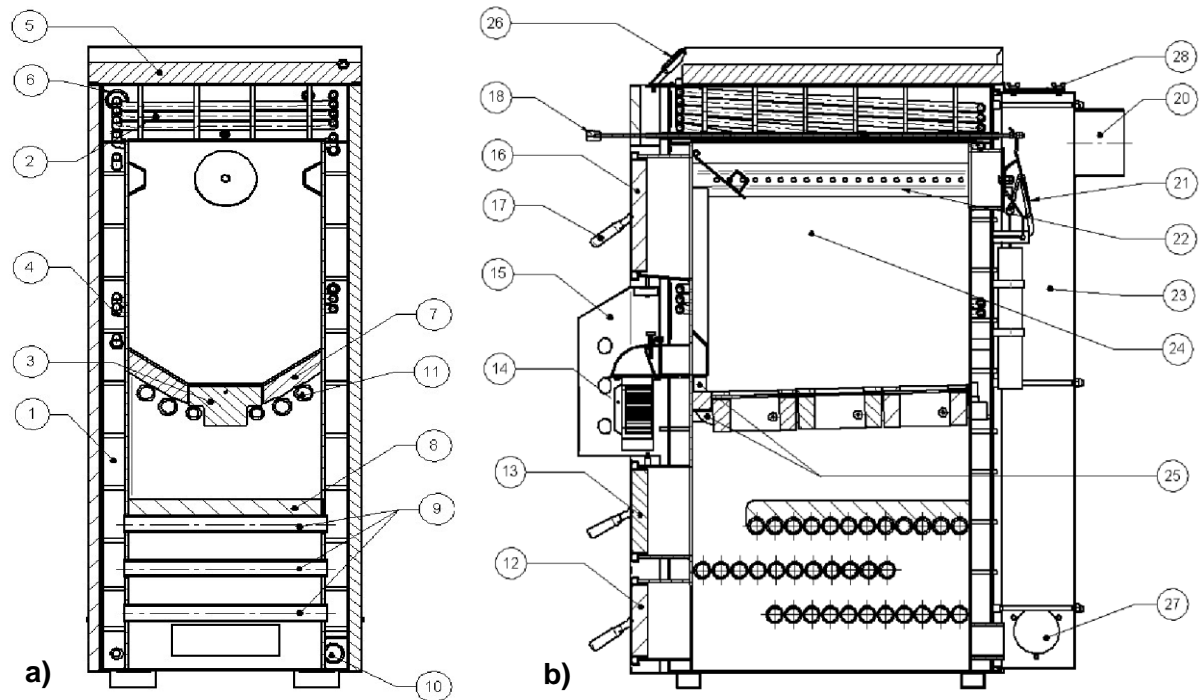
Cazanul a fost încercat experimental în cadrul laboratorului de Termoenergetică și Ingineria Mediului al Universității „Dunărea de Jos” din Galați. Experimentele au avut ca scop principal determinarea performanțelor cazanului și a gradului de poluare pe care îl implică funcționarea sa utilizând brichete fabricate din diverse materiale. În timpul acestor experimente s-au realizat diverse măsurători, iar o parte dintre acestea au fost folosite pentru aprecierea nivelului de corectitudine al rezultatelor simulării numerice.

5.1. Configurația cazanului cu flacără întoarsă

5.1.1. Structura cazanului, funcționare, caracteristici

Tab.5.1: Principalele caracteristici ale cazanului TERMOFARC FI-GS 40 (sursa: [13])

Conținut de apă în cazan	[l]	158
Temperatura maximă de lucru	[°C]	95
Putere electrică consumată	[W]	80
Presiunea maximă de lucru	[bar]	2
Volum magazie de combustibil	[l]	180
Timp de ardere continuă la puterea nominală	[ore]	3
Lățime cazan	[mm]	600
Înălțime cazan	[mm]	1520
Lungime cazan	[mm]	1210
Greutate	[kg]	408



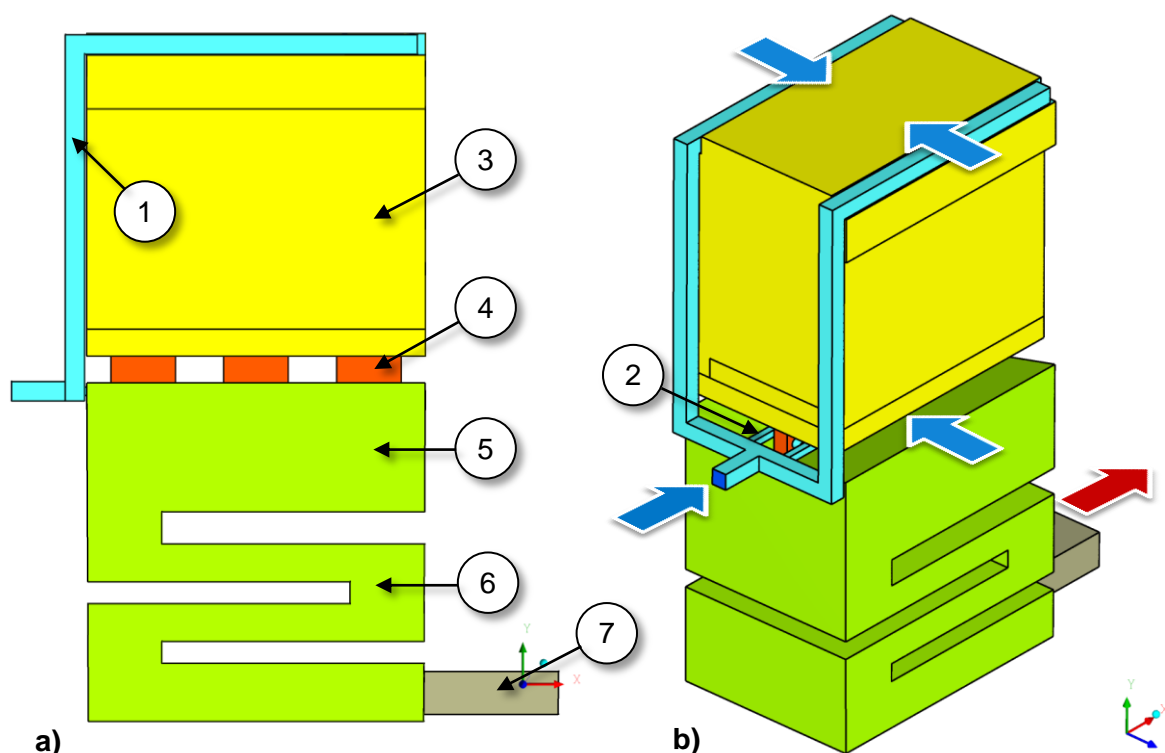
- | | |
|--|--|
| 1. Cameră apă | 15. Apărător ventilator |
| 2. Serpentină de preparare a apei calde menajere | 16. Ușa magazie combustibil |
| 3. Duză de ardere | 17. Mâner ușă termoizolant |
| 4. Serpentină de răcire | 18. Tijă mâner – acționare clapetă aprindere |
| 5. Izolație de vată minerală | 19. Conductă by-pass |
| 6. Racord tur | 20. Racord coș |
| 7. Placă de beton refractar | 21. Ansamblu clapetă |
| 8. Șamotă – ecran termic | 22. Conducte distribuție aer primar |
| 9. Sistemul convectiv | 23. Colector fum |
| 10. Racord retur | 24. Magazia de combustibil |
| 11. Țevi orizontale (de susținere placă) | 25. Rampă aer secundar |
| 12. Ușa curățare inferioară | 26. Panou de comandă și control |
| 13. Ușa cameră de ardere | 27. Capac curățare laterală |
| 14. Ventilator centrifugal | 28. Capac curățare superioară |

Fig.5.2: Structura cazanului TERMOFARC FI-GS 40: vedere din față (a) și din lateral (b) (sursa: [13])

5.2. Modelul numeric al cazanului

5.2.1. Modelarea incintelor cazanului

După cum se observă în Figura 5.4, modelul CAD al geometriei cazanului este mult simplificat față de geometria reală. Elementele păstrate sunt relevante strict pentru problema arderii, în ipoteza neglijării transferului termic către exterior. Chiar și în această configurație, modelul cazanului s-a dovedit a fi o adevărată provocare pentru realizarea efectivă a calculelor numerice, singura soluție disponibilă la acest moment fiind reducerea dimensiunii modelului prin micșorarea numărului de volume de control, respectiv a numărului de celule al grilei de discretizare.



1. Canalizație pentru aer primar
2. Canalizație pentru aer secundar
3. Camera de ardere primară
4. Duze de trecere a gazelor în camera secundară
5. Camera de ardere secundară
6. Șicane sistem convectiv
7. Evacuarea gazelor de ardere

Fig.5.4: Modelul CAD al cazanului utilizat în etapa de preprocesare a modelului numeric CFD (vedere laterală (a), vedere izometrică (b))

Tab.5.4: Dimensiunile zonelor grilei de discretizare

Domeniu	Noduri	Celule
Canalizație aer	127.796	109.168
Combustibil	207.284	192.640
Cameră primară	596.488	660.775
Cameră secundară	274.672	251.641
TOTAL	1.206.240	1.214.224

După cum se poate vedea în Figura 5.5, discretizarea domeniului de calcul a fost realizată cu o deosebită atenție, toate eforturile fiind depuse pentru a obține o grilă cu o distribuție a nodurilor cât mai apropiată de ideal, concentrând densitatea acestora în zonele de interes. Discretizarea finală este complet conformă, iar gradul de deformare al volumelor de control este redus la minimum posibil, valoarea deformației standard fiind max. = 0,446, med. = 0,0496.

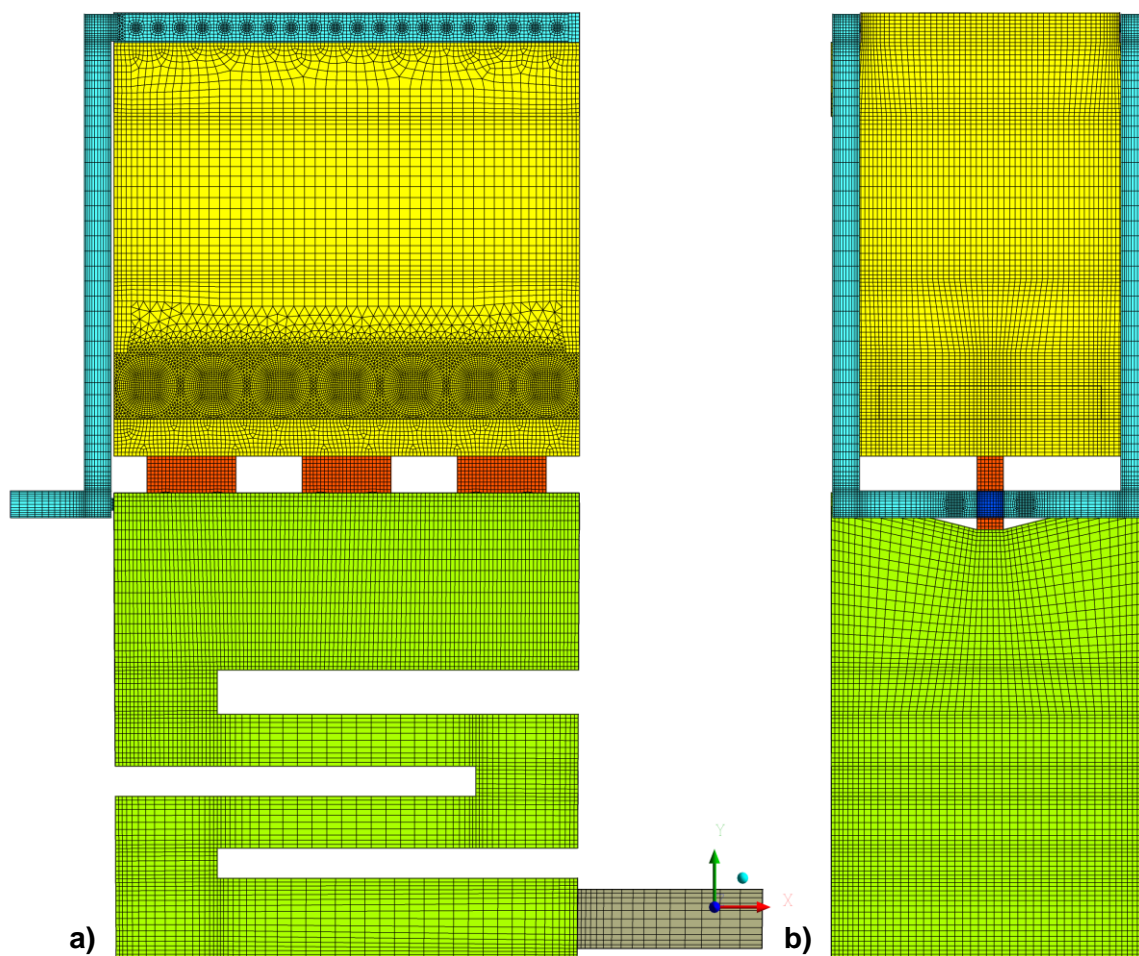


Fig.5.5: Discretizarea domeniului de calcul: vedere laterală (a), vedere din față (b)

5.2.3. Modelarea biomasei

Brichetele au fost modelate sub forma unor cilindri cu diametrul de 70 [mm] și lungimea de 320 [mm]. Așezate transversal, cele șapte brichete au fost distribuite uniform pe adâncimea camerei de ardere primare. La o densitate medie de 747 [kg/m³], masa totală de combustibil brut a fost de 6,44 [kg]. Compoziția echivalentă a combustibilului, raportată la masa umedă, este următoarea: CL = 0,398, HCL = 0,267, LG = 0,194, cenușă = 0,070, apă = 0,072. Tipul de lignină considerat este un amestec proporțional de LG-HW și LG-G (pentru detalii a se vedea Tabelul 2.10).

5.4. Rezultatele simulării numerice a procesului de combustie

În cele ce urmează se vor prezenta câteva rezultate numerice selectate din totalul celor generate în timpul simulării cazanului. Din cele 20 minute de funcționare simulate, primele 10 minute au constituit etapa de aprindere a masei de combustibil și stabilizarea arderii, urmată de modificarea debitului de aer de combustie (reducerea la jumătate) și rularea următoarelor 10 minute de funcționare. Parametrii operaționali ai cazanului în cele două regimuri de alimentare cu aer sunt foarte diferiți, după cum arată rezultatele numerice, debitul de aer dovedindu-se factorul critic pentru această problemă.

5.4.1. Rezultate numerice

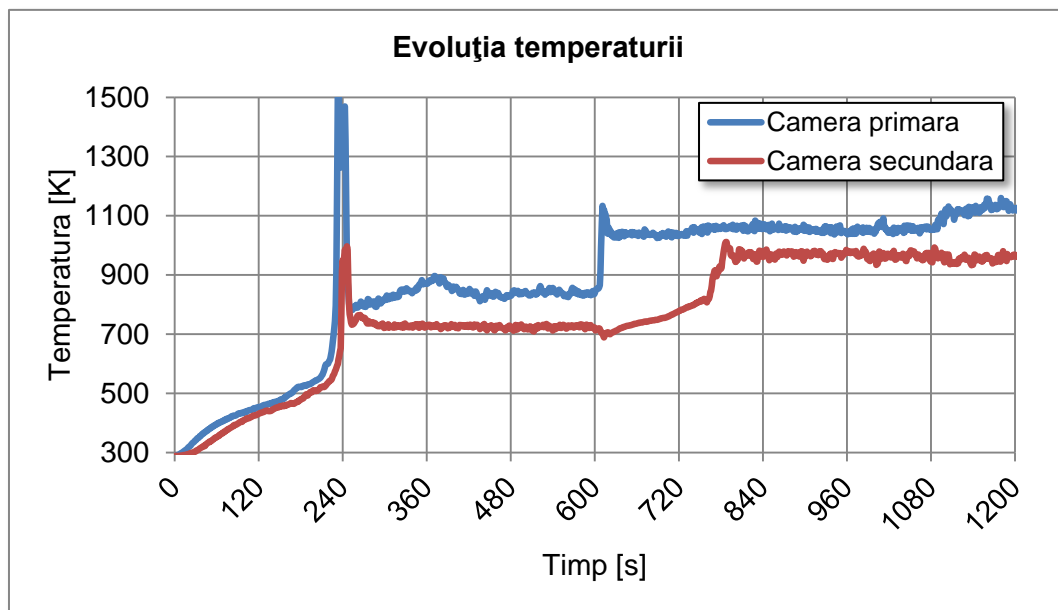


Fig.5.11: Evoluția în timp a temperaturii în punctele de măsurare

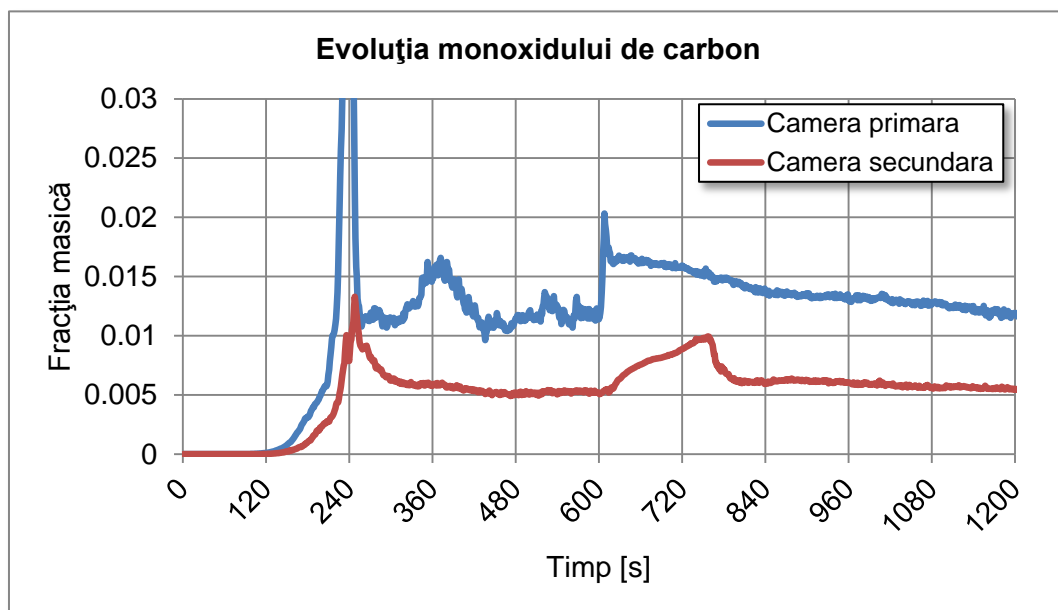


Fig.5.12: Evoluția în timp a concentrației monoxidului de carbon în punctele de măsurare

În continuare, se prezintă în Figurile 5.12–5.21 diverse mărimi determinate în timpul simulării, pe baza cărora se pot aprecia comparativ caracteristicile procesului de ardere, între debitul de referință pentru aerul de combustie de 0,04 [kg/s] și debitul redus de 0,02 [kg/s]. Pentru majoritatea cazurilor, cu excepția intensității radiației, s-a utilizat aceeași scară de valori în ambele situații, în scopul ușurării identificării diferențelor. În toate figurile, mărimea reprezentată și unitatea de măsură sunt afișate împreună cu scara de valori. De asemenea, este foarte important de reținut faptul că în majoritatea figurilor, exceptând intensitatea radiației și fracția masică de oxigen, scara de valori nu reprezintă valorile maxime și/sau minime pentru variabila afișată! Limitele scârilor sunt alese astfel încât informația conținută în imagini să fie cât mai clar comunicată.

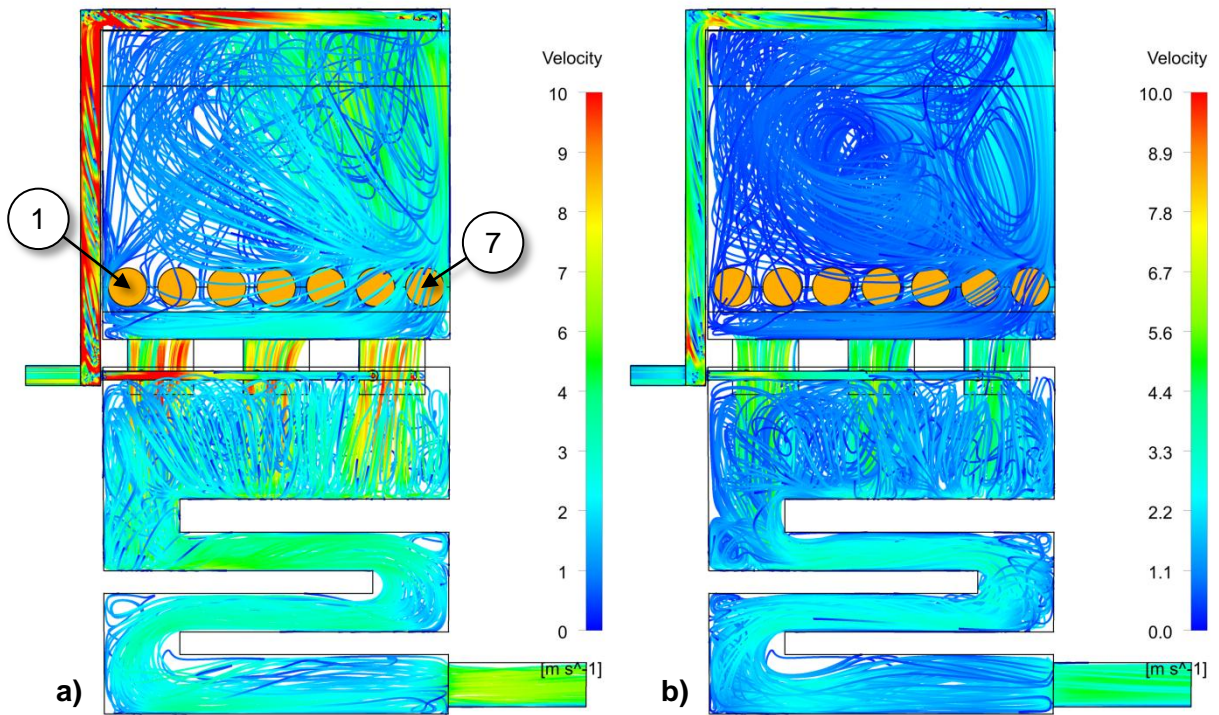


Fig.5.14: Linii de curent colorate după viteza locală, la debit de aer = 100 [%] (a) și la debit de aer = 50 [%] (b) (în fig. sunt marcate bricheta nr.1 și bricheta nr.7)

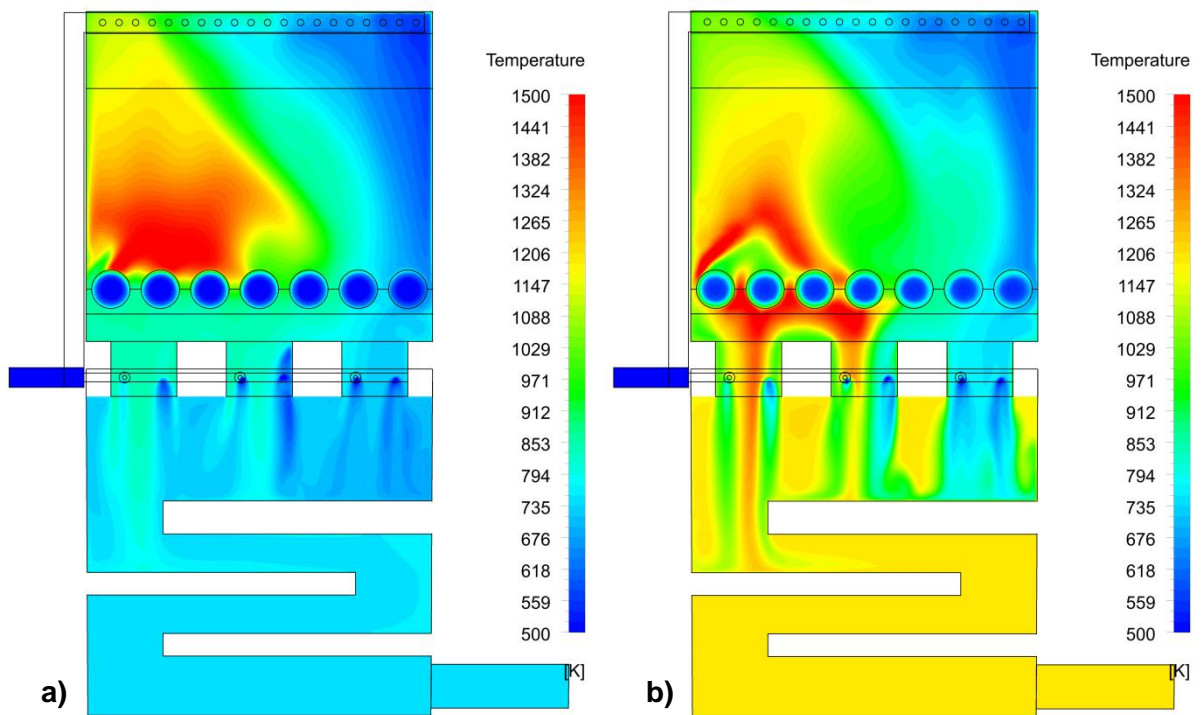


Fig.5.17: Distribuția temperaturii în secțiunea longitudinală mediană, la debit de aer = 100 [%] (a) și la debit de aer = 50 [%] (b)

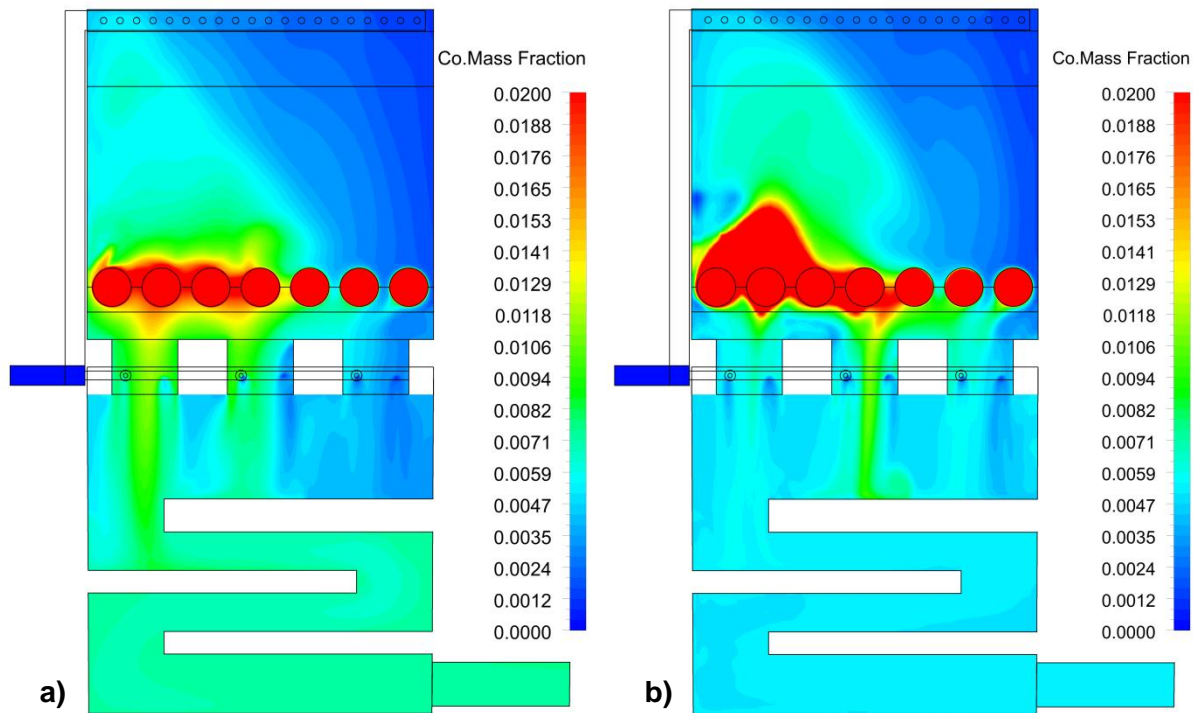


Fig.5.19: Distribuția CO în secțiunea longitudinală mediană, la debit de aer = 100 [%] (a) și la debit de aer = 50 [%] (b)

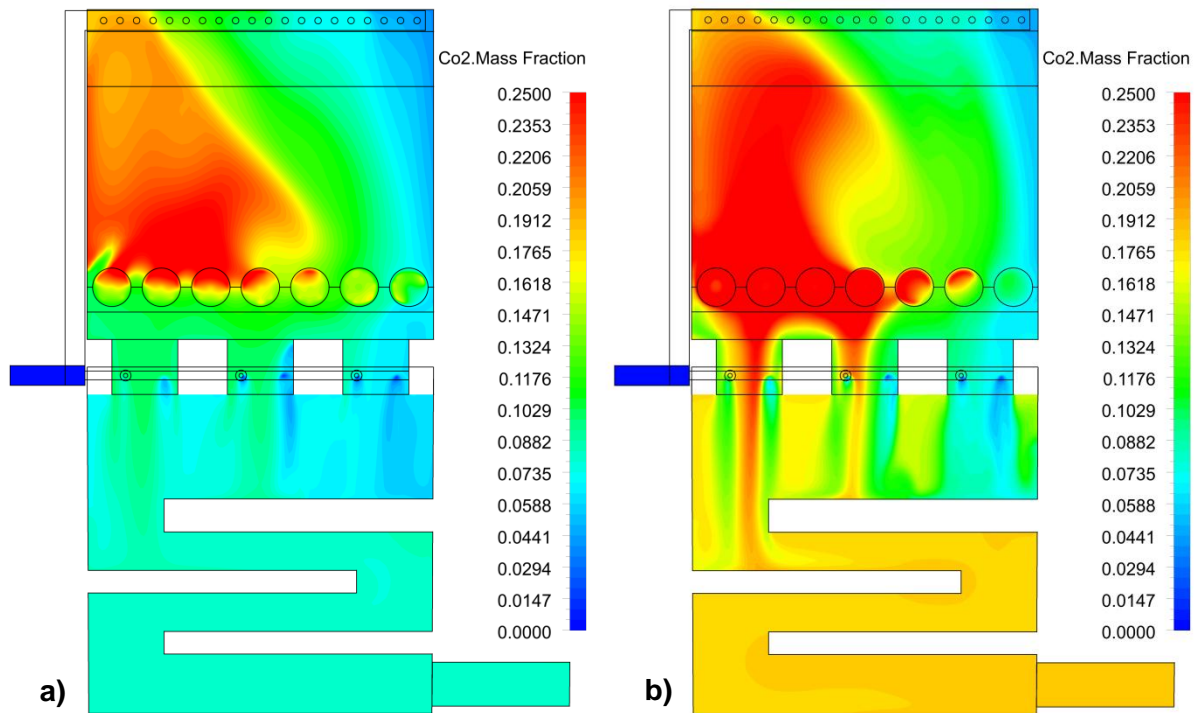


Fig.5.20: Distribuția CO₂ în secțiunea longitudinală mediană, la debit de aer = 100 [%] (a) și la debit de aer = 50 [%] (b)

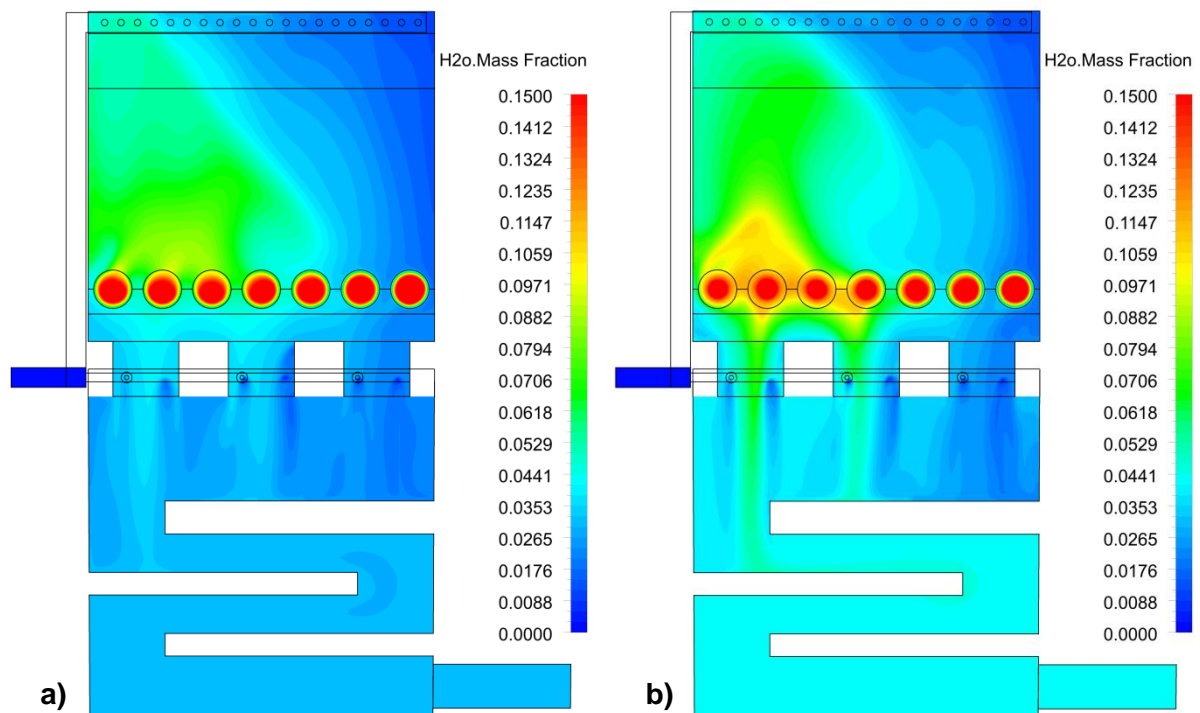


Fig.5.21: Distribuția H_2O în secțiunea longitudinală mediană, la debit de aer = 100 [%] (a) și la debit de aer = 50 [%] (b)

Discuția rezultatelor numerice

Una dintre primele caracteristici care iese în evidență pentru ambele valori ale debitului de aer este distorsionarea curgerii în camera de ardere primară. Efectul acestuia se poate observa în aproape toate imaginile. Topologia curgerii este determinată de modul în care aerul primar de combustie este introdus în camera de ardere superioară și constă în formarea unei coloane de aer proaspăt care coboară din planul celor 40 de duze de aer aflate la capătul superior al camerei, în secțiunea longitudinală mediană, oblic către peretele posterior (opus ventilatorului) al camerei. De aici, coloana de aer se distribuie lateral și se întoarce către partea frontală a cazanului, sub forma unui evantai, paralel cu pereții laterali ai camerei de ardere. Reducerea debitului de aer modifică într-o oarecare măsură această topologie, însă nu esențial, forma și sensul circulației se păstrează (a se vedea Figura 5.14 (b)). Această proprietate a curgerii în camera de ardere primară are un impact major asupra modului în care are loc descompunerea șarjei de combustibil.

În primul rând, nu se poate vorbi despre gazificarea biomasei, în sensul corect al termenului. Pentru ambele debite de aer, în camera superioară are loc arderea amestecului de volatili și aer, în cazul debitului normal chiar aproape integral. Figura 5.17 (a), demonstrează faptul că, la debit normal, în camera secundară amestecul de gaze nu mai arde, temperatura gazelor rămânând la un nivel practic constant. Flacăra are temperatura maximă de cca. 1600 [K] și se formează efectiv numai deasupra primelor patru brichete (bricheta nr.1 fiind cea de lângă peretele frontal) iar amestecul arde foarte repede (ceea ce se vede și din distribuția CO, Figura 5.19 (a)), zona de temperatură mare aflându-se imediat deasupra brichetelor. Celelalte trei brichete doar se descompun mai lent sub influența temperaturii gazelor care trec prin duza nr.3 în camera secundară. Temperatura din camera secundară abia ajunge la 800 [K]. La debit redus, situația se schimbă semnificativ: amestecul de gaze format în camera primară arde doar parțial, iar arderea se continuă destul de intens în camera secundară. Totuși, și în acest caz flacăra propriu-zisă se formează doar în zona

primelor patru brichete, însă nu numai deasupra, ci și pe partea inferioară. Arderea în camera primară este mai lentă, flacăra de pe partea de sus a brichetelor este mai lungă, cu o zonă vizibil mai rece, de formă conică (ce se poate observa și în distribuția CO din Figura 5.19 (b)). Flacăra de pe partea inferioară este scurtă, și se prelungește în camera secundară prin duzele 1 și 2. Se observă efectul introducerii aerului secundar, care răcește temporar fluxul de gaze și se mai observă și funcționarea la încărcare redusă a duzei nr.3, prin care trece direct în camera secundară o parte din coloana de aer primar. Temperatura din camera secundară atinge 1200 [K].

5.4.2. Posibilități de îmbunătățire a funcționării cazanului

După cum s-a evidențiat prin rezultatele simulării numerice, curgerea în camera primară a cazanului este departe de a fi ideală. Indiferent de debit, distribuția aerului de ardere primar este defectuoasă, ceea ce favorizează arderea mai viguroasă a primelor brichete, aflate mai aproape de peretele frontal al cazanului. Brichetele plasate în partea opusă sunt expuse unui flux de gaze mai bogat în oxigen, însă mai rece, și nu ard corespunzător. Experimental, acest lucru a fost constatat prin distribuția reziduurilor de ardere, în speță a cenușii, produsă în cantitate vizibil mai mare în zona brichetelor nr. 5–7, aceasta fiind o consecință directă a temperaturilor mai scăzute de descompunere.

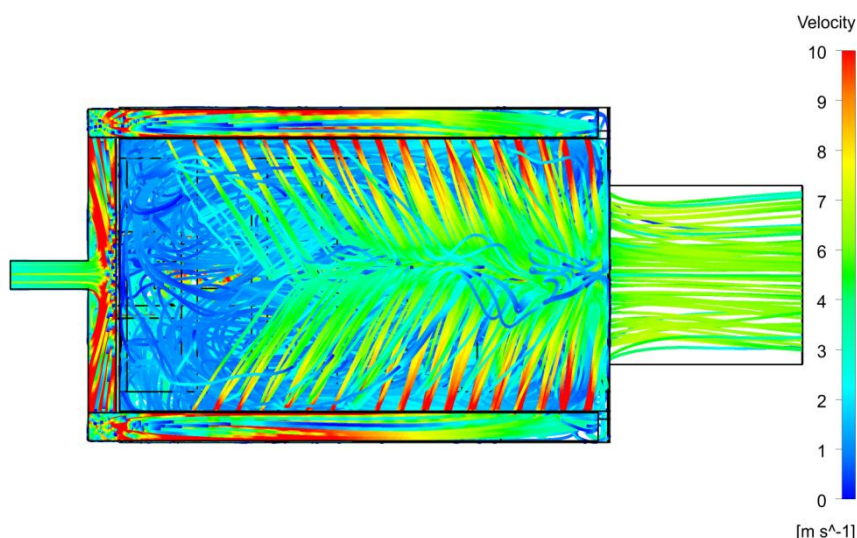


Fig.5.24: Linii de curent colorate după viteza locală, la debit de aer = 100 [%]

În Figura 5.24 se prezintă forma liniilor de curent colorate după viteza locală în vedere de deasupra, putându-se astfel observa foarte bine cauza distribuției nefavorabile a aerului primar de ardere: (1) Datorită secțiunii constante a canalizației de aducere a aerului primar la partea superioară a camerei de ardere, fluxul de aer nu este uniform distribuit pe adâncime, cantitatea de aer transferată prin primele perforații este neglijabilă, iar ultimele perforații sunt suprasolicitate; (2) Energia cinetică a aerului nu este corect redirectionată de sistemul de distribuție, rezultând o traiectorie oblică a jeturilor de aer, care favorizează deplasarea coloanei de aer către peretele posterior al camerei de ardere.

Cel puțin teoretic, această situație poate fi corectată ușor, cea mai simplă soluție constând în realizarea în primul rând a unei secțiuni variabile pe adâncime pentru porțiunea finală orizontală a canalizației, care poate fi liniară, pentru simplitate constructivă. Rafinarea acestei soluții tehnice poate include introducerea unor elemente de dirijare sub forma unor table circulare care să redirectioneze eficient fluxul de aer pe direcție normală. Printre

beneficiile colaterale ale unei asemenea îmbunătățiri se numără și reducerea pierderilor de presiune, respectiv ameliorarea funcționării ventilatorului.

5.5. Concluzii

Aplicarea modelului numeric de combustie pentru rezolvarea unei probleme cu un grad de dificultate realist, mai apropiat de practica inginerescă, este desigur o modalitate prin care se poate demonstra utilitatea efortului depus în cadrul acestui studiu. Tocmai din acest motiv, acest penultim capitol al lucrării este dedicat prezentării abordării, modelării și simulării unei asemenea probleme. Subiectul este constituit de un cazan real destinat producerii căldurii și apei calde pentru o locuință, produs în România. Același cazan a fost și obiectul unor serii de experimente realizate în cadrul laboratorului de Termoenergetică și Ingineria Mediului al Universității „Dunărea de Jos” din Galați. Experimentele au constatat în arderea unor brichete realizate din diverse combinații de biomase, dintre acestea selectându-se un caz anume, respectiv brichete compuse dintr-un amestec de rumeguș de lemn și reziduuri agricole (coceni de porumb).

Pentru studierea arderii în acest cazan s-a realizat mai întâi un model geometric simplificat, în care au fost incluse doar camerele de ardere cu duzele de trecere, sistemul convectiv al camerei secundare și canalizația de distribuție a aerului de ardere. Discretizarea domeniului de calcul a constituit o etapă laborioasă, tratată cu maximum de atenție, știut fiind faptul că de succesul acestei operații depinde în bună parte calitatea rezultatelor și optimizarea efortului de calcul. Realizarea modelului numeric al cazanului a urmat aceiași pași ca în cazul modelelor folosite pentru verificarea și validarea modelului numeric de combustie, subiectul capitolului anterior. Simularea efectivă a modelului CFD nestaționar al cazanului, chiar și în configurația simplificată, s-a dovedit dificilă, efortul de calcul fiind neașteptat de mare. Problema a fost rezolvată prin rularea simulării numerice cu ajutorul unui sistem de calcul paralel de înaltă performanță, aflat în dotarea Universității „Dunărea de Jos”.

Unii parametri experimentali au trebuit estimați, spre exemplu debitul de aer, pentru care nu există măsurători, a cărui problemă a fost rezolvată eficient, prin aplicarea unei metode iterative (problema fiind neliniară) pentru găsirea valorii corecte bazată pe evaluarea automatizată, cu o funcție externă atașată modelului numeric.

Rezultatele calculelor sunt deosebit de valoroase, prin prisma faptului că în condițiile date, aceasta este singura metodă la îndemână pentru realizarea unor cercetări amănunțite, cu un grad de detaliere a informației inaccesibil metodelor experimentale. Compararea unor mărimi calculate, de exemplu a emisiilor de monoxid sau dioxid de carbon, concentrația oxigenului în gazele de ardere, sau valorile temperaturii din camerele de ardere, cu măsurătorile experimentale, are mai mult caracter informativ, deoarece condițiile experimentale exacte nu au putut fi reproduse, din lipsa datelor necesare. La această problemă se adaugă simplificările modelului, care nu a inclus și problema transferului termic către exteriorul camerelor de ardere, ceea ce este posibil să fi avut un impact hotărâtor asupra rezultatelor numerice. Valorile obținute sunt totuși acceptabile, chiar bune în unele cazuri, ceea ce încurajează perfecționarea modelului și eventual refacerea calculelor într-un studiu viitor, în vederea evaluării corecte a capacității modelului de a estima fenomenul în ansamblul său.

În final se discută și câteva posibilități de creștere a randamentului cazanului, în principal prin ameliorarea arderii combustibilului în camera primară, care se poate obține prin distribuirea corectă a aerului de combustie, actualul sistem fiind neperformant. Se și sugerează o posibilă soluție tehnică, care nu implică modificări drastice sau costuri tehnologice cu un impact semnificativ asupra costurilor de producție.

Se poate considera că scopul propus a fost atins, respectiv confirmarea faptului că modelul numeric de combustie realizat este deja o unealtă de studiu importantă, care prin dezvoltarea și aducerea de îmbunătățiri poate deveni un adevărat instrument de proiectare pentru domeniul instalațiilor de ardere a biomasei.

6. CONCLUZII GENERALE, CONTRIBUȚII PERSONALE ȘI PERSPECTIVE

6.1. Concluzii generale

Modelarea matematică și simularea numerică a conversiei termice a biomasei a evoluat foarte mult în ultimele decenii, inclusiv datorită interesului în creștere pentru valorificarea eficientă a acestei resurse de energie regenerabilă. Deocamdată însă, limitările impuse de complexitatea deosebită a compoziției biomasei brute și, implicit, a proceselor de transformare fizice și chimice asociate descompunerii sale au impus modelarea cinetică ca unica metodă practic aplicabilă. Datorită avantajelor pe care le oferă (simplitate, robustețe, grad de generalitate), dintre schemele cinetice publicate în literatură a fost selectată schema Miller-Bellan (1997) pentru implementarea în modelul de combustie dezvoltat în cadrul acestui studiu.

Se remarcă faptul că foarte puține studii numerice au tratat și procesele ce au loc în exteriorul particulei de biomasă, în acele cazuri apelându-se la programe dedicate dinamicii fluidelor. Această metodă s-a aplicat și în studiul de față, avantajele utilizării unei cuplări bidirecționale între un model dezvoltat extern și un solver numeric CFD performant fiind evidente: pe lângă scurtarea masivă a timpului necesar implementării propriu-zise, programul CFD oferă un cadru matematic și numeric excelent pentru testarea, validarea și ulterior îmbunătățirea modelului numeric de combustie.

Modelul numeric realizat în cadrul acestui studiu este realizat dintr-o componentă statică, respectiv modelul cinetico-chimic și o componentă dinamică, ansamblul funcție de implementare (UDF) + model numeric CFD. Modelul cinetico-chimic are ca scop generarea unor funcții pentru reprezentarea numerică a tuturor mărimilor necesare în modelul dinamic, al căror unic parametru este temperatura. Caracterul de independență al reprezentării mărimilor modelului matematic conferit de aceste funcții conduce la simplificarea deosebită a implementării lor în funcția externă. Datorită diferențierii pe componente ale biomasei (celuloză, hemiceluloză, lignină) în baza ipotezei de superpoziție a efectelor, funcțiile determinate au o formă unică, invariabilă la schimbarea tipului de biomasă. Acest aspect atribuie modelului numeric o proprietate deosebit de valoroasă, respectiv posibilitatea de a reprezenta printr-o combinație a tuturor funcțiilor individuale orice tip de biomasă pentru care se cunosc fracțiile masice ale componentelor inițiale (componente principale + cenușă și umiditate) și densitatea.

Validarea modelului numeric de combustie s-a făcut utilizând rezultatele experimentale ale lui Lu (2006). Modelul numeric prezentat în această lucrare este capabil să estimeze cu precizie atât durata procesului de conversie, fie că este vorba despre piroliză sau despre combustie, cât și evoluția masei particulei și masa reziduală, însă la fel de bine poate determina temperatura de ardere, în ambele faze principale ale procesului (arderea volatilelor, urmată de arderea cărbunelui). Aceleași rezultate experimentale au fost utilizate și de alți autori, însă prin comparație, performanța globală a modelului numeric de combustie dezvoltat în cadrul acestui studiu este deosebită. Acest aspect sugerează faptul că realizarea unor modele numerice de înaltă fidelitate și precizie nu se poate face doar prin concentrarea eforturilor pe aspectele legate de transformările fizico-chimice prin care trece biomasa în timpul descompunerii termice; modelarea completă a fenomenelor de transport a căldurii și, mai ales, a masei, este cel puțin la fel de importantă.

Pentru a demonstra utilitatea efortului depus în cadrul acestui studiu, modelul numeric de combustie a fost aplicat pentru rezolvarea unei probleme cu un grad de dificultate mai apropiat de realitate, respectiv combustia biomasei într-un cazan real destinat producerii căldurii și apei calde. Același cazan a fost și obiectul unor experimente realizate în cadrul laboratorului de Termoenergetică și Ingineria Mediului al Universității „Dunărea de Jos” din Galați. Experimentele au constatat în arderea unor brichete realizate din diverse

combinații de biomase, dintre care s-a selectat pentru modelare un caz în care s-au utilizat brichete compuse dintr-un amestec de rumeguș de lemn și reziduuri agricole (coceni de porumb). Rezultatele simulării numerice sunt deosebit de valoroase, prin prisma faptului că în condițiile date, aceasta este singura metodă la îndemână pentru realizarea unor cercetări amănunțite, cu un grad de detaliere a informației inaccesibil metodelor experimentale. Condițiile experimentale exacte nu au putut fi reproduse, din lipsa datelor necesare, însă comparația cu măsurătorile efectuate a unor mărimi calculate, precum emisiile de monoxid sau dioxid de carbon, concentrația oxigenului în gazele de ardere, sau valorile temperaturii din camerele de ardere, indică faptul că modelul are potențialul necesar pentru a justifica continuarea dezvoltării și perfecționării acestuia.

6.2. Contribuții personale

- Realizarea unui model numeric de combustie a biomasei este cea mai importantă contribuție personală din cadrul acestui studiu. Din cele trei componente ale modelului, două sunt rezultatul direct al efortului depus pentru rezolvarea problemei propuse, respectiv modelul cinetico-chimic și funcția de implementare a modelului numeric de descompunere a biomasei în programul CFD.
- Crearea unui model matematic de piroliză de concepție originală care, pornind de la compoziția elementară a principalelor componente ale biomasei, generează fracțiile masice și compoziția chimică a produșilor de descompunere și proprietățile lor termodinamice, separat pentru fiecare componentă în parte, toate ca funcții doar de temperatură.
- Realizarea unei funcții de implementare a modelului de piroliză într-un program CFD, de concepție originală, prin programarea unei colecții de rutine în limbajul C, compilată sub forma unei librării dinamice externe. Aceasta funcție conține toate elementele matematice necesare modelării descompunerii termice a biomasei, inclusiv calcularea proprietăților de material ca funcții de temperatură, cracarea termică a gudroanelor și gazificarea și combustia rezidului carbonos.
- Punerea la punct a unui model CFD pentru simularea descompunerii biomasei și combustia produșilor, în care au fost implementate un mecanism de reacție simplificat pentru combustia gazelor și un model de calcul pentru coeficientul de absorbție a radiației pentru faza gazoasă. Modelul înglobează toate elementele matematice utilizate în simularea curgerii gazelor și reacțiilor chimice și modelul de mediu poros al fracției solide, cu modelele de transfer termic aferente.
- Testarea modelului numeric de combustie utilizând modele CFD simplificate pentru verificarea funcționării corecte a tuturor componentelor.
- Validarea modelului numeric de combustie prin simularea detaliată a unor cazuri experimentale și compararea datelor numerice cu valorile măsurate.
- Demonstrarea funcționalității modelului numeric de combustie prin aplicarea acestuia la modelarea și simularea nestaționară a arderii în șarjă a brichetelor de biomasă într-un cazan cu flacără întoarsă, iar ulterior compararea rezultatelor numerice cu măsurătorile experimentale. La final, s-a realizat analiza funcționării cazanului pe baza rezultatelor simulării numerice, s-au identificat problemele și s-au propus soluții tehnice pentru corectarea acestora.

În cele ce urmează sunt punctate elementele de detaliu strict originale ale acestui studiu:

- Calcularea entalpiei de piroliză pe baza unei formulări termodinamic corectă, ca diferența dintre entalpia produșilor de descompunere primară (cărbune, gaze și gudron);

- Utilizarea ecuațiilor schemei cinetice Miller-Bellan la derivarea pe baza ipotezei superpoziției efectelor a unor funcții de temperatură pentru descrierea formării produșilor primari de descompunere;
- Modelarea descompunerii independente a componentelor biomasei sub forma unui sistem de reacții chimice globale, ale cărui necunoscute au fost determinate inclusiv pe baza unor ipoteze personale;
- Utilizarea pentru cărbune a unei formule atomice calculată prin relații empirice pentru modelarea descompunerii componentelor biomasei, cărbunele fiind considerat un compus chimic conținând carbon, hidrogen și oxigen (fapt cunoscut experimental, dar ignorat în studiile numerice anterioare);
- Determinarea compoziției gazelor primare pe baza unor formule echivalente determinate pentru fiecare componentă de bază individual, urmată de calcularea unei compoziții chimice probabile la echilibru prin aplicarea principiului minimizării energiei libere Gibbs;
- Calcularea unor funcții de temperatură care să aproximeze compoziția gazelor primare pentru fiecare componentă a biomasei în parte;
- Modelarea independentă a descompunerii gudroanelor în două faze, prin cracare termică, compoziția chimică a gazelor secundare rezultate fiind determinată prin aceeași metodă utilizată anterior, urmată de (eventual) arderea gazelor secundare, ceea ce permite atât modelarea prozizei, cât și a combustiei prin același model;
- Formularea modelului de gazificare și combustie a cărbunelui, la care pe lângă reacțiile clasice s-a adăugat o alta, necesară din cauza compoziției atomice;
- Modelarea absorbției radiației în faza gazoasă printr-un coeficient care este o funcție de compoziția gazelor și de temperatură;
- Determinarea debitului de aer în cazanul simulat printr-o metodă iterativă implementată cu o funcție externă suplimentară (rutină C).

6.3. Perspective

După cum s-a arătat și pe parcursul lucrării, există încă destule particularități ale modelului numeric de combustie care mai pot fi perfecționate, dezvoltate sau chiar adăugate. Deoarece chestiunile mărunte, de detaliu, au fost menționate deja acolo unde a fost cazul, aici se va insista numai asupra posibilităților mai importante de îmbunătățire.

Una dintre principalele probleme la acest moment este lipsa de integrare, în primul rând între cele trei componente ale modelului cinetico-chimic, dar și între acest model și restul componentelor modelului global. Mai exact, este vorba despre transferul de date între componente și rularea acestora în faza de inițializare. Acestea pot fi automatizate într-un grad destul de mare, reducând intervenția utilizatorului la minimum necesar (de exemplu, introducerea datelor de intrare și alegerea unor eventuali parametri).

O altă variantă posibilă de dezvoltare viitoare este transferarea tuturor operațiilor specifice modelului cinetico-chimic într-o rutină *Matlab*TM, având în vedere faptul că utilizarea programului *Mathcad*TM la începutul studiului a fost justificată exclusiv de interfața de lucru mult mai intuitivă și de stilul de lucru cu programul, care au permis dezvoltarea rapidă a modelului. Totuși, modelul nu poate fi considerat definitiv încă, dar cu siguranță că acest aspect va putea fi luat în considerare la momentul potrivit.

Dintre cele trei obiective definite la începutul acestui studiu, obiectivul corespunzător utilizării facile a modelului a beneficiat de cea mai redusă atenție. În acest moment, aplicarea efectivă a modelului este destul de laborioasă, dar pentru a putea aduce acest aspect cel puțin la nivelul utilizării unui program CFD comercial, efortul de programare necesar este

semnificativ. Problema ușurării lucrului cu modelul va rămâne eventual ca un posibil scop al dezvoltării pe viitor a acestuia.

Implementarea unor alte scheme cinetice, eventual mai elaborate și mai bine validate, pentru creșterea gradului de generalitate al modelului, poate fi o posibilă dezvoltare. În același timp, se poate alege și calea opusă, respectiv implementarea unor scheme cinetice mai simple și reformularea modelului, cu scopul facilitării aplicării acestuia în situații care la acest moment nu sunt abordabile cu ușurință (arderea particulelor mici în număr mare, în strat, eventual chiar circulant sau fluidizat).

Validarea modelului în ceea ce privește compoziția fracțiilor volatile ar putea fi realizată în viitor, deocamdată nu sunt disponibile date în acest sens. Totuși, pentru ca modelul să devină un adevărat instrument de proiectare pentru domeniul instalațiilor de ardere a biomasei, această validare trebuie efectuată (odată cu facilitarea utilizării).

LISTA LUCRĂRILOR PUBLICATE ȘI PREZENTATE

1. **Mahu R.**, Ion V.I., Popescu F., *Testing of improved boiler for biomass briquettes*, Proceedings of the 41 international symposium on agricultural engine - Actual Tasks on Agricultural Engineering, 25 th – 28 th February 2013, Opatija, Croatia, pp. 336-342.
<http://atae.agr.hr/proceedings.htm> (ISI proceedings)
2. **Mahu R.**, Popescu F., Ion V. I., *CFD modelling of biomass combustion in a heating boiler*, Termotehnica, Supliment 1/2013, pp. 141-145.
<http://www.agir.ro/buletine/1920.pdf> (BDI)
3. **Mahu, R.**, Popescu, F., *3D CFD Modeling and Simulation of NREL Phase VI Rotor*, International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics - ICNAAM 2011 (published in AIP Conference Proceedings, September 2011, Vol.1389, pp.1520-1523, doi: 10.1063/1.3637914) ISSN: 0094-243X
<http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp/10.1063/1.3637914> (ISI Proceedings)
4. Frunzulică, F., Dumitrescu, H., **Mahu, R.**, Preotu, O., *Active and Passive Lift Force Augmentation Techniques on Wind Turbines*, International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics - ICNAAM 2011 (published in AIP Conference Proceedings, September 2011, Vol.1389, pp.1507-1510, doi: 10.1063/1.3637911) ISSN: 0094-243X <http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp/10.1063/1.3637911> (ISI Proceedings)
5. Frunzulică, F., **Mahu, R.**, Dumitrescu, H., *A numerical investigation of the stall-delay phenomenon for horizontal axis wind turbine*, 9th International Conference on Mathematical Problems in Engineering, Aerospace and Sciences: ICNPAA 2012, Vienna, Austria (published in AIP Conference Proceedings, Vol. 1493, pp. 389-394, 2012) doi:<http://dx.doi.org/10.1063/1.4765518>, ISSN: 0094-243X
<http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp/10.1063/1.4765518> (ISI Proceedings)
6. Dumitrache, Al., Frunzulică, F., Dumitrescu, H., **Mahu, R.**, *Active and passive circulation control as enhancement techniques of wind turbines performance*, 9th International Conference on Mathematical Problems in Engineering, Aerospace and Sciences: ICNPAA 2012, Vienna, Austria (published in AIP Conference Proceedings, Vol. 1493, pp. 330-337, 2012) doi:<http://dx.doi.org/10.1063/1.4765509>, ISSN: 0094-243X
<http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp/10.1063/1.4765509> (ISI Proceedings)
7. Frunzulica, F., **Mahu, R.** and Dumitrescu, H. (2012), *An Investigation of the Separate Flow and Stall-delay for Horizontal-Axis Wind Turbine*. Proc. Appl. Math. Mech., 12: 483–484. doi: 10.1002/pamm.201210230, ISSN 1617-7061
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/pamm.201210230/abstract> (ISI Proceedings)
8. **Mahu, R.**, Popescu, F., *NREL Phase VI Rotor Modeling And Simulation Using ANSYS FLUENT® 12.1*, Young Researchers Conference - YRC 2010 (published in Mathematical Modeling in Civil Engineering - Scientific Journal, Vol.7, No.1-2, pp.185-194, March 2011, ISSN 2066-6926) (BDI)
9. **Mahu R.**, Popescu F., Ion V.I., *CFD Modeling Approach for HVAC Systems Analysis*, Chemical Bulletin of “Politehnica” University of Timisoara, Volume 57(71), 2, 2012.
http://www.chemicalbulletin.ro/admin/articole/79687Chemical_Bulletin_Galati.pdf (BDI)
10. **Mahu R.**, Popescu F., Ion V.I., *Experimental approach of the turbulent separated flow*, Termotehnica, 1/2013, pp. 91-94. <http://www.agir.ro/buletine/1734.pdf> (BDI)
11. Mingireanu F., Murariu G., **Mahu R.**, Mocanu I., Georgescu L.P., *Environment monitoring through UAV technologies*, Annals of „Dunărea de Jos” University of Galați, Mathematics. Physics. Theoretical Mechanics, Fascicle II, Year III (XXXIV) 2011, No. 2, pp.300, ISSN 2067-2071 (BDI)

12. **Mahu, R.**, Popescu, F., *Applicability of 3D CFD Methods to Urban Atmospheric Pollutant Dispersion Modeling & Simulation*, ENVIRONMENTAL CAPACITY BUILDING International Conference, Bucharest 2011 (Abstract published in Proceedings of the International Conference „ENVIRONMENTAL CAPACITY BUILDING”, November 2011, pp.32-33, ISBN 978-606-8035-37-6)
13. **Mahu, R.**, Popescu, F., *Preliminary results on the numerical assessment approach using FLUENT platform*, The PhD Student Symposium, December 2011 (poster presentation) - POSDRU/107/1.5/S/76822, Project SOP HRD 107/1.5/S/76822 - TOP ACADEMIC
14. **Mahu, R.**, Popescu, F., *Studiul fenomenului de flutter aerodinamic utilizând modelarea și simularea numerică CFD*, Sesiunea Națională de Comunicări Științifice Studentești „Anghel Saligny”, Galați, 18-21 Mai 2012
15. Murariu G., **Mahu R.**, Georgescu L.P., Mocanu I., Mingireanu F., *Design and Construction of a Novel Fixed Wing UAV*, Journal of Theoretical and Applied Mechanics (JTAM), **Impact Factor 2012 = 0.452**, ISSN 1429-2955 (submitted, under revision)
<http://www.ptmts.org.pl/jtam.html>

BIBLIOGRAFIE SELECTIVĂ

- [1] REN21, "Renewables 2012: Global Status Report," 2012.
- [2] V. I. Ion și D. I. Ion, „Energie din biomasă,” *Revista Tehnica Instalațiilor, Anul VI*, vol. 7, nr. 38, pp. 14-30, 2006.
- [3] D. Mohan et al., "Pyrolysis of wood/biomass for bio-oil: A critical review," *Energy & Fuels*, vol. 20, no. 3, pp. 848-889, 2006.
- [4] R. S. Miller and J. Bellan, "A generalized biomass pyrolysis model based on superimposed cellulose, hemicellulose and lignin kinetics," *Combustion Science and Technology*, vol. 126, pp. 97-137, 1997.
- [5] C. Di Blasi, "Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 34, pp. 47-90, 2008.
- [6] S. Suhendra et al., "Mechanism of the Char Reduction Reaction in a Staged Gasification: Sensitivity of Water Gas Shift Reaction," *International Journal of Engineering & Technology*, vol. 11, no. 2, pp. 86-93, 2011.
- [7] N. Richard and H. Thunman, "General equations for Biomass Properties," 2002.
- [8] Ansys Inc., "ANSYS 14.5 Documentation," 2013.
- [9] J. Bibrzycki and T. Poinso, "CERFACS," [Online]. Available: http://www.cerfacs.fr/~cfdbib/repository/WN_CFD_10_17.pdf.
- [10] L. Ip, "Comprehensive black liquor droplet combustion studies," PhD Thesis, Chemical Engineering, Brigham Young University, Provo, UT, US, 2005.
- [11] P. Sannigrahi and A. J. Ragauskas, "Poplar as a feedstock for biofuels: A review of compositional characteristics," *Biofuels, Bioprod, Bioref.*, vol. 4, pp. 209-226, 2010.
- [12] H. Lu, "Experimental and Modeling Investigations of Biomass Particle Combustion," PhD Thesis, Brigham Young University, Provo, UT, US, 2006.
- [13] S.C. Termofarc S.R.L., „Cazane cu gazeificare "FI-GS". Instrucțiuni de montaj, întreținere și exploatare,” Săcele, BV, RO, 2013.