

ROMÂNIA MINISTERUL EDUCAȚIEI, CERCETĂRII ȘI TINERETULUI UNIVERSITATEA "DUNĂREA DE JOS" DIN GALAȚI FACULTATEA DE MECANICĂ

Modelarea arderii brichetelor din reziduuri agricole într-un cazan cu gazeificare

TEZĂ DE DOCTORAT REZUMAT

Îndrumător științific, Prof. Dr. Ing. Florin POPESCU

> Doctorand, Gina-GeorgianaROLEA

2<u>.8</u> 58







Galați, 2011





ROMÂNIA MINISTERUL EDUCAȚIEI, CERCETĂRII, TINERETULUI ȘI SPORTULUI UNIVERSITATEA DUNĂREA DE JOS DIN GALAȚI

Strada	Domnească nr. 47, cod postal 800008
Galați,	Románia
E-mail:	rectorat@ugal.ro

11 39.842



Tel.: (+4) 0336-130.109; 0336-130.108; 336-130.104 Fax: (+4) 0236 - 461.353 www.ugal.ro

C 12310/22 11 2011

Către

Universitatea " Dunărea de Jos " din Galați vă face cunoscut că în data de <u>16.12.2011</u>, ora<u>12.00</u>, în <u>sala</u> <u>G102 a Facultății de Mecanică</u>, va avea loc susținerea publică a tezei de doctorat intitulată: <u>"STUDII PRIVIND</u> <u>CRESTEREA EFICIENTEI UTILIZĂRII ENERGIEI SOLARE"</u>, elaborată de domnul/doamna <u>ing. TEODORU</u> <u>ALEXANDRINA</u>, în vederea conferirii titului științific de doctor în Domeniul de doctorat - <u>Inginerie mecanică</u>. Comisia de doctorat are urmatoarea componență :

Presedinte:	<u>Prof.univ.dr.ing. Elena SCUTELNICU</u> Universitatea "Dunărea de Jos" din Galați
<u>Conducător</u> de doctorat:	<u>Prof.univ.dr.ing. Tănase PANAIT</u> Universitatea "Dunărea de Jos" din Galați
Referent 1:	<u>Prof.univ.dr.ing. Jorge MARTINS</u> Universidade do Minho, Portugal
Referent 2:	<u>Prof.univ.dr.ing. Gheorghe POPESCU</u> Universitatea POLITEHNICA București
Referent 3:	<u>Conf.univ.dr.ing. Krisztina UZUNEANU</u> Universitatea "Dunărea de Jos" din Galați

Cu această ocazie vă transmitem rezumatul tezei de doctorat și vă invităm să participați la susținerea publică. În cazul în care doriți să faceți eventuale aprecieri sau observații asupra conținutului lucrării, vă rugăm să le transmiteți în scris pe adresa Universității, str. Domnească nr. 47, 800008 - Galați, Fax - 0236 / 461353.



Cuprins
Introducere4
Capitolul I Arderea biomasei
Capitolul II Stadiul actual al cercetărilor privind modelarea numerică a procesului de ardere7
Capitolul III Prezentarea instalației de ardere experimentale
3.1. Caracteristicile cazanului
Capitolul IV Modelarea volatilizării biomasei
4.1. Descrierea modelului 11 4.2. Algoritmul de calcul 12 4.3. Rezultate simulare numerică 13 4.4. Validarea modelului 17 4.5. Concluzii 17
Capitolul V Estimarea compoziției gazului de gazeificare folosind un model de echilibru
5.1. Descrierea modelului. 18 5.2. Algoritmul de calcul. 21 5.3. Validarea modelului 22 5.4. Efectul temperaturii asupra compoziției gazului de gazeificare. 24 5.5. Compoziția gazului rezultat din gazeificarea diferitelor tipuri de biomasă. 24 5.6. Concluzii. 27
Capitolul VI Modelarea numerică a arderii volatilelor
6.1.Etapele simulării. 27 6.2. Definirea și discretizarea domeniului de calcul. 27 6.3. Modelarea fizică. 29 6.4. Condiții la limită. 30 6.5.Simularea numerică. 31 6.6. Analiza rezultatelor simulării. 31
Capitolul VII Concluzii și contribuții personale
Bibliografie
Lista completă a lucrărilor elaborate și/sau publicate40
Curriculum Vitae

Introducere

Nevoia urgentă de combustibili verde și sustenabil a împins cercetările în domeniul biomasei ca o alternativă la combustibilii fosili. România are un potențial ridicat de biomasă atât în ce privesc reziduurile lemnoase cât și reziduurile agricole. Creșterea prețurilor combustibililor fosili, taxele de poluare precum și subvențiile acordate de guvern pentru biocombustibili așează biocombustibilii pe picior egal cu combustibilii convenționali.

Biomasa poate satisface diferite nevoi energetice precum generarea de electricitate, încălzirea locuințelor și producerea de căldură pentru procesele industriale. Biomasa poate fi utilizată în diferite moduri:

arderea directă pentru a produce căldură sau electricitate;

- gazeificarea pentru a produce gaz combustibil ce poate fi folosit într-o instalație cu turbină cu gaze cu ciclu combinat;

piroliza pentru a produce ulei de piroliză și diferite produse chimice;

conversia termochimică pentru obținerea de combustibili pentru transport ca etanolul, metanolul şi combustibili Fischer-Tropsch.

Dintre toate aceste utilizări, cea mai răspândită este arderea pentru producerea de căldură și electricitate.

Pentru ca biomasa să atingă potențialul ei ca resursă de energie sunt necesare cercetări extinse pe întregul lanț al producerii de energie.

Cercetările legate de arderea cărbunelui au atins maturitatea în sensul că există o mulțime de modele ce descriu procesele de volatilizarea și oxidare a cărbunelui și programe de modelare numerică care permit analizarea performanțelo cazanelor cu cărbune. Aceste modele nu pot fi aplicate direct în modelarea arderii biomasei deoarece biomasa este diferită de cărbune în ceea ce privește proprietățile fizice și cele de ardere. Toate aceste diferențe majore ale proprietăților fac foarte diferit comportamentul arderii biomasei de cel al cărbunelui și de aceea este necesară continuarea cercetărilor.

Pentru creșterea eficienței termice și reducerea emisiilor poluante datorate arderii incomplete este necesară înțelegerea caracteristicilor arderii biomasei.

Modelarea și simularea numerică completează în mod sinergetic experimentele și reprezintă o abordare cu costuri reduse în proiectare, permițând optimizarea arderii biomasei în instalațiile pentru producerea de căldură sau electricitate. Există diferite tipuri de instrumente de modelare, de la cele mai simple modele de bilanț termic și masic la instrumentele CFD (Computational Fluid Dynamics) avansate. Modelarea ne ajută să înțelegem procesele fundamentale ce au loc la arderea biomasei și poate reduce substanțial timpul necesar pentru optimizarea proiectării. Prin combinarea modelării cu experimentele se îmbunătățește proiectarea în ceea ce privește reducerea emisiilor poluante provenite atât de la arderea incompletă cât și de la arderea completă. Prin studiu parametric se determină influența relativă a diferitelor variabile ale procesului de ardere asupra emisiilor poluante și eficienței energetice. Aceasta permite luarea deciziilor corecte în proiectarea optimală și exploatarea corectă a instalațiilor de ardere a biomasei.

Cele mai avansate instrumente de modelare, instrumentele CFD, au, de regulă, un grad mare de complexitate și timpul necesar calculelor atunci când se iau în considerare toate fenomenele care intervin într-un proces de ardere (curgerea turbulentă, transferul de căldură și cinetica chimică), poate fi foarte mare. În plus, faptul că biomasa este un combustibil solid introduce complicații suplimentare în ce privește modelarea volatilizării, gazeificării și arderii combustibilului solid. În prezent, cercetările din multe țări sunt îndreptate spre mai buna înțelegere a proceselor fundamentale ale arderii biomasei și dezvoltarea de modelare pot fi efectiv incluse în instrumentele CFD. Există deja instrumente de modelarea cineticii chimice în combinație cu reactoare chimice ideale sau flăcări ideale precum și modele CFD simplificate.

Aplicarea metodelor de modelare și simulare numerică a arderii oferă o înțelegere mai avansată a proceselor de curgere ce au loc în timpul conversiei termochimice a biomasei solide și de aceea apreciate ca un instrument puternic pentru dezvoltarea mai rapidă, mai puțin riscantă și mai precisă de noi tehnologii.

Modelarea CFD oferă posibilitatea calculării curgerii reactive și distribuției speciilor, temperaturii și timpului de rezidență precum și curgerile multifazice (gaze de ardere, particule de combustibil și cenușă zburătoare) în cazanele și focarele pe biomasă.

În prezent se fac eforturi pentru a cupla diferite modele CFD dezvoltate și de a integra cinetica reacțiilor și modelarea echilibrului în simulările CFD pentru a oferi un puternic instrument pentru simularea și vizualizarea proceselor fizice și chimice complexe și interconectate în instalațiile de conversie a biomasei.

Pe plan internațional există numeroase preocupări legate de arderea biomasei din reziduuri agricole si de modelare numerică a acestui proces.

Teza de doctorat cu titlul "Modelarea arderii brichetelor din reziduuri agricole într-un cazan cu gazeificare", vine în întâmpinarea unor probleme legate de arderea brichetelor din reziduuri agricole într-un cazan mic destinat încălzirii, cu putere mică, proiectat să funcționeze cu lemne de foc sau brichete din rumegus. La arderea biomasei în instalații mici, emisiile datorate arderii incomplete, cum ar fi compușii organici volatili (COV), monoxidul de carbon (CO) și oxizii de azot (NO_x) au tendința să crească. Scopul tezei constă în studiul proceselor de conversie a brichetelor din reziduuri agricole prin modelarea numerică a acestor procese inclusiv a procesului de ardere în cazan pentru a înțelege mai bine comportamentul biomasei în vederea creșterii performanțelor cazanului.

Cazanul pe care s-a efectuat studiul este un cazan cu gazeificare cu puterea de 40 kW. Prin separarea fazelor de volatilizare și ardere a solidului în cazanele cu gazeificare, se îmbunătățește amestecarea gazelor combustibile cu aerul secundar de ardere, conducând la o ardere cât mai completă și implicit la reducerea emisiilor datorate arderii incomplete.

Lucrarea cuprinde cercetările pe care le-am efectuat în cadrul Departamentului de Sisteme Termice și Ingineria Mediului de la Facultatea de Mecanică a Universității "Dunărea de Jos din Galați" și în cadrul Departamentului TERM din cadrul Université Catholique de Louvain, Belgia.

Cercetările au pornit de la rezultatele obținute în studiul experimental al arderii reziduurilor agricole sub formă de brichete într-un cazan cu gazeificare, cu puterea de 40kW, destinat încălzirii. Combustibilii utilizați au fost brichetele obținute din amestecuri de reziduuri agricole (paie de grâu, numeras, sur, coceni etc.) în diferite proporții.

Cercetarile experimentale anterioare realizate de ing. Gheorghe Ciocea au avut drept scop evidenterea influenței diferițiilor parametri asupra performanțelor arderii biomasei (emisii poluante și eficienții termică), efectuarea unor analize fizico-chimice asupra eșantioanelor de combustibili în terene concercaria cestora.

Sudial actual are ca obiectiv continuarea cercetărilor anterioare prin abordarea unei modelări numerice a procesului de ardere prin gazeificare și respectiv validarea rezultatelor numerice cu rezultatele esperimentale obținute anterior pe cazanul cu gazeificare de 40kW.

Terre a considerat că arderea cuprinde următoarele etape: considerat că arderea cuprinde următoarele etape: considerat că arderea gazului generat din gazificarea mangalului. În acest sens au terre de la volatilizării biomasei și un model al gazeificării. Pentru fiecare model a terre de calcul pentru determinarea compoziției volatilelor și respectiv a Rezultatele modelării volatilizării furnizează datele de intrare pentru terre de calcul de ardere a volatilelor în cazanul cu gazeificare.

superior de superi

Senderes numerica a procesului de ardere a volatilelor a fost realizată cu ajutorul unui

Larren de fiel este structurată în sapte capitole.

 tipuri de instalații de ardere a biomasei precum și o analiză a etapelor modelării numerice în mecanica fluidelor.

Capitolul II "Stadiul actual al cercetărilor privind modelarea numerică a procesului de ardere", prezintă o sinteză a stadiului actual al cercetărilor la nivel mondial privind modelarea proceselor de volatilizare-piroliză, gazeificare și de ardere.

În capitolul III "**Prezentarea instalației de ardere experimentale**" este descris cazanul Termofarc FI GS 40 pe care s-a efectuat studiul. Acest capitol mai cuprinde, de asemenea, caracterizarea și calculul formulei chimice a combustibililor biomasici utilizați. Pentru determinarea formulei chimice a biomasei în funcție de analiza elementală a biomasei a fost realizat un program propriu de calcul.

Capitolul IV "Modelarea volatilizării biomasei" prezintă un model matematic de calcul a compoziției volatilelor utilizând formula chimică a biomasei determinată din analiza elementală a biomasei. Pornind de la acest model a fost dezvoltat un algoritm de calcul precum și un program în Matlab care a permis determinarea concentrațiilor gazelor volatile pentru brichetele din reziduuri agricole. Rezultatele obținute în urma rulării programului de calcul au fost validate cu rezultate din literatură.

În capitolul V "Estimarea compoziției gazului de gazeificare folosind un model de echilibru" este descris modelul dezvoltat pentru calculul compoziției gazului rezultat prin gazeificare utilizând modelul de echilibru chimic. Pornind de la acest model a fost dezvoltat un algoritm de calcul precum și un program în Matlab care a permis determinarea concentrațiilor gazelor rezultate prin gazeificare a brichetelor din reziduuri agricole. Modelul de calcul a fost validat cu date din literatură.

Este cunoscut faptul că pentru modelarea numerică a arderii unui amestec de gaze combustibile cu un program de genul Ansys CFD (Fluent) este necesară cunoașterea compoziției gazului combustibil.

Dificultatea întâmpinată în utilizarea Ansys CFD, precum și a altor programe de modelare numerică comerciale constă în aceea că acestea nu oferă și posibilitatea calculării compoziției gazelor rezultate din procesele de volatilizare și gazeificare a biomasei sau cărbunelui. Aceste compoziții trebuie calculate anterior, constituind date de intrare în modelarea arderii gazelor volatile.

Modelele și programele de calcul dezvoltate în capitolele 4 și 5 pot fi integrate sub formă de UDF (funcții definite de utilizator) în programele de modelare numerică a arderii în cazane cu biomasa.

Capitolul VI "Modelarea numerică a arderii volatilelor", cuprinde etapele modelării numerice a procesului de ardere a volatilelor: crearea geometriei, discretizarea rețelei, definirea modelelor matematice, stabilirea condițiilor pe frontieră, rezolvarea numerică a problemei de ardere şi postprocesarea rezultatelor.

În capitolul VII "Concluzii și contribuții personale" sunt prezentate concluziile finale precum și contribuțiile aduse în prezenta teză și anume conceperea unui model pentru gazeificarea biomasei, a unui model pentru volatilizarea biomasei, conceperea programelor pentru simularea numerică a volatilizării și gazeificării și modelarea numerică a arderii biomasei utilizând Ansys CFD. Dezvoltarea acestor modele și programe a fost determinată de complexitatea procesului de ardere cu gazeificare a biomasei și de faptul că trebuie cunoscute compoziția gazelor volatile sau a gazelor produse prin gazeificare pentru a putea simula procesul de ardere.

Efectuarea acestor calcule numerice oferă un suport cercetării experimentale printr-o mai bună observare a anumitor procese și a evoluției anumitor mărimi care experimental nu pot fi vizibile sau nu au putut fi determinate.

Capitolul I

Arderea bioamasei

Acest capitol face o trecere în revistă a noțiunilor care stau la baza acestui studiu. Este prezentată biomasa ca și combustibil și motivul pentru care acest combustibil prezintă interes, urmată de o descriere a proceselor care au loc într-un cazan: procesul volatilizare-piroliză, procesul de ardere a volatilelor și procesul de gazeificare.



Figura 1.1. Conversia termică a biomasei [59].

În acest capitol mai sunt prezentate principalele tipuri de instalații de ardere a biomasei precum și o analiză a etapelor modelării numerice în mecanica fluidelor.

Capitolul II

Stadiul actual al cercetarilor privind modelarea numerică a procesului de ardere

Prezintă o sinteză a stadiului actual al cercetărilor la nivel mondial privind modelarea procession de volatilizare-piroliză, gazeificare și de ardere.

Pe baza informațiilor culese din literatură au fost stabilite următoarele direcții de cercetare:

- Modelarea și simularea numerică a procesului de ardere a volatilelor;
- Modelarea și simularea numerică a procesului de ardere cu gazeificare ;

Durarità complexității problemei de ardere și a faptului că programul de simulare namerica Ansys CFD are nevoie de implementarea unor funcții definite de utilizator pentru a cabili anumile proprietăți ale combustibilului (compoziția gazelor) au fost impuse

- describeres unui model pentru calculul volatilelor (cap. IV) care a fost integrat în cazul
- desentarea guzzi ficării ca un proces termodinamic, pentru a determina compoziția gazelor de guzzi rezultate în urma gazeificării, utilizând un model de echilibru (cap.V).

Capitolul III

Prezentarea instalației experimentale

3.1. Caracteristicile cazanului

Cazanul utilizat în acest studiu este un cazan cu gazeificare modelul TERMOFARC FI-GS 40, cu puterea de 40 kW (Figura 3.1). Cazanele cu gazeificare sunt cele mai recente inovații în domeniul arderii biomasei. Introducerea acestui tip de cazane a fost necesară din cauza limitelor stricte ale emisiilor de poluanți impuse de unele țări. Costurile investițiilor la acest tip de cazan față de cazanele simple cu ardere normală cresc cu aproximativ 50%. Separarea fazelor de volatilizare și de ardere a reziduului carbonos conduce la o îmbunătățire a amestecării gazului combustibil cu aerul secundar rezultând temperaturi de ardere mai mari și emisii reduse provocate de arderea incompletă.

Cazanul cu gazeificare FI-GS 40 a fost construit să folosească lemnele și brichetele de biomasă. Acest cazan este prevăzut cu un ventilator de aer care asigură alimentarea cu aer de ardere și care ajută și la evacuarea gazelor de ardere (Figura 3.2). Aerul introdus de ventilator este dirijat prin două canale de aer către cele două camere de ardere ale cazanului. Cazanul are două camere de ardere despărțite de o placă de beton refractar prevăzută cu duze de ardere. Camera superioară are rol de magazie de combustibil și camera de gazeificare, iar cea inferioară are rol de cameră de ardere principală unde are loc arderea propriu-zisă a gazului rezultat. Este echipat cu două schimbătoare de căldură: o serpentină pentru producerea de apă caldă menajeră și încălzire și o serpentină de răcire (protecție la supraîncălzire). Ușile cazanului, permit alimentarea cu biomasă (în partea superioară), și evacuarea cenușii și curățarea focarului (în partea inferioară) și a drumurilor convective (în mijloc).

Gazele de ardere, după cedarea căldurii, sunt adunate în colectorul de fum, aflat în partea posterioară a cazanului și sunt evacuate la cos. Placa de beton refractar în care se găsesc duzele de ardere desparte magazia de combustibil de camera de ardere secundară fiind sprijinită pe o structură de tevi. Duzele de ardere sunt poziționate în mijlocul plăcii de beton și au rolul de a susține jarul și de a permite trecerea gazului combustibil format.

Flacăra formată de duze atinge plăcile de cărămida refractară, gazele de ardere întorcându-se și în drumul lor cedând căldură la parcurgerea sistemului convectiv.



Figura 3.1. - Cazanul de gazeificare model Termofarc FI-GS 40.

3.2. Caracteristicile combustibililor utilizați

Compoziția elementală a biomasei are un efect semnificativ asupra compoziției gazului de sinteză. Eliberarea gazelor de piroliză depinde în mare măsură de raportul H/C, precum și de raportul O/C și crește atunci când aceste rapoarte cresc, în special cu creșterea raportului H/C [54]

O concentrație mai mare de oxigen în biomasă are nevoie de rapoarte echivalente mai mici din cauza oxigenului intrisec care va fi de asemenea disponibil pentru procesul de gazeificare.

Un alt factor important este conținutul de cenușă. În tabelul 3.2 sunt date conținutul de cenușă (% raportate la substanța uscată) și compoziția elementală pentru diferite reziduuri agricole.[Ciocea 26]

Combustibilii biomasici utilizați sunt brichete din reziduuri agricole (coceni, rumeguș, paie, stuf sau amestecuri ale acestora). Brichetele utilizate au înălțimea variabilă și diametrul fix d = 0.07m (figura 3.3).



Figura 3.3. Brichete din biomasă utilizate în studiu.

[Anal	iza eleme	entală			Puterea	Densitates de
Combustibilul				calorifică	energie				
	С	н	N	S	0	w	A	superioară [kJ/kg]	[GJ/m ³ _N]
1. lemne de salcâm	49,6	6,0	0,9	0,1	33,8	5,4	4,2	20798,08	14,97
2. brichete din stuf	48,4	5,5	0,6	0,0	31,2	7,0	7,3	19987,92	15,13
3. brichete din rumeguş	50,0	5,9	1,8	0,0	33,6	6,0	2,6	20850,69	15,78
4. brichete din rumeguş 50% si coceni 50%	46,1	5,5	0,4	0,0	38,0	6,7	3,3	18569,29	17,37
5. brichete din rumeguş 50% si paie 50%	48,0	5,8	0,5	0,0	36,1	5,2	4,4	19757,81	15,69
6. brichete din rumeguş 25% si coceni 75%	48,2	5,9	0,6	0,0	34,5	7,5	3,4	20130,49	14,42
7. brichete din rumeguş 25% si paie 75%	48,5	5,7	0,7	0,0	36,4	7,3	1,4	19843,79	12,94

Tabel 3.2. Analiza elementară a combustibililor biomasici solizi.

Pornind de la analiza elementală dată în tabelul 3.2 se calculează formulele chimice ale biomaselor utilizate sub forma $C_n H_a O_b N_c S_d$ utilizând următoarele relații (*n*=1):[71]

$$a = \frac{HM_{C}}{CM_{H}}, \qquad b = \frac{OM_{C}}{CM_{O}}, \qquad c = \frac{NM_{C}}{CM_{N}}, \qquad d = \frac{SM_{C}}{CM_{S}}$$

unde

- a numărul atomilor de H substituiți; n numărul atomilor de C substituiți;
- b numărul atomilor de O substituiți; c numărul atomilor de N substituiți;
- d numărul atomilor de S substituiți; M masa molară (kg/mol);
- C fracția masică de carbon; H fracția masică de hidrogen;
- O fracția masică de oxigen; N fracția masică de azot;

S- fracția masică de sulf.

Formulele chimice ale biomaselor le-am calculat pornind de la analiza elementală a combustibililor biomasici. Utilizând formulele de calcul mai sus prezentate și analiza elementară a biomasei am dezvoltat un program care calculează formula chimică a biomasei.

Formula finală a biomasei
$CH_{1,451}O_{0,51}N_{0,015}S_{0,0007}$
CH _{1,363} O _{0,48} N _{0,01} S ₀
CH _{1,416} O _{0,50} N _{0,03} S ₀
CH1,431O0,61N0,007S0
CH1,450O0,56N0,008S0
CH1,468O0,53N0,01S0
CH _{1,410} O _{0,56} N _{0,012} S ₀

Tabel 3.3. Formulele chimice ale combustibililor din reziduuri agricole.

Datele din tabelul 3.2 au fost utilizate pentru determinarea compoziției gazelor volatile și estimarea compoziției gazului de gazeificare. Modelele de calcul sunt prezentate în detaliu în capitolele 4 și 5.

Concluzii

În acest capitol este prezentata instalația de ardere cu gazeificare de putere mică (40 kW).

Studiul unei astfel de instalații a fost considerată de interes din cauza dezvoltării din ultimii ani a pieței de desfacere a acestor instalații pentru încălzirea și furnizarea de apă caldă unei locuințe.

Pentru a se putea face o analiză detaliată a procesului de ardere și optimizarea instalației prin modelare numerică este necesară cunoașterea detaliată a instalației de ardere.

Cunoașterea compoziției chimice a biomasei utilizate este de asemenea importanta în modelarea unui proces de ardere. Compoziția chimică a biomasei a fost calculată pornind de la analiza elementală.

Porozitatea stratului de combustibil a fost de asemenea calculată deoarece este importantă în procesul de modelare a arderii.

Capitolul IV

Modelarea volatilizării biomasei

4.1. Descriere model

Stratul de combustibil l-am considerat a fi un mediu poros care eliberează specii gazoase în timpul procesului de volatilizare. Fracțiile gazelor volatile sunt calculate utilizând analiza elementală a biomasei (Tabel 3.1, capitolul 3).

Pentru a determina compoziția produșilor de piroliză în funcție de temperatură, în modelarea numerică a proceselor de gazeificare și ardere a biomasei, unde procesul de piroliză este lent, am utilizat un model simplificat. Acest model simplificat combină modele și date existente în literatură.

După cum s-a precizat în capitolul 2, cantitățile de volatile și reziduu carbonos depind foarte mult de viteza de încălzire și de domeniul de temperaturi din zona de piroliză. Pentru că procesul de piroliză la arderea biomasei în cazan se desfășoară lent se poate considera cantitatea de reziduu carbonos independentă de temperatură și viteza de încălzire.

În acest model, speciile volatile sunt considerate a fi compuse din CO_2, H_2O, CO, H_2 , hidrocarburi usoare și hidrocarburi grele (gudron).[27, 107]

Am considerat formula $C_6H_{6,2}O_{0,2}$ pentru gudron așa cum sugerează Di Blasi [30].

Reziduul carbonos este considerat ca fiind carbon pur deoarece s-a observat că odată cu creșterea temperaturii, conținuturile de C și O din reziduul carbonos scad brusc [106].

Procesul de descompunere pirolitieă a biomasei poate fi reprezentat astfel:

$$CH_{2}O_{b} = n_{rc} f_{ara} c_{musa} C + n_{1}CO + n_{2}CO_{2} + n_{3}H_{2} + n_{4}H_{2}O + n_{5}CH_{4} + n_{6}C_{6}H_{6,2}O_{0,2}$$
(4.1)

unde: $C_6 H_a O_b$ - este formula chimica a biomasei uscate;

 n_{rc} - numărul de moli reziduu carbonos;

 n_i - numărul de moli ai speciilor *i* implicate în proces.

Din bilanțul elemental pentru C, H și O rezultă următoarele ecuații:

C: $6n_{biomasa} - n_{rc, fara \, cenusa} = n_1 + n_2 + n_5 + 6n_6$ (4.2)

 $H: \quad n_{biomasa} a = 2n_3 + 2n_4 + 4n_5 + 6, 2n_6 \tag{4.3}$

$$O: \quad n_{biomasa} b = n_1 + 2n_2 + n_4 + 0.2n_6 \tag{4.4}$$

În ecuațiile (4.2), (4.3), (4.4), $n_{biomasa}$ este calculată cu ajutorul conținuturilor de C, H și *O* ale biomasei și de reziduu carbonos al acestor constituenți.

Pentru a putea calcula cele șase necunoscute $n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$ mai sunt necesare trei ecuații difierale. În acest sens am considerat raporturile masice $\frac{CO}{CO_2}$ și $\frac{hidrocarburi usoare}{CO_2}$ în funcție de repertură astfel încât să corespundă datelor experimentale prezentate în lucrarea lui Thurnman, iar $\frac{ECO}{CO_2}$ l-am considerat în acest model egal cu unitatea.

Astfel avem:

$$\frac{\mathbf{I}_{COD}}{\mathbf{I}_{COD_2}} = e^{-1.845 + \frac{7.730.3}{T} - \frac{5.019.898}{T^2}}$$
(4.5)
$$\frac{\mathbf{I}_{EQD}}{\mathbf{I}_{COD_2}} = 1$$
(4.6)

$$\frac{Y_{CH_4}}{Y_{CO_2}} = 5 \cdot 10^{-16} T^{5,06}$$
(4.7)

unde: Y_i - fracția masică a speciilor i,

i - speciile volatile.

În primele trei ecuații avem cantitățile de volatile exprimate în moli, iar în ecuațiile (4.5), (4.6), (4.7) sunt aproximate prin fracția masică.

Pentru aceasta am luat în considerare următoarele relații care fac trecerea de la fracția masică la moli:

$$n_i = \frac{m_i}{M_i} \quad [kmol] \tag{4.8}$$

$$\frac{Y_{CO}}{Y_{CO_2}} = \frac{m_{CO}}{m_{CO_2}} \qquad \frac{Y_{H_2O}}{Y_{CO_2}} = \frac{m_{H_2O}}{m_{CO_2}} \qquad \frac{Y_{CH_4}}{Y_{CO_2}} = \frac{m_{CH_4}}{m_{CO_2}} \tag{4.9}$$

Din relațiile (4.8) și (4.9) rezultă:

$$n_{CO} = \frac{m_{CO}}{M_{CO}} = \frac{m_{CO}}{28} \to 28 n_{CO} = m_{CO}$$
(4.10)

$$n_{CO_2} = \frac{m_{CO_2}}{M_{CO_2}} = \frac{m_{CO}}{44} \to 44 \, n_{CO_2} = m_{CO_2} \tag{4.11}$$

$$n_{H_2O} = \frac{m_{H_2O}}{M_{H_3O}} = \frac{m_{H_2O}}{18} \to 18 \, n_{H_2O} = m_{H_2O} \tag{4.12}$$

$$n_{CH_4} = \frac{m_{CH_4}}{M_{CH_4}} = \frac{m_{CH_4}}{16} \to 16 \, n_{CH_4} = m_{CH_4} \tag{4.13}$$

Înlocuind relațiile (4.10), (4.11), (4.12) în relațiile (4.5), (4.6), (4.7), obținem:

$$\frac{28\,n_1}{44\,n_2} = e^{-1.845 + \frac{7.730}{T} - \frac{5.018}{7} \frac{9.999}{7^2}}$$
(4.15)

$$\frac{18n_4}{44n_2} = 1 \tag{4.16}$$

$$\frac{16\,n_5}{44\,n_4} = 5 \cdot 10^{-16} \cdot T^{5,06} \tag{4.17}$$

Rezolvând sistemul de ecuații format din ecuațiile (4.2), (4.3), (4.4), (4.15), (4.16) și (4.17) rezultă compoziția volatilelor la diferite temperaturi.

4.2. Algoritmul de calcul

Pentru rezolvarea sistemului liniar format din cele 6 ecuații:

$$C: 6n_{blomasa} - n_{rc, fara cemusa} = n_1 + n_2 + n_5 + 6n_6$$

$$H: n_{blomasa} a = 2n_3 + 2n_4 + 4n_5 + 6, 2n_6$$

$$O: n_{blomasa} b = n_1 + 2n_2 + n_4 + 0, 2n_6$$

$$\frac{28n_1}{44n_2} = e^{-1.845 + \frac{77.303}{T} + \frac{5.019898}{T^2}}$$

$$\frac{18n_4}{44n_2} = 1$$

$$\frac{16n_5}{44n_2} = 5 \cdot 10^{-6} \cdot T^{5,06}$$
(4.18)

s-a dezvoltat un program propriu de calcul în Matlab .

Datele de intrare sunt reprezentate de compoziția elementară a biomasei, temperatura și cantitatea de carbon fix.

Datele de ieșire reprezintă concentrația masică a volatilelor rezultate în urma procesului de piroliză pentru diverse biomase.

4.3. Rezultatele simulării numerice

În acest subcapitol am reprezentat sub formă tabelară și grafic concentrațiile gazelor volatile obținute în urma calculelor utilizând modelul prezentat anterior.

1. Lemne de salcâm

Figura 4.1 prezintă variația concentrației volatilelor în funcție de temperatură pentru lemnele de salcâm.



Figura 4.1. Concentrația de volatile în funcție de temperatură pentru lemne de salcâm.

2. Brichete din rumeguş

Figura 4.2 descrie variația diferitelor concentrații de volatile în funcție de temperatură pentru biomasa din rumeguș.



Figura 4.2. Concentrația de volatile în funcție de temperatură pentru brichete din rumeguș.

3. Brichete 50% rumeguş şi 50% paie

În figura 4.3 sunt prezentate variația concentrației volatilelor în funcție de temperatură pentru brichete din 50% rumeguș și 50% paie.



Figura 4.3. Concentrația de volatile în funcție de temperatură pentru brichete 50% rumegus și 50% paie.

4. Brichete 50% rumeguş şi 50% coceni

În figura 4.4 sunt prezentate variația concentrației volatilelor în funcție de temperatură pentru brichete din 50% rumeguș și 50% coceni.



Figura 4.4. Concentrația de volatile în funcție de temperatură pentru brichete din 50% rumeguş și 50% coceni.

5. Brichete 25% rumeguş şi 75% coceni

În figura 4.5 sunt prezentate variația concentrației de volatile în funcție de temperatură pentru brichete din 25% rumeguș și 75% coceni.



Figura 4.5. Concentrația de volatile în funcție de temperatură pentru brichete din 25% rumeguş și 75% coceni.

6. Brichete 25% rumeguş si 75% paie

În figura 4.6 sunt prezentate variația concentrației volatilelor în funcție de temperatură pentru brichete din 25% rumeguș și 75% paie.



Figura 4.6. Concentrația de volatile în funcție de temperatură pentru brichete din 25% rumeguş și 75% paie.

După cum se poate observa în figura 4.7 în jurul temperaturii de 600 K concentrațiile au valori apropiate pentru diversele biomase utilizate, iar peste 800 K concentrația de CO din volatile este mai mare pentru brichetele formate din 50% rumeguş și 50% coceni. Diferențele de concentrație între celelalte trei tipuri de biomase sunt nesemnificative.



Figura 4.7. Evoluția concentrației de CO din volatile cu temperatura.

In tabelul 4.8 este prezentată evoluția concentrației de CO_2 din volatile pentru diferite temperaturi. Am observat că în jurul temperaturii de 600K (fig.4.10) concentrațiile de CO_2 au valori ridicate pentru toste biomasele utilizate, iar peste 800K se concentrația de CO_2 din volatile scade. Totasi pentru brichetele formate din amestec 50% rumeguş și 50% coceni, concentrația de CO_2 este mai mare comparativ cu celelalte biomase.



Figura 4.8. Evoluția concentrației de CO2 din volatile cu temperatura.

În tabelul 4.9 este prezentată evoluția concentraților de H_2 din volatile pentru diferite temperaturi. În urma calculelor s-a observat că concentrațiile de H_2 sunt mai mari pentru biomasele 50% rumeguș și 50% paie și respectiv 25% rumeguș și 75% paie. Pentru brichetele formate din amestec 50% rumeguș și 50% coceni concentrația de H_2 este mult mai mică comparativ cu celelalte biomase.



Figura 4.9. Variația concentrației de H2 din volatile cu temperatura.



Figura 4.10. Variația concentrației de CH4 din volatile cu temperatura.

Pentru brichete 50% rumegus și 50% coceni concentrațiile de CO, CO_2 și CH_4 în volatile sunt mai mari în comparație cu celelalte trei tipuri de brichete.

Concentrația de H₂ din volatile este mare pentru brichetele 50% rumeguş și 50% paie, 25% rumeguş și 75% paie și 25% rumeguş și 75% coceni. În schimb brichetele 50% rumeguş și 25% coceni au o concentrație mică de H₂.

4.4. Validare model

Validarea modelului s-a făcut utilizând datele experimentale obținute de Zanzi [145] pentru biomase din lemn de esența moale și coji de orez.





Figura 4.11. Predicția compoziției volatilelor în funcție detemperatură pentru lemn de esentă moale. [145]



După cum se poate observa în figurile 4.1 și 4.2 concentrația de *CO* are o creștere până în jurul temperaturii de 900 K, apoi începe să scadă. Concentrația de ME (echivalent metan) are o creștere ușoară începând cu temperatura de 600 K.

În cazul concentrațiilor de CO_2 și H_2O curbele coincid până în jurul temperaturii de 950 K, după această temperatură gudronul tinde să atingă valoarea de zero motiv pentru care cele două curbe nu mai coincid.

Aceleași lucru poate fi observat și în cazul cojilor de orez. Curbele volatilelor sunt aproape la fel pentru cele două biomase. Aceste rezultate sunt pentru biomase uscate și fără cenușă.

Comparând rezultatele lui Zanzi [145] cu rezultatele obținute cu modelul de calcul dezvoltat, se observa aceeași variație a compoziției gazelor volatile. Compararea rezultatelor s-a facut cantitativ desprece nu au existat valori numerice disponibile în literatură.

4.5. Concluzii

Modelul de volatile a fost dezvoltat pentru calculul compoziției volatilelor pentru diverse teneri de biorrasă. Pentru modelarea numerică a procesului de ardere este necesar să se cunoască compare de gaze volatile antrenate în procesul de ardere. Programul de calcul dezvoltat a fost integrat cano famele definită de utilizator în programul de simulare numerică.

Analizand cele prezentate în acest capitol putem concluziona:

- Validarea modelului a arătat că există o concordanță bună între rezultatele calculate de model

Characteria analizei datelor (fig.4.1-4.8) s-a remarcat faptul că odată cu creșterea temperaturii **Characteria** de **CO** si CH₄ în volatile crește (fig.4.9, 4.12).

Carrientes de CO₂ scade odată cu creșterea temperaturii (Fig.4.10)

Continutul de H₂ în volatile este mic în jur de 1,5-2%.

8110

HIMB

Capitolul V

Estimarea compoziției gazului de gazeificare folosind un model de echilibru

5.1. Descrierea modelului

Conversia biomasei în biocombustibili și energie a apărut ca o alternativă promițătoare pentru satisfacerea cererii de energie în viitor. Dintre diversele tehnologii de conversie termochimică a biomasei sau biochimică, în acest studiu s-a ales gazeificarea biomasei pentru producerea gazului de sinteză. Gazeificarea biomasei a primit cea mai mare atenție în rândul diverselor tehnologii de conversie a biomasei deoarece poate fi folosită în vecinătatea locului de generare a materiei prime lignocelulozice și poate fi utilizată pentru a produce energie și combustibili lichizi folosind procesul Fisher-Tropsch. Mai mult, gazeificarea biomasei a demostrat o eficiență mai mare în comparație cu alte procese cum ar fi arderea directă, piroliza și lichefierea [3]. Gazul produs (cunoscut și sub numele de gaz de sinteză) din gazeificarea biomasei este un amestec de dioxid de carbon (CO_2) , monoxid de carbon (CO), hidrogen (H_2) , metan (CH_4) , apă (H_2O) și azot (N_2) în cazul în care aerul este utilizat ca agent de gazeificare.

Gazeificarea a fost acceptată în mare măsură pentru a produce energie și este considerată o tehnologie mai matură comparativ cu alte procese de conversie a biomasei [40].

Reactoarele în strat fix sunt utilizate pe scară largă pentru gazeificarea cărbunelui și biomasei incluzând deșeuri municipale datorită simplicității de proiectare și a eficienței [136].

Compoziția biomasei variază în funcție de locul de producere care în final afectează compoziția gazului de sinteză. De cele mai multe ori, compoziția gazului este necunoscută până nu are loc procesul de gazeificare. Munca experimentală cere deseori resurse importante (timp și bani) iar un model matematic pentru estimarea compoziției gazului de sinteză (concentrația de H_2 , CO, CO_2 și

CH₄) folosind analiza elementală a biomasei este de mare ajutor.

Există mai multe modele care pot fi utilizate pentru determinarea compoziției unui gaz de sinteză, cum ar fi modelul echilibrului termodinamic, modelul cinetic sau modelul echilibrului chimic [92]. Dintre acestea, modelul de echilibru termodinamic este cel mai simplu și determină compoziția gazului de sinteză pentru diferite tipuri de biomasă la diverse temperaturi de gazeificare.

Modelul echilibrului termodinamic oferă rezultate teoretice mai bune atunci când temperatura de reacție este suficient de ridicată [143]. Condițiile de echilibru sunt dificil de realizat în condiții practice de operare și rezultatele obținute cu modelul echilibrului termodinamic pot servi ca limită maximă pentru compoziția unui gaz de sinteză. Au fost efectuate mai multe studii pentru a determina compoziția gazului de sinteză și puterea calorifică a gazului de sinteză utilizând modelul echilibrului termodinamic pe diverse tipuri de biomasă [143, 52, 71, 133].

Obiectivul acestui capitol este de a dezvolta un model matematic pentru a determina compoziția gazului de sinteză pe baza conținutului de carbon, hidrogen și oxigen, model ce poate fi aplicat la orice tip de biomasă. În plus, modelul ține seama de efectul conținutului de umiditate din biomasă. Rezultatele numerice vor fi comparate cu datele experimentale pentru tipurile de biomasă selectate.

Au fost scrise relații empirice pentru estimarea fracțiilor masice ale speciilor chimice ale gazului de sinteză. Deși aceste ecuații pot fi folosite pentru orice tip de reactor, sunt mai precise pentru un reactor direct datorită conținutului scăzut de gudroane. Deși există mai mulți factori care afectează compoziția unui gaz de sinteză din biomasă, aceasta depinde în principal de tipul reactorului, materiile prime, de pre-tratament, mediul de gazeificare și parametrii de funcționare cum ar fi: temperatura, presiunea și raportul de echivalență [87]. În acest studiu, formularea modelul termodinamic s-a bazat pe următoarele ipoteze:

• tot conținutul de carbon din biomasă este convertit în formă gazoasă și timpul de rezidență este suficient de mare pentru a atinge echilibru termodinamic. Acest lucru nu ar putea fi adevărat întrun proces de gazeificare real. Cu toate acestea gradul de eroare introdus prin această ipoteză este acceptabil și aplicabilitatea acestei ipoteze este confirmată de literatura de specialitate [144, 71, 102]. Produsele luate în considerare sunt CO, CO_2 , H_2 , CH_4 , N_2 și H_2O . Aceștia sunt compușii

gazoși majori formați în timpul procesului de gazeificare. Hidrocarburile, altele decât CH_4 au fost considerate neglijabile în compoziția gazului de sinteză și nu au fost luate în considerare;

• s-a considerat că cenuşa din materia primă este inertă în toate reacțiile de gazeificare, deși se întâmplă de obicei numai pentru temperaturi de reacție mai mici de $700^{\circ}C$ [54]. Biocombustibilii au conținut ridicat de minerale (siliciu și potasiu) care scad temperatura de fuziune a cenușii sub $700^{\circ}C$. Procesul de gazeificare are loc în general la temperaturi mai mari de $700^{\circ}C$. Prin urmare, în acest studiu nu pot fi folosite efectiv tipuri de biomasă cu un conținut ridicat minerale;

se presupune că toate produsele gazoase se comportă ca gaze ideale. Acest lucru va duce la
erori nesemnificative, deoarece procesul de gazeificare în reactoarele cu tiraj direct se desfășoară la
temperaturi ridicate și presiuni scăzute. De asemenea, o cădere de presiune în interiorul reactorului a
fost considerată a fi neglijabilă;

 reacția a fost considerată exotermă și nici o sursă externă de căldură nu a fost aplicată.
 Procesul este complet adiabatic, astfel încât nu au loc pierderi de căldură din reactor. Cantitatea de aer a fost modificată pentru a atinge temperatura de reacție dorită în sistem;

 cantitatea de gudroane din gazul de sinteză a fost asumată a fi neglijabilă. Pentru un reactor cu tiraj direct, această ipoteză este valabilă, deoarece concentrația de gudroane este semnificativ scăzută în comparație cu alte configurații [132, 79, 135]. Pentru un reactor cu tiraj inversat, caz în care hidrocarburile produse nu mai sunt descompuse și conțin prin urmare un procent ridicat de gudroane, această modelare nu poate fi aplicată [132]. Modificări, cum ar fi scăderea cantității de volatile din biomasă și tratarea restului de mangal pentru procesul de gazeificare pot fi făcute pentru a îmbunătăți modelul [133]. Acest lucru va conduce la creșterea erorilor în ceea ce privește rezultatele finale.

Produșii rezultați din procesul de gazeificare au fost presupuși a fi gaze permanent lipsite de O_2 ceea ce este adevărat deoarece cantitatea de oxigen ce participă la reacția de gazeificare este mai mică decât cea necesară pentru ardere. Conținuturile de sulf și de clor în biomasă au fost de asemenea neglijate, deoarece acestea sunt mai mici de 0,6% în cele mai multe biomase [54].

Validarea acestui model prin compararea rezultatelor cu date din literatura de specialitate sunt prezentate în subcapitolul 5.3.

Concentrațiile calculate ale acestor gaze sunt prezentate în capitolul 5.4.

În vederea modelarii procesului de gazeificare am considerat compoziția biomasei de forma $CH_a O_b N_c$. Reacția de gazeificare se va scrie:

$$CH_a O_b N_c + w H_2 O + x_6 (O_2 + 3,76N_2) \rightarrow x_1 CO + x_2 H_2 + x_3 CO_2 + x_4 H_2 O + x_5 CH_4 + \left(\frac{c}{2} + x_6 3,76\right) N_2$$
(5.1)

unde w poate fi calculat folosind următoarea relație:

$$w = \frac{(M_{bio} m)}{18 (1 - m)}$$
(5.2)

Principalele reacții care au loc în reactorul cu tiraj direct sunt:

$$C + CO_2 \rightarrow 2CO$$
 (5.3)

 $C + H_2 O \to CO + H_2 \tag{5.4}$

Cele două reacții prezentate mai sus pot fi combinate într-o singură reacție cunoscută ca reacția gazului de apă [144,71]:

$$CO + H_2 O \to CO_2 + H_2 \tag{5.5}$$

O altă reacție importantă în procesul de gazeificare este reacția de formare a metanului:

$$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$$
 (5.6)

Ecuațiile (5.5) și (5.6) sunt două reacții importante care au loc în procesul de gazeificare [144, 71, 2, 52]. Constantele de echilibru ale celor două ecuații în funcție de compoziția molară pot fi scrise sub următoarea formă :

$$K_1 = \frac{P_{CO_2} \cdot P_{H_2}}{P_{CO} \cdot P_{H_2O}} = \frac{n_{CO_2} \cdot n_{H_2}}{n_{CO} \cdot n_{H_3O}} = \frac{x_3 x_2}{x_1 x_4}$$
(5.7)

$$K_{2} = \frac{P_{CH_{4}}}{(P_{H_{3}})^{2}} = \frac{n_{CH_{4}} \cdot n_{tot}}{n_{H_{3}}^{2}} = \frac{x_{5}}{x_{2}^{2}} n_{tot}$$
(5.8)

Pentru un gaz ideal dat, energia liberă Gibbs este o funcție doar de temperatură [110]:

$$\ln K(T) = \frac{-\Delta G_T}{RT}$$
(5.9)

$$\Delta G_T = \sum x_i \Delta \overline{g}_{f,T,i}^0 \tag{5.10}$$

unde funcția Gibbs standard de formare $\Delta \overline{g}_{f,T,i}^{0}$ este calculată cu relația (5.18).

Din ecuația (5.1) în urma bilanțului molar pentru carbon, hidrogen și oxigen rezultă următoarele ecuații:

$$x_1 + x_3 + x_5 = 1 \tag{5.11}$$

$$x + 2w = 2x_2 + 2x_4 + 4x_5 \tag{5.12}$$

$$b + w + 2x_6 = x_1 + 2x_3 + x_4 \tag{5.13}$$

Sistemul de ecuații ce descrie compoziția gazului de sinteză cuprinde 5 ecuații (5.7), (5.8), (5.11), (5.12), (5.13) și șase necunoscute x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 și x_6 . Ultima ecuație care formează sistemul a fost obținută din echilibrul termic al sistemului (reactorului): entalpia produșilor de reacție la temperatura de reacție este egală cu entalpia sensibilă și de formare a biomasei, umidității, aerului și căldura intrată și căldura ieșită din sistem:

$$\begin{aligned} H_{f-biomasa}^{0} &+ w \left(H_{fH_{2}O(t)}^{0} + H_{vap} \right) + x_{6} \left(H_{fO_{2}}^{0} + 3,76 H_{fN_{2}}^{0} \right) \\ &= x_{1} \left(H_{fCO}^{0} + \int_{258}^{T_{6}} C_{PCO} dT \right) + x_{2} \left(H_{fH_{2}}^{0} + \int_{258}^{T_{6}} C_{PH_{2}} dT \right) \\ &+ x_{3} \left(H_{fCO_{2}}^{0} + \int_{258}^{T_{6}} C_{PCO_{2}} dT \right) + x_{4} \left(H_{fH_{2}O}^{0} + \int_{258}^{T_{6}} C_{PH_{2}O} dT \right) \\ &+ x_{5} \left(H_{fCH_{4}}^{0} + \int_{258}^{T_{6}} C_{PCH_{4}} dT \right) + \left(\frac{c}{2} + x_{6} 3,76 \right) \int_{258}^{T_{6}} C_{PN_{2}} dT \end{aligned}$$
(5.14)

Zainal și alții [144] au folosit puterea calorifică superioară (Q_s) și analiza elementală pentru determinarea căldurii de formare a biomasei:

$$H_{f-biomasa}^{0} = 0,2326 (146,58C + 56,878H - 51,530O - 6,58A + 29,45)$$
(5.15)

Ținând cont că $H^0_{f_{N_2}}$, $H^0_{f_{H_2}}$ și $H^0_{f_{O_2}}$ sunt zero la temperatura de referința 298K și presiunea latm., ecuația (5.15) devine:

$$H_{f-blomasa}^{0} + w \left(H_{fH_{2}O(t)}^{0} + H_{vap} \right)$$

$$= x_{1} \left(H_{fCO}^{0} + \int_{258}^{T} C_{PCO} dT \right) + x_{2} \left(\int_{258}^{T} C_{PH_{2}} dT \right)$$

$$+ x_{3} \left(H_{fCO_{2}}^{0} + \int_{258}^{T} C_{PCO_{2}} dT \right) + x_{4} \left(H_{fH_{2}O}^{0} + \int_{258}^{T} C_{PH_{2}O} dT \right)$$

$$+ x_{5} \left(H_{fCH_{4}}^{0} + \int_{258}^{T} C_{PCH_{4}} dT \right) + \left(\frac{c}{2} + x_{6} 3, 76 \right) \int_{258}^{T} C_{PN_{2}} dT$$

$$(5.16)$$

Ecuația (5.16) acționează ca o condiție pentru procesul de gazeificare și formează baza pentru reglarea cantității de aer care urmează să fie furnizat. Cantitatea de aer este reglată astfel încât entalpia totală a reactanților să fie egală cu cea a produșilor sub formă gazoasă.

Căldura specifică la presiune constantă C_p se determină utilizând o relație de forma:

$$C_{n}(T) = c_{1} + c_{2}T + c_{3}T^{2} + c_{4}T^{3} [kJ/kg]$$
(5.17)

unde coeficienții c_1, c_2, c_3, c_4 sunt dați în tabelul 5.1 [92]

Căldură sensibilă pentru fiecare specie gazoasă a fost calculată prin integrarea ecuației (5.17) între temperatura ambiantă și temperatura de gazeificare:

$$\int_{298}^{T} C_{p} dT = \int_{298}^{T} \left(c_{1} + c_{2}T + c_{3}T^{2} + c_{4}T^{3} \right) dT = c_{1}T + \frac{c_{2}T^{2}}{2} + \frac{c_{3}T^{3}}{3} + \frac{c_{4}T^{4}}{4}$$
(5.17)

Gazul	c_1	<i>c</i> ₂	<i>c</i> ₃	C ₄
N ₂	31,2	$-1,36 \times 10^{-2}$	2,68×10 ⁻⁵	$-1,17 \times 10^{-8}$
CO2	19,8	7,34×10 ⁻²	$-5,60 \times 10^{-5}$	1,72×10 ⁻⁸
H ₂	29,1	$-1,92 \times 10^{-3}$	4,00×10 ⁻⁶	$-8,70 \times 10^{-10}$
СО	30,9	$-1,29 \times 10^{-2}$	2,79×10 ⁻⁵	$-1,23 \times 10^{-8}$
CH ₄	19,3	5,21×10 ⁻²	1,20×10 ⁻⁵	-1,13×10 ⁻⁸
H ₂ O	32,2	1,92×10 ⁻³	1,06×10 ⁻⁵	$-3,60 \times 10^{-9}$

Tabel. 5.1. Căldura specifică a principalelor gaze [92].

Variația energiei libere Gibbs pentru un gaz se poate calcula cu relația:

$$\Delta \overline{g}_{f,T,i}^{0} = \overline{H}_{f,i}^{0} - aT \ln T - bT^{2} - \frac{c}{2}T^{3} - \frac{d}{3}T^{4} + \frac{e}{2T} + f + gT$$
(5.18)

Valorile pentru coeficienții a - g sunt preluate din Probstein și Hicks [20] și sunt prezentate în tabelul 5.2, împreună cu entalpia de formare la temperatura standard de 298K și presiunea de l atm.

Gazul	CH ₄	CO	CO ₂	H ₂ O
$\overline{H}_{f,298}^{0}$	- 74,8	-110,5	- 393,5	- 241,8
а	$-4,62 \times 10^{-2}$	5,62×10 ⁻³	$-1,95 \times 10^{-2}$	$-8,95 \times 10^{-3}$
b	1,13×10 ⁻⁵	$-1,19 \times 10^{-5}$	3,12×10 ⁻⁵	$-3,67 \times 10^{-6}$
c	1,32×10 ⁻⁸	6,38×10 ⁻⁹	$-2,45 \times 10^{-8}$	5,21×10 ⁻⁹
d	$-6,65 \times 10^{-12}$	$-1,85 \times 10^{-12}$	6,95×10 ⁻¹²	$-1,48 \times 10^{-12}$
e	$-4,89 \times 10^{2}$	$-4,89 \times 10^{2}$	$-4,89 \times 10^{2}$	$-4,89 \times 10^{2}$
ſ	14,1	8,68	5,27	2,87
£	- 0,223	-0,0613	- 0,121	- 0,172

Tabel 5.2. Entalpia de formare și coeficienții pentru ecuația (5.18).

5.2. Algoritmul de calcul

Permit de la modelal de echilibru dezvoltat am elaborat un program de calcul a compoziției gazalia de gazagen permit diverse biomase. Materiile prime pentru care am calculat compoziția gazului de gazogen sunt: lemne de salcâm, brichete din, stuf, rumeguş, coceni de porumb, paie şi amestecuri ale acestor reziduuri agricole.

Pornind de la compoziția elementală a acestor tipuri de biomasă, am calculat cu ajutorul programului elaborat în Matlab compoziția gazului de gazogen. Programul rezolvă sistemul de ecuații neliniare format din ecuațiile (5.7), (5.8), (5.11), (5.12), (5.13) și (5.16).

$$\begin{cases} f_1(x) = x_1 + x_3 + x_5 - 1 = 0 \\ f_2(x) = 2x_2 + 2x_4 + 4x_5 - a - 2w = 0 \\ f_3(x) = x_1 + 2x_3 + x_4 - b - w - 2x_6 = 0 \\ f_4(x) = K_1x_1 \cdot x_4 - x_3 \cdot x_2 = 0 \\ f_5(x) = K_2 \cdot x_2^2 - x_5 \cdot n_{tot} = 0 \\ f_6(x) = x_1 \left(H_{0CO}^{0} + \int_{298}^{T_g} C_{pCO} dt \right) + x_2 \left(\int_{298}^{T_g} C_{pH_2} dT \right) + \\ x_3 \left(H_{fCO_2}^{0} + \int_{298}^{T_g} C_{pCO_2} dT \right) + x_4 \left(H_{fH_2O}^{0} + \int_{298}^{T_g} C_{pH_2O} dT \right) + \\ x_5 \left(H_{fCH_4}^{0} + \int_{298}^{T_g} C_{pCH_4} dT \right) + \left(\frac{c}{2} + x_6 3, 76 \right) \int_{298}^{T_g} C_{pN_2} dT = 0$$

$$(5.19)$$

Integralele de forma $\int_{298}^{T_g} C_{pl} dT$ se calculează cu relațiile (5.17')

Pentru rezolvarea acestui sistem de ecuații neliniare a fost utilizată metoda Newton.

Validarea acestui model cu date din literatura de specialitate este prezentat în subcapitolul 5.3. Concentrațiile gazelor de gazeificare calculate sunt prezentate în capitolul 5.4, iar în subcapitolul 5.5 este prezentată validarea rezultatelor obținute de model cu datele experimentale.

5.3. Validarea modelului

Validarea modelului de echilibru l-am făcut utilizând rezultate din literatura de specialitate [2, 144, 53, 130]. Compozițiile de CO și H_2 raportate de Altafini [2] prezintă media a 10 teste efectuate la temperatura de $832^{\circ}C$ și o medie a raportului aer/rumeguș de 1,829.

Datele raportate de Jayah [53] sunt rezultate în urma experimentelor efectuate pe un gazeificator cu tiraj direct. Cantitatea de gaze de gazeificare raportată de Jayah este între 18,4% și 22,1% pentru CO și 13-18,3% pentru H_2 la o temperatură de gazeificare cuprinsă în intervalul $700 - 1000^{0}C$.

Concentrația de H_2 și CO_2 raportată de Zainal [144] reprezintă media a 57 de teste efectuate la o temperatură de $700 - 900^{\circ}C$ pentru majoritatea experimentelor. Biomasa utilizată a fost lemn iar raportul de echivalență între 0,268 și 0,43.

În tabelele de mai jos sunt prezentate concentrațiile gazelor de gazogen din literatura de specialitate utilizate pentru validarea modelului din acest studiu.

Model Altafini (C=46,8%; H=5,46%; O=37,40%; N=0,25%; Cenuşa=0,09%)									
	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	3,76·N ₂				
Model Altafini	20,06	19,7	10,5	0	50,1				
Experiment Altafini	14	20,14	12,06	2,31	50,79				
Modelul propriu Matlab	12,78	17,8	11,54	0	57,81				

Tabel 5.3. Compoziției gazului de gazogen - validare model propriu la T=1073K.



Figura 5.2 .Validarea modelului comparativ cu modelul și experimentul lui Altafini.

Jayah (C=50,6%	; H=6,5%	; O=42%	; N=0,2%;	Cenușa=	=0,7%)
	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	3,76·N ₂
Model Jayah	16,4	18,3	11,1	1,1	53,2
Experiment Jayah	15,5	19,1	11,4	1,1	52,9
Model propriu Matlab	18,13	22,25	9,26	0,2	50,13

Tab	el 5.5.	Compoziția	gazului de	gazogen -	validare model	propriu la	T=1023 K
-----	---------	------------	------------	-----------	----------------	------------	----------



Figura 5.3. Validarea modelului comparativ cu modelul și experimentul lui Jayah.

Tabel 5.7.	Compoziția	gazului de	e gazogen	- validare	model	propriu	la T=1073K.
		-					

Model Zainal (C=	50%, H=6%,	0=44%, N	N=0%, Cen	uşa=0%)	land the
	H ₂	СО	CO ₂	CH ₄	3,76·N ₂
Model Zainal	21,06	19,61	12,01	0,64	46,68
Experiment Zainal	15,23	23,04	16,42	1,58	42,31
Modelul propriu Matlab	17,91	24,21	11,3	4,27	42,3





5.4. Efectul temperaturii asupra compoziției gazului de gazeificare

În figurile 5.6-5.18 din subcapitolul 5.5 am evidențiat evoluția concentrațiilor de CO, H_2 și CH_4 în funcție de temperatură. Scăderea concentrațiilor se datorează atenuării concentrației de N_2 la temperaturi mari, deoarece raportul de echivalență se ajustează singur astfel încât să se întrunească condițiile adiabatice setate de ecuația (5.16). Numărul de moli de CO rămâne aproape constant, în timp ce numărul de moli de H_2 scade monoton.

Numărul de moli de H2O și CO2 crește odată cu creșterea temperaturii.

5.5. Concentrațiile gazelor de gazeificare pentru diferitele tipuri de biomasă utilizate

În acest subcapitol sunt descrise tabelar și grafic variațiile compoziției gazelor de gazeificare în funcție de temperatură, rezultate calculate pentru diferite tipuri de brichete din reziduuri agricole.

Graficele de mai jos descriu scăderea concentrațiilor de CO, H_2 și CH₄ cu creșterea temperaturii. Această variație se datorează diluării N_2 la temperaturi ridicate deoarece raportul de echivalență se adaptează singur pentru a îndeplini condiția adiabatică impusă de relația (5.16). Numărul de moli de CO rămâne aproape constant, în timp ce numărul de moli de H₂ scad monoton.

 Lemn de salcâm cu următoarea compoziție elementară : C=49,6%; H=6%; O=33,8%; N=0,9; Cenusă=4.2%.



Figura 5.5.Compoziția molară a gazelor rezultate din lemne de salcâm.



Figura 5.6. Compoziția volumică a gazelor din lemne de salcâm.

• Brichete din stuf cu următoarea compoziție elementală: C=48,4%; H=5,5%; O=31,2%, N=0,6%; Cenușă=7,3%.





Figura 5.7.Compoziția molară a gazelor rezultate din brichete de stuf.



• Brichete din rumeguş cu următoarea compoziție elementală: C=50%; H=5,9%; O=33,6%; N=1,8%; Cenuşă=2,6%.



Figura 5.9.Compoziția molară a gazelor rezultate din brichete de rumeguş.

Figura 5.10. Compoziția volumică a gazelor din brichete de rumeguş.

• Brichete 50% rumeguş si 50% coceni cu următoarea compoziție elementală: C=46,1%; H=5,5%; O=38%; N=0,4%; Cenuşă=3,3%.







Figura 5.12. Compoziția volumică a gazelor pentru brichete 50%rumeguş și 50% coceni.

• Brichete 50% rumeguş şi 50% paie cu următoarea compoziție elementală: C=48%; H=5,8%; O=36,1%; N=0,5%; Cenuşă=4,4%.





Figura 5.12.Compoziția molară a gazelor rezultate din brichete 50% rumeguș și și 50% paie.

Figura 5.13. Compoziția volumică a gazelor pentru brichete 50%rumeguș și 50% paie.

 Brichete 25% rumeguş şi 75% coceni cu următoarea compoziție elementală: C=48,2%; H=5,9%; O=34,5%; N=0,6%; Cenuşă=3,4%.





Figura 5.12.Compoziția molară a gazelor rezultate din brichete 25% rumeguș și și 75% coceni.

Figura 5.13. Compoziția volumică a gazelor pentru brichete 25%rumeguș și 75%coceni.

• Brichete 25% rumeguş şi 75 % paie cu următoarea compoziție elementală: C=48,5%; H=5,7%; O=36,4%; N=0,7%; Cenuşă=1,4%.



Figura 5.14.Compoziția molară a gazelor rezultate din brichete 25% rumeguș și și 75% paie.



Figura 5.15. Compoziția volumică a gazelor pentru brichete 25%rumeguș și 75% paie.

5.6. Concluzii

Relațiile derivate pentru calculul compoziției gazului de gazeificare CO, H_2 și CO_2 au un grad mare de precizie. Relațiile tind să devină mai puțin precise odată cu creșterea conținutului de cenușă a biomasei deoarece sunt ignorate în acest model reacția cenușii și căldura absorbită. Condițiile adiabatice perfecte sunt și ele greu de atins în testele experimentale ceea ce conduce la o mică discrepantă între rezultatele calculate folosind modelul și rezultatele experimentale.

Așa cum s-a menționat anterior, concentrațiile de CH_4 calculate folosind modelul de echilibru sunt semnificativ mai mici decat cele obținute experimental. Concentrația tipică de CH_4 obținută întrun reactor cu tiraj direct este de (2-5)% pentru biomasa uscată. Concentrația mai mică de CH_4 se datorează faptului că CH_4 rezultat în urma descompunerii termice și a volatilizării biomasei nu este încorporat în acest model.

Se cunoaște faptul că CH_4 este o hidrocarbură stabilă și că este unul dintre principalii produși ai descompunerii termice a hidrocarburilor de ordin superior. Neglijând acest fenomen rezultă un conținut scăzut de CH_4 calculat cu modelul de echilibru.

Pornind de la modelul de echilibru s-a dezvoltat un program în Matlab pentru calculul compoziției gazului de gazogen pentru diverse tipuri de biomasa. Pentru modelarea numerică a procesului de gazeificare este necesar să se cunoască cantitatea de gaze de gazogen antrenate în procesul de ardere.

Validarea modelului a arătat că există o concordanță bună între rezultatele calculate de model și cele din literatura de specialitate.

În urma analizei rezultatelor obținute se pot trage următoarele concluzii:

- Conținutul de H₂ în gazul rezultat crește pentru toate biomasele considerate aproape liniar.
- Cantitatea de CO₂ scade odată cu creșterea temperaturii aproape liniar.
- Cantitatea de CH₄ s-a observat că scade odată cu creșterea temperaturii și este mai mică de

1%.

Capitolul VI Modelarea numerică a arderii volatilelor

În acest capitol am realizat modelarea și simularea numerică a arderii volatilelor în camera inferioară a cazanului FI-GS 40.

S-a considerat că în camera inferioară are loc arderea volatilelor în timp ce gazeificarea are loc în camera superioară. Compoziția volatilelor rezultate a fost calculată cu ajutorul modelului prezentat în capitolul IV. Simularea arderii în camera inferioară a fost realizată cu ajutorul programului Ansys CFD (Fluent).

6.1.Etapele simulării

Simularea numerică a fost realizată urmând pașii de mai jos:

 Stabilirea obiectivelor simulării, definirea domeniului de analiză, discretizarea domeniului de calcul, definirea modelelor matematice, introducerea condițiilor la limită, soluționarea numerică a problemei, postprocesarea grafică a rezultatelor.

6.2. Definirea și discretizarea domeniului de analiză

Pornind de la instalația practică de lucru a fost realizată geometria cazanului Termofarc FI-GS 40 (Fig.3.1).

Geometria 3D a instalației de ardere a fost realizată în Catia, un program care permite realizarea geometriilor în formate ce pot fi integrate în programul Ansys CFD. Geometria a fost creată în prima fază pentru întreg cazanul cuprinzând camera primară și camera secundară (figura 6.1).



Figura 6.1. Geometria cazanului Termofarc FI-GS 40 realizată în Catia.

6.2.1. Definirea domeniului de calcul

Domeniul de calcul l-am redus la camera de ardere inferioară a cazanului (figura 6.2). Domeniul de calcul este format din camera inferioară, schimbătorul de căldura (în cazul suprafețelor interioare), canalele de intrare a gazelor (notate cu I, II si III, fig.6.2), canalele de intrare a aerului secundar (notate de la 1 la 6, fig.6.2) și canalul de iesire a gazelor arse (notat cu O, fig.6.2).



Figura 6.2. Domeniul de calcul a camerei secundare a cazanului de gazeificare.

6.2.2. Discretizarea domeniului de calcul

Pentru discretizarea domeniului de calcul am generat cu programul Gambit o rețea complet structurată, neuniformă, cu densitatea grilei mai mare în zonele cu gradienți mai mari (pereți, jeturi etc.). Geometria cazanului Termofarc FI-GS a permis o discretizare complet structurata, acest tip de rețea reprezentând un caz ideal de discretizare.

Utilizarea acestui tip de rețea reduce timpul de calcul. Domeniul de calcul rezultat are un număr de 1.572.681 de noduri și 1.497.136 celule. Discretizarea domeniului de calcul este ilustrată în figura 6.3 și 6.4.



Figura 6.3. Discretizarea structurată și neuniformă a domeniului de calcul.



Figura 6.4. Detaliu al grilei canalelor de intrare a gazelor aerului secundar.

6.3.Modelarea fizică 6.3.1. Modelarea curgerii gazelor - Reynolds-Averaged Navier-Stokes

Pentru modelarea curgerii gazelor în acest studiu a fost ales un model RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Acest model include eforturi turbulente suplimentare rezultate din miscările turbulente la toate scările. Aceste eforturi Reynolds sunt determinate din ecuații suplimentare cunoscute ca modele de turbulență. În alegerea modelului de turbulență am ținut cont de considerații cum ar fi: fizica curgerii, metodologia utilizată în cazul unei probleme specifice de ardere, nivelul de precizie solicitat, resursele de calcul disponibile și nu în ultimul rând de timpul disponibil pentru simulare.

6.3.2. Modelarea turbulenței cu modelul SST k-omega

Modelul de turbulență ales în cazul acestui studiu a fost un model $SST k - \omega$ (Shear Stress Transport). Acest model este un amestec între modelul standard $k - \varepsilon$ și modelul $k - \omega$. Modelul SST $k - \omega$ folosește o formulare $k - \varepsilon$ pentru zona curgerii libere, evitând astfel dezavantajele majore ale modelului $k - \omega$ privind condițiile initiale și un model $k - \omega$ pentru stratul limită. Acest lucru este realizat prin formularea modelului $k - \varepsilon$ în maniera $k - \omega$.

6.3.3. Modelarea reacțiilor și transportul speciilor chimice

Modelarea reacțiilor chimice și transportul speciilor chimice s-a realizat utilizând un model predefinit în Fluent și anume modelul de ardere a fracției de amestec (non-premixed combustion model

6.3.4. Modelarea transferului termic

Modelul de radiație P1

Transferul termic a fost modelat utilizând ecuația de conservare a energiei pentru conducție și convecție. Pentru radiație a fost ales modelul P-1. Transferul termic pentru șicane și pereții laterali a avut loc prin conducție și radiație.

6.4. Condiții la limită

Mass-Flow-Inlet

Condițiile de intrare au fost stabilite pentru toate granițele de intrare în domeniul de calcul, cu specificarea debitului masic al amestecului de gaze.

Debitul de gaze din camera primară a fost de 0.0376 kg/s, la o temperatură T = 875° C.

S-a calculat compoziția gazelor volatile cu ajutorul modelului dezvoltat în capitolul IV pentru o biomasă cu compoziția 50% rumeguș și 50% coceni.

CO	CO ₂	H ₂ O	H ₂	O ₂	N ₂
0.0121	0,0429	0,0218	0,0009	0,2149	0,7074

Debitul de aer secundar considerat a fost de 0,0038 kg/s, la o temperatură T =23°C

Pressure-Outlet

Condițiile stabilite la ieșirea din domeniul de calcul unde presiunea a fost considerată egală cu presiunea atmosferică:

$$p_{st} = p_{atm}$$

Wall

Pentru pereți s-a considerat o condiție "no-slip" ceea ce înseamnă că viteza relativă a fost considerată 0 în zona pereților.

Transfer termic

Transferul termic s-a facut prin conducție și radiație pentru zona șicanelor și pereții laterali ai camerei secundare a cazanului.

$$Q = 13179.6 \text{ W/m}^2$$

6.5.Simularea numerică

Programul CFD utilizat pentru simularea numerică a fost ANSYS Fluent v13.0. Solver numeric

Solverul numeric utilizat a fost un solver cuplat bazat pe presiune (Pressure-based Coupled Solver). Acest solver rezolvă într-o manieră cuplată ecuațiile de conservare și impuls, celelalte ecuații sunt rezolvate segregat.

Pentru accelerarea convergenței soluției staționare s-a utilizat un algoritm de tip pseudo-time stepping.

Discretizarea ecuațiilor de transport

Pentru discretizarea ecuațiilor de transport a fost ales o schemă de ordinul doi (Second Order Upwind) pentru o mai bună precizie pentru toate ecuațiile.

6.6. Analiza rezultatelor simulării

În acest subcapitol sunt prezentate rezultatele simulăriilor numerice cu privire la viteza gazelor, intensitatea turbulenței, temperatura gazelor în apropierea pereților, temperatura gazelor, radiația incidentă, coeficientul de absorbție al radiației și fracția masică a monoxidului de carbon.

Rezultatele simulării le-am validat cu datele experimentale. Temperatura măsurată experimental într-un punct din zona de intrare a gazelor a fost de 836° C. Temperatura rezultată prin modelarea numerică a arderii gazelor de gazogen în acelasi punct a fost de 850° C. Diferența de temperatură dintre cea masurată experimental și cea rezultată în urma modelării numerice a fost de 16° C (figura 6.8).



Figura 6.5. Viteza gazelor în secțiune verticală mediană [m/s].

În figura 6.4 se observă că viteza gazelor este mai mare în interiorul jetului și curgerea respecte o configurație corectă pentru această geometrie.





Turbulența crește în zonele în care jetul de ardere lovește prima șicană unde apar vârtejuri.



Figura 6.7. Temperatura gazelor în apropierea pereților cazanului [°C]

Temperatura pereților este mai mare în zona superioară și scade pe măsură ce gazele de ardere se apropie de zona de evacuare.



Figura 6.8. Temperatura gazelor (secțiune verticală mediană) [°C]

Se poate observă că este necesară protejarea cu material refractar a părții superioare a vetrei (zona de impact a gazelor fierbinți). Protejarea cu material refractar a fost utilizată și în cazul cazanului experimental deoarece, fără acest strat protector, țevile s-ar topi datorită temperaturilor ridicate din interiorul cazanului [26].

Temperatura calculată este aproximativ egală cu cea masurată experimental (850°C).



Figura 6.9. Radiația incidentă [W/m2].



Figura 6.10. Coeficientul de absorbție al radiației pentru gazele arse [1/m].

Transferul termic în acest caz are loc prin radiație asa cum s-a menționat în subcapitolul anterior. Radiația are o intensitate mai mare în zona de intrare a camerei secundare (figura 6.9) și scade pe măsură ce se apropie de zona de ieșire.

Coeficientul de absorbție al radiației pentru gazele de ardere (figura 6.10) depinde de compoziție și de temperatura locală. După cum se poate observa în figura 6.10 coeficientul de absorbție a radiației pentru gaze este mai mare pe măsură ce se apropie de ieșire.



Figura 6.11. Fracția masică a monoxidului de carbon CO (secțiune verticală mediană).

În figura 6.11 fracția masică a monoxidului de carbon CO are o concentrație mai mare în zona de intrare și pe măsură ce are loc arderea, această cantitate scade cand se deplasăm spre ieșire. Acest rezultat este în concordanță cu rezultatele experimentale unde concentrația de CO este mai mare în zona de intrare în camera secundară a cazanului [26].

Capitolul VII

7.1.Concluzii

Utilizarea energiei regenerabile în Europa oferă posibilitatea reducerii emisiei de gaze cu efect de seră și contribuie la securitatea și independența energetică. Odată cu reforma Politicii Agricole Comune și adoptării la nivel național a directivelor ce promovează utilizarea resursele de energie regenerabilă în Uniunea Europeană, a crescut atractivitatea față de bioenergie.

Disponibilitatea largă a reziduurilor agricole și potențialul ridicat al culturilor energetice fac din biomasă o opțiune interesantă pentru producerea de căldură și electricitate, utilizând arderea ca proces de conversie fie în sisteme mici, medii sau mari. În ultimii ani utilizarea reziduurilor agricole pentru încălzire a cunoscut o creștere importantă. Odată cu creșterea interesului pentru această metodă de încălzire s-a pus de asemenea accent și pe calitatea procesului de ardere, a eficienței de transformare a energiei și a costurilor cazanelor ce folosesc acest tip de combustibil. Prezenta teză vine în întâmpinarea acestor cerințe oferind o analiză detaliată a procesului de ardere a brichetelor din reziduuri agricole, utilizand modelarea numerică.

Această lucrare are ca obiectiv modelarea numerică a procesului de ardere a 6 tipuri de brichete și anume brichete din stuf, brichete din rumeguş, brichete din amestec de rumeguş și paie de grâu (50% rumeguş și 50% paie; 25% rumeguş și 75% paie) și brichete din rumeguş și coceni de porumb (50% rumeguş și 50% coceni; 25% rumeguş și 75% coceni) într-un cazan mic de încălzire proiectat și construit să funcționeze pe lemne. Instalația folosită pentru modelarea arderii are puterea de 40W și este prevăzută cu ardere inversă cu gazeificare. Investigațiile realizate la funcționarea instalației cu lemne de foc și cu brichete din reziduuri agricole au arătat un comportament similar si eficiențe termice apropiate pentru cele două cazuri. Cazanul testat în laborator nu este potrivit pentru arderea reziduurilor agricole și de aceea sunt necesare îmbunătățiri în ceea ce privește schimbul de căldură în camera superioară de ardere și distribuția aerului între cele două camere de ardere.

Pentru a înțelege mai bine procesul complex de ardere cu gazeificare în vederea creșterii performanțelor instalației de ardere (eficiență termică ridicată și emisii poluante reduse) s-a recurs la modelarea numerică a arderii. S-a considerat că arderea cu gazeificare se desfășoară după următorii pași: 1) uscare, volatilizare (piroliză); 2) arderea volatilelor; 3) arderea gazului format prin gazeificarea carbonului fix. Astfel au fost dezvoltate un model pentru calculul compoziției volatilelor și un model pentru predicția compoziției gazului produs prin gazeificarea carbonului fix. Pentru fiecare model s-a elaborat și câte un program de calcul. Rezultatele modelării proceselor de volatilizare au fost folosite la modelarea numerică a arderii gazelor combustibile cu ajutorul unui programului Ansys CFD.

Pentru validarea celor două modele au fost folosite datele disponibile în literatura de specialitate.

Cele două modele numerice oferă o mai bună înțelegere a influenței diferiților parametri asupra compoziției volatilelor și a gazului produs prin gazeificarea carbonului fix.

Teza este structurată pe 7 capitole de bază, aceste capitole fiind logic legate și interdependente. Primele două capitole se ocupă de partea teoretică și de stadiul actual al modelării numerice a procesului de ardere.

Cel de-al treilea capitol prezintă instalația de laborator formată din cazanul cu gazeificare Termofarc FI-GS 40, precum și caracteristicile celor 6 tipuri de brichete din reziduuri agricole utilizate în studiu.

În capitolul 4 este descris modelul dezvoltat pentru calculul compozitiei volatilelor. Acest model simplificat combină modele și date existente în literatură. Fracțiile gazelor volatile au fost calculate utilizând ecuațiile de bilanț masic ale principalelor elemente chimice ce compun biomasa C, H, O și date experimentale disponibile în literatura de specialitate. Deoarece procesul de piroliză la arderea biomasei în cazan se desfășoară lent, s-a considerat formarea reziduului carbonos independentă de temperatură și viteza de încălzire. Speciile volatile considerate în model sunt: CO_2, H_2O, CO, H_2 , hidrocarburi ușoare și hidrocarburi grele (gudron). Reziduul carbonos este considerat ca fiind carbon pur deoarece s-a observat că odată cu creșterea temperaturii, conținuturile de C și O din reziduul carbonos scad brusc. Modelul a fost implementat într-un program de calcul dezvoltat în mediul de programare Matlab. Comparând rezultatele obținute în urma rulării programului de calcul pentru biomasa pentru care se găsesc în literatură date experimentale datele rezultate în urma simulării volatilizării cu programul propriu se poate spune că există o bună concordanță între rezultatele calculate de model și cele din literatura de specialitate.

Analizând variația compoziției volatilelor cu temperatura s-a remarcat faptul că odată cu creșterea temperaturii cantitatea de CO și CH₄ în volatile crește (fig.4.9, 4.12), cantitatea de CO₂ scade odată cu creșterea temperaturii (fig.4.10), iar conținutul de H₂ în volatile este redus de circa 1,5-2%.

În capitolul 5 este prezentat modelul numeric dezvoltat pentru calculul compoziției gazelor de gazogen. Modelul dezvoltat are la bază modelul echilibrului termodinamic. Compoziția gazului produs prin gazeificare a fost determinată cu ajutorul reacției de gazeificare cu aer, a reacției gazului de apă, a reacției de formare a metanului, a constantelor de echilibru ale ultimelor două ecuații în funcție de compoziția molară și a ecuației de echilibru termic a sistemului (reactorului). Modelul a fost implementat într-un program de calcul în Matlab.

Relațiile derivate pentru calculul compoziției gazului de gazeificare (CO, H_2 , CH_4 , N_2 și CO_2) au un grad mare de precizie. Ele tind să devină mai puțin precise odată cu creșterea conținutului de cenuşă a biomasei deoarece în model sunt ignorate reacția cenușii și căldura absorbită. Deoarece este greu să se obțină condiții adiabatice perfecte în testele experimentale, se constată o mică discrepanță între rezultatele obținute folosind modelul și rezultatele experimentale. Concentrațiile de CH_4 calculate folosind modelul de echilibru sunt semnificativ mai mici decat cele obținute experimental. Concentrația tipică de CH_4 obținută într-un reactor cu tiraj direct este de (2-5)% pentru biomasa uscată. Concentrația mai mică a CH_4 se datorează faptului că CH_4 rezultat în urma descompunerii termice și a volatilizării biomasei nu este încorporat în acest model. Deoarecec CH_4 este o hidrocarbură stabilă care rezultă și din descompunerea termică a hidrocarburilor de ordin superior rezultă un conținut mai scăzut de CH_4 calculat cu modelul de echilibru. Din aceste considerente, rezultatele obținute folosind modelul dezvoltat sunt mai apropiate de rezultatele obținute utilizănd alte modele decât de rezultatele experimentale.

Analizând rezultatele obținute prin rularea programului de calcul pentru brichetele studiate se pot trage următoarele concluzii:

- participația H_2 în gazul rezultat are o creștere odată cu temperatura urmată de o descreștere pentru toate brichetele considerate;

- participația CO_2 scade aproape liniar odată cu creșterea temperaturii pentru toate brichetele

considerate;

- participația CH₄ scade odată cu creșterea temperaturii și este mai mică de 1%;

- participația *CO* are o creștere odată cu temperatura urmată de o descreștere pentru toate brichetele considerate:

participația N₂ crește odată cu temperatura pentru toate brichetele considerate.

În capitolul 6 este prezentată simularea numerică a procesului de ardere utilizand programul Ansys CFD. S-a considerat că în camera superioară a cazanului are loc volatilizarea biomasei iar în camera inferioară are loc arderea volatilelor. Compoziția volatilelor generate a fost calculată cu ajutorul modelului și a programului de calcul prezentate în capitolul IV. Simularea arderii în camera inferioară a fost realizată cu ajutorul programului Ansys CFD (Fluent).

După definirea domeniului de analiză s-a trecut la discretizarea acestuia utilizând o rețea complet structurată. Domeniul de calcul rezultat are un număr de 1.572.681 de noduri și 1.497.136 celule. Pentru modelarea curgerii gazelor în acest studiu a fost ales un model RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Pentru modelarea turbulenței a fost ales modelul SST (shear stress transport) k- ω , denumit astfel deoarece definiția vâscozității turbulente a fost modificată pentru a lua în considerare transportul principalelor tensiuni turbulente de forfecare. Modelarea reacțiilor chimice și transportul speciilor chimice s-a realizat utilizând un model predefinit în Fluent și anume modelul de ardere a fracției de amestec (non-premixed combustion model). Transferul termic a fost modelat utilizând ecuația de conservare a energiei pentru conducție și convecție. Pentru radiație a fost ales modelul P-1. Se consideră că transferul termic pentru șicane și pereții laterali are loc prin conducție și radiație, fluxul de căldură fiind de 13179,6 W/ m².

Condițiile de intrare au fost stabilite pentru toate granițele de intrare în domeniul de calcul, cu specificarea debitului masic al amestecului de gaze.

Debitul de gaze combustibile din camera primară a fost de 0,0376 kg/s, la o temperatură t = 875° C. Debitul de aer secundar considerat a fost de 0,0038 kg/s, la o temperatură t = 23° C.

La ieșirea din domeniul de calcul presiunea a fost considerată egală cu presiunea atmosferică. Pentru pereți s-a considerat o condiție "no-slip" ceea ce înseamnă că viteza relativă a fost considerată 0 în zona pereților.

Solverul numeric utilizat a fost un solver cuplat bazat pe presiune (Pressure-based Coupled Solver). Acest solver rezolvă într-o manieră cuplată ecuațiile de conservare și impuls, celelalte ecuații fiind rezolvate segregat. Pentru accelerarea convergenței soluției staționare s-a utilizat un algoritm de tip pseudo-time stepping.

Pentru discretizarea ecuațiilor de transport a fost ales un model de ordinul doi (Second Order Upwind) pentru o mai bună precizie pentru toate ecuațiile.

Rezultatele simulării au fost comparate cu datele experimentale, constatându-se o foarte bună corelare. Au fost măsurate experimental temperatura, concentrația de CO într-un punct din zona de intrare a volatilelor. Temperatura rezultată prin modelarea numerică a arderii volatilelor în același punct a fost de 850°C. Diferența dintre temperatura masurată (836°C) și cea rezultată în urma modelării numerice (850°C) a fost de 16°C (figura 6.8). Diferența dintre concentrația de CO masurată (1,11%) și cea rezultată în urma modelării numerice (1,13%) a fost de 0,02% (figura 6.11).

Din analiza rezultatele au reieșit următoarele:

 viteza gazelor de ardere este mai mare în interiorul jetului şi curgerea respectă o configurație corectă pentru geometria cazanului;

• turbulența crește în zonele în care jetul de flacără lovește prima șicana și apar vârtejuri;

 temperatura pereților este mai mare în zona superioară și scade pe măsură ce gazele de ardere se apropie de zona de evacuare (fig. 6.7);

- necesitatea protejării cu material refractar a părții superioare a vetrei (zona de impact a gazelor

fierbinți) (fig. 6.8);

- transferul termic are loc prin radiație. Radiația are o intensitate mai mare în zona de intrare a camerei secundare (fig. 6.9) și scade pe măsură ce gazele de ardere se apropie de evacuare.

 - coeficientul de absorbţie al radiaţiei pentru gazele de ardere (fig. 6.10) depinde de compoziţie şi de temperatura locală. Coeficientul de absorbţie al radiaţiei este mai mare pe măsură ce gazele de ardere se apropie de evacuare.

7.2.Contribuții personale

În urma cercetărilor desfășurate, prezenta teză aduce următoarele contribuții:

- realizarea unei analize exhaustive a stadiului actual privind modelarea arderii biomasei;
- elaborarea şi aplicarea unei metodologii de simulare a arderii biomasei cu gazeificare cu scopul de a evidenția influența diferiților parametri asupra arderii;
- modelarea procesului de gazeificare a biomasei prin adoptarea unor ipoteze de calcul necesare in vederea deducerii compoziției gazelor de gazogen. Modelul de echilibru a fost formulat astfel încât să descrie procesele chimice şi fizice care au loc în timpul procesului de gazeificare, rezultatele fiind validate cu datele din literatura de specialitate. Modelul poate fi utilizat pentru orice tip de instalație de gazeificare. Modelul poate fi utilizat pentru elaborarea unei funcții definite de utilizator în programele CFD;
- elaborarea programului de calcul în mediul de programare Matlab pentru predicția compoziției gazelor rezultate prin gazeificarea biomasei;
- modelarea procesului de volatilizare abiomasei prin adoptarea unor ipoteze de calcul necesare în vederea deducerii compoziției gazelor volatile. Modelul poate fi utilizat pentru orice tip de biomasă. Modelul poate fi utilizat pentru elaborarea unei funcții definite de utilizator în programele CFD. Modelul de volatile a fost formulat astfel încât să descrie procesele chimice care au loc în timpul procesului de volatilizare, rezultatele fiind validate cu datele din literatura de specialitate;
- elaborarea programului de calcul în mediul de programare Matlab pentru predicția compoziției gazelor rezultate prin volatilizarea biomasei;
- realizarea geometriei 3D a instalației de ardere utilizând Programul Catia V.5. Pentru
 discretizarea domeniului de calcul a fost aleasă o rețea complet structurată, neuniformă cu
 nodurile concentrate în zonele cu gradienți mai mari (pereți, jeturi etc.). Geometria
 cazanului Termofarc FI-GS a permis o discretizare complet structurata, acest tip de rețea
 reprezentând un caz ideal de discretizare. Utilizarea acestui tip de rețea reduce timpul de
 calcul şi de asemenea cererea puterii calcul necesară simulărilor. Domeniul de calcul
 rezultat are un număr de 1.572.681 de noduri şi 1.497.136 celule.
- simularea arderii biomasei într-un cazan cu gazeificare cu puterea de 40kW utilizând ANSYS Fluent v13.0.

Bibliografie selectivă

1. Adkins C.J. Equilibrium thermodynamics, 3rd Edition, Cambridge University Press, New York, 1983.

2. Altafini C.R., Wander P.R., Barretoa R.M. Prediction of the working parameters of a wood waste gasifier through an equilibrium model, Energy conversion and management, vol.44, p.2763-2777, 2003.

3. Babu B.V., Chaurasia A.S. Pyrolysis of biomass: Improved models for simultaneous kinetics and transport of heat, mass and momentum. Energy Conservation and Management, vol.45, p.1297-1327, 2004.

4. Ciocea Gh. Contributii la optimizarea parametrilor proceselor de ardere a biomasei. Teza de doctorat. STIM, Universitatea Dunarea de Jos, Galati, 2010.D

5. Jarungthammachote, Dutta A. Thermodynamic equilibrium model and second law analysis of a downdraft waste gasifier, Energy, vol.32, p.1660-1669, 2007.

6. Jayah T.H., Aye L., Fuller R.J., Stewart D.F. Computer simulation of a downdraft wood gasifier for tea drying, Biomass and Bioenergy, vol.25, p.459-469, 2003.

7. Melgar A., Perez J.F., Laget H., Horillo A. *Thermochemical equilibrium modeling of a gasifying process*, Energy Conversion and Management, vol.48, p.59-67, 2007.

8. Molcan P., Caillat S., Le Gleau F. Numerical simulation of wood chips combustion in a 25 MW spreader stoker boiler. Venice Symposion, Venice, 2010.

9. Porteiro J., Collazo J., Patino D., Granada E., Gonzales-Moran J.C., Miguez J.L. Numerical modeling of a biomass pellet domestic boiler. Energy and Fuels, vol.23, p.1067-1075, 2009.

10. Scharler R., Obernberger I., Lanle G., Heinzle J. *CFD analysis of air staging and flue gas recirculation in biomass grate furnances.* Proceedings of the 1st World Conference on Biomass for energy and Industry, Sevilla, Spain, june 2000.

11. Sharma A.K., Ravi M.R., Kohli S. Modelling product composition in slow pyrolysis of wood, SESI J. 16(1), P.1-11, 2006.

12. Sharma A.K. Modeling fluid and heat transport in the reactive, porous bed of downdraft (biomass) gasifier, International Journal of Heat and Fluid Flow, 28 pp. 1518-1530, 2007.

13. Srivastava V.K., Jalan R.K. Prediction of concentration in the pyrolysis of biomass materials-I. Energy Conversion and Management, vol.35, p.1031-1040, 1994.

14. Srivastava V.K., Sushil, Jalan R.K. Prediction of concentration in the pyrolysis of biomass materials -II. Energy Conversion and Management, vol.37, p.473-483, 1995.

15. Stastny M., Ahnert F., Spliethoff H. Three-dimensional Combustion Modelling of a Biomass Fired Pulverised Fuel Boiler. In : Advanced Computational Methods in Heat Transfer VII, edited by Sunden B., Brebbia C.A., WIT Press Boston, p.439-448.

16. Thurman H., Nicklasson F., Johnsson F., Leckner B. Composition of volatile gases and thermochemical properties of wood for modeling of fixed or fluidized beds. Energy &Fuels, vol.15, p.1488-1497, 2001.

17. Vuthaluru R., Vuthaluru H.B. Modeling of a Wall Fired Furnance for Different Operating Conditions using Fluent. Fuel Processing Technology, vol.87, p.633-639, 2006.

18. Zainal Z.A., Ali R., Lean C.H., Seetharamu K.N. Prediction of performance of a downdraft gasifier using a equilibrium modeling for different biomass materials. Energy Conversion and Management, vol.42, p.1499-1515, 2001.

19. Zainal Z.A, Rifau A., Quadir G.A., Seetharamu K.N. Experimental investigation of a downdraft gasifier. Biomass and Bioenergy, vol.23, p.283-289, 2002.

20. **Zanzi R.V.** *Pyrolysis of biomass: rapid pyrolysis at high temperature; slow pyrolysis for active carbon preparation.* Dissertation. Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 2001.

21. Zhou, H., Jensen, A.D., Glarborg, P., Jensen, P.A, Kavaliauskas, A. Numerical modeling of straw combustion in a fixed bed. Fuel, 2005, 84:389-403.

LISTA COMPLETĂ A LUCRĂRILOR ELABORATE ȘI/SAU PUBLICATE

Lucrări publicate în volumele unor conferințe naționale și internaționale

1. Florin POPESCU, Ion ION, **Gina-Georgiana ROLEA**. *Effect of excess air on natural gas /blast furnance gas co-combustion*, 3rd International Conference on Thermal Engines and Environmental Engineering METIME, June 4-6, 2009, Galati, Romania, pg 321.

2. G.Murariu, L.Georgescu, Gh.Puscasu, B.Codres, Gina-G. Rolea. *Thermodynamical equilibrium modeling of a gasifying process*. Physics Conference TIM 10, Timisoara 25-27 Noiembrie 2010.

3. Gina-Georgiana Rolea, Florin POPESCU, Ion ION, Daniela Tasma. Syngas composition produced from agricultural residue. The 8th International Conference on Industrial Power Engineering, CIEI 2011, 14-15 april 2011, Bacau, Romania, ISSN 2069-9905.

4. Daniela Tasma, Tanase Panait, Alexandrina Teodoru, **Gina-Georgiana Rolea**. *Thermodynamics analysis of biomass gasification*. The 8th International Conference on Industrial Power Engineering, CIEI 2011, 14-15 April 2011, Bacau, Romania, ISSN 2069-9905.

5. Gina-Georgiana Rolea, Florin Popescu, Ion Ion. A biomass pyrolysis model for CFD application. CEEC-TAC1. September 2011, Craiova.

6. **G.G.Rolea**, F. Popescu, I. Ion. *Modeling of biomass pyrolysis process*. International Environmental Conference: Environmental Capacity Building, ECB, 11-13 November 2011, Bucharest Romania.

Lucrări publicate în volumele unor conferințe indexate ISI

7. Gina-Georgiana ROLEA, Gh. CIOCEA, Ion V. ION, Florin Popescu. *The Use of Reed Gras Briquettes in a Domestic Heating Boiler*. International Conference on Development, Energy, Environment, Economics (DEEE'10), Puerto de la Cruz, Tenerife, November 30-December 2, 2010, pg.403-406.

Lucrări publicate în reviste indexate BDI (B+)

8. Gina-Georgiana Rolea, Gabriel Murariu, Florin Popescu. Matlab Approaching for combustion preliminary assessment. Annals of "Dunarea de Jos" University of Galati, Mathematics, Physics, Theoretical Mechanics, Fascicule II, Year II(XXXIII)2010, No.2, pg. 201-205.

9. Gina-Georgiana Rolea, Florin Popescu, Gabriel MURARIU. A numerical Algoritm for solving a specific chemical equilibrium. Annals of "Dunarea de Jos" University of Galati, FASCICLE V, TECHNOLOGIES IN MACHINE BUILDING, Year 2010- Volume II, pg.120-131.

10. **Gina-Georgiana Rolea**, Florin Popescu, Ion Ion. *Simulation of agricultural residues gasification*. 4rd International Conference on Thermal Engines and Environmental Engineering MET TIME, November 4-6, 2011, Galati, Romania. Revista Tehnica Supliment nr.2/2011, pg.23-26.

Lucrări trimise spre publicare la reviste cotate ISI

11. Gina-Georgiana Rolea, Florin Popescu, Ion Ion. A biomass pyrolysis model for CFD application. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry.

12. G.G.Rolea, F. Popescu, I. Ion. *Modeling of biomass gasification process*. Journal of Environmental Protection and Ecology.

Curriculum vitae

Informații personale:

Nume :ROLEAPrenume:Gina-GeorgianaNaționalitate:RomânăData nașterii :22 aprilie 1985Locul nașterii:Galați



Educație și formare:

- 1.10.2008- admisă la doctorat în cadrul Facultății de Mecanică, Departamentul Sisteme Termice și Ingineria Mediului, domeniul inginerie mecanică.
- Stagiu de cercetarea în cadrul doctoratului la Universitate Catolique Louvain la Neuve, Belgia 6.01.2010-6.09.2010 – obținerea unui Certifie de recherche.
- 1.10.2003-30.06.2007 Facultatea de Științe, Universitatea Dunărea de Jos, Galați, specializarea fizică-informatică.

Experiență profesională:

- 1.10.2008 30.09.2011 doctorand în cadrul departamentului Sisteme Termice şi Ingineria Mediului.
- 1.09.2007-30.10.2008- profesor informatică-fizică, Școala nr.3 și liceul Metalurgic Galați.

Competențe și aptitudini de utilizare a calculatorului:

- Utilizatoare a pachetului Microsoft Office, a programelor Html, Matlab și Fluent.

Limbi străine:

engleză – utilizator independent; franceză – utilizator independent; spaniolă – utilizator elementar.

