

MODELAREA ȘI SIMULAREA, ÎN MEDIUL OPEN SOURCE - SCILAB, A UNUI PROCES DE TRATARE A GAZULUI DE ARDERE SO_2

Delia Mihaela Rădulescu

delia.mihaela2010@gmail.com

Institutul Național de Cercetare Dezvoltare în Informatică - ICI București

Rezumat: În acest articol se modelează și se simulează procesul real de tratare a gazului de ardere SO_2 rezultat în urma arderilor unor deșeuri într-un incinerator experimental. Procesul fizic este modelat cu ajutorul modelului Bohart Adams. Modelul rezultat este programat și simulat cu ajutorul produsului software open source Scilab. Scilab asigură un mediu de calcul puternic pentru aplicații științifice. Scilab emulează limbajul MATLAB, având extensii suplimentare și o interfață grafică puternică (GUI) portabilă pe Linux și Windows. În articol sunt prezentate câteva rezultate ale simulării procesului fizic. În cadrul simulării sunt variate concentrația SO_2 în faza gazoasă, concentrația SO_2 în faza solidă și concentrația SO_2 la ieșirea din filtrul ceramic.

Cuvinte cheie: modelare, model Bohart – Adams, simulare, Open Source SCILAB, gaze de ardere.

Abstract: This paper presents the modeling and simulation of the actual process of treating the flue gas SO_2 resulting from the burning of waste in an experimental incinerator. The physical process is modeled using the Bohart Adams model. The resulting model is programmed and simulated using the open source software Scilab. Scilab provides a powerful computing environment for scientific applications. Scilab emulates MATLAB language, with additional extensions and a graphical interface (GUI) portable Linux and Windows. We present some simulation results of the physical structure consisting of the SO_2 concentration variation in the gas phase, the concentration variation of SO_2 in the solid phase and the concentration variation of SO_2 at the outlet of the ceramic filter.

Keywords: modeling, simulation, model Bohart - Adams, Open Source Scilab, flue gas.

1. Introducere

Corelarea dintre dezvoltarea economică și protecția mediului este sintetizată în conceptul dezvoltării durabile. Cea mai cunoscută definiție a dezvoltării durabile este cu siguranță cea dată de Comisia Mondială pentru Mediu și Dezvoltare (WCED) în raportul „Viitorul nostru comun”, cunoscut și sub numele de Raportul Brundtland [5]: „dezvoltarea durabilă este dezvoltarea care urmărește satisfacerea nevoilor prezentului, fără a compromite posibilitatea generațiilor viitoare de a-și satisface propriile nevoi”. Cele trei componente ale unei dezvoltării durabile sunt ilustrate în figura 1.

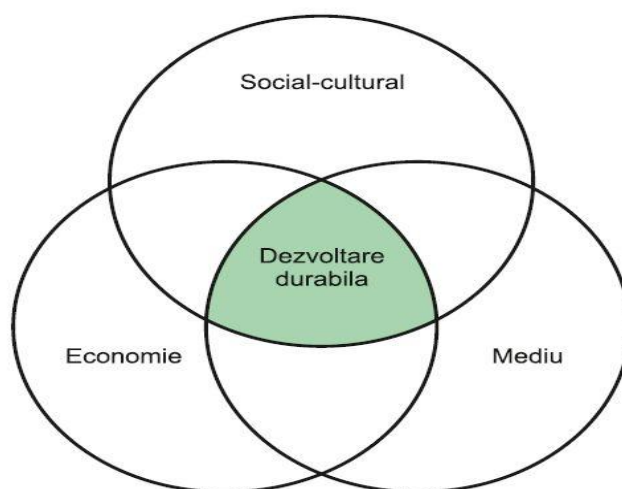


Figura 1. Componentele dezvoltării durabile

Activitățile industriale joacă un rol important în bunăstarea economică a Europei. Cu toate acestea, activitățile industriale au un impact semnificativ asupra mediului. Cele mai mari instalații

industriale sunt responsabile de o parte importantă a emisiilor de poluanți în atmosferă, apă și sol precum și cu generarea de deșeuri. Emisiile provenite de la instalațiile industriale au fost, prin urmare, obiectul legislației la nivelul UE pentru reducerea emisiei de poluanți.

Instalațiile industriale de incinerare a deșeurilor sunt o sursă de emisie în atmosferă a unui mare număr de substanțe periculoase. Acestea includ sulf și oxizi de azot, metale grele etc. Datorită varietății de poluanți emiși, a proprietăților chimice diferite și a schimbării concentrațiilor poluanților în timp, o problemă serioasă o reprezintă purificarea gazelor de ardere de la instalațiile de incinerare a deșeurilor. Metodele de tratament aplicate trebuie să îndeplinească standardele restrictive definite în legislație pentru emisii poluante. Metodele recomandate de purificare a gazelor de ardere includ sisteme de mai multe instalații în care sunt îndepărtați poluanții individuali. Ca una dintre etapele de purificare sunt recomandate procesele de adsorbție. Cercetătorii au modelat și simulat aceste procese la nivel de experiment urmând ca rezultatele obținute să fie aplicate apoi la nivel industrial. Modelul oferă un mod simplificat, abstractizat de abordare a realității.

În acest articol se modelează și simulează procesul real de tratare a gazului de ardere SO_2 rezultat în urma arderilor unor deșeuri într-un incinerator experimental. Procesul fizic este modelat cu ajutorul modelului Bohart Adams. Modelul rezultat este programat și simulat cu ajutorul Scilab. Scilab este un software open source, care asigură un mediu de calcul puternic pentru aplicații științifice. Scilab emulează limbajul MATLAB, având extensii suplimentare și o interfață grafică puternică (GUI) portabilă pe Linux și Windows. Scilab include sute de funcții matematice și dispune de un limbaj de programare de nivel înalt. În continuare sunt prezentate câteva rezultate ale simulării procesului fizic. În cadrul simulării sunt variate concentrația SO_2 în faza gazoasă, concentrația SO_2 în faza solidă și concentrația SO_2 la ieșirea din filtrul ceramic.

2. Modelul Bohart Adams

Incineratorul considerat este utilizat pentru producția de energie din deșeuri. Instalația considerată arde $2t/h$ deșeuri ceea ce generează până la $40.000 Nm^3/h$ gaze de ardere. Litera N din Nm^3/h specifică starea de "Normal" ceea ce înseamnă la presiune și temperatură standard. Deșeurile sunt incinerate într-un cuptor rotativ. Gazele fierbinți trec prin zona de post combustie unde materia volatilă este arsă și apoi printr-un boiler pentru recuperarea căldurii [2]. Gazele de ardere sunt tratate înainte de evacuarea gazului pe coș. Curățarea gazelor de ardere din incinerator se face printr-o neutralizare a gazelor acide prin injectarea în conductă de carbonat de sodiu în stare uscată, urmată de filtrare cu ajutorul unui filtru ceramic (strat fix). Un filtru ceramic lucrează ca un filtru din țesătură convențională, dar care rezistă la temperaturi mai ridicate.

În figura 2 este prezentat un proces simplificat pentru captarea de particule și reacția pe un filtru textil. Reacția și acumularea pe suprafața filtrului sunt procese dinamice. În timpul acumulării de particule pe suprafața filtrului, concentrația se schimbă în întregul ansamblu variabil cu timpul. În figură este prezentat modul în care praful gazos este filtrat de filtrul textil. Gazul, în principal format din N_2 , O_2 , CO_2 , H_2O , NO , SO_2 , NH_3 trece prin filtrul textil, iar praful compus din cenușă și adsorbantul Na_2CO_3 rămâne pe suprafața filtrului textil. Turta de adsorbție compusă din cenușă și Na_2CO_3 este depusă în direcția z în funcție de timpul T , iar h reprezintă înălțimea turtei în funcție de timp. O parte din gazele SO_2 și HCl sunt adsorbite de către particule și reacționează cu Na_2CO_3 .

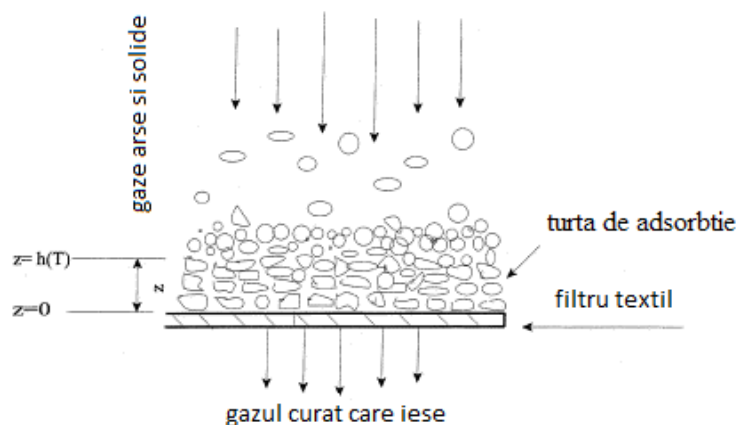
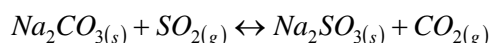


Figura 2. Imagine de ansamblu a curățării gazelor prin filtrare [6].

Acest proces fizic este modelat cu ajutorul modelelor cu strat fix. În literatura de specialitate au fost prezentate numeroase modele cu strat fix la diferite niveluri de complexitate care diferă în principal în alegerea ratei de exprimare. Multe dintre acestea au fost rezumate în lucrarea lui Ruthven [4]. Modelele riguroase cu strat fix, sunt exprimate, de obicei, sub forma unor ecuații cu derivate parțiale, ce permit o descriere matematică realistă a dinamicii fenomenului de adsorbție. Atunci când relația de echilibru este liniară, se obține întotdeauna o soluție analitică pentru comportamentul dinamic al statului fix [4].

Pentru sistemele neliniare ecuațiile care guvernează modelul sunt de obicei rezolvate numeric. Cu toate acestea, pentru sistemele care prezintă o relație de echilibru foarte favorabilă, este posibil să se obțină o soluție analitică presupunând o izotermă de adsorbție ireversibilă sau dreptunghiulară [1].

Gazul de ardere SO_2 rezultat este tratat într-un proces de adsorbție. Adsorbția reprezintă fenomenul de reținere a moleculelor unei substanțe gazoase sau fluide (numite *adsorbat*) pe suprafața unui corp lichid sau solid (*adsorbant*). Datorită grosimii sale mici, această suprafață (numită *strat superficial*) poate fi considerată omogenă și având proprietăți specifice. Procesul de adsorbție utilizează un filtru ceramic ce conține carbonat de sodiu Na_2CO_3 . Prin filtrul ceramic se adsorbe o parte din gazul de ardere SO_2 . Reacția chimică prin care gazul de ardere SO_2 este adsorbit este următoarea:



unde: s – semnifică “solid”, iar g semnifică “gazos”.

Modelul Bohart-Adams este un model de tip Langmuir modificat [1], [4] pentru o adsorbție ireversibilă. Acesta a fost utilizat pe scară largă pentru modelarea adsorbțiilor de carbon activ. O versiune simplificată a acestui model este formulată astfel:

$$\ln\left(\frac{C_0}{C_b} - 1\right) = \frac{k_{BA} \cdot N_0 \cdot Z}{u} - k_{BA} \cdot C_0 \cdot t_b$$

unde:

- C_0 - concentrația de sorbat inițială,
- C_b - concentrația de trecere prin filtru,
- k_{BA} - constanta Bohart-Adams,
- N_0 - capacitatea de adsorbție a adsorbantului pe unitatea de volum a turtei,
- Z este adâncimea totală a turtei de adsorbție,
- u viteza și
- t_b timpul de trecere prin filtru.

Datorită simplității matematice, modelul Bohart-Adams a fost folosit în multe studii de modelare a procesului de adsorbție.

3. Programul Open Source Scilab

Scilab este un pachet de calcul numeric dezvoltat încă din anul 1990 de către cercetători de la INRIA (Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique) și École Nationale des ponts et chaussées (ENPC). După crearea consorțiului Scilab în May 2003, el a fost dezvoltat și întreținut de către INRIA.

Scilab este un software gratuit, pentru calcul numeric, care asigură un mediu de calcul puternic pentru aplicații științifice. Scilab este Open Source sub licența CeCILL (GPL compatibil), și este disponibil pentru download gratuit la adresa <http://www.scilab.org/>. Scilab este disponibil sub GNU / Linux, Mac OS X și Windows XP / Vista / 7/8. Scilab include sute de funcții matematice. El are un înalt nivel de limbaj de programare care permite accesul la structuri de date avansate, 2-D și funcții grafice 3-D. Scilab este un produs din domeniul public care emulează limbajul MATLAB, având extensii suplimentare. Codul scris poate fi exportat și salvat în format executabil în mediul Scilab, fiind foarte ușor ca aceste fișiere să fie expediate și rulate pe diferite platforme software, singura condiție fiind existența mediului Scilab. Scilab este mai mult decât un limbaj de programare de tip script, el este un mediu de programare dedicat științelor aplicative. În plus are o puternică interfață grafică (GUI) portabilă pe Linux și Windows. Prin orientarea către un calcul matricial, folosirea tipurilor de variabile alocate dinamic și managementul de memorie automat, multe probleme numerice pot fi scrise folosind un număr redus de linii de cod, prin comparație cu alte soluții similare bazate pe limbajele tradiționale, precum Fortran, C sau C++. Scilab poate fi folosit pentru procesarea semnalelor, analize statistice, procesări de imagine sau sunet, simularea dinamicii fluidelor și optimizări numerice.

Scilab s-a dezvoltat în mai multe versiuni Scilab 2, Scilab 3, Scilab 4 și Scilab 5. Scilab 2 poate include fișiere FORTRAN și C dacă calculatorul gazdă are compilatoare pentru ele și este dotat cu interfața Java. Scilab 3 emulează multe din funcțiile Matlab, are o interfață grafică (GUI) puternică, portabilă între Linux și Windows, este dotat cu un modul pentru desenarea graficelor care conține chiar și rutine pentru grafice 3D. Scilab 4 include un pachet numit Scicos destinat simulării și modelării sistemelor dinamice, care conține subsisteme (module) atât continue, cât și discrete. Scilab 5 conține Scilab–LabVIEW Gateway, iar interfața dintre Scilab și LabVIEW este asigurată prin intermediul unui script Scilab prin intermediul căruia pot fi incluse module de programare Scilab în instrumentele virtuale create cu LabVIEW.

Din punct de vedere științific Scilab are numeroase capabilități. La început Scilab a fost orientat către algebră liniară. Dar rapid numărul de capabilități s-a extins pentru a acoperi multe domenii ale calculului științific. O listă scurtă a acestor capabilități este:

- algebră liniară, matrici rare,
- interpolare, aproximare,
- optimizare liniară, pătratică și neliniară,
- solver pentru ecuații diferențiale ordinare și ecuații algebrice diferențiale,
- control clasic și robust,
- prelucrare de semnal,
- statistică.

4. Rezultatele soluției numerice realizate cu programul Scilab

Soluția numerică începe cu discretizarea sistemului Bohart Adams de ecuații cu derivate parțiale.

Simularea numerică a fost efectuată cu programul Scilab și reconstituie procesul de adsorbție al gazului SO_2 din incinerator. Sunt prezentate câteva rezultate ale simulării procesului fizic ce constau în variația concentrației SO_2 în faza gazoasă, variația concentrației SO_2 în faza solidă și concentrația SO_2 la ieșirea din filtrul ceramic.

În figura 3 este reprezentată o curbă care are pe axa x pasul în spațiu și pe axa y concentrația SO_2 în fază gazoasă.

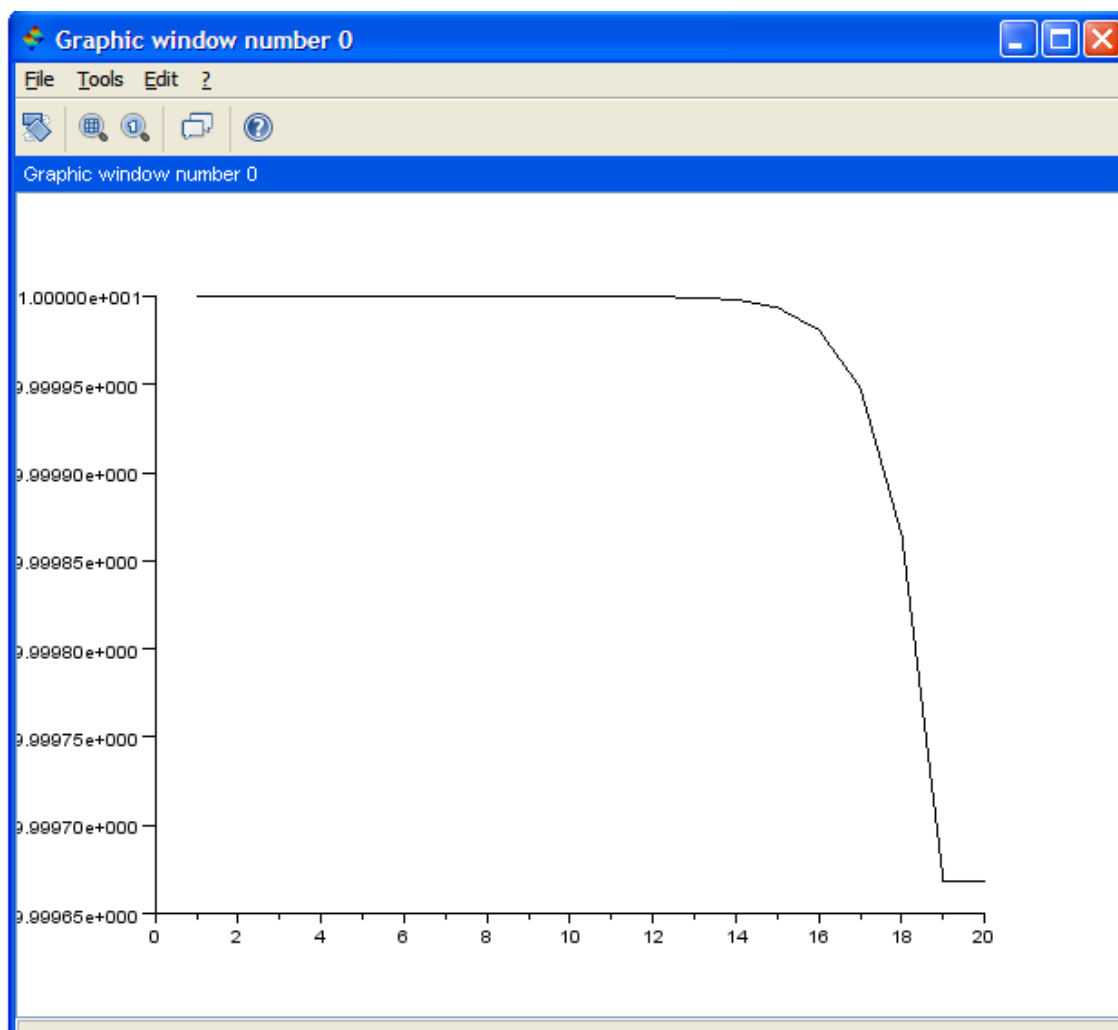


Figura 3. Variația concentrației SO_2 în faza gazoasă

În graficul din figura 4 este reprezentată o curbă care are pe axa x pasul în spațiu și pe axa y concentrația de SO_2 în faza solidă.

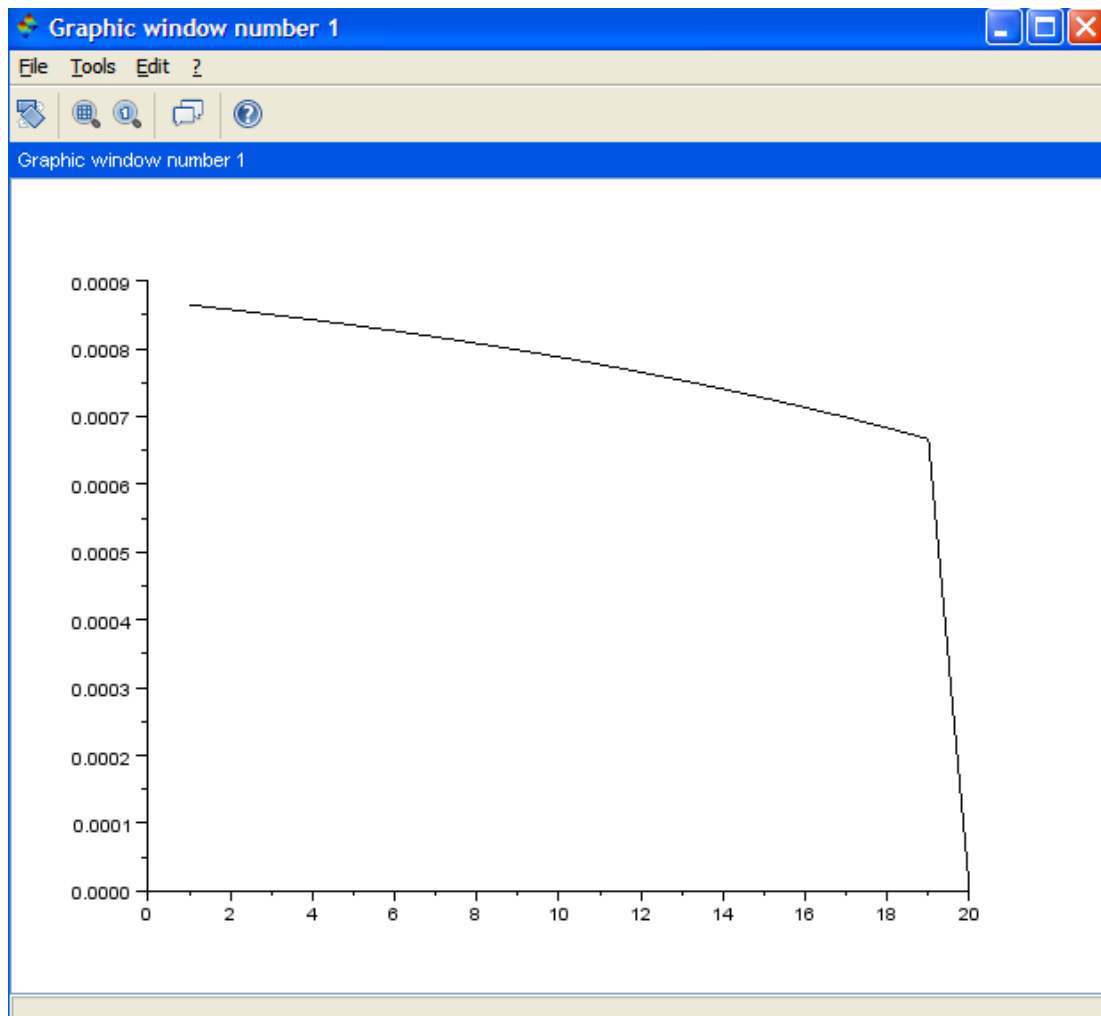


Figura 4. Variația concentrației în faza solidă

În figura 5 este reprezentată curba concentrației de SO_2 care iese din reactor. Pe axa x este reprezentat timpul și pe axa y este reprezentată concentrația de gaz.

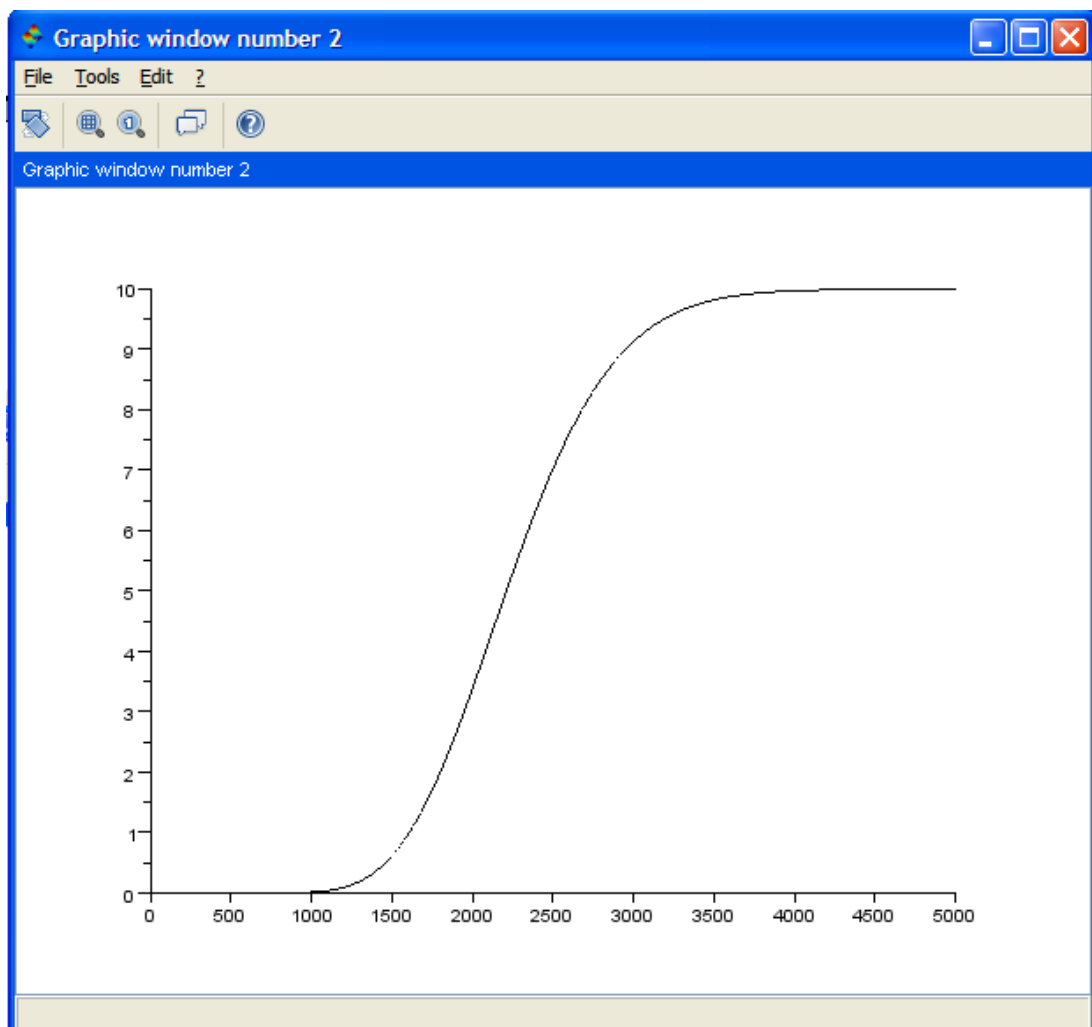


Figura 5. Concentrația de SO_2 la ieșirea din filtrul ceramic

Experimentele au fost realizate pe o instalație de testare din Ecole de Mines de Douai, Franța, care simulează condițiile reale dintr-un incinerator industrial. S-a calculat concentrația normalizată de SO_2 în patru experimente făcute pentru diverse alegeri ale cantităților de nisip și Na_2CO_3 . Au fost calculate concentrațiile normalizate de SO_2 folosind soluția numerică obținută cu programul Scilab precum și soluția analitică aferentă modelului Bohart Adams pentru toate cele patru experimente [3].

Au fost făcute comparații între măsurătorile efectuate în laborator și rezultatele obținute cu cele două metode menționate mai sus. S-a ținut cont că soluția analitică a fost considerată numai în cazul când dispersia este neglijată.

5. Concluzii

În articol a fost prezentată modelarea procesului real de tratare a gazului de ardere SO_2 rezultat în urma arderilor unor deșeuri într-un incinerator experimental cu ajutorul modelului Bohart Adams. Pe baza acestui model a fost realizată o simulare a procesului cu ajutorul programului Open Source Scilab. Au fost prezentate pe scurt câteva caracteristici ale Scilab și versiuni ale acestuia.

Au fost prezentate apoi câteva rezultate ale simulării procesului fizic ce constau în variația concentrației SO_2 în faza gazoasă, variația concentrației SO_2 în faza solidă și concentrația SO_2 la ieșirea din filtrul ceramic. Această simulare a fost comparată cu experimente realizate pe o instalație experimentală. Experimentele au arătat că în multe cazuri soluția analitică aproximează

mai bine valorile obținute ca rezultat al măsurătorilor făcute în laborator. Soluția numerică dă de asemenea rezultate bune, dar nu este stabilă. Rezultatele obținute cu ajutorul soluției analitice necesită însă un efort mult mai mic.

În concluzie, simularea numerică oferă rezultate ale concentrației de SO_2 apropiate de rezultatele obținute în realitate.

Cercetarea a fost realizată de către autoarea acestui articol, în Departamentul de Chimie și Mediu al "Ecole des Mines de Douai", Franța în cadrul unei burse ERASMUS [3].

BIBLIOGRAFIE

1. **CHU, K. H.:** Fixed bed sorption: Setting the record straight on the Bohart-Adams and Thomas models. *Journal of Hazardous Materials*, Volume 177, Issues 1-3, 2010, pp. 1006-1012.
2. **LE GLEAU, F.; CAILLAT, S. PEDRIX; E., GASNOT; L., GAMBIER, D.; PAUWELS, J-F.:** Comparative study of flue gas dry desulphurisation and SCR systems in an industrial hazardous waste incinerator. *Proceedings of the Third International Symposium on Energy from Biomass and Waste*, Venice, Italy; 8-11 November 2010.
3. **RĂDULESCU, D. M.:** Modelling of the flow in porous media with heterogeneous gas/solid reactions, Dissertation thesis in Master of Science in Environmental Management, ECOLE DES MINES DE DOUAI, 2011, Coordinators: Dr. Sébastien Caillat, Dr. Esperanza Perdrix, Prof. Dr. Ing. Gheorghe Lăzăroiu, Phd. Student Florent Le Gleau.
4. **RUTHVEN, D.M.:** Principles of Adsorption and Adsorption Processes, Wiley, New York, 1984.
5. **World Commission on Environment and Development (WCED),** 1987. Our common future (The Brundtland Report). Oxford University Press, Oxford, UK/<http://www.un-documents.net/our-common-future.pdf>
6. **WU, C.; KHANG, S-J.; KEENER, T. C.; LEE, S. K.:** A model for dry bicarbonate duct injection flue gas desulfurization. *Advances in Environmental Research*, Volume 8, Issues 3-4, March 2004.