

**UNIVERSITATEA „POLITEHNICA“ DIN TIMIȘOARA**

**FACULTATEA DE MECANICĂ**

617.600  
180 c

**Ing. Paul-Dan OPRIȘA-STĂNESCU**

**Studiul și modelarea fenomenelor de ardere  
cu aplicatie la arderea cărbunelui pulverizat  
în focarele cazanelor industriale.**

**- Teză de doctorat -**

**Conducător științific:**

**Prof. dr. ing. Cornel UNGUREANU**

BIBLIOTECA CENTRALĂ  
UNIVERSITATEA "POLITEHNICA"  
TIMIȘOARA

**Timișoara 1996**

Lucrarea „STUDIUL ȘI MODELAREA FENOMENELOR DE ARDERE CU APLICAȚIE LA ARDEREA CĂRBUNELUI PULVERIZAT ÎN FOCARELE CAZANELOR INDUSTRIALE“ a putut fi elaborată datorită climatului de emulare profesională și a asigurării condițiilor materiale la Catedra de Termotehnică și Mașini Termice a Facultății de Mecanică a Universității „Politehnica“ din Timișoara.

Autorul mulțumește pe această cale în primul rând conducătorului științific, Prof.dr.ing. Cornel Ungureanu pentru îndrumarea din punct de vedere științific, sprijinul neprecupețit pe care l-a acordat pe întreaga durată de elaborare a lucrării și încurajarea constantă în anumite momente dificile.

Autorul mulțumește în mod special d-nei Conf.dr.ing. Ioana Ionel, prin colaborarea căreia cu Universitățile Tehnice din München și Braunschweig s-a procurat cea mai mare parte din materialul necesar modelării producerii noxelor, pecum și o bună parte din baza materială.

De asemenea, autorul aduce mulțumiri tuturor colegilor de catedră pentru înțelegerea manifestată pe durata elaborării lucrării.

Mulțumiri deosebite datorează autorul d-lui Ș.l.ing. Romeo Resiga-Susan de la Catedra de Mașini Hidraulice, care a fost principalul său colaborator la dezvoltarea modelelor bazate pe metoda elementului finit și, fără contribuția căruia, autorul se îndoiește că ar fi putut progresa atât în acest domeniu.

Nu în ultimul rând autorul mulțumește soției sale pentru că a avut răbdare cu el în timpul redactării lucrării, perioadă care de obicei nu lasă loc altor ocupații.

În final, autorul aduce un gând pios memoriei mamei sale la a cărei dorință expresă s-a inițiat lucrarea de față.

Autorul.



## CUPRINS

|   | Pag. |
|---|------|
| 1. Scopul și obiectivele lucrării   | 7    |
| 1.1 Principalele fenomene care apar în focarele<br>generatoarelor de abur   | 8    |
| 1.2 Moduri de abordare ale calculului focarelor   | 10   |
| 1.3 Note și comentarii  | 12   |
| 2. Modele matematice ale fenomenelor din focare   | 16   |
| 2.1 Ecuații de bilanț   | 16   |
| 2.1.1 Ecuația de bilanț pentru masă   | 17   |
| 2.1.2 Ecuația de bilanț pentru impuls   | 17   |
| 2.1.3 Ecuația de bilanț pentru masele<br>speciilor chimice  | 19   |
| 2.1.4 Ecuația de bilanț pentru entalpie   | 21   |
| 2.2 Schimb de căldură și de masă  | 24   |
| 2.2.1 Difuzia moleculară  | 24   |
| 2.2.2 Modele ale curgerii turbulente  | 27   |
| 2.3 Transmiterea căldurii   | 31   |
| 2.3.1 Transmiterea căldurii prin conducție  | 31   |
| 2.3.2 Transmiterea căldurii prin convecție  | 32   |
| 2.3.3 Transmiterea căldurii prin radiație   | 33   |
| 2.4 Arderea combustibililor solizi  | 39   |
| 2.4.1 Devolatilizarea și arderea volatilelor  | 43   |
| 2.4.2 Arderea rezidului carbonos  | 50   |
| 2.5 Formarea noxelor  | 53   |
| 2.5.1 Formarea oxizilor de sulf   | 53   |
| 2.5.2 Formarea oxizilor de azot   | 60   |
| 2.6 Formulări variaționale  | 65   |
| 2.6.1 Formulări variaționale pentru mișcarea<br>potențială axial-simetrică a fluidului<br>nevâscos incompresibil                  | 66   |
| 2.6.2 Formulare variațională pentru descrierea<br>unei mișcări rotaționale cu ajutorul<br>funcției de curent                      | 68   |
| 2.6.3 Formulare variațională pentru conducția<br>căldurii   | 69   |
| 3. Metode de discretizare   | 71   |
| 3.1 Metode cu diferențe finite  | 71   |
| 3.1.1 Discretizarea ecuației Poisson<br>în coordonate carteziane  | 74   |
| 3.1.2 Discretizarea ecuației Poisson<br>în coordonate cilindrice  | 75   |
| 3.2 Metode cu elemente finite   | 77   |
| 3.2.1 Elementul izoparametric axial-simetric<br>pentru mișcarea potențială axial-simetrică<br>a fluidului nevâscos, incompresibil | 78   |
| 3.2.2 Elementul izoparametric axial-simetric<br>pentru curgeri cu recirculație  | 86   |

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 4.    | Rezolvarea problemelor de dimensiuni mari  | 88  |
| 4.1   | Reprezentarea matricilor în calculatoare   | 88  |
| 4.1.1 | Stocarea în memoria internă  | 88  |
| 4.1.2 | Stocarea pe suporturi de memorie externă   | 90  |
| 4.2   | Rezolvarea sistemelor de ecuații liniare   | 93  |
| 4.2.1 | Metode directe   | 93  |
| 4.2.2 | Metode iterative   | 95  |
| 4.3   | Transpunerea matricilor bandă  | 96  |
| 4.4   | Înmulțirea unei matrici bandă cu transpusa sa  | 97  |
| 4.5   | Generarea matricilor locale  | 101 |
| 4.6   | Asamblarea matricilor globale  | 101 |
| 4.7   | Prelucrarea matricilor stocate pe suporturi<br>de memorie externă                                    | 103 |
| 4.8   | Rețele de discretizare la metoda elementului finit   | 106 |
| 4.9   | Postprocesor grafic pentru trasarea<br>liniilor echiparametrice                                      | 107 |
| 5.    | Modelări numerice ale fenomenelor din focare   | 111 |
| 5.1   | Determinarea constantelor cinetice ale cărbunilor  | 111 |
| 5.2   | Modele cu diferențe finite   | 114 |
| 5.3   | Modele cu elemente finite  | 119 |
| 5.3.1 | Modelarea curgerii în focare axial-simetrice   | 119 |
| 5.3.2 | Modelarea câmpurilor de temperatură<br>în focare axial-simetrice                                     | 126 |
| 5.4   | Programul FEUER  | 131 |
| 5.4.1 | Implementarea programului FEUER 1.1<br>pe calculatoare compatibile IBM-PC                            | 131 |
| 5.4.2 | Modelarea cu programul FEUER 1.1<br>a proceselor de ardere la cazanul de 420 t/h<br>de la CET Oradea | 144 |
| 6.    | Cercetări experimentale  | 173 |
| 6.1   | Mijloace de măsurare a noxelor   | 173 |
| 6.2   | Măsurători pe instalații industriale   | 177 |
| 7.    | Concluzii  | 183 |
| 7.1   | Concluzii  | 183 |
| 7.2   | Contribuții originale  | 185 |
| 8.    | Bibliografie   | 188 |

## Anexa:

- Fișier de intrare pentru GEOM
- Fișier de intrare/ieșire condiții la limită pentru FEUER
- Fișier de intrare/ieșire mărimi de câmp pentru FEUER

## 1. SCOPUL ȘI OBIECTIVELE LUCRĂRII

Studiul și modelarea fenomenelor de ardere din focarele generatoarelor de abur este un domeniu care a prezentat întotdeauna interes. Dacă pâna în jurul anului 1980 accentul se punea pe aspectul energetic [1, 2, 3], scopul fiind valorificarea rezervelor de cărbuni inferiori din România, după acest moment pe plan mondial a apărut o nouă preocupare, reducerea emisiilor poluante (noxe), a emisiilor de oxizi de sulf ( $\text{SO}_2$  și  $\text{SO}_3$ ) și în special a emisiilor de oxizi de azot ( $\text{NO}$  și  $\text{NO}_2$ ). O trecere în revistă a situației în anul 1990 este prezentată în [4, 5].

Această tendință s-a accentuat după anul 1990. În 1993 a avut loc la Lisabona „A Doua Conferință Internațională despre Tehnologiile de Ardere pentru un Mediu înconjurător Curat”. Numărul mare de lucrări prezentate demonstrează largul interes pe plan internațional pentru problema reducerii formării noxelor în interiorul focarelor, chiar în timpul arderii. Numai cu privire la acest aspect au fost prezentate lucrări din Japonia [6], Germania [7, 8, 9, 10], Polonia [11], Italia [12], Grecia [13], Elveția [14], Spania [15], Anglia [16] și Portugalia [17].

Metodele de cercetare tradiționale, de tip „realizează și încearcă”, respectiv „unde se rupe, acolo trebuie întărit”, în domeniul generatoarelor de abur pe de o parte sunt prohibitive din punct de vedere al prețului de cost, iar pe de altă parte riscurile de accident sunt inacceptabile. Tendința actuală este de a simula fenomenele cu ajutorul calculatoarelor electronice și de a trage concluzii cu privire la oportunitatea realizării sau a cercetării concrete pentru varianta dată. Desigur, o asemenea concluzie se poate trage numai dacă nivelul cunoștințelor despre fenomenele respective este suficient și dacă există și posibilitatea instruirii (programării) unui calculator în aceste sens.

Dezvoltarea calculatoarelor a generat conceptele de proiectare asistată de calculator (Computer Aided Design - CAD), respectiv concepție asistată de calculator (Computer Aided Engineering - CAE). Dacă în decursul timpului rezolvarea calculelor ingineresti era considerat că aparține CAD, actual prin CAD se înțelege tot mai mult desenarea automată a proiectelor, folosind subsansamble din baze de date, iar calculele sunt considerate că aparțin CAE. Procedeele CAE au luat un mare avânt în modelarea câmpurilor prin metoda elementului finit (Finite Element Method - FEM), considerându-se că cca. 90 % din timpul de calcul în CAE este afectat în acest scop.

Totuși, metoda FEM este pusă la punct pentru un număr limitat de operatori. Metoda și-a găsit numeroase aplicații în domeniul rezistenței materialelor (structuri din bare, plăci și medii continue) și a câmpurilor potențiale (electrostatică, magneto-statică, curgeri potențiale, conducție termică).

Complexitatea fenomenelor din focare a atras atenția cercetătorilor asupra noilor posibilități apărute. În lucrările [18, 19 și 20] sunt prezentate monografiile ale modelărilor făcute.

În cadrul Universității Tehnice din Timișoara s-a pus problema dotării cu un instrument de predicție prin calcul a funcționării focarelor pentru arderea cărbunelui pulverizat, cu accent pe reducerea emisiilor de noxe și care să poată funcționa pe utilajul de calcul din dotare, respectiv gama de calculatoare de tip IBM-PC 286 - 486.

### **1.1 Principalele fenomene care apar în focarele generatoarelor de abur.**

Focarele generatoarelor de abur au ca scop organizarea procesului de degajare a energiei chimice a combustibililor în cursul unor reacții chimice de ardere, sub formă de căldură. Arderea combustibilului se face cu ajutorul oxigenului conținut în aerul atmosferic. În urma arderii, cea mai mare parte a combustibilului și a aerului de ardere se transformă în produse de ardere, care sunt substanțe chimice diferite de cele introduse inițial și care, de obicei, nu mai dispun de energie chimică încorporată. Astfel, după degajarea energiei chimice a combustibilului și valorificarea (extragerea) unei părți a ei produsele arderii trebuie evacuate din focar, iar ciclul reluat cu o nouă cantitate de combustibil și aer de ardere. Procesul este continuu, specific unei mașini termice deschise, deci implică un transport a mediului de lucru.

Modul curent de reprezentare a unei mișcări de transport este de la un potențial mai ridicat la unul mai scăzut [21]. Pentru curgerea gazelor acest potențial este presiunea. În focarele generatoarelor de abur rezistențele gazodinamice sunt mici, ca urmare diferențele de presiuni necesare mișcării sunt mici. Ordinul de mărime al acestor diferențe de presiune este dat de tirajul din focar, care este de câțiva mm coloană de apă, respectiv câțiva zeci de Pa. Aceste diferențe de presiune foarte mici permit să se considere că focarele lucrează la presiune constantă. Totodată deoarece în focare curgerile se fac la cifre  $Re$  foarte mari, mediul din focare poate fi considerat fluid ideal, nevâscos. Aceste ipoteze se pot admite pentru orice condiții de modelare a focarelor. În cazul curgerilor izotermice și fără reacții chimice densitatea gazelor rămâne constantă, ca urmare ecuațiile de mișcare sunt aceleași cu cele ale fluidelor incompresibile, nevâscoase. Pentru cazul curgerilor neizotermice, cu reacții chimice și schimb de căldură, din punct de vedere al curgerilor în focare este suficient să se ia în considerare doar influența masei volumice (densității)<sup>1</sup> [22].

Reacția de ardere a cărbunelui sub formă de praf are loc în suspensia produsă chiar de aerul necesar arderii. Acesta în timpul arderii își schimbă compoziția, trecând treptat în gaze de ardere, dar nu își pierde nici o clipă funcția de suspensie și transport a particulelor de praf de cărbune. Este evident că particulele de praf de cărbune au o viteză diferită de a curentului principal al fluidului de transport, și anume, mai mică, deoarece sunt antrenate.

Forțele care produc antrenarea sunt cele aerodinamice, ceea ce permite estimarea vitezei relative dintre particule și mediul de transport [23]. Pentru un mediu de transport staționar, particulele de praf de cărbune vor cădea liber. Din echilibrul forțelor de gravitație și rezistență aerodinamică rezultă viteze de cădere mici, de ordinul a câțiva metri pe secundă. Dacă mediul de transport este în mișcare pot apărea forțe de inerție suplimentare care acționează asupra particulelor, însă acestea nu duc la modificarea ordinului de mărime a vitezei relative. Mișcarea particulelor de praf de cărbune în mediul de transport are loc la cifre Re sub 100, ceea ce indică o simetrie sferică, cel mult ușor deformată [24], a fenomenelor în jurul particulelor<sup>2</sup>. Pe de altă parte, la nivelul focarului, cifra Re este de ordinul sutelor de mii, adică curgerea este perfect turbulentă, ceea ce amplifică transportul molecular, adică intensifică atât schimburile difuzive de substanță, cât și transmiterea căldurii prin conducție și convecție.

Arderea particulelor de praf de cărbune este un fenomen asupra căruia au influență două feluri de factori: factori chimici și fizici [1, 2, 3, 25, 26]. Factorii chimici se referă la tipurile de reactanți care intră în reacțiile chimice de ardere, concentrațiile și energiile necesare pentru intrarea lor în reacție, vitezele de reacție ale diverselor reacții chimice la diferite temperaturi, echilibrul reacțiilor chimice [27]. Factorii fizici se referă la posibilitatea de a atinge anumite concentrații de reactanți chimici inițiali, de a introduce în spațiul de lucru a unei energii necesare pornirii reacției, respectiv de a disipa energia degajată prin reacția chimică și de a disipa produsele reacțiilor.

Odată degajată energia combustibilului, aceasta se obține sub formă de energie termică, care se transmite în modurile cunoscute, prin conducție, convecție și radiație.

Transmiterea prin conducție este evident prezentă deoarece mediul de transport are o conductivitate termică [1, 2, 28, 29, 30, 31]. Conductivitatea termică a mediului de transport în sens clasic este însă foarte mică, de zeci și sute de milioane de ori mai mică decât cea necesară pentru evacuarea fluxului termic generat prin reacția de ardere (v. cap. 5.3.2), deci ponderea sa ar fi ne semnificativă. În realitate în mediul din interiorul focarelor generatoarelor de abur pe de o parte există un câmp termic foarte asemănător cu cel de conducție, iar pe de altă parte există un amestec turbulent foarte intens, care este asemănător cu agitația moleculară, ceea ce conduce la ideea că cel puțin o parte (semnificativă) din propagarea căldurii în mediul din focar poate fi explicată printr-un fenomen de conducție, evident ajustat, luându-se în considerare vâscozitatea turbulentă.

Transmiterea prin convecție este un fenomen care din principiu se referă la o frontieră a fluidului în discuție<sup>3</sup>. Această frontieră poate să fie solidă sau lichidă. Frontiera solidă se întâlnește în cazul pereților ce mărginesc focarul, depunerilor solide de pe pereții focarului, suprafața solidă a particulelor de cărbune și cenușă sau a diverselor substanțe solide introduse în focar ca aditivi. Frontiera lichidă se întâlnește în cazul pereților focarelor cu evacuarea zgurii în stare lichidă, a suprafeței băilor



de zgură la aceste focare, picăturilor de combustibil lichid și picăturilor de cenușă în suspensie, în stare lichidă. Evident, nu toate aceste cazuri au o importanță semnificativă, aspectele care prezintă interes sunt convecția la perete și influența ei la încălzirea particulei de combustibil solid în faza de devolatilizare și ardere a materiilor volatile.

Transmiterea prin radiație este un fenomen esențial în focarele generatoarelor de abur. Deoarece temperatura flăcării și a gazelor de ardere este înaltă, peste 1000 °C, și coeficienții de emisivitate ai flăcării (particulele de carbon incandescent) și a gazelor triatomice sunt mari<sup>4</sup> (în orice caz, nu sunt neglijabili) rezultă că fluxurile termice transmise în focar prin radiație au o pondere mare în transferul global de căldură. Între diverși autori există unele deosebiri de păreri cu privire la ponderea radiației la schimbările de căldură în focar<sup>5</sup>, dar radiația nu poate fi omisă, cu toate dificultățile create. Emisia și absorbția radiației de către gazele triatomice este un factor important în stabilirea distribuției temperaturilor în mediul din focar. Tot radiația trebuie să aibă o oarecare pondere la încălzirea particulei de combustibil solid în faza de devolatilizare și ardere a materiilor volatile.

Odată cu arderea apar însă multe fenomene nedorite, dintre care, cum s-a arătat mai sus, formarea noxelor este cea care prezintă cel mai mare interes actual. Din punctul de vedere al modelării fenomenelor din focare se impune o observație. Concentrațiile acestor poluanți se exprimă în ppm sau mg/m<sup>3</sup>N [32], iar valorile sunt cel mult de ordinul miilor. Dacă se admite că influența lor asupra termodinamicii fenomenelor din focare este proporțională cu concentrația lor (considerând căldurile de reacție de același ordin de mărime cu a altor reacții chimice) rezultă că variația temperaturilor, concentrațiilor de aer și combustibil și a vitezelor datorită formării noxelor este sub 1 %. Ca urmare este posibilă tratarea în două etape. În prima etapă se modelează fenomenele termodinamice din focar, în scopul obținerii distribuției temperaturilor și a concentrațiilor locale de aer, combustibil și produse de ardere. În etapa a doua, considerând drept condiții de formare rezultatele primei etape și cunoscând mecanismele formării noxelor se va determina cuantumul producerii acestora. Posibilitatea postprocesării formării noxelor a fost afirmată de autor în [5]. Actualmente acest procedeu este generalizat [10, 17].

## 1.2 Moduri de abordare ale calculului focarelor

O lucrare de referință în clasificarea modelelor de focare este [33]. Clasificarea propusă de această lucrare are la bază modul de transmitere a căldurii, însă deoarece ea se bazează de fapt pe numărul de dimensiuni, este adecvată și din alte puncte de vedere, după cum se va arăta în continuare. [33] propune trei tipuri de modele de focare:

- modele adimensionale,
- modele unidimensionale și
- modele pluridimensionale.

**Modelele adimensionale** sunt modele de calcul global. Ele tratează focarul ca un tot unitar, iar denumirea sub care sunt cunoscute în literatura de specialitate este aceea de "well stirred reactor", dată de [34]. Această concepție prezintă următoarele caracteristici:

- procesele de transport, influența turbulenței nu sunt necesare;

- din procesul de ardere interesează doar bilanțul material, care este relativ simplu de făcut și este prezentat pe larg în toate lucrările de specialitate care tratează arderea [1, 2, 29] etc.;

- transferul de căldură este global, metodă care necesită un mare număr de date statistice și care este folosită de exemplu de Gurvici [35];

- determinarea emisiilor de noxe se poate face de asemenea doar cunoscând o serie de date statistice. În [32] sunt prezentate un număr impresionant de lucrări care furnizează astfel de date.

Modelul este folosit în România ca metodă de calcul normativă [36].

Modelul prezintă următoarele deficiențe:

- nu dă nici o informație cu privire la organizarea arderii în focar, adică la procesele de aprindere și stabilitate a flăcării, influența distribuției aerului și combustibilului în focar asupra arderii și producerii noxelor;

- nu dă nici o informație cu privire la distribuția temperaturilor în focar, respectiv la distribuția fluxurilor termice spre pereți;

- în caz că nu se cunosc date statistice pentru o anumită configurație de focar, rezultatele obținute, atât din punct de vedere al fluxurilor termice cât și din punct de vedere al producerii de noxe nu pot avea un grad corespunzător de încredere.

**Modelele unidimensionale** sunt modele care au de fapt ca dimensiune timpul. Admițându-se o viteză de curgere, timpul poate fi cuplat cu spațiul, în mod unidimensional. Această concepție este cunoscută în literatura de specialitate sub numele de calcul zonal și se caracterizează prin următoarele:

- procesele de transport sunt considerate tip „piston”, adică sunt reduse la ipoteza banală a vitezei, amintită mai sus;

- influența turbulenței nu este necesară;

- procesele de ardere sunt considerate instantanee (modelul „amestec = ars”), sau sunt reduse la determinarea timpilor de devolatilizare, ardere a volatilizabililor și a reziduului carbonos [2, 37] etc.;

- fluxul termic spre pereți depinde de momentul (locul, zona) unde se produce;

- determinarea emisiilor de noxe poate fi tratată ca la modelele adimensionale, pe zone.

Modelul se pretează la focare lungi și subțiri.

Intrucât curgerea este de tip piston (fără recirculare), modelul are aceleași dezavantaje ca și modelul adimensional, cu excepția unei oarecare diferențieri a fluxului termic de-a lungul

focarului. Ipotezele care trebuiesc făcute pentru schimbul de căldură între zone reduc mult din acest avantaj.

**Modelele pluridimensionale** sunt modele spațiale, în două și trei dimensiuni. Modelele bidimensionale sunt mai simple și acoperă domeniul focarelor axial-simetrice. Pentru configurații de focare fără simetrie axială este nevoie de modele tridimensionale. Modelele pluridimensionale se caracterizează prin următoarele:

- spațiul este împărțit în volume de control mici (celule, zone) pe care se fac bilanțuri masice și energetice;
- modelarea curgerilor prin ecuații de transport, care este necesar să fie turbulent;
- modelarea proceselor de ardere și formare a noxelor prin legi de cinetică chimică;
- modelarea schimbului de căldură ținând cont de radiație.

Deși aceasta este calea de urmat în viitor, modelele pluridimensionale ridică încă o serie de probleme nerezolvate:

- discretizarea domeniului se poate face prin metode cu diferențe finite sau cu elemente finite; ambele metode au avantaje și dezavantaje care vor fi prezentate pe larg la cap. 3;
- modelarea arderii numai prin adaptarea legilor de cinetică chimică este o forțare discutabilă și care nu explică de fapt mecanismul arderii;
- nu este încă rezolvată corect problema cuplării ecuațiilor radiației cu cele de transport.

În plus, aceste modele au nevoie de o putere de calcul mare, nefiind aplicabile decât cu ajutorul unui calculator electronic de putere corespunzătoare dimensiunii problemei abordate.

Din cele prezentate mai sus rezultă că o modelare a fenomenelor din focare care pune accent pe reducerea producerii de noxe trebuie să fie o modelare de câmpuri. Este evident că o asemenea abordare nu poate fi făcută prin metode globale.

### 1.3 Note și comentarii

**Nota** <sup>1</sup>. Produsele arderii pot fi considerate gaze ideale, astfel densitatea lor se poate determina simplu din ecuația termică de stare:

$$\rho_g = \frac{pM_g}{RT_g} \quad (1.3.1)$$

unde  $p$  este presiunea absolută, considerată constantă,  
 $M_g$  este masa molară a amestecului,  
 $R$  este constanta universală a gazelor perfecte,  
 având valoarea 8314,4 J/kmol K,  
 $T_g$  este temperatura absolută a gazelor.

Masa molară a amestecului de gaze este destul de apropiată de a aerului. Pentru diverși combustibili ea este:

- 29 pentru lignit ars cu un coeficient de excedent de aer  $\lambda = 1,3$  ;
- 30 pentru huilă arsă tot cu  $\lambda = 1,3$  ;
- 29 pentru păcură arsă cu  $\lambda = 1,15$  ;
- 28 pentru metan ars cu  $\lambda = 1,15$  .

Explicația este că creșterea de masă molară datorită bioxidului de carbon este compensată mai mult, respectiv mai puțin de scăderea de masă molară datorită formării apei din hidrogen (la păcură și în special la metan), sau datorită umidității inițiale (la lignit), respectiv lipsei umidității inițiale (la huilă). Concluzia este că pentru lignit și păcură neglijarea variației densității datorită reacțiilor chimice este cu totul posibilă, iar pentru huilă sau metan această neglijare introduce erori de cel mult 3 %, ceea ce pare foarte acceptabil. Cu aceasta, variația densității gazelor de ardere este în funcție numai de temperatură, ceea ce poate simplifica mult modelul matematic.

**Nota** <sup>2</sup>. Fie o granulă de cărbune aproximativ sferică de diametru  $d$ , care cade liber în mediul din focar, considerat nemișcat. Asupra granulei acționează forța gravitației și rezistența aerodinamică, având expresiile:

$$G = mg = \rho_c \frac{\pi}{6} d^3 g \quad (1.3.2)$$

unde  $\rho_c$  este masa volumică (densitatea) granulei, respectiv:

$$F = C P_d A_{\max} = C \rho_g \frac{w^2}{2} \frac{\pi}{4} d^2 \quad (1.3.3)$$

unde  $C$  este coeficientul de rezistență aerodinamică a sferei,  
 $P_d$  este presiunea dinamică a gazelor din focar,  
 $A_{\max}$  este secțiunea maximă a granulei de cărbune,  
 $\rho_g$  este densitatea gazelor din focar.

Egalând relațiile (1.3.2) și (1.3.3) rezultă viteza de cădere liberă a granulei:

$$w = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{\rho_c}{\rho_g} \frac{g}{C} d} \quad (1.3.4)$$

Substituind următoarele valori numerice, considerate a fi cele mai defavorabile pentru demonstrația propusă:

$$\begin{aligned} \rho_c &= 1400 \text{ kg/m}^3 \text{ [25], huilă,} \\ \rho_g &= 0,17 \text{ kg/m}^3 \text{ , la } 1800 \text{ }^\circ\text{C în focar,} \\ d &= 100 \text{ } \mu\text{m} = 0,0001 \text{ m , măcinare grosolană,} \\ g &= 9,81 \text{ m/s}^2 \\ C &= 0,47 \text{ [38]} \end{aligned}$$

rezultă:

$$w = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{1400}{0,17} \frac{9,81}{0,47}} 0,0001 = 4,8 \text{ m/s} \quad (1.3.5)$$

Cifra Re pentru curgerea în jurul particulei este:

$$Re = \frac{wd}{v} = \frac{4,8 \cdot 0,0001}{350 \cdot 10^{-6}} = 1,4 \quad (1.3.6)$$

Chiar dacă asupra granulei de cărbune ar acționa forțe de inerție de 100 de ori mai mari decât accelerația gravitațională (greu de crezut) viteza relativă față de mediu, respectiv cifra Re ar crește de numai 10 ori, ceea ce justifică presupunerea că cifra Re în acest caz este sub 100 și pune sub semnul întrebării oportunitatea cercetării și modelul Babiș [25] al granulei fixate pe ac de cuarț și suflată cu viteză mare.

Pentru un focar de diametru 10 m și în care viteza de curgere a gazelor este de 10 m/s cifra Re este:

$$Re = \frac{wd}{v} = \frac{10 \cdot 10}{350 \cdot 10^{-6}} = 280000 \quad (1.3.7)$$

**Nota 3.** Folosirea termenului de convecție pentru transferul termic în focare de la flacără la perete nu este corectă în acest context. Flacăra propriu-zisă (starea plasmatică) nu este corect din punct de vedere tehnic să vină în contact cu pereții focarului tocmai datorită schimbului de căldură prea intens prin convecție (exemplu practic: aparatele de sudură). Pentru a proteja pereții, arderea se organizează astfel încât întotdeauna flacăra să fie învelită într-un strat de gaze de ardere care, într-adevăr, cedează căldură pereților prin convecție și primește căldură de la flacăra prin radiație, prin amestec turbulent și prin înseși reacțiile de ardere în perioada când volumul respectiv de gaz a fost în stare de plasmă. Afirmatia că acest strat de gaze ar primi căldură prin convecție implică introducerea unei noțiuni de coeficient de convecție, evident deplasată aici.

**Nota 4.** Metoda de calcul global al schimbului de căldură în focar este prezentată amănunțit în [28]. Făcând calculele pentru un focar arzând praf de lignit se obțin valorile:

- coeficientul de atenuare a radiației datorită gazelor triatomice: 0,15 - 0,16;
- coeficientul de atenuare a radiației datorită particulelor de cenușă: 0,14 - 0,15;
- puterea emisivă a flăcării: 0,73 - 0,82.

Ca urmare, flacăra radiază aproape ca un corp negru, iar gazele triatomice absorb destul de mult din această radiație.

**Nota 5.** După cum se va vedea în lucrare aproape fiecare model matematic, bazat pe câte o singură formă de transmitere a căldurii are pretenția că reușește să simuleze foarte bine realitatea.

Afirmația pe care autorii o sugerează este că celelalte fenomene, care nu sunt cuprinse în teoria lor, au o influență cu totul neglijabilă. Concret, transmiterea prin conducție și transmiterea prin radiație aproape întotdeauna se exclud reciproc. Motivul acestei situații este dificultatea de a cupla cele două fenomene. Or în practică ele nu se pot exclude: o simplă măsurătoare cu un piometru de radiație totală indică prezența certă a radiației, iar o curgere turbulentă la întuneric asigură transmiterea căldurii în absența radiației.

## 2. MODELE MATEMATICE ALE FENOMENELOR DIN FOCARE

Ecuatiile care descriu fenomenele din focare sunt deosebit de complexe. Expuneri sistematice ale acestora se găsesc în [18, 19, 20, 39, 40], unde sunt prezentate istoricul diferitelor ipoteze de lucru, teoriile generate și adaptarea acestora la diferitele geometrii care prezintă interes, în special cele bidimensionale axial-simetrice și cele tridimensionale. În continuare se va prezenta pe scurt doar partea pe care se bazează modelările din prezenta lucrare.

### 2.1 Ecuații de bilanț

Ecuațiile de bilanț exprimă principiul conservării proprietăților (masă, impuls etc.) Fie  $\phi$  o proprietate oarecare, care se conservă, a unui fluid dintr-un volum  $V$  aflat în repaus față de un sistem de coordonate (fig. 2.1.1).

Dacă  $\rho$  este masa volumică (densitatea) fluidului și  $\phi$  este valoarea masică a proprietății, atunci:

$$\Phi = \int_V \rho \phi dV \quad (2.1.1)$$

iar variația în raport cu timpul este:

$$\frac{d\Phi}{dt} = \int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV \quad (2.1.2)$$

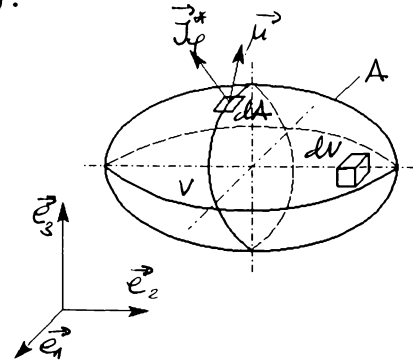


Fig. 2.1.1 Notății pentru deducerea ecuației generale de bilanț.

Variația proprietății  $\phi$  se produce datorită:

- curgerii, prin suprafața  $A$  a volumului;
- formării sau dispariției proprietății (termenul sursă) în volumul considerat.

Fluxul curentului cu proprietatea  $\phi$  prin suprafața  $A$  are următoarea expresie:

$$\vec{J}_{\phi}^* = \rho \phi \vec{v}_{\phi} \quad (2.1.3)$$

și este pozitiv când vectorul viteză  $\vec{v}$  este îndreptat în afară.

Termenul sursă  $S_{\phi}$  reprezintă cantitatea ce se crează (sau dispare) în volumul elementar pe unitatea de timp. Astfel, ecuația

de bilanț (2.1.2) devine:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot \varphi) dV = - \oint_A \rho \varphi \vec{v}_\varphi \cdot \vec{n} dA + \int_V S_\varphi dV \quad (2.1.4)$$

Cu teorema Gauss-Ostrogradski aplicată primului termen rezultă forma integrală de bilanț a proprietății  $\Phi$ :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot \varphi) dV = - \int_V \text{div}(\rho \varphi \vec{v}_\varphi) dV + \int_V S_\varphi dV \quad (2.1.5)$$

Forma diferențială este:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot \varphi) = - \text{div}(\rho \cdot \varphi \vec{v}_\varphi) + S_\varphi \quad (2.1.6)$$

Pentru un fluid care curge și reacționează, ecuațiile de bilanț se scriu pentru masă, impuls, masele diferitelor specii chimice și entalpie.

### 2.1.1 Ecuația de bilanț pentru masă

Ecuația de bilanț pentru masă se obține din (2.1.6) substituind:

$$\Phi = m \quad (2.1.7)$$

$$\varphi = \frac{m}{m} = 1 \quad (2.1.8)$$

Deoarece masa nu se crează, termenul sursă  $S_m$  este nul. Rezultă:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \text{div}(\rho \cdot \vec{v}) \quad (2.1.9)$$

adică ecuația continuității.

### 2.1.2 Ecuația de bilanț pentru impuls

Ecuația de bilanț pentru impuls se obține pornind de la ecuația lui Newton:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \sum \vec{F} \quad (2.1.10)$$

care se aplică masei de fluid ce ocupă volumul elementar  $dm = \rho dV$  și asupra căruia acționează o forță masică exterioară, aferentă elementului de masă  $d\vec{R}$  și o forță de tensiune aplicată pe elementul de suprafață  $dA_n(d\vec{S})$ . Notățiile folosite sunt prezentate în fig. 2.1.2.



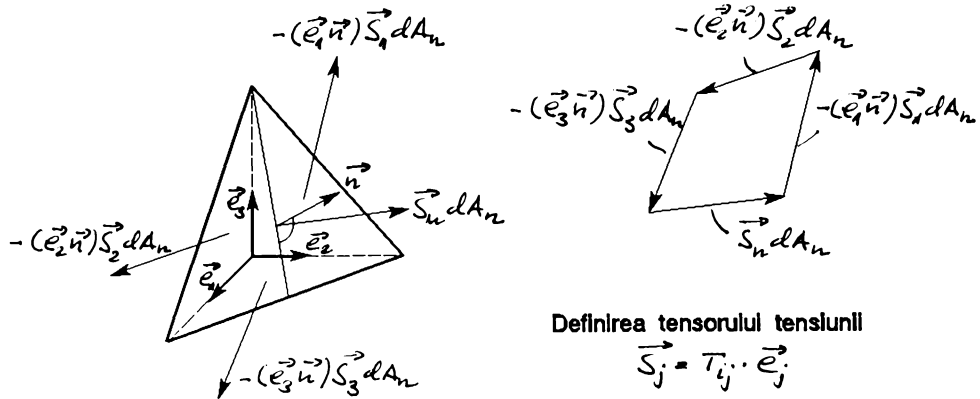


Fig. 2.1.2 Determinarea rezultantei efortului tangențial.

Cu notațiile de mai sus se poate scrie:

$$d\vec{S} = \oint_{dA} \vec{S}_n dA_n = \oint_{dA} n_i T_{ij} \vec{e}_j dA_n = \oint_{dA} \vec{n} T dA_n \quad (2.1.11)$$

Prin utilizarea formulei lui Green relația (2.1.11) devine:

$$d\vec{S} = \int_{dA} \vec{n} T dA_n = \text{div } T dV \quad (2.1.12)$$

Forța masică exterioară este definită prin:

$$d\vec{K} = \rho \cdot \vec{k} dV \quad (2.1.14)$$

unde  $k$  este forța masică masică (specifică).

Înlocuind (2.1.12) și (2.1.13) în (2.1.10), aceasta devine:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \text{div } T + \rho \vec{k} \quad (2.1.14)$$

care este ecuația de bilanț a impulsului sub formă diferențială. pentru un model Euler această ecuație devine:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot \vec{v}) + \text{div} (\rho \cdot \vec{v} \vec{v}) \quad (2.1.15)$$

sau:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot \vec{v}) + \text{div} (\rho \cdot \vec{v} \vec{v}) = \text{div } T + \rho \vec{k} \quad (2.1.16)$$

Tensorul eforturilor  $T$  se descompune în două părți: tensiunile vâscoase  $T_v$  și presiunea  $p$ , astfel că ecuația de bilanț pentru impuls devine ecuația Navier-Stokes:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot \vec{v}) = -div (\rho \cdot \vec{v} \vec{v} - T_v) - \nabla p + \rho \vec{k} \quad (2.1.17)$$

### 2.1.3 Ecuația de bilanț pentru masele speciilor chimice

Prin specii chimice se înțeleg componentele chimice ale amestecului, care curg și reactionează. Stabilirea ecuației de bilanț pentru acestea se face pornind de la relația (2.1.6) în care se substituie:

$$\Phi = m_{s,j} \quad (2.1.18)$$

$$\varphi = \frac{m_{s,j}}{m} = m_j \quad (2.1.19)$$

unde  $m_s$  este masa speciei chimice respective,  
 $m$  este masa totală a amestecului,  
 $m_j$  este participarea masică a speciei chimice respective în amestec.

Întrucât suma maselor componentelor este masa amestecului, rezultă:

$$\sum_j m_j = 1 \quad (2.1.20)$$

care înlocuită în relația (2.1.6) rezultă:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot m_j) = -div (\rho \cdot m_j \vec{v}_j) + S_j \quad (2.1.21)$$

unde  $\vec{v}_j$  este viteza absolută de transport a speciei chimice  $j$  și este compusă din:

$$\vec{v}_j = \vec{v} + \vec{w}_j \quad (2.1.22)$$

unde  $\vec{v}$  este viteză de deplasare a particulei de fluid,  
 $\vec{w}_j$  este viteza relativă de variație a masei speciei  $m_j$  în raport cu masa totală  $m$  (viteza de difuzie).

Între aceste viteze există dependența:

$$\rho \cdot \vec{v} = \sum_j \rho m_j \vec{v}_j \quad (2.1.23)$$

care arată că densitatea fluxului masei totale este formată din suma densităților fluxurilor maselor parțiale ale speciilor chimice.

Densitatea fluxului de difuzie a speciei  $j$  poate fi definită prin:

$$\vec{J}_j = \rho m_j \vec{w}_j \quad (2.1.24)$$

respectiv, folosind și relația (2.1.22):

$$\sum_j \vec{J}_j = \sum_j \rho m_j \vec{w}_j = \sum_j \rho m_j \vec{v}_j - \sum_j \rho m_j \vec{v} = 0 \quad (2.1.25)$$

înlocuind (2.1.23) și (2.1.25) în (2.1.21) rezultă:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho m_j) = -\operatorname{div} (\rho m_j \vec{v} + \vec{J}_j) + S_j \quad (2.1.26)$$

În cazul curgerii fără reacții chimice, termenul sursă  $S_j$  este nul. Considerând o reacție chimică ce se desfășoară după schema:



unde  $v_{jk}^*$  este coeficientul stoichiometric al speciei  $j$  la reacția  $k$ ,  
 $M_j$  este masa molară a speciei chimice  $j$ .

Membrul stâng reprezintă masa produselor inițiale, iar membrul drept masa produselor finale.

Pe baza principiului conservării masei se poate scrie:

$$\sum_{j=1}^P v_{jk}^* M_j = 0 \quad (2.1.28)$$

Unii autori [41] folosesc în locul coeficienților stoichiometrici  $v_{jk}^*$  coeficienții stoichiometrici raportați la masa produselor finale, adică:

$$v_{jk} = \frac{v_{jk}^* M_j}{\sum_{j=I+1}^P v_{jk}^* M_j} \quad (2.1.29)$$

Fiecărei reacții care se desfășoară după schema (2.1.27) îi este atribuită o viteză de reacție  $R_k$ , reprezentând cantitatea de masă care ia naștere la reacția  $k$  pe volum și unitate de timp. Viteza de formare  $S_{jk}$  a produselor  $j$  la reacția  $k$  sunt în următoarea dependență cu  $R_k$ :

$$S_{jk} = v_{jk} R_k \quad (2.1.30)$$

sau prin însumarea maselor parțiale, rezultă termenul sursă:

$$S_j = \sum_{k=1}^n S_{jk} = \sum_{k=1}^n v_{jk} R_k \quad (2.1.31)$$

cu care ecuația de bilanț a maselor speciilor chimice  $j$  pentru  $n$  reacții chimice devin:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot m_j) = -div (\rho \cdot m_j \vec{v} + \vec{J}_j) + \sum_{k=1}^n v_{jk} R_k \quad (2.1.32)$$

#### 2.1.4 Ecuația de bilanț pentru entalpie

Ecuația de bilanț pentru entalpie se obține din ecuația generală de bilanț (2.1.6) înlocuind:

$$\Phi = I^* \quad (2.1.33)$$

respectiv:

$$\varphi = i^* \quad (2.1.34)$$

unde  $I^*$  este entalpia de stagnare, iar  $i^*$  este entalpia de stagnare masică. Rezultă:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot i^*) = -div (\rho \cdot i^* \vec{v}_i) + S_i \quad (2.1.35)$$

Entalpia  $i^*$  este formată din entalpia  $i$  și termenul de energie cinetică:

$$i^* = i + \frac{\vec{v}^2}{2} \quad (2.1.36)$$

Pentru deducerea termenului sursă din ecuația (2.1.36) se pornește de la ecuațiile de bilanț pentru energie cinetică și potențială, deduse, prima din ecuația Navier-Stokes (2.1.17), iar a doua din ecuația continuității (2.1.9):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot \frac{\vec{v}^2}{2}) = -div (\rho \cdot \frac{\vec{v}^2}{2} \vec{v} - \vec{v} \cdot T_v) - \frac{T}{\nabla \vec{v}} + \rho \cdot \vec{v} \vec{k} \quad (2.1.37)$$

$$\frac{\partial (e_p \cdot \rho)}{\partial t} = -div (\rho \cdot e_p \vec{v}) + \rho \cdot \vec{v} \nabla e_p \quad (2.1.38)$$

Energia mecanică masică a unei particule a fluidului este formată din suma energiilor cinetică și potențială:

$$e_m = \frac{\vec{v}^2}{2} + e_p \quad (2.1.39)$$

și  $i$  se poate atașa o ecuație generală de bilanț de forma (2.1.6)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot e_m) = -div(\rho \cdot e_m \vec{v} + \vec{J}_{e_m}) + S_{e_m} \quad (2.1.40)$$

Din însumarea ecuației (2.1.37) cu (2.1.28) și compararea cu (2.1.40) rezultă că densitatea fluxului energiei mecanice  $\vec{J}_{em}$  este dată de produsul vectorului viteză și tensorul eforturilor unitare:

$$\vec{J}_{e_m} = -\vec{v}T \quad (2.1.41)$$

iar termenul sursă de raportul:

$$S_{e_m} = -\frac{T}{\nabla \vec{v}} \quad (2.1.42)$$

Energia totală  $e$  este suma dintre energia internă  $u$  și energia mecanică  $e_m$ . Ecuația de bilanț corespunzătoare trebuie să fie, conform principiului întâi al termodinamicii (conservarea energiei), fără termen sursă, adică:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot e) = -div(\rho \cdot e \vec{v} + \vec{J}_e) \quad (2.1.43)$$

Făcând diferența dintre (2.1.43) și (2.1.40) se obține ecuația de bilanț a energiei interne  $u$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot u) = -div(\rho \cdot u \vec{v} + \vec{J}_e - \vec{J}_{e_m}) - S_{e_m} \quad (2.1.44)$$

Densitatea fluxului de căldură este considerată diferența:

$$\vec{J}_q = \vec{J}_e - \vec{J}_{e_m} \quad (2.1.45)$$

Prin definiție:

$$i^* = u + \frac{\vec{v}^2}{2} + pv = u + \frac{\vec{v}^2}{2} + \frac{p}{\rho} \quad (2.1.46)$$

de unde se scoate valoarea  $u$  și se introduce în relația (2.1.44). După efectuarea calculului se obține forma finală a ecuației de bilanț a entalpiei:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot i^*) &= -div(\rho \cdot i^* \vec{v} + \vec{J}_q) + div(p \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot T) + \\ &+ \frac{\partial p}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \vec{k}) \end{aligned} \quad (2.1.47)$$

de unde rezultă termenul sursă:

$$S_{i\cdot} = \operatorname{div} (p \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot T) + \frac{\partial p}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{k}) \quad (2.1.48)$$

După cum s-a mai aratat, tensorul eforturilor unitare  $T$  poate fi descompus în două, partea presiunii statice  $pE$  și partea tensiunilor vâscoase  $T_v$ :

$$T = -pE + T_v \quad (2.1.49)$$

cu care forma termenului sursă devine:

$$S_{i\cdot} = \operatorname{div} (\vec{v} \cdot T_v) + \frac{\partial p}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{k}) \quad (2.1.50)$$

## 2.2 Schimb de căldură și de masă

Schimbul de căldură și de masă este un domeniu care face obiectul a numeroase lucrări. O monografie a acestora este [42], iar în [3, 19, 20] se găsesc relațiile care prezintă interes pentru fenomenele de ardere. Pentru procesele de ardere a flăcărilor de combustibili lichizi modelul matematic a fost dezvoltat de Spalding D.B. [41].

### 2.2.1 Difuzia moleculară

Densitatea locală a fluxului unei proprietăți  $\varphi$  a curentului de fluid este dată de relația:

$$\vec{J}_\varphi^* = \rho \vec{v}_\varphi \varphi \quad (2.2.1)$$

unde  $\vec{v}_\varphi$  este viteza de transport absolută. Dacă în relația (2.2.1) în locul vitezei de transport absolute  $\vec{v}_\varphi$  se introduce viteza de mișcare a centrului de greutate  $\vec{v}$  se obține:

$$\vec{J}_\varphi^* = \rho \vec{v} \cdot \varphi + \vec{J}_\varphi \quad (2.2.2)$$

unde  $\rho \vec{v} \cdot \varphi$  este partea convectivă a densității fluxului, iar  $\vec{J}_\varphi$  partea difuzivă.

Difuzia moleculară cuprinde următoarele aspecte: frecarea internă, difuzia materială și transmiterea căldurii.

### Frecarea internă

Frecarea internă se poate exprima ca difuzie a impulsului masic  $v$ :

$$J_v = -T_v \quad (2.2.3)$$

unde  $T_v$  este tensorul tensiunilor de frecare datorită vâscozității.

Presupunând că fluidul este newtonian (cazul curgerii în focare), forțele de frecare și fluxul de difuzie va putea fi calculat cu ipoteza lui Stokes, cunoscându-se vitezele de curgere:

$$T_v = 2\eta \left[ \dot{D} - \left( \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{v} \right) E \right] \quad (2.2.4)$$

Relația arată că tensorul forțelor de frecare  $T_v$  este proporțional cu tensorul vitezelor de deformație  $D$ . Acest lucru este analog cu legea lui Hook dacă se înlocuiește  $D$  din ecuația (2.2.4) cu tensorul vitezelor de deformație  $D$  [43]:

$$\dot{D} = (\nabla \vec{v})^s \quad (2.2.5)$$

$\dot{D}$  fiind format din partea simetrică a tensorului gradientilor vitezelor de translație. Astfel, efortul de frecare devine:

$$T_v = 2\eta \left[ (\nabla \vec{v})^s - \left( \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{v} \right) E \right] \quad (2.2.6)$$

Coeficientul de proporționalitate  $\eta$  reprezintă vâscozitatea dinamică.

Relația lui Stockes (2.2.4) are la bază o ipoteză empirică. Un caz particular al acesteia este ipoteza lui Newton, valabilă pentru curenți la care apar gradienti ai vitezelor de translație perpendicular pe direcția de curgere:

$$\tau_{xy} = \eta \frac{\partial v_x}{\partial y} \quad (2.2.7)$$

Pentru gaze este valabilă o relație de forma (2.2.7) dedusă din teoria cinetico-moleculară [44] din care rezultă că vâscozitatea dinamică  $\eta$  este proporțională cu densitatea  $\rho$ , cu viteza medie a moleculelor de gaz și cu drumul liber mijlociu  $\lambda^*$ :

$$\eta = \frac{1}{3} \rho \sqrt{v_g^2} \lambda^* \quad (2.2.8)$$

Relația stă la baza înțelegerii și elaborării modelelor turbulenței.

### Difuzia materială

Relațiile difuziei moleculare ale speciei chimice  $j$  într-un amestec de specii  $j$  și  $l$  se pot obține prin particularizarea relațiilor generale obținute din termodinamica proceselor ireversibile [45], presupunând că temperatura și presiunea sunt constante și că moleculele sunt supuse aceluiași forțe exterioare (legea lui Fick) [42]:

$$\vec{J}_{n,j} = -D_{j,l} \nabla n_j \quad (2.2.9)$$

unde  $\vec{J}_{n,l}$  este densitatea fluxului molar de difuzie,  
 $n_j$  este densitatea molară a speciei  $j$ , iar  
 $D_{j,l}$  este coeficientul binar de difuzie.

Pentru gaze  $D_{j,l}$  este dedus din teoria cinetico-moleculară a gazelor:

$$D_{j,l} = \frac{1}{3} \lambda_{j,l} \sqrt{v_{g,j}^2} \quad (2.2.10)$$

unde  $\lambda_{j,l}$  este drumul liber mijlociu al moleculei  $j$  în amestecul  $j, l$ , iar  
 $\sqrt{v_{g,j}^2}$  este viteza medie a moleculelor de gaz.



Schimbul de materie conform relației (2.2.9) pentru o aceeași masă molară a celor două componente și în condițiile de presiune și temperatură constantă duce la egalitatea:

$$\vec{J}_{n,j} = \vec{J}_{n,l} \quad (2.2.11)$$

Pentru mase molare diferite  $M_j$  și  $M_l$  apare o diferență de densitate de flux:

$$M_j \vec{J}_j - M_l \vec{J}_l = \rho \vec{v} \quad (2.2.12)$$

și ținând seama de relațiile (2.2.2), (2.2.9), (2.2.11) și (2.2.12), după transformări se obține densitatea fluxului de difuzie a speciei  $j$ :

$$\vec{J}_j = - \left( 1 + m_j \frac{M_l - M_j}{M_j} \right) D_{j,l} \nabla (\rho \cdot m_j) \quad (2.2.14)$$

Relația de mai sus este valabilă pentru un amestec de două componente în condiții de presiune și temperatură constantă. La un amestec format din mai multe componente relația dintre densitățile fluxului de difuzie și gradientii de concentrație este mult mai complicată [46].

### Transmiterea căldurii

Densitatea fluxului total de căldură  $\vec{J}_q$  definit în relația (2.1.45) se compune din densitatea fluxului de căldură moleculară  $\vec{J}_{q,m}$  și densitatea fluxului radiației termice  $\vec{J}_{q,R}$ :

$$\vec{J}_q = \vec{J}_{q,m} + \vec{J}_{q,R} \quad (2.2.14)$$

Într-un sistem cu o singură componentă transmiterea căldurii se poate trata ca difuzie a energiei cinetice suplimentare a moleculei, corespunzător legii lui Fourier:

$$\vec{J}_{q,m} = -\lambda \nabla T \quad (2.2.15)$$

unde  $\lambda$  este conductivitatea termică. Pentru un sistem cu o singură componentă gazoasă  $j$ ,  $\lambda$  este:

$$\lambda = \frac{1}{6} \rho \sqrt{v_g^2} \lambda^* f R_j \quad (2.2.16)$$

unde  $\lambda^*$  este drumul liber mijlociu al moleculei  $j$ ,  
 $f$  este numărul gradelor de libertate ale mișcării moleculare, iar  
 $R_j$  este constanta gazului de specie  $j$ .

### 2.2.2 Modele ale curgerii turbulente

Ecuatiile Navier-Stokes se aplică atât curgerilor laminare, cât și curgerilor turbulente. Modelarea curgerilor turbulente trebuie să țină seama de caracterul profund nestaționar al turbulenței. O modelare completă a turbulenței cu ecuațiile Navier-Stokes este prohibitivă din punct de vedere al timpului de calcul, datorită caracterului fractal al turbulenței. În practică în locul soluțiilor nestaționare ale ecuațiilor Navier-Stokes se folosesc diferite ecuații empirice.

#### Ecuatiile curgerii turbulente

Exprimarea ecuațiilor care descriu curgeri turbulente pentru probleme practice se bazează pe medierea în timp a fluctuațiilor turbulente în jurul valorilor mărimilor de câmp ale curentului principal. Această interpretare este prezentată pe larg în multe lucrări [47, 48, 49, 50].

Se admite deci că toate mărimile curgerii turbulente  $f$  se pot exprima ca suma dintre valoarea medie și fluctuația în jurul mediei, adică:

$$f = \bar{f} + f' \quad (2.2.17)$$

Cu aceasta se poate scrie:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = 0 \quad (2.2.18)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \bar{u}_i - \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.2.19)$$

unde:

$$R_{ij} = \overline{u'_i u'_j} \quad (2.2.20)$$

În ecuația (2.2.19) termenul care ridică probleme este  $\rho R_{ij}$ . Pentru a rezolva acesta, în diferite modele ale turbulenței este necesară exprimarea acestui termen în funcție de  $u_i$  și de câteva constante care se vor „acorda” în funcție de problemă. Acordarea acestor constante face obiectul unui mare număr de lucrări, care nu vor fi trecute în revistă aici. În continuare se vor prezenta principiile de bază.

Principala problemă care apare este cea a închiderii ecuațiilor de transport [50].

Un prim model face analogia cu curgerile laminare și în acest caz se poate lua:

$$-R_{ij} = \frac{\mu_t}{\rho} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2\mu_t}{3\rho} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \delta_{ij} \quad (2.2.21)$$

unde  $\mu_t$  este vâscozitatea turbulentă, iar  $\delta_{ij}$  este simbolul lui Kronecker.

Substituind în ecuația (2.2.19) se obține:

$$-\frac{\partial R_{ij}}{\partial x_i} = \frac{\mu_t}{\rho} \nabla^2 \bar{u}_i \quad (2.2.22)$$

Aceasta este o metodă simplă de asociere dintre vâscozitatea laminară și cea turbulentă. Din păcate utilizarea doar a  $\mu_t$  nu permite modelări prea precise, deoarece [18] este necesară determinarea experimentală a unei scări de lungime, lucru care se poate realiza la curgerile de tip strat limită, dar pentru curgerile cu recirculație este foarte complex.

Pentru o acuratețe mai mare este necesar un model mai bun pentru  $R_{ij}$ . Se folosesc modele cu două sau mai multe ecuații. Întrucât toate aceste modele se bazează pe constante empirice, nu s-a demonstrat încă utilitatea certă a modelelor cu mai mult de două ecuații.

Cele mai cunoscute modele cu două ecuații sunt:

- modelul  $k - \epsilon$ , [51], [52], utilizat în [19];
- modelul  $k - \epsilon$ , [48], [49], prezentat, pe scurt, în continuare.

Conform acestui model se pot stabili relații pentru  $R_{ij}$ , dintre care una din cele mai simple forme este:

$$-R_{ij} = \frac{\mu_t}{\rho} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \quad (2.2.23)$$

unde  $\mu_t$  este vâscozitatea turbulentă, iar  $k$  este energia cinetică turbulentă:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i' \cdot u_i'} \quad (2.2.24)$$

Această definiție introduce două necunoscute,  $\mu_t$  și  $k$ , care necesită pentru închidere două ecuații.

Este dificil să se deriveze relația (2.2.23) în funcție de  $\mu_t$ . De aceea se fac unele simplificări valabile pentru numere  $Re$  mari (cazul flăcărilor turbulente, unde  $Re > 10^6$ ), și anume:

$$\frac{\mu_t}{\rho} \sim \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.2.25)$$

unde  $\epsilon$  este rata de disipare a energiei. Deci, cu constanta de proportionalitate  $C_1$ , rezultă:

$$\frac{\mu_t}{\rho} = C_1 \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.2.26)$$

unde  $C_1$  poate depinde de numărul Re.

La construcția modelului  $k - \epsilon$  ecuațiile pentru  $k$  și  $\epsilon$  au fost deduse folosind postulate și considerații logice și empirice.

Ecuatiile folosesc analogia cu ecuațiile clasice de transport ale energiei și au forma:

$$\frac{Dk}{Dt} = \nabla \left( C_2 \frac{\mu_t}{\rho} \nabla k \right) + G - \epsilon \quad (2.2.27)$$

$$\frac{D\epsilon}{Dt} = \nabla \left( C_3 \frac{\mu_t}{\rho} \nabla \epsilon \right) + C_4 \frac{\epsilon}{k} G - C_5 \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.2.28)$$

unde termenii din stânga sunt componentele „de convecție”, iar cele din dreapta sunt cele „de difuzie”, inclusiv surse. În ecuația (2.2.28)  $G$  este termenul sursă al energiei cinetice turbulente și forma sa generală poate fi găsită prin analogie cu ecuațiile conservării energiei. Forma generală este foarte complicată. În practică se folosesc forme bidimensionale, a căror expresie este:

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left( C_2 \frac{\mu_t}{\rho} \frac{\partial k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( C_2 \frac{\mu_t}{\rho} \frac{\partial k}{\partial y} \right) + G - \epsilon \quad (2.2.29)$$

$$\frac{D\epsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left( C_3 \frac{\mu_t}{\rho} \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( C_3 \frac{\mu_t}{\rho} \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right) + C_4 \frac{\epsilon}{k} G - C_5 \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.2.30)$$

unde:

$$G = \frac{\mu_t}{\rho} \left[ 2 \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (2.2.31)$$

Constantele  $C_n$  sunt empirice și în modelul de bază [52] aceste constante au valorile:

$$\begin{aligned} C_1 &= 0,09 \\ C_2 &= 1,0 \\ C_3 &= 0,769 \\ C_4 &= 1,44 \\ C_5 &= 1,92 \end{aligned}$$

Evident, aceste constante se vor ajusta în funcție de fenomenul modelat.

Programul FEUER folosește un model tridimensional al turbulenței, mult mai complex. Spre exemplu, expresia  $G$  din termenul sursă este:

$$\begin{aligned}
 G = & 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left[ \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right)^2 \right] + \\
 & + 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left[ \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right) \right] \quad (2.2.32) \\
 & + \frac{\mu_t}{\rho} \left[ \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right)^2 \right]
 \end{aligned}$$

Dacă în relația (2.2.32) se elimină termenii conținând  $w$  și  $z$  se obține relația (2.2.31).

## 2.3 Transmiterea căldurii.

### 2.3.1 Transmiterea căldurii prin conducție.

Transmiterea căldurii prin conducție este un fenomen care se produce în medii omogene. Variația temperaturii în spațiu și în timp în interiorul unui corp sau a unui mediu este exprimată de ecuația diferențială a conducției (Fourier) [53, 54]:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\rho c T) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + M \quad (2.3.1)$$

unde  $T$  este temperatura;

$\tau$  este timpul;

$c$  este capacitatea termică masică;

$\rho$  este masa volumică (densitatea);

$\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  sunt coeficienții de conductivitate termică, după direcțiile  $x, y, z$ ;

$M$  este debitul surselor interioare de căldură.

Dacă  $\lambda$  nu este în funcție de temperatură ecuația (2.3.1) devine:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\rho c T) = \lambda \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + M = \lambda \nabla^2 T + M \quad (2.3.2)$$

Pentru probleme axial-simetrice, exprimate în coordonate  $z, r$  relația (2.3.2) devine:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\rho c T) = \lambda \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + M \quad (2.3.3)$$

### 2.3.2 Transmiterea căldurii prin convecție.

Transmiterea căldurii prin convecție este un fenomen care se produce între un fluid în mișcare și o suprafață care delimitează mișcarea fluidului. Descrierea transmiterii căldurii prin convecție se face prin patru ecuații [54]:

- ecuația continuității (2.1.9),

- ecuația Navier-Stockes pentru curgerea fluidelor vâscoase:

$$\frac{\partial w}{\partial \tau} + (w \nabla w) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu (\nabla w + \frac{1}{3} \nabla \operatorname{div} w) + g\beta \Delta T \quad (2.3.4)$$

unde  $w$  este viteza de curgere,

$p$  este presiunea,

$\nu$  este vâscozitatea cinematică,

$g$  este accelerația gravitațională, iar

$\beta$  este coeficientul de variație volumică a fluidului cu temperatura.

- ecuația conducției (în stratul limită) (2.3.1),

- ecuația de contur:

$$\alpha \Delta t = -\lambda \left( \frac{\partial T}{\partial n} \right)_p \quad (2.3.5)$$

unde  $\alpha$  este coeficientul de convecție termică,

$n$  este versorul normal la suprafață.

Expresia coeficientului de convecție  $\alpha$  se determină din criteriul de similitudine Nusselt ( $Nu$ ), care pentru curgeri forțate depinde numai de criteriile de similitudine Reynolds ( $Re$ ) și Prandtl ( $Pr$ ). Pentru diferite tipuri de curgeri există diferite forme ale expresiei Nusselt, cele mai convenabile fiind relațiile de tip Miheev [55].

### 2.3.3 Transmiterea căldurii prin radiație

Transmiterea căldurii prin radiație se poate caracteriza prin intensitatea direcțională a radiației, dependența dintre această variabilă și densitatea fluxului de căldură exprimându-se:

$$d\vec{q}_R = i \vec{e}_R d\omega \quad (2.3.6)$$

unde  $i$  este intensitatea radiației,  
 $\vec{e}_R$  este versorul direcției de propagare a radiației, iar  
 $d\omega$  este unghiul solid de divergență.

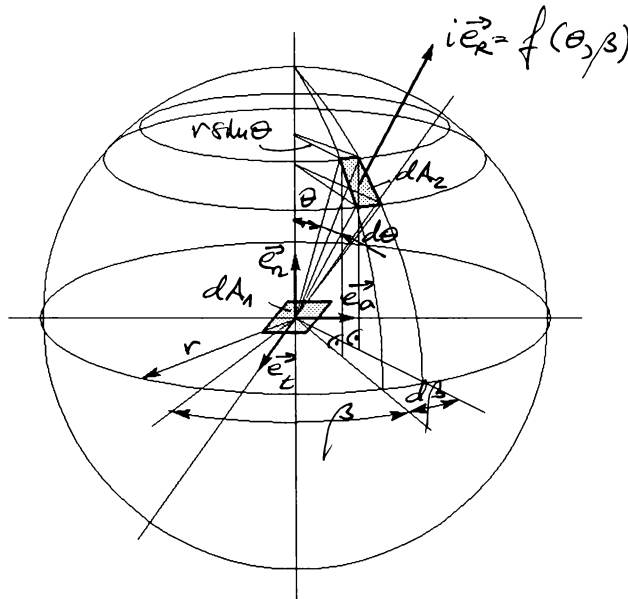


Fig. 2.3.1 Definirea unghiului solid

Integrând ecuația (2.3.6) pe întreaga sferă se obține densitatea fluxului de căldură prin radiație emis de un corp plasat în punctul 0:

$$\vec{q}_R = \int_0^{4\pi} i \vec{e}_R d\omega \quad (2.3.7)$$

În general, intensitatea radiației într-un punct oarecare al focarului este o funcție de unghiul polar  $\theta$  și de azimutul  $\beta$ . Pentru ca ecuația (2.3.7) să poată fi cuplată cu modelele de curgere este nevoie să fie adusă la forma unei ecuații de transport. Acest lucru se poate face doar cu anumite artificii.



Transformarea la care se recurge se bazează pe aproximarea intensității radiației cu funcții continue sau discontinue a unghiurilor  $\theta$  și  $\beta$ . Se cunosc două metode [56, 57, 58]:

- modele pe baza aproximării Milne-Eddington;
- modele pe baza aproximării Schuster-Schwarzschild.

Metoda Milne-Eddington are la bază înmulțirea intensității radiației cu cosinusurile directe ale unghiului polar al direcțiilor de curgere.

Metoda Schuster-Schwarzschild are la bază substituirea intensității radiației cu o funcție aleasă  $f_{(\theta, \beta)}$ , definită pe domenii parțiale. O împărțire în două domenii duce la un model cu două fluxuri, în patru domenii la un model cu patru fluxuri etc.

Metoda Schuster-Schwarzschild dă rezultate mai bune, dacă se cunoaște funcția  $f_{(\theta, \beta)}$ , deci în acest caz este nevoie de o mare cantitate de date experimentale.

Pentru focare axial-simetrice se face ipoteza că schimbul de căldură prin radiație în direcție axială este nul. Această ipoteză are la bază presupunerea că focarul fiind relativ lung, există o compensare în direcție axială. Cu această ipoteză se constată că este suficient un model al radiației relativ simplu, cu doar două fluxuri, spre exterior, respectiv spre interior. În continuare se va prezenta această metodă.

Spațiului modelat i se atașează sistemul de coordonate cilindrice  $(x, r, \theta)$  (v. fig. 2.3.2):

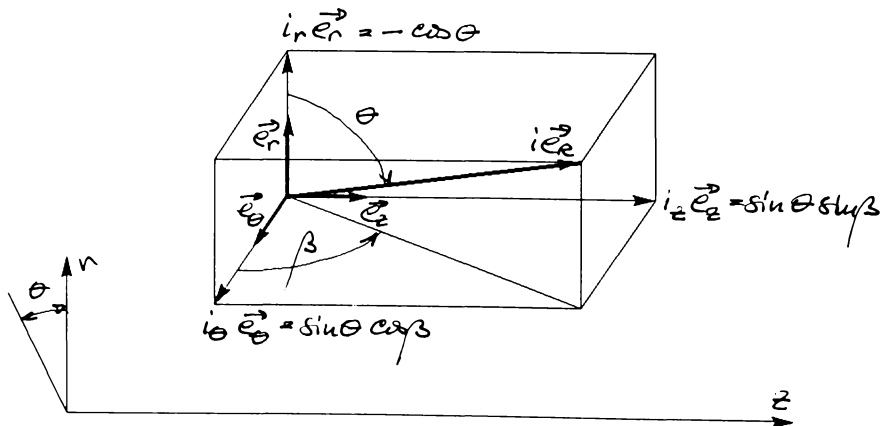


Fig. 2.3.2 Componentele intensității de radiație în sistemul de coordonate cilindrice

Distribuția intensității de radiație în focar necesită ca unghiul solid total  $4\pi$  să se divizeze în două subdomenii:

$i = f_{(\theta, \beta)} = I_r$  pentru toate direcțiile din semispațiul

$$r^- \left( -\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2} \right)$$

$i = f_{(\theta, \beta)} = J_r$  pentru toate direcțiile din semispațiul

$$r^+ \left( \frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2} \right)$$

iar în locurile de discontinuitate se folosesc medii aritmetice corespunzătoare ale lui I și J.

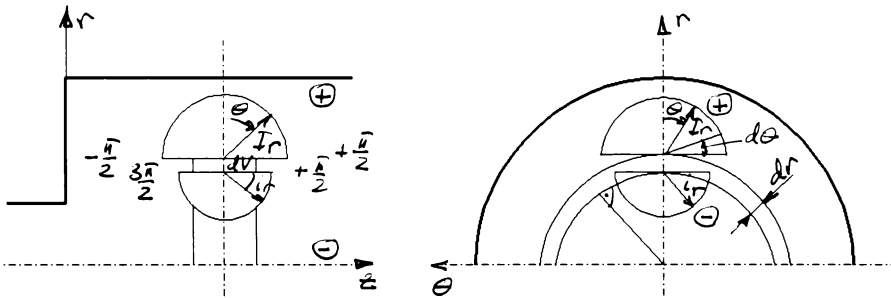


Fig. 2.3.3 Distribuția intensității radiației în focar pentru un model cu două fluxuri.

Ecuția de transport a intensității monocromatice a radiației se scrie:

$$\vec{e}_R \nabla i = -(K_a + K_R) i + K_a \frac{\sigma}{\pi} T^4 + \frac{K_R}{4\pi} \int_0^{4\pi} p(\theta^*) i(\omega^*) d\omega \quad (2.3.8)$$

unde  $K_a$  este coeficientul de atenuare al radiației absorbite,  
 $K_R$  este coeficientul de atenuare al radiației emise,  
 $p(\theta^*)$  este funcția de dispersie.

cu condițiile pe contur:

$$i_p^+ = \epsilon_p \frac{\sigma}{\pi} T_p^4 + \frac{1}{\pi} (1 - \epsilon_p) \int_0^{2\pi} i_p^- \cos\theta^- d\omega^- \quad (2.3.9)$$

unde  $\epsilon_p$  este factorul energetic de emisie.

Mărimile  $K_a$ ,  $K_r$ ,  $p(\theta^*)$  și  $\epsilon_p$  în principiu depind de lungimea de undă  $\lambda$  a radiației. Considerând gazele din focar drept corpuri cenușii mărimile susmenționate nu depind de  $\lambda$ , iar relația (2.3.8) se poate integra pentru toate lungimile de undă.

Pe baza componentelor scalare ale vectorului intensității de radiație  $\mathbf{i}$ , relația (2.3.8) devine:

$$\vec{e}_R \nabla i = i_r \vec{e}_r \left( \frac{\partial i}{\partial r} \right)_{\theta, z} + i_\theta \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \left( \frac{\partial r}{\partial \theta} \right)_{r, z} + i_z \vec{e}_z \left( \frac{\partial i}{\partial z} \right)_{\theta, r} \quad (2.3.10)$$

unde în membrul drept, al doilea termen este transferul în direcție axială, considerat după cum s-a arătat mai sus nul, al treilea termen este transferul în direcție tangențială, de asemenea nul, iar deoarece:

$$\left( \frac{\partial i}{\partial \beta} \right)_{r, z} = 0 \quad (2.3.11)$$

valoarea netă a fluxului de căldură prin radiație este:

$$\int_{4\pi} \vec{e}_R \nabla i d\omega = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \dot{q}_r) \quad (2.3.12)$$

Pentru domeniile celor două unghiuri solide considerate, rezultă următoarele ecuații diferențiale:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \dot{q}_r^+) = -A_r K_a \dot{q}_r^+ + B_r K_a \sigma T^4 + \frac{\dot{q}_r^-}{r} \quad (2.3.13)$$

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \dot{q}_r^-) = -A_r K_a \dot{q}_r^- + B_r K_a \sigma T^4 - \frac{\dot{q}_r^-}{r} \quad (2.3.14)$$

Fluxurile de radiație sunt legate de intensitățile stabilite conform relațiilor:

$$\dot{q}_r^+ = \pi \frac{B_r}{A_r} I_r \quad ; \quad \dot{q}_r^- = \pi \frac{B_r}{A_r} J_r \quad (2.3.15)$$

Pentru un model cu două fluxuri, coeficienții  $A_r$  și  $B_r$  sunt:

$$A_r = 2 \quad ; \quad B_r = 2$$

astfel că densitățile fluxurilor de căldură prin radiație sunt:

$$\dot{q}_r^+ = \pi I_r \quad ; \quad \dot{q}_r^- = \pi J_r \quad (2.3.16)$$

Condițiile pe contur la pereții solizi ai focarului sunt:

$$\dot{q}_{n,p}^+ = (1 - \varepsilon_p) \dot{q}_{n,p}^- + \left( \frac{B_n}{A_n} \right)_p \varepsilon_p \sigma T_p^4 \quad (2.3.17)$$

$$\dot{q}_{n,p}^- = (1 - \varepsilon_p) \dot{q}_{n,p}^+ + \left( \frac{B_n}{A_n} \right)_p \varepsilon_p \sigma T_p^4 \quad (2.3.18)$$

iar pe axa de simetrie:

$$\dot{q}_a^+ = \dot{q}_a^- \quad (2.3.19)$$

Din rezolvarea sistemului de ecuații diferențiale (2.3.13 - 2.3.14) rezultă termenul de sursă negativ din ecuația entalpiei:

$$\operatorname{div} \dot{q}_R = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r(\dot{q}_r^+ - \dot{q}_r^-)] \quad (2.3.20)$$

precum și densitatea fluxului termic net prin radiație le perete:

$$(\dot{q}_{n,p}) = \dot{q}_{n,p}^+ - \dot{q}_{n,p}^- \quad (2.3.21)$$

Pentru rezolvare, cele două ecuații diferențiale de ordinul I (2.3.13 - 2.3.14) se aduc la forma unei ecuații de transport de ordinul II prin schimbarea de variabilă:

$$F_r = \frac{2}{3} (\dot{q}_r^+ - \dot{q}_r^-)$$

astfel rezultă:

$$-\frac{d}{dr} \left( \frac{r^2}{rA_r K_a + 1} \cdot \frac{dF_r}{dr} \right) - rK_a \left( \frac{4}{3} B_r \sigma T^4 - A_r F_r \right) = 0 \quad (2.3.22)$$

Condițiile pe contur ale aceste ecuații sunt:

- la pereți:

$$\frac{r(2 - \varepsilon_p)}{rA_r K_a + 1} \cdot \frac{dF_r}{dr} + \varepsilon_p F_r - \frac{4}{3} \frac{B_r}{A_r} \varepsilon_p \sigma T_p^4 = 0 \quad (2.3.23)$$

- în axa de simetrie:

$$\frac{dF_r}{dr} = 0 \quad (2.3.24)$$

După introducerea variabilei  $F_r$  termenul sursă negativ din ecuația de transport a entalpiei devine:

$$\operatorname{div} \dot{q}_R = 2K_a B_r \sigma T^4 - \frac{3}{2} A_r F_r \quad (2.3.25)$$

iar densitatea fluxului net prin radiație la perete:

$$(\dot{q}_{R,r})_P = -\frac{3}{2} \cdot \frac{r}{r A_r K_a + 1} \cdot \frac{dF_r}{dr} \quad (2.3.26)$$

## 2.4 Arderea combustibililor solizi

În [5] s-a făcut o trecere în revistă a diferitelor modele de ardere a cărbunelui sub formă de praf, astfel că în lucrarea de față se vor prezenta doar noțiunile care sunt în legătură cu modelările efectuate.

### Modele adimensionale

Modelele adimensionale cuprind doar bilanțul material al produselor arderii. Relațiile de calcul sunt prezentate pe larg în lucrările de specialitate [1, 2, 18, 25, 28, 29]. Pentru modelările efectuate importanța acestor bilanțuri constă în faptul că pe baza lor se pot stabili factorii de normare (închidere) ai formulelor.

### Modele unidimensionale

Modelele unidimensionale au la bază determinarea timpului de ardere a particulelor de praf de cărbune. În [25, 26] sunt enumerate încercările lui Nusselt, Tu, Gumz, Spalding, Essenhigh, care au obținut cele mai variate expresii pentru timpul de ardere al particulelor. Tu și Spalding au obținut expresii în funcție de pătratul diametrului particulei, care este urmată și astăzi [3].

Timpul total de ardere al particulei de cărbune este suma timpilor fazelor de devolatilizare, ardere a volatilelor și ardere a rezidului carbonos [1, 2, 3, 26]:

$$\tau_{tot} = \tau_p + \tau_v + \tau_r \quad (2.4.1)$$

Pentru timpul de pregătire s-au abordat două căi, una teoretică și cealaltă semiempirică. Calea teoretică face apel la schimbul nestaționat de căldură între particula considerată sferică și mediul înconjurător [26], scriind o ecuație criterială:

$$\frac{t}{t_a} = f(Bi, Fo, \frac{r}{r_0}) \quad (2.4.2)$$

unde  $t$  este temperatura particulei la timpul  $\tau$ ,  
 $t_a$  este temperatura mediului,  
 $Bi$  și  $Fo$  sunt criteriile Biot și Fourier,  
 $r_0$  și  $r$  sunt razele exterioare, respectiv curente a  
 particulei.

Din criteriul  $Fo$  rezultă timpul necesar pentru ca particula să ajungă la o anumită temperatură, considerată temperatura de aprindere.

Întrucât calea este greu abordabilă, s-au căutat experimental dependențe dintre timpul de pregătire și diverși parametri [2, 3, 26], scriindu-se o relație de forma:

$$\tau_p = K_p \cdot d_{mc}^{r_1} \cdot T_0^n \cdot T_a^{n_a} \cdot O_2^z \cdot w^r \quad (2.4.3)$$

unde  $K_p$  este un coeficient ce ține cont de calitatea combustibilului, în  $s \cdot K^4/cm$ ,  
 $d_{mc}$  este diametrul mediu corectat al particulei, în cm,  
 $T_0$  este temperatura mediului, în K,  
 $T_a$  este temperatura aerului preîncălzit introdus în focar, în K,  
 $O_2$  este concentrația de oxigen, în %,  
 $w$  este viteza de spălare a aerului, în cm/s, iar  
 $r_1, n, n_a, z, r$  sunt exponenți determinați experimental.

Valorile exponenților sunt:  $r_1 = 0,62$ , ceea ce înseamnă influența redusă a dimensiunii particulei,  $n = -4,05$ , ceea ce relevă importanța deosebită a schimbului de căldură prin radiație,  $n_a = -1,75$ , adică o influență mai mare decât cea dată de convecția a temperaturii aerului preîncălzit, iar exponenții  $z$  și  $r$  au variat în funcție de sortimentul de cărbune.

Pentru timpul de ardere a materiilor volatile [26] prezintă deducerea teoretică a relației:

$$\tau_v = \frac{\rho_0 \left( \frac{V}{100} \right)}{8 \cdot C_0 \cdot \frac{e^3}{k_0 \cdot S_0^2} \cdot \frac{1}{\eta'}} \cdot d_0^2 \quad (2.4.4)$$

unde  $\rho_0$  este densitatea aparentă a particulei, în  $g/cm^3$ ,  
 $V$  este conținutul în volatile, în %,  
 $C_0$  este concentrația volatilelor la suprafața rețelei poroase,  
 $e$  este porozitatea rețelei,  
 $k_0$  este constanta lui Kozeney,  
 $S_0$  este volumul specific al suprafeței,  
 $\eta'$  este vâscozitatea volatilelor.

Relația a fost dedusă după modelul picăturii de combustibil lichid al lui Spalding. Pusă sub forma:

$$\tau_v = K_v \cdot d_{mc}^{m_1} \quad (2.4.5)$$

unde  $K_v$  este un coeficient, în  $s/cm^2$ , relația a fost verificată experimental. Exponentul  $m_1$  a variat între 1,7 și 2,23, cu multe valori în jur de 2, ceea ce este în acord cu teoria.

Pentru timpul de ardere al reziduului carbonos [26] prezintă deducerea teoretică a relației:

$$\tau_r = \frac{\rho_p}{3 \cdot \rho_0 \cdot D_0 \cdot C_g \left( \frac{T}{T_0} \right)^{n-1}} \cdot d_0^2 \quad (2.4.6)$$

unde  $\rho_p$  și  $\rho_0$  sunt densitățile momentană și inițială a particulei, în  $g/cm^3$ ,  
 $D_0$  este coeficientul de difuzivitate inițial, egal cu  $0,18 \text{ cm}^2/s$ ,  
 $C_g$  este concentrația masică a oxigenului în mediul înconjurător,  
 $T$  este temperatura mediului înconjurător, în K, iar  
 $n = 1,75$ , din teoria cinetică a gazelor.

Verificările experimentale s-au făcut pe relația (2.4.6) pusă sub forma:

$$\tau_r = K_r \cdot d_{mc}^{m_r} \quad (2.4.7)$$

respectiv cu luarea în considerare a mai multor corecții:

$$\tau_r = \varphi \cdot \psi \cdot B_r \cdot T_a^{n_a} \cdot w^a \cdot K_{r0} \cdot d_{mc}^{m_r} \quad (2.4.8)$$

unde  $\varphi$  este o funcție liniară de inversa temperaturii mediului înconjurător,  
 $\psi$  este o funcție liniară de inversa concentrației de oxigen în mediul înconjurător,  
 $B_r$  este un coeficient dependent de sortimentul cărbunelui,  
 $T_a$  și  $w$  ca la relația (2.4.3),  
 $K_{r0}$  este determinat la temperatura de  $1000 \text{ }^\circ\text{C}$  și  $21 \%$   $\text{O}_2$ .

Exponentii  $n_a$  și  $a$  au valori de  $-0,7$ , respectiv  $-0,3$ , ceea ce indică influența redusă a  $T_a$  și  $w$ , iar  $m_r$  a variat între  $1,71$  și  $2,13$ , cu multe valori în jur de  $2$ , în acord cu teoria.

Alți autori determină durata celor trei faze pe baza asimilării lor cu reacțiile chimice acceptând legea lui Arrhenius:

$$K = K_0 \exp \left( -\frac{E}{RT} \right) \quad (2.4.9)$$

unde  $K_0$  este factorul de frecvență,  
 $E$  este energia de activare, în J/mol,  
 $R$  este constanta universală a gazelor, în J/mol K, iar  
 $T$  este temperatura, în K.

Zelkowski în [59] admite că toate cele trei faze se pot modela cu relația (2.4.9) și propune determinarea a șase constante, câte o pereche ( $K_0$ ,  $E$ ) pentru fiecare fază. Evident, devolatilizarea nu este o reacție chimică și nu se supune relației (2.4.9), iar Zelkowski în lucrarea ulterioară [25] va renunța la acest model.



Pentru devolatilizare Smith și Smooth [60] propun o relație complet diferită de (2.4.9), însă admit această lege pentru fazele de ardere a volatilelor și a rezidului carbonos.

Cercetările experimentale [25, 26] au arătat că pentru arderea prafului de cărbune de granulație normală devolatilizarea are o durată de ordinul unei sutimi de secundă, arderea volatilelor durează circa o zecime de secundă iar arderea rezidului carbonos durează circa o secundă. Durata relativ scurtă de devolatilizare a condus la contopirea timpilor de devolatilizare și de ardere a volatilelor, rezultând un model de ardere bifazic, acceptat actual de majoritatea autorilor [10, 25, 61, 62], inclusiv în lucrarea de față. În aceste condiții, modelul arderii prafului de cărbune se reduce la aplicarea de două ori a relației (2.4.9), de fiecare dată cu altă pereche de constante ( $K_0$ ,  $E$ ), determinate experimental.

Modelele unidimensionale se pot completa cu determinarea legii de degajare a căldurii de ardere în funcție de timp. Această lege poate fi liniară sau exponențială, după modelul reacțiilor chimice [27]. Admițând un model simplu al reacțiilor chimice, adică că arderea se produce conform reacțiilor chimice corespunzătoare bilanțului material al produselor arderii, fără etape intermediare, se poate considera că concentrațiile diferitelor specii chimice sunt proporționale cu cantitatea de căldură degajată, ceea ce face ca procedeul să fie suficient pentru calculul termenilor sursă din relațiile de transport prezentate în cap. 2.1. Ca urmare, acest procedeu, deși nu explică mecanismele arderii este larg folosit la modelarea focarelor.

### Modele pluridimensionale

Modelele pluridimensionale își propun modelarea în profunzime a fenomenelor, încercând să studieze structura microatmosferei din jurul particulei, schimbul de căldură și de masă cu mediul înconjurător etc. Se folosesc modele de ardere a particulei la densitate constantă sau la volum constant [25]. Deoarece suprafața de reacție proasă a particulei este mult mai mare decât suprafața geometrică a unei sfere în care se înscrie particula, rezultatele stabilite pe baza cineticii reacțiilor chimice la nivelul unei suprafețe diferă mult de realitate. [63] introduce noțiunea de reactivitate a cărbunilor care compensează acest efect, însă autorul însuși admite că această proprietate este dificil de stăpânit. În spațiu se admit distribuții statistice ale granulelor de diferite dimensiuni (praf polidispers).

Modelarea microatmosferei din jurul particulei se face considerând în jurul particulei de cărbune un front de flacără [25, 26] care apare într-o poziție în care sunt satisfăcute simultan o serie de condiții, și anume, o concentrație suficientă a reactanților (materii combustibile și oxigen) și o temperatură suficientă întreținerii arderii. În [26] se prezintă un sistem de ecuații diferențiale între concentrațiile reactanților, iar în [64] se dau constantele vitezelor de reacție. Modelele sunt excesiv de complexe pentru calcule practice.

### 2.4.1 Devolatilizarea și arderea volatilelor

În [25] se admite că în modelul bifazic faza de devolatilizare și ardere a volatilelor are loc în timp ce temperatura particulei de cărbune crește liniar. Pentru o variație liniară a temperaturii  $dT/d\tau = m = \text{constatant}$ , [65] adaptează legea lui Arrhenius (2.4.9) scriind relația:

$$\frac{dV}{d\tau} = \frac{dV}{dT} \cdot \frac{dT}{d\tau} = K_0 (V_0 - V) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.4.10)$$

unde  $V_0$  este cantitatea de volatili inițială, iar  $V$  este cantitatea de volatili la momentul  $\tau$ .

Relația (2.4.10) devine:

$$\frac{dV}{dT} = \frac{K_0}{m} (V_0 - V) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.4.11)$$

Separând variabilele și integrând se obține:

$$\int_0^V \frac{dV}{V_0 - V} = \frac{K_0}{m} \cdot I \quad (2.4.12)$$

unde  $I$  este integrala:

$$I = \int \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) dT \quad (2.4.13)$$

Efectuând integrala se obține:

$$V_0 - V = V_0 \exp\left(-\frac{K_0}{m} \cdot I\right) \quad (2.4.14)$$

de unde rezultă:

$$1 - \frac{m}{m_0} = \exp\left(-\frac{K_0}{m} \cdot I\right) \quad (2.4.15)$$

Pentru integrala  $I$ , [65] a dat soluția:

$$I = T \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) + \frac{E}{R} \text{Ei}\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.4.16)$$

Funcția F poate fi dezvoltată în serie de puteri:

$$f\left(-\frac{E}{RT}\right) = \frac{\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)}{\frac{E}{RT}} \left[ 1 - \frac{1!}{\frac{E}{RT}} + \frac{2!}{\left(\frac{E}{RT}\right)^2} - \dots \right] \quad (2.4.17)$$

Intrucât mărimea  $E/RT$  este mare, este suficientă reținerea primilor doi termeni din seria de puteri, astfel că integrala I devine:

$$I = \frac{RT^2}{E} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.4.18)$$

Substituind în (2.4.15) se obține:

$$V_0 - V = V_0 \exp\left[-\frac{K_0}{m} \cdot \frac{RT^2}{E} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)\right] \quad (2.4.19)$$

iar aceasta substituită în (2.4.11) dă:

$$\frac{dV}{dT} = \frac{K_0 V_0}{m} \exp\left[-\frac{E}{RT} - \frac{K_0 R}{mE} T^2 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)\right] \quad (2.4.20)$$

Folosirea relației (2.4.20) în calcule practice necesită determinarea constantelor cinetice  $E$  și  $K_0$ . În continuare se prezintă o metodă originală de determinare a acestor constante.

#### **Determinarea constantelor cinetice pentru arderea volatilelor**

Dacă se dispune de o serie de perechi de valori ( $dV/dT$ ,  $T$ ) determinate experimental [65, 66], pentru determinarea constantelor cinetice se poate aplica metoda celor mai mici pătrate în modul următor:

a) Relația (2.4.20) se scrie pentru fiecare punct determinat sub forma:

$$\delta_i = \frac{K_0 V_0}{m} \exp\left[-\frac{E}{RT_i} - \frac{K_0 R}{mE} T_i^2 \exp\left(-\frac{E}{RT_i}\right)\right] - \left(\frac{dV}{dT}\right)_i \quad (2.4.21)$$

relație care se ridică la pătrat și se sumează pentru toate valorile  $i$  ;

b) Se calculează derivatele parțiale ale sumei obținute față de  $E$  și  $K_0$ . Eroarea minimă se obține când aceste derivate sunt nule, astfel încât se poate scrie sistemul:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \sum_{i=1}^n \delta_i^2}{\partial E} = 0 = F_{(E, K_0)} \\ \frac{\partial \sum_{i=1}^n \delta_i^2}{\partial K_0} = 0 = G_{(E, K_0)} \end{array} \right. \quad (2.4.22)$$

Acesta este un sistem neliniar, care poate fi rezolvat prin metoda Newton, dacă se cunoaște o soluție aproximativă bună.

Pentru calculul derivatelor parțiale ce apar se procedează în modul următor:

Expresia (2.4.21) se pune sub forma:

$$z = \frac{dV_i}{dT} = \exp(y) \quad (2.4.23)$$

unde expresia  $y$  este:

$$y = \ln \frac{K_0 V_0}{m} - \frac{E}{RT} + \frac{K_0 R}{mE} T^2 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.4.24)$$

Pentru necesitățile elaborării unui algoritm și simplificarea scrierii se introduc următoarele notații:

$$\begin{aligned} L &= \ln \frac{K_0 V_0}{m} \\ B &= -\frac{E}{RT} \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

$$C = \frac{K_0 R}{mE} T^2 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

Folosind notația  $B$ , definită mai sus, termenul  $C$  devine:

$$C = \frac{K_0}{mB} T e^B \quad (2.5.26)$$

Pentru elaborarea unui algoritm este nevoie să se facă pași de calcul foarte mici. Se calculează derivatele parțiale ale fiecărui termen:

$$\frac{\partial L}{\partial E} = 0$$

unde  $A$  este de asemenea o notație.

$$\frac{\partial L}{\partial K_0} = \frac{1}{K_0 V_0} \cdot \frac{V_0}{m} = \frac{1}{K_0}$$

$$\frac{\partial B}{\partial E} = -\frac{1}{RT} = A$$

$$\frac{\partial B}{\partial K_0} = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial E} &= \frac{K_0 T}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{e^B}{B} \right) = \frac{K_0 T}{m} \left[ e^B \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{1}{B} \right) + \frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial E} e^B \right] = \\ &= \frac{K_0 T}{m} \left[ e^B \left( -\frac{1}{B^2} \right) \frac{\partial B}{\partial E} + \frac{1}{B} e^B \frac{\partial B}{\partial E} \right] = \\ &= -\frac{K_0 T}{mB} e^B \left( \frac{A}{B} - A \right) = -C \left( \frac{1}{E} - A \right) = -CH \end{aligned}$$

unde cu H s-a notat expresia:

$$H = \frac{1}{E} - A$$

iar derivatele parțiale ale funcției H sunt:

$$\frac{\partial C}{\partial E} = -\frac{1}{E^2}$$

$$\frac{\partial H}{\partial K_0} = 0$$

Ultima derivată parțială a unei expresii intermediare:

$$\frac{\partial C}{\partial K_0} = \frac{1}{mB} T e^B = \frac{C}{K_0}$$

Cu acestea, derivatele parțiale de ordinul I ale funcției y devin:

$$\frac{\partial y}{\partial E} = 0 + A - CH = A - CH$$

$$\frac{\partial y}{\partial K_0} = \frac{1}{K_0} + 0 + \frac{C}{K_0} = \frac{1 + C}{K_0}$$

În continuare se calculează derivatele parțiale de ordinul II ale funcției  $y$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 y}{\partial E^2} &= \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{\partial y}{\partial E} \right) = \frac{\partial}{\partial E} (A - CH) = \frac{\partial A}{\partial E} - \left( \frac{\partial C}{\partial E} H + C \frac{\partial H}{\partial E} \right) = \\ &= 0 - \left[ -CH \cdot H + C \left( -\frac{1}{E^2} \right) \right] = C \left( H^2 + \frac{1}{E^2} \right)\end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial E \partial K_0} = \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{\partial y}{\partial K_0} \right) = \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{1 + C}{K_0} \right) = \frac{1}{K_0} \frac{\partial C}{\partial E} = -\frac{CH}{K_0}$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial K_0^2} = \frac{\partial}{\partial K_0} \left( \frac{\partial y}{\partial K_0} \right) = \frac{\partial}{\partial K_0} \left( \frac{1}{k_0} + \frac{C}{K_0} \right) = \frac{\partial}{\partial K_0} \left( \frac{1}{K_0} \right) + 0 = -\frac{1}{K_0^2}$$

Ultima relație se poate scrie deoarece expresia  $C/K_0$  nu depinde de  $K_0$  (v. relația 2.4.26).

Pe baza derivatelor parțiale ale funcției  $y$ , calculate mai sus se pot calcula derivatele parțiale de ordinul I și II ale funcției  $z$ . Derivatele parțiale de ordinul I sunt:

$$\frac{\partial z}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E} (e^y) = e^y \frac{\partial y}{\partial E} = z \frac{\partial y}{\partial E}$$

$$\frac{\partial z}{\partial K_0} = \frac{\partial}{\partial K_0} (e^y) = e^y \frac{\partial y}{\partial K_0} = z \frac{\partial y}{\partial K_0}$$

iar cele de ordinul II:

$$\frac{\partial^2 z}{\partial E^2} = \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{\partial z}{\partial E} \right) = \frac{\partial}{\partial E} \left( z \frac{\partial y}{\partial E} \right) = \frac{\partial z}{\partial E} \cdot \frac{\partial y}{\partial E} + z \frac{\partial^2 y}{\partial E^2}$$

$$\frac{\partial^2 z}{\partial E \partial K_0} = \frac{\partial}{\partial K_0} \left( \frac{\partial z}{\partial E} \right) = \frac{\partial}{\partial K_0} \left( z \frac{\partial y}{\partial E} \right) = \frac{\partial z}{\partial K_0} \cdot \frac{\partial y}{\partial E} + z \frac{\partial^2 y}{\partial E \partial K_0}$$

$$\frac{\partial^2 z}{\partial K_0^2} = \frac{\partial}{\partial K_0} \left( \frac{\partial z}{\partial K_0} \right) = \frac{\partial}{\partial K_0} \left( z \frac{\partial y}{\partial K_0} \right) = \frac{\partial z}{\partial K_0} \cdot \frac{\partial y}{\partial K_0} + z \frac{\partial^2 y}{\partial K_0^2}$$

Metoda Newton de rezolvare a unui sistem de două ecuații neliniare (2.4.23) constă în corectarea valorilor inițiale  $E$  și  $K_0$  cu diferențele  $\Delta E$  și  $\Delta K_0$  determinate cu relațiile:

$$\Delta E = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} \frac{\partial F}{\partial K_0} & F \\ \frac{\partial G}{\partial K_0} & G \end{vmatrix} = \frac{1}{J} \left( G \frac{\partial F}{\partial K_0} - F \frac{\partial G}{\partial K_0} \right) \quad (2.4.28)$$

$$\Delta K_0 = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} F & \frac{\partial F}{\partial E} \\ G & \frac{\partial G}{\partial E} \end{vmatrix} = \frac{1}{J} \left( F \frac{\partial G}{\partial E} - G \frac{\partial F}{\partial E} \right) \quad (2.4.29)$$

unde  $J$  este Jacobianul sistemului (2.4.23):

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial F}{\partial E} & \frac{\partial F}{\partial K_0} \\ \frac{\partial G}{\partial E} & \frac{\partial G}{\partial K_0} \end{vmatrix} = \frac{\partial F}{\partial E} \cdot \frac{\partial G}{\partial K_0} - \frac{\partial F}{\partial K_0} \cdot \frac{\partial G}{\partial E} \quad (2.4.30)$$

În continuare se calculează derivatele parțiale necesare sistemului (2.4.23):

$$\frac{\partial F}{\partial E} = 2 \frac{\partial}{\partial E} \left( \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial E} \right) = 2 \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \delta_i}{\partial E} \cdot \frac{\partial \delta_i}{\partial E} + \delta_i \frac{\partial^2 \delta_i}{\partial E^2} \right) \quad (2.4.31)$$

$$\frac{\partial F}{\partial K_0} = 2 \frac{\partial}{\partial K_0} \left( \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial E} \right) = 2 \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} \cdot \frac{\partial \delta_i}{\partial E} + \delta_i \frac{\partial^2 \delta_i}{\partial K_0 \partial E} \right) \quad (2.4.32)$$

$$\frac{\partial G}{\partial E} = 2 \frac{\partial}{\partial E} \left( \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} \right) = 2 \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \delta_i}{\partial E} \cdot \frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} + \delta_i \frac{\partial^2 \delta_i}{\partial E \partial K_0} \right) \quad (2.4.33)$$

$$\frac{\partial G}{\partial K_0} = 2 \frac{\partial}{\partial K_0} \left( \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} \right) = 2 \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} \cdot \frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} + \delta_i \frac{\partial^2 \delta_i}{\partial K_0^2} \right) \quad (2.4.34)$$

Se observă că:

$$\frac{\partial F}{\partial K_0} = \frac{\partial G}{\partial E}$$

Diferențele  $\delta_i$  sunt de fapt expresiile (2.4.22):

$$\delta_i = z_i - \left( \frac{dV}{dT} \right)_i \quad (2.4.35)$$

unde ultimul termen este constant față de  $E$  și  $K_0$  (este de fapt măsurat), deci în expresiile (2.4.31 - 2.4.34) toate derivatele lui  $\delta_i$  pot fi înlocuite cu derivatele lui  $z_i$ . Cu aceste expresiile (2.4.31 - 2.4.34) devin:

$$\frac{\partial F}{\partial E} = 2 \sum_{i=1}^n \left[ \left( \frac{\partial z_i}{\partial E} \right)^2 + \delta_i \frac{\partial^2 z_i}{\partial E^2} \right] \quad (2.4.36)$$

$$\frac{\partial F}{\partial K_0} = \frac{\partial G}{\partial E} = 2 \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial z_i}{\partial E} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial K_0} + \delta_i \frac{\partial^2 z_i}{\partial E \partial K_0} \right) \quad (2.4.37)$$

$$\frac{\partial G}{\partial K_0} = 2 \sum_{i=1}^n \left[ \left( \frac{\partial z_i}{\partial K_0} \right)^2 + \delta_i \frac{\partial^2 z_i}{\partial K_0^2} \right] \quad (2.4.38)$$

Funcțiile  $F$  și  $G$  (2.4.22) sunt:

$$F = 2 \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial E} = 2 \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial z_i}{\partial E} \quad (2.4.39)$$

$$G = 2 \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} = 2 \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial z_i}{\partial K_0} \quad (2.4.40)$$

Coeficientul 2, provenit din pătratul expresiilor (2.4.23) apare atât în expresia derivatelor (2.4.31 - 2.4.34) și (2.4.36 - 2.4.38), cât și a funcțiilor (2.4.39 - 2.4.40). Examinând relațiile (2.4.28 - 2.4.30) rezultă că el se reduce și deci poate fi omis în calcule.



### 2.4.2 Arderea reziduului carbonos

În [25] se admite că în modelul bifazic arderea reziduului carbonos are loc la temperatură constantă, practic egală cu temperatura mediului din jurul particulei, adică admite ipoteza că degajarea de căldură prin arderea reziduului carbonos compensează cedarea de căldură de către mediul din jurul particulelor pereților focarului, ceea ce corespunde în bună măsură realității. Această ipoteză permite ca determinările constantelor cinetice ale arderii reziduului carbonos să se poată face de la legea lui Arrhenius (2.4.9), mult mai simplă ca relația (2.4.21).

Folosirea relației (2.4.9) în calcule practice necesită de asemenea determinarea constantelor cinetice corespunzătoare,  $E$  și  $K_0$ . În continuare se prezintă o metodă originală de determinare a acestor constante.

#### Determinarea constantelor cinetice pentru arderea reziduului carbonos

Dacă se dispune de o serie de perechi de valori ( $K, T$ ) determinate experimental, pentru determinarea constantelor cinetice se poate aplica metoda celor mai mici pătrate în modul următor:

Întrucât temperatura este constantă, aplicarea metodei celor mai mici pătrate la determinarea constantelor  $K_0$  și  $E$  se poate face și asupra logaritmului expresiei (2.4.9), considerație falsă pentru relația (2.4.21).

Logaritmând expresia (2.4.9) se obține:

$$\ln K = \ln K_0 - \frac{E}{RT} \quad (2.4.41)$$

Se procedează în următoarele etape:

a) Relația (2.4.41) se scrie pentru fiecare punct determinat sub forma:

$$\delta_i = \ln K_0 - \ln K_i - \frac{E}{RT_i} \quad (2.4.41)$$

relație care se ridică la pătrat și se sumează pentru toate valorile  $i$  ;

b) Se calculează derivatele parțiale ale sumei obținute față de  $E$  și  $K_0$ . Eroarea minimă se obține când aceste derivate sunt nule, astfel încât se poate scrie sistemul:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \sum_{i=1}^n \delta_i^2}{\partial E} = 0 = F_{(E, K_0)} \\ \frac{\partial \sum_{i=1}^n \delta_i^2}{\partial K_0} = 0 = G_{(E, K_0)} \end{array} \right. \quad (2.4.43)$$

Acesta este un sistem liniar, care poate fi rezolvat prin metode analitice după cum urmează:

Se calculează efectiv derivatele din sistemul (2.4.43):

$$\frac{\partial}{\partial E} \sum_{i=1}^n \delta_i^2 = 2 \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial E} \quad (2.4.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial K_0} \sum_{i=1}^n \delta_i^2 = 2 \sum_{i=1}^n \delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} \quad (2.4.45)$$

Intrucât conform (2.4.43) relațiile (2.4.44 - 2.4.45) vor fi egale cu 0, coeficientul 2 se poate omite.

$$\frac{\partial \delta_i}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E} \left( \ln K_0 - \ln K_i - \frac{E}{RT_i} \right) = -\frac{1}{RT_i} \quad (2.4.46)$$

$$\frac{\partial \delta_i}{\partial K_0} = \frac{\partial}{\partial K_0} \left( \ln K_0 - \ln K_i - \frac{E}{RT_i} \right) = \frac{1}{K_0} \quad (2.4.47)$$

Cu care relațiile (2.4.44 - 2.4.45) devin:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \left( \ln K_0 - \ln K_i - \frac{E}{RT_i} \right) \cdot \left( -\frac{1}{RT_i} \right) = \\ = -\frac{1}{R} \left( \ln K_0 \sum_{i=1}^n \frac{1}{T_i} - \sum_{i=1}^n \frac{\ln K_i}{T_i} - \frac{E}{R} \sum_{i=1}^n \frac{1}{T^2} \right) \end{aligned} \quad (2.4.48)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \left( \ln K_0 - \ln K_i - \frac{E}{K_0} \right) \cdot \frac{1}{K_0} = \\ = -\frac{1}{K_0} \left( \sum_{i=1}^n \ln K_0 - \sum_{i=1}^n \ln K_i - \frac{E}{R} \sum_{i=1}^n \frac{1}{T} \right) \end{aligned} \quad (2.4.49)$$

iar sistemul devine:

$$\begin{cases} \ln K_0 \sum_{i=1}^n \frac{1}{T_i} - \frac{E}{R} \sum_{i=1}^n \frac{1}{T_i^2} = \sum_{i=1}^n \frac{\ln K_i}{T_i} \\ n \ln K_0 - \frac{E}{R} \sum_{i=1}^n \frac{1}{T_i} = \sum_{i=1}^n \ln K_i \end{cases} \quad (2.4.50)$$

care este un sistem liniar în  $K_0$  și  $E/R$  și poate fi rezolvat prin substituție. Scoțând valoarea  $\ln K_0$  din a doua ecuație:

$$\ln K_0 = \frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^n \ln K_i + \frac{E}{R} \sum_{i=1}^n \frac{1}{T_i} \right) \quad (2.4.51)$$

și substituind-o în prima ecuație se obține:

$$\frac{E}{R} = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{\ln K_i}{T_i} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln K_i \cdot \sum_{i=1}^n \frac{1}{T_i}}{\frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^n \frac{1}{T_i} \right)^2 - \sum_{i=1}^n \frac{1}{T_i^2}} \quad (2.4.52)$$

care împreună cu relația (2.4.51) constituie soluția sistemului (2.4.43).

## 2.5 Formarea noxelor.

### 2.5.1 Formarea oxizilor de sulf.

Modelul matematic al formării și reducerii oxizilor de sulf în timpul arderii este expus în [13, 68].

Modelul desulfurării gazelor de ardere cu CaO admite că aditivii sunt formați din particule absorbante de  $\text{CaCO}_3$  sau  $\text{Ca(OH)}_2$ , sferice având raza inițială  $R_0$  [cm] și o structură poroasă. După absorbția în pori a  $\text{SO}_2$  acesta reacționează cu pereții de CaO producând  $\text{CaSO}_4$ , fenomen numit sulfatare.  $\text{CaSO}_4$  format colmatează porii reducând suprafața de reacție. Procesul continuă până când toată particula este acoperită cu un strat de  $\text{CaSO}_4$ , care oprește reacția. Modelul conține mai multe etape.

**Calcinarea.** Prin calcinare aditivii  $\text{CaCO}_3$  și  $\text{Ca(OH)}_2$  se transformă în CaO, care absoarbe  $\text{SO}_2$ . Calcinarea și desulfurarea sunt descrise de următoarele reacții chimice:



Calcinarea particulelor de calcar este considerată o reacție cinetică. Ca urmare, suprafața particulei de calcar, care încă nu a devenit CaO este descrisă de o reacție de ordinul întâi:

$$i \frac{d(\text{CaCO}_3)}{d\tau} = -K \cdot A_{\text{CaCO}_3} \quad (2.5.1)$$

unde  $(\text{CaCO}_3)$  este masa calcarului care încă nu a reacționat, în [moli],

$K = 10,303 \exp(10980/T)$  este constanta de echilibru, în [moli/cm<sup>2</sup> s],

$A_{\text{CaCO}_3}$  este suprafața calcarului, în [cm<sup>2</sup>].

Făcând ipotezele că suprafața internă specifică a calcarului este constantă în timpul calcinării, temperatura de calcinare este constantă, iar particula de calcar are dimensiuni mici (sub 120 μm) relația (2.5.1) poate fi reformulată astfel:

$$\ln(1 - X) = -K \cdot S_g \cdot \tau \quad (2.5.2)$$

unde X este procentul de calcar care încă nu a reacționat,

$S_g$  este suprafața specifică inițială a calcarului, în [cm<sup>2</sup>/mol],

$\tau$  este timpul de reacție, în [s].

**Sinterizarea.** În timpul calcinării CaO sinterizează. Sinterizarea CaO are o influență majoră asupra sulfatării. deoarece sinterizarea se face la temperatură înaltă densitatea structurii poroase a CaO crește. Prin gruparea mai multor particule crește volumul particulelor de CaO și se modifică porozitatea și suprafața internă specifică. Silcox a propus următoarea relație pentru suprafața specifică a particulei:

$$\frac{dS_m}{d\tau} = -2450 (1 + 50,7 P_{H_2O}^{0,17} + 10,3 P_{CO_2}^{0,67}) \cdot \exp\left(-\frac{29600}{T}\right) (S_m - 5000)^2 \quad (2.5.3)$$

unde  $S_m$  este suprafața specifică a particulei, în [ m<sup>2</sup>/kg ],  
 $P_{H_2O}$  este presiunea parțială a vaporilor de apă, în [ kPa ],  
 $P_{CO_2}$  este presiunea parțială a bioxidului de carbon, în [ kPa ],  
 $T$  este temperatura, în [ K ].

**Modelul micșorării miezului.** Modelul a fost propus de Pershing și Silcox. Conform acestui model calcinarea, sinterizarea și sulfatarea au loc simultan la nivelul unui front de reacție sferic a cărui rază se micșorează treptat. Prin calcinare apar granule de CaO cu structură poroasă și o suprafață cu mult mai mare decât cea a particulei absorbante inițiale. Amestecul de SO<sub>2</sub> și vaporii de H<sub>2</sub>O reacționează în pori cu CaO producând CaSO<sub>4</sub> care are o suprafață cu mult mai mică, datorită sinterizării.

Ecuția (2.5.2) se calculează pentru diferite intervale de timp  $\Delta\tau$  arbitrare, în care suprafața specifică și temperatura sunt considerate constante. pentru fiecare  $\Delta\tau$  calculat se obține procentajul  $X_c$  al conversiei CaCO<sub>3</sub>:

$$X_c = 1 - \left[ 1 - \frac{K_c}{(0,01 \cdot D_o)^{0,6}} (\tau + \Delta\tau) \right]^3 \quad (2.5.4)$$

unde  $K_c$  este constanta vitezei de reacție pentru calcinare, în [ m<sup>0,6</sup>/s ],  
 $D_o$  este diametrul inițial al particulei, în [ cm ].

Constantele vitezei de reacție pentru calcinare au expresiile:

$$K_c = 10,303 \exp(-10980/T) \text{ pentru calcinarea CaCO}_3$$

$$K_c = 53,870 \exp(-8300/T) \text{ pentru calcinarea Ca(OH)}_2$$

Raza  $R_c$  [ cm ] a suprafeței frontului de reacție la calcinare este calculată cu relația:

$$X_c = 1 - \left( \frac{R_c}{R_o} \right)^3$$

Procesul de sulfatare este descris de ecuația:

$$1 - 3(1 - X_s)^{2/3} + 2(1 - X_s) = K_{sd}\tau \quad (2.5.5)$$

unde  $X_s$  este procentul total de sulfatare al particulelor de  $\text{CaCO}_3$  sau  $\text{Ca(OH)}_2$ ,  
 $K_{sd}$  este constanta vitezei de sulfatare, în [  $\text{s}^{-1}$  ]

Procentul total de sulfatare la sfârșitul intervalului de timp  $\Delta\tau$  este:

$$X_s = 1 - \left(\frac{R_s}{R_o}\right)^3 \quad (2.3.6)$$

unde  $R_s$  este raza suprafeței de reacție la sfârșitul intervalului de timp  $\Delta\tau$ , în [ cm ].

Înlocuind relația (2.5.6) în (2.5.5), aceasta devine:

$$3\left(\frac{R_s}{R_o}\right)^2 - 2\left(\frac{R_s}{R_o}\right)^3 = 3\left(\frac{R_{so}}{R_o}\right)^2 - 2\left(\frac{R_{so}}{R_o}\right)^3 - K_{sd}\Delta\tau \quad (2.5.7)$$

unde  $R_{so}$  este raza suprafeței de reacție la începutul intervalului de timp  $\Delta\tau$ , în [ cm ].

Dacă  $R_s$  este mult mai mic decât  $R_o$ , în relația (2.5.7) se poate substitui  $R_s$  cu  $R_c$ . Constanta  $K_{sd}$  se determină din relația:

$$K_{sd} = \frac{6M_{\text{CaO}}D_eC_{\text{SO}_2}}{\rho_{\text{CaO}}R_o^2} \quad (2.5.8)$$

unde  $M_{\text{CaO}}$  este masa molară a CaO,  
 $D_e$  este coeficientul difuzivității efective, în [  $\text{cm}^2/\text{s}$  ],  
 $C_{\text{SO}_2}$  este concentrația  $\text{SO}_2$  în gazele de ardere,  
 în [  $\text{kmol}/\text{m}^3$  ],  
 $\rho_{\text{CaO}}$  este densitatea particulei poroase de CaO.

Coeficientul difuzivității efective are expresia:

$$D_e = 0,01 S_{mo} \exp\left(-\frac{14000}{T}\right)$$

unde  $S_{mo}$  este suprafața specifică internă la începutul intervalului de timp  $\Delta\tau$ , în [  $\text{m}^2/\text{kg}$  ].

Densitatea particulei poroase se calculează cu relația:

$$\rho_{\text{CaO}} = \rho_{\text{solid}} (1 - \varepsilon)$$

unde  $\rho_{\text{solid}}$  este densitatea CaO fără pori,  
 $\varepsilon$  este porozitatea particulei de  $\text{CaCO}_3$  sau  $\text{Ca(OH)}_2$ .

La sfârșitul unui interval de timp arbitrar se recalculează suprafața internă specifică  $S_m$  din ecuația de sinterizare:

$$S_m = S_{\min f} + \left\{ \frac{1}{S_{m0} - S_{\min f}} - \left[ -2450 (1 + 50,7 P_{H_2O}^{0,17} + 10,3 P_{CO_2}^{0,67}) \cdot \exp\left(-\frac{29600}{T}\right) \right] \Delta\tau \right\}^{-1} \quad (2.5.9)$$

unde  $S_{\min f}$  este suprafața specifică internă de echilibru asimptotic a  $CaCO_3$  sau  $Ca(OH)_2$ , în [ $m_2/kg$ ]. Ea este aproximată drept 1/10 din suprafața specifică internă inițială.

Pentru  $\tau = 0$ ,  $S_{m0}$  devine egală cu  $S_p$  (inițială).

**Modelul structurii porilor.** Teoria structurii porilor a lui Simons consideră o particulă sferică conținând pori de lungime  $l_p$  și de rază  $r_p$ . Raza celui mai mare por este  $r_{\max}$  și se determină cu relația:

$$r_{\max} = \frac{2a\theta^{1/3}}{3K_o}$$

unde  $\theta$  este porozitatea inițială a absorbantului calcinat,  $K_o$  este raportul (considerat constant) dintre lungimea porilor și diametrul lor, având de obicei valoarea 5,  $a$  este raza particulei sferice.

Raza minimă este  $r_{\min}$  și se determină cu relația:

$$r_{\min} = \frac{2\theta}{\beta \rho_{cs} S_p}$$

unde  $\rho_{cs}$  este densitatea particulei absorbante fără pori,  $S_p$  este suprafața specifică internă (suprafață/masă),  $\beta = \ln(r_{\max}/r_{\min})$ .

Lungimea porilor de rază  $r_p$  este dată de relația:

$$l_p = \frac{K_o r_p}{\theta^{1/3}}$$

Particula conține pori cu o distribuție continuă a dimensiunilor între  $r_{\min}$  și  $r_{\max}$ . Numărul porilor cu o secțiune arbitrară conținuți pe suprafața  $A$  și având razele cuprinse între  $r_p$  și  $r_p + dr_p$  este dat de expresia:

$$g_{(r_p)} \cdot A \cdot dr_p$$

Funcția de distribuție a porilor  $g_{(r_p)}$  este:

$$g_{(r_p)} = \frac{\theta}{2\pi\beta r_p}$$

Fiecare por care se deschide pe suprafața exterioară a particulei este considerat ca având o structură arborescentă (fig. 2.5.1). Distribuția dimensiunilor trunchiurilor porilor care se deschid pe suprafața externă a particulei este dată de expresia:

$$g_{(n)} \cdot 4\pi \cdot a^2 \cdot dn$$

unde  $g_{(n)}$  este funcțional identică cu  $g_{(r_p)}$ . Fiecare trunchi de rază  $r_t$  este asociat cu structura sa arborescentă specifică.

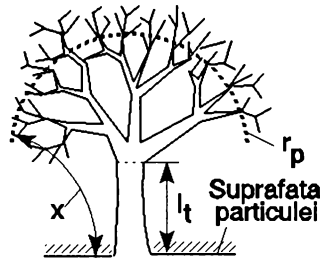


Fig. 2.5.1 Structura porilor.

Structura porilor este cu ramificare continuă și descreșterea continuă a razei lor. Raza și numărul porilor este numai în funcție de distanța  $x$  în arbore. Numărul porilor  $n_{(x)}$  de rază  $r_p$  la poziția  $x$  în arborele a cărui trunchi are raza  $r_t$  este dat de expresia:

$$n_{(x)} = \frac{r_t^2}{r_p^2(x)}$$

unde coordonata  $x$  este legată de  $r_p$  prin relația:

$$\frac{dr_p}{dx} = -\frac{r_p}{l_t}$$

unde  $l_t$  este lungimea trunchiului porului de rază  $r_t$ .

Teoria admite că suprafața totală a fiecărui por poate fi mai mare cu câteva ordine de mărime decât suprafața trunchiului porului, în timp ce volumul porului poate fi doar cu un ordin de mărime mai mare decât volumul trunchiului porului.

Când structura poroasă este în contact cu un mediu conținând  $SO_2$ , acesta va difuza în pori și va reacționa cu pereții de  $CaO$ . Difuzia  $SO_2$  în  $n$  pori de rază  $r_p$  este compensată de reacția  $SO_2$  cu pereții, condiție care este descrisă de relația:



$$\frac{d}{dx} \left( n \cdot \rho_G \cdot D \cdot \pi \cdot r_p^2 \frac{dc}{dx} \right) = n \cdot 2\pi \cdot r_p \cdot k \cdot p_o \cdot \xi \cdot c \quad (2.5.10)$$

unde  $\rho_G$  este densitatea gazului, în [ g/cm<sup>3</sup> ],  
 $D$  este coeficientul de difuzie al gazului reactant în pori,  
 în [ cm<sup>2</sup>/s ],  
 $c$  este participarea masică a gazului reactant în pori,  
 $K$  este constanta cinetică a vitezei de reacție,  
 în [ gSO<sub>2</sub>/cm<sup>2</sup> s atmSO<sub>2</sub> ],  $K = 0,07 \exp(-6750/T)$ ,  
 $p_G$  este presiunea gazului în pori, în [ atm ],  
 $\xi$  este raportul dintre cota molară a speciei chimice  
 și cota masică a speciei chimice.

**Viteza de sulfatare.** Viteza de absorbție în pori  $\dot{M}_t$  este descrisă de gradientul concentrației SO<sub>2</sub> la  $x_0$  de relația:

$$\dot{M}_t = -\rho_G \cdot D \cdot \pi \cdot n^2 \frac{dc_{SO_2}}{dx} \quad (2.5.11)$$

unde  $c_{SO_2}$  este gradientul concentrației de SO<sub>2</sub>.

Pentru a obține valoarea lui  $dc/dx$  la  $x = 0$  ecuația (2.5.11) trebuie integrată împreună cu condițiile la limită  $c = c_0$  la  $x = 0$  ( $r_p = r_t$ ) și  $dc/dx = 0$  la  $x = x_t$  ( $r_p = r_{min}$ ).

Difuzia SO<sub>2</sub> este descrisă de relația Knudsen, în care coeficientul  $D$  este dat de relația:

$$D = \frac{2}{3} \bar{w} \cdot r_p$$

unde  $w$  este viteza medie a moleculei de SO<sub>2</sub> la temperatura de absorbție, iar  $2r_p$  este drumul mediu mijlociu între două ciocniri consecutive cu pereții porilor. Cu aceasta, viteza de sulfatare în pori pentru concentrația dată de SO<sub>2</sub> și în ipoteza că  $r_t \gg r_{min}$  poate fi exprimată astfel:

$$\dot{M}_t = \pi \cdot n^2 \cdot c_o \cdot \left( \frac{4 \xi \cdot k \cdot p_G \cdot \rho_G \cdot \bar{w}}{3} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{e^{2x} - 1}{e - 1} \quad (2.5.12)$$

unde:

$$x = \left( \frac{3 \xi \cdot k \cdot p_G}{\rho_G \cdot \bar{w}} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{S_t}{2\pi n^2}$$

și

$$S_t = 2\pi n \cdot l_t \left( \frac{n}{r_{min}} \right) (1 - \theta)$$

unde  $S_t$  este suprafața totală a porilor, în [ cm<sup>2</sup>/g ].

Pentru  $\kappa > 1$  toată specia chimică  $c$  este consumată în pori,  
 $\kappa < 1$  viteza de sulfatare este limitată de constanta  
 cinetică  $K$ .

Viteza totală de sulfatare a particulei absorbante se obține integrând  $\dot{M}_t$  pe toți arborii:

$$\dot{M}_T = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} 4\pi a^2 \cdot \dot{M}_t \cdot g_{(n)} \, dn \quad (2.5.13)$$

**Colmatarea porilor.** Modelul depinde foarte mult de raza minimă a porilor  $r_{\min}$ , care determină suprafața internă de reacție și limitele de integrare. În timpul sulfatării porii de rază mică se colmatează, raza minimă crescând proporțional cu grosimea depunerilor  $\delta_{(r)}$ . Dependența razei minime în funcție de timp este dată de relația:

$$r_{\min}(\tau) = r_{\min(0)} + f_{\delta_{(r)}} \quad (2.5.14)$$

Valoarea lui  $\delta_{(r)}$  se obține transformând viteza de absorbție masică în creșterea grosimii stratului de  $\text{CaSO}_4$  depus, totul integrat în timp:

$$\frac{d\delta}{d\tau} = k \cdot \rho_G \cdot c_o \cdot \xi \frac{V_p}{M_j} \quad (2.5.15)$$

unde  $V_p$  este volumul molar al  $\text{CaSO}_4$ ,  
 $M_j$  este masa molară a speciei chimice respective ( $\text{SO}_2$ ),  
 $c_o$  este concentrația masică a  $\text{SO}_2$  pe suprafața externă a  
 particulei absorbante.

Coefficientul vitezei cinetice efective  $k$  este viteza care corespunde concentrației  $c$  a speciei în pori, în timp ce  $k_s$  este coeficientul vitezei cinetice care corespunde concentrației actuale a  $\text{CaO}$  în stratul depus. Relația de legătură este:

$$k = \frac{k_s}{1 + \frac{\xi k_s \cdot \rho_G \cdot \delta}{\rho_G \cdot D_p}} \quad (2.5.16)$$

Factorul de acoperire  $f$  reflectă faptul că  $\text{CaSO}_4$  umple porii ocupând locul  $\text{CaO}$  și mărește întrucâtva și particula. Determinarea  $f$  este pasul final în modelul colmatării porilor. La limită, când depozitul colmatează toți porii, factorul  $f$  este:

$$f = 2(1 - \theta) \frac{V_p - V_{CS}}{V_p} \quad (2.5.17)$$

unde  $V_p$  este volumul molar al depunerilor, în  $[\text{cm}^3/\text{mol}]$ .

### 2.5.2 Formarea oxizilor de azot.

Formarea oxizilor de azot are loc în timpul arderii, atât din azotul din aer cât și din azotul conținut în combustibil. În timpul arderii se formează cu precădere oxid de azot (NO). Bioxidul de azot (NO<sub>2</sub>) formează numai o mică parte ( < 5% ) [25] din totalul oxizilor de azot. Pentru oxizii NO și NO<sub>2</sub> se folosește termenul de NOx. Emisiile de NO se exprimă în NO<sub>2</sub> deoarece, deși în flacără se formează doar NO, ulterior, în canalele de gaze sau în atmosferă acesta se transformă în NO<sub>2</sub>.

Din punct de vedere teoretic există trei mecanisme pentru formarea NO și anume:

- formarea NO termic,
- formarea NO prompt,
- formarea NO din azotul conținut în combustibil.

Există diverse modele matematice pentru formarea NO, de la cele mai simple, cum sunt normativul VTI-NPOTKTI [69] până la cele mai complexe, cum este modelul Görner-Zinser [62]. Aceste modele au fost prezentate pe larg în [5]. Acestea sunt cazuri limită, iar ulterior au apărut modele mai simple decât [62], însă suficient de puternice.

NO termic se formează din azotul din aer. NO prompt se formează tot din azotul din aer, însă printr-un mecanism care include hidrocarburile din combustibil [70]. Practic s-a constatat că în focarele industriale NO prompt se formează într-o proporție redusă și poate fi neglijat [17].

În cele ce urmează, mecanismele formării NO sunt bazate pe diverse reacții chimice și la descrierea lor se vor folosi notațiile uzuale în chimie [27]. Astfel, prin [X] se notează concentrația volumică a speciei chimice X. Constantele vitezei de reacție în sens direct și invers la reacția chimică n sunt notate cu  $k_n$ , respectiv  $k_{-n}$ . Pentru ușurința scrierii relațiilor, reacțiile chimice vor fi numerotate în dreapta cu numere mici. Ulterior se va reveni la numerotarea globală a relațiilor.

#### Formarea NO termic [17].

NO termic se formează după un mecanism Zeldovici extins care cuprinde următoarele reacții:



Aproximarea stării staționare a concentrației NO este:

$$\frac{d[NO]}{d\tau} = \frac{2k_1 [O] [M]}{1 + \frac{k_{-1} [NO]}{k_2 [O_2] + k_3 [OH]}} \cdot \left[ 1 - \frac{k_{-1} [NO]}{k_2 [O_2] + k_3 [OH]} \left( \frac{k_{-2} [NO]}{k_1 [N_2]} + \frac{k_{-3} [NO] [H]}{k_3 [O] [N_2]} \right) \right] \quad (4)$$

Considerând că reacția:



este în echilibru parțial, se obține:

$$[H] = \frac{k_{-2} k_3 [O] [OH]}{k_2 k_{-3} [O_2]} \quad (6)$$

Substituind relația (6) în (4) se obține:

$$\frac{d[NO]}{d\tau} = \frac{2k_1 [O] [M]}{1 + \frac{k_{-1} [NO]}{k_2 [O_2] + k_3 [OH]}} \left( 1 - \frac{k_{-1} k_{-2} [NO]^2}{k_1 k_2 [N_2] [O_2]} \right) \quad (7)$$

Dacă concentrația [OH] este foarte mică, ca în majoritatea flăcărilor, expresia (7) se poate simplifica prin neglijarea relației (3), obținându-se:

$$\frac{d[NO]}{d\tau} = \frac{2 [O] (k_1 k_2 [O_2] [N_2] - k_{-1} k_{-2} [NO]^2)}{k_2 [O_2] + k_{-1} [NO]} \quad (8)$$

Când concentrația [NO] este foarte mică sau reacția inversă este neglijabilă este posibilă și următoarea simplificare:

$$\frac{d[NO]}{d\tau} = 2 k_1 [O] [N_2] \quad (9)$$

După Dupont și colab. (1993) dificultatea modelării NO termic nu constă în lipsa cunoștințelor asupra mecanismului formării, ci asupra aplicării lui corecte. Pentru o modelare corectă trebuie cunoscute concentrațiile efective de [O] și [OH], ori ceea ce se cunoaște sunt concentrațiile la echilibru, ceea ce introduce erori de ±35%. Pentru mărirea preciziei modelării, concentrațiile de [O] și [OH] se estimează. În continuare se prezintă câteva astfel de modele de estimare.

**Modelul 1.** Primul model admite un echilibru parțial al reacției:



unde M este un radical inert. Astfel se obține:

$$[O] = \left( \frac{k_{10}}{k_{-10}} [O_2] \right)^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

Concentrația [NO] se neglijează, iar pentru calculul vitezei de formare a NO se folosește relația (8). Modelul este des folosit în practică și tot adesea este neglijată reacția inversă, în locul relației (8) folosindu-se relația (9).

**Modelul 2.** În regiunile din flacără în care hidrocarburile s-au consumat concentrația oxigenului adeseori depășește semnificativ nivelul prezis de (11). În aceste regiuni se admite un echilibru parțial al reacțiilor:



obținându-se:

$$[O] = \frac{k_{12}k_{13}}{k_{-12}k_{-13}} \frac{[O_2][CO]}{[CO_2]} \quad (14)$$

Această expresie se folosește în regiunile bogate în combustibil, în rest se folosește relația (11). De obicei se neglijează reacția inversă, ca urmare pentru calculul vitezei de formare a NO se folosește relația (8).

**Modelul 3.** Acest model se bazează pe admiterea unui echilibru parțial a reacției ramificate și propagarea reacțiilor printr-un mecanism hidrogen-oxigen:



Aceasta permite calculul [H], [O] și [OH] în funcție de speciile majore [O<sub>2</sub>], [H<sub>2</sub>] și [H<sub>2</sub>O]. În modelul 3 se folosește doar expresia pentru [O]:

$$[O] = \frac{k_{15} k_{16}}{k_{-15} k_{-16}} \frac{[O_2] [H_2]}{[H_2O]} \quad (18)$$

Pentru calculul vitezei de formare a NO se folosește relația (8).

**Modelul 4.** Modelul 4 admite influența completă a tuturor relațiilor (15), (16) și (17). Astfel, în afară de relația (18) există și relațiile:

$$[H] = \left( \frac{k_{15}^2 k_{16} k_{17}}{k_{-15} k_{-16} k_{-17}} \frac{[O_2] [H_2]^3}{[H_2O]^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

$$[OH] = \left( \frac{k_{16} k_{17}}{k_{-16} k_{-17}} [O_2] [H_2] \right)^{\frac{1}{2}} \quad (20)$$

Pentru calculul vitezei de formare a NO se folosește relația (4).

Modelarea formării NO termic se face cu relații de transport obișnuite (2.1.6) în care termenul sursă este:

$$S_{NO} = M_{NO} \frac{d[NO]}{dt} \quad (2.5.18)$$

unde  $M_{NO}$  este masa molară a NO.

Valorile mediate tip Reynolds sunt calculate cu relația:

$$\overline{S_{NO}} = \bar{\rho} \int_0^1 \frac{S_{NO}}{\rho} p(f) df \quad (2.5.19)$$

unde  $p(f)$  este funcția de probabilitate a densității. La evaluarea relației (2.5.19) pentru temperatură și concentrații se folosesc valori medii.

#### Formarea NO din azotul conținut în combustibil [17].

La formarea NO din azotul conținut în combustibil se admite că azotul din combustibil este transportat de agenți intermediari cum ar fi acidul cianhidric (HCN) și amoniacul ( $NH_3$ ). Modelul De Soete, prezentat în continuare, ia în considerare ca unic intermediar HCN. Conform acestui model NO se formează prin oxidarea HCN și simultan se reduce prin reacția dintre NO și HCN. Vitezele de reacție ale acestor două reacții au fost determinate de De Soete (1975):

$$w_1 = 10^{10} \rho X_{HCN} X_{O_2}^b \exp\left(-\frac{67000}{RT}\right) \quad (2.5.20)$$

$$w_2 = 3 \cdot 10^{12} \rho X_{HCN} X_{NO} \exp\left(-\frac{60000}{RT}\right) \quad (2.5.24)$$

unde  $\rho$  este densitatea gazului,  
 $X$  este fracțiunea molară a speciei respective,  
 $b$  este ordinul reacției.

Ordinul reacției chimice  $b$  depinde de concentrația de oxigen și a fost de asemenea determinat de De Soete.

Dacă se formează simultan atât NO termic, cât și NO din azotul din combustibil, termenul sursă din ecuația de transport se calculează cu relația:

$$S_{NO} = M_{NO} \frac{d[NO]}{d\tau} + w_1 - w_2 \quad (2.5.22)$$

Ecuația (2.5.19) rămâne valabilă și în acest caz.

Pentru modelarea formării NO din combustibil lichid, concentrațiile speciilor chimice depind de modelul vaporizării picăturii. În [17] se discută câteva modele în acest sens, însă acestea nu fac obiectul prezentei lucrări. La arderea prafului de cărbune concentrațiile speciilor chimice depind de fapt de modelul degajării și arderii volatilelor. Este nevoie de modelarea cu relații de transport a concentrației de combustibil [10], respectiv de cunoașterea sau admiterea legii de degajare a volatilelor.

## 2.6 Formulări variaționale.

Formulările variaționale sunt calea urmată cu predilecție în metoda elementului finit. În caz că problema admite un principiu variațional [71], ele permit aducerea problemei la o formă matematică care generează matrici globale simetrice (v. cap. 3), cu toate avantajele ce decurg de aici. În continuare se prezintă formulările variaționale folosite la modelarea prin metoda elementului finit a focarelor axial-simetrice.

Pentru studiul câmpurilor axial-simetrice se utilizează un sistem de coordonate cilindrice (fig.2.6.1), la care axa  $Oz$  este axa de simetrie a mișcării, iar  $Or$  este direcție radială. Deoarece mișcarea fluidului se reproduce identic în semiplane meridiane, derivata parțială a oricărei marimi în raport cu coordonata unghiulară  $\theta$  va fi nulă.

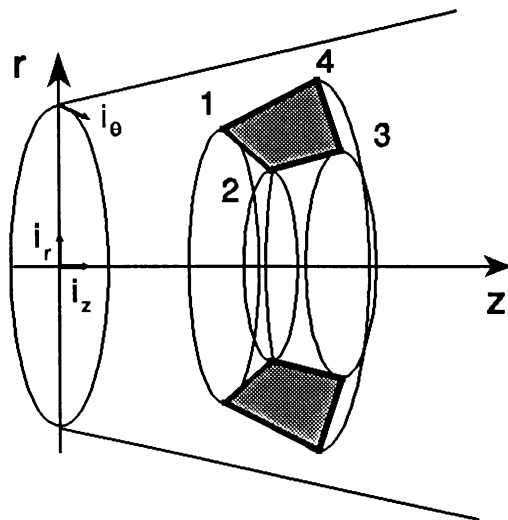


Fig. 2.6.1 Sistemul de coordonate cilindrice.

Într-un punct din spațiu sistemul de coordonate local este prezentat în fig. 2.6.1 și are versorii celor trei direcții reciproc ortogonale  $i_r$ ,  $i_\theta$  și  $k$ .

Cu precizările de mai sus rezultă că este suficient să se studieze mișcarea într-un plan meridian  $zOr$ .



### 2.6.1 Formulări variaționale pentru mișcarea potențială axial-simetrică a fluidului nevâscos incompresibil.

Componentele vitezei pe direcțiile celor două axe pot fi exprimate fie cu ajutorul potențialului scalar al vitezei  $\varphi$ , fie cu ajutorul funcției de curent  $\psi$ , conform relațiilor [72]:

$$V_x = \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad (2.6.1)$$

$$V_r = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (2.6.2)$$

Ținând cont că mișcarea este potențială și fluidul incompresibil se obțin următoarele ecuații cu derivate parțiale pentru funcțiile  $\varphi$  și  $\psi$ :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} = 0 \quad (2.6.3)$$

pe domeniul  $\Omega$  din semiplanul meridian, cu condițiile la limită:

$$\varphi = f_1 \quad pe \quad \Gamma_1 \quad (2.6.4)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = f_2 \quad pe \quad \Gamma_2 \quad (2.6.5)$$

unde  $\Gamma_1$  U  $\Gamma_2$  este frontiera lui  $\Omega$ ,  $\mathbf{n}$  este normala exterioară la frontieră, iar  $f_1$  și  $f_2$  sunt funcții cunoscute pe  $\Gamma_1$  și  $\Gamma_2$ , respectiv

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} = 0 \quad (2.6.6)$$

cu condițiile la limită:

$$\psi = g_1 \quad pe \quad \Gamma_1 \quad (2.6.7)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial n} = g_2 \quad pe \quad \Gamma_2 \quad (2.6.8)$$

unde  $g_1$  și  $g_2$  sunt funcții cunoscute pe porțiunile respective ale frontierei.

În continuare se prezintă formulările variaționale pentru problemele la limită aferente funcțiilor  $\varphi$  și  $\psi$ . Astfel, problema (2.6.3), (2.6.4) și (2.6.5) admite următoarea formulare variațională echivalentă: **Să se determine funcția scalară  $\varphi$ , din mulțimea funcțiilor care satisfac condiția la limită Dirichlet (2.6.4), care realizează extremul funcționalei:**

$$I(\varphi) = \rho\pi \int_{\Omega} \left[ \left( \frac{\partial\varphi}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial\varphi}{\partial r} \right)^2 \right] r dr dz - 2\rho\pi \int_{\Gamma_2} \varphi f_2 r ds \quad (2.6.9)$$

Pentru problema (2.6.6), (2.6.7) și (2.6.8) formularea variațională va fi: **Să se determine funcția scalară  $\psi$ , din mulțimea funcțiilor care satisfac condiția la limită Dirichlet (2.7), care realizează extremul funcționalei:**

$$J(\psi) = \rho\pi \int_{\Omega} \left[ \left( \frac{\partial\psi}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial\psi}{\partial r} \right)^2 \right] \frac{1}{r} dr dz - 2\rho\pi \int_{\Gamma_2} \varphi g_2 r ds \quad (2.6.10)$$

Relațiile (2.1) și (2.2) pot fi scrise vectorial sub forma:

$$\vec{v} = \nabla\varphi = -\frac{\vec{i}_\theta}{r} \times \nabla\psi \quad (2.6.11)$$

de unde rezultă:

$$v^2 = \vec{v} \cdot \vec{v} = (\nabla\varphi)^2 = \frac{(\nabla\varphi)^2}{r^2} \quad (2.6.12)$$

și cu aceasta, energia cinetică a fluidului din volumul considerat va fi:

$$\begin{aligned} E_c &= \int_{Vol} \frac{\rho v^2}{2} dVol = \rho\pi \int_{\Omega} v^2 r dr dz = \\ &= \rho\pi \int_{\Omega} \left[ \left( \frac{\partial\varphi}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial\varphi}{\partial r} \right)^2 \right] r dr dz = \\ &= \rho\pi \int_{\Omega} \left[ \left( \frac{\partial\psi}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial\psi}{\partial r} \right)^2 \right] \frac{1}{r} dr dz \end{aligned} \quad (2.6.13)$$

Prin urmare, formulările variaționale (2.6.9) și (2.6.10) au următoarea interpretare din punct de vedere fizic: **Curgerea potențială a fluidului incompresibil nevâscos se organizează în așa fel încât energia cinetică să fie minimă, cu respectarea condițiilor impuse pe frontieră.**

### 2.6.2 Formulare variațională pentru descrierea unei mișcări rotaționale cu ajutorul funcției de curent.

În cele ce urmează se prezintă modelul matematic pentru o curgere axială rotațională utilizând funcția de curent  $\psi$  pentru exprimarea vitezei [73].

În ipoteza curgerii axial-simetrice a unui fluid incompresibil, viteza într-un semiplan meridian  $zOr$  (fig. 2.6.1) poate fi exprimată cu ajutorul funcției de curent conform relației:

$$\vec{v} = v_z \vec{k} + v_r \vec{i}_r = -\frac{\vec{i}_\theta}{r} \times \nabla \Psi, \quad \text{unde } \vec{i}_\theta = \vec{k} \times \vec{i}_r \quad (2.6.14)$$

de unde componentele axială și radială ale vitezei sunt:

$$v_z = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \quad \text{și} \quad v_r = -\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \quad (2.6.15)$$

Dacă  $D$  este domeniul din semiplanul meridian pe care se studiază curgerea, pe frontiera acestuia  $\Gamma$  componentele normală, respectiv tangențială ale vitezei vor fi:

$$v_n = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial s} \quad \text{și} \quad v_t = -\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial n} \quad (2.6.16)$$

unde  $s$  este abscisa curbilinie de-a lungul curbei  $\Gamma$  parcursă în sens trigonometric, iar  $n$  este versorul normalei exterioare.

Pentru curgerea considerată, numai componenta vorticității  $\omega$  normală pe semiplanul meridian va fi nenulă:

$$\omega = \nabla \times \vec{v} = -\frac{1}{r} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} \right) \quad (2.6.17)$$

Cu acestea, din ecuația de mișcare a unui fluid nevâscos, rezultă [73]:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\omega}{r} \right) = 0 \quad (2.6.18)$$

Această relație este utilă în special în cadrul unei curgeri staționare, când anularea derivatei totale a unei mărimi implică constanța acelei mărimi pe o linie de curent, adică:

$$\frac{\omega}{r} = \Omega(\psi) \quad (2.6.19)$$

unde  $\Omega$  este o funcție numai de  $\psi$ .

Utilizând (2.6.17) și (2.6.19) se poate formula următoarea problemă cu condiții la limită pentru  $\psi$ :

$$-\frac{1}{r} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right) = \Omega(\psi) \quad \text{în } D \quad (2.6.20)$$

$$\psi = g_1 \quad \text{pe } \Gamma_D \quad (2.6.21)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial n} = g_2 \quad \text{pe } \Gamma_N \quad (2.6.22)$$

cu  $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$ , iar  $g_1$  și  $g_2$  sunt funcții cunoscute pe porțiunile respective ale frontierei. În continuare se va trata numai cazul  $\Omega = \text{constant}$ . Astfel, problema (2.6.19), (2.6.20) și (2.6.21) admite următoarea formulare variațională echivalentă: **Să se determine funcția scalară  $\psi$ , din mulțimea funcțiilor care satisfac condiția la limită Dirichlet (2.21), care realizează extremul funcționalei:**

$$F(\psi) = \int_D \left\{ \left[ \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)^2 \right] \frac{1}{r} - 2\psi r \Omega \right\} dr dz - \\ - 2 \int_{\Gamma_N} \psi g_2 ds \quad (2.6.23)$$

### 2.6.3 Formulare variațională pentru conducția căldurii.

Variația temperaturii în spațiu și în timp în interiorul unui corp sau a unui mediu este exprimată de ecuația diferențială a conducției (2.3.1). Pentru precizarea cazurilor concrete este nevoie de introducerea condițiilor la limită, care sunt de patru feluri:

a). Condiții la limită de timp (temporale) stabilesc distribuția de temperatură la începutul procesului sub forma:

$$T_0 = f(x, y, z) \quad (2.6.24)$$

b). Condiții la limită spațiale de tip Dirichlet, care precizează temperatura impusă pe suprafața  $S_1$  a corpului:

$$T_{t_1} = f(x, y, z, t) \quad (2.6.25)$$

c). Condiții la limită de tip Neumann, care precizează fluxul termic impus prin suprafața  $S_2$  a corpului:

unde  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  sunt cosinusurile directe ale normalei la

$$q = \lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} n_x + \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} n_y + \lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} n_z \quad (2.6.26)$$

suprafața  $S_2$ .

d). Condiții la limită de tip Neumann, care precizează schimbul de căldură cu parametri cunoscuți prin suprafața  $S_3$  a corpului:

$$\alpha (T - T_e) = \lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} n_x + \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} n_y + \lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} n_z \quad (2.6.27)$$

unde  $\alpha$  este coeficientul de transmitere a căldurii prin convecție de la suprafața  $S_3$  la mediul exterior;  
 $T_e$  este temperatura mediului exterior.

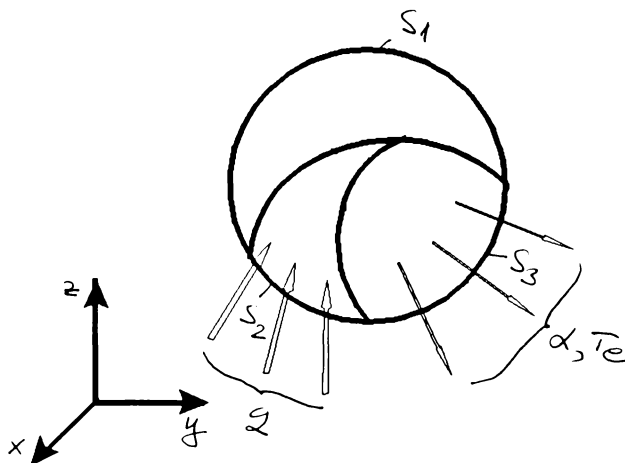


Fig. 2.6.2 Condiții la limită la transmiterea căldurii.

În abordarea variațională a metodei problema (2.6.24), (2.6.25), (2.6.26), (2.6.27) și (2.6.28) admite următoarea formulare echivalentă: Să se determine funcția scalară  $T$ , din mulțimea funcțiilor care satisfac condiția la limită Dirichlet (2.6.25) și (2.6.26), respectiv Neumann (2.6.27) și (2.6.28), care realizează extremul funcționalei:

$$J = \int_V \left\{ \frac{1}{2} \left[ \lambda_x \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \lambda_y \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 + \lambda_z \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right] - \left( M - c\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} \right) T \right\} dV - \int_{S_2} q T dS + \int_{S_3} \alpha T \left( \frac{1}{2} T - T_e \right) dS \quad (2.6.28)$$

### 3. METODE DE DISCRETIZARE

#### 3.1 Metode cu diferențe finite

Metodele cu diferențe finite se bazează pe discretizarea spațiului prin rețele relativ regulate. În cvasitotalitatea cazurilor se folosesc discretizări cu rețele cubice, eventual deformate în rețele paralelipipedice. Deși se cunosc și alte tipuri de discretizări, de exemplu în [74] sunt prezentate discretizări în plan cu triunghiuri sau hexagoane, ele se folosesc rar și nu formează obiectul prezentării de față.

Pentru modelarea focarelor prezintă interes și vor fi prezentate în continuare discretizări cu rețele neregulate și cu pași neegali, adică la care pașii sunt diferiți după direcțiile principale de discretizare, iar pasul rețelei variază de-a lungul direcției de discretizare. Aceste tipuri de rețele au avantajul acoperirii superioare a spațiului modelat din punct de vedere al memoriei și a preciziei de calcul necesare, deoarece rețelele pot avea pași mai mici în zonele unde gradientii sunt mai mari și invers.

Există diferite scheme optime de aproximare. Datorită simetriei spațiului aceste scheme în coordonate carteziane pot fi cu 7, 19, sau mai multe puncte [74]. Schema cea mai simplă (cu 7 puncte) este și cea mai utilă, deoarece o schemă mai complicată din punct de vedere al preciziei aproximării este echivalentă cu o schemă mai simplă aplicată pe o rețea mai deasă.

În continuare vor fi prezentate schemele de discretizare a ecuațiilor de tip Poisson pentru spații tridimensionale, în coordonate carteziane, respectiv în coordonate cilindrice. Metoda de deducere a acestor scheme este prezentată în [74], însă relațiile pentru cazurile care interesează sunt deduse cu unele inadvertențe, aspect corectat în prezentarea ce urmează.

Ecuațiile de tip Poisson sunt ecuații cu derivate parțiale de ordinul doi în coordonate carteziane și cu derivate parțiale de ordinul întâi și doi în coordonate cilindrice. Aproximarea derivatelor se face cu scheme cu diferențe centrale [75], care asigură stabilitatea optimă.

Pentru deducerea expresiilor derivatelor la o schemă cu pași neegali fie funcția  $u$  care trebuie aproximată, iar  $U$  valorile numerice ale funcției  $u$  în punctele de discretizare. Fie  $h_s$  și  $h_D$  pașii rețelei de discretizare „la stânga”, respectiv „la dreapta” punctului curent. Funcția  $u$  este dezvoltată în serie Taylor la dreapta, respectiv la stânga, [75, 76, 77] obținându-se expresiile:

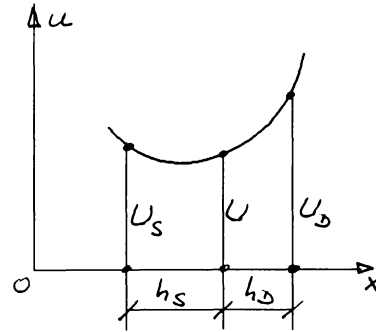


Fig.3.1.1 Notații pentru deducerea expresiilor derivatelor de ordinul întâi și doi.

$$U_D = U + h_D \frac{du}{dx} + \frac{h_D^2}{2!} \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{h_D^3}{3!} \frac{d^3u}{dx^3} + \dots \quad (3.1.1)$$

$$U_S = U - h_s \frac{du}{dx} + \frac{h_s^2}{2!} \frac{d^2u}{dx^2} - \frac{h_s^3}{3!} \frac{d^3u}{dx^3} + \dots \quad (3.1.2)$$

Deoarece interesează doar derivatele de ordinul întâi și doi dezvoltările (3.1.1) și (3.1.2) se limitează la primii trei termeni, obținându-se sistemul:

$$\begin{cases} h_D \frac{du}{dx} + \frac{h_D^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} = U_D - U \\ -h_s \frac{du}{dx} + \frac{h_s^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} = U_S - U \end{cases} \quad (3.1.3)$$

având ca necunoscute tocmai derivatele de ordinul întâi și doi. Rezolvând sistemul (3.1.3) se obțin expresiile derivatelor de ordinul întâi și doi:

$$\frac{du}{dx} = \frac{(h_D^2 - h_s^2) U - h_D^2 U_S + h_s^2 U_D}{h_s \cdot h_D (h_s + h_D)} \quad (3.1.4)$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{-2(h_s + h_D) U + 2h_D U_S + 2h_s U_D}{h_s \cdot h_D (h_s + h_D)} \quad (3.1.5)$$

Relația (3.1.4) este dată în [20] fără demonstrație, iar în [77] se dă, de asemenea fără demonstrație, pentru derivata de ordinul doi expresia:

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{\frac{U_D - U}{h_D} - \frac{U_S - U}{h_S}}{\frac{h_S + h_D}{2}} \quad (3.1.6)$$

care este echivalentă cu expresia (3.1.5).

Pentru asamblarea în sistemul global relațiile (3.1.4) și (3.1.5) se pun sub forma:

$$\frac{du}{dx} = \frac{h_D - h_S}{h_S \cdot h_D} U - \frac{h_D}{h_S(h_S + h_D)} U_S + \frac{h_S}{h_D(h_S + h_D)} U_D \quad (3.1.7)$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -\frac{2}{h_S \cdot h_D} U + \frac{2}{h_S(h_S + h_D)} U_S + \frac{2}{h_D(h_S + h_D)} U_D \quad (3.1.8)$$

Pentru  $h_s = h_p = h$  relațiile (3.1.7) și (3.1.8) se reduc la binecunoscutele scheme cu diferențe centrale pentru rețele cu pași egali [75].

Pentru cazul că nodul  $i$  este la marginea din stânga, în locul nodului inexistent aflat „la stânga” acestuia se ia un nod aflat la doi pași la dreapta,  $h_s$  devenind suma cu semn schimbat a doi pași la dreapta. Pentru cazul că nodul  $i$  este la marginea din dreapta, în locul nodului inexistent aflat „la dreapta” acestuia se ia un nod aflat la doi pași la stânga,  $h_p$  devenind suma cu semn schimbat a doi pași la stânga. Procedura înlocuirii cu un nod aflat la distanță mai mare decât un pas este obligatorie deoarece o înlocuire a unui nod din stânga cu cel aflat la un pas în dreapta (și invers) conduce la anularea unui numitor în expresiile (3.1.7) și (3.1.8).

Ca urmare, la conceperea unui algoritm de calcul pe calculator toate schemele prezentate în [20] pentru cazuri de margine sau colț sunt superflue, se pot folosi peste tot schemele unice (3.1.7) și (3.1.8) precizând de fiecare dată doar poziția nodurilor din stânga și din dreapta, ceea ce reduce considerabil spațiul ocupat de program în memoria calculatorului. Ținând cont de cele spuse mai sus stabilirea schemelor cu diferențe finite pentru orice operatori, inclusiv Laplace este utilă doar pentru puncte centrale ale domeniului discretizat.

Schema de discretizare a operatorului Laplace se obține prin superpoziția discretizărilor derivatelor [74].



### 3.1.1 Discretizarea ecuației Poisson în coordonate carteziene

Expresia ecuației Poisson în coordonate carteziene este:

$$\left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = f(x, y, z) \quad (3.1.9)$$

Fie  $U_{i,j,k}$ ,  $U_N$ ,  $U_S$ ,  $U_E$ ,  $U_V$ ,  $U_T$ ,  $U_B$  soluția discretă ce aproximează soluția reală  $u$  în punctul de coordonate  $M_{i,j,k}$  respectiv în direcțiile NORD, SUD, EST, VEST, TOP (SUS) și BOTTOM (JOS), față de punctul de coordonate  $i, j, k$  și  $f_{i,j,k}$  termenul liber al ecuației Poisson în punctul  $M$ . Fie  $h_N$ ,  $h_S$ ,  $h_E$ ,  $h_V$ ,  $h_T$  și  $h_B$  pașii rețelei de discretizare în direcțiile respective (fig. 3.2.1).

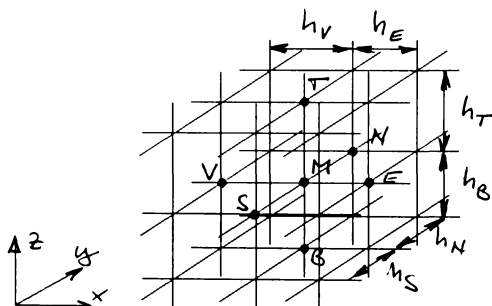


Fig. 3.2.1 Schemă de discretizare cu șapte puncte  
în coordonate carteziene.

Pentru discretizare se înlocuiește expresia (3.1.8) în locul fiecărei derivate din (3.1.9) rezultând următoarea discretizare cu șapte puncte:

$$\begin{aligned} & - \left( \frac{2}{h_E \cdot h_V} + \frac{2}{h_N \cdot h_S} + \frac{2}{h_T \cdot h_B} \right) U_{i,j,k} + \\ & + \frac{2}{h_E (h_E + h_V)} U_E + \frac{2}{h_V (h_E + h_V)} U_V + \\ & + \frac{2}{h_N (h_N + h_S)} U_N + \frac{2}{h_S (h_N + h_S)} U_S + \\ & + \frac{2}{h_T (h_T + h_B)} U_T + \frac{2}{h_B (h_T + h_B)} U_B = f_{i,j,k} \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Poziția reală a punctelor N, S, E, V, T și B trebuie stabilită pentru fiecare caz particular, cum s-a arătat mai sus.

Pentru ecuația Laplace  $f_{i,j,k} = 0$ .

### 3.1.2 Discretizarea ecuației Poisson în coordonate cilindrice

Expresia ecuației Poisson în coordonate cilindrice este:

$$\left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right) = f_{(z,r,\theta)} \quad (3.1.11)$$

Dacă problema tratată este axial-simetrică, derivata în funcție de unghiul  $\theta$  este nulă și dispăre din ecuația (3.1.11) iar efectele punctelor T și B se compensează cu punctul M, astfel că în final schema de discretizare cu 7 puncte prezentată în fig. 3.2.2 se reduce la o schemă bidimensională de discretizare cu 5 puncte. Demonstrația matematică a acestui fapt nu mai este reprodusă aici.

Fie  $U_{i,j}$ ,  $U_N$ ,  $U_S$ ,  $U_E$ ,  $U_V$  soluția discretă ce aproximează soluția reală  $u$  în punctul de coordonate  $M_{i,j}$  respectiv în direcțiile NORD, SUD, EST și VEST, față de punctul de coordonate  $i, j$  și  $f_{i,j}$  termenul liber al ecuației Poisson în punctul M. Fie  $h_N$ ,  $h_S$ ,  $h_E$  și  $h_V$  pașii rețelei de discretizare în direcțiile respective (fig. 3.2.2).

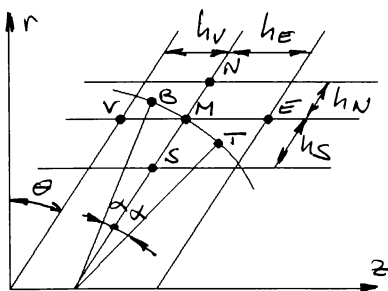


Fig. 3.2.2 Schemă de discretizare cu șapte puncte în coordonate cilindrice.

Pentru discretizare se înlocuiesc expresiile (3.1.7 - 3.1.8) în locul fiecărei derivate din (3.1.11) rezultând următoarea discretizare cu cinci puncte:

$$\begin{aligned}
& - \left[ \frac{2}{h_E \cdot h_V} + \frac{2}{h_N \cdot h_S} \left( 1 - \frac{h_N - h_S}{2 r} \right) \right] U_{i,j} + \\
& + \frac{2}{h_E (h_E + h_V)} U_E + \frac{2}{h_V (h_E + h_V)} U_V + \\
& + \frac{2}{h_N (h_S + h_N)} \left( 1 + \frac{h_N}{2 r_j} \right) U_N + \\
& + \frac{2}{h_S (h_N + h_S)} \left( 1 - \frac{h_S}{2 r_j} \right) U_S = f_{i,j}
\end{aligned} \tag{3.1.12}$$

Poziția reală a punctelor N, S, E și V trebuie stabilită pentru fiecare caz particular, cum s-a arătat mai sus.

Pentru ecuația Laplace  $f_{i,j} = 0$ .

Pentru alte tipuri de ecuații se procedează în mod analog. Astfel, pentru integrarea ecuației cu diferențe finite complete (2.1.5) trebuie tratate următoarele aspecte:

- aproximarea termenilor de convecție,
- aproximarea termenilor de difuzie,
- aproximarea termenilor de sursă.

Dezvoltarea matematică completă a teoriei pe baza celor expuse mai sus pentru curgeri axial-simetrice se găsește în [18, 20], și nu va fi reluată aici.

### 3.2 Metode cu elemente finite.

#### 3.2.1 Elementul izoparametric axial-simetric pentru mișcarea potențială axial-simetrică a fluidului nevâscos, incompresibil.

În cele ce urmează se prezintă calculul matricii elementale și a termenilor liberi pentru problemele aferente potențialului vitezei, respectiv funcțiilor de curent în cadrul unui element finit patrulater (fig. 3.2.1) [78, 79, 80, 81]. Elementul considerat are patru noduri și este izoparametric, adică nodurile de interpolare corespund cu nodurile geometrice. De aici rezultă că funcțiile de transformare geometrică coincid cu funcțiile de interpolare și vor fi notate cu  $N_i$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ .

Pentru găsirea acestor funcții se va utiliza în continuare un element de referință, situat într-un spațiu de referință. Elementul de referință poate fi transformat în orice element real cu ajutorul funcțiilor de transformare geometrică.

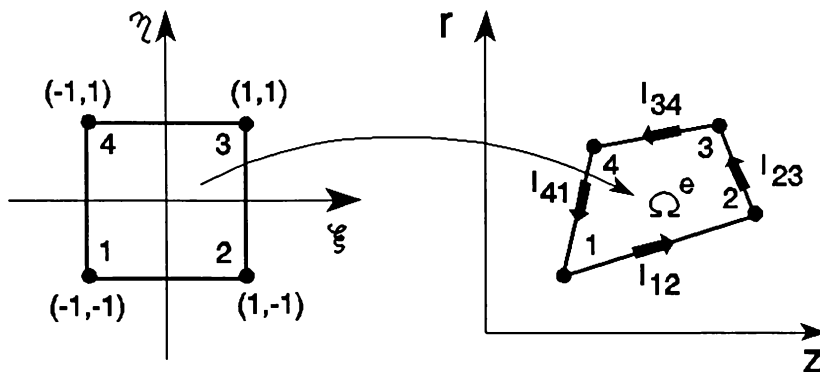


Fig. 3.2.1 Element izoparametric cu patru noduri.

Transformarea geometrică  $\tau$  (fig. 3.2.1) asociază fiecărui punct  $(\xi, \eta)$  din spațiul de referință un punct  $(z, r)$  din spațiul real. Această transpunere geometrică trebuie aleasă astfel încât:

- să fie bijectivă, adică fiecărui punct  $(\xi, \eta)$  din elementul de referință  $\Omega'$  să-i corespundă un punct  $(z, r)$  din elementul  $\Omega$  și reciproc;
- nodurile geometrice ale elementului de referință corespund nodurilor geometrice ale elementului real;
- fiecare porțiune a frontierei elementului de referință, definită de nodurile geometrice de pe ea corespunde unei porțiuni din frontiera elementului real, definită de nodurile geometrice corespunzătoare.

În cazul de față deoarece  $r$  transformă segmente de dreaptă tot în segmente de dreaptă are loc o transformare liniară. Pentru construirea ei, întrucât elementul are 4 noduri se va porni de la o bază polinomială liniară de ordinul 2 incompletă:

$$\langle P \rangle = \langle 1 \quad \xi \quad \eta \quad \xi\eta \rangle \quad (3.2.1)$$

Cu aceasta, coordonatele unui punct din spațiul real se pot scrie:

$$z(\xi, \eta) = \langle P \rangle \cdot \{ \alpha_z \} \quad (3.2.2)$$

$$r(\xi, \eta) = \langle P \rangle \cdot \{ \alpha_r \} \quad (3.2.3)$$

unde  $\{ \alpha_z \}$  și  $\{ \alpha_r \}$  sunt matrici coloană ce conțin coeficienții polinoamelor care definesc transformarea geometrică pentru coordonatele  $z$  și  $r$  din spațiul real. Acești coeficienți se pot determina din condițiile de corespondență a nodurilor.

Coordonatele nodurilor pe elementul de referință sunt:

$$\langle \xi_n, \eta_n \rangle = \langle -1, -1 ; 1, -1 ; 1, 1 ; -1, 1 \rangle \quad (3.2.4)$$

cu care:

$$[ P_n ] = \begin{bmatrix} \langle P(\xi_1, \eta_1) \rangle \\ \langle P(\xi_2, \eta_2) \rangle \\ \langle P(\xi_3, \eta_3) \rangle \\ \langle P(\xi_4, \eta_4) \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.2.5)$$

Această matrice este ortogonală deoarece produsele scalare ale coloanelor, două câte două sunt nule. Prin urmare inversa matricii  $[ P_n ]$  este:

$$[ P_n ]^{-1} = \frac{1}{4} [ P_n ]^T = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Coordonatele nodurilor conform (3.2.2) și (3.2.3) sunt:

$$\{ z_n \} = [ P_n ] \cdot \{ \alpha_z \} \quad (3.2.7)$$

respectiv

$$\{ r_n \} = [ P_n ] \cdot \{ \alpha_r \} \quad (3.2.8)$$

Din (3.2.7) și (3.2.8) rezultă:

$$\{ \alpha_z \} = [ P_n ]^{-1} \cdot \{ Z_n \} \quad (3.2.9)$$

$$\{ \alpha_r \} = [ P_n ]^{-1} \cdot \{ r_n \} \quad (3.2.10)$$

Care introduse în (3.2.2) și (3.2.3) dau:

$$z = \langle 1 \quad \xi \quad \eta \quad \xi\eta \rangle \cdot [ P_n ]^{-1} \cdot \{ Z_n \} \quad (3.2.11)$$

$$r = \langle 1 \quad \xi \quad \eta \quad \xi\eta \rangle \cdot [ P_n ]^{-1} \cdot \{ r_n \} \quad (3.2.12)$$

Cu alte cuvinte coordonatele unui punct curent din elementul real pot fi exprimate cu ajutorul coordonatelor nodurilor geometrice și a unor funcții:

$$\langle N \rangle = \langle N_1 \quad N_2 \quad N_3 \quad N_4 \rangle = \langle P \rangle \cdot [ P_n ]^{-1} \quad (3.2.13)$$

Efectuând calculele se obțin pentru funcții, respectiv derivatele lor parțiale expresiile:

| $\{ N \}$ | $\{ \partial N / \partial \xi \}$ | $\{ \partial N / \partial \eta \}$ |                        |
|-----------|-----------------------------------|------------------------------------|------------------------|
| 1         | $\frac{1}{4} (1-\xi) (1-\eta)$    | $\frac{1}{4} (-1+\eta)$            | $\frac{1}{4} (-1+\xi)$ |
| 2         | $\frac{1}{4} (1+\xi) (1-\eta)$    | $\frac{1}{4} (1-\eta)$             | $\frac{1}{4} (-1-\xi)$ |
| 3         | $\frac{1}{4} (1+\xi) (1+\eta)$    | $\frac{1}{4} (1+\eta)$             | $\frac{1}{4} (1+\xi)$  |
| 4         | $\frac{1}{4} (1-\xi) (1+\eta)$    | $\frac{1}{4} (-1-\eta)$            | $\frac{1}{4} (1-\xi)$  |

Dacă s-au generat elementele reale pornind de la elementul de referință, este normal ca și operațiile de derivare parțială în raport cu coordonatele din spațiul real să fie transformate în derivate parțiale în raport cu coordonatele din spațiul de referință.

Relația de legătură va fi:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{bmatrix} = [ J ] \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial r} \end{bmatrix} \quad (3.2.15)$$

unde

$$[ J ] = \begin{bmatrix} \frac{\partial Z}{\partial \xi} & \frac{\partial R}{\partial \xi} \\ \frac{\partial Z}{\partial \eta} & \frac{\partial R}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (3.2.16)$$

este matricea Jacobiană a transformării.

Obținerea acestei matrici se poate face pornind de la relația de transformare geometrică:

$$\langle Z \ R \rangle = \langle N \rangle \cdot [ \{ z_n \} \ \{ r_n \} ] \quad (3.2.17)$$

Prin derivare rezultă matricea Jacobiană a transformării:

$$\begin{aligned} [ J ] &= \begin{bmatrix} \left\langle \frac{\partial N}{\partial \xi} \right\rangle \\ \left\langle \frac{\partial N}{\partial \eta} \right\rangle \end{bmatrix} \cdot [ \{ z_n \} \ \{ r_n \} ] = \\ &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} (-1+\eta) \cdot (1-\xi) & (1+\eta) \cdot (-1-\xi) \\ (-1+\eta) \cdot (-1-\xi) & (1+\eta) \cdot (1-\xi) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z_1 & r_1 \\ z_2 & r_2 \\ z_3 & r_3 \\ z_4 & r_4 \end{bmatrix} = \\ &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -z_1+z_2+z_3-z_4+ & -r_1+r_2+r_3-r_4+ \\ +\eta(z_1-z_2+z_3-z_4) & +\eta(r_1-r_2+r_3-r_4) \\ -z_1-z_2+z_3+z_4+ & -r_1-r_2+r_3+r_4 \\ +\xi(z_1-z_2+z_3-z_4) & +\xi(r_1-r_2+r_3-r_4) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

iar Jacobianul transformării este:

$$J = \det [ J ] = \frac{1}{8} (\alpha_0 + \alpha_1 \xi + \alpha_2 \eta) \quad (3.2.19)$$

unde

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= (r_4-r_2) \cdot (z_3-z_1) - (r_3-r_1) \cdot (z_4-z_2) \\ \alpha_1 &= (r_3-r_4) \cdot (z_2-z_1) - (r_2-r_1) \cdot (z_3-z_4) \\ \alpha_2 &= (r_4-r_1) \cdot (z_3-z_2) - (r_3-r_2) \cdot (z_4-z_1) \end{aligned}$$

Pentru calculul inversei matricii Jacobiene se ține cont că dacă

$$[ J ] = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{bmatrix}$$

atunci

$$[ J ]^{-1} = \frac{1}{\det [J]} \begin{bmatrix} J_{22} & -J_{12} \\ -J_{21} & J_{11} \end{bmatrix}$$

Cu aceasta derivata funcțiilor de interpolare în raport cu coordonatele din spațiul real pot fi scrise sub forma:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \left\langle \frac{\partial N}{\partial \xi} \right\rangle \\ \left\langle \frac{\partial N}{\partial \eta} \right\rangle \end{bmatrix} &= [ J ]^{-1} \begin{bmatrix} \left\langle \frac{\partial N}{\partial \xi} \right\rangle \\ \left\langle \frac{\partial N}{\partial \eta} \right\rangle \end{bmatrix} = \\ &= \frac{1}{16 J} \begin{bmatrix} -r_1 - r_2 + r_3 + r_4 & r_1 - r_2 - r_3 + r_4 \\ +\xi (r_1 - r_2 + r_3 - r_4) & +\eta (-r_1 + r_2 - r_3 + r_4) \\ z_1 + z_2 - z_3 - z_4 & -z_1 + z_2 + z_3 - z_4 \\ +\xi (-z_1 + z_2 - z_3 + z_4) & +\eta (z_1 - z_2 + z_3 - z_4) \end{bmatrix} \cdot \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

$$\cdot \begin{bmatrix} (-1+\eta) \cdot (1-\xi) & (1+\eta) \cdot (-1-\xi) \\ (-1+\eta) \cdot (-1-\xi) & (1+\eta) \cdot (1-\xi) \end{bmatrix}$$

După efectuarea calculelor relațiile (3.2.20) pot fi scrise sub forma:

$$\frac{\partial N_i}{\partial z} = \frac{1}{8 J} (a_1^i + \xi b_{1,1}^i + \eta b_{1,2}^i) \quad (3.2.21)$$

$$9 \quad \frac{\partial N_i}{\partial r} = \frac{1}{8 J} (a_2^i + \xi b_{2,1}^i + \eta b_{2,2}^i)$$

pentru  $i = 1, 2, 3, 4;$



unde:

$$a_1^1 = r_2 - r_4 \quad a_2^1 = z_4 - z_2$$

$$a_1^2 = r_3 - r_1 \quad a_2^2 = z_1 - z_3$$

$$a_1^3 = r_4 - r_2 \quad a_2^3 = z_2 - z_4$$

$$a_1^4 = r_1 - r_3 \quad a_2^4 = z_3 - z_1$$

$$b_{1,1}^1 = r_4 - r_3 \quad b_{1,2}^1 = r_3 - r_2$$

$$b_{1,1}^2 = r_3 - r_4 \quad b_{1,2}^2 = r_1 - r_4$$

$$b_{1,1}^3 = r_1 - r_2 \quad b_{1,2}^3 = r_4 - r_1$$

$$b_{1,1}^4 = r_2 - r_1 \quad b_{1,2}^4 = r_2 - r_3$$

$$b_{2,1}^1 = z_3 - z_4 \quad b_{2,2}^1 = z_2 - z_3$$

$$b_{2,1}^2 = z_4 - z_3 \quad b_{2,2}^2 = z_4 - z_1$$

$$b_{2,1}^3 = z_2 - z_1 \quad b_{2,2}^3 = z_1 - z_4$$

$$b_{2,1}^4 = z_1 - z_2 \quad b_{2,2}^4 = z_3 - z_2$$

La calculul termenilor matricii elementale intervine sub integrală expresia:

$$\frac{\partial N_i}{\partial z} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial z} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial r}$$

pentru scrierea căreia se definesc coeficienții:

$$c_1^{i,j} = a_1^i \cdot a_1^j + a_2^i \cdot a_2^j$$

$$c_2^{i,j} = a_1^i \cdot b_{1,1}^j + a_1^j \cdot b_{1,1}^i + a_2^i \cdot b_{2,1}^j + a_2^j \cdot b_{2,1}^i$$

$$c_3^{i,j} = a_1^i \cdot b_{1,2}^j + a_1^j \cdot b_{1,2}^i + a_2^i \cdot b_{2,2}^j + a_2^j \cdot b_{2,2}^i$$

$$c_4^{i,j} = b_{1,1}^i \cdot b_{1,2}^j + b_{1,2}^i \cdot b_{1,1}^j + b_{2,1}^i \cdot b_{2,2}^j + b_{2,2}^i \cdot b_{2,1}^j$$

$$c_5^{i,j} = b_{1,1}^i \cdot b_{1,1}^j + b_{2,1}^i \cdot b_{2,1}^j$$

$$c_6^{i,j} = b_{1,2}^i \cdot b_{1,2}^j + b_{2,2}^i \cdot b_{2,2}^j$$

Cu aceștia se poate scrie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i}{\partial z} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial z} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial r} &= \\ &= \frac{1}{64 J} (C_1^{i,j} + C_2^{i,j} \xi + C_3^{i,j} \eta + C_4^{i,j} \xi \eta + C_5^{i,j} \xi^2 + C_6^{i,j} \eta^2) \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

De asemenea, raza poate fi scrisă sub forma:

$$\begin{aligned} r = \sum_{i=1}^4 N_i r_i &= \frac{1}{4} [ (r_1 + r_2 + r_3 + r_4) + \xi (-r_1 + r_2 + r_3 - r_4) + \\ &+ \eta (-r_1 - r_2 + r_3 + r_4) + \xi \eta (r_1 - r_2 + r_3 - r_4) ] \end{aligned} \quad (3.2.23)$$

respectiv cu notațiile:

$$\begin{aligned} d_1 &= r_1 + r_2 + r_3 + r_4 \\ d_2 &= -r_1 + r_2 + r_3 - r_4 \\ d_3 &= -r_1 - r_2 + r_3 + r_4 \\ d_4 &= r_1 - r_2 + r_3 - r_4 \end{aligned}$$

se poate scrie:

$$r = \frac{1}{4} ( d_1 + d_2 \xi + d_3 \eta + d_4 \xi \eta ) \quad (3.2.24)$$

Expresiile care apar sub integralele efectuate pe domeniul elemental vor fi:

$$\begin{aligned} f_{i,j}(\xi, \eta) &= \frac{1}{32} ( C_1^{i,j} + C_2^{i,j} \xi + C_3^{i,j} \eta + C_4^{i,j} \xi \eta + C_5^{i,j} \xi^2 + C_6^{i,j} \eta^2 + C_7^{i,j} \xi + C_8^{i,j} \eta + C_9^{i,j} \xi \eta + C_{10}^{i,j} \xi^2 + C_{11}^{i,j} \eta^2 ) \\ &\cdot (d_1 + d_2 \xi + d_3 \eta + d_4 \xi \eta) / (\alpha_0 + \alpha_1 \xi + \alpha_2 \eta) \end{aligned} \quad (3.2.25)$$

$$\begin{aligned} p_{i,j}(\xi, \eta) &= \frac{1}{2} ( C_1^{i,j} + C_2^{i,j} \xi + C_3^{i,j} \eta + C_4^{i,j} \xi \eta + C_5^{i,j} \xi^2 + C_6^{i,j} \eta^2 + C_7^{i,j} \xi + C_8^{i,j} \eta + C_9^{i,j} \xi \eta + C_{10}^{i,j} \xi^2 + C_{11}^{i,j} \eta^2 ) \\ &/ (d_1 + d_2 \xi + d_3 \eta + d_4 \xi \eta) / (\alpha_0 + \alpha_1 \xi + \alpha_2 \eta) \end{aligned} \quad (3.2.26)$$

și prin urmare, elementele matricilor elementale sunt:

$$EF_{i,j} = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f_{i,j}(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (3.2.27)$$

$$EP_{i,j} = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 P_{i,j}(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (3.2.28)$$

Integrarea se face numeric prin metoda Gauss. în cazul utilizării unei formule de ordinul 3 cu 4 puncte de integrare pe element, ecuațiile (3.2.27) și (3.2.28) se pot pune sub forma aproximativă:

$$EF_{i,j} \approx \sum_{k=1}^4 f_{i,j}(\xi_k, \eta_k) \quad (3.2.29)$$

$$EP_{i,j} \approx \sum_{k=1}^4 P_{i,j}(\xi_k, \eta_k) \quad (3.2.30)$$

unde

$$\xi_k = \pm 1/\sqrt{3} \quad , \quad \eta_k = \pm 1/\sqrt{3}$$

--- \* ---

Pentru calculul termenilor liberi elementali se fac mai întâi următoarele precizări:

- pentru funcția de curent în cadrul problemelor ridicate nu sunt impuse condiții la limită de tip Neumann și prin urmare termenii liberi elementali BP sunt nuli.

- în locul funcției  $f_2$  se va nota cu  $(\partial\varphi/\partial n)^{l_m}$

valoarea impusă pentru derivata potențialului vitezei pe direcția normalei pe latura  $l_m$  a elementului.

Cu acestea se scrie:

$$BF_1 = \int_1^2 N_1 \left( \frac{\partial\varphi}{\partial n} \right)^{l_{12}} r ds + \int_2^3 N_1 \left( \frac{\partial\varphi}{\partial n} \right)^{l_{23}} ds + \int_3^4 N_1 \left( \frac{\partial\varphi}{\partial n} \right)^{l_{34}} ds + \int_4^1 N_1 \left( \frac{\partial\varphi}{\partial n} \right)^{l_{41}} r ds \quad (3.2.31)$$

Conform relațiilor (3.2.6) rezultă:

$$N_1|_{12} = \frac{1 - \xi}{2} ; \quad N_1|_{23} = 0 ; \quad N_1|_{34} = 0 ; \quad N_1|_{41} = - \quad (3.2.32)$$

Deci al doilea și al treilea termen din membrul drept al ecuației (3.2.31) sunt nuli.

De asemenea:

$$r|_{12} = \frac{1 - \xi}{2} r_1 + \frac{1 + \xi}{2} r_2 \quad (3.2.33)$$

$$r|_{41} = \frac{1 - \eta}{2} r_1 + \frac{1 + \eta}{2} r_4 \quad (3.2.34)$$

Elementul de lungime pe latura 1-2 este:

$$ds|_{12} = \sqrt{\left(\frac{\partial z}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \eta}\right)^2} d\eta = \sqrt{\left(\frac{z_2 - z_1}{2}\right)^2 + \left(\frac{r_2 - r_1}{2}\right)^2} d\eta = l_{12} \quad (3.2.35)$$

și analog pe latura 4-1:

$$ds|_{41} = l_{41} \left(-\frac{d\eta}{2}\right) \quad (3.2.36)$$

i

Înlocuind relațiile (3.2.32 - 3.2.36) în (3.2.31) se obține:

$$BF_1 = \int_{-1}^1 \frac{1 - \eta}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial n}\right)^{l_{12}} \left[\frac{1 - \eta}{2} r_1 + \frac{1 + \eta}{2} r_2\right] l_{12} \frac{d\eta}{2} + \\ + \int_1^{-1} \frac{1 - \eta}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial n}\right)^{l_{41}} \left[\frac{1 - \eta}{2} r_1 + \frac{1 + \eta}{2} r_4\right] l_{41} \left(-\frac{d\eta}{2}\right)$$

După efectuarea calculelor rezultă în final:

$$BF_1 = \frac{l_{12}}{6} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial n}\right)^{l_{12}} (2r_1 + r_2) + \frac{l_{41}}{6} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial n}\right)^{l_{41}} (2r_1 + r_4) \quad (3.2.37)$$

respectiv pentru ceilalți termeni elementali:

$$BF_2 = \frac{I_{23}}{6} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right)^{I_{23}} (2r_2 + r_3) + \frac{I_{12}}{6} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right)^{I_{12}} (2r_2 + r_1) \quad (3.38)$$

$$BF_3 = \frac{I_{34}}{6} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right)^{I_{34}} (2r_3 + r_4) + \frac{I_{23}}{6} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right)^{I_{23}} (2r_3 + r_2) \quad (3.2.39)$$

$$BF_4 = \frac{I_{41}}{6} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right)^{I_{41}} (2r_4 + r_1) + \frac{I_{34}}{6} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right)^{I_{34}} (2r_4 + r_3) \quad (3.2.40)$$

Pentru transmiterea căldurii prin conducție se poate folosi același element ca și pentru potențialul vitezei. Modelul complet al relației (2.3.1) se găsește expus în [82, 83].

### 3.2.2 Elementul izoparametric axial-simetric pentru curgeri cu recirculație.

În cazul curgerilor cu recirculație, pe fiecare element funcția necunoscută este aproximată cu ajutorul valorilor nodale  $\psi_i$  și a funcțiilor de interpolare  $N_i$ , conform relației:

$$\psi = \sum_{i=1}^4 \Psi_i N_i \quad (3.2.41)$$

Condițiile de minim ale funcționalei  $F$  pe elementul  $D^e$  conduc la următoarele patru ecuații elementale:

$$[E] \{ \psi \} = \{ BR \} + \{ BN \} \quad (3.2.42)$$

unde  $[E]$  este matricea elementală, cu:

$$E_{i,j} = \int_{D^e} \left( \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \frac{1}{r} dr dz \quad (3.2.43)$$

$\{BR\}$  este contribuția vorticității la termenii liberi.

$$BR_i = \Omega \int_{D^e} N_i r dr dz \quad (3.44)$$

$\{BN\}$  este contribuția condițiilor Neumann la termenii liberi.

$$BN_i = \int_{\Gamma_N^e} N_i g_2 dr dz \quad (3.2.45)$$

iar  $\{\psi\}$  este vectorul valorilor nodale ale funcției  $\psi$ .

Calculul integralelor (3.2.43) și (3.2.45) este prezentat în [73], pentru elementul patrulater. În continuare se va prezenta numai expresia integralei (3.2.44):

$$\int_{D^e} N_i r dr dz = \frac{1}{32} \left( \alpha_1 \beta_1 + \frac{\alpha_2 \beta_1 \gamma_1^i}{3} + \frac{\alpha_3 \beta_1 \gamma_2^i}{3} + \right. \\ \left. + \frac{\alpha_1 \beta_3 \gamma_2^i}{3} + \frac{\alpha_2 \beta_2}{3} + \frac{\alpha_3 \beta_2 \gamma_3^i}{9} + \right. \\ \left. + \frac{\alpha_1 \beta_3 \gamma_2^i}{3} + \frac{\alpha_2 \beta_3 \gamma_3^i}{9} + \frac{\alpha_3 \beta_3}{9} + \right. \\ \left. + \frac{\alpha_1 \beta_4 \gamma_3^i}{9} + \frac{\alpha_2 \beta_4 \gamma_2^i}{9} + \frac{\alpha_3 \beta_4 \gamma_1^i}{9} \right) \quad (3.2.46)$$

unde

$$\alpha_1 = (r_4 - r_2)(z_3 - z_1) - (r_3 - r_1)(z_4 - z_2)$$

$$\alpha_2 = (r_3 - r_4)(z_2 - z_1) - (r_2 - r_1)(z_3 - z_4)$$

$$\alpha_3 = (r_4 - r_1)(z_3 - z_2) - (r_3 - r_2)(z_4 - z_1)$$

|                                    |              |    |    |   |    |
|------------------------------------|--------------|----|----|---|----|
| $\beta_1 = r_1 + r_2 + r_3 + r_4$  | $i$          | 1  | 2  | 3 | 4  |
| $\beta_2 = -r_1 + r_2 + r_3 - r_4$ | $\gamma_1^i$ | -1 | 1  | 1 | -1 |
| $\beta_3 = -r_1 - r_2 + r_3 + r_4$ | $\gamma_2^i$ | -1 | -1 | 1 | 1  |
| $\beta_4 = r_1 - r_2 + r_3 - r_4$  | $\gamma_3^i$ | 1  | -1 | 1 | -1 |

Pentru evaluarea lui  $\Omega$  se va presupune că într-o porțiune cilindrică a domeniului există o distribuție parabolică a vitezei axiale, iar  $\psi = 0$  în axă, respectiv  $\psi = 1$  la perete. În aceste condiții se obține:

$$\Omega = \frac{8}{R^4} \quad (3.2.47)$$

unde  $R$  este raza cilindrului.

#### 4. REZOLVAREA PROBLEMELOR DE DIMENSIUNI MARI.

Modelarea câmpurilor, atât prin metoda diferențelor finite, dar mai ales prin metoda elementului finit conduce în cele din urmă la rezolvarea unui sistem de ecuații liniare a cărui dimensiune crește foarte repede odată cu numărul nodurilor, depășind de regulă memoria internă disponibilă a calculatoarelor.

Printr-o numerotare adecvată a nodurilor sistemul devine un sistem bandă, având totalitatea elementelor nenule grupate într-o bandă relativ îngustă în jurul diagonalei principale ( NV - SE ), restul elementelor fiind zero.

Un prim pas ar fi adaptarea algoritmilor la a considera elementele din exteriorul benzii zero și a nu mai reține în memorie aceste elemente. Deși acest pas este necesar, el nu rezolvă problema memoriei deoarece interesul este de a trata sisteme a căror bandă este mult mai mare decât memoria internă disponibilă. Ca urmare sunt necesare procedee de a stoca această bandă în memorii externe.

##### 4.1 Reprezentarea matricilor în calculatoare.

###### 4.1.1 Stocarea în memoria internă.

Memoria calculatoarelor este formată în mod logic dintr-o înșiruire numerotată de locații în care pot fi stocate elementele matricilor. Această înșiruire este **monodimensională**, întrucât numărul locației precizează elementul dorit.

În domeniul calculatoarelor prin „matrice” se înțelege un tablou de elemente bidimensional, pentru precizarea unui element  $a_{ij}$  fiind furnizați doi indici, al liniei,  $i$ , respectiv al coloanei,  $j$ .

Fie matricea de  $n$  linii și  $m$  coloane:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & \dots & a_{2m} \\ \dots & & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} \quad (4.1.1)$$

Elementele acestei matrici pot fi stocate în ordinea „pe linii”, adică în ordinea:

$$a_{11}, a_{12}, a_{13}, \dots, a_{1m}, a_{21}, a_{22}, a_{23}, \dots, a_{2m}, \dots, \\ a_{n1}, a_{n2}, a_{n3}, \dots, a_{nm}$$

respectiv „pe coloane”, adică în ordinea:

$$a_{11}, a_{21}, a_{31}, \dots, a_{n1}, a_{12}, a_{22}, a_{32}, \dots, a_{n2}, \dots, \\ a_{1m}, a_{2m}, a_{3m}, \dots, a_{nm}$$

În virtutea convenției „primul indice variază primul” în unele limbaje de programare care operează cu numere reprezentate în virgulă mobilă (FORTRAN, BASIC, PASCAL etc.) este preferată reprezentarea „pe coloane”. Această convenție, bizară la prima vedere, introduce inconveniente doar la tablourile bidimensionale, unde o regulă „ultimul indice variază primul” ar părea mai naturală. Această regulă este însă total neintuitivă la tablourile tri și multidimensionale.

La stocarea „pe coloane”, calculatorul, care trebuie să localizeze elementul de matrice  $a_{ij}$ , știind că dimensiunile matricii sunt  $n \times m$ , calculează locația  $k$  a elementului  $a_{ij}$  cu relația:

$$k = (j - 1) \cdot n + i \quad (4.1.2)$$

de unde rezultă două aspecte:

- este necesar calculul expresiei (4.1.2), ceea ce mărește timpul de calcul,
- dacă cunoașterea lui  $n$  este strict necesară, rolul lui  $m$  este numai de a dimensiona zona de memorie alocată matricii.

Dacă la analiza algoritmilor se renunță la reprezentarea bidimensională a matricilor și se lucrează pe o reprezentare internă monodimensională - lucru deloc complicat, după cum se va vedea - dezavantajele prezentate mai sus dispar. De asemeni, în acest caz nesolicitând compilatorul să genereze expresii de tip (4.1.2) nimic nu împiedică stocarea „pe linii”, care este de fapt necesară, după cum se va vedea în continuare.

La rezolvarea unui sistem de ecuații liniare de forma:

$$A \cdot X = B \quad (4.1.3)$$

matricea coeficienților  $A$  este o matrice pătrată, de dimensiunea  $n \times n$ , unde  $n$  este numărul de ecuații, iar matricile  $X$  (a necunoscutelor) și  $B$  (a termenilor liberi) sunt matrici coloană, având dimensiunile  $1 \times n$ .

Majoritatea implementărilor limbajelor pe calculatoarele IBM-PC pot trata indici reprezentați în numere întregi pe doi octeți, adică până la cel mult 65535 (în gama -32768 ... 32767). Adresarea relativă a unui masiv de date se face tot pe doi octeți, astfel că dimensiunea acestui masiv de date este de 64 ko. Reprezentarea numerelor în virgulă mobilă în simplă precizie, atât în actualul format IEEE cât și în vechiul format MicroSoft se face pe câte patru octeți, astfel că un masiv de date de 64 ko poate conține cel mult 16383 de valori. Pentru matrici peste această dimensiune, unele compilatoare foarte performante, cum sunt FORTRAN FL 5.0 și FORTRAN FL 5.1 [84] permit alocarea automată a mai multor masive de 64 ko și generează secvențe de gestionare a acestor masive, ceea ce conduce însă la reducerea vitezei de calcul. Din motive ce vor reieși din cele expuse în continuare, pe calculatoarele de tip





considerat numărul de ecuații  $n = 10$  și lățimea benzii  $m = 5$ . Aceste dimensiuni nu sunt, bineînțeles, critice, dar exemplele următoare pot fi urmărite convenabil pe această dimensiune. S-a renunțat la o formalizare matematică întrucât o asemenea formalizare este foarte greu de urmărit la nivelul analizei algoritmilor.

Elementele din banda matricii au fost numerotate ca în fig. 4.1.1. Această numerotare „simplă și logică” indică o primă dificultate care trebuie învinsă de algoritmi: numărul de elemente din bandă este variabil în primele și ultimele două linii. Aceste linii reprezintă de fapt lățimea semibenzii, fără diagonală. Gestiunea acestei zone „strâmbe” este dificilă și propunerea este de a o completa cu elementele necesare pentru a uniformiza lățimea benzii. Aceste elemente sunt reprezentate în fig. 4.1.1 cu linie punctată. Întrucât lățimea benzii  $m$  este mai mică decât dimensiunea  $n$  acest procedeu generează o zonă în formă de paralelogram cu un număr de elemente mai mic decât matricea inițială, rezultatul fiind cu atât mai bun cu cât lățimea benzii este mai mică. Pentru limitele examinate mai sus creșterea de memorie necesară este de  $90 \times 89 \times 4 = 32$  ko, cu totul ne semnificativă față de cei 6 Mo ai benzii.

Atât procedeele directe cât și cele iterative prelucrează această zonă pe linii, astfel încât o reprezentare aparent convenabilă într-un fișier ar fi cea din fig. 4.1.2., elementele benzii fiind stocate consecutiv într-o înregistrare iar liniile consecutive fiind stocate în înregistrări (articole) consecutive. Pentru o asemenea reprezentare este optimă o structură de fișier secvențial.

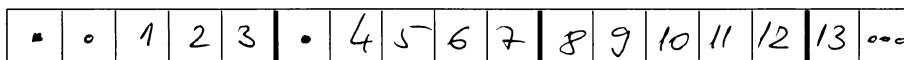


Fig. 4.1.2 Fișier matrice A bandă

Întrucât reprezentarea din fig. 4.1.2 este puțin intuitivă, în descrierea algoritmilor în continuare înregistrările vor fi amplasate una sub alta, rezultând reprezentarea din fig. 4.1.3. Structura este în fond monodimensională, valoarea  $m$  (aici  $m = 5$ ) caracterizând complet matricea. De remarcat că  $n$  poate rămâne nedeterminat dacă la sfârșitul fișierului se pune o marcă de sfârșit de fișier (EOF). Cum acest procedeu este utilizat în mod general la fișierele secvențiale, identificarea sfârșitului matricii se va face în acest mod.

Se pune întrebarea dacă nu există o altă ordine de stocare, mai eficientă. Atât metodele de rezolvare directe, cât și cele iterative lucrează mai eficient dacă în loc să fie aplicate sistemului (4.1.3) sunt aplicate sistemului:

$$A^T \cdot A \cdot X = A^T \cdot B$$

(4.1.4)

unde  $A^T$  este transpusa matricii  $A$ .

Pentru calculul produsului  $A^T \cdot A$  și chiar a  $A^T \cdot B$  este mai eficient să se pornească de la  $A^T$ , cum se va vedea la algoritmiile respectivi.

Matricea  $A^T$  corespunzătoare matricii  $A$  din fig. 4.1.1 este prezentată în fig. 4.1.4.

|    |    |    |    |    |
|----|----|----|----|----|
| •  | •  | 1  | 2  | 3  |
| •  | 4  | 5  | 6  | 7  |
| 8  | 9  | 10 | 11 | 12 |
| 13 | 14 | 15 | 16 | 17 |
| 18 | 19 | 20 | 21 | 22 |
| 23 | 24 | 25 | 26 | 27 |
| 28 | 29 | 30 | 31 | 32 |
| 33 | 34 | 35 | 36 | 37 |
| 38 | 39 | 40 | 41 | •  |
| 42 | 43 | 44 | •  | •  |

Fig. 4.1.3 Fișier matrice  $A$  bandă

|   |   |   |   |    |    |    |    |    |    |    |    |   |   |
|---|---|---|---|----|----|----|----|----|----|----|----|---|---|
| • | • | 1 | 4 | 8  | •  | •  | •  | •  | •  | •  | •  |   |   |
| • | • | 2 | 5 | 9  | 13 | •  | •  | •  | •  | •  | •  |   |   |
| • | • | 3 | 6 | 10 | 14 | 18 | •  | •  | •  | •  | •  |   |   |
| • | • | • | 7 | 11 | 15 | 19 | 23 | •  | •  | •  | •  |   |   |
| • | • | • | • | 12 | 16 | 20 | 24 | 28 | •  | •  | •  |   |   |
| • | • | • | • | •  | 17 | 21 | 25 | 29 | 33 | •  | •  |   |   |
| • | • | • | • | •  | •  | 22 | 26 | 30 | 34 | 38 | •  |   |   |
| • | • | • | • | •  | •  | •  | 27 | 31 | 35 | 39 | 42 |   |   |
| • | • | • | • | •  | •  | •  | •  | 32 | 36 | 40 | 43 | • |   |
| • | • | • | • | •  | •  | •  | •  | •  | 37 | 41 | 44 | • | • |

Fig. 4.1.4 Matrice  $A^T$  bandă

Și în acest caz apare dificultatea numărului variabil de elemente la primele și la ultimele linii, dificultate rezolvată analog, rezultând structura de fișier din fig. 4.1.5.

|   |   |   |   |   |   |   |   |   |    |   |   |    |    |    |   |     |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|---|---|----|----|----|---|-----|
| • | • | 1 | 4 | 8 | • | 2 | 5 | 9 | 13 | 3 | 6 | 10 | 14 | 18 | 7 | ... |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|---|---|----|----|----|---|-----|

Fig. 4.1.5 Fișier matrice  $A^T$  bandă

Corespunzator structurii din această figură, la prezentarea algoritmilor se va folosi reprezentarea din fig. 4.1.6.

În caz că sistemul este simetric (de exemplu provine dintr-o formulare variațională), matricea  $A$  este simetrică, deci  $A^T = A$ , iar fișierele conținând matricile  $A$  și  $A^T$  sunt identice.

Alte metode de stocare se depărtează de scopurile propuse. Stocarea „pe diagonală” în structura din fig. 4.1.7 este folosită de algoritmul REBAN [85] care rezolvă sisteme bandă care încap în memoria internă, dar conduce la articole lungi (de lungime  $n$ ), care nu se pot prelucra individual.

Stocarea în fișiere cu acces direct nu este doar inutilă, ci de-a dreptului dăunătoare, datorită accesului mai lent în aceste fișiere la o prelucrare secvențială. În concluzie, structura de stocare propusă este cea din fig. 4.1.5 - 4.1.6.

|    |    |    |    |    |
|----|----|----|----|----|
| •  | •  | 1  | 4  | 8  |
| •  | 2  | 5  | 9  | 13 |
| 3  | 6  | 10 | 14 | 18 |
| 7  | 11 | 15 | 19 | 23 |
| 12 | 16 | 20 | 24 | 28 |
| 17 | 21 | 25 | 29 | 33 |
| 22 | 26 | 30 | 34 | 38 |
| 27 | 31 | 35 | 39 | 42 |
| 32 | 36 | 40 | 43 | •  |
| 37 | 41 | 44 | •  | •  |

Fig. 4.1.6 Fișier matrice  $A^T$  bandă

|   |   |   |    |    |    |    |    |    |    |   |   |   |    |    |    |     |
|---|---|---|----|----|----|----|----|----|----|---|---|---|----|----|----|-----|
| • | • | 8 | 13 | 18 | 23 | 28 | 33 | 38 | 42 | • | 4 | 9 | 14 | 19 | 24 | ... |
|---|---|---|----|----|----|----|----|----|----|---|---|---|----|----|----|-----|

Fig. 4.1.7 Fișier matrice  $A$  bandă stocată „pe diagonale”

## 4.2 Rezolvarea sistemelor de ecuații liniare.

Pentru rezolvarea sistemelor de ecuații liniare se cunosc două căi principale [86, 87, 88, 89, 90]:

- metode directe (exacte),
- metode iterative.

### 4.2.1 Metode directe.

Metodele directe permit obținerea soluției exacte din punct de vedere matematic a sistemului considerat, făcând abstracție de

erorile de rotunjire și trunchiere, folosind un număr finit de operații elementare. Se cunosc mai multe metode directe, dintre care vor fi discutate câteva.

**Metoda Cramer** se bazează pe calculul determinanților matricii complete a sistemului. Deși foarte simplă din punct de vedere matematic, ea este foarte ineficientă din punct de vedere numeric [87]. Ineficiența sa se datorează reluării repetate la calculul succesiv al determinanților a unor operații deja efectuate.

**Metoda matricii inverse** se bazează pe înmulțirea la stânga a matricii complete a sistemului cu inversa matricii coeficienților. Inversarea matricii coeficienților presupune însă un volum de calcul egal cu cel al rezolvării sistemului propriu-zis. De fapt, metodele numerice de inversare a matricilor se bazează tocmai pe metodele de rezolvare a sistemelor. Metoda matricii inverse este utilă la rezolvarea repetată a aceluiași sistem, la care diferă doar termenii liberi. Problema apare des în domeniul rezistenței materialelor, la care matricea coeficienților, zisă și matricea de rigiditate rămâne constantă, iar matricea termenilor liberi, zisă și matricea încărcărilor variază.

**Metoda Gauss a eliminării** se bazează pe transformarea matricii sistemului într-o matrice superior triunghiulară (superior trapezoidală, după [89]), folosind succesiv ecuația numărul  $i$  pentru eliminarea necunoscutelor numărul  $i$  din ecuațiile următoare. Metoda este foarte simplă din punct de vedere numeric, însă pentru configurații speciale ale matricii coeficienților (matrici singulare sau slab condiționate [91]) pot apărea dificultăți numerice. Una din căile de evitare a acestor dificultăți este pivotarea matricilor [86], ceea ce conduce la complicarea algoritmilor de calcul, uneori în mod inacceptabil, ca în cazul sistemelor bandă. O altă cale este simetrizarea matricilor coeficienților prin generarea lor prin metode variaționale, sau, la nevoie, prin înmulțirea la stânga a matricii complete a sistemului cu matricea transpusă a coeficienților. Acest procedeu dublează practic timpul de rezolvare, însă în caz că problema care trebuie rezolvată este pusă corect (nu generează matrici singulare din principiu) evită orice altă dificultate numerică. Multe lucrări [87, 92, 93] afirmă că aceste dificultăți apar deja la sisteme de ecuații cu mai mult de 100 de ecuații. Acest lucru poate apare numai în cazul folosirii unei programări neingrijite. La un algoritm și o programare corectă pierderea de precizie în timpul calculelor este de ordinul  $\log n$ , unde  $n$  este numărul de ecuații a sistemului [94]. Pentru 10000 de ecuații se pierd deci patru cifre semnificative. Cum în calculatoare reprezentările în simplă precizie ale mantisei se fac pe 24 de biți, adică cu șapte cifre semnificative, pierderea a patru cifre conduce la rezultate cu trei cifre semnificative exacte, ceea ce este absolut suficient. De fapt, datorită reprezentării interne binare a cifrelor, cele trei cifre zecimale semnificative exacte se păstrează până la 16000 de ecuații. Ca urmare, pentru probleme până la această dimensiune este inutilă folosirea reprezentării în dublă precizie. Autorul a verificat practic aceste aspecte pe teste foarte dure bazate pe matrici maxime generate aleator [95] și garantează afirmațiile de mai sus. Ca urmare, procedeu eliminării Gaussiene este un procedeu preferat la rezolvarea sistemelor bandă de ecuații liniare.

**Metoda Gauss-Jordan** se bazează pe transformarea matricii coeficienților într-o matrice unitate. Este o variantă a eliminării Gaussiene și prezintă interes doar din punct de vedere matematic.

**Metoda Crout** se bazează pe descompunerea matricii coeficienților în două matrici inferior și superior triunghiulare. Ea necesită practic același număr de operații ca și eliminarea Gaussiană, și ceva mai puțină memorie pentru stocarea datelor intermediare. Nu permite pivotări, deci este o metodă mai nesigură din punct de vedere al preciziei de calcul.

**Metoda Cholesky a rădăcinii pătrate** se aplică sistemelor simetrice și se bazează tot pe descompunerea matricii coeficienților în două matrici inferior și superior triunghiulare, care de fapt sunt una transpusa celeilalte. Metoda folosește doar una din cele două matrici, face economie de memorie și număr de operații.

#### 4.2.2 Metode iterative.

Metodele iterative se caracterizează prin faptul că soluția sistemului considerat se obține ca o limită a unui șir de vectori ce reprezintă soluția pentru diversele iterații efectuate. În cadrul acestei metode se pune problema alegerii metodei celei mai convenabile din punct de vedere al unei viteze sporite de convergență. Se cunosc mai multe metode iterative, dintre care vor fi discutate câteva.

**Metoda Jacobi** presupune cunoașterea unei soluții aproximative a sistemului. Prin înlocuirea acesteia în sistem se obține o soluție aproximativă mai bună. Procedeu se repetă iterativ până când diferența dintre cele două soluții este sub o valoare admisă, numită criteriu de oprire.

**Metoda Seidel** este o variantă a metodei Jacobi, în care noua valoare calculată a unei necunoscute se folosește imediat la calculul valorilor necunoscutele următoare. În multe aplicații această metodă este mai stabilă și are o convergență mai bună decât metoda Jacobi, însă se cunosc și excepții.

**Metoda relaxărilor succesive** este o variantă a metodei Gauss-Seidel, în care pentru calculul valorii următoarei necunoscute se folosește o combinație liniară dintre soluția precedentă și noua valoare calculată a necunoscutei curente. Factorul combinației liniare se numește coeficient de relaxare și poate fi subunitar sau supraunitar, obținându-se subrelaxări, respectiv supra-relaxări. Pentru un coeficient de relaxare unitar se obține metoda Seidel [89, 90].

Metodele iterative prezintă probleme de stabilitate și viteză de convergență. Problemele de stabilitate constau în faptul că metoda converge sau nu. Există extrem de multe studii care tratează stabilitatea metodei Seidel pentru diverse probleme. Se arată matematic că această metodă este stabilă pentru matrici pozitiv definite. Verificarea dacă o matrice este pozitiv definită necesită însă un număr de operații de același ordin de mărime cu cel necesar rezolvării sistemului printr-o metodă directă. Odată stabilitatea



#### 4.4 Înmulțirea unei matrici bandă cu transpusa sa.

Pentru elaborarea unui algoritm de obținere a matricii  $A^T \cdot A$  pornind de la matricile  $A$  sau  $A^T$  stocate ca în cap. 4.1.2 se pornește de la reprezentările din fig. 4.1.1 și 4.1.4. Matricea  $A^T \cdot A$  rezultată este prezentată în fig. 4.4.1.

|   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 1 | 2  | 3  | 4  | 5  | .  | .  | .  | .  | .  |
| 2 | 6  | 7  | 8  | 9  | 10 | .  | .  | .  | .  |
| 3 | 7  | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | .  | .  | .  |
| 4 | 8  | 12 | 16 | 17 | 18 | 19 | 20 | .  | .  |
| 5 | 9  | 13 | 17 | 21 | 22 | 23 | 24 | 25 | .  |
| . | 10 | 14 | 18 | 22 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30 |
| . | .  | 15 | 19 | 23 | 27 | 31 | 32 | 33 | 34 |
| . | .  | .  | 20 | 24 | 28 | 32 | 35 | 36 | 37 |
| . | .  | .  | .  | 25 | 29 | 33 | 36 | 38 | 39 |
| . | .  | .  | .  | .  | 30 | 34 | 37 | 39 | 40 |

Fig. 4.4.1 Matrice  $A^T \cdot A$  bandă

Primul element al matricii  $A^T \cdot A$  va fi notat cu (1), al doilea cu (2) etc. Matricea fiind simetrică, n-au mai fost numerotate distinct elementele de sub diagonală. În fig. 4.4.2 se prezintă spre exemplificare mersul calculelor la generarea liniei numărul 3 al matricii  $A^T \cdot A$  pornind atât de la matricea  $A$ , cât și de la matricea  $A^T$ . Pe figură sunt unite prin linii elementele a căror produs trebuie efectuat. Fiecare element din matricea  $A^T \cdot A$  este suma produselor reprezentate. În urma examinării fig. 4.4.2 se constată următoarele:

a) Nu este nevoie de ambele matrici,  $A$  și  $A^T$ , este suficientă doar una, din care se pot scoate printr-o gestionare adecvată elementele necesare.

b) Pentru calculul corect al elementului (1) pornind de la  $A$  cu algoritmul pentru o linie completă, acesta funcționează numai după completarea matricii  $A$  cu două linii goale, ca în fig.4.4.3, rezultând un triunghi de elemente nule (încadrat cu linie groasă) complet nefolosit. Pornind de la  $A^T$  algoritmul funcționează chiar de la început, fără nici o măsură suplimentară, ceea ce simplifică gestiunea, nu necesită anulări prealabile de zone și utilizează mai eficient spațiul de memorie.



$A$

(11)

|               |               |               |              |              |
|---------------|---------------|---------------|--------------|--------------|
| .             | .             | 1             | 2            | <del>3</del> |
| .             | 4             | 5             | <del>6</del> | 7            |
| 8             | 9             | <del>10</del> | 11           | 12           |
| 13            | <del>14</del> | 15            | 16           | 17           |
| <del>18</del> | 19            | 20            | 21           | 22           |
| 23            | 24            | 25            | 26           | 27           |
| 28            | 29            | 30            | 31           | 32           |
|               |               |               |              |              |

$A^T$

|              |              |               |               |               |
|--------------|--------------|---------------|---------------|---------------|
| .            | .            | 1             | 4             | 8             |
| .            | 2            | 5             | 9             | 13            |
| <del>3</del> | <del>6</del> | <del>10</del> | <del>14</del> | <del>18</del> |
| 7            | 11           | 15            | 19            | 23            |
| 12           | 16           | 20            | 24            | 28            |
| 17           | 21           | 25            | 29            | 33            |
| 22           | 26           | 30            | 34            | 38            |
|              |              |               |               |               |

(12)

|               |               |               |              |    |
|---------------|---------------|---------------|--------------|----|
| .             | .             | 1             | 2            | 3  |
| .             | 4             | 5             | <del>6</del> | 7  |
| 8             | 9             | <del>10</del> | 11           | 12 |
| 13            | <del>14</del> | 15            | 16           | 17 |
| <del>18</del> | 19            | 20            | 21           | 22 |
| 23            | 24            | 25            | 26           | 27 |
| 28            | 29            | 30            | 31           | 32 |
|               |               |               |              |    |

|              |               |               |               |               |
|--------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| .            | .             | 1             | 4             | 8             |
| .            | 2             | 5             | 9             | 13            |
| <del>3</del> | <del>6</del>  | <del>10</del> | <del>14</del> | <del>18</del> |
| <del>7</del> | <del>11</del> | <del>15</del> | <del>19</del> | 23            |
| 12           | 16            | 20            | 24            | 28            |
| 17           | 21            | 25            | 29            | 33            |
| 22           | 26            | 30            | 34            | 38            |
|              |               |               |               |               |

(13)

|               |               |               |    |               |
|---------------|---------------|---------------|----|---------------|
| .             | .             | 1             | 2  | 3             |
| .             | 4             | 5             | 6  | 7             |
| 8             | 9             | <del>10</del> | 11 | <del>12</del> |
| 13            | <del>14</del> | 15            | 16 | 17            |
| <del>18</del> | 19            | <del>20</del> | 21 | 22            |
| 23            | 24            | 25            | 26 | 27            |
| 28            | 29            | 30            | 31 | 32            |
|               |               |               |    |               |

|               |               |               |               |               |
|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| .             | .             | 1             | 4             | 8             |
| .             | 2             | 5             | 9             | 13            |
| 3             | <del>6</del>  | <del>10</del> | <del>14</del> | <del>18</del> |
| <del>7</del>  | <del>11</del> | <del>15</del> | <del>19</del> | 23            |
| <del>12</del> | <del>16</del> | 20            | 24            | 28            |
| 17            | 21            | 25            | 29            | 33            |
| 22            | 26            | 30            | 34            | 38            |
|               |               |               |               |               |

|      | A             |    |    |    |    | $A^T$         |               |               |    |    |
|------|---------------|----|----|----|----|---------------|---------------|---------------|----|----|
| (14) | ·             | ·  | 1  | 2  | 3  | ·             | ·             | 1             | 4  | 8  |
|      | ·             | 4  | 5  | 6  | 7  | ·             | 2             | 5             | 9  | 13 |
|      | 8             | 9  | 10 | 11 | 12 | 3             | 6             | <del>10</del> | 14 | 18 |
|      | 13            | 14 | 15 | 16 | 17 | 7             | 11            | 15            | 19 | 23 |
|      | <del>18</del> | 19 | 20 | 21 | 22 | 12            | <del>16</del> | <del>20</del> | 24 | 28 |
|      | 23            | 24 | 25 | 26 | 27 | <del>17</del> | 21            | 25            | 29 | 33 |
|      | 28            | 29 | 30 | 31 | 32 | 22            | 26            | 30            | 34 | 38 |
|      |               |    |    |    |    |               |               |               |    |    |
|      |               |    |    |    |    |               |               |               |    |    |

|      |               |    |    |    |    |               |               |               |    |    |
|------|---------------|----|----|----|----|---------------|---------------|---------------|----|----|
| (15) | ·             | ·  | 1  | 2  | 3  | ·             | ·             | 1             | 4  | 8  |
|      | ·             | 4  | 5  | 6  | 7  | ·             | 2             | 5             | 9  | 13 |
|      | 8             | 9  | 10 | 11 | 12 | 3             | 6             | 10            | 14 | 18 |
|      | 13            | 14 | 15 | 16 | 17 | 7             | 11            | 15            | 19 | 23 |
|      | <del>18</del> | 19 | 20 | 21 | 22 | 12            | <del>16</del> | <del>20</del> | 24 | 28 |
|      | 23            | 24 | 25 | 26 | 27 | 17            | 21            | 25            | 29 | 33 |
|      | 28            | 29 | 30 | 31 | 32 | <del>22</del> | 26            | 30            | 34 | 38 |
|      |               |    |    |    |    |               |               |               |    |    |
|      |               |    |    |    |    |               |               |               |    |    |

Fig. 4.4.2 Operații la calculul matricii  $A^T \cdot A$ 

Este totuși de observat că pentru pornirea calculului primei linii din  $A^T \cdot A$ , pornind de la A sunt necesare doar 3 înregistrări în timp ce pornind de la  $A^T$  sunt necesare 5. Acest lucru este compensat de necesitatea de a introduce inițial în A două înregistrări nule și, datorită faptului că oricum fișierul se citește pe blocuri mari, pornirea de la  $A^T$  este avantajoasă.

c) Notând cu  $i_s$  indicele elementului „din stânga”, adică aparținând matricii  $A^T$  și cu  $i_p$  indicele elementului „din dreapta”, adică aparținând matricii A, la calculul sumelor dacă se pornește de la A indicii  $i_s, i_p$  variază în salturi, în timp ce pornind de la  $A^T$

|    |    |    |    |    |   |
|----|----|----|----|----|---|
| ·  | ·  | ·  | ·  | ·  | · |
| ·  | ·  | ·  | ·  | ·  | · |
| ·  | ·  | ·  | ·  | 2  | 3 |
| ·  | 4  | 5  | 6  | 7  |   |
| 8  | 9  | 10 | 11 | 12 |   |
| 13 | 14 | 15 | 16 | 17 |   |
| 18 | 19 | 20 | 21 | 22 |   |
|    |    |    |    |    |   |
|    |    |    |    |    |   |

Fig. 4.4.3

indicii cresc cu câte o unitate. Pentru unele compilatoare incrementarea unei variabile întregi cu o unitate este mult mai rapidă decât alte operații, cum ar fi (chiar) adunarea sau scăderea unor variabile întregi.

d) Pentru terminarea corectă a calculului  $A^T \cdot A$  cu algoritmul pentru o linie completă, indiferent că se pornește de la  $A$  sau de la  $A^T$  sunt necesare două linii goale. Dacă la pornirea de la  $A$  verificarea acestui fapt este simplă și se explică prin faptul că distanța pe verticală de la linia curentă până la elementul cel mai depărtat nu depășește două linii, pentru pornirea de la  $A^T$  este mai puțin evident și acest aspect va fi urmărit în continuare.

În fig. 4.4.4 este reprezentată coada matricii  $A^T$ , două linii nule și două linii cu conținut oarecare, marcat cu „X”. Urmărind pe fig. 4.4.4 operațiile din fig. 4.4.2 rezultă că produsele în care intră locațiile marcate cu „X” se fac întotdeauna cu locații cu conținut nul, rezultatul fiind, bineînțeles, nul. Deci acest conținut este indiferent și aceste locații pot fi situate chiar în afara matricii dimensionate (!).

|    |    |    |    |    |  |
|----|----|----|----|----|--|
|    |    |    |    |    |  |
| 27 | 31 | 35 | 39 | 42 |  |
| 32 | 36 | 40 | 43 | •  |  |
| 37 | 41 | 44 | •  | •  |  |
| •  | •  | •  | •  | •  |  |
| •  | •  | •  | •  | •  |  |
| X  | X  | X  | X  | X  |  |
| X  | X  | X  | X  | X  |  |

Fig. 4.4.4

f) Dacă elementul cel mai din dreapta dintr-o linie a semibenziilor matricii  $A^T \cdot A$ , (de exemplu 15 din linia a 3-a) este format dintr-un singur produs, cu apropierea de diagonală numărul de termeni crește, diagonală având numărul maxim de termeni. În cazul că matricea  $A$  are elemente de același ordin de mărime, elementele diagonalei matricii  $A^T \cdot A$  au valori maxime. Efectele descrise la punctele e) și f) favorizează convergența în cazul procedurilor iterative.

g) Un element al diagonalei principale a matricii  $A^T \cdot A$  nu poate fi nul decât dacă toate elementele unei linii a matricii  $A^T \cdot A$  sunt nule, caz în care sistemul este de fapt nedeterminat. Calculul trebuie oprit imediat din două motive:

- în acest caz este inutil,
- toate procedeele de rezolvare conduc la împărțiri prin zero.

Invers, aplicarea atât a procedurii de rezolvare Gauss, cât și a procedurii Seidel pe matricea  $A^T \cdot A$  este garantată fără nici un fel de precauții. La aplicarea acestor procedee pe matricea  $A$  pot apărea dificultăți la întâlnirea unui element diagonal nul (lucru perfect posibil). Rezolvarea acestei situații impune o pivotare, ceea ce duce la modificarea lățimii benzii, cu complicații suplimentare.

h) Mărirea lăţimii benzii de două ori la matricea  $A^T \cdot A$  faţă de  $A$  este compensată de faptul că matricea  $A^T \cdot A$  este simetrică, putându-se reţine doar o semibandă, a cărei lăţime este exact cât a benzii matricii  $A$ , astfel că fişierele care stochează matricile  $A$  şi  $A^T \cdot A$  vor avea practic aceeaşi mărime.

Reprezentarea matricii  $A^T \cdot A$  într-un fişier este absolut naturală, pentru descrierea algoritmulor folosindu-se reprezentarea din fig. 4.4.5.

#### 4.5 Generarea matricilor locale.

În cadrul metodei elementului finit fiecare element local generează o serie de termeni pentru fiecare din nodurile sale, considerate în numerotare locală (de obicei în ordine naturală, în sens trigonometric). Dacă elementul are  $e$  noduri se va genera un tablou de  $e \times e$  valori, corespunzător fiecărei perechi de noduri, inclusiv pentru de două ori acelaşi nod. La prima vedere se pare că este necesară definirea a câte unei matrici locale bidimensionale pentru fiecare element finit, însă după cum se va vedea în cap. 4.6 acest lucru nu este necesar. Pentru fiecare tip problemă şi tip de element finit este necesară scrierea a câte unei alte rutine, bazată pe teoria matematică corespunzătoare, rezultând o bibliotecă de tipuri de elemente finite.

i

Pentru metoda diferenţelor finite, modelarea la nivel local este atât de simplă încât nu este percepută ca un pas independent de asamblarea globală.

#### 4.6 Asamblarea matricilor globale.

Problema asamblării matricilor globale la FEM provine din două cauze:

- Faptul că nodurile din reţeaua de discretizare au o numerotare globală, ceea ce face ca elementele să nu aibă nodurile numerotate în ordine naturală. Legătura între numerotarea locală şi numerotarea globală se face prin **matricea de conexiuni după elemente**. Această matrice se generează pentru o anumită problemă o singură dată, odată cu generarea reţelei de discretizare.

- Fiecare nod al reţelei de discretizare poate fi un nod al mai multor elemente finite diferite, deci în nodul respectiv trebuie asamblaţi termenii provenind din matricile locale ale tuturor elementelor din jurul său.

*diagonala  
principala*

|    |    |    |    |    |
|----|----|----|----|----|
| 1  | 2  | 3  | 4  | 5  |
| 6  | 7  | 8  | 9  | 10 |
| 11 | 12 | 13 | 14 | 15 |
| 16 | 17 | 18 | 19 | 20 |
| 21 | 22 | 23 | 24 | 25 |
| 26 | 27 | 28 | 29 | 30 |
| 31 | 32 | 33 | 34 | .  |
| 35 | 36 | 37 | .  | .  |
| 38 | 39 | .  | .  | .  |
| 40 | .  | .  | .  | .  |

Fig. 4.4.5 Fişier matrice  $A^T \cdot A$

Din analiza funcționării FEM rezultă că matricile locale se pot asambla în matricea globală imediat ce au fost generate. Mai mult, se pot asambla imediat fiecare termen generat pentru fiecare pereche de noduri, astfel că nici nu este necesară definirea nici măcar a unei singure matrici locale (!). Procedeu de asamblare imediată permite scrierea unor algoritmi de asamblare universali, indiferent de tipul elementului și numărul de noduri al unui element.

Poziția (linia și coloana) în care trebuie asamblat în matricea globală fiecare termen al matricii locale generat este cea corespunzătoare numerelor globale ale celor două noduri care intră în calcul. Deci distanța la care se află termenii generați pentru un element oarecare este tocmai diferența dintre numerele nodurilor elementului respectiv, în numerotare globală. Distanța maximă este diferența maximă. Printr-o numerotare adecvată această distanță maximă se poate minimiza, rezultând chiar banda sistemului. În concluzie, cea mai eficientă cale pentru a asambla matrici globale este de a genera pe rând pentru fiecare nod toți termenii în care intervine nodul respectiv și a-i asambla imediat. Toți acești termeni se găsesc la o distanță (pe orizontală sau pe verticală) nu mai mare decât banda sistemului și, la asamblarea unui nod, doar această zonă a matricii globale trebuie să fie în memoria internă.

Pe de altă parte, toți termenii generați de un element se găsesc de asemenea în bandă (prin definiție). Cum zona necesară a matricii globale este deja poziționată în memorie, este eficientă generarea tuturor termenilor elementului respectiv și asamblarea lor. Deci se assemblează și termeni ai altor noduri decât cel curent și este necesară o evidență a termenilor deja asamblați. Aceasta se face de obicei cu ajutorul **matricii de conexiuni după noduri**, care stochează numerele elementelor adiacente unui nod. Întrucât acest număr nu este constant, consumul de memorie este mare. Autorul a constatat că dimensiunea acestei matrici poate fi redusă drastic printr-o sortare a matricii de conexiuni după elemente în ordinea nodului minim și stocarea doar a **câte**, nu și **care**, elemente mai trebuie asamblate în nodul curent. Astfel matricea de conexiuni după noduri se reduce de la dimensiunea  $e \times n$  la dimensiunea  $n$ . Cea mai bună metodă de sortare a matricii de conexiuni după elemente este metoda MATHSORT [96].

Odată cu asamblarea se pune și problema introducerii condițiilor la limită de tip Dirichlet. Aceste condiții înseamnă de fapt valori cunoscute în nodurile respective. Există mai multe metode de tratare, dar cea mai corectă este de a asambla simultan întreg sistemul (4.1.3) și a substitui la asamblare imediat valorile cunoscute, trecând aceste valori în termenii liberi și eliminând linia și coloana nodului curent. Bineînțeles, algoritmul acestor manevre nu este tocmai simplu, însă autorul a implementat unul pentru matrici stocate pe suporturi externe.

#### 4.7 Prelucrarea matricilor stocate pe suporturi de memorie externă.

Întrucât atât fișierul conținând matricea de intrare cât și cel conținând matricea de ieșire au aceeași dimensiune (prin urmare dacă unul nu încapă în memoria internă, nu încapă nici celălalt) și în cazul de față se poate aplica schema clasică, cu un fișier de intrare, un bloc prelucrat în memoria internă și un fișier de ieșire. Completând schema cu obișnuitele tamponare de intrare/ieșire se obține situația din fig. 4.7.1:

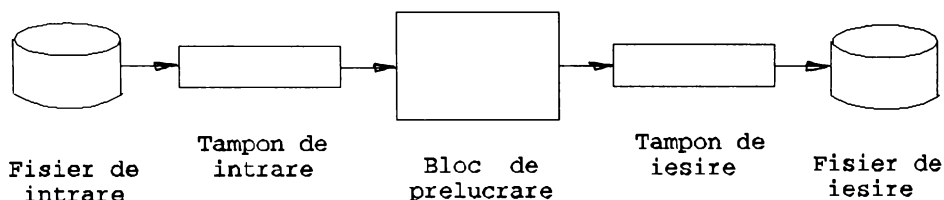


Fig. 4.7.1 Schema de principiu a prelucrării unui fișier

Analizând algoritmi de transpunere și înmulțire cu transpusa prezentați în cap. 4.3 și 4.4 se constată că tamponul de intrare poate fi înglobat în blocul de prelucrare ca în fig. 4.7.2:

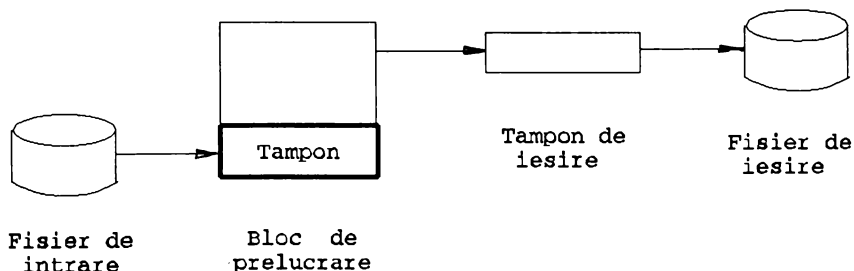


Fig. 4.7.2 Schema prelucrării cu tampon înglobat.

O primă posibilitate ar fi de a aduce în blocul de prelucrare câte o înregistrare din fișierul de intrare, a genera o înregistrare în blocul de ieșire și a deplasa apoi în sus blocul de prelucrare cu o linie. În acest caz dimensiunea necesară pentru blocul de prelucrare este  $m \times m$ . Procedul descris are două dezavantaje:

a) Deplasările, dacă se fac element după element consumă mult timp de calculator. Acest dezavantaj poate fi foarte mult micșorat dacă deplasarea se face cu o rutină în cod mașină [97] care

deplasează o zonă de memorie.

b) Se citește și se scrie alternativ câte o înregistrare din fișierul de intrare, respectiv în fișierul de ieșire, ceea ce consumă mult timp cu poziționarea capetelor pe disc. Sunt de imaginat trei soluții:

1) Se folosesc fișiere de intrare și ieșire plasate pe discuri diferite. Această soluție este bună pentru un calculator care dispune de cel puțin două discuri hard, cum ar fi FELIX C-256, sau numai discuri floppy, cum ar fi M218 [83], dar pentru un calculator de tip IBM-PC echipat cu un disc hard și 1 - 2 discuri floppy este neelegantă și limitează mărimea fișierului la discheta disponibilă, de obicei mult mai mică decât discul hard. Organizarea unui fișier pe mai multe dischete necesită un efort disproporționat.

2) Întrucât toate discurile hard au cel puțin două suprafețe se pot organiza în principiu fișiere de intrare și ieșire amplasate pe aceiași cilindri, dar folosind piste pe fețe diferite. Soluția necesită un efort de programare foarte mare și este incompatibilă cu programele de întreținere a discului. Soluția este adecvată numai dacă se dispune de calculatoare orientate pe aplicație.

3) Se mărește pe cât posibil tamponul și se citesc în el cât mai multe înregistrări. După ce tamponul s-a umplut se trece la prelucrarea lui, generându-se înregistrările de ieșire. În acest mod numărul de poziționări a capetelor scade considerabil. În cazul limită cu dimensiunea fișierului de intrare de 6 Mo și a benzii de 90 de elemente sunt necesare cca. 200 de poziționări. Aceasta este soluția adoptată.

Pentru a începe prelucrarea, trebuie citite inițial  $m$  înregistrări, astfel că se conturează necesitatea unei zone premergătoare,

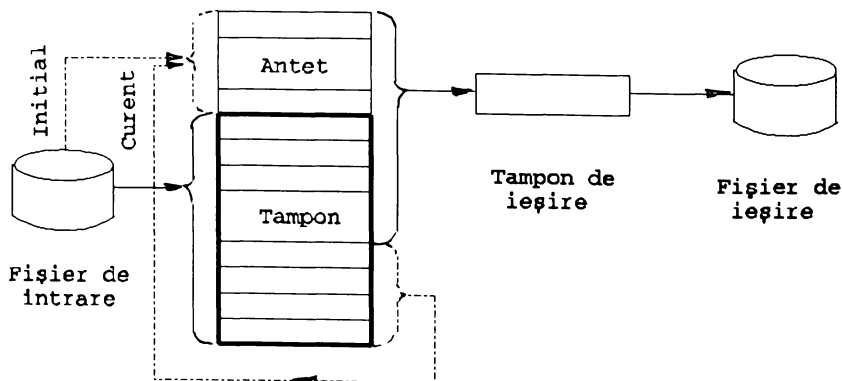


Fig. 4.7.3 Schema prelucrării cu tampon maxim.

conținând  $m - 1$  înregistrări, numită în cele ce urmează „antet”. Schema prelucrării în aceste caz este prezentată în fig. 4.7.3.

Algoritmul prelucrării are următoarele etape:

1. Se pregătește antetul (anulări sau, după caz, citiri).
2. Se citește în tampon.
3. Se prelucrează cât se poate din tampon. (De obicei ultimele  $m - 1$  linii nu sunt suficiente pentru a genera noi înregistrări la ieșire).
4. Se mută ultimele  $m - 1$  linii în antet și se reia de la punctul 2.

Citirile în tampon se termină la detectarea mărcii de sfârșit de fișier (EOF) iar algoritmul se termină după generarea numărului de înregistrări dorit ( $n$ ).

O altă chestiune de rezolvat ar fi anularea unor linii la începutul antetului și la sfârșitul prelucrării (v. fig. 4.3.1). Poziția fixă a începutului antetului face ca anularea câtorva linii la început să fie foarte simplă. Cu totul altfel se prezintă lucrurile la sfârșit. Dacă fișierul conține numai liniile din fig. 4.1.6 și sfârșitul citirilor este detectat prin marca de sfârșit de fișier (EOF) înseamnă că în continuare trebuiesc anulate  $(m - 1)/2$  linii. În caz că acestea nu încap în tampon (după detectarea EOF au rămas în tampon mai puțin de  $(m - 1)/2$  linii) înseamnă că trebuie completat tamponul cu câte linii nule încap, prelucrat, mutată coada în antet, completat restul de linii nule și terminată prelucrarea. Algoritmul de prelucrare trebuie prevăzut cu o secvență destul de complicată pentru tratarea acestui caz. Este mult mai simplu dacă marca de sfârșit de fișier este detectată după cele  $(m - 1)/2$  linii goale, caz în care algoritmul descris anterior funcționează corect fără nici o secvență suplimentară. De aceea fișierele A, respectiv A<sup>T</sup> vor fi prevăzute la sfârșit cu  $(m - 1)/2$  linii nule.

Acum se poate explica și de ce banda matricii nu poate depăși 90 de elemente. La anumiți algoritmi este necesară prezența simultană în tampon a  $m$  înregistrări pentru a putea prelucra zone cuprinse între diagonalele îngroșate din fig. 4.7.4. Întrucât dimensiunea maximă a masivului care conține antetul și tamponul este de 16383 trebuie satisfăcută inegalitatea:

$$m(2m - 1) < 16384 \quad (4.7.1)$$

din care rezultă  $m < 90,76$ . Lățimea benzii  $m$  trebuie să fie un număr întreg (iar uneori chiar impar), de unde rezultă că  $m$  poate fi cel mult 90.

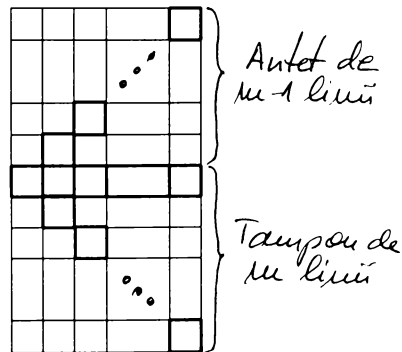


Fig. 4.7.4 Tamponul minim.



#### 4.8 Rețele de discretizare la metoda elementului finit.

În [98] s-au prezentat pe larg problemele generării rețelelor din punct de vedere a numărului elementelor, nodurilor și laturilor. În continuare se va face doar o prezentare a rezultatelor acestui studiu.

Rețelele de discretizare pot fi cu elemente triunghiulare sau patrulatere. Elemente cu un număr mai mare de laturi nu se folosesc deoarece se reduc în mod simplu, prin introducerea unui punct interior la elemente triunghiulare.

Matricea de conexiuni stochează numere de noduri, deci numere întregi, care se reprezintă pe 2 octeți. Un masiv de 64 ko poate conține până la 32767 de numere întregi, deci numărul maxim de elemente care pot fi descrise de această matrice este câtul dintre numărul 32767 și numărul de noduri ale elementului, trunchiat la întreg.

Matricea de coordonate stochează câte două coordonate pentru fiecare nod ( $x$  și  $y$  pentru probleme plane, respectiv  $r$  și  $z$  pentru probleme axial-simetrice), care se reprezintă pe câte 4 octeți. Un masiv de 64 ko poate conține până la 16383 de numere reale și deci matricea poate descrie un număr maxim de 8191 de noduri.

Elementele care sunt folosite în mod curent sunt:

- elementul triunghiular cu trei noduri,
- elementul patrulater cu patru noduri,
- elementul triunghiular cu șase noduri,
- elementul patrulater cu opt noduri.

Limitele maxime ale rețelelor generate cu stocarea datelor în masive de până la 64 ko sunt prezentate în tabelul 4.1. Semnul (\*) indică că matricea de stocaj corespunzătoare este saturată.

Tabelul 4.1

|                                     | Elemente          | Noduri | Laturi  |
|-------------------------------------|-------------------|--------|---------|
| Element triunghiular cu trei noduri | 10922 *           | 5461   | 16383 * |
| Element patrulater cu patru noduri  | 8191 *            | 8191 * | 16383 * |
| Element triunghiular cu șase noduri | 4095<br>( 5461 *) | 8191 * | 12287   |
| Element patrulater cu opt noduri    | 2730<br>( 4095 *) | 8191 * | 16383 * |

Dacă s-ar dori depășirea acestor limite, din punct de vedere al programării nu ar fi prea dificil de a dubla numărul de noduri și de laturi, dar numărul de elemente nu poate fi mărit peste cele din paranteze. Întrucât câștigul nu este de loc mare se apreciază că nu se justifică matrici mai mari, limitele rămânând cele prezentaate mai sus.

Este practic imposibilă generarea unei rețele care saturează mai multe matrici simultan, deoarece apare problema nodurilor și laturilor de pe contur. Valorile prezentate mai sus însă sunt o bună orientare în ce privește posibilitățile de generare a rețelelor.

#### 4.9 Postprocesor grafic pentru trasarea liniilor echiparametrice [99].

Rezultatul obținut prin analiza cu elemente finite a unui fenomen se prezintă sub forma unei matrici conținând valorile calculate în nodurile rețelei de discretizare. Această formă de prezentare este foarte puțin intuitivă pentru om și este necesară convertirea rezultatului într-o imagine grafică. Pentru câmpuri scalare cea mai bună metodă de prezentare este cea a liniilor echiparametrice.

Cu totul excepțional valoarea dintr-un nod corespunde cu valoarea impusă parametrului care definește o linie echiparametrică, astfel că în general aceste linii nu vor trece prin noduri, ci printre ele, fiind nevoie de un algoritm de trasare.

Un postprocesor grafic trebuie să îndeplinească următoarele cerințe:

- să poată trata orice fel de rețele, indiferent de ordinea de numerotare a nodurilor, sau de tipul elementului, problemei sau condițiilor la limită;
- să poată urmări traseul unei linii, chiar dacă ea se intersectează pe ea înseși și fără a aluneca de pe traseul unei linii pe traseul alteia având același parametru;
- să sesizeze terminarea liniei la frontiera domeniului sau la închiderea ei;
- să identifice eventuala existență a unei alte linii având același parametru și să o traseze;
- să traseze linii pentru mai multe valori impuse parametrului.

Pentru realizarea funcțiilor de mai sus se dispune de:

- matricea de conexiuni după elemente,
- matricea de coordonate ale nodurilor, pe direcțiile  $x$ , respectiv  $y$ ;
- matricea de rezultate, care conține valorile  $z$  calculate în noduri;
- lista valorilor parametrului pentru care se dorește trasarea liniilor echiparametrice.

După cum s-a arătat, o linie nu trece prin noduri, ci printre ele, intersectând laturile elementelor. Pentru a evita o intersecție multiplă a liniei cu o latură se admite că de-a lungul laturii câmpul variază monoton. Cea mai simplă variație este cea liniară, adoptată în lucrarea de față. Astfel, determinarea punctului de intersecție al liniei cu o latură se reduce la o interpolare liniară între nodurile de la capetele laturii. Din cele expuse rezultă că este nevoie de o serie de informații cu privire la laturile rețelei și, în urma analizei s-a optat pentru generarea unei „matrici de conexiune după laturi”, cu următoarea structură (v. și fig. 4.9.1).

Tabelul 4.2

| Nodul din stânga | Nodul din dreapta | Elementul din stânga | Elementul din dreapta |
|------------------|-------------------|----------------------|-----------------------|
|------------------|-------------------|----------------------|-----------------------|

Fiecare latură are două noduri la capete, respectiv este mărginită de două elemente, pe o parte și pe cealaltă. Denumirile „stânga” și „dreapta” sunt convenționale, se referă la structura matricii prezentate și nu au altă semnificație topologică. Laturile de frontieră nu au element „în dreapta”, matricea fiind completată în poziția corespunzătoare cu 0.

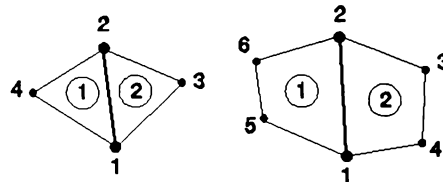


Fig. 4.9.1 Definirea unei laturi

Crearea acestei matrici se face simultan cu cea de conexiuni după elemente, de generatorul de rețea. Ea nu este necesară la rezolvarea problemei prin FEM, iar la postprocesare nu mai este necesară matricea de conexiuni după elemente, realizându-se astfel optimizarea folosirii memoriei.

Generarea matricii de laturi se face cu următorul algoritm:

1. Pentru toate elemntele rețelei;
2. Pentru toate laturile elementului;
3. - Se generează următoarea latură a elemntului;
- Se sortează nodurile de la capete în ordine crescătoare;
- Se caută latura generată în matricea de laturi.
4. Dacă latura nu este găsită:
  - Se adaugă latura în matrice, precizând nodurile din stânga/dreapta, la „elementul din stânga” de pune elementul curent, iar la „elemntul din dreapta” se pune 0;
  - Se continuă cu pasul 3.

5. Dacă latura este găsită:
- Se pune la „elementul din dreapta” numărul elementului curent;
  - Se continuă cu pasul 3.

În cursul algoritmului se ține evidența numărului de laturi generate. Dacă se generează prea multe laturi se pune un mesaj de eroare.

Trasarea unei linii se face urmărind mersul ei dintr-un element în altul pe intersecțiile cu laturile. Intersecția cu o latură este sesizată de condiția:

$$0 \leq r \leq 1, \quad \text{unde} \quad r = \frac{z - z_1}{z_2 - z_1} \quad (4.9.1)$$

unde  $z$  este valoarea dată a parametrului;  
 $z_1, z_2$  sunt valorile calculate în nodurile din stânga, respectiv dreapta.

Poziția punctului de intersecție este:

$$\begin{aligned} X &= X_1 + r(X_2 - X_1) \\ Y &= Y_1 + r(Y_2 - Y_1) \end{aligned} \quad (4.9.2)$$

O latură odată examinată este marcată, pentru a nu fi tratată din nou.

Algoritmul de urmărire al unei linii este următorul:

1. - Se caută prima latură nemarcată care îndeplinește condiția (4.9.1). Dacă nu există, algoritmul se termină.
2. - Se notează latura de start;
  - Se trece poziția punctului la mijlocul unui tabel de coordonate ale punctelor liniei;
  - Se consideră drept element curent „elementul din stânga”.
3. - Se caută punctul de ieșire al liniei din element prin căutarea elementului curent în coloanele „elementul din stânga/dreapta” care nu au fost încă marcate. Punctul este considerat găsit dacă este îndeplinită condiția (4.9.1).
4. Dacă nu a fost găsită ieșirea din element se pune un mesaj de eroare.
5. Dacă a fost găsită ieșirea din element, atunci:
  - Se trece punctul găsit în următoarea poziție în tabelul punctelor liniei;
  - Se marchează latura respectivă.

6. Dacă „elementul din dreapta” nu este 0, se verifică închiderea liniei prin întoarcerea la latura de start.
7. Dacă linia se închide, se trece la pasul 12.
8. Dacă linia nu se închide, se trece la elemntul următor prin:
  - Se consideră drept element curent elemntul din cealaltă coloană unde s-a oprit căutarea;
  - Se trece la pasul 3.
9. Dacă „elementul din dreapta” este 0, se consideră că linia a atins o frontieră și atunci:
10. Dacă este prima atingere a frontierei, înseamnă că trebuie parcursă și cealaltă ramură a liniei și atunci:
  - Se consideră drept element curent elementul de pe coloana „elementul din dreapta” al laturii de start;
  - Se revine la mijlocul tabelului de puncte ale liniei;
  - Se inversează direcția de scriere în tabelul de puncte ale liniei;
  - Se trece la pasul 3.
11. Dacă este următoarea atingere a frontierei se consideră că s-a terminat trasarea liniei, se trece la pasul 12.
12. - Se scrie într-un fișier destinat unui program de grafică (de exemplu AutoCAD [100, 101]) tabelul pozițiilor punctelor liniei;
  - Se continuă cu pasul 1 pentru a căuta și alte linii care au același parametru.

Pentru trasarea liniilor pentru alte valori ale parametrului algoritmul se reia de la început.

Performanțele algoritmului sunt următoarele:

- numărul maxim de laturi ale rețelei este de 16383;
- numărul maxim de noduri ale rețelei este de 16383;
- numărul maxim de puncte al unei linii deschise este de 8191;
- numărul maxim de puncte al unei linii închise este de 4095.

## 5. MODELĂRI NUMERICE ALE FENOMENELOR DIN FOCARE.

### 5.1 Determinarea constantelor cinetice ale cărbunilor.

Pe baza teoriei prezentate în cap. 2.4.1 s-a conceput un program scris în limbajul BASIC, care inițial a fost scris pentru calculatoarele din familia SPECTRUM [102]. Listingul acestui program a fost prezentat în [103]. Ulterior s-a scris o variantă și pentru calculatoarele IBM-PC, folosind dialectul GW-BASIC [104]. Listingul acestui program este prezentat în continuare.

```

10 ' Program pentru determinarea constantelor cinetice
11 ' la arderea nestationara a volatilelor.

19 ' Datele initiale
20 Ko = 670 ' Factorul preexponential
30 E = 57700 ' Energia de activare
40 R = 8.3143 ' Constanta universala a gazelor
50 m = 9.67 ' Viteza de incalzire
60 Vo = 190 ' Masa initiala a volatilelor
70 n = 20 ' Numarul punctelor masurate

80 ' Valorile masurate:
90 DATA .026,510, .051,529, .051,549, .079,568, .103,587
91 DATA .128,607, .205,626, .385,646, .526,665, .769,684
92 DATA 1.026,704, .789,723, .641,742, .769,762, .658,781
93 DATA .769,800, .769,820, .769,839, .769,859, .526,878
!
100 ' Initializari
110 L = log(Ko*Vo/m): F = 0: G = 0: dFE = 0: dFK = 0: dGK = 0
120 dyKK = -1/Ko^2

130 ' Calcul derivate y
140 RESTORE: FOR i = 1 TO n
150 GOSUB 1000: H = 1/E - A
160 dyE = -C*H + A: dyK = (1+C)/Ko
170 dyEE = C*(H^2+1/E^2): dyEK = -C*H/Ko

200 ' Calcul derivate z
210 dzE = z*dyE: dzK = z*dyK
220 dzEE = dzE*dyE + z*dyEE
230 dzEK = dzK*dyE + z*dyEK
240 dzKK = dzK*dyK + z*dyKK

300 ' Calcul derivate si functii pentru sistemul Newton
310 dFE = dFE + D*dzEE + dzE*dzE
320 dFK = dFK + D*dzEK + dzE*dzK
330 dGK = dGK + D*dzKK + dzK*dzK
340 F = F + D*dzE: G = G + D*dzK
350 NEXT i: dGE = dFK

```

```

400 '   Calcul solutie
410 J = dGK*dFE - dFK*dGE
420 dE = (G*dFK - F*dGK)/J: dK = (F*dGE - G*dFE)/J
430 E = E + dE: Ko = Ko + dK

500 '   Afisare rezultat
510 PRINT "E =";E,"Ko =";Ko
520 INPUT "Comparare (d/n)";a$: IF a$ <> "d" GOTO 560
530 CLS: PRINT " T","z dat","z calculat","eroarea %": PRINT
540 RESTORE: L = log(Ko*Vo/m): FOR i = 1 TO n
550   GOSUB 1000: PRINT T, zs, z, INT(100*d/zs): NEXT i
560 INPUT "Inca o data (d/n)";a$: IF a$ <> "n" GOTO 100
570 SYSTEM

1000 READ zs, T: A = -1/(R*T): B = E*A: C = (Ko*T*exp(B))/(m*B)
1010 y = L+B+C: z = exp(y): d = z - zs: RETURN

```

Deși relațiile prezentate în cap. 2.4.1 se pretează cu ușurință la a scrie un program de calculator, apar numeroase dificultăți numerice. Funcțiile  $F$  și  $G$  din sistemul Newton au numeroase discontinuități și aproape pe întregul domeniu de definiție formă de șa. Stabilitatea calculului este redusă. Cele mai bune rezultate s-au obținut folosind metoda subrelaxării și urmărind iterațiile efectuate de calculator, respectiv oprind calculul imediat ce procesul devine evident divergent și repornindu-l cu o altă aproximație inițială.

În listingul precedent s-au folosit ca date de intrare valorile determinate conform [66, 67]. Determinările s-au făcut pentru o huiță spălată de Lupeni, având caracteristicile:

Tabelul 5.1.1

| T [K] | z dat | z calculat |
|-------|-------|------------|
| 510   | 0,026 | 0,016      |
| 529   | 0,051 | 0,026      |
| 549   | 0,051 | 0,042      |
| 568   | 0,079 | 0,064      |
| 587   | 0,103 | 0,094      |
| 607   | 0,128 | 0,136      |
| 626   | 0,205 | 0,189      |
| 646   | 0,385 | 0,258      |
| 665   | 0,526 | 0,338      |
| 684   | 0,769 | 0,428      |
| 704   | 1,026 | 0,530      |
| 723   | 0,789 | 0,625      |
| 742   | 0,641 | 0,707      |
| 762   | 0,769 | 0,767      |
| 781   | 0,658 | 0,784      |
| 800   | 0,769 | 0,756      |
| 820   | 0,769 | 0,676      |
| 839   | 0,769 | 0,561      |
| 859   | 0,769 | 0,419      |
| 878   | 0,526 | 0,286      |

- Conținut de umiditate al probei pentru analiză: 1,0 %,
- Conținut de volatile al probei pentru analiză: 22,3 %,
- Conținut de cenușă al probei pentru analiză: 17,0 %.

Derivatograma prelucrată este prezentată în fig. 5.1.1, iar în tab. 5.1.1 se arată un exemplu de comparare la rulare. Din derivatogramă rezultă:

- Temperatura de la sfârșitul uscării: 110 °C,
- Temperatura de la sfârșitul intervalului de degajare a volatilelor: 560 °C.

Valorile introduse în program au fost extrase de pe curba TG a derivatogramei. Modelul se stabilizează pentru valori apropiate de cele din intrare, și anume:

$$\begin{aligned}
 K_o &= 671,85 \text{ s}^{-1}, \\
 E &= 57747 \text{ J/kmol}.
 \end{aligned}$$

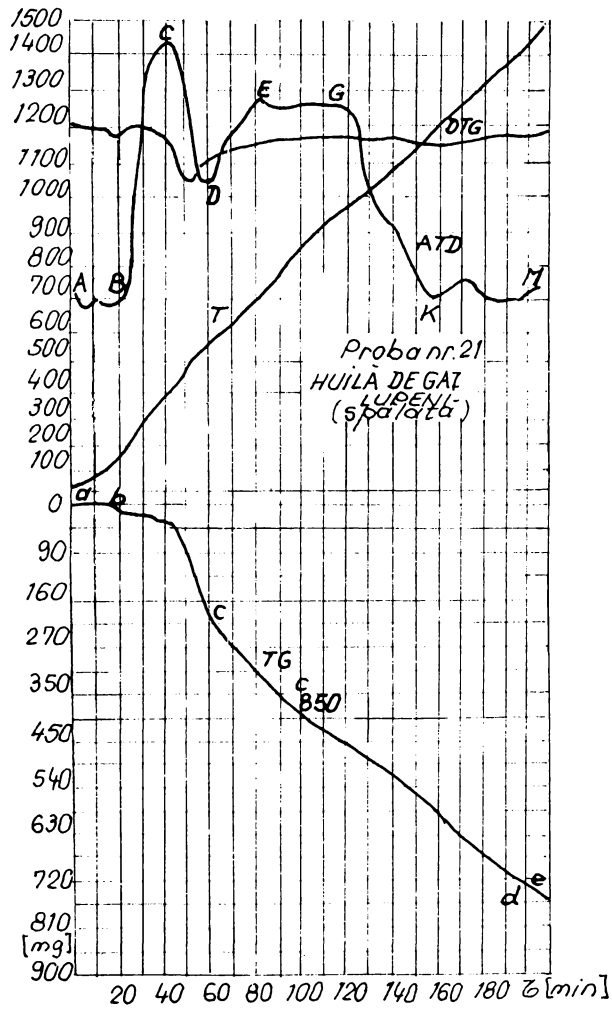


Fig. 5.1.1 Derivatogramă pentru huiă spălată de Lupeni.



## 5.2 Modelări cu diferențe finite.

În cadrul [105] s-a adaptat programul folosit în [19] la arderea prafului de cărbune, în scopul modelării unui antefocar ciclon cu evacuarea zgurii în stare lichidă și funcționând cu huilă spălată de Lupeni. Programul are la bază formalizarea „psi-omega” pentru focare axial-simetrice, formalizare expusă în detaliu în [18, 20]. Programul folosește pentru procesele de ardere modelul „amestec = ars”, care este adecvat pentru arderea gazelor și, într-o oarecare măsură pentru arderea volatilelor. Pentru modelarea radiației programul folosește un model cu două fluxuri, adecvat pentru spații axial-simetrice.

Programul este scris în FORTRAN IV și a fost adaptat pentru calculatorul FELIX C-256, rezolvându-se problema segmentării [85, 106, 107, 108, 109, 110]. În prezent programul are patru segmente:

- 1) un segment rădăcină, foarte scurt,
- 2) un segment care conține toate blocurile COMMON,
- 3) un segment de intrare/ieșire,
- 4) segmentul de calcul propriu-zis.

În structura de reacoperire se suprapun segmentele 3 și 4. Segmentarea este strict necesară, dar nu și reacoperirea. În varianta cu reacoperire memoria ocupată este de 68 de pagini ( 136 ko). Timpul de rulare pe FELIX C-256 este destul de lung, fiind necesar cca. un minut/iterație. Întrucât după primele iterații valorile calculate nu se mai modifică semnificativ, numărul iterațiilor a fost limitat la 10. Deși criteriile de convergență nu sunt atinse (dar din teste a rezultat că ele nu sunt atinse nici după 100 de iterații) din examinarea listingului se vede că de fapt valorile sunt stabilizate.

Diferențele la datele de intrare față de programul original au cuprins:

- rețeaua de discretizare,
- coeficienții stoichiometrici ai produselor intrate și ieșire din reacția de ardere,
- compoziția, temperatura și gradul de turbionare al curenților primar și secundar,
- puterea calorică și constantele cinetice ale arderii combustibilului.

Focarul modelat are un diametru de 510 mm. Rețeaua de discretizare are în direcție radială 10 linii, mai dese în dreptul limitelor sau a punctelor de discontinuitate ( 0300 - 320, limita de contact dintre jeturile de aer primar și secundar). Jetul primar, introdus central este considerat neturbionat, iar jetul secundar, considerat de la  $\varnothing$  300 până la  $\varnothing$  510 este considerat turbionat, cu o viteză de rotație ce corespunde unei viteze tangențiale de insuflare de cca. 120 m/s, adică de 550 rad/s.

Rezultatele obținute sunt prezentate în fig. 5.2.1 - 5.2.3.

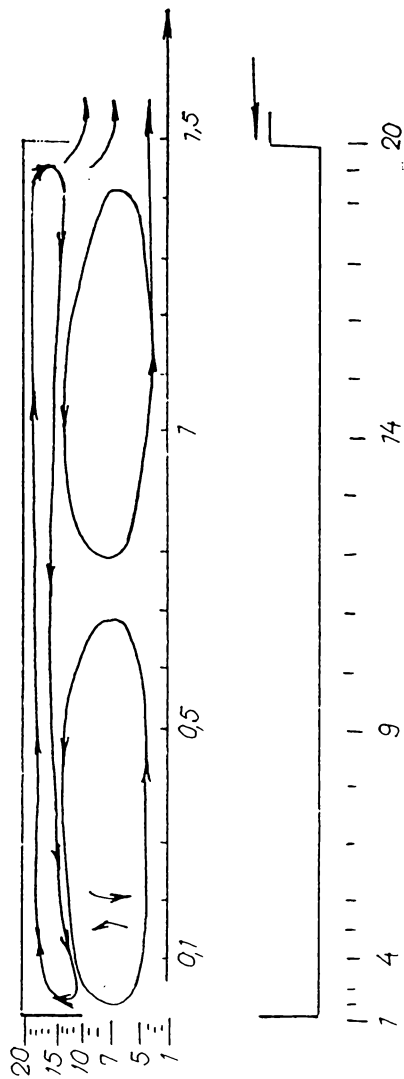


Fig. 5.2.1 Spectrul de linii de curgere.

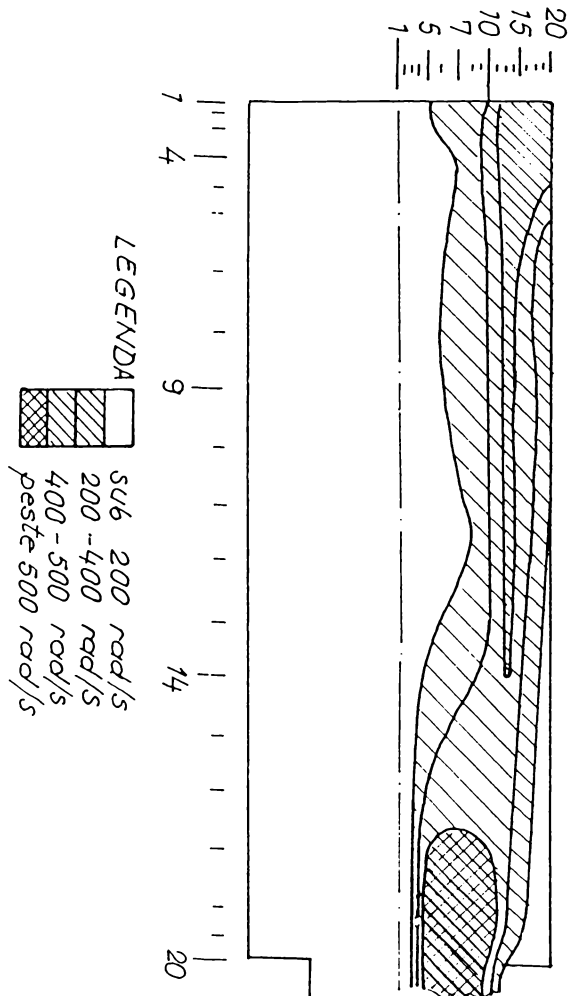


Fig. 5.2.2 Viteza de rotație.

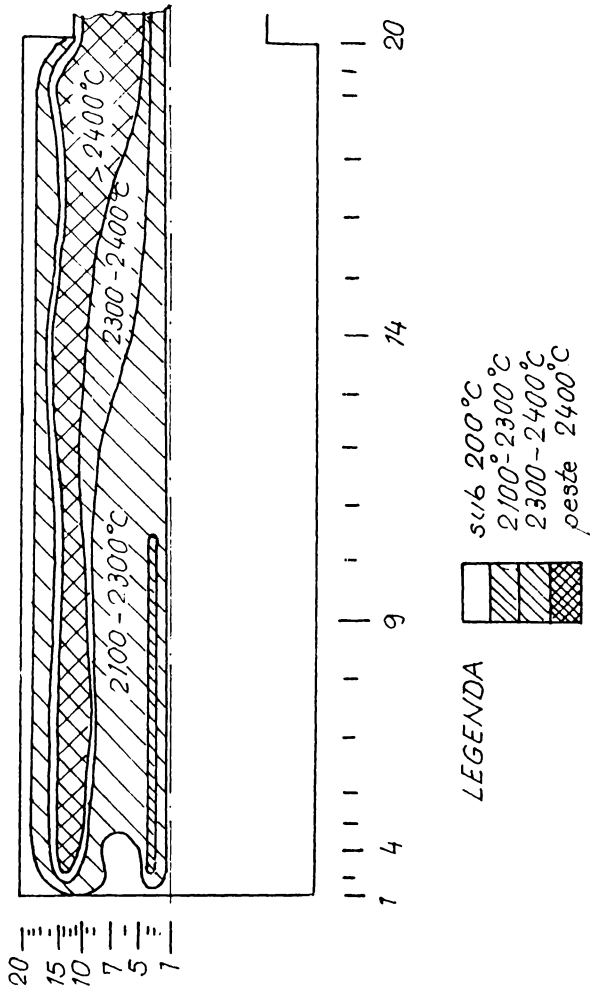


Fig. 5.2.3 Câmpul de temperaturi.

Fig. 5.2.1 prezintă liniile de curgere deduse din câmpurile de viteze, fig. 5.2.2 prezintă vitezele de rotație obținute, iar fig. 5.2.3 prezintă câmpul de temperatură.

Din figuri se observă ca peste mișcarea generală de rotație se suprapun trei recirculații în direcție axială. Aerul injectat tangențial împreună cu combustibilul este antrenat într-o mișcare axială până la capătul focarului, menținându-se la o temperatură relativ scăzută. Apoi el este antrenat într-o recirculație la nivelul unui cilindru de  $\varnothing 350 + 400$  mm, unde intră în contact cu mediul fierbinte din focar, combustibilul se aprinde și arde producând în această zonă cea mai înaltă temperatură înregistrată (peste  $2000$  °C). Mediul fierbinte, având temperatura de  $1900$  °C este și el antrenat în două recirculații, fiecare aproximativ pe jumătate din lungimea focarului, lucru confirmat și de câmpul de temperaturi. La distanță de  $0,15 - 0,20$  m de la intrarea în zona cilindrică are loc o intensă turbionare.

Din fig. 5.2.2 se vede că mișcarea de rotație inițiată de introducerea tangențială a aerului se amortizează destul de repede, viteza tangențială scăzând în unele zone sub  $30$  % din cea inițială. Această mișcare se accelerează din nou spre ieșirea din focar, lucru care se explică prin conservarea momentului cinetic la variația secțiunii de curgere.

Câmpul de temperaturi din fig. 5.2.3 indică o flacără care umple practic tot focarul, anvelopa ei având un diametru de cca.  $400$  mm. Cu toate acestea, temperatura în apropierea pereților este relativ scăzută, faptul datorându-se centrifugării aerului secundar, mult mai rece și mai greu decât mediul fierbinte. Acest aspect duce la mărirea vâscozității zgurii, ceea ce favorizează infundarea ciclonului.

--- \* ---

Calculatorul FELIX C-256 nu a fost adecvat pentru modelarea acestor câmpuri datorită capacității sale relativ mici. [22] prezintă calcule comparative pentru un focar axial-simetric (deci model în plan) discretizat cu grile cu  $4000$ ,  $15000$ ,  $30000$  și  $130000$  de celule. Dacă rezultatele obținute pentru grilele având  $15000 - 130000$  de celule nu diferă între ele prea mult, rezultatele obținute pentru grila de  $4000$  de celule se abat cu cca.  $15$  % de celelalte. Concluzia este că la modelarea câmpurilor sunt necesare rețele relativ dese, deci problemele devin mari din punct de vedere al programării.

### 5.3 Modele cu elemente finite.

Datorită răspândirii metodei FEM la modelarea câmpurilor s-a căutat aplicarea acesteia la modelarea focarelor. S-a optat pentru modele bidimensionale, care acoperă domeniul focarelor axial-simetrice.

#### 5.3.1 Modelarea curgerii în focare axial-simetrice.

Prima etapă în modelarea curgerii în focare ciclon a fost modelarea unei curgeri potențiale fără recirculație, etapă care a făcut obiectul fazei pe 1991 a unui contract cu MIS [111]. În această etapă s-a folosit rețeaua de discretizare prezentată în fig. 5.3.1. S-au trasat mai multe variante de linii de curent pentru diverse distribuții ale aerului primar și secundar, cuprinse între 0 și 100%. Aerul primar s-a introdus axial în centrul focarului ciclon, iar cel secundar s-a introdus la periferia focarului ciclon, axial sau radial. Din variantele examinate, în prezenta lucrare sunt prezentate cele mai semnificative trei și anume:

- în fig. 5.3.1 este prezentată o curgere potențială, având admisia aerului 100% centrală. Această variantă, care nu face diferență între aerul primar și cel secundar, deși nu corespunde perfect din punctul de vedere al tehnicii arderii este semnificativă ca element de referință în comparația cu celelalte tipuri de curgeri studiate.

- în fig. 5.3.2 este prezentată o curgere potențială, având admisia aerului 20% centrală și 80% periferică, atât aerul primar, cât și cel secundar fiind introduse axial. Această variantă este mai apropiată de tehnica arderii în focare ciclon și este necesară ca element de comparație, întrucât introducerea exclusiv axială a fluidului face ca poziționarea inițială a termenilor liberi din sistemul generat de MEF să fie zero.

- în fig. 5.3.3 este prezentată o curgere potențială, având admisia aerului 20% centrală și 80% periferică, aerul primar fiind introdus axial, iar cel secundar radial. Această variantă este cea mai apropiată curgere potențială fără recirculație de tehnica arderii în focare ciclon. Varianta introduce unele complicații la poziționarea inițială a termenilor liberi din sistemul generat de MEF, care sunt diferiți de zero (apar condiții pe contur de tip Neumann, ce-i drept, foarte simple).

Figurile prezentate mai sus au fost trasate manual, lucru permis de rețeaua de discretizare foarte simplă folosită.

Următorul pas a fost generarea unor rețele mai complicate, prezentate în fig. 5.3.4 - 5.3.6 pentru care a apărut necesitatea postprocesorului grafic. În fig. 5.3.7 [112] este prezentat un spectru de linii de curent și de potențial al vitezei pentru o curgere potențială fără recirculație, cu introducerea aerului 100% central. Rețeaua folosită a fost una ca cea din fig. 5.3.4, dar mai

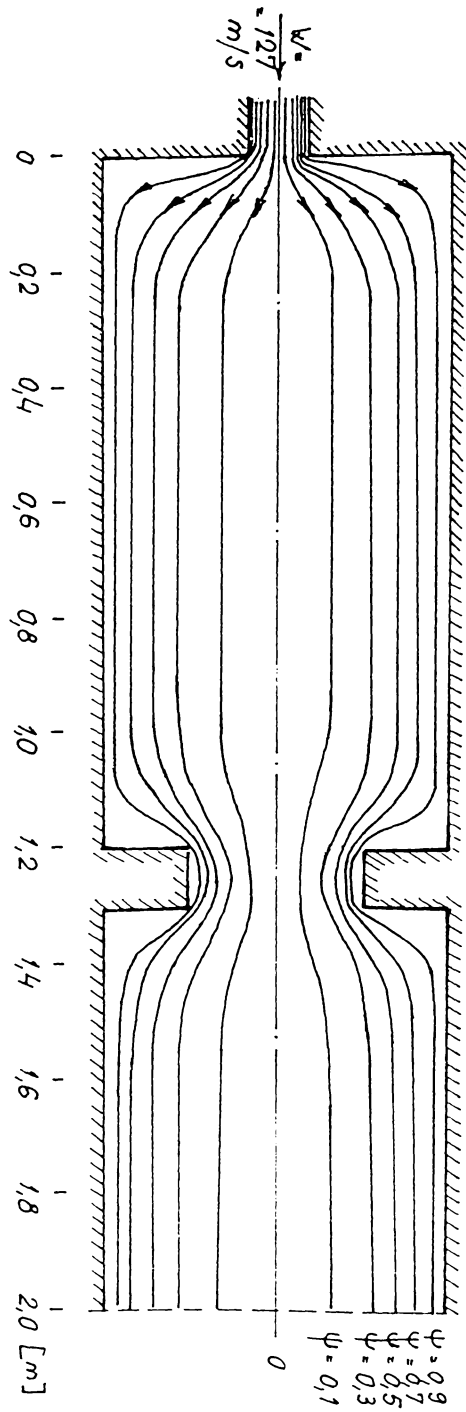


Fig. 5.3.1 Liniiile de curent pentru admisiune 100 % centrală.

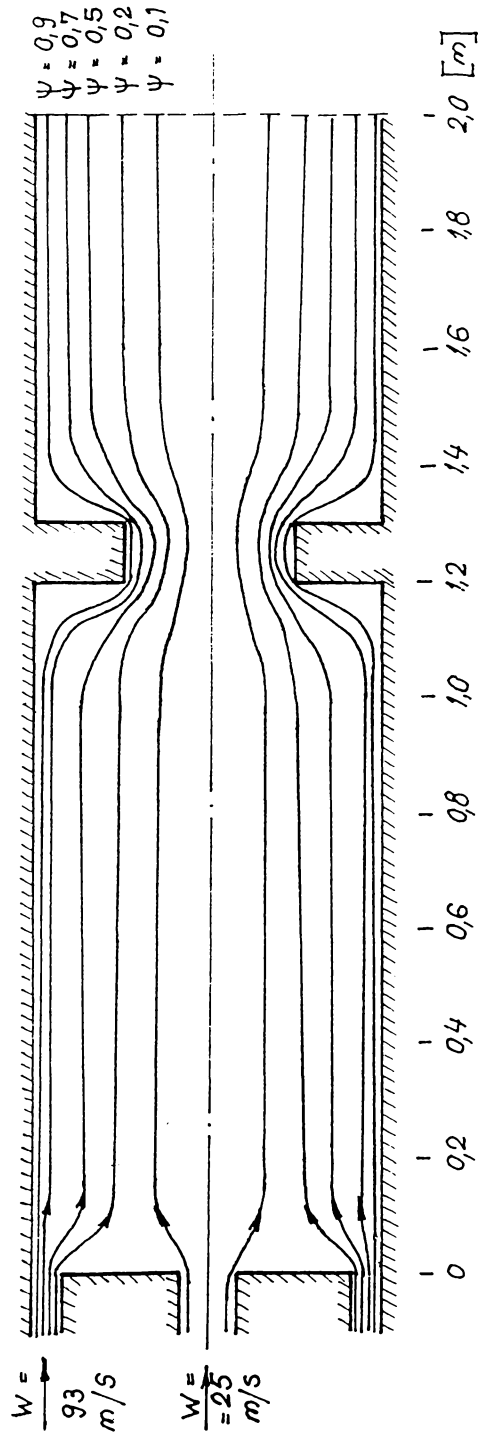


Fig. 5.3.2 Liniiile de curent pentru admisiune 20 % centrală și 80 % axială.



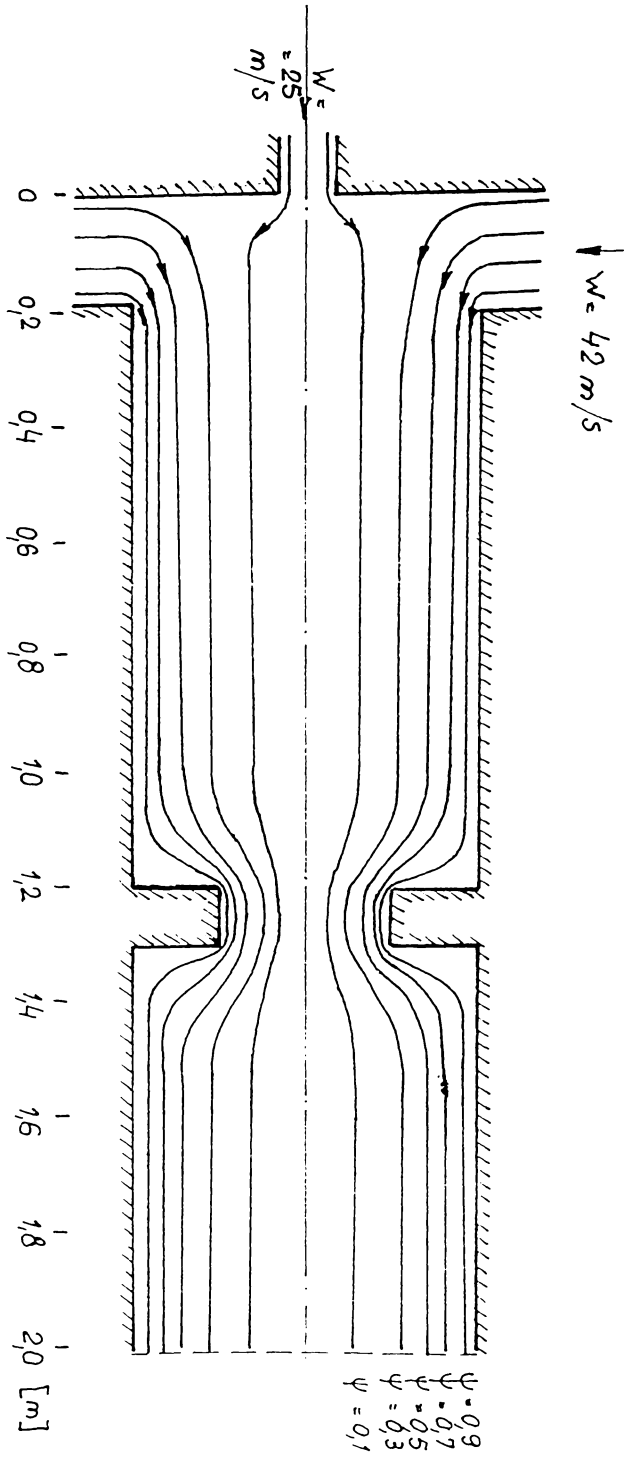


Fig. 5.3.3 Liniile de curent pentru admisiune 20 % centrala și 80 % radiala.

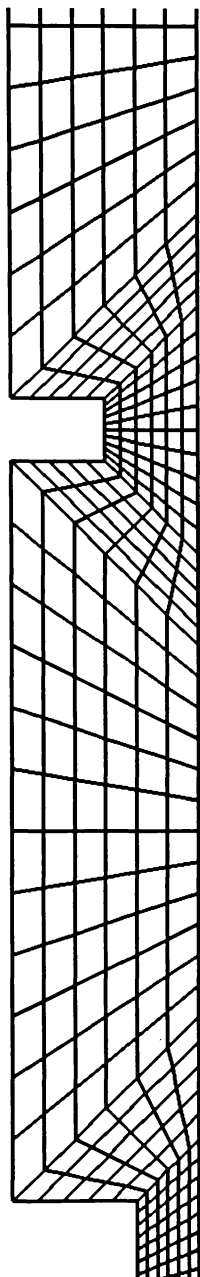


Fig. 5.3.4 Rețea cu bandă constantă.

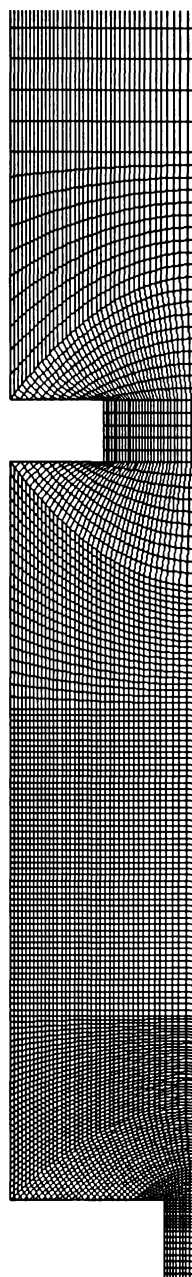
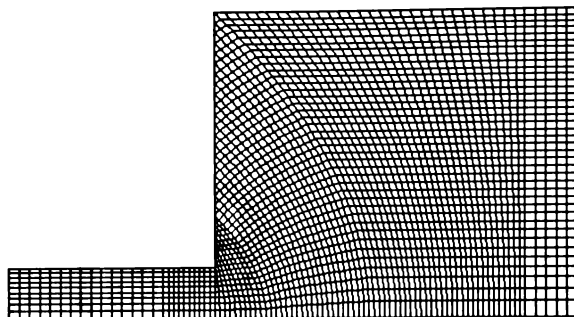
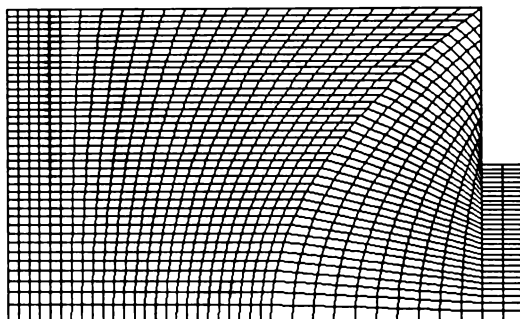


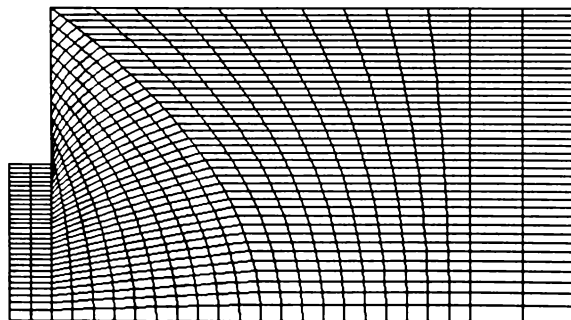
Fig. 5.3.5 Rețea cu bandă variabilă.



Detaliu rețea cu bandă variabilă în zona de intrare.



Detaliu rețea cu bandă variabilă în zona centrală.



Detaliu rețea cu bandă variabilă în zona de ieșire.

Fig. 5.3.6 Detalii de rețea.

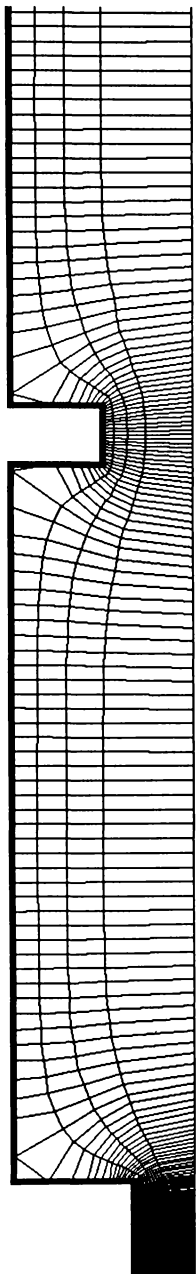


Fig. 5.3.7 Spectru de linii de curent și potențial a vitezei.

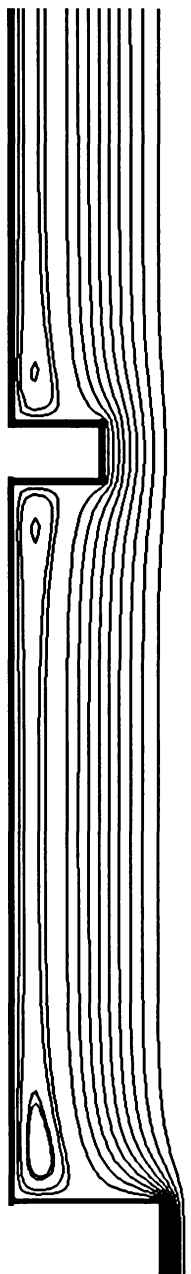


Fig. 5.3.8 Curgere în focar cu recirculație.

deasă, deoarece s-a dovedit că o rețea rară, ca cea din fig. 5.3.4 conduce la rezultate cu abateri mari de la realitate. Postprocesorul folosit pentru trasarea liniilor de curent și a liniilor de potențial al vitezei a fost unul din primele generații și funcționa numai pentru acest tip de rețea și această problemă.

În continuare s-a mers pe linia perfecționării rețelei și a obținerii unui model de curgere cu recirculație. Rețeaua prezentată în fig. 5.3.5 - 5.3.6 are cca. 6000 de noduri. În fig. 5.3.8 [113] este prezentat un spectru de linii de curent pentru o curgere potențială cu recirculație. Rețeaua folosită a fost cea din fig. 5.3.5 - 5.3.6, iar postprocesarea grafică a rezultatului s-a făcut cu algoritmul prezentat la cap. 4.9.

### 5.3.2 Modelarea câmpurilor de temperatură în focare axial-simetrice.

Următoarea etapă în modelarea focarelor ciclon a fost modelarea unui câmp de temperatură, etapă care a făcut obiectul fazelor pe 1992 și 1993 a unui contract cu MIS [111, 114]. După cum s-a arătat la cap. 3.2, câmpurile de temperatură care se pot modela cu operatori Laplace sunt cele de conducție. Programele executate de autor până în momentul de față permit numai introducerea condițiilor la limită de tip Dirichlet, adică valori cunoscute ale temperaturii în anumite noduri ale rețelei, de obicei pe contur. Pentru a le putea aplica s-a considerat în centrul focarului un nucleu de flacără având temperatura teoretică de ardere, iar temperatura pereților a fost considerată cea de topire a zgurii. Cunoscând și temperatura gazelor la ieșirea din focar este cunoscut întreg conturul, care poate fi verificat și printr-o ecuație de bilanț, în sarcina MEF a rămas doar stabilirea câmpului interior de temperaturi, scopul de fapt urmărit.

În această etapă s-a folosit rețeaua de discretizare prezentată în fig. 5.3.5 - 5.3.6. S-au trasat două variante de linii izoterme, pentru două debite diferite de aer introdus în focar. În fig. 5.3.9 și 5.3.10 sunt prezentate câmpurile de temperatură obținute [115].

Programele elaborate de autor până în acest moment nu dispun de tratarea termenilor sursă din funcționala căldurii, astfel că nu acoperă domeniul flăcării. Se dispune însă de o aplicație shareware (liberă la utilizare), ELCUT, care poate modela câmpuri termice plane și axial simetrice și dispune de tratarea termenilor sursă. Limitările acestei aplicații sunt următoarele:

- Poate trata rețelele cu maximum 500 de noduri, pentru mai multe (până la 100.000) fiind necesară o altă versiune și o completare hard;

- Condițiile pe contur se introduc prin noțiunea de „latură etichetată”, ceea ce implică o variație a condiției cel mult liniară de-a lungul laturii. Eventualele probleme se rezolvă măbind numărul de laturi de contur, dar în limita rețelei de 500 de noduri.

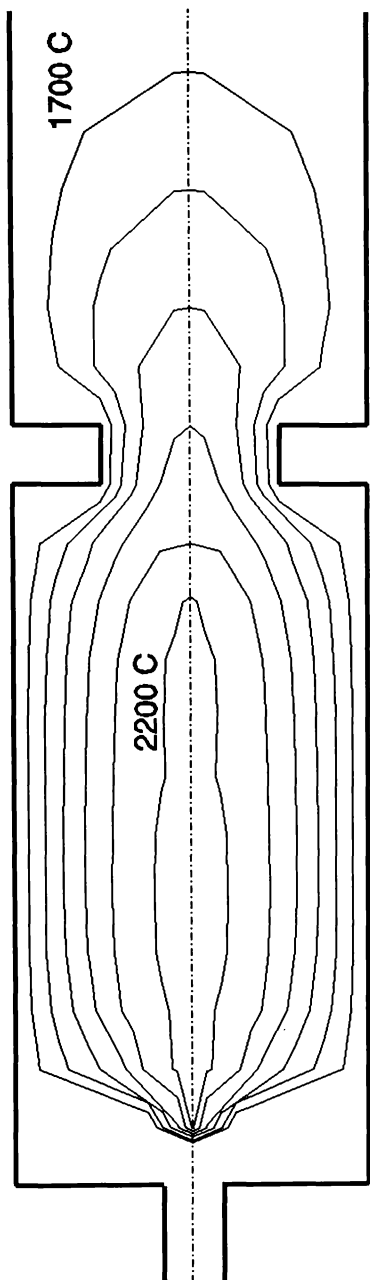


Fig. 5.3.9 Câmp de temperatură, debit de aer și combustibil mare.

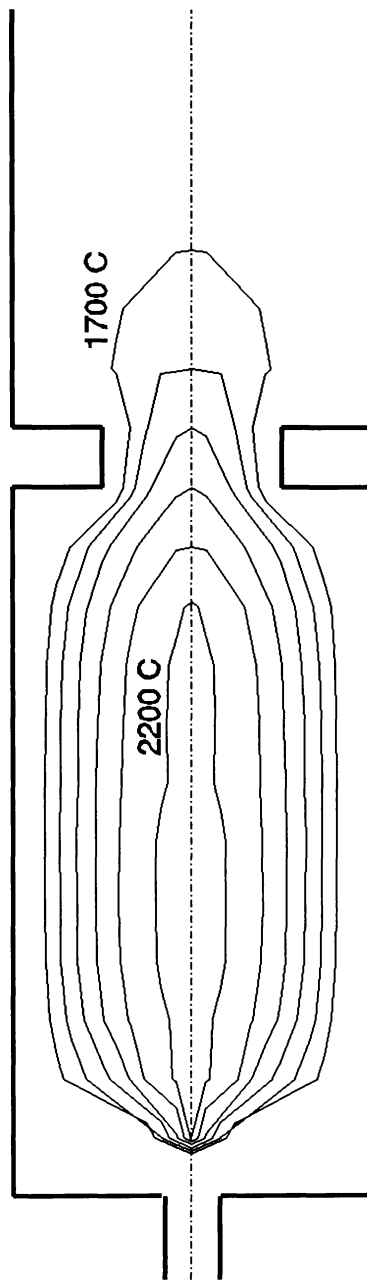


Fig. 5.3.10 Câmp de temperatură, debit de aer și combustibil mic.

- Proprietățile fizice ale mediului și termenii sursă se introduc prin noțiunea de „bloc etichetat”, valoarea introdusă fiind comună tuturor punctelor blocului. Eventualele probleme se rezolvă măbind numărul de blocuri, dar în limita rețelei de 500 de noduri.

Pentru a încerca totuși o modelare s-a procedat în modul următor:

- S-a admis o geometrie foarte simplă a arzătorului (fără a putea spera la o îmbunătățire ulterioară);

- S-a împărțit întregul domeniu în numai trei blocuri:

- blocul arderii materiilor volatile, în care sursa termică este dată de căldura degajată prin arderea volatilelor, considerată uniform distribuită în spațiu și nedepinzând de timp sau temperatură,

- blocul arderii reziduului carbonos, în care sursa termică este dată de căldura degajată prin arderea reziduului carbonos, considerată uniform distribuită în spațiu și nedepinzând de timp sau temperatură,

- blocul gazelor de ardere, fără surse de căldură.

- S-au folosit pentru contur datele cunoscute din etapa precedentă.

În fig. 5.3.11 sunt prezentate domeniile considerate, iar în fig. 5.3.12 este prezentată rețeaua generată. Se observă limitarea drastică a numărului de elemente în zona de ieșire a focarului pentru a se putea încadra în limita celor 500 de noduri.

În fig. 5.3.13 este prezentat câmpul de temperaturi generat.

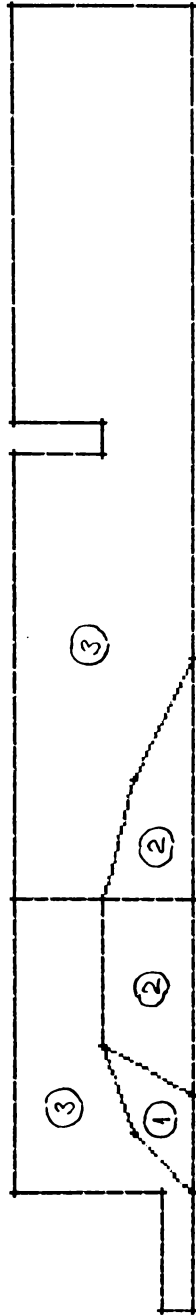


Fig. 5.3.11 Domeniile considerate: 1. volatile, 2. carbon, 3. gaz.

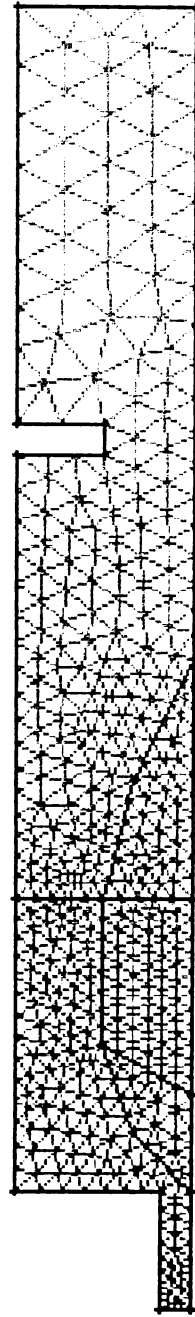


Fig. 5.3.12 Rețeaua de discretizare generată.



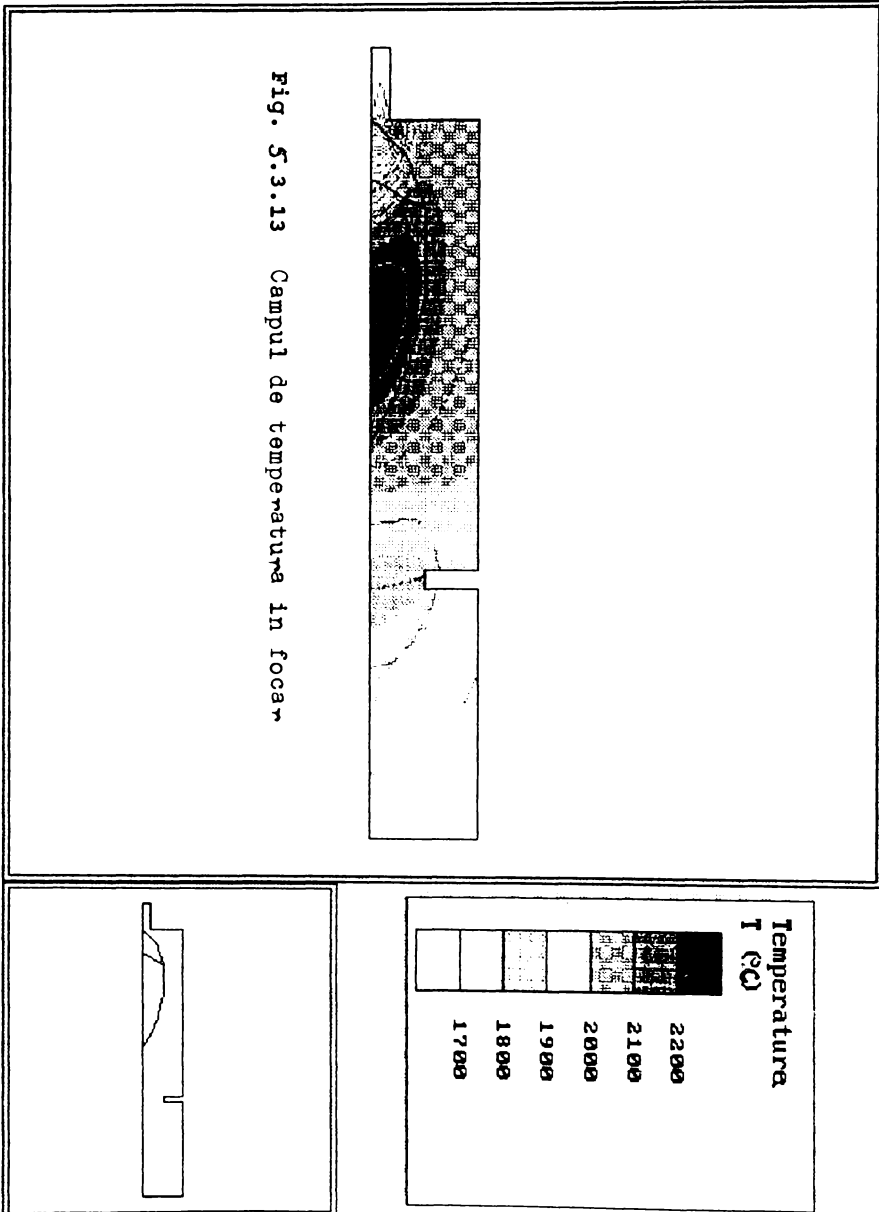


Fig. 5.3.13 Campul de temperatura în focar

#### 5.4 Programul FEUER

La Institutul de Termotehnică și Tehnica Arderii a Universității Tehnice din Braunschweig [TUB] a fost dezvoltat un program de tehnica arderii exploatat pe calculatoare IBM 3090 și rețele de stații SUN [68, 116, 117, 118, 119]. Actualmente acest program a fost implementat la Universitatea „Politehnica” din Timișoara pe calculatoare IBM-PC AT/286-486.

##### 5.4.1 Implementarea programului FEUER 1.1 pe calculatoare compatibile IBM-PC.

Programele sursă provenite de la TUB sunt în limbaj FORTRAN și conțin o parte din instrucțiuni sub formă de comentarii, cele pentru SUN fiind marcate cu CS, iar cele pentru IBM 3090 cu CI. Pentru IBM-PC s-a folosit compilatorul FORTRAN FL, varianta 5.1, însă varianta 5.0 este și ea suficientă. Compilatorul folosit este foarte performant și a permis o structurare aprofundată a textelor sursă, acestea fiind încadrate în structuri DO - ENDDO și IF - THEN - ELSE, ceea ce a permis înțelegerea funcționării sale.

##### Prezentarea situației inițiale.

Programul este format din două părți separate: o primă parte, cunoscută sub numele de GEOM servește la crearea, pe baza datelor inițiale despre geometria domeniului modelat a unor fișiere de date necesare părții a doua, programul FEUER propriu-zis.

La o primă încercare de compilare și asamblare a programelor s-au constatat următoarele:

- codul programului GEOM este de lungime acceptabilă.
- programul GEOM conține în blocuri COMMON mai multe declarații de matrici extrem de mari ( 6 x 316 x 316 elemente ), fiecare de cca. 2,4 Mo, mult peste capacitatea calculatorului IBM-PC;

- codul programului FEUER este de peste 700 Ko, mai mare decât memoria operativă a calculatorului IBM-PC;

- programul FEUER conține, pentru un exemplu de modelare a unui domeniu de 6 x 16 x 14 celule [117, 118], în blocuri COMMON declarații de matrici de cca. 780 Ko, de asemenea mai mult decât memoria operativă a calculatorului IBM-PC;

- din codul sursă lipsesc o serie de module și anume: RZERR, RZFLU, D02NBF, D02NSF D02NVF, X04AAF, X04ABF, D02NYF, D02NZF, D02NBY, D02NBZ, D02BAF.

Efectiv, situația inițială a programului FEUER a fost următoarea:

|                              |         |
|------------------------------|---------|
| Lungime CODE                 | 646336  |
| Lungime FAR_DATA             | 13037   |
| Lungime COMMON               | 780632  |
| Lungime DATA                 | 23872   |
| Lungime MSG, BSS, STACK etc. | 36264   |
| TOTAL                        | 1494501 |

### Tratarea problemelor ridicate de implementare

S-a pornit de la obiectivul că pentru programul FEUER din cei cca. 600 Ko de memorie operativă disponibilă să se aloce cca. jumătate pentru codul program și jumătate pentru blocuri COMMON. Aceasta a condus imediat la constatarea că se va putea modela un domeniu de cca. 600 de celule, considerat acceptabil.

Prin restructurarea textelor sursă (încadrarea în structuri DO - ENDDO și IF - THEN - ELSE) s-a făcut o oarecare primă reducere a lungimii codului generat, prin eliminarea tabelor de etichete.

Pentru fiecare program s-au examinat atât logica părții de program, cât și dimensiunile blocurilor COMMON, intervenindu-se în fiecare cu scopul reducerii dimensiunii totale a programului executabil.

#### La programul GEOM:

a. Pe partea de program, fișierul sursă inițial GEOM are lungimea de cca. 200 Ko, mult prea mare pentru compilatorul FL, astfel că a fost necesară divizarea sa în fișiere mici, fiecare conținând câte o subrutină și generând câte un modul obiect (OBJECT MODULE).

S-a constatat că modulul FEING [116], referitor la grila fină (FEINES GITTER) nu este necesar, grila fină nemaifiind implementată la varianta actuala de FEUER [117]. Astfel, dimensiunea codului program este de cca. 230 Ko și nu ridică probleme deosebite.

Modulul FEING generează un cod obiect (OBJECT CODE) mai mare decât 64 Ko, ceea ce compilatorul FL nu acceptă. Pentru a rezolva această problemă modulul a fost divizat în 7 părți, partea FEING de bază și 6 subrutine corspunzătoare celor 6 tipuri de pereți tratați. Astfel, programul GEOM poate fi compilat și asamblat și împreună cu FEING, dar, cum s-a spus, acest lucru nu este necesar.

Cu ocazia actualizării dimensiunilor matricilor s-a făcut și o revedere a programelor sursă, s-au unificat dimensiunile în toate modulele prin declarații de parametri și s-au structurat modulele.

b. Pe partea de blocuri COMMON, reducerea dimensiunilor matricilor la cele ale unui domeniu care să poată fi tratat de FEUER a condus la blocuri COMMON de lungime totală de cca. 190 Ko.

Ca urmare programul executabil GEOM are o lungime de cca. 420 Ko, putând fi executat pe orice calculator IBM-PC, în orice condiții.

#### La programul FEUER:

a. Pe partea de program, s-au efectuat următoarele:

a1. Fișierele conținând mai multe subrutine și care generează un cod obiect (OBJECT CODE) peste 64 Ko au fost divizate în fișiere

mai mici. Nici o subrutină separată nu a generat un cod obiect mai lung decât 64 Ko, deci nu a fost cazul divizării subrutinelor.

**a2.** Tratarea modulelor lipsă:

- s-a constatat că rutinele RZERR și RZFLU tratează erori pe IBM 3090 și nu sunt necesare pe IBM-PC.

- restul modulelor lipsă se referă la modelele NOx Fenimore și Vonderbank-Pohl. În lipsa lor s-a renunțat la aceste modele, menținându-se modelul De Soete.

**a3.** S-a segmentat programul după următoarele principii:

- modulele apelate foarte des sau de rutine plasate în segmente diferite au fost plasate în segmentul rădăcină (ROOT SEGMENT);

- modulele folosite o singură dată, atât la start, cât și la încheierea execuției au fost plasate într-un segment separat, considerat de inițializare;

- modulele folosite în ciclul iterativ au fost grupate, în funcție de logica de apel. Intre ele, în segmente de lungime pe cât posibil egale, segmente apelate pe cât posibil o singură dată în cursul unei iterații, pentru a minimiza timpul de încărcare a segmentelor.

Pentru segmentarea programului a fost necesară creerea a câte unei biblioteci de module obiect pentru fiecare segment.

Structura grupării fișierelor în biblioteci, respectiv în segmente este următoarea:

```

main
RAD
  tdma
  nsums
  upstream
  randkoef

i
INIT      IMPULS      STRAHL      BILANZ      NOXS02
filename  waleif         strabgam    abbquell    so2frei
write     maisub         tdmast      abbrand     so2func
init      hilfsrou      absorb      ausum       so2rueck
in        randim         energie     enbilanz    so2trans
out       impulsx       fluesse     ausso2      so2out
noxin     impulsy       gasrho      nox_ncnf    nox_ncnf
so2in     impulsz       mischgrd    noxhcncr   noxhcncr
geometri  simple          print       noxsubso    noxsubso
eindues   pyrolyse       pyrolyse   pyrolyse   noxout
anfwert   randsk         randsk      pyrolyse   pyrolyse
normi     rgzusam        rgzusam    pyrolyse   pyrolyse
brenner   stoffwer       stoffwer   pyrolyse   pyrolyse
so2einko  turbulen       turbulen   pyrolyse   pyrolyse
so2randw  turb_ed        turb_ed    pyrolyse   pyrolyse
          zaehigk       zaehigk    pyrolyse   pyrolyse
          wandfu      wandfu     pyrolyse   pyrolyse

```

În continuare se prezintă lista fișierelor, modulelor, blocurilor COMMON și a subrutinelor apelate.

|   |          | COMMON |     |  |  |
|---|----------|--------|-----|--|--|
| B | Fișier   | Modul  | All | APELURI, /COMMON/, Observații  |  |
| B | ABBQUELL | ABBQUE | *   |  |  |
| B | ABBRAND  | ABBRAN | *   | TDMAI, TDMAJ, TDMAK  |  |
| S | ABSORB   | ABSORB | *   |  |  |
| I | ANFWERT  | ANFAN  | *   |  |  |
| I | AUSSO2   | AUSSO2 | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/   |  |
| B | AUSUM    | AUSUM  | *   |  |  |
| I | BRENNER  | BRENNE | *   | Too large for postoptimizer  |  |
| I | EINDUES  | EIDUES | *   | Too large for postoptimizer  |  |
| B | ENBILANZ | ENBILA | *   |  |  |
|   |          | MABIKO | *   |  |  |
|   |          | WRIT04 | *   |  |  |
|   |          | WRIT05 | *   |  |  |
| B | ENERGIE  | ENERGI | *   | RANDSK   |  |
| I | FILENAME | FILNAM | *   |  |  |
| B | FLUESSE  | MASSFL | *   |  |  |
|   |          | MOLFL  | *   |  |  |
| B | GASRHO   | GASRHO | *   |  |  |
| I | GEOMETRI | VOLFLA | *   |  |  |
| P | HILFSROU | SIPRE  | *   | XBIUP, YBIUP, ZBIUP, IMPLER  |  |
|   |          | AUSTRI | *   |  |  |
|   |          | ZUENDE | *   |  |  |
|   |          | ZUENAU | *   |  |  |
|   |          | FEUVER | *   |  |  |
| I | IN       | IN     | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/   |  |
| I | INIT     | INIT   | *   | /KOEFL/  |  |
| x | MAIN     | MAIN   | *   | ABBQUE, ABBRAN, ABSORB, ANFAN, AUSDES, AUSGAB, AUSSO2, AUSTRI, AUSUM, BRENNER, CAOTG, CASO4T, DICHTTE, EDDY, EIDUES, ENBILA, ENERGI, ENTALT, ENTHAL, FEUVER, FILNAM, GASRHO, HCNFRI, HCNSEN, HCNTG, IMPONT, IMPOSB, IMPOST, IMPWBN, IMPWNT, IMPWSB, IN, INIT, ITEABB, MABIKO, MASSFL, MISCHU, MOLFL, NOINIT, NORM, NOXIN, NOXOUT, NOXUMS, OUT, PYROLY, REAOUT, RGZUS, RHOAL, RZERR, RZFLU, SIMPLE, SIPRE, SO2CAO, SO2EIN, SO2GOT, SO2IN, SO2INI, SO2OUT, SO2PYR, SO2RAN, SO2TG, SO2UMS, SO2VER, STRGAM, TAVIN, TDMAI, TDMAJ, TDMAK, TEMP, TURBUL, TURKIN, UMSPEI, UPSTRE, VDBKIN, VOLFLA, WAERKA, WALEIF, WANDFU, WRIT01, WRIT02, WRIT03, WRIT04, WRIT05, HCNTG, XNOSQ, XNOTG, XNOVER, ZAEHI, ZUEHIL |  |
| P | MAISUB   | WRIT03 | *   |  |  |
|   |          | ZUEHIL | *   | ZUENDE, ZUENAU   |  |
|   |          | UMSPEI | *   |  |  |
|   |          | IMPWSB | *   | XBIUP, YBIUP, ZBIUP  |  |
|   |          | IMPONT | *   | XBIUP, YBIUP, ZBIUP  |  |
|   |          | IMPWBN | *   | XBIUP, YBIUP, ZBIUP  |  |
|   |          | IMPOST | *   | XBIUP, YBIUP, ZBIUP  |  |
|   |          | IMPWNT | *   | XBIUP, YBIUP, ZBIUP  |  |

|   |          | COMMON |     |                                |            |
|---|----------|--------|-----|--------------------------------|------------|
| B | Fisier   | Modul  | All | APELURI, /COMMON/,             | Observatii |
|   |          | IMPOSB | *   | XBIUP, YBIUP, ZBIUP            |            |
| B | MISCHGRD | MISCHU | *   |                                |            |
| I | NORMI    | NORM   | *   |                                |            |
| N | NOX_NCNF | HCFNRI | *   | /STICK/                        |            |
|   |          | HCNSEN | *   | /STICK/                        |            |
|   |          |        |     | VONOTI, VOO2TI, VONCNT, VOXNOT |            |
|   |          | XNOSQ  | *   | /STICK/                        |            |
|   |          |        |     | VONOTI, VOO2TI, VONCNT, VOXNOT |            |
| N | NOXHCNTR | HCNTG  | *   | /STICK/                        |            |
|   |          |        |     | TDMAI, TDMAJ, TDMAK            |            |
|   |          | XNOTG  | *   | /STICK/                        |            |
|   |          |        |     | TDMAI, TDMAJ, TDMAK            |            |
| I | NOXIN    | NOINIT | *   | /STICK/                        |            |
|   |          | NOXIN  | *   | /STICK/                        |            |
| N | NOXOUT   | NOXOUT | *   | /STICK/                        |            |
| N | NOXSUBSO | AUSDES | *   | /STICK/                        |            |
|   |          | VONOTI | *   |                                |            |
|   |          | VOO2TI | *   | VONOTI                         |            |
|   |          | VOHCNT | *   | VONOTI                         |            |
|   |          |        |     | /STICK/                        |            |
|   |          | VOXNOT | *   | VONOTI                         |            |
|   |          |        |     | /STICK/                        |            |
|   |          | XNOVER | *   | /STICK/                        |            |
| R | NSUMS    | NOXUMS | *   | /STICK/                        |            |
|   |          | SO2UMS | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
| I | OUT      | OUT    | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | REAOUT | *   |                                |            |
| B | PRINT    | AUSGAB | *   | FAKTI var decl but not used    |            |
|   |          | PRIFEL | *   |                                |            |
|   |          | PRLJK  | *   | Form arg ZIP                   | never used |
|   |          | PRLIK  | *   | Form arg ZIP, EINH             | never used |
|   |          | PRLIJ  | *   | Form arg YIP                   | never used |
| B | PYROLYSE | PYROLY | *   |                                |            |
| R | RANDKOEf | RNKOEf | *   |                                |            |
| B | RANDSK   | RANDSK | *   | Too large for postoptimizer    |            |
| B | RGZUSAM  | RGZUS  | *   | TDMAI, TDMAJ, TDMAK            |            |
| P | SIMPLE   | SIMPLE | *   | TDMAI, TDMAJ, TDMAK            |            |
|   |          | IMPLER | *   | C;TDMJJK, C;TDMJIK, C;TDMKJI   |            |
| I | SO2EINKO | SO2EIN | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
| N | SO2FREI  | SO2PYR | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | SO2CAO | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          |        |     | FAS, FCSO2S, FDS, FKMS, FKRS,  |            |
|   |          |        |     | FYD, FYH2O, FYRS, FYTS, FZS    |            |
| N | SO2FUNC  | FCSO2S | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FKRS   | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FKMS   | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FDS    | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FUS    | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FUC    | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FZS    | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FAS    | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FYTS   | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |
|   |          | FYRS   | *   | /SCHWEF/, /TAVEIN/             |            |

|   |          | COMMON |  |
|---|----------|--------|--|
| B | Fisier   | Modul  | All APELURI, /COMMON/, Observatii                                  |
|   |          | FYH2O  | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
|   |          | FYD    | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
| I | SO2IN    | SO2INI | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
|   |          | SO2IN  | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
|   |          | TAVIN  | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
| N | SO2OUT   | SO2OUT | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
| I | SO2RANDW | SO2RAN | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
| N | SO2RUECK | SO2GOT | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
| N | SO2TRANS | SO2TG  | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
|   |          |        | TDMAI, TDMAJ, TDMAK  |
|   |          | CAOTG  | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
|   |          |        | TDMAI, TDMAJ, TDMAK  |
|   |          | CASO4T | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
|   |          |        | TDMAI, TDMAJ, TDMAK  |
|   |          | RSCAIT | * /SCHWEF/, /TAVEIN/   |
|   |          |        | TDMAI, TDMAJ, TDMAK  |
| B | STOFFWER | TEMP   | *  |
|   |          | WAERKA | *  |
|   |          | ENTHAL | *  |
|   |          | ENTALT | *  |
|   |          | DICHTE | *  |
|   |          | RHOAL  | *  |
| S | STRABGAM | STRGAM | * STRBGX, STRBGY, STRBGZ   |
|   |          | STRBGX | * TDMAIS   |
|   |          |        | Form arg NIT never used  |
|   |          | STRBGY | * TDMAJS   |
|   |          |        | Form arg NIT never used  |
|   |          | STRBGZ | * TDMAKS   |
|   |          |        | Form arg NIT never used  |
| R | TDMA     | TDMAI  | *  |
|   |          | TDMAJ  | *  |
|   |          | TDMAK  | *  |
| S | TDMASTR  | TDMAIS | *  |
|   |          | TDMAJS | *  |
|   |          | TDMAKS | *  |
| B | TURB_ED  | TURKIN | * RANDSK   |
|   |          | EDDY   | * RANDSK   |
| B | TURBULEN | TURBUL | *  |
| R | UPSTREAM | UPSTRE | * RNKOEf   |
| P | WALEIF   | WALEIF | *  |
| B | WANDFU   | WANDFU | * Too large for postoptimizer                                      |
| I | WRITE    | OPEIBM | *  |
|   |          | OPENSN | *  |
|   |          | WRIT01 | *  |
|   |          | WRIT02 | *  |
| P | XBIUP    | XBIUP  | * /GEXBI/, /INDEX/, /KENIMP/, /KOEf/<br>TDMAI, TDMAJ, TDMAK, XRAND |
|   |          |        | Too large for postoptimizer  |
| P | YBIUP    | YBIUP  | * /GEYBI/, /INDEX/, /KENIMP/, /KOEf/<br>TDMAI, TDMAJ, TDMAK, YRAND |
|   |          |        | Too large for postoptimizer  |

| COMMON |         |       |   |
|--------|---------|-------|---|
| B      | Fisier  | Modul | All APELURI, /COMMON/, Observatii   |
| P      | ZBIUP   | ZBIUP | * /GEZBI/, /INDEX/, /KENIMP/, /KOEf/<br>TDMAI, TDMAJ, TDMAK, ZRAND<br>Too large for postoptimizer |
| P      | XRAND   | XRAND | * /INDEX/, /KENIMP/, /KOEf/, /GEXBI/  |
| P      | YRAND   | YRAND | * /INDEX/, /KENIMP/, /KOEf/, /GEYBI/  |
| p      | ZRAND   | ZRAND | * /INDEX/, /KENIMP/, /KOEf/, /GEZBI/  |
| B      | ZAEHIGK | ZEAHI | *   |

Legendă - biblioteci (B) B - LBILANZ  
 I - LINIT  
 N - LNOXSO2  
 P - LIMPULS  
 R - LRADAC  
 S - LSTRAHL  
 x - fără bibliotecă  
 - COMMON All \* - este necesar

Funcțiile diverselor subrutine (module) sunt următoarele:

| Fișier   | Modul  | Funcția îndeplinită  |
|----------|--------|--|
| ABBQUELL | ABBQUE | Calculul termenilor sursă la arderea volatilelor, a reziduului carbonos și a oxidului de carbon.                     |
| ABBRAND  | ABBRAN | Calculul relațiilor de transport pentru arderea volatilelor, a reziduului carbonos și a oxidului de carbon.          |
| ABSORB   | ABSORB | Calculul coeficientului de absorbție a radiației în gaze.  |
| ANFWERT  | ANFAN  | Introducerea concentrațiilor inițiale date în câmpurile necesare. Calculul mărimilor de pornire la modelul curgerii. |
| AUSSO2   | AUSSO2 | Afișarea variabilelor modelului SO2 la ieșire.   |
| AUSUM    | AUSUM  | Setarea variabilelor în zona de ieșire pentru calculul cu reacții chimice.   |
| BRENNER  | BRENNE | Calculul condițiilor pe contur pentru arzător.   |
| EINDUES  | EIDUES | Idem pentru duzele de intrare.   |
| ENBILANZ | ENBILA | Controlul bilanțului energetic.  |
|          | MABIKO | Calculul neînchiderii bilanțului de masă în bilanțul impuls - energie.   |
|          | WRIT04 | Ieșire unele rezultate.  |
|          | WRIT05 | Idem.  |
| ENERGIE  | ENERGI | Calculul entalpiei și al bilanțului energetic.   |
| FLUESSE  | MASSFL | Calculul densității fluxului masic în celulele de lângă pereți.  |
|          | MOLFL  | Calculul densității fluxului de difuzie în celulele de lângă pereți.   |
| FILENAME | FILNAM | Citirea datelor cu numele fișierelor folosite.   |
| GASRHO   | GASRHO | Calculul densității fazei gazoase.   |
| GEOMETRI | VOLFLA | Determinarea zonei active și a limitelor volumelor de control.   |



| Fișier   | Modul   | Funcția îndeplinită   |
|----------|---------|---|
| HILFSROU | SIPRE   | Calculul "plafonului" vitezelor pentru SIMPLER.   |
|          | AUSTRI  | Corecția vitezelor la ieșire în funcție de bilanțul global de masă.                                     |
|          | ZUENDE  | Introducerea curentului de gaze combustibile.   |
|          | ZUENAU  | Deconectarea curentului de gaze combustibile la atingerea limitei.                                      |
|          | FEUEVER | Calculul pierderilor de ardere în curentul masic de gaz * concentrație * putere calorifică.             |
| IN       | IN      | Citirea din fișier a cheilor, datelor geometrice, vitezelor și temperaturilor.                          |
| INIT     | INIT    | Setarea valorilor implicite în câmpuri.   |
| MAIN     | MAIN    | Programul principal.  |
| MAISUB   | WRIT03  | Ieșire unele rezultate.   |
|          | ZUEHIL  | Precizarea curentului de gaze combustibile.   |
|          | UMSPEI  | Memorarea mărimilor de bilanț noi.  |
|          | IMPWSB  | Comanda bilanțului energetic dacă SIMP.   |
|          | IMPONT  | Idem.   |
|          | IMPWBN  | Idem.   |
|          | IMPOST  | Idem.   |
|          | IMPWNT  | Idem.   |
|          | IMPOSB  | Idem.   |
| MISCHGRD | MISCHU  | Calculul gradului de amestec.   |
| NORMI    | NORM    | Calculul mărimilor de normare pentru stabilirea limitelor iterațiilor la bilanțurile de masă și impuls. |
| NOX_NCNF | HCNFRI  | Degajarea azotului sub forma de HCN în timpul pirolizei.  |
|          | HCNSEN  | Calculul global al HCN după De Soete.   |
|          | XNOSQ   | Idem pentru NO.   |
| NOXHCNTR | HCNTG   | Calculul relațiilor de transport pentru HCN.  |
|          | XNOTG   | Idem pentru NO.   |
| NOXIN    | NOINIT  | Setarea mărimilor de câmp implicite pentru modelul NOx.   |
|          | NOXIN   | Citirea concentrației noxelor NOx.  |
| NOXOUT   | NOXOUT  | Ieșiri ale modelului noxelor NOx.   |
| NOXSUBSO | AUSDES  | Calculul variabilelor la ieșire pentru modelul NOx De Soete.  |
|          | VONOTI  | Calculul volumelor molare curente.  |
|          | VOO2TI  | Calculul participării masice în participarea volumică pentru O2.  |
|          | VOHCNT  | Idem pentru HCN.  |
|          | VOXNOT  | Idem pentru NO.   |
|          | XNOVER  | Calculul NOx format.  |
| NSUMS    | NOXUMS  | Memorarea mărimilor de bilanț pentru NOx.   |
|          | SO2UMS  | Idem pentru SO2.  |
| OUT      | OUT     | Ieșirea cheilor, datelor geometrice, vitezelor și temperaturilor în fișier.                             |
|          | REAOUT  | Idem, pentru cuplarea reacțiilor - mărimi de câmp.  |
| PRINT    | AUSGAB  | Ieșire rezultate în fișiere.  |
|          | PRIFEL  | Idem.   |
|          | PRLJK   | Idem.   |
|          | PRLIK   | Idem.   |
|          | PRLIJ   | Idem.   |

| Fișier    | Modul   | Funcția îndeplinită  |
|-----------|---------|--|
| PYROLYSE  | PYROLY  | Calculul arderii cărbunelui.   |
| RANDKOEFL | RNKOEFL | Setarea coeficienților pe contur.  |
| RANDSK    | RANDSK  | Setarea mărimilor scalare pe contur.   |
| RGZUSAM   | RGZUS   | Calculul compoziției gazelor de ardere.  |
| SIMPLE    | SIMPLE  | Calculul corecțiilor de presiune în funcție de bilanțul masic.                       |
|           | IMPLER  | Idem.  |
| SO2EINKO  | SO2EIN  | Controlul intrării aditivilor de desulfurare.  |
| SO2FREI   | SO2PYR  | Degajarea sulfului sub forma de SO <sub>2</sub> în timpul arderii.                   |
|           | SO2CAO  | Calculul reducerii SO <sub>2</sub> cu aditivul de desulfurare.                       |
| SO2FUNC   | FCSO2S  | Calculul concentrației de SO <sub>2</sub> .  |
|           | FKRS    | Calculul constantei de viteză a reacției eterogene de formare a sulfatului.          |
|           | FKMS    | Calculul difuziei masice a SO <sub>2</sub> .   |
|           | FDS     | Calculul constantei de viteză a reacției difuzive de sulfatare.                      |
|           | FUS     | Calculul gradului de sulfatare.  |
|           | FUC     | Calculul gradului de calcinare.  |
|           | FZS     | Calculul grosimii stratului de sulfat depus.   |
|           | FAS     | Calculul suprafeței de reacție echivalente.  |
|           | FYRS    | Calculul factorului YRS.   |
|           | FYH2O   | Idem pentru YH <sub>2</sub> O.   |
|           | FYTS    | Idem pentru YTS.   |
|           | FYD     | Idem pentru YD.  |
| SO2IN     | SO2INI  | Setarea mărimilor implicite ale modelului SO <sub>2</sub> .                          |
|           | SO2IN   | Citirea concentrațiilor noxelor SO <sub>2</sub> și ale CaO, CaSO <sub>4</sub> .      |
|           | TAVIN   | Citirea datelor pentru aditivii de desulfurare.                                      |
| SO2OUT    | SO2OUT  | Ieșirea concentrațiilor noxelor pentru modelul SO <sub>2</sub> .                     |
| SO2RANDW  | SO2RAN  | Repartizarea condițiilor pe contur pentru aditivul de desulfurare.                   |
| SO2RUECK  | SO2GOT  | Sumarea debitelor masice de SO <sub>2</sub> , CaO, CaSO <sub>4</sub> la recirculare. |
| SO2TRANS  | SO2TG   | Calculul relațiilor de transport pentru SO <sub>2</sub> .                            |
|           | CAOTG   | Idem pentru CaO.   |
|           | CASO4T  | Idem pentru CaSO <sub>4</sub> .  |
|           | RSCAIT  | Calculul razei CaO în relațiile de transport.  |
| STOFFWER  | TEMP    | Calculul iterativ al temperaturii pe baza entalpiei.                                 |
|           | WAERKA  | Calculul capacităților termice masice.   |
|           | ENTHAL  | Calculul entalpiei.  |
|           | ENTALT  | Idem, pentru situația veche.   |
|           | DICHTE  | Calculul densității în funcție de compoziție și temperatură.                         |
|           | RHOAL   | Idem, pentru situația veche.   |
| STRABGAM  | STRGAM  | Calculul fluxului termic prin radiație.  |
|           | STRBGX  | Calculul fluxului radiant în direcția X.   |
|           | SRTBGY  | Idem în direcția Y.  |
|           | STRBGZ  | Idem în direcția Z.  |

| Fișier   | Modul  | Funcția îndeplinită  |
|----------|--------|--|
| TDMA     | TDMAI  | Rezolvarea sistemului de ecuații prin algoritmul Thomas.                                     |
|          | TDMAJ  | Idem.  |
|          | TDMAK  | Idem.  |
| TDMASTR  | TDMAIS | Rezolvarea sistemului de ecuații prin algoritmul Thomas, dacă se ia în considerare radiația. |
|          | TDMAJS | Idem.  |
|          | TDMAKS | Idem.  |
| TURB_ED  | TURKIN | Calculul mărimilor scalare ale modelului turbulenței, turbulența cinetică.                   |
|          | EDDY   | Calculul disipației.   |
| TURBULEN | TURBUL | Calculul termenilor sursă din modelul $K - \epsilon$ .                                       |
| UPSTREAM | UPSTRE | Calculul coeficienților pentru discretizarea contracurent.                                   |
| WALEIF   | WALEIF | Calculul conductivității termice.  |
| WANDFU   | WANDFU | Calculul stratului inactiv și a tensiunii tangențiale la perete.                             |
| WRITE    | WRIT01 | Ieșire unele rezultate.  |
|          | WRIT02 | Idem.  |
| XBIUP    | XBIUP  | Bilanțul de impuls în direcția X, viteza u.  |
| YBIUP    | YBIUP  | Idem în direcția Y, viteza v.  |
| ZBIUP    | ZBIUP  | Idem în direcția Z, viteza w.  |
| XRAND    | XRAND  | Setarea condițiilor pe contur în direcția X.   |
| YRAND    | YRAND  | Idem în direcția Y.  |
| ZRAND    | ZRAND  | Idem în direcția Z.  |
| ZAEHIGK  | ZEAHI  | Calculul vâscozității turbulente și moleculare.  |

Situația efectivă actuală a programului FEUER este următoarea:

|                              |        |
|------------------------------|--------|
| Lungime CODE                 | 189760 |
| Lungime FAR_DATA             | 14784  |
| Lungime COMMON               | 360192 |
| Lungime DATA                 | 20524  |
| Lungime MSG, BSS, STACK etc. | 18659  |
| TOTAL                        | 603919 |

Structura și dimensiunile codului program sunt următoarele:

| Segmentul | Conținut   | Lungime | Observatii |
|-----------|------------|---------|------------|
| rădăcina  | MAIN + RAD | 59024   | resident   |
| overlay 1 | INIT       | 105692  |            |
| overlay 2 | IMPULS     | 130721  |            |
| overlay 3 | STRAHL     | 26322   |            |
| overlay 4 | BILANZ     | 128141  |            |
| overlay 5 | NOXS02     | 30404   |            |

După cum se observă, cea mai lungă ramură este IMPULS, cu o lungime de 130721 o, ramură care dă de fapt lungimea programului. Foarte apropiată ca lungime este ramura BILANZ. Ramura INIT, fiind mai scurtă, permite o eventuală suplimentare a intrărilor și ieșirilor. Ramura STRAHL este foarte scurtă și este încărcată numai dacă este cerut și modelul radiației. Ramura NOXS02 este de

asemenea foarte scurtă și ar permite completarea cu modulele 'FENIMORE', 'NOXREDKI', 'EULSIM' și 'METAN1', care însă au nevoie de modulele lipsă enumerate la început.

**a4.** Asamblarea (LINK) a modulelor și a segmentelor s-a făcut cu un program LINK versiunea 3.10, al pachetului de programe FORTRAN FL 5.1. Programul LINK consideră drept segment nu numai segmentele de cod declarate, ci și fiecare bloc COMMON. Ca urmare, la asamblare s-a depășit valoarea implicită de 127 a tabelii de segmente și a fost necesară declararea unei tabeli de segmente majorată, aici la 255 de segmente.

**a5.** La execuția (rularea) programului s-a constatat că sunt prea multe fișiere deschise simultan, tampoanele lor ocupând prea multă memorie. Lista fișierelor originale de intrare-ieșire este prezentată în continuare.

#### Fișiere pentru FEUER

| Nume logic | Ca-nal | For-mat | Extensie originala | Semnificație   |
|------------|--------|---------|--------------------|--|
| nein1      | 4      | 132     | .datalt            | - Marimi inițiale si condiții la limită (fișier de intrare)                                  |
| nein       | 5      | 132     | .datenalt          | - Chei și marimi de câmp în întregul domeniu de curgere (fișier de intrare)                  |
| errors     | 6      | 132     | .aus               | - Fișier de ieșire pentru mesajele de eroare și de timp                                      |
| naus       | 7      | 132     | .erg               | - Ieșirea mărimilor de câmp într-o formă prescurtată   |
| naus1      | 8      | 132     | .datenneu          | - Chei și marimi de câmp în întregul domeniu de curgere (fișier de ieșire)                   |
| naus2      | 9      | 132     | .ergeb             | - Ieșirea diferențelor dintre mărimile de câmp între doi pași de timp consecutivi            |
| naus3      | 10     | 132     | .erge              | - Ieșirea neînchiderilor bilanțului de masă și a mărimilor reziduale pentru fiecare iterație |
| naus4      | 11     | 132     | .datneu            | - Mărimi inițiale și condiții la limită (fișier de ieșire)                                   |
| naus5      | 12     | 132     | .datstrneu         | - Mărimi pentru radiație și ardere (fișier de ieșire)  |
| nein2      | 13     | 132     | .datstralt         | - Mărimi pentru radiație și ardere (fișier de intrare)                                       |
| naus6      | 14     | 80      | .mabikon           | - Controlul bilanțului de masă global  |
| naus7      | 16     | 132     | .enbikon           | - Controlul bilanțului energetic   |
| nausmo     | 20     | 132     | .monitor           | - Ieșirea mărimilor de câmp pentru celula cu neînchiderea maximă a bilanțului de masă        |
| mausmt     | 21     | 132     | .monitau           | - Ieșirea celulelor cu diferențe maxime ale mărimilor de câmp între doi pași de timp         |
| naus8      | 19     | 132     | .reakdaten         | - Ieșirea concentrațiilor pentru procedeul SNCR  |

| Nume logic | Ca-<br>nal | For-<br>mat | Extensie<br>originala | Semnificație   |
|------------|------------|-------------|-----------------------|--|
| -          | 18         |             | .tauaus               | - Fișier folosit la versiunile anterioare ale programului    |
| nnoxal     | 31         |             |                       | - Fișier de intrare pentru formarea poluanților de NOx       |
| nnoxne     | 32         |             |                       | - Fișier de ieșire pentru formarea poluanților de NOx        |
| nso2al     | 33         |             |                       | - Fișier de intrare pentru formarea poluanților de SO2       |
| nso2ne     | 34         |             |                       | - Fișier de ieșire pentru formarea poluanților de SO2        |
| nnoxko     | 35         |             |                       | - Fișier suplimentar pentru formarea NOx din combustibil     |
| nso2ko     | 36         |             |                       | - Fișier suplimentar pentru formarea NOx din combustibil     |
| nnoxmg     | 37         |             |                       | - Fișier suplimentar pentru reducerea NOx cu aditiv magneziu |
| nso2mg     | 38         |             |                       | - Fișier suplimentar pentru reducerea SO2 cu aditiv magneziu |
| ntaval     | 39         |             |                       | - Fișier de intrare pentru procedeul de desulfurare SNCR     |
| ntavne     | 40         |             |                       | - Fișier de ieșire pentru procedeul de desulfurare SNCR      |

Pentru a reduce numărul de fișiere deschise simultan s-a procedat în modul următor:

- rutinele 'OPENSN' și 'OPESUN', care deschideau fișierele au fost înlocuite cu rutina 'FILNAM', care doar citește numele fișierelor din fișierul 'iofiles.foc'.

- fișierul 'stopgo' este deschis de 'MAIN' și închis după citire imediat.

- fișierele necesare la intrare: 'nein', 'nein1' și 'nein2' sunt deschise de subrutina 'IN', iar la nevoie fișierul 'nnoxal' este deschis de subrutina 'NOXIN' și 'nso2al' de subrutina 'SO2IN'. După citire toate aceste fișiere sunt închise, eliberând canalele.

- fișierele de ieșire necesare părții iterative au fost grupate în doar trei fișiere: 'nume.out', 'errors' și 'nume.nox'. Acestea sunt deschise de 'MAIN' și conțin liniile următoarelor fișiere:

| 'nume.out' | 'errors' | 'nume.nox' |
|------------|----------|------------|
| naus       | errors   | nnoxne     |
| naus2      | nausmo   | nso2ne     |
| naus3      | nausmt   | nnoxko     |
| naus6      |          | nso2ko     |
| naus7      |          | nnoxmg     |
|            |          | nso2mg     |
|            |          | ntavne     |

În fiecare din aceste fișiere liniile care vin sunt scrise pe măsură ce apar, deci amestecat, dar cu un cod numeric de identificare de un octet pe prima poziție a fiecărei linii. La terminarea

părții iterative, cele trei fișiere susmenționate sunt închise. Pentru restaurarea fișierelor în formatul original s-a conceput un program de sortare a liniilor, care, după terminarea execuției programului FEUER reface pe baza codurilor de identificare a liniilor fișierele și ordinea normală a liniilor.

- restul fișierelor sunt fișiere de ieșire și sunt deschise, după caz, de subrutinele 'OUT', 'REAOUT' și 'TAVIN'.

b. Pe partea de blocuri COMMON, spațiul rămas disponibil în memoria operativă este de cca. 380 Ko, ceea ce permite modelarea unui domeniu cu cca. 700 de celule, deci ceva mai mult decât obiectivul propus. În exemplul care urmează s-a modelat un domeniu de  $6 \times 8 \times 14 = 672$  celule, folosind pentru blocurile COMMON cca. 360 Ko.

Programul asamblat are o lungime de cca. 1040 Ko, însă datorită structurii segmentate permite execuția sa în 640 Ko, deci chiar pe un IBM-PC/XT. La aceste calculatoare însă încărcarea segmentelor se face de pe harddisk, iar ieșirea rezultatelor se face tot pe harddisk, ceea ce micșorează extrem de mult viteza de execuție. Dacă se dispune de memorie extinsă la 4 Mo, se poate declara un RAM-drive de cca. 2,5 Mo, pe care încape programul, fișierele de intrare și cele de ieșire pentru cca. 100 de iterații, întregul program executându-se astfel de fapt în memoria calculatului, iar încărcările segmentelor se reduc la transferuri de date între blocuri de memorie, accelerând mult execuția.

În acest sens, o capacitate de memorie mai mare permite execuția unui număr corespunzător mai mare de iterații.

Pentru exploatarea programului s-a păstrat compatibilitatea cu fișierele de intrare-ieșire inițiale [117]. Tot în [117] se găsește expunerea detaliată a structurii acestor fișiere. Această documentație a fost tradusă în limba română, însă, datorită volumului său destul de mare se consideră că nu este cazul să fie inclusă în lucrarea de față, ea fiind disponibilă pentru eventualii beneficiari la Catedra de Termotehnică și Mașini Termice a Facultății de Mecanică a Universității „Politehnica” Timișoara.

#### 5.4.2 Modelarea cu programul FEUER 1.1 a proceselor de ardere la cazanul de 420 t/h de la CET Oradea.

Cazanul nr. 1 de la CET Oradea II produce 420 t/h de abur la parametri nominali:  $p_0 = 139$  bar și  $t_n = 540$  °C. Focarul are o secțiune aproape pătrată (10782 \* 10730 mm) iar zona sa activă este între nivelele 9 m și 34 m, deci înălțimea sa este de cca. 25 m. Focarul este echipat cu 8 arzătoare de tip fantă plasate la același nivel, între cotele de înălțime 14 m și 20 m, câte două pe fiecare perete, astfel încât se poate organiza o ardere turbionară. Fiecare arzător are câte patru zone principale de insuflare eșalonate pe înălțime. La nivelul 34 m există o strangulare care delimitează focarul propriu-zis de o cameră radiantă plasată deasupra sa până la nivelul de 45 m.

Cazanul folosește drept combustibil lignit ars sub formă de praf. Conținutul de umiditate foarte mare (cca. 43 %) face necesară uscarea sa. Pentru uscare și prepararea prafului de cărbune se folosește o schemă clasică în circuit închis echipată cu mori ventilator [1, 2, 3, 123]. Drept agent de uscare se folosește o parte a aerului insuflat în focar împreună cu o parte a gazelor de ardere prelevate din focar. Prelevarea gazelor pentru uscare se face din partea superioară a focarului, imediat sub strangulare, la nivelul de 30 m.

#### Discretizarea domeniului.

Domeniul de analiză pentru modelarea cu programul FEUER 1.1 este zona activă a focarului împreună cu camera radiantă superioară. Capacitatea programului FEUER 1.1 implementat pe calculator de tip IBM-PC permite discretizarea domeniului de analiză în 7 x 7 x 14 celule. Întrucât domeniul de analiză trebuie să conțină un rând de celule așa zis „fictive” în jurul zonei modelate propriu-zise, rămâne disponibil pentru discretizare un număr de 5 x 5 x 12 celule. Discretizarea propusă este prezentată în fig. 5.4.1. La această discretizare s-a dat prioritate conturării corecte a zonei arzătoarelor, ca urmare discretizarea în 5 x 5 celule în plan orizontal este impusă, pentru celelalte suprafețe trebuind să se facă aproximații. Conturul real al focarului este trasat în fig. 5.4.1 cu linie întreruptă. Abaterile se manifestă în zona pâlniei de cenușă și în zona strangulării superioare.

În zona pâlniei de cenușă limita inferioară a focarului a fost considerată la jumătatea înălțimii pâlniei [1, 28, 29, 121, 122], ceea ce corelat cu discretizarea disponibilă în plan orizontal a condus la conturul oarecum strâmb în această zonă. Totuși, și din alte modelări cu programul FEUER 1.1 [10, 117, 118, 119] rezultă influență relativ redusă a acestei zone asupra fenomenelor modelate.

În zona strangulării superioare discretizarea focarului propriu-zis are abateri nesemnificative față de geometria reală, iar în zona camerei radiante superioare schimbarea bruscă de secțiune și direcție la nivelele 11 - 12 determină, într-adevăr,

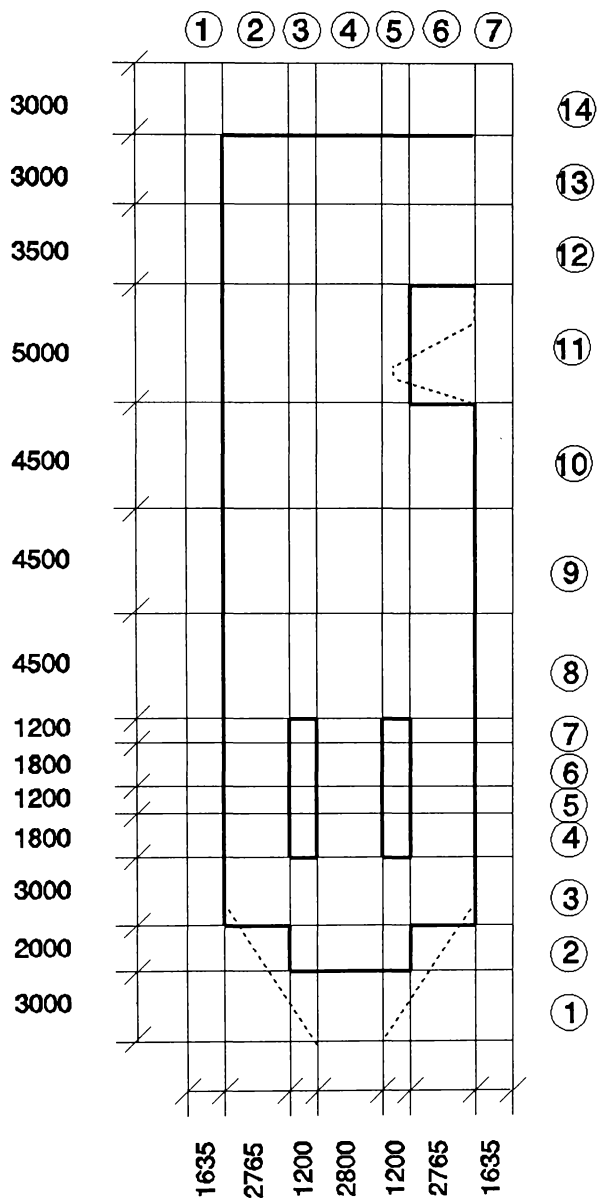


Fig. 5.4.1 Schema de discretizare a focarului cazanului nr. 1 de 420 t/h de la CET Oradea II



viteze de curgere ceva mai mari, însă zona în discuție este situată relativ aproape de ieșirea din domeniul de analiză și relativ departe de zona arzătoarelor, astfel că și aici abaterile determinate de această discretizare au o importanță redusă.

Zona arzătoarelor este discretizată în înălțime în câte 4 celule, corespunzând la patru zone principale de insuflare. Două zone (5 și 7) sunt destinate pentru insuflarea prafului de cărbune și a mediului său de transport format din aerul primar și gazele de ardere folosite la uscare și umiditatea degajată prin uscare. Celelalte două zone (4 și 6) sunt destinate pentru insuflarea aerului secundar.

Dimensiunile celulelor sunt prezentate de asemenea în fig. 5.4.1. Discretizarea în plan orizontal este aproape un pătrat, diferențele dimensionale sunt de ordinul a câțiva mm și de aceea nu s-a mai considerat necesară prezentarea detaliată a acestei discretizări în lucrarea de față.

Programul FEUER 1.1 face referințe la descrierea direcțiilor pe cele trei axe în modul următor:

- direcția **x** are sensul spre dreapta numerotat cu 1 și are simbolul logic **EST**;
- direcția **x** are sensul spre stânga numerotat cu 4 și are simbolul logic **VEST**;
- direcția **y** are sensul spre adâncime numerotat cu 2 și are simbolul logic **NORD**;
- direcția **y** are sensul spre privitor numerotat cu 5 și are simbolul logic **SUD**;
- direcția **z** are sensul spre sus numerotat cu 3 și are simbolul logic **TOP**;
- direcția **z** are sensul spre jos numerotat cu 6 și are simbolul logic **BOTTOM**;

Din punct de vedere al programului FEUER 1.1 focarul este orientat cu partea frontală spre VEST. Această așezare nu este de fapt obligatorie, însă este uzuală la modelări cu programul FEUER 1.1.

Limitele focarului sunt stabilite cu ajutorul notiunii de **perete**, care se definește prin indicii celulelor extreme ale peretelui. Pereții pot fi doar plani și situați în planele x-y, x-z și y-z. Definirea pereților este prezentată în detaliu în [116]. Este necesară definirea unui același număr de pereți de toate tipurile (EST, VEST, NORD, SUD, TOP, BOTTOM). Dacă în domeniul modelat există mai puțini pereți de un tip trebuie să definiți **pereți fictivi**. Pentru discretizarea folosită la cazanul de 420 t/h s-au definit:

- 3 pereți de EST,
- 2 pereți de VEST,
- 1 perete de NORD,
- 1 perete de SUD,
- 2 pereți de TOP,
- 4 pereți de BOTTOM.

Se vede că numărul maxim de pereți de un tip este 4, deci

celelalte direcții vor fi completate cu pereți fictivi până la 4.

În continuare este necesară descrierea intrărilor și ieșirilor. Ca zone de intrare au fost considerate zonele arzătoarelor. Pentru a putea fi controlate individual fiecare celulă din fiecare arzător au fost definite 32 de zone de intrare (8 arzătoare x 4 celule). Ca zonă de ieșire a fost considerat perete spre EST a camerei radiante superioare.

Toate datele necesare pentru discretizarea domeniului sunt furnizate inițial programului GEOM, care generează fișierele de pornire necesare, unul conținând condițiile la limită (extensie **.dt1**), iar celălalt (extensie **.dt2**) conținând o serie de indici, chei și rezultate intermediare pentru fiecare celulă. În continuare precizarea condițiilor la limită se face modificând corespunzător fișierul de tip **.dt1** între rulările consecutive ale programului FEUER 1.1.

#### Stabilirea condițiilor la limită.

Condițiile la limită se pun la pereți și în zona de intrare. În zona de ieșire nu se pune nici o condiție. În afară de aceasta, pentru o pornire plauzibilă a simulării este necesară introducerea unei temperaturi medii a focarului apropiată de realitate, precum și o serie de proprietăți fizice la această temperatură.

**a). La pereți** trebuie introduse temperaturile acestora. Acestea au fost considerate 723 K (450 °C) pentru ecranul frontal, care este un supraîncălzitor de radiație plasat pe prima poziție în lanțul supraîncălzitoarelor și de 673 K (400 °C) pentru celelalte ecrane, care fac parte din sistemul fierbător și conțin emulsie apă-abur.

**b). Pentru zona de intrare** sunt necesare definirea vitezelor de insuflare, a parametrilor turbulenței, a temperaturilor, a intrărilor de combustibil și de aditiv, a compoziției elementare a combustibilului, a compoziției mediului de transport a combustibilului și a mediului de transport al aditivului. Pentru precizarea acestor condiții trebuie făcut un calcul al sistemului de preparare a prafului [3, 121, 122]. Rezultatul acestui calcul este prezentat în continuare.

Compoziția elementară a combustibilului raportată la masa inițială este:

|                  |         |          |
|------------------|---------|----------|
| Carbon           | $C^i$   | = 20,4 % |
| Hidrogen         | $H^i$   | = 2,1 %  |
| Sulf combustibil | $S_f^i$ | = 1,7 %  |
| Oxigen           | $O_f^i$ | = 10,8 % |
| Azot             | $N^i$   | = 0,4 %  |
| Cenușă           | $A^i$   | = 21,6 % |
| Umiditate totală | $W_t^i$ | = 43,0 % |

Puterea calorifică inferioară măsurată  $H_i^i = 7075$  kJ/kg

Randamentul termic brut al cazanului  $\eta_{tb} = 85,0$  %

|  |             |                    |
|--|-------------|--------------------|
| Puterea termică a cazanului                          | $Q_1$       | = 287,2 MW         |
| Consumul de combustibil                              | B           | = 47,8 kg/s        |
| Oxygenul minim necesar arderii                       | $O_{\min}$  | = 0,435 $m^3_N/kg$ |
| Aerul minim necesar arderii                          | $L_{\min}$  | = 2,07 $m^3_N/kg$  |
| Coeficientul de exces de aer în focar                | $\lambda_f$ | = 1,25             |
| Coeficientul de exces de aer<br>la ieșirea din focar | $\lambda_o$ | = 1,30             |

Se admite că în sistemul de preparare a prafului uscarea prafului de cărbune se face de la umiditatea de 43 % până la umiditatea de 14 %, folosindu-se ca agent de uscare 10 % din aerul minim necesar arderii și o parte a gazelor prelevate din partea superioară a focarului și recirculate. Efectuând calculele se obține o cotă a gazelor recirculate de 21,7 %. Cu aceste date se calculează compozițiile la ieșirea din moară, global pe arzătoare, respectiv la ieșirea din focar. Debitele masice corespunzătoare acestor compoziții sunt prezentate în tab. 5.4.1.

Tabelul 5.4.1

| Componenta                        | U.M.       | Compoziția<br>la ieșirea<br>din moară | Compoziția<br>globală pe<br>arzătoare | Compoziția<br>la ieșirea<br>din focar |
|-----------------------------------|------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|
| CO <sub>2</sub> + SO <sub>2</sub> | kg/kg comb | 0,162                                 | 0,162                                 | 0,775                                 |
| N <sub>2</sub>                    | "          | 0,813                                 | 3,112                                 | 2,660                                 |
| O <sub>2</sub>                    | "          | 0,117                                 | 0,816                                 | 0,186                                 |
| H <sub>2</sub> O                  | "          | 0,427                                 | 0,427                                 | 0,650                                 |
| TOTAL                             | "          | 1,519                                 | 4,516                                 | 4,271                                 |

Vitezele de insuflare în focar rezultă cunoscând secțiunile, debitele masice, densitățile normale și temperaturile. Pentru amestecul primar temperatura admisă este de 160 °C, iar pentru aerul secundar 245 °C. Din cele 8 arzătoare se consideră că funcționează doar 4, pentru a realiza o ardere turbionară. Cu aceste ipoteze rezultă viteze de insuflare a amestecului primar de cca. 20 m/s și a aerului secundar de cca. 30 m/s.

### Mersul rulărilor.

Programul FEUER 1.1 modelează cu relații de transport (v. cap. 2) următoarele mărimi [10, 119]:

- masa (o relație);
- impulsul (trei relații, pentru cele trei componente ale vitezelor);
- turbulență (două relații, pentru energia turbulentă și disipația turbulentă);
- concentrațiile speciilor chimice (opt relații, pentru oxigen, bioxid de carbon, apă, oxid de carbon, metan, cărbune, cocs și cenușă);
- radiație (o relație, pentru un model cu 6 fluxuri);
- entalpia (o relație);
- poluanți pe bază de azot (trei relații, pentru oxid de azot,

amoniac și acid cianhidric);

- poluanți pe bază de sulf (trei relații, pentru bioxid de sulf, oxid de calciu și sulfat de calciu).

Nu toate relațiile de transport prezentate pot fi tratate simultan și fără o inițializare prealabilă, astfel că rularea programului FEUER 1.1 se poate face doar în mai multe etape, care trebuiesc parcurse succesiv [119]. Conducerea programului prin diversele etape se face cu ajutorul unor variabile logice de control [116], a căror semnificație este prezentată în tabelul 5.4.2.

Tabelul 5.4.2

| Variabila | Semnificația pentru <b>.TRUE.</b>   |
|-----------|---|
| LAMINA    | Curgere laminară; altfel turbulentă.  |
| ISOTHE    | Curgere izotermă; altfel bilanț energetic.  |
| STRAHL    | Cu schimb de căldură prin radiație.   |
| VERBRE    | Cu model de arderă.   |
| MONITO    | Cu ieșirea celulelor cu abatere maximă de masă, pentru fiecare iterație, în fișierul <b>*.mbi</b>   |
| MONITA    | Cu ieșirea celulelor cu abatere maximă a mărimilor de câmp, între doi pași de timp, în fișierul <b>*.ebi</b>                                  |
| ZUEND     | Cu model de aprindere auxiliară pentru cărbune.   |
| REAKT     | Cu calculul amestecului aditiv-gaze de ardere pentru simularea procedurii SNCR.   |
| FINISH    | Cu ieșirea concentrațiilor, în părți volumice și a temperaturilor, în °C în fișierul <b>*.rez</b> (dacă și <b>REAKT</b> este <b>.TRUE.</b> ). |
| TURANF    | Cu secvența de inițializare a mărimilor necesare pentru modelul turbulenței.  |
| VERANF    | Cu secvența de inițializare a mărimilor necesare pentru modelul arderii.  |

**Etapa I** presupune luarea în considerație doar a relațiilor de transport pentru masă și impuls. Pentru aceasta, variabilele **LAMINA** și **ISOTHE** vor fi **.TRUE.** iar celelalte variabile logice vor fi **.FALSE.** Astfel se obține un spectru inițial al vitezelor gazelor în focar pentru o curgere laminară, izotermă. Aceste viteze (deocamdată aproximative) permit inițializarea în continuare a calculului celorlalte mărimi. Vitezele obținute pentru o curgere laminară sunt prezentate în fig. 5.4.2 - 5.4.4. Scara vitezelor în aceste figuri este 1 mm = 2 m/s.

În fig. 5.4.2 sunt prezentate vitezele în cele cinci plane x-z (focarul văzut lateral) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $j = 2$  până la  $j = 6$ . Se reamintește că planele cu indicii  $j = 1$  și  $j = 7$  conțin celule fictive, în afara domeniului de analiză. În figură se observă vitezele relativ mari din dreptul

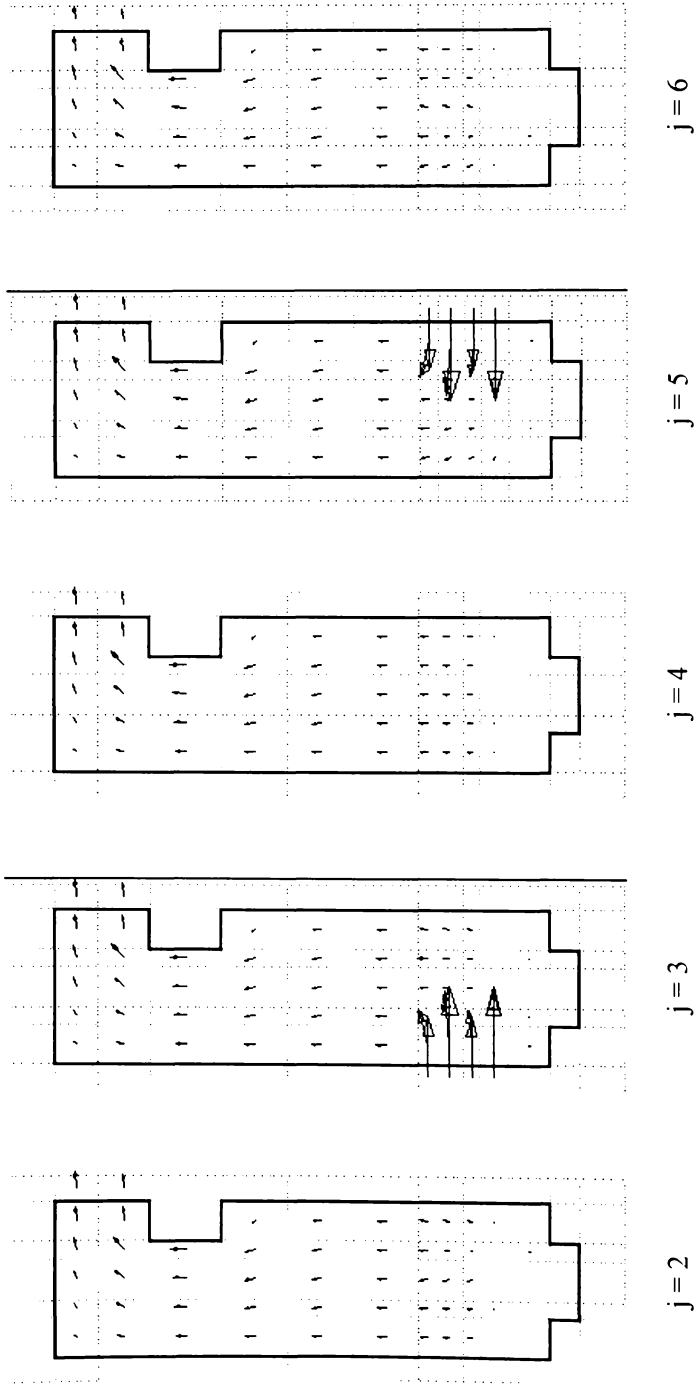
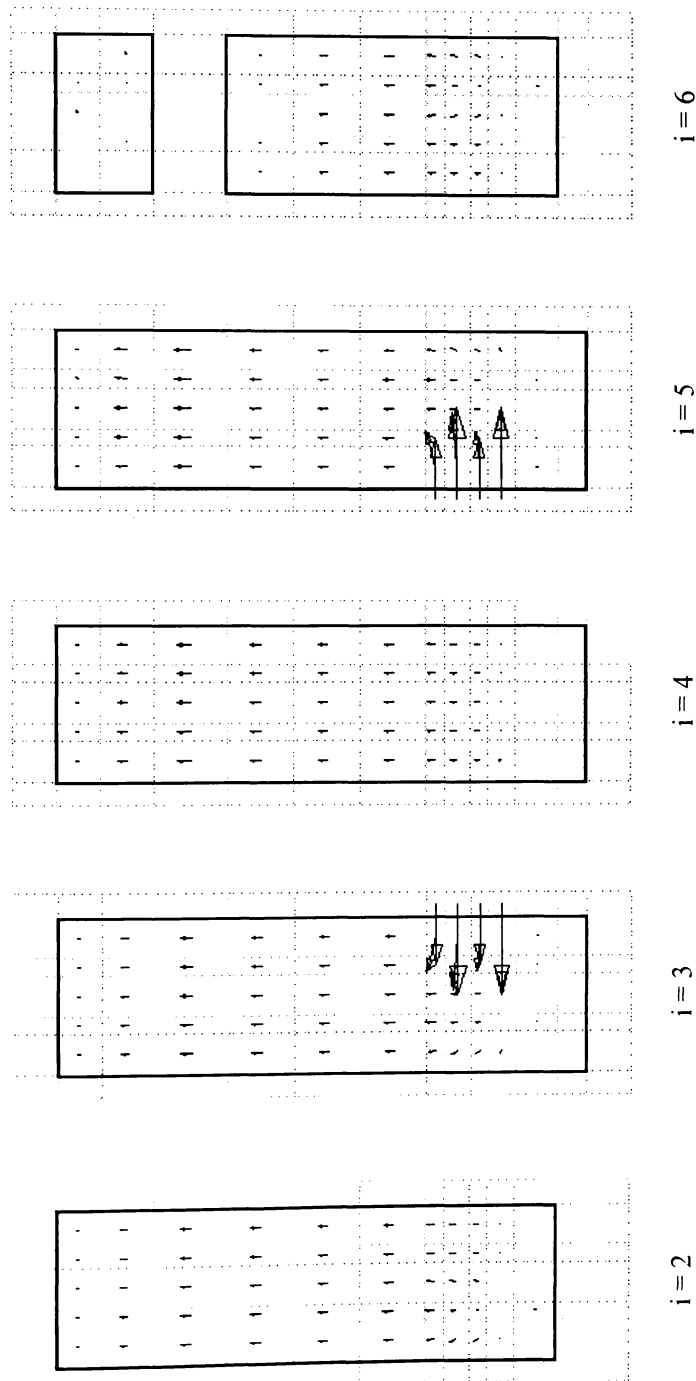


Fig. 5.4.2 Vitezele pentru o curgere laminară, în planele x-z pentru diverse  $j$ .

Fig. 5.4.3

Fig. 5.4.3 Vitezele pentru o curgere laminară, în planele  $y-z$  pentru diverse  $i$ .

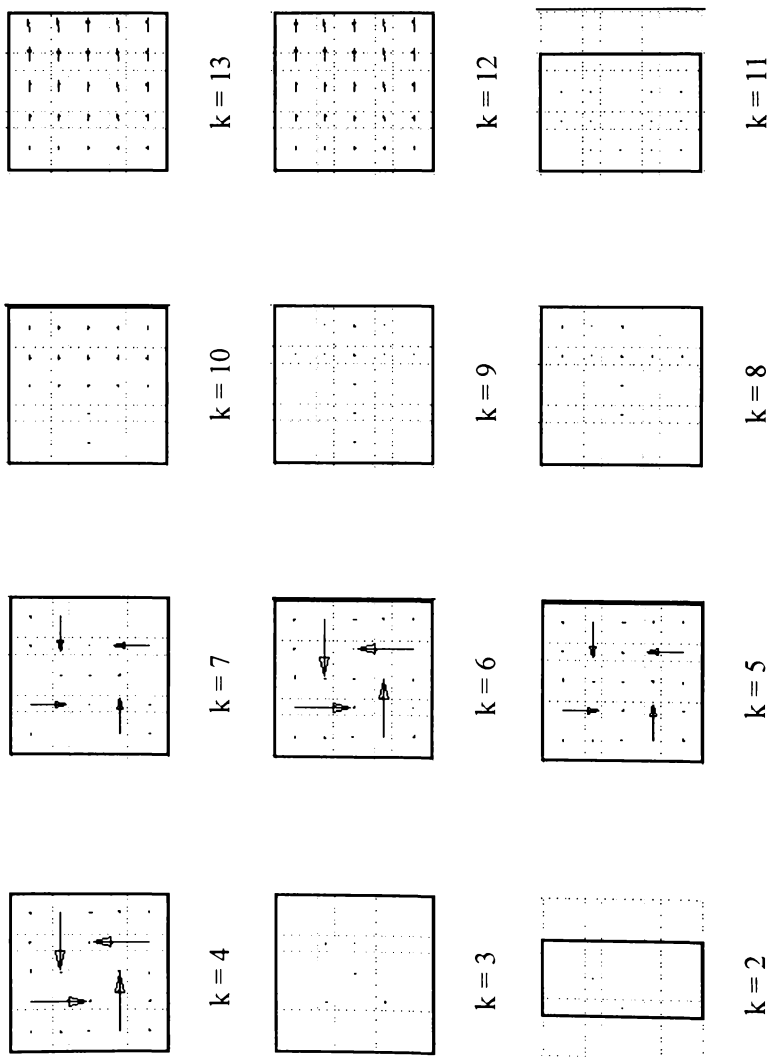


Fig. 5.4.4 Vitezele pentru o curgere laminară, în planele  $x-y$  pentru diverse  $k$ .

arzătoarelor (planele  $j = 3$  și  $j = 5$ ), iar în zona de ieșire mărimea vitezei este de cca. 6 m/s, de fapt nesemnificativă. Semnificative sunt doar direcțiile de curgere și ordinele de mărime. Figurile 5.4.3 și 5.4.4 prezintă în mod analog vitezele în cele cinci plane y-z (focarul văzut din spate) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $i = 2$  până la  $i = 6$  și în cele douăsprezece plane x-y (focarul văzut de sus) corespunzătoare celor douăsprezece rânduri de celule cu indicii  $k = 2$  până la  $k = 13$ . În planele  $k = 4, 5, 6, 7$  se vede tendința organizării arderii în sistem turbionar. Discretizarea relativ rară nu a permis detalierea câmpului prezentat.

**Etapa a II-a** inițializează curgerea turbulentă. Pentru aceasta, datele de intrare vor fi mărimile de ieșire ale etapei I, variabilele **ISOTHE** și **TURANF** vor fi **.TRUE.**, iar celelalte variabile logice vor fi **.FALSE.**

**Etapa a III-a** ia în considerație în plus și relațiile de transport pentru energie și disipație turbulentă. Pentru aceasta datele de intrare vor fi mărimile de ieșire ale etapei a II-a, variabila **ISOTHE** va fi **.TRUE.**, iar celelalte variabile logice vor fi **.FALSE.**

**Etapa a IV-a** inițializează arderea combustibilului și modelul radiației. Pentru aceasta, datele de intrare vor fi mărimile de ieșire ale etapei a III-a, iar variabilele **ISOTHE**, **VERBRE** și **VERANF** vor fi **.TRUE.** Dacă combustibilul este cărbune (cazul de față) variabila **ZUEND** trebuie să fie de asemenea **.TRUE.** Celelalte variabile logice vor fi **.FALSE.**

**Etapa a V-a** ia în considerație în plus și relațiile de transport pentru speciile chimice. Pentru aceasta datele de intrare vor fi mărimile de ieșire ale etapei a IV-a, variabilele **ISOTHE** și **VERBRE** vor fi **.TRUE.** Dacă combustibilul este cărbune (cazul de față) variabila **ZUEND** trebuie să fie de asemenea **.TRUE.** Celelalte variabile logice vor fi **.FALSE.**

**Etapa a VI-a** ia în considerație în plus și relația de transport pentru radiație. Pentru aceasta datele de intrare vor fi mărimile de ieșire ale etapei a V-a, variabilele **ISOTHE**, **STRAHL** și **VERBRE** vor fi **.TRUE.** Dacă combustibilul este cărbune (cazul de față) variabila **ZUEND** trebuie să fie de asemenea **.TRUE.** Celelalte variabile logice vor fi **.FALSE.**

**Etapa a VII-a** ia în considerație în plus și relația de transport pentru entalpie. Pentru aceasta datele de intrare vor fi mărimile de ieșire ale etapei a VI-a, variabilele **STRAHL** și **VERBRE** vor fi **.TRUE.** Dacă combustibilul este cărbune (cazul de față) variabila **ZUEND** trebuie să fie de asemenea **.TRUE.** Celelalte variabile logice vor fi **.FALSE.** În această etapă se fac de fapt bilanșurile energetice pe volumele celulelor (așa zise volume de control). Intră în funcțiune toate modelele energetice ale diverselor reacții chimice, dintre care se amintesc ca cele mai importante arderea volatilelor și a cocsului, și formarea și reducerea oxidului de carbon (modelul arderii particulei de cărbune). Rezultatele obținute în etapa a VII-a sunt prezentate în fig. 5.4.5 - 5.4.15.



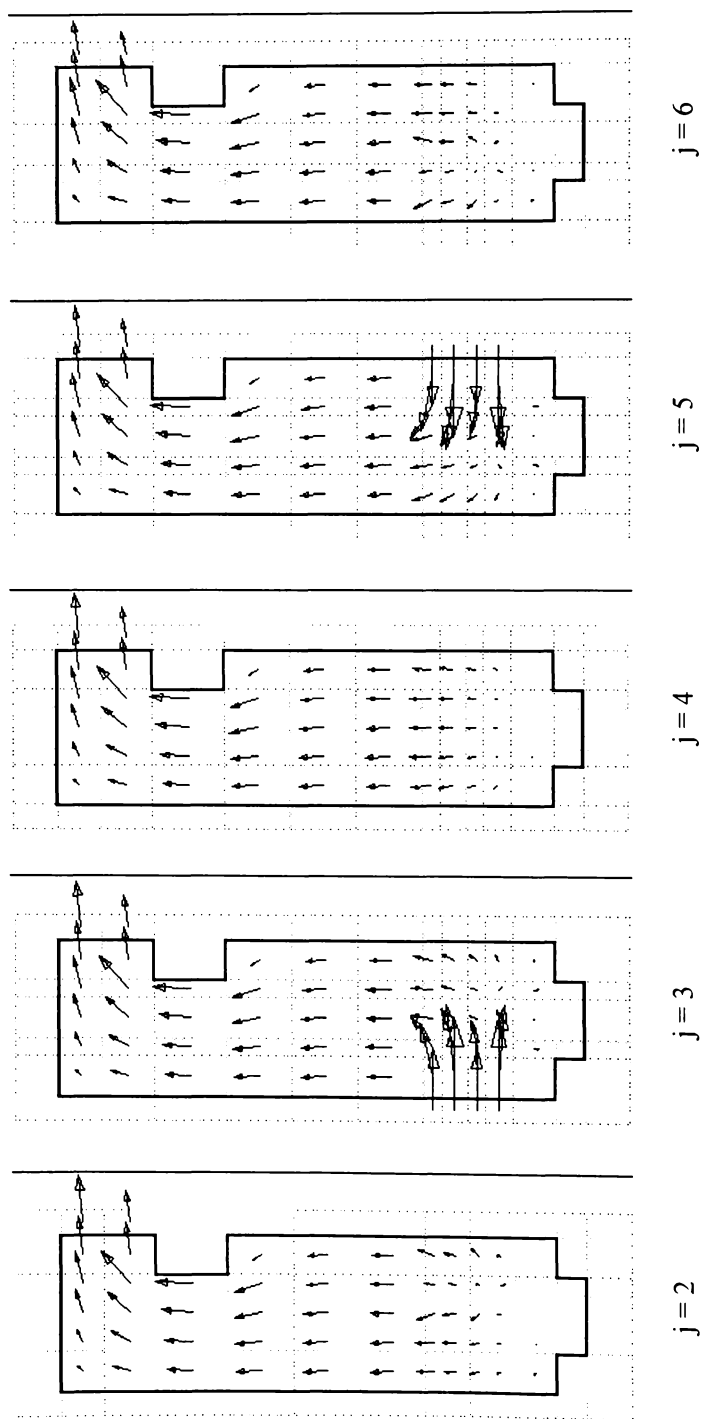


Fig. 5.4.5 Vitezele pentru o curgere turbulentă, în planele x-z pentru diverse  $j$ .

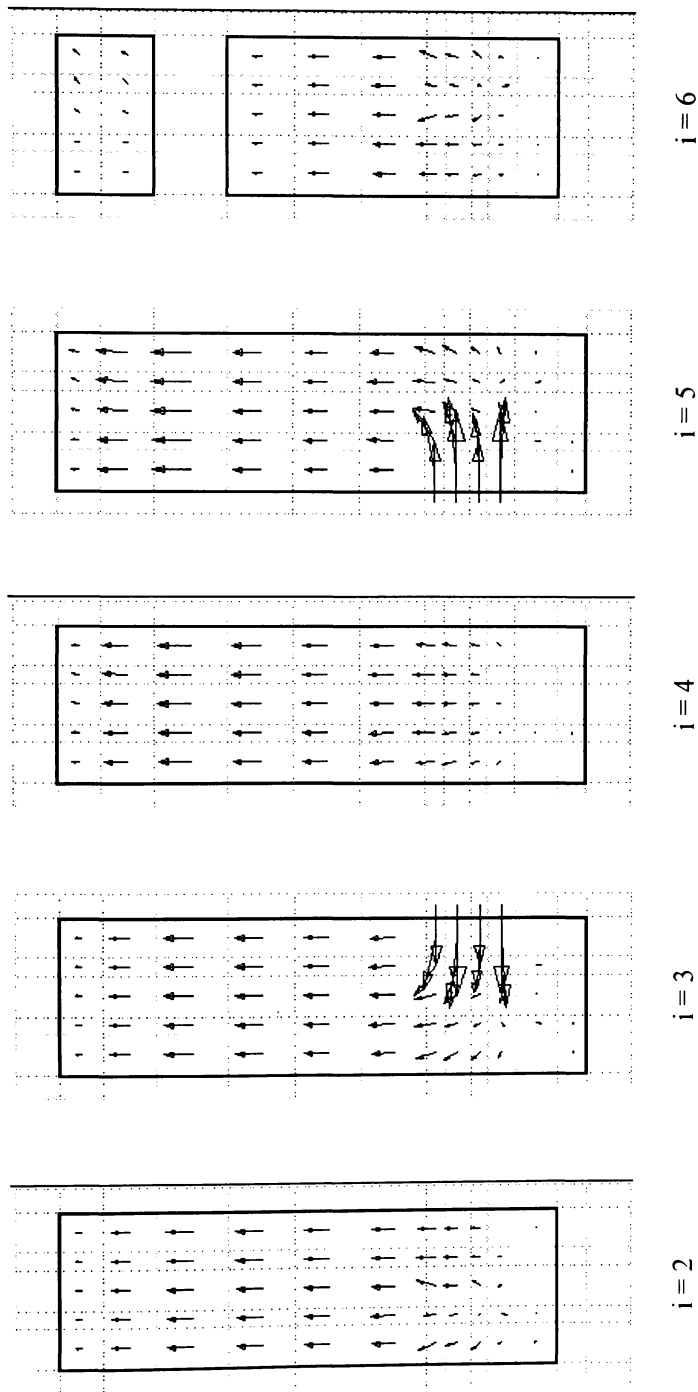


Fig. 5.4.6 Vitezele pentru o curgere turbulentă, în planele  $y-z$  pentru diverse  $i$ .

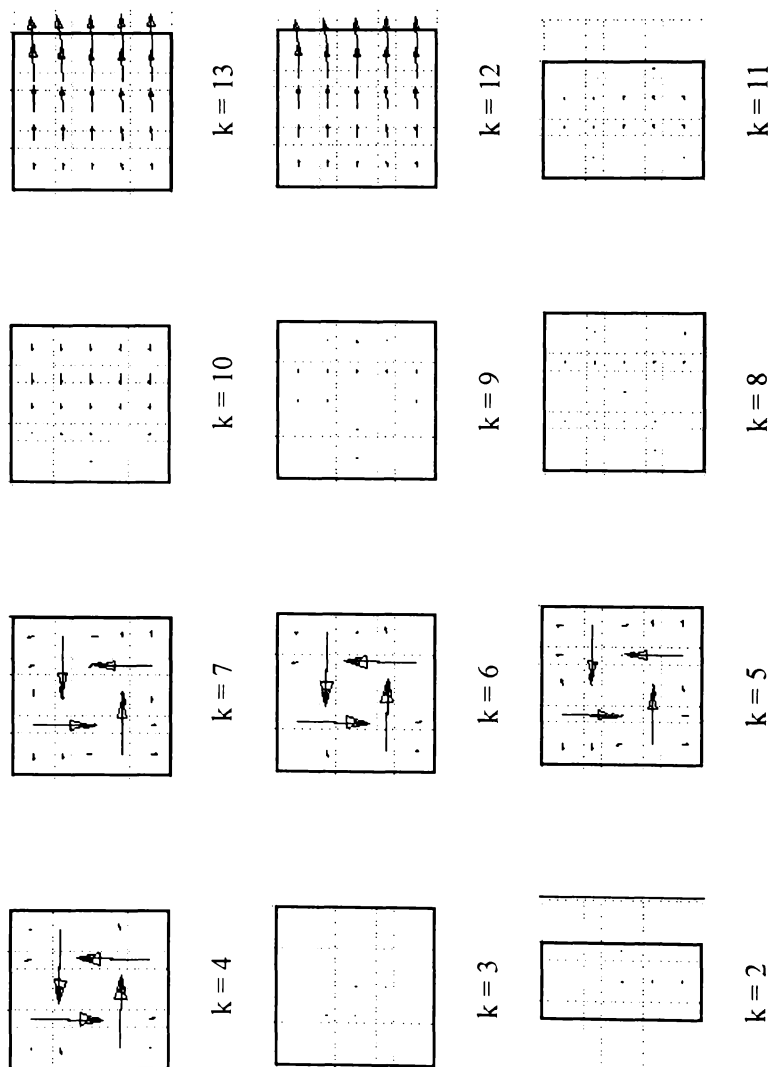


Fig. 5.4.7 Vitezele pentru o curgere turbulentă, în planele  $x-y$  pentru diverse  $k$ .

În fig. 5.4.5 - 5.4.7 sunt prezentate vitezele pentru o curgere turbulentă, neizotermă, în mod analog figurilor 5.4.2 - 5.4.4. Scara vitezelor în aceste figuri este de asemenea  $1 \text{ mm} = 2 \text{ m/s}$ . Vitezele de curgere sunt ceva mai mari decât la curgerea laminară, izotermă, iar în zona de ieșire ele sunt de cca. 15 - 20 m/s.

În fig. 5.4.8 - 5.4.9 sunt prezentate spectrele de energie cinetică turbulentă în cele cinci plane x-z (focarul văzut lateral) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $j = 2$  până la  $j = 6$ , respectiv în cele cinci plane y-z (focarul văzut din spate) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $i = 2$  până la  $i = 6$ . Energiile turbulente sunt mai mari în dreptul arzătoarelor și în zonele cu obstacole gazodinamice.

În fig. 5.4.10 - 5.4.11 sunt prezentate spectrele de disipație turbulentă în cele cinci plane x-z (focarul văzut lateral) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $j = 2$  până la  $j = 6$ , respectiv în cele cinci plane y-z (focarul văzut din spate) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $i = 2$  până la  $i = 6$ . Disipația maximă este în dreptul arzătoarelor, datorită concentrației mai mari de energie cinetică turbulentă.

În fig. 5.4.12 - 5.4.15 sunt prezentate temperaturile obținute, exprimate în [K]. Din cele 32 de plane care pot fi prezentate s-au ales patru, considerate a fi cele mai semnificative. Fig. 5.4.12 prezintă temperaturile în planul x-z (focarul văzut lateral) pentru  $j = 2$ , adică imediat lângă prretele lateral din dreapta focarului. Fig. 5.4.13 prezintă temperaturile în planul x-z pentru  $j = 3$ , adică prin planul arzătorului frontal din dreapta. Fig. 5.4.14 prezintă temperaturile în planul y-z (focarul văzut din spate) pentru  $i = 2$ , adică imediat lângă prretele frontal al focarului. Fig. 5.4.15 prezintă temperaturile în planul y-z pentru  $i = 3$ , adică prin planul central al focarului.

Temperaturile obținute sunt destul de scăzute, mult sub temperatura teoretică adiabatică, care pentru combustibilul dat, temperatura dată a aerului preîncălzit și cota de recirculare a gazelor arse este de cca. 1700 K. Temperatura teoretică adiabatică este ea înseși scăzută datorită puterii calorifice inferioare scăzute a combustibilului.

Vizualizarea rezultatelor de mai sus s-a făcut cu un post-procesor grafic scris pentru VISUAL BASIC de către Mezei Ferencz de la Universitatea Tehnică din Budapesta în 1993. Postprocesorul permite vizualizarea în plus a câmpului de presiuni, dar nu și a altor mărimi, cum ar fi concentrațiile speciilor chimice, a poluanților etc. Ca urmare, pentru mărimile care nu pot fi vizualizate nu se pot da decât valori globale, obținute prin prelucrarea fișierelor de ieșire.

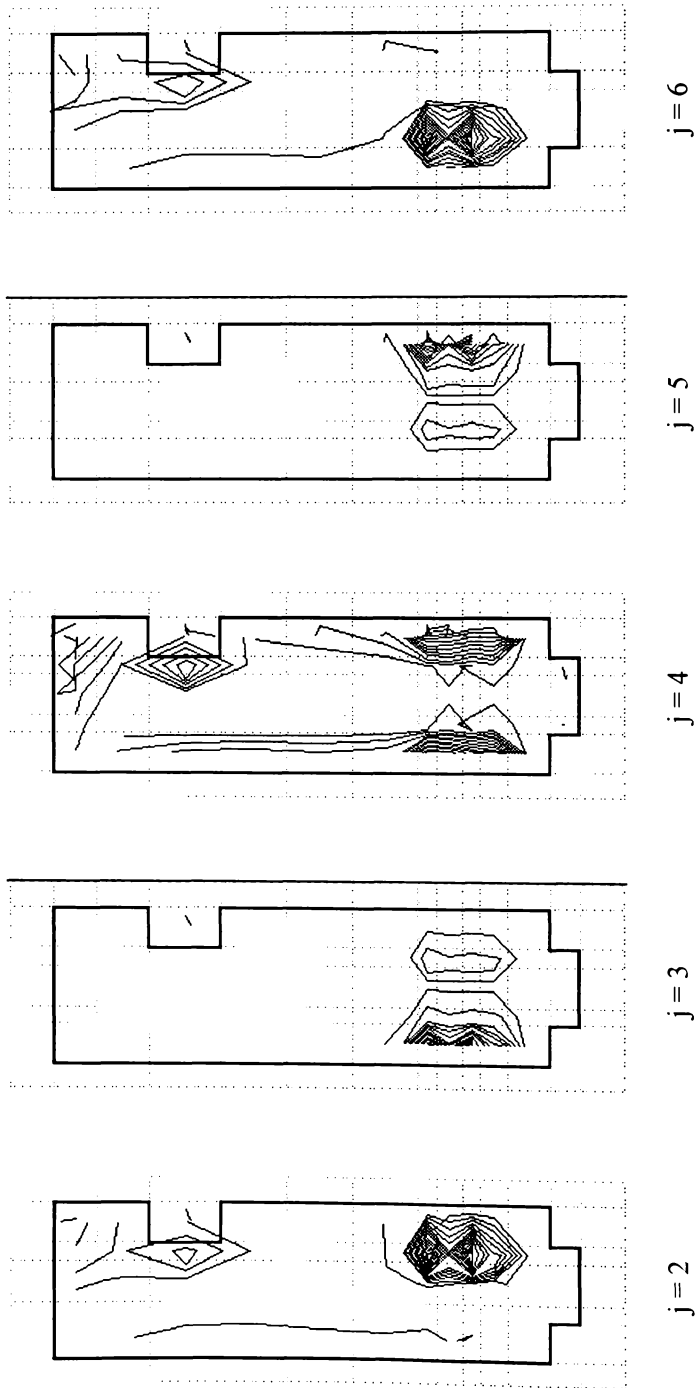


Fig. 5.4.8 Spectrele de energie cinetică turbulentă, în planele  $x-z$ , pentru diferite  $j$ .

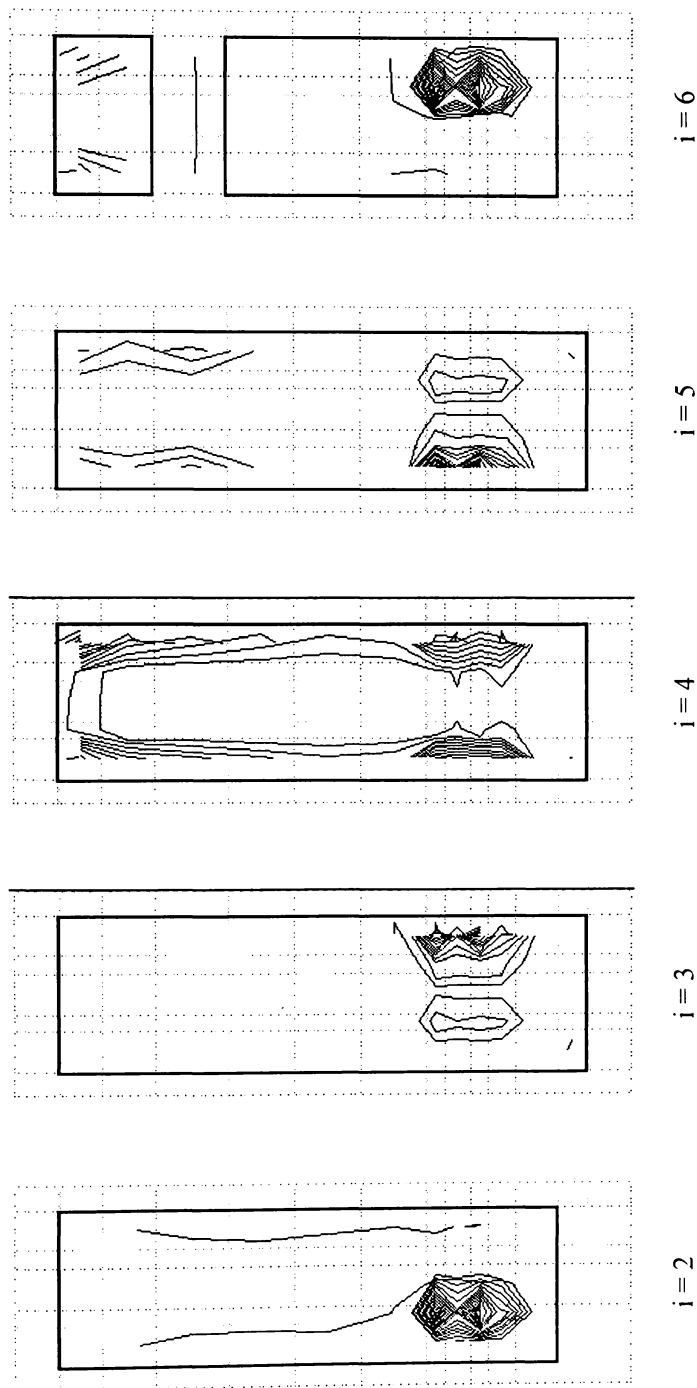


Fig. 5.4.9 Spectrele de energie cinetică turbulentă în planele  $y-z$ , pentru diferite  $i$ .

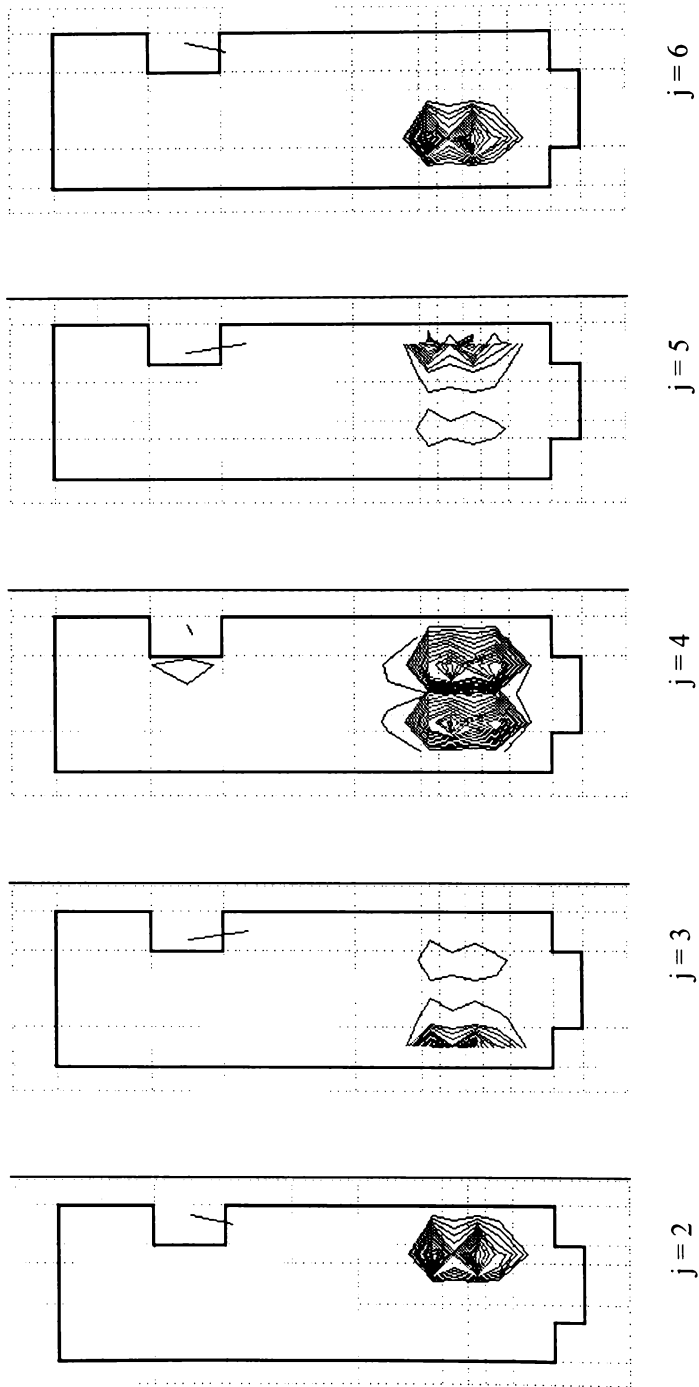


Fig. 5.4.10 Spectrele de disipație turbulentă, în planele  $x-z$ , pentru diferitele  $j$ .

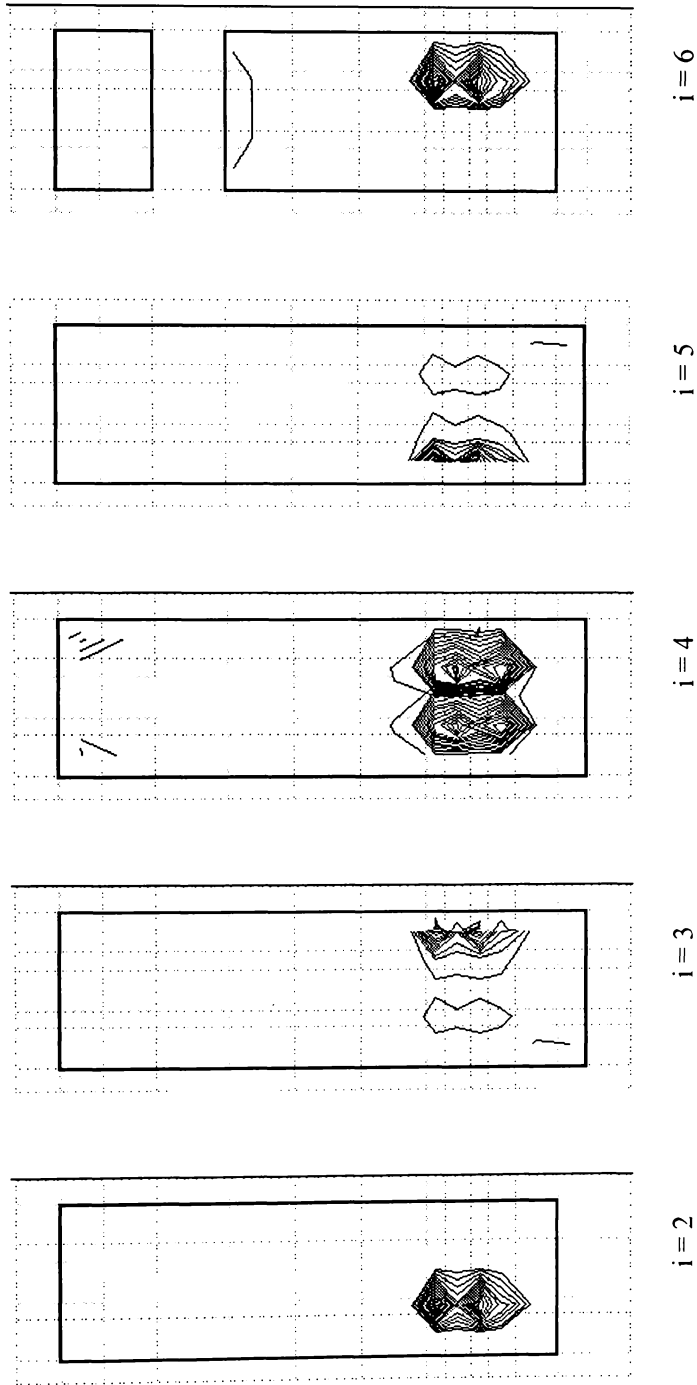


Fig. 5.4.11 Spectrele de disipație turbulentă în planele  $y-z$ , pentru diferite  $i$ .



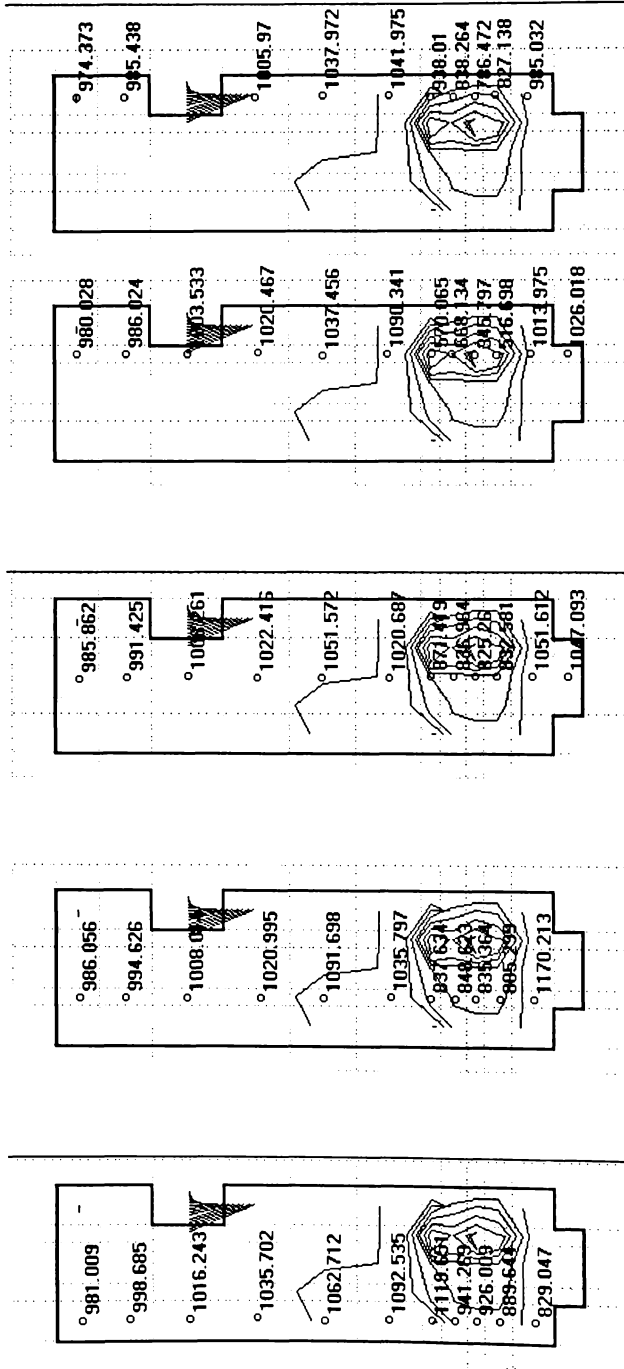


Fig. 5.4.12 Temperaturile, exprimate în [ K], în planul x-z pentru j = 2.

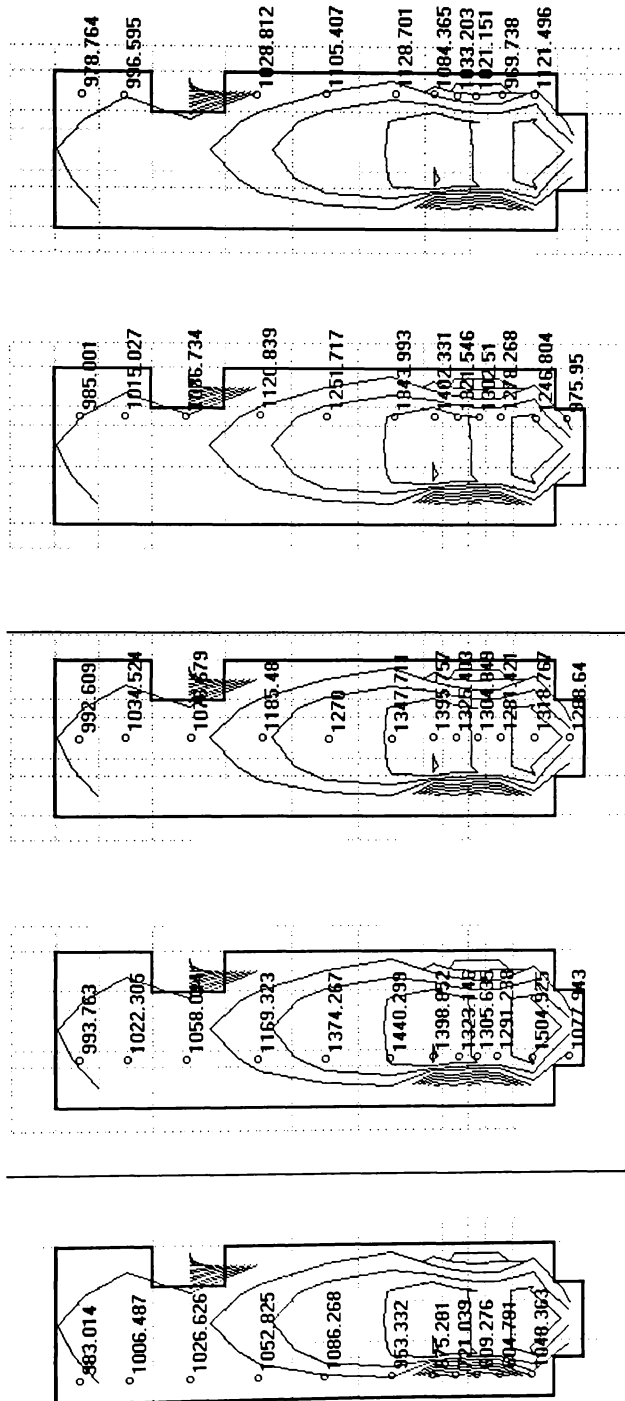


Fig. 5.4.13 Temperaturile, exprimate în [K], în planul x-z pentru  $j = 3$ .

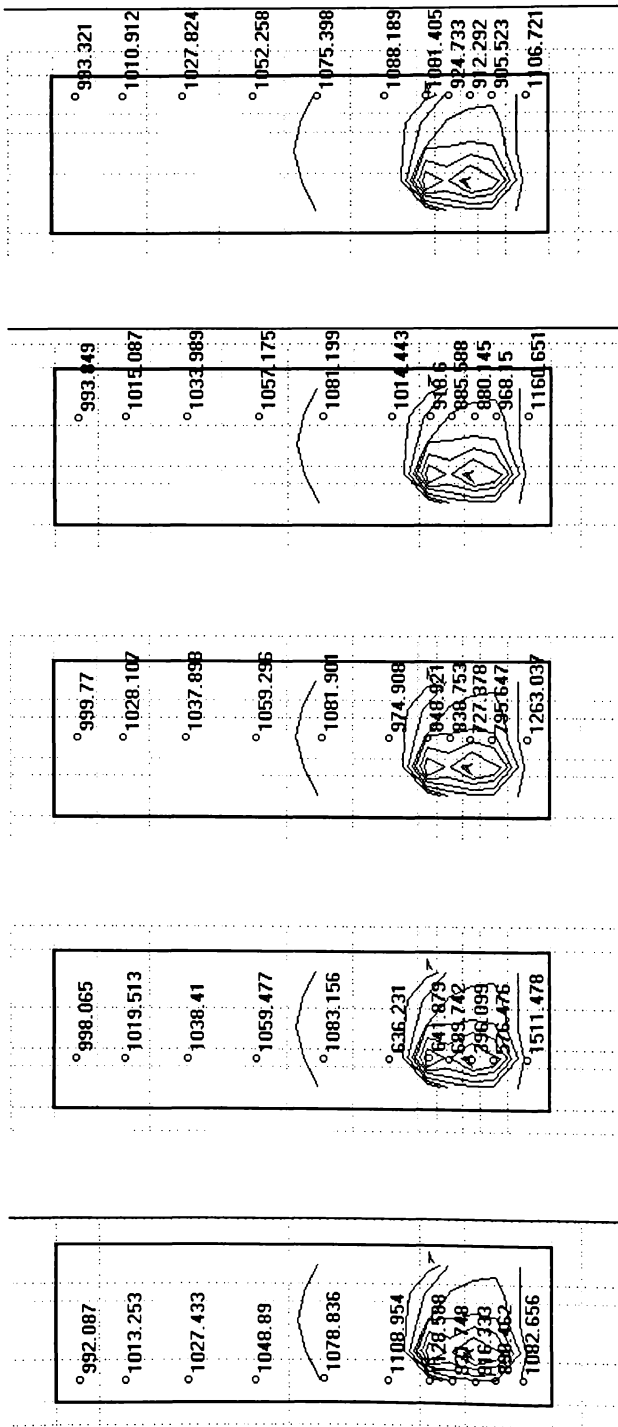


Fig. 5.4.14 Temperaturile, exprimate în [K], în planul y-z pentru  $i = 2$ .

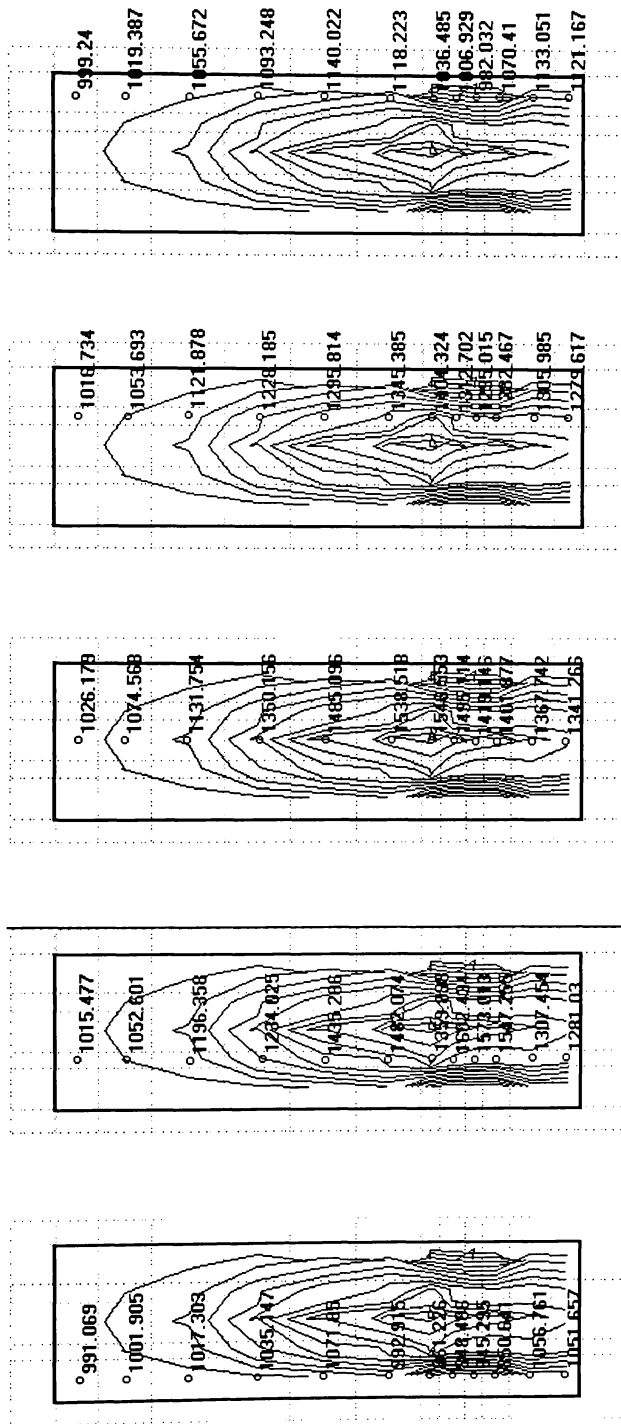


Fig. 5.4.15 Temperaturile, exprimate în [K], în planul y-z pentru  $i = 4$ .

### Modelarea noxelor de SO<sub>2</sub> și NO<sub>x</sub>.

Pentru modelarea noxelor cu programul FEUER 1.1 sunt necesare parcurgerea în prealabil a etapelor prezentate anterior, care permit obținerea distribuției vitezelor și a temperaturilor în focar. În continuare, comenzile pentru apelul rutinelor de modelare a noxelor se dau tot prin intermediul unor variabile logice, care în varianta originală a programului FIRE 1.1 sunt definite în programul principal. Aceste variabile și semnificația lor sunt prezentate în tabelul 5.4.3.

Tabelul 5.4.3

| Variabila | Semnificația pentru .TRUE.  |
|-----------|---|
| REAK      | Se cere calculul concentrațiilor SO <sub>2</sub> sau/și NO <sub>x</sub>                                     |
| SO2FRI    | Se cere calculul concentrațiilor SO <sub>2</sub> , indiferent dacă se introduce sau nu aditiv CaO.          |
| LCAOIN    | Se introduce aditiv CaO.  |
| LSO2TA    | Se calculează termenii sursă din relațiile de transport pentru SO <sub>2</sub> , CaO și CaSO <sub>4</sub> . |
| DESOET    | Cu model de formare a NO <sub>x</sub> De Soete.   |
| FENIMO    | Cu model de formare a NO <sub>x</sub> Fenimore.   |
| VDBJPP    | Cu model de formare a NO <sub>x</sub> Vonderbank-Pohl.  |

Variabila **REAK** este obligatoriu de poziționat **.TRUE.** la calculul noxelor și exclude efectuarea bilanțurilor energetice pe celule (deci nu se pot face simultan bilanțurile energetice și calculul noxelor).

Numai una din variabilele **DESOET**, **FENIMO** sau **VDBJPP** poate lua valoarea **.TRUE.**, deci nu se pot folosi simultan două modele diferite. Din considerațiile expuse la cap. 5.4.1 în varianta FEUER 1.1 implementată pe calculatoare IBM-PC este disponibil numai modelul De Soete.

Pentru rularea programului în vederea determinării concentrațiilor noxelor trebuie să pregătiți în prealabil trei fișiere care conțin:

- locurile unde se introduce în focar aditivul conținând calciu,
- spectre inițiale de concentrații de aditiv și poluanți de sulf,
- spectre inițiale de concentrații de poluanți de azot.

Datele introduse în primul fișier sunt similare cu datele privind modul de introducere a combustibilului în focar. Trebuie să definiți celulele prin care se introduce aditivul și cantitățile masice de aditiv introduse. Se pot folosi aceleași celule prin care se introduce combustibilul (de exemplu prin arzătoare). Aditivul introdus luat în considerare este numai oxid de calciu (CaO), alți

aditivi trebuie recalculați la echivalent CaO. Dacă se introduce de exemplu carbonat de calciu (CaCO<sub>3</sub>) sau dolomită, CO<sub>2</sub> care s-ar degaja suplimentar nu va fi luat în considerare. Dificultatea poate fi oarecum ocolită redefinind compoziția gazelor introduse prin arzătoare.

Cantitatea de aditiv introdusă este în funcție de raportul calciu/sulf dorit. Pentru rapoarte de Ca/S de 2 ... 3 [32] și pentru concentrația de sulf în combustibil de 1,7% rezultă că trebuie introdus 0,035 ... 0,05 kg Ca/kg combustibil. Considerând și că raportul molar al CaO/Ca este 1,4 cantitatea de aditiv introdusă este 0,05 ... 0,07 kg CaO/kg combustibil. Pentru cazanul de 420 t/h, având consumul de combustibil de 48 kg/s, cantitatea de aditiv CaO necesar a fi introdusă este de 2,5 ... 3,5 kg/s. În modelarea de față acest aditiv a fost introdus prin fantele de combustibil superioare ale celor patru arzătoare active, câte 0,8 kg/s prin fiecare arzător.

Datele introduse în fișierele conținând concentrații de aditiv și poluanți nu sunt semnificative, inițial ele pot fi chiar zero peste tot, deoarece oricum vor fi actualizate ulterior. Singurul lucru necesar este existența inițială a acestor fișiere. Programul FEUER 1.1 în varianta actuală nu are secvență de inițializare pentru aceste fișiere (cum are de exemplu pentru turbulență și ardere), astfel că ele trebuie generate manual, însă cu un editor de texte aceasta nu este o problemă.

Rezultatele se obțin în fișierele de ieșire (v. cap. 5.4.1) sub forma unor tabele de dimensiuni foarte mari, a căror listare ar ocupa numai ele cca. 200 de pagini. În anexă se prezintă spre exemplificare părți din aceste tabele. În tabelul 5.4.4 se prezintă un extras din tabelele de rezultate pentru celulele de la ieșirea din focar. Pentru restul valorilor s-a apelat la trasarea unor figuri cu ajutorul vizualizatorului FIRE 1.1. Tabelul 5.4.4 conține pentru celulele de ieșire indicii, temperaturile obținute, exprimate în K și concentrațiile de SO<sub>2</sub> fără a se introduce aditiv conținând Ca, respectiv cu introducerea de aditiv conținând Ca, precum și concentrațiile de NO<sub>x</sub> în echivalent NO<sub>2</sub>. Toate concentrațiile sunt exprimate în mg/m<sup>3</sup><sub>N</sub>, raportat la gaze de ardere uscate cu un conținut de oxigen de referință O<sub>2,ref</sub> = 6 %.

Tabelul 5.4.4

| I | J | K  | N   | T(N)       | SO <sub>2</sub> | SO <sub>2</sub> (SNCR) | NO <sub>2</sub> |
|---|---|----|-----|------------|-----------------|------------------------|-----------------|
| 6 | 2 | 12 | 516 | 0.9837D+03 | 3.999D+03       | 2.238D+03              | 2.448D+02       |
| 6 | 2 | 13 | 517 | 0.9722D+03 | 3.955D+03       | 2.213D+03              | 2.421D+02       |
| 6 | 3 | 12 | 530 | 0.9857D+03 | 3.948D+03       | 2.210D+03              | 2.417D+02       |
| 6 | 3 | 13 | 531 | 0.9745D+03 | 3.946D+03       | 2.208D+03              | 2.416D+02       |
| 6 | 4 | 12 | 544 | 0.9868D+03 | 3.991D+03       | 2.234D+03              | 2.444D+02       |
| 6 | 4 | 13 | 545 | 0.9754D+03 | 4.012D+03       | 2.245D+03              | 2.456D+02       |
| 6 | 5 | 12 | 558 | 0.9851D+03 | 3.931D+03       | 2.200D+03              | 2.407D+02       |
| 6 | 5 | 13 | 559 | 0.9747D+03 | 3.940D+03       | 2.205D+03              | 2.412D+02       |
| 6 | 5 | 12 | 572 | 0.9837D+03 | 3.909D+03       | 2.188D+03              | 2.393D+02       |
| 6 | 5 | 13 | 573 | 0.9729D+03 | 3.948D+03       | 2.210D+03              | 2.417D+02       |

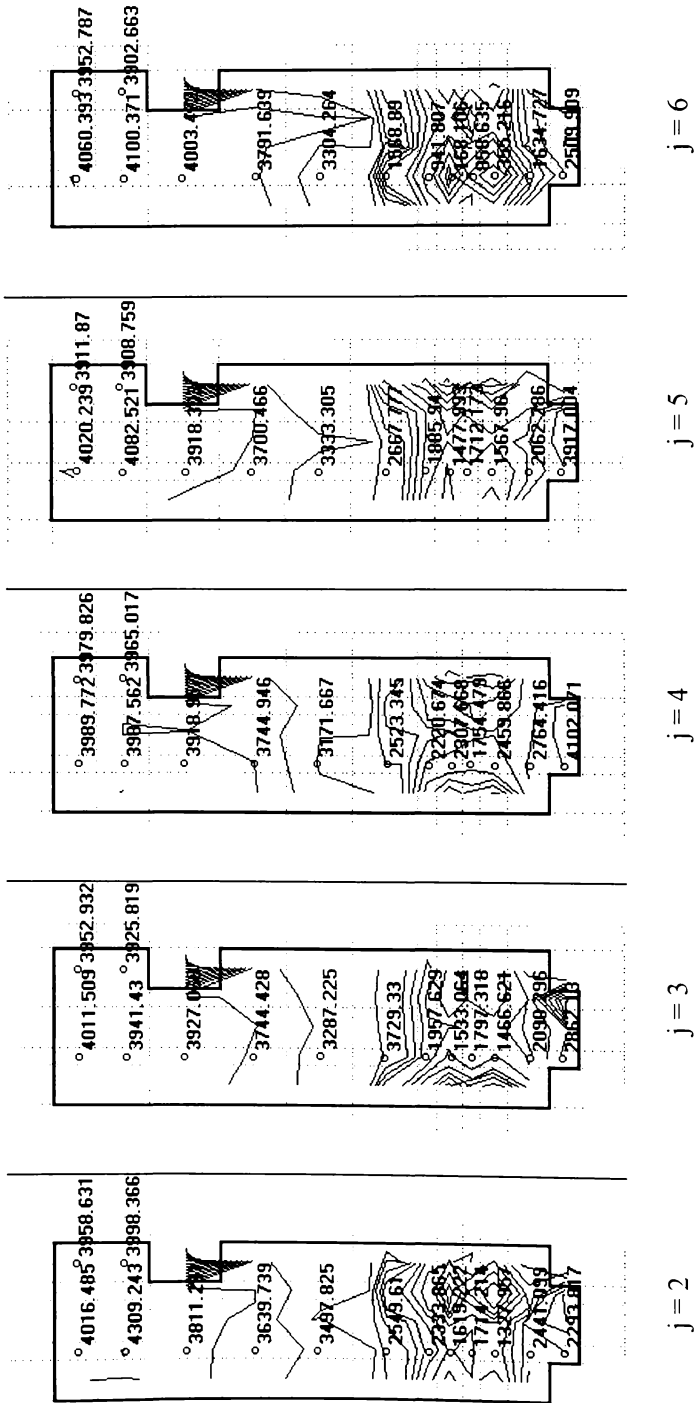


Fig. 5.4.16 Spectrele de concentrații SO<sub>2</sub>, exprimate în [mg/m<sup>3</sup>N], în planele x-z, pentru diferite j, fără introducerea de aditiv echivalent CaO.

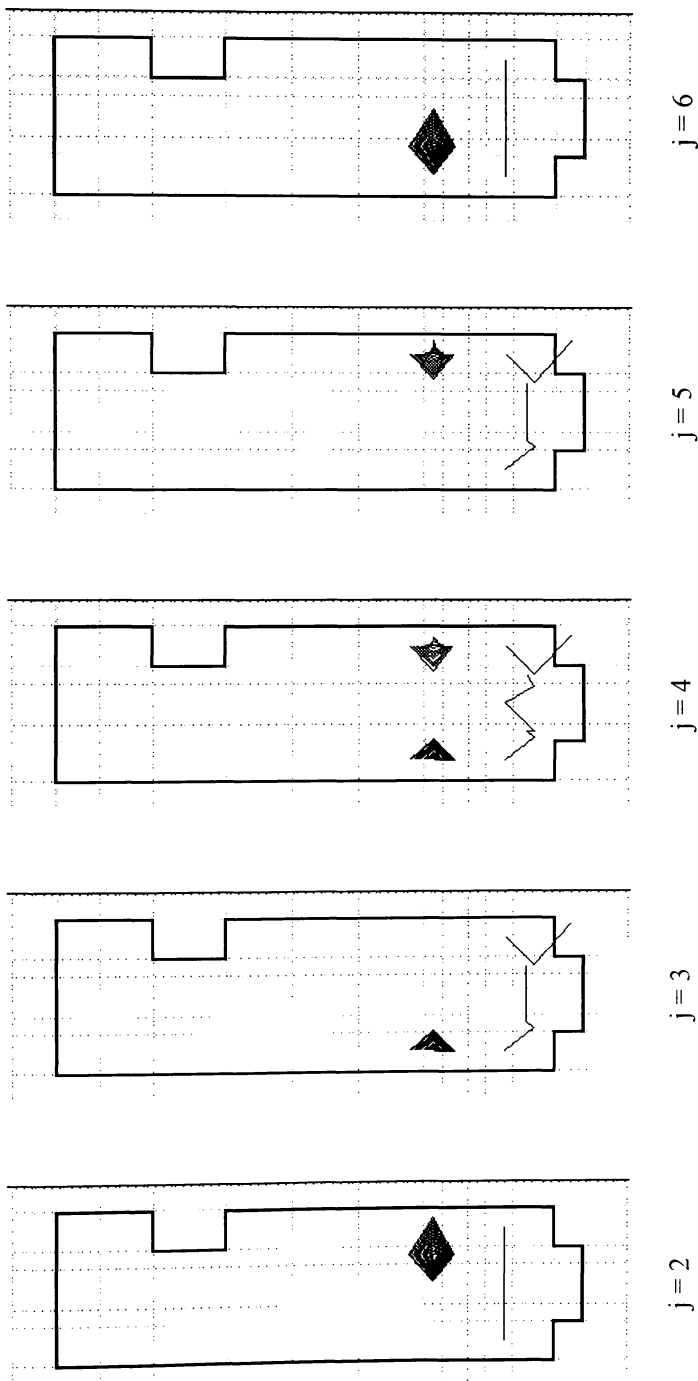


Fig. 5.4.17 Spectrele de concentrații aditiv echivalent  $\text{CaO}$ , în planele  $x-z$  pentru diverse  $j$ .



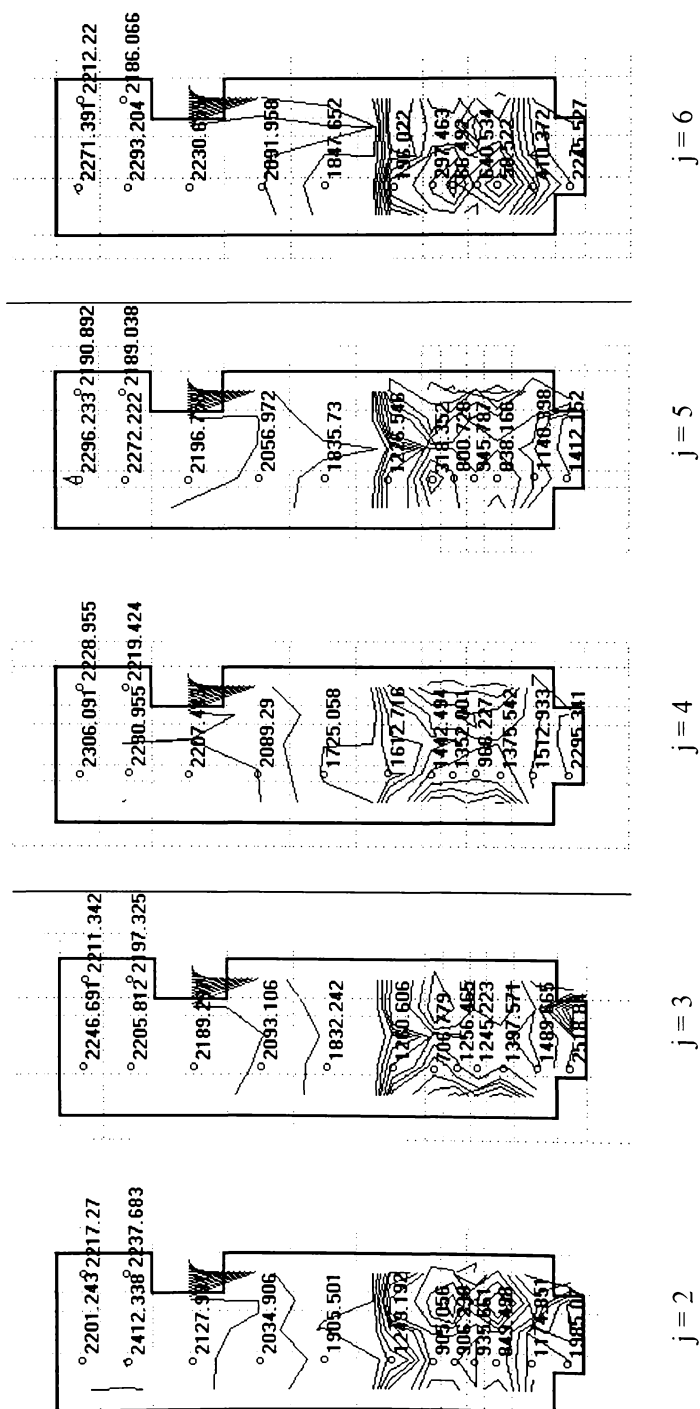


Fig. 5.4.18 Spectrele de concentrații  $\text{SO}_2$ , exprimate în  $[\text{mg}/\text{m}^3\text{N}]$ , în planele x-z, pentru diferitele j, cu introducerea de aditiv echivalent CaO.

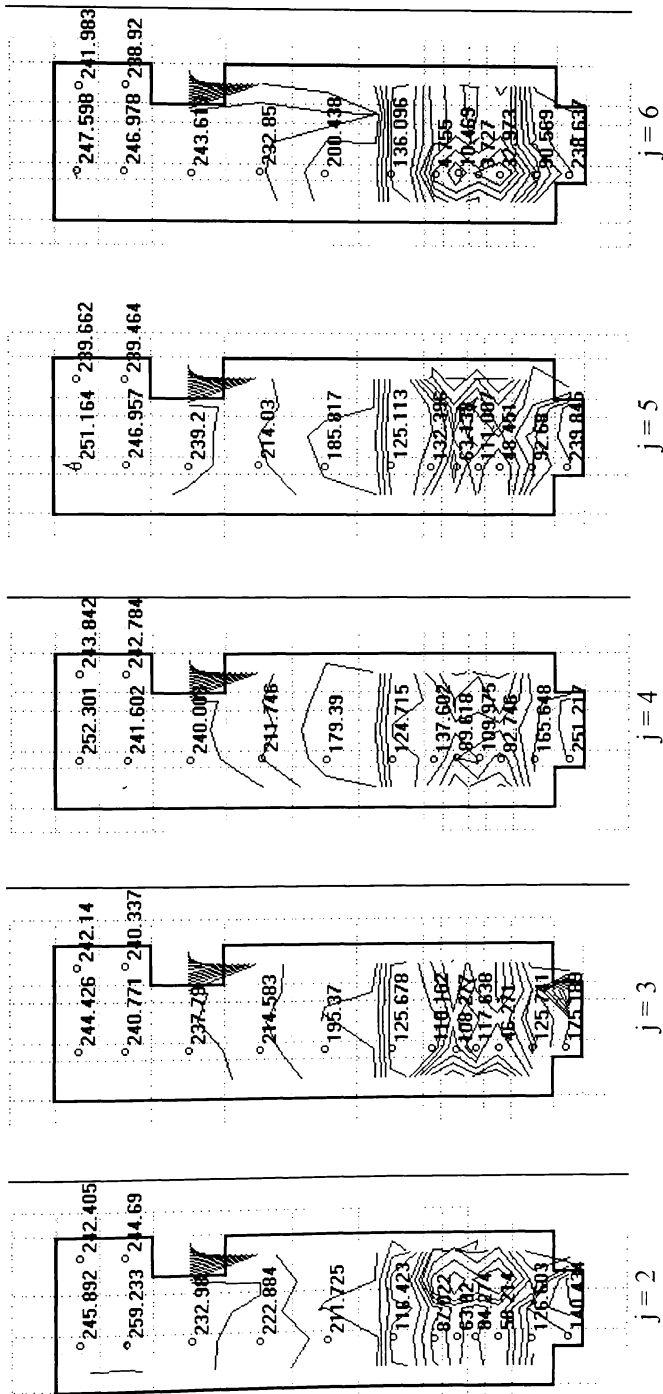


Fig. 5.4.19 Spectrele de concentrații NO<sub>2</sub>, exprimate în [mg/m<sup>3</sup>N], în planele x-z, pentru diferite j.

După cum s-a spus, vizualizatorul FIRE 1.1 nu este prevăzut cu posibilitatea vizualizării concentrațiilor speciilor chimice, dar se poate face următorul artificiu: valorile calculate și a căror vizualizare se dorește se copiază din fișierele de ieșire în coloana corespunzătoare presiunii din fișierul \*.dt4. Acest lucru se poate face cu un mic program adițional, sau cu un editor de texte care permite această manevră, de exemplu CONTEXT. Apoi se cere vizualizarea presiunii, rezultând spectrul de concentrații dorit.

În fig. 5.4.16 sunt prezentate spectrele de concentrații de SO<sub>2</sub> în cele cinci plane x-z (focarul văzut lateral) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $j = 2$  până la  $j = 6$  pentru cazul că nu se introduce aditiv suplimentar conținând CaO. Variațiile mari ale concentrațiilor de SO<sub>2</sub> se găsesc în dreptul arzătoarelor.

În fig. 5.4.17 sunt prezentate spectrele de concentrații de CaO în cele cinci plane x-z (focarul văzut lateral) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $j = 2$  până la  $j = 6$ . Concentrațiile mari de CaO sunt grupate în dreptul fantelor de combustibil superioare ale arzătoarelor active.

În fig. 5.4.18 sunt prezentate spectrele de concentrații de SO<sub>2</sub> în cele cinci plane x-z (focarul văzut lateral) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $j = 2$  până la  $j = 6$  pentru cazul că se introduce aditiv suplimentar conținând CaO. Apar modificări atât pentru valorile absolute ale concentrațiilor, cât și în ce privește distribuția în jurul punctelor de introducere a CaO.

Dacă nu se introduce aditiv conținând Ca și se consideră că întreaga cantitate de sulf din combustibil se transformă în SO<sub>2</sub>, concentrația medie de SO<sub>2</sub> în celulele de ieșire ar trebui să atingă valori de cca. 12000 mg/m<sup>3</sup><sub>N</sub>, ceea ce este evident exagerat. Având în vedere că nu se atinge echilibrul chimic la arderea sulfului și că cenușa conține cca. 12% echivalent CaO, rezultă la ieșire o concentrație medie de SO<sub>2</sub> de 3968 mg/m<sup>3</sup><sub>N</sub>, în concordanță cu valorile măsurate. Dacă se introduce în plus aditivul CaO în cantitatea susmenționată, concentrație medie de SO<sub>2</sub> scade la 2215 mg/m<sup>3</sup><sub>N</sub>.

În fig. 5.4.19 sunt prezentate spectrele de concentrații de NO<sub>2</sub> echivalent în cele cinci plane x-z (focarul văzut lateral) corespunzătoare celor cinci rânduri de celule cu indicii  $j = 2$  până la  $j = 6$ .

Concentrația medie de NO<sub>2</sub> echivalent în celulele de ieșire este de 242 mg/m<sup>3</sup><sub>N</sub>, în concordanță cu valorile măsurate.

Rezultatele obținute au fost comparate atât cu valori măsurate [124] cât și cu valori date de autorii altor simulări [12, 13, 22, 125, 126, 127].

## 6: CERCETĂRI EXPERIMENTALE.

### 6.1 Mijloace de măsurare a noxelor.

Date fiind concentrațiile foarte mici din punct de vedere chimic ale diferitelor noxe, pentru măsurarea acestora este necesară o aparatură cu o sensibilitate adecvată. Un astfel de aparat este TESTO 33 [128], prezentat în continuare.

Testo 33 este un sistem de măsurare mobil pentru analiza unei probe individuale de gaz, măsurarea presiunii și temperaturii. El este adecvat pentru controlul rapid și reglarea cu acuratețe a arzătoarelor. Poate măsura concentrațiile următoarelor componente:

- oxigen ( $O_2$ ),
- bioxid de carbon ( $CO_2$ ),
- oxid de carbon ( $CO$ ),
- bioxid de sulf ( $SO_2$ ),
- bioxid de azot ( $NO_2$ ),
- suma dintre bioxidul de azot și oxidul de azot ( $NO_x$ ),
- randamentul (eficiența) arderii,
- coeficientul de exces de aer
- tirajul,
- temperatura la coș.

Testo 33 este format dintr-un instrument ① și o unitate de analiză ②. Instrumentul prelucrează datele măsurate. El este echipat cu o interfață RS 232 standard cu care poate fi conectat la o mini imprimantă ③ sau la un calculator de tip IBM-PC. Unitatea de analiză conține celulele de analiză chimică, pompa de absorbție, separatorul de condens și senzorul de presiune.

Pompa de absorbție preia proba de gaz care va fi examinată prin sonda ④. Proba de gaz este curățată în separatorul de condens și prin traversarea unui filtru, iar apoi este trimisă la celulele de analiză. Semnalul dat de senzorii din celulele de analiză este amplificat, liniarizat, digitizat și afișat.

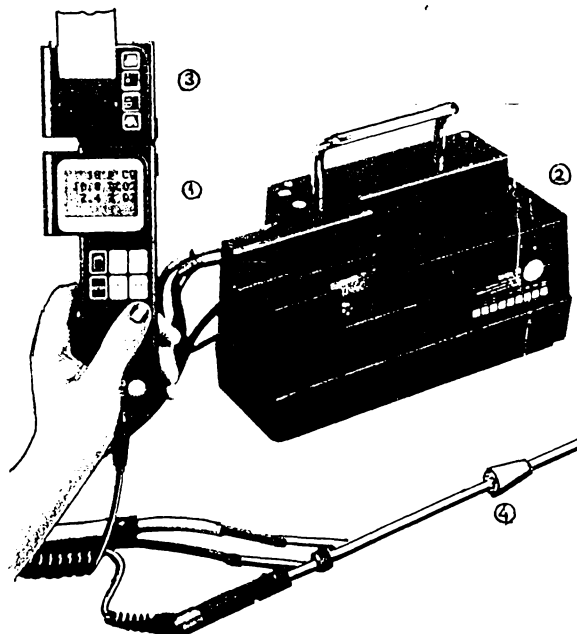


Fig. 6.1.1 Aparatul Testo 33.

Descrierea instrumentului de măsură al Testo 33:

1. Mufă de alimentare.
2. Interfață pentru conectarea mini imprimantei sau a calculatorului.
3. Compartimentul bateriilor.
4. Ecran de afișare cu 4 linii (3 valori măsurate și o linie de stare).
5. Pornit/Oprit. Execută funcțiile pornit, autotest, calibrare, selecție combustibil.
6. Mod de măsurare. Comută între măsurarea propriu-zisă și indicarea mărimilor măsurate sau calculate.
7. Pornit/Oprit măsurarea. Pornește și oprește pompa de absorbție. Menține valorile măsurate.
8. Salt la modul dorit.
9. Salt la meniu. Alege combustibilul, modul de măsurare, modul de lucru (modul de lucru al instrumentului, variabilele măsurate, interfața RS-232 etc.)
10. Confirmare.
11. Mufă de legătură cu unitatea de măsurare (14 fire).
12. Mufă de legătură pentru măsurarea temperaturii (8 fire).
13. Două ieșiri analogice.

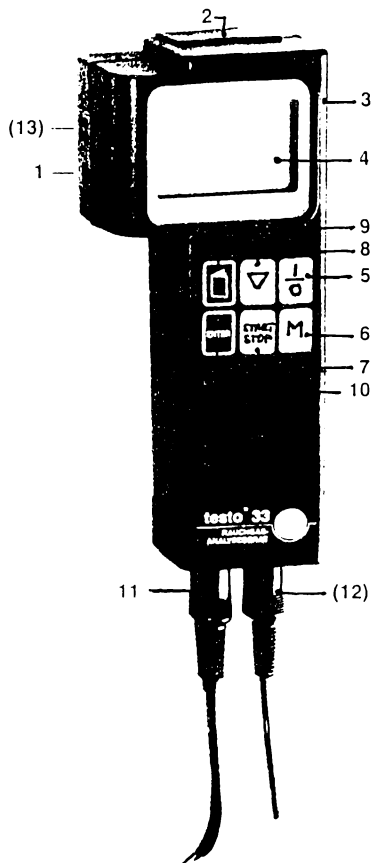


Fig. 6.1.2 Aparatul de măsură al Testo 33.

Pentru analiza probei de gaz aparatul Testo 33 este dotat cu senzori electrochimici cu lichid [129]. Acești senzori prezintă mai multe avantaje: sunt miniaturali, robuști, nu necesită o întreținere deosebită, sunt ușor manevrabili și relativ accesibili ca preț. Principiul de bază constă într-o reacție fizico-chimică a componentei ce trebuie măsurată, în urma căruia senzorul generează un curent electric care constituie semnalul proporțional cu concentrația măsurată.

Senzorii pot fi cu doi sau cu trei electrozi. Pentru măsurarea concentrației de  $O_2$  se folosește un senzor cu doi electrozi. Anodul este format din plumb și prin oxidare furnizează electronii necesari reacției de analiză, ca urmare el se consumă în timp. Durata sa de viață este de cca. trei ani. Pentru determinarea gazelor

toxice ( $\text{CO}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ) se folosesc senzori cu trei electrozi. Aceștia au avantajul că electrozii nu se consumă, dar în timp apare un fenomen de îmbătrânire care reduce din capacitatea lor catalitică. Durata de viață a unui senzor cu trei electrozi este de cca. doi ani. Domeniile de măsură ale acestor senzori sunt prezentate în tabelul 6.1.1.

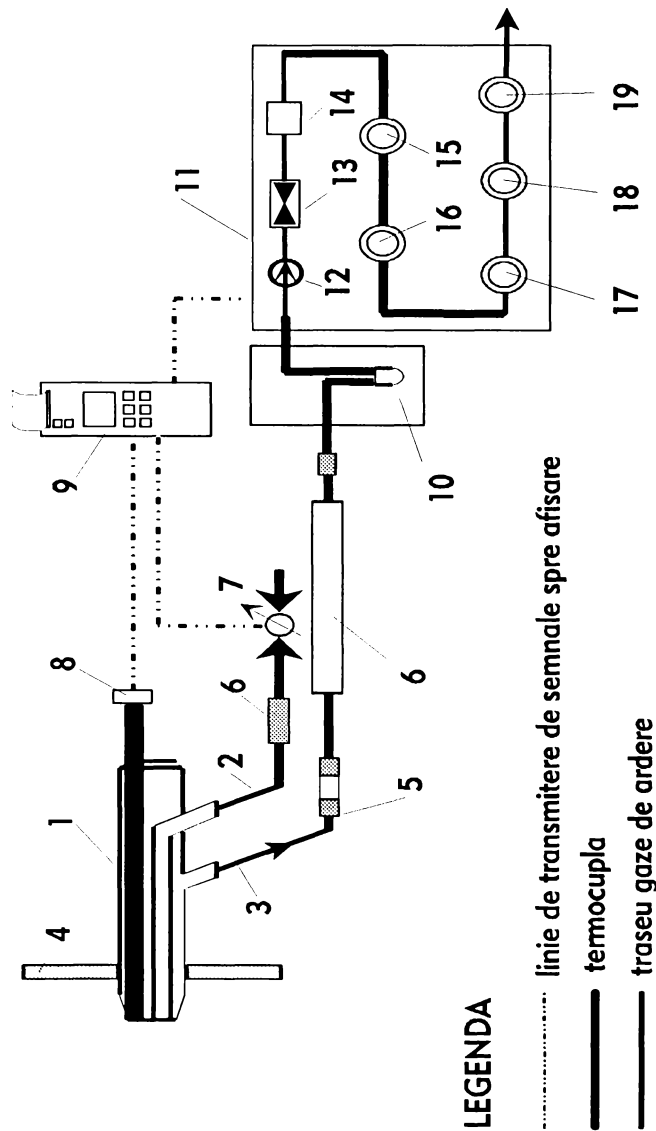
Tabelul 6.1.1

| Tipul constructiv | Domeniul de măsură | Semnal de ieșire               | Domeniul de temperatură |
|-------------------|--------------------|--------------------------------|-------------------------|
| $\text{O}_2$      | 0 ... 25 %         | 20 $\mu\text{A}/\% \text{O}_2$ | -15...+40°C             |
| CO                | 0...20000 ppm      | 0,03 $\mu\text{A}/\text{ppm}$  | -5...+40°C              |
| $\text{SO}_2$     | 0... 2000 ppm      | 0,1 $\mu\text{A}/\text{ppm}$   | -15...+40°C             |
| NO                | 0... 2000 ppm      | 0,1 $\mu\text{A}/\text{ppm}$   | -5...+40°C              |
| $\text{NO}_2$     | 0... 800 ppm       | 1,4 $\mu\text{A}/\text{ppm}$   | -15...+40°C             |

Alte date tehnice ale aparatului Testo 33 sunt prezentate în tabelul 6.1.2.

Tabelul 6.1.2

| Mărimă măsurată     | Senzor                 | Rezoluție      | Acuratețe                                  | Timp de răspuns |
|---------------------|------------------------|----------------|--|-----------------|
| Temperatură         | termocuplu NiCr - Nial | 0,1 °C<br>1 °C | ±0,5 %<br>(0-100)°C<br>±0,5 %<br>în rest   | -               |
| Presiune            | diferențial            | 0,01 mbar      | ±0,03 mbar<br>(0-3)mbar<br>±2 %<br>în rest | -               |
| Conc. $\text{O}_2$  | electroch.             | 0,1 % vol      | ±0,2 %                                     | 40 sec.         |
| Conc. $\text{CO}_2$ | calcul                 | 0,1 % vol      | 0,1 %                                      | 40 sec.         |
| Conc. CO            | electroch.             | 0,1 % vol      | ±20 ppm<br>(0-400)ppm<br>±5 %<br>în rest   | 60 sec.         |
| Conc. NO            | electroch.             | 0,1 % vol      | ±0,1 %                                     | 60 sec.         |



**Fig. 6.1.3** Schema funcțională a aparatului TESTO 33

1 - sondă, 2 - conductă de gaze pentru determinarea presiunii, 3 - conductă de gaze pentru analiză, 4 - peretele camerei de ardere, 5 - filtru capcană, 6 - furtun încălzit electric, 7 - aparat pentru măsurarea presiunii, 8 - termocuplu, 9 - calculator cu sistem de afișare, 10 - stație de preparare a gazelor, 11 - corpul analizorului, 12 - pompă, 13 - tub capilar, 14 - cameră de liniștire, 15 - senzor de O<sub>2</sub>, 16 - senzor de CO, 17 - senzor de NO, 18 - senzor de SO<sub>2</sub>, 19 - senzor de NO<sub>2</sub>.

Proba de analiză (amestec de gaze de ardere din focar sau fum) este trecută prin două ramificații: una este necesară determinării diferenței de presiune dintre camera de ardere sau canalul de gaze și mediul ambiant, iar cealaltă servește filtrării, preparării și analizei efective a amestecului de gaze.

Filtrul capcană are rolul de a reține particulele de funingine și o parte din umiditate. Deoarece  $\text{SO}_2$  și  $\text{NO}_2$  sunt foarte solubili în apă, pentru a evita alterarea probei prelevate se impune separarea și eliminarea rapidă a apei din proba de gaz. Această separare are loc în așa numita stație de preparare, prin răcirea bruscă a probei la o temperatură sub  $5^\circ\text{C}$ . Tubul capilar și camera de liniștire atenuază pulsațiile de presiune datorită funcționării pompei și creează condițiile necesare pentru difuzia componentelor în senzori. Proba trece apoi prin cei cinci senzori ai aparatului.

Toate semnalele sunt transmise la calculator, care înglobează și o unitate de afișare. Afișarea se poate face pe monitor sau și pe hârtia termosensibilă a unei mini imprimante. Pe lângă compoziția presiunea și temperatura gazelor aparatul determină și temperatura mediului ambiant. Calculatorul determină prin calcul și alți parametri specifici procesului de ardere cum ar fi: concentrația de  $\text{CO}_2$ , coeficientul excesului de aer  $\lambda$  și randamentul arderii. Valorile măsurate sau calculate sunt raportate la condiții normale de temperatură și presiune, respectiv la o concentrație standardizată de  $\text{O}_2$  în fum, în funcție de tipul combustibilului folosit. Concentrațiile se pot afișa în ppm sau  $\text{mg}/\text{m}^3$  și reprezintă analiza gazelor uscate. Analizorul are o memorie proprie care poate stoca 100 de seturi de date măsurate. Pentru un număr de măsurători mai mare este necesară cuplarea la un calculator de tip IBM-PC dotat cu un soft corespunzător și care face și prelucrarea și prezentarea grafică.

Măsurătorile se pot efectua în regim continuu sau periodic. A doua modalitate este preferabilă deoarece asigură între măsurători o spălare cu aer a senzorilor, permițând calibrarea lor repetată și prelungind durata lor de viață.

Analizorul are o construcție compactă și este transportabil, fiind dotat în acest scop cu o valiză proprie. Aici încap toate componentele, cu excepția sondei, care poate avea diverse lungimi. Sonda Catedrei de Termotehnică și Mașini Termice a Universității „Politehnica” Timișoara are o lungime de 1,5 m și rezistă la temperaturi de  $1300^\circ\text{C}$ . În timpul funcționării aparatul este alimentat la tensiunea de 220 V, dar dispune și de trei seturi de acumuloare, care îi asigură o autonomie de cca. 4 ore.

## 6.2 Măsurători pe instalații industriale.

În cadrul Catedrei de Termotehnică și Mașini Termice s-au executat o serie de măsurători pe instalații industriale în scopul determinării emisiilor poluante. În cele ce urmează vor fi prezentate măsurătorile efectuate la trei cazane din centralele I și II de la CET Oradea [124].



Parametrii nominali ai acestor cazane sunt prezentați în tabelul 6.2.1.

Tabelul 6.2.1

| Denumire                        | U.M.  | Cazan nr. 1<br>CET 2 | Cazan nr. 2<br>CET 1 | Cazan nr. 3<br>CET 1 |
|---------------------------------|-------|----------------------|----------------------|----------------------|
| Debitul nominal                 | t/h   | 420                  | 165                  | 350                  |
| Presiunea nominală              | at    | 139                  | 139                  | 139                  |
| Temperatura nominală            | °C    | 540                  | 540                  | 540                  |
| Temperatura apei de alimentare  | °C    | 220                  | 220                  | 220                  |
| Randamentul termic brut         | %     | 85                   | 85                   | 85,5                 |
| Entalpia aburului supraîncălzit | kJ/kg | 3432                 | 3432                 | 3432                 |
| Entalpia apei de alimentare     | kJ/kg | 970                  | 970                  | 970                  |
| Puterea termică                 | MW    | 338                  | 133                  | 280                  |

Analiza tehnică și compoziția elementară a cărbunilor folosiți este prezentată în tabelul 6.2.2.

Tabelul 6.2.2

| Denumire  | Simbol     | U.M.  | Cazan nr. 1 | Cazan nr. 2 | Cazan nr. 3 |
|---|------------|-------|-------------|-------------|-------------|
| Umiditate totală                                  | $W_t^i$    | %     | 43,0        | 41,4        | 41,0        |
| Cenușă  | $A^i$      | %     | 21,6        | 22,4        | 22,5        |
| Putere calorifică măsurată                        | $H_{ic}^i$ | kJ/kg | 7075        | 7556        | 7703        |
| Compoziția elementară raportată la proba inițială |            |       |             |             |             |
| Carbon  | $C^i$      | %     | 20,4        | 21,5        | 22,3        |
| Hidrogen  | $H^i$      | %     | 2,1         | 2,0         | 2,2         |
| Sulf combustibil                                  | $S_c^i$    | %     | 1,7         | 1,7         | 1,7         |
| Azot  | $N^i$      | %     | 0,4         | 0,4         | 0,4         |
| Oxigen  | $O^i$      | %     | 10,8        | 10,6        | 9,9         |
| Cenușă  | $A^i$      | %     | 21,6        | 22,4        | 22,5        |
| Umiditate totală                                  | $W_t^i$    | %     | 43,0        | 41,4        | 41,0        |
| Putere calorifică calculată                       | $H_{ic}$   | kJ/kg | 7024        | 7354        | 7917        |

Măsurătorile s-au făcut prin prelevarea probelor de analiză la coș și vizează determinarea nivelului global al emisiilor poluante. Măsurătorile s-au făcut la mai multe regimuri de funcționare, iar rezultatele sunt prezentate în tabelele 6.2.3 - 6.2.6. Tabelul 6.2.3 prezintă parametrii la care au funcționat cazanele. Tabelele 6.2.4 - 6.2.6 prezintă compoziția gazelor de ardere la cazanele nr. 1, respectiv 2 și 3.

Tabelul 6.2.3

| Denumire   | Simbol      | U.M.               | Cazan 1 |       | Cazan 2 |       | Cazan 3 |  |         |  |
|--|-------------|--------------------|---------|-------|---------|-------|---------|--|---------|--|
|  |             |                    | Regim 1 |       | Regim 2 |       | Regim 1 |  | Regim 2 |  |
|  |             |                    |         |       |         |       |         |  |         |  |
| Debitul mediu de abur                                  | $D_m$       | t/h                | 248     | 161   | 133     | 260   | 220     |  |         |  |
| Presiunea medie a aburului                             | $p_m$       | $\frac{kgf}{cm^2}$ | 132     | 132   | 127     | 128   | 115     |  |         |  |
| Temperatura medie de supraîncalzire a aburului         | $t_{am}$    | °C                 | 529     | 522   | 519     | 540   | 535     |  |         |  |
| Temperatura medie a apei de alimentare                 | $t_{w1}$    | °C                 | 227     | 158   | 158     | 158   | 158     |  |         |  |
| Presiunea medie a apei de alimentare                   | $p_{w1}$    | $\frac{kgf}{cm^2}$ | 143     | 175   | 175     | 183   | 188     |  |         |  |
| Consum de cărbune                                      | $B_c$       | t/h                | 101     | 61    | 55      | 110   | 90      |  |         |  |
| Consum de păcura                                       | $B_p$       | kg/h               | -       | 470   | 0       | 1660  | 1660    |  |         |  |
| Temperatura aerului înainte de P.A.                    | $t_{ac}'$   | °C                 | 51      | 62    | 65      | 46    | 46      |  |         |  |
| Temperatura aerului după P.A.                          | $t_{ac}$    | °C                 | 245     | 195   | 195     | 177   | 180     |  |         |  |
| Conținut de CO <sub>2</sub> în gazele de ardere uscate | $(CO_2)_f$  | %                  | 10,4    | 14,5  | 12,6    | 12,9  | 10,6    |  |         |  |
| Conținut de O <sub>2</sub> în gazele de ardere uscate  | $(O_2)_f$   | %                  | 7,9     | 2,2   | 5,7     | 5,7   | 7,2     |  |         |  |
| Temperatura gazelor arse înaintea ventilatorului       | $t_{g,exh}$ | °C                 | 201     | 125   | 124     | 126   | 126     |  |         |  |
| Sarcina  | $D_m/D_n$   | -                  | 0,595   | 0,977 | 0,806   | 0,743 | 0,678   |  |         |  |

Tabelul 6.2.4

Compoziția gazelor de ardere de la cazanul nr. 1 CET Oradea 2, în 09.06.94.

| Nr<br>Cî    | t <sub>gc</sub><br>[ °C] | (O <sub>2</sub> ) <sub>f</sub><br>[%] | (CO <sub>2</sub> ) <sub>f</sub><br>[%] | λ <sub>exh,m</sub><br>[-] | λ <sub>exh,c</sub><br>[-]* | (CO <sub>2</sub> ) <sub>f</sub> |                                   | NO | NO <sub>2</sub> | NO <sub>x</sub> | SO <sub>2</sub> |                                   |
|-------------|--------------------------|---------------------------------------|--|---------------------------|----------------------------|---------------------------------|-----------------------------------|----|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------------------------|
|             |                          |                                       |  |                           |                            | ppm                             | $\frac{\text{mg}}{\text{m}^3}$ ** |    |                 |                 | ppm             | $\frac{\text{mg}}{\text{m}^3}$ ** |
| Regim nr. 1 |                          |                                       |  |                           |                            |                                 |                                   |    |                 |                 |                 |                                   |
| 1           | 207                      | 12,1                                  | 7,8                                    | 2,360                     | 2,316                      | 108                             | 228                               | 75 | 0               | 259             | 863             | 4145                              |
| 2           | 208                      | 12,2                                  | 7,7                                    | 2,386                     | 2,342                      | 121                             | 257                               | 71 | 0               | 248             | 898             | 4362                              |
| 3           | 208                      | 12,4                                  | 7,5                                    | 2,442                     | 2,394                      | 137                             | 299                               | 60 | 0               | 214             | 776             | 3857                              |
| 4           | 208                      | 11,7                                  | 8,1                                    | 2,258                     | 2,216                      | 101                             | 204                               | 71 | 0               | 235             | 922             | 4238                              |
| 5           | 208                      | 11,6                                  | 8,2                                    | 2,234                     | 2,193                      | 97                              | 194                               | 70 | 0               | 229             | 918             | 4180                              |
| 6           | 209                      | 11,4                                  | 8,4                                    | 2,188                     | 2,149                      | 90                              | 176                               | 81 | 0               | 260             | 1004            | 4471                              |
| 7           | 210                      | 11,9                                  | 8,0                                    | 2,308                     | 2,267                      | 61                              | 126                               | 97 | 0               | 328             | 1048            | 4923                              |
| 8           | 208                      | 12,1                                  | 7,8                                    | 2,360                     | 2,316                      | 67                              | 141                               | 95 | 0               | 328             | 923             | 4434                              |

$$\lambda_{exhc} = \frac{(N_2)_f}{(N_2)_f - \frac{0,79}{0,21} (O_2)_f}$$

\*) Valoare calculată cu relația:

\*\*) Raportat la 6 % (O<sub>2</sub>)<sub>f</sub>

Tabelul 6.2.5

Compoziția gazelor de ardere de la cazanul nr. 2 CET Oradea 1, în 08.06.94.

| Nr<br>cr    | $t_{gc}$<br>[ °C] | $(O_2)_f$<br>[%] | $(CO_2)_f$<br>[%] | $\lambda_{exh,m}$<br>[-] | $\lambda_{exh,c}$<br>[-] | $(CO_2)_f$ |                        | NO | NO <sub>2</sub> | NO <sub>x</sub> | SO <sub>2</sub> |                        |
|-------------|-------------------|------------------|-------------------|--------------------------|--------------------------|------------|------------------------|----|-----------------|-----------------|-----------------|------------------------|
|             |                   |                  |                   |                          |                          | ppm        | $\frac{mg}{m^3_{m,N}}$ |    |                 |                 | ppm             | $\frac{mg}{m^3_{m,N}}$ |
| Regim nr. 1 |                   |                  |                   |                          |                          |            |                        |    |                 |                 |                 |                        |
| 9           | 136               | 10,6             | 9,1               | 2,019                    | 2,006                    | 741        | 1136                   | 40 | 1               | 121             | 606             | 2491                   |
| 10          | 135               | 10,4             | 9,3               | 1,981                    | 1,950                    | 702        | 1241                   | 41 | 0               | 119             | 983             | 3964                   |
| 11          | 134               | 9,9              | 9,7               | 1,892                    | 1,863                    | 1791       | 3025                   | 40 | 0               | 111             | 1008            | 3882                   |
| 12          | 134               | 10,0             | 9,6               | 1,909                    | 1,879                    | 1414       | 2410                   | 36 | 0               | 101             | 1130            | 4392                   |
| 13          | 134               | 10,6             | 9,1               | 2,019                    | 2,006                    | 736        | 1327                   | 33 | 0               | 98              | 949             | 3901                   |
| 14          | 134               | 11,9             | 8,0               | 2,308                    | 2,267                    | 753        | 1553                   | 37 | 0               | 125             | 865             | 4063                   |
| Regim nr. 2 |                   |                  |                   |                          |                          |            |                        |    |                 |                 |                 |                        |
| 15          | 135               | 11,5             | 8,3               | 2,211                    | 2,171                    | 108        | 213                    | 38 | 0               | 123             | 1071            | 4820                   |
| 16          | 135               | 11,3             | 8,5               | 2,165                    | 2,128                    | 113        | 218                    | 35 | 0               | 111             | 1094            | 4821                   |
| 17          | 135               | 12,0             | 7,9               | 2,338                    | 2,291                    | 128        | 267                    | 41 | 0               | 140             | 1026            | 4874                   |
| 18          | 135               | 11,9             | 8,0               | 2,308                    | 2,267                    | 115        | 237                    | 44 | 0               | 149             | 1124            | 5280                   |
| 19          | 135               | 12,1             | 7,8               | 2,360                    | 2,316                    | 109        | 230                    | 47 | 1               | 166             | 932             | 4477                   |
| 20          | 137               | 11,9             | 7,9               | 2,318                    | 2,263                    | 115        | 237                    | 46 | 1               | 159             | 980             | 4604                   |
| 21          | 134               | 12,1             | 7,8               | 2,360                    | 2,316                    | 119        | 251                    | 48 | 2               | 173             | 950             | 4563                   |
| 22          | 137               | 11,9             | 8,1               | 2,251                    | 2,243                    | 124        | 253                    | 46 | 0               | 154             | 957             | 3497                   |
| 23          | 134               | 11,9             | 8,0               | 2,306                    | 2,232                    | 130        | 288                    | 45 | 2               | 159             | 985             | 4627                   |

Tabelul 6.2.6

Compoziția gazelor de ardere de la cazanul nr. 3 CET Oradea 1, în 08.06.94.

| Nr<br>Cr    | $t_{gc}$<br>[ °C] | $(O_2)_f$<br>[%] | $(CO_2)_f$<br>[%] | $\lambda_{exh,m}$<br>[-] | $\lambda_{exh,c}$<br>[-] | $(CO_2)_f$ |                  | NO | NO <sub>2</sub> | NO <sub>x</sub> | SO <sub>2</sub> |                  |
|-------------|-------------------|------------------|-------------------|--------------------------|--------------------------|------------|------------------|----|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|
|             |                   |                  |                   |                          |                          | ppm        | $\frac{mg}{m^3}$ |    |                 |                 | ppm             | $\frac{mg}{m^3}$ |
| Regim nr. 1 |                   |                  |                   |                          |                          |            |                  |    |                 |                 |                 |                  |
| 24          | 141               | 12,9             | 7,1               | 2,593                    | 2,542                    | 48         | 111              | 90 | 2               | 349             | 448             | 2364             |
| 25          | 141               | 15,0             | 5,3               | 3,500                    | 3,420                    | 15         | 47               | 84 | 1               | 436             | 127             | 905              |
| 26          | 141               | 12,9             | 7,1               | 2,593                    | 2,542                    | 75         | 147              | 91 | 7               | 372             | 394             | 2079             |
| 27          | 139               | 12,1             | 7,8               | 2,360                    | 2,316                    | 46         | 97               | 93 | 2               | 328             | 312             | 1499             |
| 28          | 138               | 12,0             | 7,9               | 2,330                    | 2,291                    | 49         | 102              | 90 | 4               | 321             | 623             | 2959             |
| 29          | 138               | 12,3             | 7,6               | 2,414                    | 2,368                    | 56         | 121              | 87 | 5               | 325             | 616             | 3027             |
| 30          | 138               | 12,3             | 7,6               | 2,414                    | 2,368                    | 55         | 118              | 87 | 6               | 325             | 613             | 3012             |
| Regim nr. 2 |                   |                  |                   |                          |                          |            |                  |    |                 |                 |                 |                  |
| 31          | 138               | 13,1             | 6,9               | 2,655                    | 2,604                    | 67         | 159              | 79 | 4               | 323             | 448             | 2424             |
| 32          | 138               | 13,1             | 6,9               | 2,658                    | 2,604                    | 66         | 157              | 77 | 5               | 319             | 492             | 2662             |
| 33          | 138               | 13,3             | 6,7               | 2,727                    | 2,700                    | 63         | 158              | 70 | 6               | 303             | 455             | 2526             |
| 34          | 138               | 13,7             | 6,4               | 2,877                    | 2,817                    | 74         | 190              | 65 | 7               | 303             | 445             | 260              |
| 35          | 139               | 13,3             | 6,7               | 2,727                    | 2,700                    | 67         | 163              | 76 | 6               | 327             | 435             | 2698             |

## 7. CONCLUZII ȘI CONTRIBUȚII ORIGINALE.

### 7.1 Concluzii

Lucrarea „Studiul și modelarea fenomenelor de ardere cu aplicație la arderea cărbunelui pulverizat în focarele cazanelor industriale” are ca scop îmbunătățirea funcționării focarelor cazanelor industriale din punct de vedere al formării și reducerii emisiilor poluante de oxizi de sulf și azot.

Mărimea și complexitatea instalațiilor de cazane limitează posibilitățile de determinare experimentală a diferitelor influențe ale factorilor constructivi și funcționali asupra emisiilor poluante. Ca urmare, s-a pus problema modelării numerice a fenomenelor de ardere din focare, urmând ca studiul influențelor susmenționate să se facă pe model.

Focarele instalațiilor de cazane sunt de fapt reactoare chimice deosebit de complexe. Din punct de vedere termodinamic focarele sunt sisteme deschise. În interiorul lor practic toate proprietățile au o distribuție neuniformă, ca urmare modelarea fenomenelor de ardere nu se poate face prin metode globale, ci prin metode de modelare a câmpurilor, prin relații de transport a proprietăților. Principalele fenomene care trebuie modelate sunt:

- **Curgerea turbulentă**, care necesită modelarea vitezelor, respectiv a parametrilor turbulenței [39, 50, 51, 52]. În lucrarea de față s-au luat în considerare trei componente ale vitezelor (pentru o curgere tridimensională) și doi parametri de turbulență (energia cinetică turbulentă și disipația turbulentă).

- **Arderea particulei de cărbune**. Reacția de ardere a prafului de cărbune se produce la nivelul unei suprafețe de reacție (front de flacără pentru arderea volatilelor, respectiv suprafața poroasă a particulei pentru arderea rezidului carbonos). Modelul arderii poate fi mai simplu sau mai complex [1, 2, 3, 25, 36, 37, 41, 62]. În acord cu practica mondială în domeniu, arderea a fost modelată în două faze, arderea volatilelor, considerată la temperatură nestaționară și arderea rezidului carbonos, considerată la temperatură staționară [25]. Pentru ambele faze s-a folosit modelul reacțiilor chimice obișnuite, determinând constantele cinetice pentru arderea volatilelor, respectiv pentru arderea rezidului carbonos.

- **Radiația termică**. Radiația termică nu este un fenomen de transport, un volum elementar (celulă) schimbă energie prin radiație cu toate volumele elementare din raza sa de vizibilitate. Radiația nu poate fi tratată direct în această formă și ca urmare practica în domeniu a dezvoltat modele ale radiației cu mai multe fluxuri, câte unul pentru fiecare volum elementar cu care se schimbă energie [57]. În lucrarea de față se folosește un model cu șase fluxuri, care modelează schimbul de căldură prin radiație cu

cele șase volume elementare vecine volumului elementar curent. Astfel ecuațiile radiației termice sunt aduse la forma unei ecuații de transport.

- **Câmpurile de temperatură și concentrații ale speciilor chimice.** Determinarea temperaturilor se face pe bază de bilanț energetic în volumele elementare, cunoscând vitezele de transport, sursele energetice (din modelul arderii) și proprietățile termofizice ale mediului. Concentrațiile speciilor chimice se determină de asemenea pe baza modelului arderii.

- **Formarea poluanților de sulf.** În lucrarea de față se modelează doar formarea și reducerea bioxidului de sulf ( $\text{SO}_2$ ), trioxidul de sulf ( $\text{SO}_3$ ) formându-se în focar într-o proporție nesemnificativă. Concentrațiile de bioxid de sulf se determină din modelul reacției chimice de ardere a sulfului, respectiv din modelul reducerii bioxidului de sulf cu oxid de calciu [13, 68]. Determinarea acestor concentrații se face cunoscând conținutul de sulf din combustibil, debitele și distribuțiile combustibilului și a aditivului conținând calciu, respectiv temperaturile locale în focar.

- **Formarea poluanților de azot.** În lucrarea de față se modelează doar formarea oxidului de azot (NO), bioxidul de azot ( $\text{NO}_2$ ) formându-se în focar într-o proporție nesemnificativă. Concentrațiile de oxid de azot se determină cu modelul De Soete [17]. Determinarea acestor concentrații se face cunoscând conținutul de azot din combustibil, debitul și distribuția combustibilului, respectiv temperaturile locale în focar. Datorită masei reduse a poluanților față de masa combustibilului se consideră că formarea poluanților nu influențează semnificativ bilanșurile energetice în volumele elementare [10, 17].

Din punct de vedere al modelării numerice se folosesc metodele de modelare ale câmpurilor. S-au folosit atât metode cu diferențe finite [71, 74, 77], cât și metode cu elemente finite [78, 80, 81]. La modelarea focarelor fiecare dintre metode are avantaje, dezavantaje și domenii de aplicabilitate specifice.

## 7.2 Contribuții originale.

### I. Contribuții la studiul arderii particulei de cărbune.

#### Contribuții teoretice:

- Metodă de determinare prin metoda celor mai mici pătrate a constantelor cinetice la arderea neizotermă a volatilelor.
- Algoritm de calcul a constantelor cinetice la arderea neizotermă a volatilelor.
- Metodă de determinare prin metoda celor mai mici pătrate a constantelor cinetice la arderea izotermă a reziduului carbonos.
- Algoritm de calcul a constantelor cinetice la arderea izotermă a reziduului carbonos.

#### Contribuții practice:

- Program pentru determinarea constantelor cinetice la arderea neizotermă a volatilelor.
- Program pentru determinarea constantelor cinetice la arderea izotermă a reziduului carbonos.

### II. Contribuții la modelarea focarelor prin diferențe finite.

#### Contribuții practice:

- Adaptarea la arderea prafului de cărbune și implementarea pe FELIX C-256 a unui program în vederea modelării arderii într-un focar ciclone, contract ICSITEE București.
- Implementarea pe IBM-PC a programului FEUER 1.1 (RFG).

### III. Contribuții la modelarea focarelor prin metoda elementului finit.

#### Contribuții teoretice:

- Algoritm pentru asamblare matrice globală bandă asimetrică, stocată pe suport de memorie extern.
- Algoritm pentru asamblare matrice globală bandă simetrică, stocată pe suport de memorie extern.
- Algoritm de transpunere matrice globală bandă asimetrică, stocată pe suport de memorie extern.
- Algoritm de înmulțire matrice globală bandă asimetrică, stocată pe suport de memorie extern cu transpusa sa.
- Algoritm de înmulțire sistem bandă asimetrică, stocat pe suport de memorie extern cu transpusa matricii coeficienților.
- Algoritm de rezolvare sistem bandă simetrică, stocat pe suport de memorie extern prin metoda directă Gauss.
- Algoritm de rezolvare sistem bandă simetrică, stocat pe suport de memorie extern prin metoda iterativă Seidel.
- Algoritm de trasat linii echiparametrice.

#### Contribuții practice:

- Program pentru generarea matricii locale pentru element finit plan cu trei noduri, pentru operator Laplace.
- Program pentru generarea matricii locale pentru element finit axial-simetric cu patru noduri, pentru operator Laplace.



- Program pentru generarea matricii locale pentru element finit axial-simetric cu patru noduri, pentru operator Helmholtz.
- Program pentru generare rețea de elemente finite cu trei noduri.
- Program pentru generare rețea de elemente finite cu patru noduri.
- Program pentru sortarea matricii de conexiuni după elemente în ordinea nodului minim, prin metoda MATHSORT.
- Program pentru asamblare matrice globală bandă asimetrică, stocată pe suport de memorie extern.
- Program pentru asamblare matrice globală bandă simetrică, stocată pe suport de memorie extern.
- Program de transpunere matrice globală bandă asimetrică, stocată pe suport de memorie extern.
- Program de înmulțire matrice globală bandă asimetrică, stocată pe suport de memorie extern cu transpusa sa.
- Program de înmulțire sistem bandă asimetrică, stocat pe suport de memorie extern cu transpusa matricii coeficienților.
- Program de rezolvare sistem bandă simetrică, stocat pe suport de memorie extern prin metoda directă Gauss.
- Program de rezolvare sistem bandă simetrică, stocat pe suport de memorie extern prin metoda iterativă Seidel.
- Program de trasat linii echiparametrice.
- Program pentru modelarea curgerii potențiale fără recirculație în focare ciclon, contract MIS București.
- Program pentru modelarea curgerii potențiale cu recirculație în focare ciclon, contract MIS București.
- Program pentru modelarea câmpului termic în focare ciclon, contract MIS București.

#### IV. Alte contribuții:

- Modelarea cazanului de 420 t/h de la CET Oradea cu stabilirea emisiilor de SO<sub>2</sub> și NO<sub>x</sub>.
- Șase lucrări în domeniu publicate [4, 67, 99, 112, 113, 115].

- \* -

La modelarea arderii particulei de cărbune, teoriile folosite actual pe plan mondial se bazează pe constantele cinetice ale reacțiilor de devolatilizare și ardere a volatilelor, respectiv ale arderii reziduului carbonos. Determinarea acestor constante, în special pentru volatile este o problemă dificilă. Zelkowski în [25] indică o metodă de determinare, dar această metodă necesită ipoteze suplimentare. În lucrarea de față se prezintă o metodă originală de determinare, cu o bază teoretică mult mai solidă.

Rezultatele obținute la modelarea focarelor constau în principal în două domenii: dezvoltarea metodei de modelare prin elemente finite pe IBM-PC pentru rețele de dimensiuni relativ mari și obținerea unui instrument de simulare a funcționării unui focar pe calculatoare de tip IBM-PC.

Programele elaborate pentru tratarea modelelor cu elemente finite sunt destinate în principiu pentru modelarea ecuațiilor de transport în focare axial-simetrice. Aplicațiile de bază prezentate

În lucrarea de față sunt modelarea curgerilor și a câmpurilor de temperaturi. Programele au fost concepute pentru a modela și alte fenomene, adaptarea cea mai simplă putând fi făcută pentru câmpuri potențiale, putându-se modela practic fără modificări și câmpuri electrostatice și magnetostatice. Cu modificări minime, care constau în scrierea unor rutine care generează valorile numerice ale matricilor elementale locale, programele pot fi folosite și la modelarea altor tipuri de câmpuri. În toate cazurile, rețelele de discretizare pot conține un număr de până la 16000 de laturi, ceea ce înseamnă un număr de 3 - 10000 de elemente (8000 pentru elemente izoparametrice cu patru noduri), cu o bandă de 90 de noduri. Aceste rețele sunt cu mult mai mari decât rețelele de 500 de noduri folosite curent la programele demonstrative și acoperă foarte bine domeniile bidimensionale.

Programul FEUER 1.1 este un foarte puternic program de calcul al proceselor din interiorul focarelor, bazat pe modelarea fenomenelor de curgere turbulentă și de ardere a particulei de cărbune, pe modelarea schimbului de căldură prin radiație, pe întocmirea bilanțului energetic pentru determinarea câmpurilor de temperatură și concentrații ale speciilor chimice, pe modelarea formării oxizilor de sulf și azot. Acest program de calcul pune la dispoziția cercetătorilor și proiectanților instalațiilor de ardere un instrument de calcul cu ajutorul căruia este posibilă alegerea mai ușoară a soluției optime, deoarece se pot pune rapid în evidență influențele schimbării combustibilului, a tipului de arzător, a geometriei și gazodinamicii interioare a focarului etc. Implementarea programului FEUER 1.1, conceput la Universitatea Tehnică din Braunschweig - Germania, pe calculatoare IBM-PC, aflate în dotarea catedrei TMT deschide largi perspective în folosirea acestui program în vederea încheierii unor contracte de cercetare științifică pentru rezolvarea problematicii care se ridică atât la rețehnologizarea actualelor cazane energetice, cât și la proiectarea altora noi.

## 8. BIBLIOGRAFIE

1. Ungureanu, C. - „Generatoare de abur pentru instalații energetice clasice și nucleare”, EDP București, 1977.
2. Pănoiu, N. - „Cazane de abur”, EDP București, 1982.
3. Pănoiu, N., ș.a. - „Instalații de ardere a combustibililor solizi”, ET București, 1985.
4. Ungureanu, C., Ionel, I., Oprea, P.-D. - „Tehnologii moderne pentru frînarea formării de NOx în procesele de ardere din focarele cazanelor de abur”, Energetica, nr. 10-12/1990.
5. Oprea, P.-D. - „Cinetica arderii prafului de cărbune”, Referat pentru doctorat, nr.1, 1990.
6. Kwee, K., Morita, Sh. - „NOx control of coal fired boiler by in-furnace SOx reduction technique” Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul. 1993.
7. Arthkamp, J., Kremer, H. - „The effects of staged combustion on the formation and destruction of N2O”, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul. 1993.
8. Sybon, G., Leuckel, W. - „Experimental studies on formation and reduction of nitric and nitrous oxide in advanced combustion systems”, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
9. Stapf, D., Leuckel W. - „NOx formation from fuel nitrogen in technical flames application of reaction kinetics modelling to in-flame conditions”, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
10. Vonderbank, R.S., Müller, H., Leitner, R. - „Primary measures for lignite fired steam generators”, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
11. Wilk, R., Szlek, A. - „NOx formation and destruction during fuel oil combustion”, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
12. Antifora, A., Sala, M., Vigevano, L. - „NOx emissions from a large scale coal-fired furnace”, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
13. Giannakopoulos, D., Kakaras, E., Papageorgiou, N. - „Primary measures for the reduction of SO2 emissions from the brown coal fired power plants of southern Greece” Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.

14. Dreher, H și colab. - „Optimization of recirculating low NOx combustion systems by numerical simulation“, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
15. Ballester, J. și colab. - „Large-scale laboratory experiments on pollutant emissions in heavy oil combustion“, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
16. Dearden, L.M. și colab. - „The computational modelling of a regenerative burner to reduct NO and NO<sub>2</sub> emissions“, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
17. Coelho, P.J., Carvalho, M.G. - „Mathematical modelling of NO formation in a power station boiler“, Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment, vol 1, Lisabona, 19-22 iul.1993.
18. Mihăescu, L. și colab. - „Arzătoare turbionare“, ET București, 1986.
19. Coandă, V. - „Contribuții teoretice și experimentale la studiul distribuției fluxului de căldură în focarele generatoarelor de abur“, Teză de doctorat, 1982.
20. Cristea, E.D. - „Contribuții privind cercetarea arzătoarelor cu pulverizare prin fluide auxiliare pentru cuptoare industriale“, Teză de doctorat, 1983.
21. Dragoș, L. - „Principiile mecanicii mediilor continue“, ET București, 1984.
22. May, H.-O. - „Über den Einfluß von Dichteänderungen auf das Verweilzeitverhalten“, BWK, nr. 11-12/1994, p. 512-514.
23. Constantinescu, V.N., Găletușe, S. - „Mecanica fluidelor și elemente de aerodinamică“, EDP București, 1983.
24. Idelcik, I.E. - „Îndrumător pentru calculul rezistențelor hidraulice“, ET București, 1984.
25. Zelkowski, J. - „Kohlenverbrennung. Brennstoff, Physik und Theorie, Technik“, VGB-Kraftwerkstechnik GmbH, Essen 1986.
26. Carabogdan, I., Pănoiu, N. - „Bazele teoretice ale aprinderii și arderii combustibililor solizi“, Ed. Academiei RSR, București, 1966.
27. Barrow, G.M. - „Physical Chemistry“, IV Ed., Mc.Graw-Hill Book, Tokyo, 1979.
28. Ungureanu, C. - „Generatoare de abur - Calcul termic“, Litografia UTT, 1993.
29. Aldea, M. și colab. - „Cazane de abur și recipiente sub presiune“, ET București, 1987.
30. Raznjevic, K. - „Tabele și diagrame termotehnice“, ET București, 1978.
31. Pop, M.G., Leca, A. și colab. - „Îndrumar. Tabele, nomograme și formule termotehnice“, ET București, 1987.
32. Ionel, I., Ungureanu, C. - „Arderea și combaterea poluării la cazane“, Litografia UTT, 1994.
33. Michelfelder, S. și colab. - „Übersicht über Berechnungs-Methoden zur Ermittlung der Wärmeübergangs in Brennkammern“, VDI - Berichte nr. 246, 1975.

34. Hottel, H.C., Sarofim, A.F. - „Radiative transfer“, Mc.Graw-Hill Book, New York, 1967.
35. Gurvici, A.M., Blok, A.G. - „O roscete teploobmena v topkakh“, Gosenergoizdat, Moskva, 1958.
36. ТКТИ - VTI - „Teplovoj roscet kotelnyh agregatov - Normativnyj metod“, Ed. Energija, Moskva, 1973.
37. Vilenskij, T.V., Hzmalijan, D.M. - „Dinamika gorenija pylevidnogo topliva“, Ed. Energija, Moskva, 1978.
38. \* \* \* - „HÜTTE - Manualul inginerului“, Ed. AGIR, 1952.
39. Patankar, S.V. - „Numerical heat transfer and fluid flow“, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
40. Godunov, S. și colab. - „Résolution numérique des problèmes multidimensionnels de la dynamique des gas“, Ed. Mir, Moscou, 1979.
41. Spalding, D.B. - „Combustion and mass transfer“, Pergamon Press, London, 1979.
42. Chiriac, F. și colab. - „Procese de transfer de căldură și de masă în instalațiile industriale“, ET București, 1982.
43. Schlichting, H. - „Grenzschichttheorie“, G. Braun Verlag, Karlsruhe, 1965.
44. Pohl, R.W. - „Einführung in die Physik“, Bd.1 Mechanik, Akustik und Wärmelehre, Springer Verlag, 1969.
45. Gyarmati, I. - „Non-equilibrium thermodynamics“, Springer Verlag, 1970.
46. Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F., Bird, R.B. - „Molecular theory of gases and liquids“, John Wiley & Sons Inc., 1954.
47. Hinze, J.O. - „Turbulence - An introduction to its mechanism and theory“, Mc.Graw-Hill Book, New York, 1959.
48. Frost, W., Moulden, T.H. - „Handbook of turbulence“, Plenum Press, New York and London, 1977.
49. Rodi, W. - „Turbulence models and their application in hydraulics“, International Association for Hydraulic Research, Delft, 1980.
50. Reynolds, A.J. - „Curgeri turbulente în tehnică“, ET București, 1983.
51. Spalding, D.B. - „A two-equations model of turbulence“, VDI - Forsh.-Heft. p.549, 1972.
52. Launder, B.E., Spalding, D.B. - „The numerical computation of turbulent flows“, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., nr. 3/1974, p. 269-289.
53. Mc.Adams - „Heat transmission“, Mc.Grow-Hill Book Co. Inc., 1954.
54. Negru, L.D. - „Transmiterea căldurii“, Litografia IPT, 1981.
55. Miheev, M.A. - „Osnovy teploperedaci“, Ed. Gosenergoizdat, 1956.
56. Viskanta, R. - „Radiation transfer and interaction of convection with radiation heat transfer“, Advances in Heat Transfer, vol.3, Academic Press, London & New-York, 1966.
57. Sidall, R.G. - „Flux methods for the analysis of radiant heat transfer“, 4-th Symposium on Flames & Industry, Paper 16. Inst. of Fuel, London, 1972

58. Robinson, G.F. - „A three dimensional analytical model of a large tangentially-fired furnace“, J. Inst. Energy, nr. 58/1985, p. 115-150.
59. Zelkowski, J. - „Kritischer Vergleich der Untersuchungsmethoden zur Kennzeichnung der reaktionskinetischen Eigenschaften von Kohlenstaub und deren feuerungstechnische Nutzanwendung“, Energietechnik, nr. 4/1979.
60. Smith, P.J., Smooth, D. - „One-dimensional model for pulverized coal combustion and gasification“, Combustion Science and Technology, vol 23, 1980.
61. Dogaru, M., Müller, I., Raicu, F. - „Program de calcul în vederea modelării matematice a proceselor de ardere și schimb de căldură pentru combustibili solizi“, Construcția de mașini, nr. 5/1987.
62. Görner, K., Zinser, W. - „Simulation industrieller Verbrennungssysteme“, Chem.-Ing.-Tech., nr. 11/1987.
63. Zelkowski, J. - „Reaktionsfähigkeit von Kohle - eine normalerweise nicht kontrollierte Kohleeigenschaft“, VGB-Kraftwerkstechnik 64, nr. 6/1984.
64. Grünwald, B., Apostolescu, N. - „Neomogenitatea termică și chimică a gazelor din motoarele cu ardere internă“, Ed. Academiei RSR, București, 1975.
65. van Heek, K.H., Jüntgen, H., Peters, W. - „Nicht-isotherme Reaktionskinetik der Kohlenpyrolyse“, Brennstoff Chemie 48 (1967), nr. 6, p. 163-194.
66. Ungureanu, C., Ionel, I. - „Einige Betrachtungen über die Bestimmung der Flüchtigen Bestandteile von Kohlen“, Bul. Șt. și Tehn. al IPTVT, tom 35(49)/1990, p. 33-37.
67. Ionel, I., Oprea P.-D. - „Procedeu pentru determinarea constantelor cinetice la arderea volatilelor unor cărbuni din România“, Simp. S.I.A.C. Modelarea Numerică a Proceselor Termice, București, 1990, p. 80-85.
68. Müller, H. - „Numerische Berechnung dreidimensionaler turbulenten Strömungen in Dampferzeugern mit Wärmeübergang und chemischen Reaktionen am Beispiel des SNCR Verfahrens und der Kohleverbrennung“, Teză de doctorat, TU Braunschweig, 1990.
69. Neaga, C., Epure, Al. - „Îndrumar - Calculul termic al generatoarelor de abur“, ET București, 1988.
70. Fenimore, C.P. - „Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames“, Thirteenth Symp. (Int.) of Combustion, Salt Lake City, Utah, 1971.
71. Dincă, G. - „Metode variaționale și aplicații“, ET București, 1980.
72. Batchelor, G.K. - „An introduction to fluid dynamics“ Cambridge University Press, 1967.
73. Chung T.J. - „Finite element analysis in fluid dynamics“, Mc.Graw-Hill, New York, 1978.
74. Dumitrescu, I.I. - „Simularea cimpurilor potențiale“, Ed. Academiei RSR, 1983.
75. Davis, J.L. - „Finite difference methods in dynamics of continuous media“, McMillan Publ.Co, New York, 1986.
76. Roșculeț, M., Balea, P., Moldoveanu, Ș. - „Programarea și utilizarea mașinilor de calcul și elemente de calcul numeric și informatică“, EDP București, 1980.

77. Godunov, S.K., Reabenki, V.S. - „Scheme de calcul cu diferențe finite“, ET București, 1977
78. Huebner, K.H. - „The Finite Element Method for Engineers“, John Willey, New York, 1975.
79. Carte, I.N. - „The Finite Element Method in the hydrodynamics of turbomachines“, Seminarul de Mecanică, Litografia IPT, 1987.
80. Brătianu, C. - „Metode cu elemente finite în dinamica fluidelor“, Ed. Academiei RSR, 1983.
81. Olariu, V., Brătianu, C. - „Modelare numerică cu elemente finite“, ET București, 1986.
82. Brătianu, C. - „Bazele modelării numerice cu elemente finite a câmpurilor termice conductive“, Termotehnica, nr. 1/1993.
83. Gârbea, D. - „Analiză cu elemente finite“, ET București, 1990.
84. \* \* \* - „Microsoft FORTRAN / Advanced topics, version 5.0“, Microsoft Corp., USA, 1989.
85. Soceneanțu, A. și colab. - „Programarea și utilizarea calculatoarelor“, Litografia IPTVT, 1980.
86. Démidovitch, B., Maron, I. - „Éléments de calcul numérique“, Ed. Mir, Moscou, 1973.
87. Béla, J. - „Rezolvarea numerică a sistemelor de ecuații liniare“, Ed Academiei RPR, 1961.
88. Bucur, C.M. - „Metode numerice“, Ed. Facla, Timișoara, 1973.
89. Dodescu, Gh., Toma, M. - „Metode de calcul numeric“, EDP București, 1976.
90. Larionescu, D. - „Metode numerice“, ET București, 1989.
91. Tichonov, A., Arsénine, V. - „Méthodes de résolution de problèmes mal posés“, Ed. Mir, Moscou, 1976.
92. Dancea, I. - „Programarea calculatoarelor numerice pentru rezolvarea problemelor cu caracter tehnic și de cercetare științifică“, Ed. Dacia, Cluj-Napoca, 1973.
93. Dorn, W.S., McCracken, D.D. - „Metode numerice cu programe în FORTRAN IV“, ET București, 1976.
94. Knuth, D.E. - „Tratat de programarea calculatoarelor - Algoritmi fundamentali“, ET București, 1974.
95. Knuth, D.E. - „Tratat de programarea calculatoarelor - Algoritmi seminumerici“, ET București, 1983.
96. Knuth, D.E. - „Tratat de programarea calculatoarelor - Sortare și căutare“, ET București, 1976.
97. \* \* \* - „MASM“ - Ed. Mirton, Timișoara, 1990.
98. Oprișă, P.-D. - „Stadiul actual al modelării proceselor de ardere în focarele cazanelor de abur“, referat pentru doctorat, nr.2, 1994.
99. Oprișă, P.-D., Resiga-Susan, R. - „Constant parameter curves plotting for F.E.M. results“, International Conference of Technical Informatics (CONTI'94), Timișoara, 18-19 nov.1994.
100. Billing, K.W., Byrnes, D., Hester, J.S. - „The complete AutoCad Encyclopedia“, New Riders Publishing, 1991.
101. Popescu, A., Filip, A., Merezeanu, D. - „AutoCad“, Ed. Teora, București, 1993.
102. \* \* \* - Manual „Sinclair ZX Spectrum +2“, Amstrad Consumer Electronic plc., 1986

103. Opriș, P.-D. - „Modelarea cu elemente finite a proceselor de ardere într-un spațiu axial-simetric“ Protocol la contractul de cercetare MIS nr. 2244/1991, faza 1993.
104. Bică, Fl. - „Bazele programării pe Personal Computer“, Ed. Univ. din Craiova, 1991.
105. Opriș, P.-D. - „Model matematic pentru focare ciclon“, Protocol la comanda ICSITEE nr. 7654/19.07.1990.
106. ITC 8 - „FORTRAN - Manual de utilizare“, traducere normativ CII 3074,E2/FR, Louveciennes, France, 1971.
107. ITC 20 - „FORTRAN - Manual de operare“, traducere normativ CII 3831,E/FR, Louveciennes, France, 1973.
108. ITC 23 - „Norme de programare FORTRAN“, traducere normativ CII E/FR, Louveciennes, France, 1975.
109. Cruțu, G., Lupș, C. - „Programarea la calculatorul FELIX C-256 FORTRAN - COBOL“, Ed. Științifică, București, 1973.
110. Cazacu, C., Jucan, T. - „Programarea în limbaj FORTRAN, Calculatorul FELIX C-256“, Ed. Junimea, Iași, 1978.
111. Opriș, P.-D. - „Modelarea cu elemente finite a proceselor de ardere într-un spațiu axial-simetric“ Protocol la contractul de cercetare MIS nr. 2244/1991, faza 1991.
112. Resiga-Susan, R., Opriș, P.-D. - „Study of the flow in a cyclone extension furnace by the finite element method“, în volumele „A 2-a Conferință Națională de Elemente Finite și de Frontieră (ELFIN2)“, Sibiu 13-15 mai 1993.
113. Opriș, P.-D., Resiga-Susan, R. - „Analiza cu elemente finite a curgerii rotaționale în semiplanul meridian al unui antefocar ciclon“, A IV-a Conferință Națională de Termotehnică“, Timișoara 3-4 iunie 1994.
114. Opriș, P.-D. - „Modelarea cu elemente finite a proceselor de ardere într-un spațiu axial-simetric“ Protocol la contractul de cercetare MIS nr. 2244/1991, faza 1992.
115. Opriș, P.-D., Resiga-Susan, R. - „Modelarea prin MEF a câmpului termic într-un antefocar“, A III-a Conferință Națională de Termotehnică“, București 28-29 mai 1993.
116. Leitner, R., Müller, H., Schiller, A. - „Entwicklung eines Mehrgitteralgorithmus für ein dreidimensionales Strömungsprogramm“, Lucrare de diplomă la Institutul de Termotehnică și Tehnica arderii Braunschweig, 1990.
117. Müller, H., Schiller, A. - „Anleitung zur Simulation von Brennkamern mit einem dreidimensionalen Strömungsprogramm unter Berücksichtigung der Kohleverbrennung“, Technische Universität Braunschweig, 1991.
118. Ionel, I. „Tätigkeitsbericht“, Technische Universität Temeschburg, 1993.
119. Barth, M. - „Untersuchung zum SNCR-Verfahren zur Rauchgasentstickung im Rauchgaszug einer 100 MWth - Wirbelschichtfeuerung mit dem Verbrennungssimulationsprogramm FIRE-V1.1, Lucrare de diplomă, Technische Universität Braunschweig, 1993.
120. Vonderbank, R.S., Schiewer, S. - „Modellierung des Kohlenstaubabbrandes unter Berücksichtigung physikalischer Stoffeigenschaften (A)“, BWK nr. 5/1994, p. 239-246.



121. Ungureanu, C., Theil, H., Oancea, N. - „Calculul agregatului de cazan”, Litografia IPT, 1966.
122. Ungureanu, C. și colab. - „Generatoare de abur. Probleme”, Litografia IPTVT, 1980.
123. Schröder, K. - „Centrale termoelectrice de putere mare”, Ed. Tehnică, București, 1971.
124. Ungureanu, C., Ionel, I., Marin, S. - „Măsurători în vederea determinării concentrației noxelor gazoase (CO<sub>2</sub>, CO, SO<sub>x</sub> și NO<sub>x</sub>) în gazele de ardere de la 2 (două) cazane din CET I și 1 (un) cazan din CET II Oradea”, Contract 43/01.06.94, beneficiar Filiala Electrocentrale Oradea.
125. Fiveland, W.A., Wessel, R.A. - „A model for predicting formation and reduction of NO<sub>x</sub> in three-dimensional furnaces burning pulverized fuel”, Journal of the Institute of Energy, March 1991 64, p. 41-54.
126. Sidorkin, V.T., Kniga, A.A., Rakitina, N.I. - „Calculation of the decomposition of nitric oxide in the high-temperature zone with an optimum rule of temperature variation”, Thermal Engineering 39(3) 1992, p. 165-167.
127. Hofstetter, E.M., Kutzschbauch, A. - „BETSE - Ein simulationsprogramm zur Berechnung von thermischen Schadstoffensorgungsverfahren”, Abfallwirtschaftjournal 5(1993), Nr. 3, p. 216-220.
128. \* \* \* - „Combustion Efficiency Analyzer - testo 33” - manual de utilizare 3307/GB/05.91.
129. Ionel, I - „Măsurarea emisiilor din gazele de ardere cu ajutorul senzorilor electrochimici”, Conferința Națională de Termotehnică, Timișoara 3-4 iun 1994, vol I, p. 235-240.
130. \* \* \* - „Using WordPerfect 5.1”, QUE Edition Group, 1991.
131. Kovacs, S. - „WordPerfect 5.1 - Ghid de utilizare”, Ed. Microinformatica, Cluj-Napoca, 1993.
132. Kovacs, S., Kovacs, A. - „DrawPerfect 1.1 - Ghid de utilizare”, Ed. Microinformatica, Cluj-Napoca, 1993.
133. Chiorean, C. - „Windows 3.1 - Ghid de utilizare”, Ed. Microinformatica, Cluj-Napoca, 1993.

Fișier de intrare pentru GEOM

Cazan de 420 t/h nr. 1, CET Oradea II  
 Numarul celulelor în directia: X 7 Y 7 Z 14

Grila fina  
 -FALSE-

Grila fina: I1 I2 J1 J2 K1 K2  
 0 -3 0 -3 0 -3

Numarul maxim al peretilor de un tip  
 4

Numarul intrarilor NEI; Numarul iesirilor NAU  
 32

| NEINT(N) | IEIN1(N) | IEIN2(N) | JEIN1(N) | JEIN2(N) | KEIN1(N) | KEIN2(N) | IRI(N) | VEST | 1/1 | Frontal | sj | sec |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|--------|------|-----|---------|----|-----|
| 1        | 2        | 2        | 5        | 5        | 4        | 4        | 14     | VEST | 1/1 | Frontal | sj | sec |
| 2        | 2        | 2        | 5        | 5        | 5        | 5        | 14     | VEST | 1/2 | Frontal | sj | pr  |
| 3        | 2        | 2        | 5        | 5        | 6        | 6        | 14     | VEST | 1/3 | Frontal | ss | sec |
| 4        | 2        | 2        | 5        | 5        | 7        | 7        | 14     | VEST | 1/4 | Frontal | ss | pr  |
| 5        | 2        | 2        | 3        | 3        | 4        | 4        | 14     | VEST | 2/1 | Frontal | sj | sec |
| 6        | 2        | 2        | 3        | 3        | 5        | 5        | 14     | VEST | 2/2 | Frontal | sj | pr  |
| 7        | 2        | 2        | 3        | 3        | 6        | 6        | 14     | VEST | 2/3 | Frontal | ss | sec |
| 8        | 2        | 2        | 3        | 3        | 7        | 7        | 14     | VEST | 2/4 | Frontal | ss | pr  |
| 9        | 3        | 3        | 2        | 2        | 4        | 4        | 25     | SUD  | 3/1 | Lateral | sj | sec |
| 10       | 3        | 3        | 2        | 2        | 5        | 5        | 25     | SUD  | 3/2 | Lateral | sj | pr  |
| 11       | 3        | 3        | 2        | 2        | 6        | 6        | 25     | SUD  | 3/3 | Lateral | ss | sec |
| 12       | 3        | 3        | 2        | 2        | 7        | 7        | 25     | SUD  | 3/4 | Lateral | ss | pr  |
| 13       | 5        | 5        | 2        | 2        | 4        | 4        | 25     | SUD  | 4/1 | Lateral | sj | sec |
| 14       | 5        | 5        | 2        | 2        | 5        | 5        | 25     | SUD  | 4/2 | Lateral | sj | pr  |
| 15       | 5        | 5        | 2        | 2        | 6        | 6        | 25     | SUD  | 4/3 | Lateral | ss | sec |
| 16       | 5        | 5        | 2        | 2        | 7        | 7        | 25     | SUD  | 4/4 | Lateral | ss | pr  |
| 17       | 6        | 6        | 3        | 3        | 4        | 4        | 14     | EST  | 5/1 | Spate   | sj | sec |
| 18       | 6        | 6        | 3        | 3        | 5        | 5        | 14     | EST  | 5/2 | Spate   | sj | pr  |
| 19       | 6        | 6        | 3        | 3        | 6        | 6        | 14     | EST  | 5/3 | Spate   | ss | sec |
| 20       | 6        | 6        | 3        | 3        | 7        | 7        | 14     | EST  | 5/4 | Spate   | ss | pr  |
| 21       | 6        | 6        | 5        | 5        | 4        | 4        | 14     | EST  | 6/1 | Spate   | sj | sec |
| 22       | 6        | 6        | 5        | 5        | 5        | 5        | 14     | EST  | 6/2 | Spate   | sj | pr  |
| 23       | 6        | 6        | 5        | 5        | 6        | 6        | 14     | EST  | 6/3 | Spate   | ss | sec |
| 24       | 6        | 6        | 5        | 5        | 7        | 7        | 14     | EST  | 6/4 | Spate   | ss | pr  |
| 25       | 5        | 5        | 6        | 6        | 4        | 4        | 25     | NORD | 7/1 | Lateral | sj | sec |
| 26       | 5        | 5        | 6        | 6        | 5        | 5        | 25     | NORD | 7/2 | Lateral | sj | pr  |
| 27       | 5        | 5        | 6        | 6        | 6        | 6        | 25     | NORD | 7/3 | Lateral | ss | sec |
| 28       | 5        | 5        | 6        | 6        | 7        | 7        | 25     | NORD | 7/4 | Lateral | ss | pr  |
| 29       | 3        | 3        | 6        | 6        | 4        | 4        | 25     | NORD | 8/1 | Lateral | sj | sec |
| 30       | 3        | 3        | 6        | 6        | 5        | 5        | 25     | NORD | 8/2 | Lateral | sj | pr  |
| 31       | 3        | 3        | 6        | 6        | 6        | 6        | 25     | NORD | 8/3 | Lateral | ss | sec |
| 32       | 3        | 3        | 6        | 6        | 7        | 7        | 25     | NORD | 8/4 | Lateral | ss | pr  |
| NAUST(N) | IAUS1(N) | IAUS2(N) | JAUS1(N) | JAUS2(N) | KAUS1(N) | KAUS2(N) | JRI(N) |      |     |         |    |     |
| 1        | 6        | 6        | 2        | 2        | 12       | 12       | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 13     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 1        | 14     |      |     |         |    |     |
| 1        | 1        | 1        |          |          |          |          |        |      |     |         |    |     |

|           |           |           |           |           |           |                       |         |                  |             |
|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------------------|---------|------------------|-------------|
| IWA1(1 N) | IWA2(1 N) | JWA1(1 N) | JWA2(1 N) | KWA1(1 N) | KWA2(1 N) | IRABI(1 N)            | TW(1,N) | EPS(1,L)         | VEST 1      |
| 1         | 1         | 1         | 7         | 2         | 14        | 1                     | 723.    | 0.6              | VEST 1      |
| 2         | 2         | 2         | 6         | 2         | 2         | 1                     | 723.    | 0.6              | VEST 2      |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 723.    | 0.6              | VEST Fictiv |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 723.    | 0.6              | VEST Fictiv |
| IWA1(2 N) | IWA2(2 N) | JWA1(2 N) | JWA2(2 N) | KWA1(2 N) | KWA2(2 N) | IRABI(2 N)            | TW(2,N) | EPS(2,L)         |             |
| 1         | 7         | 1         | 1         | 1         | 14        | 1                     | 673.    | 0.6              | SUD         |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | SUD Fictiv  |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | SUD Fictiv  |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | SUD Fictiv  |
| IWA1(3 N) | IWA2(3 N) | JWA1(3 N) | JWA2(3 N) | KWA1(3 N) | KWA2(3 N) | IRABI(3 N)            | TW(3,N) | EPS(3,L)         |             |
| 3         | 5         | 2         | 6         | 1         | 1         | 1                     | 1073.   | 0.6              | BOIT 1      |
| 2         | 2         | 2         | 6         | 2         | 2         | 1                     | 723.    | 0.6              | BOIT 2      |
| 6         | 6         | 2         | 6         | 2         | 2         | 1                     | 673.    | 0.6              | BOIT 3      |
| 6         | 7         | 2         | 6         | 11        | 11        | 1                     | 673.    | 0.6              | BOIT 4      |
| IWA1(4 N) | IWA2(4 N) | JWA1(4 N) | JWA2(4 N) | KWA1(4 N) | KWA2(4 N) | IRABI(4 N)            | TW(4,N) | EPS(4,L)         |             |
| 7         | 7         | 1         | 7         | 1         | 14        | 1                     | 673.    | 0.6              | EST 1       |
| 6         | 6         | 2         | 6         | 2         | 2         | 1                     | 673.    | 0.6              | EST 2       |
| 6         | 6         | 2         | 6         | 11        | 11        | 1                     | 673.    | 0.6              | EST 3       |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | EST Fictiv  |
| IWA1(5 N) | IWA2(5 N) | JWA1(5 N) | JWA2(5 N) | KWA1(5 N) | KWA2(5 N) | IRABI(5 N)            | TW(5,N) | EPS(5,L)         |             |
| 1         | 7         | 7         | 7         | 2         | 14        | 1                     | 673.    | 0.6              | NORD 1      |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | NORD Fictiv |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | NORD Fictiv |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | NORD Fictiv |
| IWA1(6 N) | IWA2(6 N) | JWA1(6 N) | JWA2(6 N) | KWA1(6 N) | KWA2(6 N) | IRABI(6 N)            | TW(6,N) | EPS(6,L)         |             |
| 1         | 7         | 1         | 7         | 14        | 14        | 1                     | 673.    | 0.6              | TOP 1       |
| 6         | 6         | 2         | 6         | 11        | 11        | 1                     | 673.    | 0.6              | TOP 2       |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | TOP Fictiv  |
| 1         | -1        | 1         | -1        | 1         | -1        | 1                     | 673.    | 0.6              | TOP Fictiv  |
| UA        | VA        | WA        | TA        | PA        | EDA       | TEA (MUSS: IE.10D-12) |         |                  |             |
| 0.0       | 0.0       | 0.0       | 1273.     | 0.0       | 1.100E-02 | 4.200E-03             |         |                  |             |
| NREIN     | UE(N)     | VE(N)     | WE(N)     | TEIN(N)   | TEKEIN(N) | FX(N)                 | PZ(N)   |                  |             |
| 1         | 1.E-7     | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | VEST 1/1 Frontal |             |
| 2         | 1.E-7     | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | VEST 1/2 Frontal |             |
| 3         | 1.E-7     | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | VEST 1/3 Frontal |             |
| 4         | 1.E-7     | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | VEST 1/4 Frontal |             |
| 5         | 34.0      | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | VEST 2/1 Frontal |             |
| 6         | 20.0      | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | VEST 2/2 Frontal |             |
| 7         | 34.0      | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | VEST 2/3 Frontal |             |
| 8         | 20.0      | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | VEST 2/4 Frontal |             |
| 9         | 0.0       | 1.E-7     | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 1.0                   | 0.2     | SUD 3/1 Lateral  |             |
| 10        | 0.0       | 1.E-7     | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 1.0                   | 0.2     | SUD 3/2 Lateral  |             |
| 11        | 0.0       | 1.E-7     | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 1.0                   | 0.2     | SUD 3/3 Lateral  |             |
| 12        | 0.0       | 1.E-7     | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 1.0                   | 0.2     | SUD 3/4 Lateral  |             |
| 13        | 0.0       | 34.0      | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 1.0                   | 0.2     | SUD 4/1 Lateral  |             |
| 14        | 0.0       | 20.0      | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 1.0                   | 0.2     | SUD 4/2 Lateral  |             |
| 15        | 0.0       | 34.0      | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 1.0                   | 0.2     | SUD 4/3 Lateral  |             |
| 16        | 0.0       | 20.0      | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 1.0                   | 0.2     | SUD 4/4 Lateral  |             |
| 17        | -1.E-7    | 0.0       | 0.0       | 518.00    | 1.2169    | 0.2                   | 1.0     | EST 5/1 Spate    |             |

|        |   |          |                                  |        |        |        |         |       |     |      |             |
|--------|---|----------|----------------------------------|--------|--------|--------|---------|-------|-----|------|-------------|
| 18     | -1.E-7  | 0.0      | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 0.2     | 1.0   | 1.0 | EST  | 5/2 Spate   |
| 19     | -1.E-7  | 0.0      | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 0.2     | 1.0   | 1.0 | EST  | 5/3 Spate   |
| 20     | -1.E-7  | 0.0      | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 0.2     | 1.0   | 1.0 | EST  | 5/4 Spate   |
| 21     | -34.0   | 0.0      | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 0.2     | 1.0   | 1.0 | EST  | 6/1 Spate   |
| 22     | -20.0   | 0.0      | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 0.2     | 1.0   | 1.0 | EST  | 6/2 Spate   |
| 23     | -34.0   | 0.0      | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 0.2     | 1.0   | 1.0 | EST  | 6/3 Spate   |
| 24     | -20.0   | 0.0      | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 0.2     | 1.0   | 1.0 | EST  | 6/4 Spate   |
| 25     | 0.0   | -1.E-7   | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 1.0     | 0.2   | 1.0 | NORD | 7/1 Lateral |
| 26     | 0.0   | -1.E-7   | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 1.0     | 0.2   | 1.0 | NORD | 7/2 Lateral |
| 27     | 0.0   | -1.E-7   | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 1.0     | 0.2   | 1.0 | NORD | 7/3 Lateral |
| 28     | 0.0   | -1.E-7   | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 1.0     | 0.2   | 1.0 | NORD | 7/4 Lateral |
| 29     | 0.0   | -34.0    | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 1.0     | 0.2   | 1.0 | NORD | 8/1 Lateral |
| 30     | 0.0   | -20.0    | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 1.0     | 0.2   | 1.0 | NORD | 8/2 Lateral |
| 31     | 0.0   | -34.0    | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 1.0     | 0.2   | 1.0 | NORD | 8/3 Lateral |
| 32     | 0.0   | -20.0    | 0.0                              | 518.00 | 1.2169 | 75.026 | 1.0     | 0.2   | 1.0 | NORD | 8/4 Lateral |
| TAU    | DPAU  | RHONO    | ETANUL                           | TNUL   |        |        |         |       |     |      |             |
| 0.0    | 0.001   | 1.2800   | 6.83E-6                          | 2000.0 |        |        |         |       |     |      |             |
| EPGMA  | EPSRE   | EPSIM    | EPSTU                            | EPSEN  | EPSCE  |        |         |       |     |      |             |
| 0.005  | 0.6   | 0.01     | 0.04                             | 0.01   | 0.005  |        |         |       |     |      |             |
| REL P  | RELSI   | RELDU    | RELVV                            | RELWW  | RELFE  | RELED  | RELFETA | RELIT |     |      |             |
| 1.8    | 1.0   | 1.0      | 1.0                              | 1.0    | 1.0    | 1.0    | 1.0     | 1.0   |     |      |             |
| GMAX   | TMAX  | EDMAX    |                                  |        |        |        |         |       |     |      |             |
| 0.1    | 0.375E-6  | 0.108E-5 |                                  |        |        |        |         |       |     |      |             |
| DX(NX) | (1) (2) (3) (4) (5)                                     | (6) (7)  | (8) (9) (10) (11) (12) (13) (14) |        |        |        |         |       |     |      |             |
|        | 1.635 2.765 1.2 2.8 1.2 2.765 1.635                     | (6) (7)  | (8) (9) (10) (11) (12) (13) (14) |        |        |        |         |       |     |      |             |
| DY(NY) | (1) (2) (3) (4) (5)                                     | (6) (7)  | (8) (9) (10) (11) (12) (13) (14) |        |        |        |         |       |     |      |             |
|        | 1.609 2.791 1.2 2.8 1.2 2.791 1.609                     | (6) (7)  | (8) (9) (10) (11) (12) (13) (14) |        |        |        |         |       |     |      |             |
| DZ(NZ) | (1) (2) (3) (4) (5)                                     | (6) (7)  | (8) (9) (10) (11) (12) (13) (14) |        |        |        |         |       |     |      |             |
|        | 3.0 2.0 3.0 3.0 1.8 1.2 1.8 1.2 4.5 4.5 5.0 3.5 3.0 3.0 | (6) (7)  | (8) (9) (10) (11) (12) (13) (14) |        |        |        |         |       |     |      |             |

Fișier de intrare/ieșire condiții la limita pentru FBUER (de tip \*.dtl și \*.dt3)

|  |                                |                |                  |
|--|--------------------------------|----------------|------------------|
| *Cazan de 420 t/h nr. 1, CET Oradea II |                                |                |                  |
| TAU                                    | DTAU                           | KTAU           |                  |
| 2.021D-01                              | 4.869D-04                      | 375            |                  |
| DTAUNUL                                | Dif. max.                      | viteza în timp | KL. GITERABST    |
| 1.000D-04                              | 1.034D+00                      |                | 0.000D+00        |
| RHONUL                                 | ETANUL                         | TNUL           |                  |
| 1.280D+00                              | 6.830D-06                      | 1.173D+03      |                  |
| EPSWA                                  | EPSRE                          | EPSIM          | EPSCE            |
| 5.000D-03                              | 6.000D-01                      | 1.000D-02      | 1.000D-02        |
| RELP                                   | RELSI                          | RELVU          | RELWV            |
| 1.800D+00                              | 1.000D+00                      | 1.000D+00      | 1.000D+00        |
| GMAX                                   | TEMAX                          | EDMAX          |                  |
| 1.000D-01                              | 3.750D-07                      | 1.080D-06      |                  |
| LAMINA                                 | ISOIHE                         | STRÄHL         | VERBRE           |
| .F.                                    | .F.                            | .T.            | .T.              |
| TURANF                                 | VERANF                         |                |                  |
| .F.                                    | .F.                            |                |                  |
| HUROH                                  | FLWAF                          | ASCHE          | WASSER           |
| 7.0750D+03                             | 2.000D-01                      | 2.160D-01      | 4.300D-01        |
| Compoziția                             | gaz de transport/aer de ardere | în dreptul     | duzelor în GEW % |
| OZTRGA                                 | H2OTRG                         | NZTRGA         | CO2TRG           |
| 4.300D-02                              | 1.520D-01                      | 6.230D-01      | 1.820D-01        |
| Compoziția                             | gaz/ aer de ardere             | în domeniul de | curgere în GEW % |
| OZGA                                   | H2OGA                          | NZGA           | CO2GA            |
| 1.800D-01                              | 9.500D-02                      | 6.890D-01      | 3.600D-02        |
| Numarul                                | intrarilor de combustibil      |                |                  |
| 16                                     |                                |                |                  |
| Debit masic de combustibil [kg/s]      |                                |                |                  |
| 0.000D+00                              | IBREN                          | JBREN          | KBREN            |
| 0.000D+00                              | 2                              | 5              | 5                |
| 0.000D+00                              | 2                              | 5              | 7                |
| 6.000D+00                              | 2                              | 3              | 5                |
| 0.000D+00                              | 2                              | 3              | 7                |
| 0.000D+00                              | 3                              | 2              | 5                |
| 0.000D+00                              | 3                              | 2              | 7                |
| 6.000D+00                              | 5                              | 2              | 5                |
| 0.000D+00                              | 5                              | 2              | 7                |
| 0.000D+00                              | 6                              | 3              | 5                |
| 0.000D+00                              | 6                              | 3              | 7                |
| 6.000D+00                              | 6                              | 5              | 5                |
| 0.000D+00                              | 6                              | 5              | 7                |
| 0.000D+00                              | 5                              | 6              | 5                |
| 0.000D+00                              | 5                              | 6              | 7                |
| 6.000D+00                              | 3                              | 6              | 5                |
| 6.000D+00                              | 3                              | 6              | 7                |
| Numarul pozitiiilor cu duze de intrare |                                |                |                  |
| 0                                      |                                |                |                  |
| Debit masic de aditiv M(I)/MGES        |                                |                |                  |
| I                                      | J                              | K              | N                |
|  | KZILB                          | UEIN           | VEIN             |
|  | IEINDU                         | WEIN           | KEINDU           |
|  | TEIN                           | TEEIN          | EDEIN            |
|  | POROEW                         | FORONS         | FOROTS           |
|  | PHIMAX                         | 1.000D+00      |                  |
|  | 1.700D-02                      | 4.000D-03      |                  |
|  | 1.080D-01                      | 1.080D-01      |                  |
|  | RHO aditiv în                  | kg/m3          |                  |
|  | BETA                           |                |                  |
|  | 0.000D+00                      | 0.000D+00      |                  |
|  | MITIL DPAR în m                |                |                  |
|  | 02BZ [vol TR]                  |                |                  |
|  | 0.000D+00                      |                |                  |
|  | SNOXFE [vpm NO produs ]        |                |                  |
|  | 0.000D+00                      |                |                  |
|  | SNOX [mg/NO2 aer TA ]          |                |                  |
|  | 0.000D+00                      |                |                  |



|    |           |           |
|----|-----------|-----------|
| 6  | 1.074D+01 | 2.770D+00 |
| 7  | 0.000D+00 | 1.630D+00 |
|    | Y(J)      | DY(J)     |
| 1  | 0.000D+00 | 1.610D+00 |
| 2  | 2.790D+00 | 2.790D+00 |
| 3  | 3.990D+00 | 1.200D+00 |
| 4  | 6.790D+00 | 2.800D+00 |
| 5  | 7.990D+00 | 1.200D+00 |
| 6  | 1.078D+01 | 2.790D+00 |
| 7  | 0.000D+00 | 1.610D+00 |
|    | Z(K)      | DZ(K)     |
| 1  | 0.000D+00 | 3.000D+00 |
| 2  | 2.000D+00 | 2.000D+00 |
| 3  | 5.000D+00 | 3.000D+00 |
| 4  | 6.800D+00 | 1.800D+00 |
| 5  | 8.000D+00 | 1.200D+00 |
| 6  | 9.800D+00 | 1.800D+00 |
| 7  | 1.100D+01 | 1.200D+00 |
| 8  | 1.550D+01 | 4.500D+00 |
| 9  | 2.000D+01 | 4.500D+00 |
| 10 | 2.450D+01 | 4.500D+00 |
| 11 | 2.950D+01 | 5.000D+00 |
| 12 | 3.300D+01 | 3.500D+00 |
| 13 | 3.600D+01 | 3.000D+00 |
| 14 | 0.000D+00 | 3.000D+00 |









|   |   |    |     |     |        |              |             |             |            |             |             |             |             |
|---|---|----|-----|-----|--------|--------------|-------------|-------------|------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 2 | 4 | 5  | 145 | 1   | 777100 | -1.24555D+00 | -2.2899D-03 | 3.6226D+00  | 0.8322D+03 | -1.2551D+02 | -1.2455D+00 | -2.2899D-03 | 3.6226D+00  |
| 2 | 4 | 6  | 146 | 1   | 777100 | -1.4866D+00  | -3.8743D-01 | 5.3686D+00  | 0.8449D+03 | -1.1418D+02 | -1.4866D+00 | -3.8743D-01 | 5.3686D+00  |
| 2 | 4 | 7  | 147 | 1   | 777100 | -8.6807D-01  | 2.0508D-02  | 7.3070D+00  | 0.8764D+03 | -1.0768D+02 | -8.6807D-01 | 2.0508D-02  | 7.3070D+00  |
| 2 | 4 | 8  | 148 | 1   | 777100 | -4.0646D-01  | 3.6629D-02  | 7.6937D+00  | 1.0940D+03 | -8.9375D+01 | -4.0646D-01 | 3.6629D-02  | 7.6937D+00  |
| 2 | 4 | 9  | 149 | 1   | 777100 | -3.7437D-01  | 2.0036D-02  | 8.2328D+00  | 1.0685D+03 | -5.3953D+01 | -3.7437D-01 | 2.0036D-02  | 8.2328D+00  |
| 2 | 4 | 10 | 150 | 1   | 777100 | -5.7346D-01  | 2.1536D-02  | 9.1483D+00  | 1.0492D+03 | -2.0790D+01 | -5.7346D-01 | 2.1536D-02  | 9.1483D+00  |
| 2 | 4 | 11 | 151 | 1   | 777100 | -3.2866D-01  | 5.8367D-02  | 7.8080D+00  | 1.0263D+03 | -9.7675D+00 | -3.2866D-01 | 5.8367D-02  | 7.8080D+00  |
| 2 | 4 | 12 | 152 | 1   | 777100 | 3.0025D+00   | 1.3619D-01  | 3.9793D+00  | 1.0124D+03 | 4.3669D+01  | 3.0025D+00  | 1.3619D-01  | 3.9793D+00  |
| 2 | 4 | 13 | 153 | 16  | 776100 | 3.6355D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.9853D+03 | 7.6255D+01  | 3.6355D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 4 | 14 | 154 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 5 | 1  | 155 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 5 | 2  | 156 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 5 | 3  | 157 | 13  | 777100 | -6.9708D-01  | 4.0474D-01  | -1.4781D-02 | 1.0380D+03 | -1.5971D+02 | -6.9708D-01 | 4.0474D-01  | -1.4781D-02 |
| 2 | 5 | 4  | 158 | 1   | 777401 | -4.1623D+00  | 1.3739D-01  | 1.8344D+00  | 0.8803D+03 | -1.3860D+02 | -4.1623D+00 | 1.3739D-01  | 1.8344D+00  |
| 2 | 5 | 5  | 159 | 1   | 777401 | -4.3308D+00  | 3.2968D-01  | 3.3786D+00  | 0.8926D+03 | -1.2635D+02 | -4.3308D+00 | 3.2968D-01  | 3.3786D+00  |
| 2 | 5 | 6  | 160 | 1   | 777401 | -4.6264D+00  | 7.3231D-02  | 5.6918D+00  | 0.8922D+03 | -1.1616D+02 | -4.6264D+00 | 7.3231D-02  | 5.6918D+00  |
| 2 | 5 | 7  | 161 | 1   | 777401 | -3.7643D+00  | 2.6919D-02  | 7.3161D+00  | 0.9547D+03 | -1.0802D+02 | -3.7643D+00 | 2.6919D-02  | 7.3161D+00  |
| 2 | 5 | 8  | 162 | 1   | 777100 | -6.0923D-01  | 2.0022D-01  | 7.6879D+00  | 1.0941D+03 | -9.0701D+01 | -6.0923D-01 | 2.0022D-01  | 7.6879D+00  |
| 2 | 5 | 9  | 163 | 1   | 777100 | -3.8358D-01  | 3.9205D-02  | 8.2336D+00  | 1.0669D+03 | -5.5258D+01 | -3.8358D-01 | 3.9205D-02  | 8.2336D+00  |
| 2 | 5 | 10 | 164 | 1   | 777100 | -5.7182D-01  | 1.9623D-02  | 9.1635D+00  | 1.0454D+03 | -2.1950D+01 | -5.7182D-01 | 1.9623D-02  | 9.1635D+00  |
| 2 | 5 | 11 | 165 | 1   | 777100 | 7.4991D-01   | 4.8318D-02  | 7.8449D+00  | 1.0222D+03 | 8.6463D+00  | 7.4991D-01  | 4.8318D-02  | 7.8449D+00  |
| 2 | 5 | 12 | 166 | 1   | 777100 | 3.0821D+00   | 1.1590D-01  | 4.0051D+00  | 1.0071D+03 | 4.2369D+01  | 3.0821D+00  | 1.1590D-01  | 4.0051D+00  |
| 2 | 5 | 13 | 167 | 16  | 776100 | 3.7529D+00   | 1.5296D-01  | 0.0000D+00  | 0.9833D+03 | 7.4826D+01  | 3.7529D+00  | 1.5296D-01  | 0.0000D+00  |
| 2 | 5 | 14 | 168 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 6 | 1  | 169 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 6 | 2  | 170 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 6 | 3  | 171 | 153 | 767100 | -3.4930D-01  | 0.0000D+00  | 8.1221D-01  | 1.0121D+03 | -1.6319D+02 | -3.4930D-01 | 0.0000D+00  | 8.1221D-01  |
| 2 | 6 | 4  | 172 | 15  | 767100 | -1.0012D+00  | 0.0000D+00  | 1.5493D+00  | 0.9236D+03 | -1.4725D+02 | -1.0012D+00 | 0.0000D+00  | 1.5493D+00  |
| 2 | 6 | 5  | 173 | 15  | 767100 | -4.5023D+00  | 0.0000D+00  | 3.6574D+00  | 0.9321D+03 | -1.3881D+02 | -4.5023D+00 | 0.0000D+00  | 3.6574D+00  |
| 2 | 6 | 6  | 174 | 15  | 767100 | -1.9047D+00  | 0.0000D+00  | 4.9413D+00  | 0.9564D+03 | -1.2731D+02 | -1.9047D+00 | 0.0000D+00  | 4.9413D+00  |
| 2 | 6 | 7  | 175 | 15  | 767100 | -4.3677D+00  | 0.0000D+00  | 6.8598D+00  | 1.1428D+03 | -1.1909D+02 | -4.3677D+00 | 0.0000D+00  | 6.8598D+00  |
| 2 | 6 | 8  | 176 | 15  | 767100 | -2.4862D-01  | 0.0000D+00  | 7.5862D+00  | 1.0934D+03 | -9.4138D+01 | -2.4862D-01 | 0.0000D+00  | 7.5862D+00  |
| 2 | 6 | 9  | 177 | 15  | 767100 | -3.5358D-01  | 0.0000D+00  | 8.2215D+00  | 1.0627D+03 | -5.6326D+01 | -3.5358D-01 | 0.0000D+00  | 8.2215D+00  |
| 2 | 6 | 10 | 178 | 15  | 767100 | -5.6844D-01  | 0.0000D+00  | 9.1739D+00  | 1.0380D+03 | -2.2693D+01 | -5.6844D-01 | 0.0000D+00  | 9.1739D+00  |
| 2 | 6 | 11 | 179 | 15  | 767100 | 7.6534D-01   | 0.0000D+00  | 7.8760D+00  | 1.0156D+03 | 7.9285D+00  | 7.6534D-01  | 0.0000D+00  | 7.8760D+00  |
| 2 | 6 | 12 | 180 | 15  | 767100 | 3.1594D+00   | 0.0000D+00  | 4.0271D+00  | 1.0014D+03 | 4.1533D+01  | 3.1594D+00  | 0.0000D+00  | 4.0271D+00  |
| 2 | 6 | 13 | 181 | 156 | 766100 | 3.8682D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.9812D+03 | 7.3913D+01  | 3.8682D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 6 | 14 | 182 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 1  | 183 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 2  | 184 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 3  | 185 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 4  | 186 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 5  | 187 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 6  | 188 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 7  | 189 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 8  | 190 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 9  | 191 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 10 | 192 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 11 | 193 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 2 | 7 | 12 | 194 | -3  | -3     | 0.0000D+00   | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |



|   |   |    |     |     |        |             |             |             |            |             |             |             |             |
|---|---|----|-----|-----|--------|-------------|-------------|-------------|------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 3 | 4 | 7  | 245 | 0   | 777200 | 6.9774D-01  | -5.0792D+00 | 7.9863D+00  | 1.4009D+03 | -9.5477D+01 | 6.9774D-01  | -5.0792D+00 | 7.9863D+00  |
| 3 | 4 | 8  | 246 | 0   | 777200 | -1.5686D-01 | -2.7326D-01 | 7.7414D+00  | 1.3237D+03 | -8.5299D+01 | -1.5686D-01 | -2.7326D-01 | 7.7414D+00  |
| 3 | 4 | 9  | 247 | 0   | 777200 | 4.8560D-01  | 7.5605D-03  | 8.1456D+00  | 1.2811D+03 | -5.2331D+01 | 4.8560D-01  | 7.5605D-03  | 8.1456D+00  |
| 3 | 4 | 10 | 248 | 0   | 777200 | -9.8702D-01 | 2.3112D-02  | 7.5178D-02  | 1.2026D+03 | -1.9222D+01 | -9.8702D-01 | 2.3112D-02  | 7.5178D-02  |
| 3 | 4 | 11 | 249 | 0   | 777200 | 9.2493D+00  | 7.5178D-02  | 8.8515D+00  | 1.0698D+03 | 8.5812D+00  | 9.2493D+00  | 7.5178D-02  | 8.8515D+00  |
| 3 | 4 | 12 | 250 | 0   | 777200 | 4.5222D+00  | 2.1316D-01  | 4.3393D+00  | 1.0283D+03 | 3.9017D+01  | 4.5222D+00  | 2.1316D-01  | 4.3393D+00  |
| 3 | 4 | 13 | 251 | 6   | 776100 | 5.3309D+00  | 2.9123D-01  | 0.0000D+00  | 0.9959D+03 | 7.1386D+01  | 5.3309D+00  | 2.9123D-01  | 0.0000D+00  |
| 3 | 4 | 14 | 252 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 5 | 1  | 253 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 5 | 2  | 254 | 13  | 777100 | -1.0996D-02 | 2.2550D-01  | -2.1740D-01 | 1.0681D+03 | -1.7803D+02 | -1.0996D-02 | 2.2550D-01  | -2.1740D-01 |
| 3 | 5 | 3  | 255 | 0   | 777200 | 6.4924D-03  | 1.0799D-01  | -2.6805D+00 | 1.3256D+03 | -1.5610D+02 | 6.4924D-03  | 1.0799D-01  | -2.6805D+00 |
| 3 | 5 | 4  | 256 | 0   | 777200 | 2.0917D+00  | -1.6971D+01 | 8.0688D-01  | 1.2910D+03 | -1.7969D+02 | 2.0917D+00  | -1.6971D+01 | 8.0688D-01  |
| 3 | 5 | 5  | 257 | 0   | 777200 | 2.6382D+00  | -1.3723D+01 | 3.0523D+00  | 1.3030D+03 | -1.1440D+02 | -1.3723D+00 | -1.3723D+01 | 3.0523D+00  |
| 3 | 5 | 6  | 258 | 0   | 777200 | 2.4841D+00  | -1.6854D+01 | 5.0952D+00  | 1.3354D+03 | -9.4370D+01 | 2.4841D+00  | -1.6854D+01 | 5.0952D+00  |
| 3 | 5 | 7  | 259 | 0   | 777200 | -2.2798D+00 | -1.5069D+01 | 9.0928D+00  | 1.4019D+03 | -1.0173D+02 | -2.2798D+00 | -1.5069D+01 | 9.0928D+00  |
| 3 | 5 | 8  | 260 | 0   | 777200 | -1.0992D-02 | -5.4217D-01 | 7.8626D+00  | 1.3148D+03 | -8.9155D+01 | -1.0992D-02 | -5.4217D-01 | 7.8626D+00  |
| 3 | 5 | 9  | 261 | 0   | 777200 | -4.7635D-01 | 2.0385D-02  | 8.1552D+00  | 1.2601D+03 | -5.3879D+01 | -4.7635D-01 | 2.0385D-02  | 8.1552D+00  |
| 3 | 5 | 10 | 262 | 0   | 777200 | -9.8475D-01 | -2.1332D-02 | 9.7022D+00  | 1.1247D+03 | -2.0452D+01 | -9.8475D-01 | -2.1332D-02 | 9.7022D+00  |
| 3 | 5 | 11 | 263 | 0   | 777200 | 9.4811D-01  | 6.3468D-02  | 8.9163D+00  | 1.0459D+03 | 7.4165D+01  | 9.4811D-01  | 6.3468D-02  | 8.9163D+00  |
| 3 | 5 | 12 | 264 | 0   | 777200 | 4.6564D+00  | 1.9010D-01  | 4.3860D+00  | 1.0203D+03 | 3.7496D+01  | 4.6564D+00  | 1.9010D-01  | 4.3860D+00  |
| 3 | 5 | 13 | 265 | 6   | 776100 | 5.5331D+00  | 2.6351D-01  | 0.0000D+00  | 0.9806D+03 | 6.9561D+01  | 5.5331D+00  | 2.6351D-01  | 0.0000D+00  |
| 3 | 5 | 14 | 266 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 6 | 1  | 267 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 6 | 2  | 268 | 153 | 767100 | -4.7728D-02 | 0.0000D+00  | 2.3961D-01  | 1.0283D+03 | -1.8043D+02 | -4.7728D-02 | 0.0000D+00  | 2.3961D-01  |
| 3 | 6 | 3  | 269 | 5   | 767100 | -2.3552D-01 | 0.0000D+00  | 6.7104D-02  | 1.0357D+03 | -1.6056D+02 | -2.3552D-01 | 0.0000D+00  | 6.7104D-02  |
| 3 | 6 | 4  | 270 | 5   | 767402 | 3.5473D+00  | -2.0000D+01 | -3.5337D+00 | 0.6355D+03 | -1.4736D+02 | 3.5473D+00  | -2.0000D+01 | -3.5337D+00 |
| 3 | 6 | 5  | 271 | 5   | 767402 | 3.5473D+00  | -2.0000D+01 | 5.5879D+00  | 0.5455D+03 | -1.1923D+02 | 3.5473D+00  | -2.0000D+01 | 5.5879D+00  |
| 3 | 6 | 6  | 272 | 5   | 767402 | 7.5273D-01  | -3.0000D+01 | -4.9661D-01 | 0.6739D+03 | -1.2787D+02 | 7.5273D-01  | -3.0000D+01 | -4.9661D-01 |
| 3 | 6 | 7  | 273 | 5   | 767402 | 3.5483D+00  | -2.0000D+01 | 8.1708D+00  | 0.5851D+03 | -1.0014D+02 | 3.5483D+00  | -2.0000D+01 | 8.1708D+00  |
| 3 | 6 | 8  | 274 | 5   | 767100 | -2.9615D-01 | 0.0000D+00  | 7.5520D+00  | 1.0925D+03 | -9.8619D+01 | -2.9615D-01 | 0.0000D+00  | 7.5520D+00  |
| 3 | 6 | 9  | 275 | 5   | 767100 | -4.9865D-01 | 0.0000D+00  | 8.1270D+00  | 1.0501D+03 | -5.5348D+01 | -4.9865D-01 | 0.0000D+00  | 8.1270D+00  |
| 3 | 6 | 10 | 276 | 5   | 767100 | -9.8431D-01 | 0.0000D+00  | 9.7173D+00  | 1.0257D+03 | -2.1386D+01 | -9.8431D-01 | 0.0000D+00  | 9.7173D+00  |
| 3 | 6 | 11 | 277 | 5   | 767100 | 9.6977D-01  | 0.0000D+00  | 8.9753D+00  | 1.0109D+03 | 6.4874D+00  | 9.6977D-01  | 0.0000D+00  | 8.9753D+00  |
| 3 | 6 | 12 | 278 | 5   | 767100 | 4.7985D+00  | 0.0000D+00  | 4.4300D+00  | 0.9974D+03 | 6.318D+01   | 4.7985D+00  | 0.0000D+00  | 4.4300D+00  |
| 3 | 6 | 13 | 279 | 56  | 766100 | 5.7525D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.9840D+03 | 6.8167D+01  | 5.7525D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 6 | 14 | 280 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 1  | 281 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 2  | 282 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 3  | 283 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 4  | 284 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 5  | 285 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 6  | 286 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 7  | 287 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 8  | 288 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 9  | 289 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 10 | 290 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 11 | 291 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 12 | 292 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 13 | 293 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |
| 3 | 7 | 14 | 294 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  |



|   |   |    |     |    |            |             |            |             |            |             |             |            |             |
|---|---|----|-----|----|------------|-------------|------------|-------------|------------|-------------|-------------|------------|-------------|
| 4 | 4 | 9  | 345 | 0  | 777200     | -7.3564D-01 | 2.0662D-02 | 7.9345D+00  | 1.4359D+03 | -5.0423D+01 | -7.3564D-01 | 2.0662D-02 | 7.9345D+00  |
| 4 | 4 | 10 | 346 | 0  | 777200     | -2.5639D+00 | 2.5518D-02 | 1.0450D+01  | 1.2590D+03 | -1.7481D+01 | -2.5639D+00 | 2.5518D-02 | 1.0450D+01  |
| 4 | 4 | 11 | 347 | 0  | 777200     | 7.9828D-01  | 9.8757D-02 | 1.0631D+01  | 1.0976D+03 | 6.5711D+00  | 7.9828D-01  | 9.8757D-02 | 1.0631D+01  |
| 4 | 4 | 12 | 348 | 0  | 777200     | 9.9879D+00  | 3.5604D-01 | 4.8799D+00  | 1.0478D+03 | 3.4486D+01  | 8.9879D+00  | 3.5604D-01 | 4.8799D+00  |
| 4 | 4 | 13 | 349 | 6  | 776100     | 8.6624D+00  | 5.0936D-01 | 0.0000D+00  | 1.0015D+03 | 6.4434D+01  | 9.6624D+00  | 5.0936D-01 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 14 | 350 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 1  | 351 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 2  | 352 | 3  | 777100     | -6.3715D-03 | 1.8932D-01 | -1.7316D-01 | 1.2907D+03 | 1.7654D-02  | -6.3715D-03 | 1.8932D-01 | -1.7316D-01 |
| 4 | 4 | 3  | 353 | 0  | 777200     | -1.7914D-01 | 5.1299D-01 | -1.1277D+00 | 1.3251D+03 | -1.5203D+02 | -1.7914D-01 | 5.1299D-01 | -1.1277D+00 |
| 4 | 4 | 5  | 354 | 0  | 777200     | -4.4556D+00 | 1.5162D+00 | 3.0879D+00  | 1.2909D+03 | -1.2430D+02 | -4.4556D+00 | 1.5162D+00 | 3.0879D+00  |
| 4 | 4 | 5  | 355 | 0  | 777200     | -4.6181D+00 | 1.2224D+00 | 3.0879D+00  | 1.3202D+03 | -1.1154D+02 | -4.6181D+00 | 1.2224D+00 | 3.0879D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 356 | 0  | 777200     | -8.5067D+00 | 1.4629D+00 | 6.3104D+00  | 1.3313D+03 | -1.0041D+02 | -8.5067D+00 | 1.4629D+00 | 6.3104D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 357 | 0  | 777200     | -5.2078D+00 | 8.1999D-01 | 7.9290D+00  | 1.3959D+03 | -9.5683D+01 | -5.2078D+00 | 8.1999D-01 | 7.9290D+00  |
| 4 | 4 | 8  | 358 | 0  | 777200     | -4.8074D-01 | 2.8382D-01 | 7.6069D+00  | 1.3216D+03 | -8.5239D+01 | -4.8074D-01 | 2.8382D-01 | 7.6069D+00  |
| 4 | 4 | 9  | 359 | 0  | 777200     | -7.4865D-01 | 4.7228D-02 | 1.9397D+00  | 1.2709D+03 | -1.1994D+01 | -7.4865D-01 | 4.7228D-02 | 1.9397D+00  |
| 4 | 4 | 10 | 360 | 0  | 777200     | -2.5670D+00 | 2.3473D-02 | 1.0481D+01  | 1.1820D+03 | -1.8755D+01 | -2.5670D+00 | 2.3473D-02 | 1.0481D+01  |
| 4 | 4 | 11 | 361 | 0  | 777200     | 8.2232D-01  | 8.5593D-02 | 1.0752D+01  | 1.0687D+03 | 5.3888D+00  | 8.2232D-01  | 8.5593D-02 | 1.0752D+01  |
| 4 | 4 | 12 | 362 | 0  | 777200     | 9.3187D+00  | 3.4064D-01 | 4.9646D+00  | 1.0349D+03 | 2.9629D+01  | 9.3187D+00  | 3.4064D-01 | 4.9646D+00  |
| 4 | 4 | 13 | 363 | 6  | 776100     | 1.0187D+01  | 4.9894D-01 | 0.0000D+00  | 0.9959D+03 | 6.2007D+01  | 1.0187D+01  | 4.9894D-01 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 14 | 364 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 1  | 365 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 2  | 366 | 53 | 767100     | 9.9470D-03  | 0.0000D+00 | 9.3201D-02  | 1.0474D+03 | -1.7894D+02 | 9.9470D-03  | 0.0000D+00 | 9.3201D-02  |
| 4 | 4 | 3  | 367 | 5  | 767100     | 9.6785D-02  | 0.0000D+00 | 2.8483D-01  | 1.0529D+03 | -1.5632D+02 | 9.6785D-02  | 0.0000D+00 | 2.8483D-01  |
| 4 | 4 | 6  | 368 | 5  | 767100     | -4.3838D-01 | 0.0000D+00 | 1.5159D+00  | 0.8359D+03 | -1.3580D+02 | -4.3838D-01 | 0.0000D+00 | 1.5159D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 369 | 5  | 767100     | -3.0149D-02 | 0.0000D+00 | 3.5858D+00  | 0.8303D+03 | -1.2575D+02 | -3.0149D-02 | 0.0000D+00 | 3.5858D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 370 | 5  | 767100     | -4.3517D-01 | 0.0000D+00 | 5.3052D+00  | 0.8421D+03 | -1.1455D+02 | -4.3517D-01 | 0.0000D+00 | 5.3052D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 371 | 5  | 767100     | -6.7126D-02 | 0.0000D+00 | 7.2180D+00  | 0.8754D+03 | -1.0801D+02 | -6.7126D-02 | 0.0000D+00 | 7.2180D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 372 | 5  | 767100     | -1.6821D-01 | 0.0000D+00 | 7.4681D+00  | 1.0925D+03 | -8.9386D+01 | -1.6821D-01 | 0.0000D+00 | 7.4681D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 373 | 5  | 767100     | -7.3688D-01 | 0.0000D+00 | 7.9238D+00  | 1.0389D+03 | -5.3441D+01 | -7.3688D-01 | 0.0000D+00 | 7.9238D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 374 | 5  | 767100     | -2.5686D+00 | 0.0000D+00 | 1.0504D+01  | 1.0210D+03 | -1.9851D+01 | -2.5686D+00 | 0.0000D+00 | 1.0504D+01  |
| 4 | 4 | 6  | 375 | 5  | 767100     | 8.4853D-01  | 0.0000D+00 | 1.0871D+01  | 1.0076D+03 | 4.2363D+00  | 8.4853D-01  | 0.0000D+00 | 1.0871D+01  |
| 4 | 4 | 6  | 376 | 5  | 767100     | 9.7864D+00  | 0.0000D+00 | 5.0605D+00  | 0.9928D+03 | 2.8042D+01  | 9.7864D+00  | 0.0000D+00 | 5.0605D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 377 | 56 | 766100     | 1.0974D+01  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.9875D+03 | 5.9880D+01  | 1.0974D+01  | 0.0000D+00 | 5.0605D+00  |
| 4 | 4 | 6  | 378 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 379 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 380 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 381 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 382 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 383 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 384 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 385 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 386 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 387 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 388 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 389 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 390 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 391 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 392 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 4 | 4 | 7  | 393 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 5 | 1  | 394 | -3 | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |





|   |   |    |     |     |        |             |             |             |            |             |             |             |            |             |
|---|---|----|-----|-----|--------|-------------|-------------|-------------|------------|-------------|-------------|-------------|------------|-------------|
| 5 | 4 | 11 | 445 | 4   | 677100 | 0.0000D+00  | -1.2284D-01 | 1.4152D+01  | 1.0664D+03 | 2.6487D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.2284D-01 | 1.4152D+01  |
| 5 | 4 | 12 | 446 | 0   | 777200 | 1.1910D+01  | 6.5991D-01  | 5.1815D+00  | 1.0211D+03 | 7.7753D+00  | 1.1910D+01  | 1.1910D+01  | 6.5991D-01 | 5.1815D+00  |
| 5 | 4 | 13 | 447 | 6   | 776100 | 1.1491D+01  | 9.8633D-01  | 0.0000D+00  | 0.9903D+03 | 4.4642D+01  | 1.1491D+01  | 0.0000D+00  | 9.8633D-01 | 0.0000D+00  |
| 5 | 4 | 14 | 448 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 5 | 1  | 449 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 5 | 2  | 450 | 43  | 677200 | 0.0000D+00  | 2.0519D-01  | -2.2558D-01 | 1.0682D+03 | -1.7550D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 5 | 3  | 451 | 0   | 777200 | 1.3684D-01  | 6.4325D-01  | -2.7053D+00 | 1.3257D+03 | -1.5233D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 6.4325D-01 | -2.7053D+00 |
| 5 | 5 | 4  | 452 | 0   | 777200 | -1.7037D+01 | 4.1280D+00  | 7.5085D-01  | 1.2905D+03 | -1.1405D+02 | -1.7037D+01 | 4.1280D+00  | 7.5085D-01 | 4.1280D+00  |
| 5 | 5 | 5  | 453 | 0   | 777200 | -1.3817D+01 | 4.2965D+00  | 3.0064D+00  | 1.3023D+03 | -1.1044D+02 | -1.3817D+01 | 4.2965D+00  | 3.0064D+00 | 4.2965D+00  |
| 5 | 5 | 6  | 454 | 0   | 777200 | -1.6983D+01 | 4.5785D+00  | 4.9843D+00  | 1.3289D+03 | -9.0271D+01 | -1.6983D+01 | 4.5785D+00  | 4.9843D+00 | 4.9843D+00  |
| 5 | 5 | 7  | 455 | 0   | 777200 | -1.5202D+01 | 3.6938D+00  | 8.9535D+00  | 1.3889D+03 | -9.7917D+01 | -1.5202D+01 | 3.6938D+00  | 8.9535D+00 | 8.9535D+00  |
| 5 | 5 | 8  | 456 | 0   | 777200 | -1.1956D-01 | 4.8407D-01  | 7.4754D+00  | 1.3104D+03 | -8.5751D+01 | -1.1956D-01 | 4.8407D-01  | 7.4754D+00 | 7.4754D+00  |
| 5 | 5 | 9  | 457 | 0   | 777200 | -6.9063D-01 | 5.5394D-01  | 7.0848D+00  | 1.2507D+03 | -4.9896D+01 | -6.9063D-01 | 5.5394D-01  | 7.0848D+00 | 7.0848D+00  |
| 5 | 5 | 10 | 458 | 0   | 777200 | -3.5944D+00 | 2.1324D-02  | 1.0932D+01  | 1.1212D+03 | -1.4441D+01 | -3.5944D+00 | 2.1324D-02  | 1.0932D+01 | 1.0932D+01  |
| 5 | 5 | 11 | 459 | 4   | 677100 | 0.0000D+00  | 1.1160D-01  | 1.4399D+01  | 1.0404D+03 | 1.5687D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.1160D-01 | 1.4399D+01  |
| 5 | 5 | 12 | 460 | 0   | 777200 | 1.2307D+01  | 7.6555D-01  | 5.3717D+00  | 1.6153D+03 | 4.7351D+00  | 1.2307D+01  | 7.6555D-01  | 5.3717D+00 | 5.3717D+00  |
| 5 | 5 | 13 | 461 | 6   | 776100 | 1.2119D+01  | 1.2019D+00  | 0.0000D+00  | 0.9852D+03 | 3.9974D+01  | 1.2119D+01  | 1.2019D+00  | 1.2019D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 5 | 14 | 462 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 6 | 1  | 463 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 6 | 2  | 464 | 453 | 667100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.6259D-01 | 1.7808D+02  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 6 | 3  | 465 | 5   | 767100 | 4.3799D-01  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.0286D+03 | -1.7808D+02 | 4.3799D-01  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 6 | 4  | 466 | 1   | 767402 | 1.3348D-01  | -1.0000D-07 | 1.7981D+00  | 0.8737D+03 | -1.3477D+02 | 1.3348D-01  | -1.0000D-07 | 1.7981D+00 | 1.7981D+00  |
| 5 | 6 | 5  | 467 | 5   | 767402 | 3.0002D-01  | -1.0000D-07 | 3.3141D+00  | 0.8683D+03 | -1.2256D+02 | 3.0002D-01  | -1.0000D-07 | 3.3141D+00 | 3.3141D+00  |
| 5 | 6 | 6  | 468 | 5   | 767402 | 2.6098D-02  | -1.0000D-07 | 5.725D+00   | 0.8855D+03 | -1.2511D+02 | 2.6098D-02  | -1.0000D-07 | 5.725D+00  | 5.725D+00   |
| 5 | 6 | 7  | 469 | 5   | 767100 | -5.3941D-02 | -1.0000D-07 | 7.1465D+00  | 0.9441D+03 | -1.0445D+02 | -5.3941D-02 | -1.0000D-07 | 7.1465D+00 | 7.1465D+00  |
| 5 | 6 | 8  | 470 | 5   | 767100 | 2.0710D-02  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.0912D+03 | -8.7407D+01 | 2.0710D-02  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 6 | 9  | 471 | 5   | 767100 | -6.7401D-01 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.0370D+03 | -5.1251D+01 | -6.7401D-01 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 6 | 10 | 472 | 5   | 667100 | 3.0004D+00  | 0.0000D+00  | 1.0963D+01  | 1.0209D+03 | 1.5614D+01  | 3.0004D+00  | 0.0000D+00  | 1.0963D+01 | 1.0963D+01  |
| 5 | 6 | 11 | 473 | 45  | 767100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.0074D+03 | 2.4982D-01  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 6 | 12 | 474 | 5   | 767100 | 1.3223D+01  | 0.0000D+00  | 5.6290D+00  | 0.9886D+03 | 1.5720D+00  | 1.3223D+01  | 0.0000D+00  | 5.6290D+00 | 5.6290D+00  |
| 5 | 6 | 13 | 475 | 56  | 766100 | 1.3741D+01  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.9801D+03 | 3.4382D+01  | 1.3741D+01  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 6 | 14 | 476 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 1  | 477 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 2  | 478 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 3  | 479 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 4  | 480 | -3  |        | 0.0000D+00  | -1.0000D-07 | 0.0000D+00  | 5.1800D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 5  | 481 | -3  |        | 0.0000D+00  | -1.0000D-07 | 0.0000D+00  | 5.1800D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 6  | 482 | -3  |        | 0.0000D+00  | -1.0000D-07 | 0.0000D+00  | 5.1800D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 7  | 483 | -3  |        | 0.0000D+00  | -1.0000D-07 | 0.0000D+00  | 5.1800D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 8  | 484 | -3  |        | 0.0000D+00  | -1.0000D-07 | 0.0000D+00  | 5.1800D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 9  | 485 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 10 | 486 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 11 | 487 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 12 | 488 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 13 | 489 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 5 | 7 | 14 | 490 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 6 | 1 | 1  | 491 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 6 | 1 | 2  | 492 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 6 | 1 | 3  | 493 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |
| 6 | 1 | 4  | 494 | -3  |        | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  |



|   |   |    |     |     |        |             |             |             |            |             |             |            |             |            |
|---|---|----|-----|-----|--------|-------------|-------------|-------------|------------|-------------|-------------|------------|-------------|------------|
| 6 | 4 | 13 | 545 | 46  | 776301 | 1.3148D+01  | 1.4372D+00  | 0.0000D+00  | 0.9754D+03 | 2.5492D+01  | 1.3148D+01  | 1.4372D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 4 | 14 | 546 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 1  | 547 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 2  | 548 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 3  | 549 | 43  | 677100 | 2.8495D-01  | 1.6315D-02  | 0.0000D+00  | 1.0356D+03 | -1.5414D+02 | 0.0000D+00  | 2.8495D-01 | 1.6315D-02  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 4  | 550 | 4   | 677401 | -3.6096D+00 | -3.6096D+00 | -3.6096D+00 | 0.6346D+03 | -1.3969D+02 | -3.0000D+01 | 9.6840D-01 | -3.6096D+00 | 5.5628D+00 |
| 6 | 5 | 5  | 551 | 4   | 677401 | -2.0000D+01 | 4.8888D+00  | 5.5628D+00  | 0.5435D+03 | -1.1065D+02 | -2.0000D+01 | 4.8888D+00 | 5.5628D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 6  | 552 | 4   | 677401 | -3.0000D+01 | 1.8644D+00  | -6.2505D-01 | 0.6692D+03 | -1.1937D+02 | -3.0000D+01 | 1.8644D+00 | -6.2505D-01 | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 7  | 553 | 4   | 677401 | -2.0000D+01 | 4.3401D+00  | 8.0405D+00  | 0.5803D+03 | -9.1448D+01 | -2.0000D+01 | 4.3401D+00 | 8.0405D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 8  | 554 | 4   | 677100 | 0.0000D+00  | 1.3209D-01  | 6.9445D+00  | 1.0909D+03 | -9.1479D+01 | 0.0000D+00  | 1.3209D-01 | 6.9445D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 9  | 555 | 4   | 677100 | 0.0000D+00  | 2.6876D-02  | 5.8366D+00  | 1.0378D+03 | -4.7914D+01 | 0.0000D+00  | 2.6876D-02 | 5.8366D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 10 | 556 | 46  | 676100 | 0.0000D+00  | 1.4133D-02  | 0.0000D+00  | 1.0204D+03 | -7.4748D+00 | 0.0000D+00  | 1.4133D-02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 11 | 557 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 12 | 558 | 43  | 777301 | 8.0257D+00  | 1.9201D+00  | 3.1381D+00  | 0.9851D+03 | -1.5304D+01 | 8.0257D+00  | 1.9201D+00 | 3.1381D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 13 | 559 | 46  | 776301 | 1.2039D+01  | 2.7262D+00  | 0.0000D+00  | 0.9747D+03 | 1.8606D+01  | 1.2039D+01  | 2.7262D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 5 | 14 | 560 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 1  | 561 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 2  | 562 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 3  | 563 | 453 | 667100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.0117D+03 | -1.5657D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 7.7939D-01 |
| 6 | 6 | 4  | 564 | 45  | 667100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.4881D+00  | 0.9214D+03 | -1.3978D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 1.4881D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 5  | 565 | 45  | 667100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 3.5630D+00  | 0.9305D+03 | -1.3109D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 3.5630D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 6  | 566 | 45  | 667100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 4.7800D+00  | 0.9447D+03 | -1.1959D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 4.7800D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 7  | 567 | 45  | 667100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 6.6369D+00  | 1.1286D+03 | -1.1140D+02 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 6.6369D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 8  | 568 | 45  | 667100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 6.8825D+00  | 1.0908D+03 | -8.7725D+01 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 6.8825D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 9  | 569 | 45  | 667100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 5.8285D+00  | 1.0378D+03 | -4.9217D+01 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 5.8285D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 10 | 570 | 456 | 666100 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 1.0182D+03 | -8.8093D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 11 | 571 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 12 | 572 | 453 | 767301 | 6.5314D+00  | 0.0000D+00  | 3.7972D+00  | 0.9837D+03 | -1.9816D+01 | 6.5314D+00  | 0.0000D+00 | 3.7972D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 13 | 573 | 456 | 766301 | 9.9790D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.9729D+03 | 6.7099D+00  | 9.9790D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 6 | 14 | 574 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 1  | 575 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 2  | 576 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 3  | 577 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 4  | 578 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 5  | 579 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 6  | 580 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 7  | 581 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 8  | 582 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 9  | 583 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 10 | 584 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 11 | 585 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 12 | 586 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 13 | 587 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 14 | 588 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 6 | 7 | 1  | 589 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 7 | 1 | 2  | 590 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 7 | 1 | 3  | 591 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 7 | 1 | 4  | 592 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 7 | 1 | 5  | 593 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |
| 7 | 1 | 6  | 594 | -3  | -3     | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 | 0.0000D+00  | 0.0000D+00 |



