

Математические, информационные и интеллектуальные технологии в энергетике

УДК 66.092-977

DOI:10.25729/ESI.2025.38.2.008

Валидация CFD-модели реактора пиролиза с использованием данных термогравиметрического анализа и масс-спектрометрии

Баденко Владислав Вадимович, Козлов Александр Николаевич,
Пензик Максим Владиславович

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН,
Россия, Иркутск, badenko@isem.irk.ru

Аннотация. В работе представлена CFD-модель слоевого реактора пиролиза биомассы. Входными данными для модели являются кинетические коэффициенты, полученные оригинальным численным методом на основе математической обработки термогравиметрических и масс-спектрометрических кривых пиролиза биомассы. Проведена валидация модели на основании экспериментальных результатов. Приведено описание используемой кинетической модели, механизмов тепло- и массопереноса. Разработанная модель характеризуется коэффициентами детерминации 0.82-0.85 по отношению к экспериментальным данным, и показывает наилучшую сходимость при температурной программе, нацеленной на выдержку при 480°C. Разработанная модель может применяться при масштабировании реакторов пиролиза.

Ключевые слова: CFD-моделирование, пиролиз, кинетика, биомасса

Цитирование: Баденко В.В. Валидация CFD-модели реактора пиролиза с использованием данных термогравиметрического анализа и масс-спектрометрии / В.В. Баденко, А.Н. Козлов, М.В. Пензик // Информационные и математические технологии в науке и управлении, 2025. – № 2 (38). – С. 90-102. – DOI:10.25729/ESI.2025.38.2.008.

Введение. В связи с мировыми тенденциями интенсификации исследований эффективного использования углеродсодержащего сырья в рамках четвертого энергетического перехода [1], большой интерес привлекают технологии термохимической конверсии альтернативных энергоносителей, таких, как биомасса [2]. Под биомассой подразумеваются отходы лесопромышленного и агропромышленного комплексов, а также твердые коммунальные отходы. Такое сырье может быть преобразовано в полезные горючие газы, жидкости и твердое топливо с помощью термохимической конверсии. Термохимическая конверсия – это способ преобразования биоресурсов в энергоемкое топливо путем пиролиза, сжижения и газификации. Вследствие этого основным объектом исследований становятся опытные установки различных размеров по газификации и пиролизу [3].

Одним из целевых продуктов пиролиза является синтез-газ (или генераторный газ), основными горючими компонентами которого являются водород, монооксид и диоксид углерода, метан и другие углеводороды. Такой газ может применяться, как горючее топливо или как сырье в химической промышленности. Также при проведении пиролиза наблюдается большой выход твердых продуктов. При пиролизе лигноцеллюлозной биомассы твердый продукт принято называть биоуглем [4]. Такой биоуголь может применяться в качестве топлива. Эффективность получаемого продукта сильно зависит от наличия нежелательных примесей, например, смолы.

В целях повышения эффективности эксплуатации установок по пиролизу твердого топлива активно исследуются процессы, протекающие внутри опытных установок. Эти знания являются основой для контроля и оптимизации производственных процессов, а также для разработки устойчивых методов производства энергии и топлив. Поэтому, наряду с экспериментом, математические модели являются важными инструментами для описания

пиролиза. С помощью этого инструмента можно оценить влияние нескольких параметров на выход целевого продукта или вносить изменения в разрабатываемые установки.

Выбор математической модели для расчета процесса пиролиза определяется целями исследования. Чем выше комплексность модели, тем больше она подходит для поиска оптимальной организации процесса. Существуют различные виды численного и нечислового моделирования, от самых простых, таких, как нульмерное моделирование, до наиболее сложных, трехмерных. Модели, наиболее часто описываемые в научной литературе, включают моделирование термодинамического равновесия, кинетическое моделирование, моделирование вычислительной гидродинамики (CFD – computational fluid dynamics) [5]. Математическое описание процесса пиролиза биомассы обычно основано на законах тепло- и массопереноса, законах энергии и принципе сохранения импульса.

Результаты моделирования, полученные в ходе исследования, дают информацию для понимания физико-химических процессов, происходящих в реакторе, что облегчает проектирование, строительство и оптимизацию оборудования для пиролиза в будущем.

Кинетические данные пиролиза биомассы часто получают с помощью термогравиметрического анализа (ТГА), совмещенного с масс-спектрометрией, поскольку образец можно исследовать при различных условиях конверсии (давление, размер частиц, скорость нагрева, концентрация газа-реагента, температура) [6]. Данные термогравиметрических и масс-спектрометрических исследований могут быть использованы, как входные данные для моделирования.

Основной целью этого исследования является применение численных методов и математического моделирования для описания реактора пиролиза биомассы. Используемый подход верифицируется на основании сравнения расчетных данных и экспериментального исследования и позволяет сделать выводы по оптимизации процесса.

2. Материалы и методы.

2.1. Описание исследуемого топлива. Исследование проводилось на образцах лигноцеллюлозной биомассы – древесной щепы (сосна), с примерным размером частицы в 30 мм x 10 мм x 10 мм.

Технические характеристики и данные элементного анализа образца щепы приведены в таблице 1. Характеристики исходной древесины определялись с помощью стандартных аналитических методов – ASTM E871, D1102 - 84 (2013), E872 и сопоставимы с данными, полученными другими исследователями [7]. Данные о содержании С и Н в образцах получены с помощью элементного анализатора ThermoFinnigan Flash EA 1112 (Италия).

Теплотворная способность (Q , МДж/кг) была рассчитана по данным элементного анализа в соответствии с уравнением Чаннивалы [8] (1), где С, Н, S, О, N, А – содержание химических элементов и золы в топливе, %.

$$Q = 0.349C + 1.1783H + 0.1005S - 0.1034O - 0.0151N - 0.0211A \quad (1)$$

Таблица 1. Физико-химические характеристики исследуемой биомассы

Технический анализ, %	
Выход летучих	86.80
Доля углерода в нелетучем остатке	13.03
Зольность	0.17
Элементный анализ, %	
С	46.60
Н	6.32
О	47.08
Q (МДж/кг)	18.84

2.2. Термогравиметрическое исследование. Для математического моделирования и численных методик помимо проведения непосредственно эксперимента необходимо термогравиметрическое и масс-спектрометрическое исследование исходной биомассы. Эти данные необходимы для анализа поведения образца в условиях термического воздействия и описания кинетики.

Было проведено термогравиметрическое исследование, совмещенное с масс-спектрометрией при различных скоростях нагрева на приборе термического анализа STA 449 F1 Jupiter. Результаты термогравиметрического исследования приведены на рисунках 1 и 2. Рисунок 2 носит демонстрационный характер, так как в расчетах участвовали кривые масс-спектров для четырёх скоростей нагрева и в каждом случае анализировались кривые для каждого массового числа.

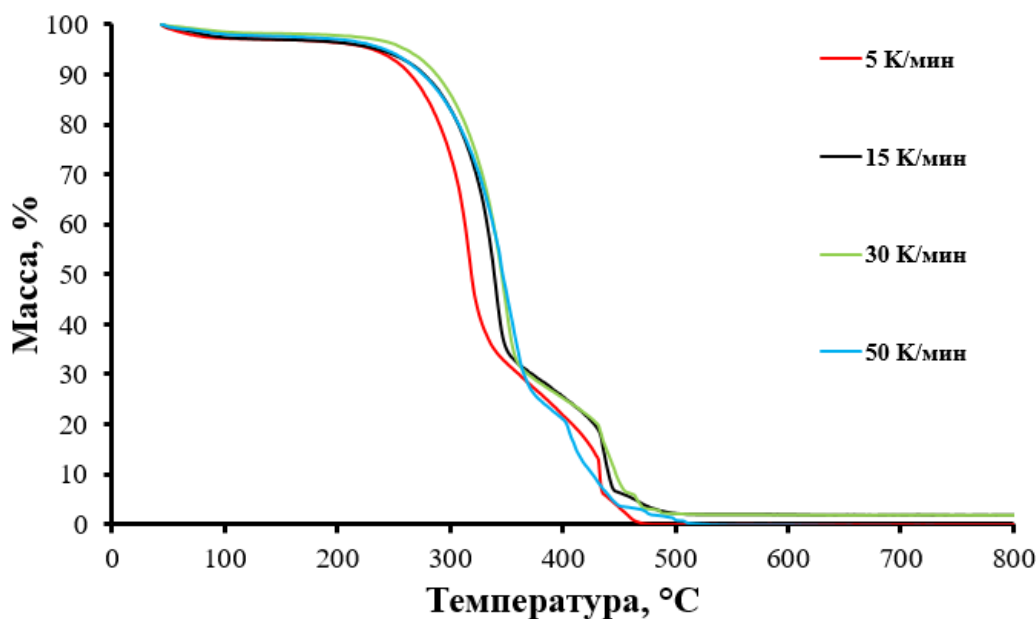


Рис.1. Данные термогравиметрического исследования образцов биомассы

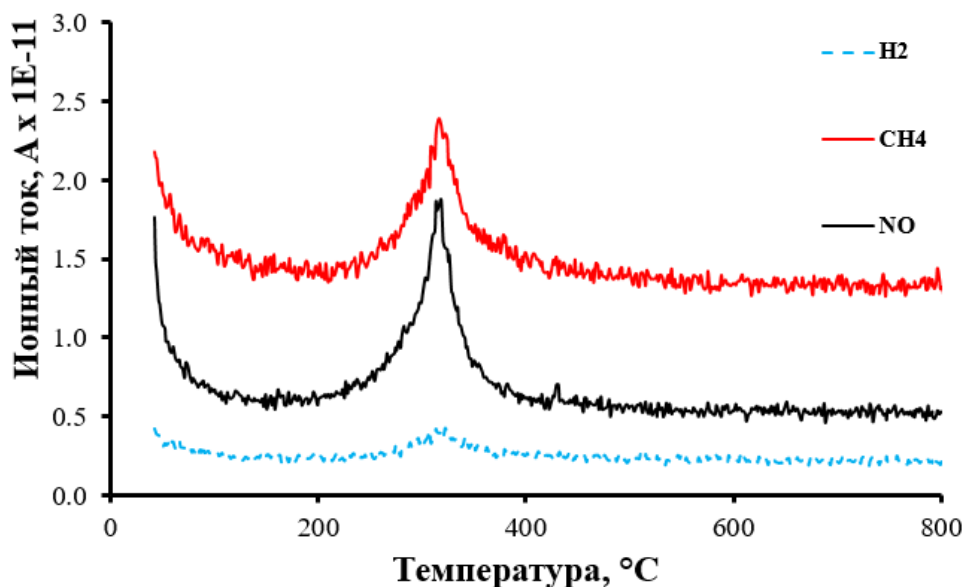


Рис.2. Данные масс-спектрометрии при термогравиметрическом исследовании образцов биомассы

Полученные данные были использованы для кинетического анализа, приведенного в п.2.5.

2.3. Экспериментальное исследование биомассы в условиях пиролиза. Было проведено экспериментальное исследование биомассы на лабораторной установке – слоевом реакторе пиролиза. В состав реактора входит решетка, электронагреватели, изоляционная рубашка и термопары в качестве аналитического элемента. Форма реактора – цилиндрическая. Габариты реактора – 31 см в высоту, внутренний диаметр – 15 см, промежуток от дна реактора до решетки – 5 см. На рисунке 3 приведена принципиальная схема реакторной зоны установки. В электронагревателях используется нихромовая проволока и керамические изоляторы. Управление нагревом производится при помощи термоконтроллера и регулятора напряжения. Изоляционная рубашка выполнена из стеклокерамических волокон. Выходная труба для газообразных продуктов не снабжена изоляцией – это необходимо для конденсации некоторых продуктов и их возвращения в реакционную зону для крекинга. Всего в установке четыре термопары, две из них расположены в слое (T1, T1'), одна над слоем (T2) и одна возле отверстия для забора газа (T3). Также установка оборудована дифференциальным манометром для измерения давления.

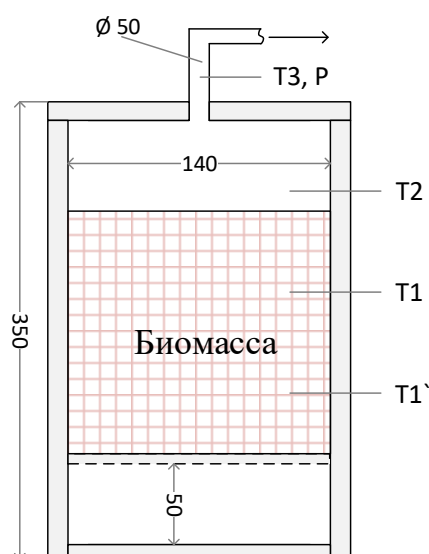


Рис.3. Принципиальная схема слоевого реактора пиролиза

Время окончания эксперимента определяется по отсутствию изменений в показаниях газового счетчика и снижению избыточного давления до значения, недостаточного для продвижения получаемого газа из реактора в газовый хроматограф. Температурная программа эксперимента состоит из двух шагов – постепенное нагревание при скорости нагрева 10° С/мин и выдерживание при определенной температуре. Данные о результатах эксперимента приведены в таблице 2. Теплотворная способность была рассчитана согласно (1).

Таблица 2. Экспериментальные данные пиролиза древесной биомассы

Входные данные	Температура, °С	480
	Масса навески, кг	0,465
Выходные данные	H ₂ , %	9,56
	CO, %	30,71
	CH ₄ , %	21,69
	CO ₂ , %	37,24
	Q, МДж/кг	12,69
	Выход твердого остатка, %	30,0
	Выход жидких продуктов, %	29,9
	Выход газа, %	17,6

Анализ компонентного состава полученного газа определялся с помощью газового хроматографа INFICON Micro GC Fusion, работающего в онлайн режиме. Отбор проб проводился каждые 3 минуты. Максимальные показатели теплотворной способности на экспериментальной установке достигались при температуре 480°C, поэтому для моделирования используются именно эти данные. Идентификация ионов, испускаемых квадрупольным масс-спектрометром, является классификационной задачей и заключается в сопоставлении отношения заряда к массе со стандартизированными библиотеками. Применение такого подхода возможно благодаря воспроизводимости таких спектров. Таким образом, сигналы ионных токов для анализируемых соотношений m/z были соотнесены как: 2 m/z – H_2 , 15 m/z – CH_4 , 18 m/z – H_2O , 30 m/z – NO , 44 m/z – CO_2 .

2.4. Описание расчетной сетки. Результаты анализа исходной биомассы, термогравиметрического (совмещенного с масс-спектрометрией) исследования и экспериментов на опытной установке были использованы в качестве входных данных для математической модели. Математическая модель представляет собой задачу вычислительной гидродинамики и решается в рамках заданной расчетной сетки. Создание расчетной сетки – процесс разбиения геометрической модели опытной установки на малые участки. В этих участках создается конечное число точек, именуемых узлами, в рамках которых решается комплекс заданных уравнений. Чем выше плотность узлов в сетке, тем выше точность получаемого результата. Однако, высокая точность неизбежно приводит к увеличению расчетного времени. Поэтому расчетная сетка должна быть сбалансирована относительно точности и времени расчета.

Используемая в работе сетка состоит из 201055 узлов и 851878 элементов. Общий объем сетки составил 0,0093 м³.

Для стенок реактора пиролиза была задана величина грани элемента сетки в 0,008 м. Такой подход связан с тем, что для металлических конструкций в реакторе детальное моделирование не требуется. Колосниковая решетка реализована, как пластина с отверстиями, осуществляющими подвод газа к засыпке. Для засыпки реализована более подробная сетка, с размером грани в 0,0003 м. На рисунке 4 представлен вид расчетной сетки.

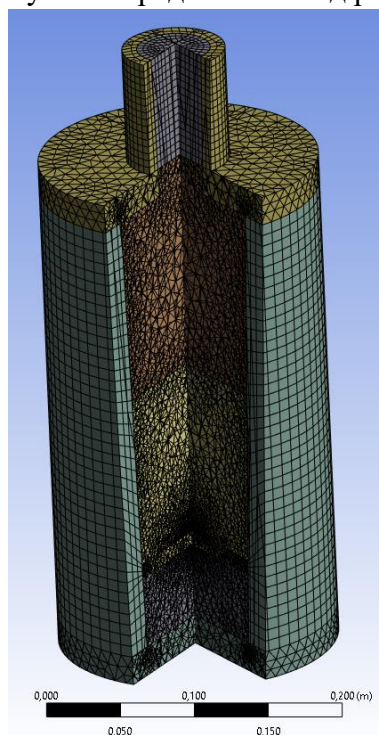


Рис. 4. Вид расчетной сетки

2.5. Описание кинетической модели. Входными данными для математического моделирования являются результаты расчетов, полученных с помощью оригинального численного метода, описанного в предыдущей работе [9,10]. Оригинальность метода заключается в корреляции данных термического анализа и масс-спектрометрии при расчетах кинетических параметров реакций выделения газообразных продуктов конверсии. Метод предполагает учет нелинейных эффектов и более комплексную оценку кинетики процесса.

Ввиду высокой сложности изучаемых процессов термохимической конверсии, при моделировании применяются различные аппроксимации. Исползованный метод содержит несколько приближений, влияющих напрямую на кинетические коэффициенты. Так, предполагается первый порядок реакции образования целевого газообразного продукта. Также, вычисляемая энергия активации представляет собой эффективную или кажущуюся энергию активации, так как исследуется укрупненный механизм кинетических реакций. При математическом моделировании также применяется допущение о первом порядке реакции, так как в условиях реального процесса невозможно отделить различные реакции и отделить их скорости. Результаты расчетов кинетических коэффициентов приведены в таблице 3.

Таблица 3. Кинетические коэффициенты для модельных реакций образования газообразных компонентов

	H ₂	CH ₄	NO	CO ₂
E _a , кДж/моль	20.0	34.0	44.7	101.0
A, 1/с	3.10E-04	6.80E-05	2.40E-05	2.10E-06

Кинетические коэффициенты применяются в уравнении Аррениуса (2) для расчета константы скорости реакции:

$$k = A \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) f(\alpha) \quad (2)$$

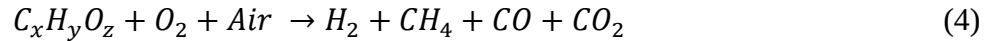
где $f(\alpha)$ – функция описания. Функция $f(\alpha)$ описывает порядок реакции и ее механизм и в качестве приближения может быть опущена или принята за константу. Размерность константы скорости реакции принята за 1/с, то есть соблюдается допущение о первом порядке реакции. Также, в моделировании часто вводится модификация уравнения Аррениуса, заключающаяся в дополнительном множителе T^θ . Степень в этом множителе в данной работе принимается как 1, однако, для более сложных моделей может иметь иные значения.

При расчете массовой доли для каждого компонента газовой смеси использовалась система уравнений (3) конвекции-диффузии на основе диссипативной модели [11,12]:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \vartheta_{i,r} M_i \xrightarrow{k_{f,r}} \sum_{i=1}^N \vartheta_{i,r} M_i \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i \\ \vec{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i - D_{i,T} \frac{\nabla T}{T} \\ R_{i,r} = \vartheta_{i,r} M_i C_1 C_2 \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_p Y_p}{\sum_j \vartheta_{j,r} M_j} \end{aligned} \quad (3)$$

где M – вещество, q – стехиометрический коэффициент, k – константа скорости, Y – концентрация, ρ – плотность (кг/м³), J – диффузионный поток (кг/м²·сек), D – коэффициент массовой диффузии (м²/с), C_1 и C_2 – константы турбулентной модели, μ – турбулентная вязкость (Па·с), Sc – число Шмидта (взято за 0.7), R_i – молярная скорость образования, ε – переменная перемешивания.

В моделировании была предложена обобщенная кинетическая реакция (4) для взаимодействия в газовой фазе, не учитывающая смолы, сажу и выделяющая только несколько газовых продуктов (соответствующих основным компонентам синтез-газа) в качестве приближения:



где *Air* обозначает имеющийся в реакторе на момент эксперимента воздух.

2.6. Описание модели тепло и газо-переноса. Энтальпия для участвующих в моделировании материалов описывается как [13]:

$$\begin{aligned} H &= h + \Delta H \\ h &= h_{ref} + \int_{T_{ref}}^T c_p dT \\ E &= h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \end{aligned} \quad (5)$$

где h_{ref} , T_{ref} – начальные значения энтальпии и температуры, c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении (Дж/кг·°C), E – тепловая энергия (Дж).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot (k^c_j \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\vec{\tau} \cdot \vec{v})) + S_h \quad (6)$$

где k^c – теплопроводность (Вт/м·°K), J – диффузионный поток для компонента j в смеси газов, v – скорость (м/с), S_h – тепло от химических реакций и внешних источников (Дж), p – давление (Па), ρ – плотность.

Общее описание скоростей базируется на уравнении неразрывности и уравнениях Навье-Стокса [14]:

$$\begin{cases} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \\ v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} - \nu \Delta v_x + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \\ v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} - \nu \Delta v_y + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (7)$$

где ρ – плотность жидкости, ν – коэффициент кинематической вязкости, p – гидродинамическое давление, v_x и v_y – продольная и поперечная компоненты вектора скорости.

Слой древесной щепы предполагается, как пористая среда, через которую проходит поток газа. В работе используется описание среды со следующими предположениями: размер частиц однороден, пористость изотропна во всей засыпке, твердая и газовая фазы в одной ячейке находятся в тепловом равновесии, газовая смесь состоит из воздуха и подчиняется закону идеального газа. Для моделирования стационарного течения жидкости внутри пористого слоя используется модель турбулентности переноса напряжения сдвига Ментера (Menter's Shear Stress Transport) [15], состоящая из двух уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j k)}{\partial x_j} &= P - \beta \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \\ \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \omega)}{\partial x_j} &= \frac{\gamma}{\nu_t} P - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F) \frac{\partial \rho \sigma}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (8)$$

где σ , β – корректировочные константы, P и F – функции, μ – вихревая вязкость.

Использование *SST* связано с тем, что она использует модели k - ω и k - ϵ в зависимости от геометрически заданных условий, переключаясь между моделированием свободного потока и пограничными слоями и применяя соответствующее уравнение.

3. Результаты и обсуждение. Использование математических моделей предполагает их валидацию на физическом эксперименте. На рисунке 5 представлено сравнение

моделируемых профилей температуры в точках, аналогичных расположению термодпар в реакторе – в слое биомассы, над слоем и в выходном газоходе. В экспериментальной установке в слое установлено две термодпары, для моделирования их сигналы были усреднены в качестве приближения, так как более детальное моделирование слоя биомассы требует значительного усложнения модели и предполагается в будущих исследованиях. В силу того, что при моделировании были использованы аппроксимации, расчетные и экспериментальные кривые не совпадают полностью, вследствие чего требуется статистическая оценка.

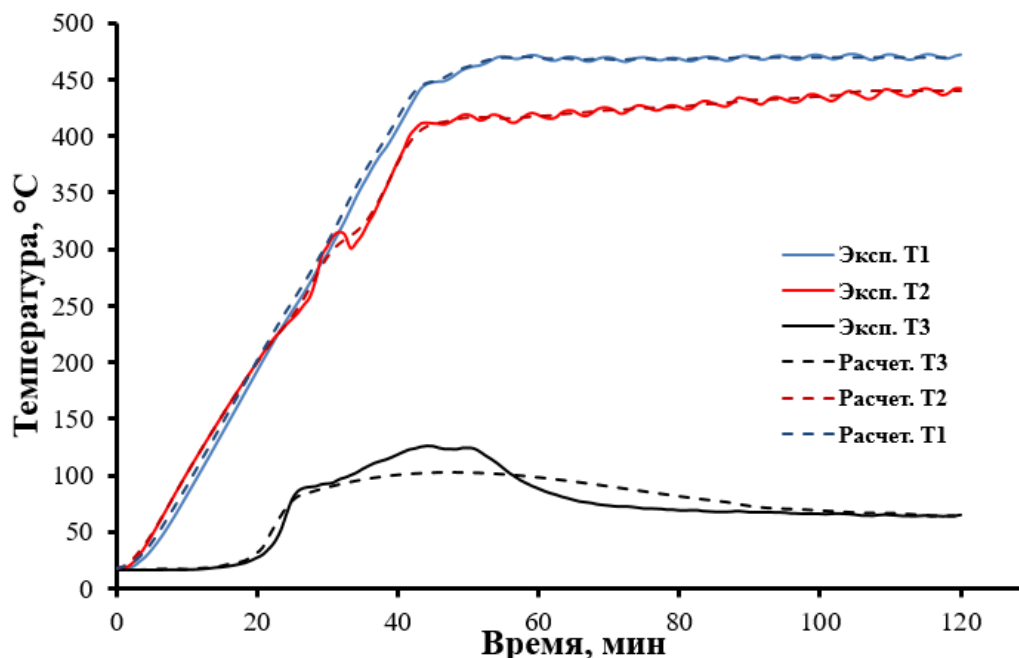


Рис. 5. Результаты моделирования температуры в реакторе и экспериментальные значения

Сравнение расчетных и экспериментальных данных было проведено с использованием критерия Фишера, выраженного в сравнении двух дисперсий:

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}$$

$$F = \frac{S_a^2}{S_b^2} \quad a > b \quad (9)$$

где S^2 – дисперсия выборки, n – объем выборки, F – критерий Фишера. Рассчитанный критерий сравнивался с табличным значением для степени свободы $k=n-1=145$ и степени значимости 0,05.

Результат статистической обработки для трех пар кривых приведен в таблице 3.

Таблица 3. Результат расчета критерия Фишера и коэффициента достоверности для расчетных термограмм.

Термопара/расчетная кривая	T ₁	T ₂	T ₃
Рассчитанный критерий F	1.001	1.003	1.246
Табличный критерий F	1.21		
Коэффициент достоверности аппроксимации	0.999	0.999	0.885

Из таблицы следует, что температурное моделирование можно считать корректным для слоя биомассы и газовой фазы над слоем. Распределение температуры на выходе из реактора не совпадает с экспериментальным. Это обусловлено влиянием смолы, опускаемой в моделировании в качестве приближения, и другими неучтенными эффектами. Такое расхождение можно охарактеризовать как систематическую погрешность. В связи с этим, в

температурную программу вводятся поправочные коэффициенты, учитывающие этот эффект с привязкой по времени. Таким образом, вводится дополнительное нагревание на 10°C в интервале 28-60 минут после начала эксперимента.

На основании комплексной модели и кинетических коэффициентов были получены расчетные зависимости концентрации от времени, представленные на рисунках 6 и 7 в сравнении с нормализованными концентрациями из эксперимента.

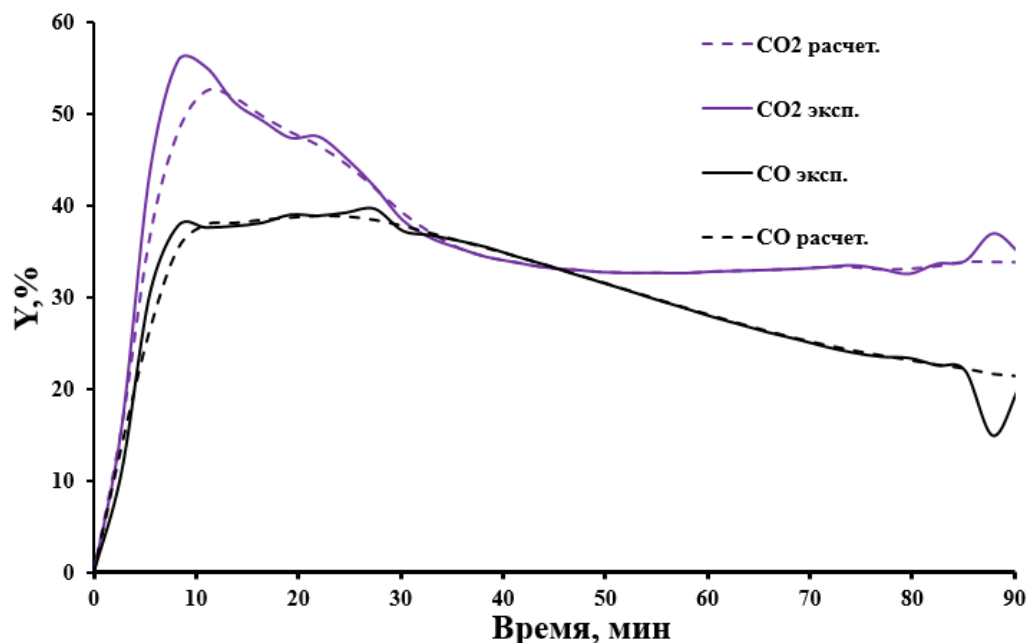


Рис. 6. Сопоставление результатов моделирования и экспериментальных значений по образованию CO и CO₂ при пиролизе биомассы

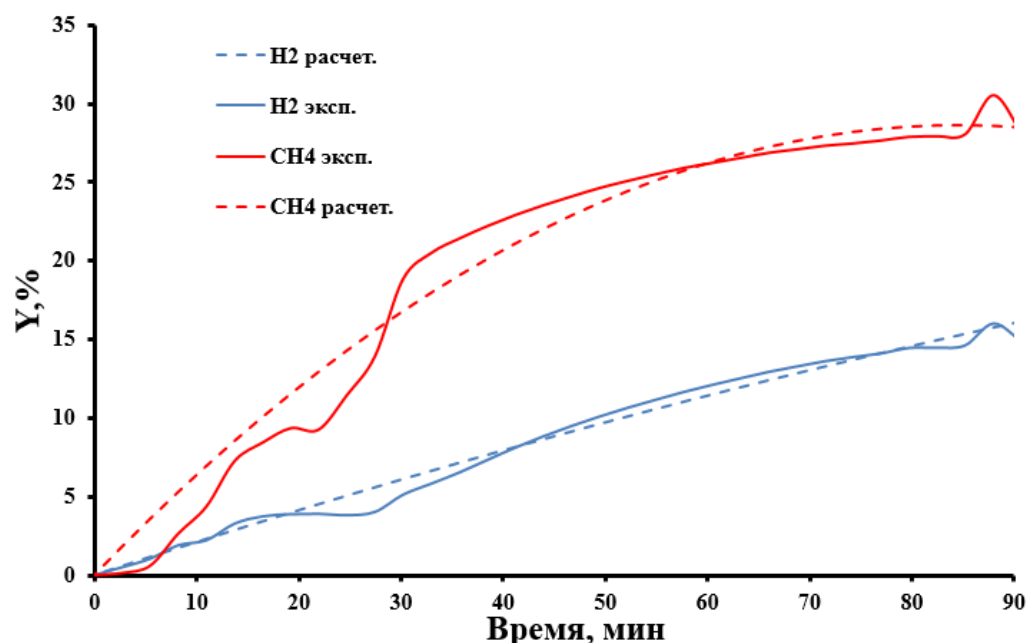


Рис.7. Сопоставление результатов моделирования и экспериментальных значений по образованию H₂ и CH₄ при пиролизе биомассы

Расчетные кривые за счет принятых допущений и упрощенного кинетического механизма очень гладкие. Модельные кривые обладают коэффициентами детерминации в диапазоне 0.82-0.85, однако, этого достаточно для использования в прогнозировании. В

литературных источниках состав получаемого в ходе пиролиза газа варьируется в зависимости от сырья, конструкции реакторной зоны и температурных программ. Полученные данные сопоставимы как с экспериментальными данными [16-18], так и с различными CFD-моделями [19].

Заключение. На основе оригинального численного метода для получения входных данных, экспериментальных данных и CFD-моделирования были получены температурные профили и зависимости концентраций компонентов синтез-газа. Валидация модели была проведена с помощью статистического критерия Фишера и коэффициента достоверности аппроксимации. Разработанная модель характеризуется коэффициентами детерминации 0.82-0.85 по отношению к экспериментальным данным, однако, показывает наилучшую сходимость только при температурной программе, нацеленной на выдержку при 480°C. Применение модели и численного метода в дальнейших исследованиях позволит подобрать режимы работы реактора пиролиза с целью получения условий, обеспечивающих максимальный выход биоугля и синтез-газа с максимальной теплотворной способностью при минимальном образовании смолы, а также для масштабирования опытных установок пиролиза.

Благодарности. Работа выполнена в рамках проекта государственного задания (№ FWEU-2021-0005) программы фундаментальных исследований РФ на 2021-2030 гг. с использованием ресурсов ЦКП «Высокотемпературный контур».

Список источников

1. Amoah A., Amoah B., Kwablah E. et al. Renewable energy transition and climate finance nexus in sub-Saharan Africa. *Global environmental change advances*, 2025, vol. 4, DOI: 10.1016/j.gecadv.2025.100013.
2. Adeleke A., Ikubanni P., Orhadahwe T. et al. Sustainability of multifaceted usage of biomass: a review. *Heliyon*, 2021, vol. 7, iss. 9, DOI: 10.1016/j.heliyon.2021.e08025.
3. Прогноз развития энергетики мира и России 2019 / под ред. А.А. Макарова, Т.А. Митровой, В.А. Кулагина // ИНЭИ РАН–Московская школа управления СКОЛКОВО. – Москва, 2019. – 210 с.
4. Ebrahimi M., Gholipour S., Mostafaii G. et al. Biochar-amended food waste compost: A review of properties. *Results in engineering*, 2024, vol. 24, DOI: 10.1016/j.rineng.2024.103118
5. Bournet P., Rojano F. Advances of Computational Fluid Dynamics (CFD) applications in agricultural building modelling: research, applications and challenges. *Computers and electronics in agriculture*, 2022, vol. 201, DOI: 10.1016/j.compag.2022.107277.
6. Moyo D., Mapossa A., Rademeyer M. et al. TGA investigation of the volatilisation of fipronil at elevated temperatures. *Thermochimica acta*, 2022, vol. 718, DOI: 10.1016/j.tca.2022.179379.
7. Sun Z., Xu B., Rony A.H. et al. Thermogravimetric and kinetics investigation of pine wood pyrolysis catalyzed with alkali-treated CaO/ZSM-5. *Energy conversion and management*, 2017, vol. 146, 182-194, DOI: 10.1016/j.enconman.2017.04.104.
8. Channiwala S.A., Parikh P.P. A unified correlation for estimating HHV of solid, liquid and gaseous fuels. *Fuel*, 2002, vol. 81, iss. 8, pp. 1051-1063, DOI: 10.1016/S0016-2361(01)00131-4.
9. Badenko V., Sosnovsky I., Kozlov A. et al. Kinetic and quantitative analysis of gaseous products of thermochemical biomass conversion based on thermogravimetric and mass-spectrometric data. *Biofuels, Bioprod. Bioref.*, 2024, vol. 18, iss. 5, pp. 1254-1266, DOI: 10.1002/bbb.2616.
10. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024611908 / В.В. Баденко, А.Н. Козлов, И.К. Сосновский. – Заявка № 2024610731. Дата поступления 16 января 2024 г. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 25 января 2025 г.
11. Goris Q., Bampouli A., Hussain M. et al. A new strategy for modelling sonochemical reactors: Coupling of the non-linear Louisonard model with mass and heat transport equations with applications to cavitating viscous fluids. *Ultrasonics Sonochemistry*, 2025, vol. 112, DOI: 10.1016/j.ultsonch.2024.107114.
12. Fathi M., Roekaerts D., Hickel S. Numerical simulation of transcritical multiphase combustion using real-fluid thermochemical and transport properties. *Combustion and flame*, 2025, vol. 275, DOI: 10.1016/j.combustflame.2025.114055.
13. Modi N., Wang X., Kumar V. et al. Impact of key parameters on the numerical modelling of Phase-Changing phenomena in horizontal latent heat thermal energy storage. *Applied thermal engineering*, vol. 257, part C, 2024, DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2024.124419.

14. Сумбатян М.А. Итерационный метод для уравнений Навье-Стокса в задаче обтекания тонкой пластинки потоком вязкой несжимаемой жидкости / М.А. Сумбатян, Я.А. Бердник, А.А. Бондарчук // Вестн. Томск. гос. ун-та. Матем. и мех., 2020. – № 66. – 132-142. DOI: 10.17223/19988621/66/11.
15. Menter F.R., Kuntz M., Langtry R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model. Turbulence, heat and mass transfer, Begell House, Inc., 2003, vol. 4, pp. 625-632.
16. Chen T., Ku X., Li T. et al. High-temperature pyrolysis modeling of a thermally thick biomass particle based on an MD-derived tar cracking model. Chemical engineering journal, 2021, vol. 417, 127923, DOI: 10.1016/j.cej.2020.127923.
17. Matamba T., Tahmasebi A., Yu J. et al. A review on biomass as a substitute energy source: Polygeneration influence and hydrogen rich gas formation via pyrolysis. Journal of analytical and applied pyrolysis, 2023, vol. 175, 106221, DOI: 10.1016/j.jaap.2023.106221.
18. Yang H., Cui Yu., Han T. et al. High-purity syngas production by cascaded catalytic reforming of biomass pyrolysis vapors. Applied Energy, 2022, vol. 322, DOI: 10.1016/j.apenergy.2022.119501.
19. Mlonka-Mędrala A., Evangelopoulos P., Sieradzka M. et al. Pyrolysis of agricultural waste biomass towards production of gas fuel and high-quality char: Experimental and numerical investigations. Fuel, 2021, vol. 296, 120611, DOI: 10.1016/j.fuel.2021.120611.

Баденко Владислав Вадимович. Инженер-исследователь, аспирант отдела теплоэнергетических систем ИСЭМ СО РАН. Основные направления исследований - термохимическая конверсия биомассы, численное моделирование процессов горения и комбинированные энергетические установки для разложения биомассы. AuthorID: 1186521, SPIN: 5115-6229, ORCID: 0009-0007-0992-564X, badenko@isem.irk.ru, 664033, Россия, г. Иркутск, ул. Лермонтова 130.

Козлов Александр Николаевич. Кандидат технических наук, заведующий лабораторией термодинамики, отдел теплоэнергетических систем ИСЭМ СО РАН. Основные направления исследований - сжигание гетерогенных твердых топлив (биомасса, уголь) и разработка инженерных методов расчета процесса газификации. AuthorID: 217821, SPIN: 5451-8611, ORCID: 0000-0002-5983-5884, kozlov@isem.irk.ru, 664033, Россия, г. Иркутск, ул. Лермонтова 130.

Пензик Максим Владиславович. Кандидат технических наук, старший научный сотрудник лаборатории термодинамики, отдел теплоэнергетических систем ИСЭМ СО РАН. AuthorID: 599819, SPIN: 9045-8057, ORCID: 0000-0002-3544-9866, penzik@isem.irk.ru, 664033, Россия, г. Иркутск, ул. Лермонтова 130.

UDC 66.092-977

DOI:10.25729/ESI.2025.38.2.008

Validation of CFD model of pyrolysis reactor using thermogravimetric analysis and mass spectrometry data

Vladislav V. Badenko, Alexander N. Kozlov, Maxim V. Penzik

Melentiev energy systems institute SB RAS,

Russia, Irkutsk, badenko@isem.irk.ru

Abstract. The paper presents a CFD model of a bed reactor for biomass pyrolysis. The input data for the model are kinetic coefficients obtained by an original numerical method based on mathematical processing of thermogravimetric and mass spectrometric curves of biomass pyrolysis. Validation of the model on the basis of experimental results is carried out. The description of the used kinetic model, heat and mass transfer mechanisms is given. The developed model is characterized by coefficients of determination 0.82-0.85 with respect to the experimental data, and shows the best convergence at the temperature program aimed at exposure at 480°C. The developed model can be used for scaling of pyrolysis reactors.

Keywords: CFD modeling, pyrolysis, kinetics, biomass

Acknowledgements: The research was carried out under State Assignment Project (no. FWEU-2021-0005) of the Fundamental Research Program of Russian Federation 2021-2030 using the resources of the High-Temperature Circuit Multi-Access Research Center.

References

1. Amoah A., Amoah B., Kwablah E. et al. Renewable energy transition and climate finance nexus in sub-Saharan Africa. *Global environmental change advances*, 2025, vol. 4, DOI: 10.1016/j.gecadv.2025.100013.
2. Adeleke A., Ikubanni P., Orhadahwe T. et al. Sustainability of multifaceted usage of biomass: a review. *Heliyon*, 2021, vol. 7, iss. 9, DOI: 10.1016/j.heliyon.2021.e08025.
3. Makarova A.A., Mitrova T.A., Kulagina B.A. Prognoz razvitiya energetiki mira i Rossii 2019 [Forecast of energy development in the world and Russia 2019]. INEI RAN – Moskovskaya shkola upravleniya SKOLKOVO [INEI RAS, Moscow School of Management SKOLKOVO], Moscow, 2019, 210 p.
4. Ebrahimi M., Gholipour S., Mostafaei G. et al. Biochar-amended food waste compost: A review of properties. *Results in engineering*, 2024, vol. 24, DOI: 10.1016/j.rineng.2024.103118.
5. Bournet P., Rojano F. Advances of Computational Fluid Dynamics (CFD) applications in agricultural building modelling: research, applications and challenges. *Computers and electronics in agriculture*, 2022, vol. 201, DOI: 10.1016/j.compag.2022.107277.
6. Moyo D., Mapossa A., Rademeyer M. et al. TGA investigation of the volatilisation of fipronil at elevated temperatures. *Thermochimica acta*, 2022, vol. 718, DOI: 10.1016/j.tca.2022.179379.
7. Sun Z., Xu B., Rony A.H. et al. Thermogravimetric and kinetics investigation of pine wood pyrolysis catalyzed with alkali-treated CaO/ZSM-5. *Energy conversion and management*, 2017, vol. 146, 182-194, DOI: 10.1016/j.enconman.2017.04.104.
8. Channiwala S.A., Parikh P.P. A unified correlation for estimating HHV of solid, liquid and gaseous fuels. *Fuel*, 2002, vol. 81, iss. 8, pp. 1051-1063, DOI: 10.1016/S0016-2361(01)00131-4.
9. Badenko V., Sosnovsky I., Kozlov A. et al. Kinetic and quantitative analysis of gaseous products of thermochemical biomass conversion based on thermogravimetric and mass-spectrometric data. *Biofuels, Bioprod. Bioref.*, 2024, vol. 18, iss. 5, pp. 1254-1266, DOI: 10.1002/bbb.2616.
10. Badenko V.V., Kozlov A.N., Sosnovsky I.K. Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM no. 2024611908 [Certificate of state registration of computer program No. 2024611908]. [Zayavka no. 2024610731. Data postupleniya 16 yanvarya 2024 g. Zaregistrirovano v Reyestre programm dlya EVM 25 yanvarya 2025] Application No. 2024610731. Date of receipt January 16, 2024. Registered in the register of computer programs January 25, 2025.
11. Goris Q., Bampouli A., Hussain M. et al. A new strategy for modelling sonochemical reactors: Coupling of the non-linear Louissard model with mass and heat transport equations with applications to cavitating viscous fluids. *Ultrasonics Sonochemistry*, 2025, vol. 112, DOI: 10.1016/j.ultsonch.2024.107114.
12. Fathi M., Roekaerts D., Hickel S. Numerical simulation of transcritical multiphase combustion using real-fluid thermochemical and transport properties. *Combustion and flame*, 2025, vol. 275, DOI: 10.1016/j.combustflame.2025.114055.
13. Modi N., Wang X., Kumar V. et al. Impact of key parameters on the numerical modelling of Phase-Changing phenomena in horizontal latent heat thermal energy storage. *Applied thermal engineering*, Vol. 257, Part C, 2024, DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2024.124419.
14. Sumbatyan M.A., Berdnik Ya.A., Bondarchuk A.A. Iteratsionnyy metod dlya uravneniy Nav'ye-Stoksa v zadache obtekaniya tonkoy plastinki potokom vyazkoy neszhimayemoy zhidkosti [An iterative method for the Navier-Stokes equations in the problem of a viscous incompressible fluid flow around a thin plate], *Vestn. Tomsk. Gos. Univ. Mat. Mekh.* [Bulletin of Tomsk state university. Mathematics and mechanics.], 2020, no. 66, pp. 132-142, DOI: 10.17223/19988621/66/11.
15. Menter F.R., Kuntz M., Langtry R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model. *Turbulence, heat and mass transfer*, Begell House, Inc., 2003, vol. 4, pp. 625-632.
16. Chen T., Ku X., Li T. et al. High-temperature pyrolysis modeling of a thermally thick biomass particle based on an MD-derived tar cracking model. *Chemical engineering journal*, 2021, vol. 417, 127923, DOI: 10.1016/j.cej.2020.127923.
17. Matamba T., Tahmasebi A., Yu J. et al. A review on biomass as a substitute energy source: Polygeneration influence and hydrogen rich gas formation via pyrolysis. *Journal of analytical and applied pyrolysis*, 2023, vol. 175, 106221, DOI: 10.1016/j.jaap.2023.106221.
18. Yang H., Cui Yu., Han T. et al. High-purity syngas production by cascaded catalytic reforming of biomass pyrolysis vapors. *Applied Energy*, 2022, vol. 322, DOI: 10.1016/j.apenergy.2022.119501.
19. Mlonka-Mędrala A., Evangelopoulos P., Sieradzka M. et al. Pyrolysis of agricultural waste biomass towards production of gas fuel and high-quality char: Experimental and numerical investigations. *Fuel*, 2021, vol. 296, 120611, DOI: 10.1016/j.fuel.2021.120611.

Badenko Vladislav Vadimovich. Research engineer, postgraduate student of the Heat and Power Systems Department of ISEM SB RAS. Main research areas - thermochemical conversion of biomass, numerical modelling of combustion processes and combined heat and power plants for biomass decomposition. AuthorID: 1186521, SPIN: 5115-6229, ORCID: 0009-0007-0992-564X, badenko@isem.irk.ru, 664033, Russia, Irkutsk, Lermontova St., 130.

Kozlov Alexander Nikolaevich. Senior researcher (PhD) at the Department of Thermal Power Systems at ESI SB RAS. His research interests focus on heterogeneous solid fuel (biomass, coal) combustion and the design of simple engineering techniques for the calculation of the gasification process. AuthorID: 217821, SPIN: 5451-8611, ORCID: 0000-0002-5983-5884, kozlov@isem.irk.ru. 664033, Russia, Irkutsk, Lermontova St., 130.

Penzik Maxim Vladislavovich. Senior researcher (PhD) at the Department of Thermal Power Systems at ESI SB RAS. AuthorID: 599819, SPIN: 9045-8057, ORCID: 0000-0002-3544-9866, penzik@isem.irk.ru, 664033, Russia, Irkutsk, Lermontova St., 130.

Статья поступила в редакцию 19.03.2025; одобрена после рецензирования 21.04.2025; принята к публикации 24.04.2025.

The article was submitted 03/19/2025; approved after reviewing 04/21/2025; accepted for publication 04/24/2025.