Universitatea Națională de Știință și Tehnologie
POLITEHNICA București

Școala Doctorală de Inginerie Energetică

Facultatea de Energetică

TEZĂ DE DOCTORAT

Hidrogenul – vector industrial și energetic pentru perioada de tranziție către o societate neutră climatic

Autor: Doctorand Inginer Fizician Alina Elena ȘTEFĂNESCU

Profesor Coordonator: Profesor Doctor Gheorghe LĂZĂROIU,

București

2026

Abstract

The thesis entitled "***Hydrogen – an industrial and energy vector for the transition towards a climate-neutral society***" investigates the integrated use of hydrogen as an energy vector, with emphasis on the characteristics of combustion processes and on technological solutions compatible with this fuel. The work highlights the necessity of reassessing the physicochemical properties of the resulting gaseous fuels and of combustion equipment, in order to adapt to the challenges generated by the use of mixtures with high hydrogen content. The diffusion combustion technology was studied in detail, a technology that offers high combustion stability and allows the increase of the hydrogen proportion beyond the 15–20% limit currently achieved in premixed combustion with air. The research underlined the role of internal architecture and the need for precise control of operating parameters, particularly the air–fuel ratio. The architecture of the proposed system is completely innovative, thus providing an effective response to current challenges in the energy sector. The applied component of the research included the modeling and numerical simulation of a diffusion burner designed for the combustion of H_2–CH_4 mixtures with a hydrogen content of up to 50%. Using advanced computational fluid dynamics (CFD) methods in the ANSYS Fluent platform, issues related to flame stability, temperature distribution, and gas emissions were analyzed, with the aim of promoting low-carbon alternative fuels. The simulated model reproduces the operation of a burner under real industrial conditions, and the results obtained indicate optimal operating stabilities and validate the potential of using such gaseous fuel mixtures as a sustainable energy transition solution. The validation of the simulations was carried out through an experimental program developed using a specially designed test stand. This was equipped with the innovative burner and with advanced instrumentation for real-time monitoring of flow and combustion parameters, such as flame temperature, pressure, and gas flow rates. The separate feeding of hydrogen and methane allowed the preparation of variable mixtures, tested under controlled conditions, providing highly accurate experimental data useful for the optimization of diffusion combustion technology. Considering these aspects, the objective of the thesis is the detailed exploration of the effects of different proportions of hydrogen mixed with methane on the general characteristics of combustion, including flame stability, energy efficiency, and pollutant emission levels. Although previous studies have highlighted the significant influence of hydrogen on combustion processes—sometimes in contradiction with the behavior of methane - this thesis has clarified the exact mechanisms and complex interactions between the two fuels. By conducting an extensive set of experiments and analyzing flame behavior at different equivalence ratios, the thesis contributes to a deeper understanding of the gas-dynamic, thermodynamic, and kinetic phenomena involved. In this context, the thesis makes an important contribution to the specialized literature, opening new directions for future research in the field of alternative fuels and energy efficiency in the combustion of H_2–CH_4 mixtures.

Keywords: hydrogen energy vector, energy transition, diffusion combustion, diffusion burner, numerical simulation, experimental validation.

Rezumat

Teza intitulată „***Hidrogenul – vector industrial și energetic pentru perioada de tranziție către o societate neutră climatic***” investighează utilizarea integrată a hidrogenului ca vector energetic, cu accent pe caracteristicile proceselor de ardere și pe soluțiile tehnologice compatibile cu acest combustibil. Lucrarea evidențiază necesitatea reevaluării proprietăților fizico-chimice ale combustibililor gazoși formați și a echipamentelor de ardere, în vederea adaptării la provocările generate de utilizarea amestecurilor cu conținut ridicat de hidrogen. A fost studiată în detaliu tehnologia de ardere difuzivă, o tehnologie ce oferă o stabilitate ridicată a arderii și care permite creșterea proporției de hidrogen peste limita de 15–20% realizată în prezent la arderea preamestecului cu aer. Cercetările au subliniat rolul arhitecturii interne și necesitatea controlului precis al parametrilor de funcționare, în special al raportului aer–combustibil. Arhitectura sistemului propus este complet inovativă, oferind astfel un răspuns eficient la provocările actuale din sectorul energetic. Componenta aplicativă a cercetării a inclus modelarea și simularea numerică a unui arzător difuziv, proiectat pentru arderea amestecurilor H_2–CH_4, cu un conținut de hidrogen de până la 50%. Utilizând metode avansate de dinamică computațională a fluidelor (CFD) în platforma ANSYS Fluent, au fost analizate problemele legate de stabilitatea flăcării, distribuția temperaturii și emisiile de gaze, în vederea promovării combustibililor alternativi cu emisii reduse de carbon. Modelul simulat reproduce funcționarea unui arzător în condiții industriale reale, iar rezultatele obținute indică stabilitățile optime de operare și validează potențialul utilizării acestor amestecuri de combustibili gazoși ca soluție de tranziție energetică sustenabilă. Validarea simulărilor s-a realizat printr-un program experimental desfășurat prin utilizarea unui stand de testare special conceput în acest scop. Acesta a fost echipat cu arzătorul inovativ și cu oinstrumentație avansată pentru monitorizarea în timp real a parametrilor de curgere și de ardere, precum temperatura flăcării, presiunea și debitele gazelor. Alimentarea separată cu hidrogen și metan a permis obținerea unor amestecuri variabile, testate în condiții controlate, oferind date experimentale de mare precizie, utile pentru optimizarea tehnologiei de ardere difuzive. Având în vedere aceste considerente, rezultă că obiectivul tezei constă în explorarea detaliată a efectelor diferitelor proporții de hidrogen în amestec cu metanul asupra caracteristicilor generale ale combustiei inclusiv stabilitatea arderii eficienței energetice și nivelului emisiilor de poluanți. Deși studiile anterioare au evidențiat influența semnificativă a hidrogenului asupra proceselor de ardere – uneori în contradicție cu comportamentul metanului – prezenta teză a clarificat mecanismele exacte și interacțiunile complexe dintre cei doi combustibili. Prin desfășurarea unui set extins de experimente și prin analiza comportamentului flăcării la diverse rapoarte de echivalență, teza contribuie la o înțelegere aprofundată a fenomenelor gazodinamice, termodinamice și cinetice implicate. În acest context, teza aduce o contribuție importantă la literatura de specialitate, deschizând direcții noi pentru cercetările viitoare în domeniul combustibililor alternativi și al eficienței energetice în arderea amestecurilor H_2- CH_4.

Cuvinte cheie: *hidrogen vector energetic, tranziție energetică, ardere difuzivă. arzător difuziv, simulare numerică și validare experimentală*

Prefață

Teza intitulată „***Hidrogenul – vector industrial și energetic pentru perioada de tranziție către o societate neutră climatic***” abordează rolul strategic al hidrogenului în contextul tranziției energetice și industriale, analizând potențialul acestuia de a contribui la decarbonizarea sectoarelor economice cu emisii mari de gaze cu efect de seră.

În contextul actual al schimbărilor climatice și al presiunilor tot mai mari de reducere a emisiilor de carbon, cercetarea alternativelor la combustibilii fosili devine esențială. Hidrogenul, ca și combustibil curat, are un potențial semnificativ în tranziția către o economie cu emisii scăzute. n mod particular, amestecurile de hidrogen cu gaze naturale, precum metanul, reprezintă o oportunitate valoroasă pentru integrarea hidrogenului în prima etapă a tranziției energetice, facilitând optimizarea proceselor de ardere și reducerea impactului ecologic asociat utilizării combustibililor convenționali.

Obiectivul principal al cercetării cuprinde dezvoltarea de modele predictive și strategii de optimizare a arderii, destinate aplicațiilor industriale, cu accent atât pe performanța termică, cât și pe impactul ecologic. Aceste cercetări conduc la soluții tehnologice inovatoare în domeniul energetic și al reducerii emisiilor poluante, având un impact semnificativ asupra sustenabilității proceselor industriale și utilizării eficiente a resurselor.

Tranziția energetică globală, impusă de necesitatea reducerii emisiilor de gaze cu efect de seră și de adaptarea la noile realități climatice, a deschis calea către o regândire profundă a sistemelor de producere și utilizare a energiei. În acest context, hidrogenul se afirmă tot mai puternic ca un vector energetic strategic, cu aplicabilitate extinsă în industrie, transporturi și generare de energie electrică și termică. Integrarea sa într-un mix energetic decarbonizat impune însă o abordare riguroasă, multidisciplinară, care să răspundă provocărilor tehnice, tehnologice și de siguranță asociate utilizării acestui combustibil.

Lucrarea de față se înscrie în acest efort de cunoaștere și inovație, propunând o analiză complexă a comportamentului hidrogenului în procesele de ardere și dezvoltând soluții aplicative concrete pentru valorificarea sa în instalații industriale și rezidențiale. Prin combinarea modelării numerice cu testarea experimentală, autorul oferă o contribuție relevantă la înțelegerea mecanismelor de ardere ale amestecurilor H_2–CH_4 și la optimizarea configurațiilor de arzătoare compatibile cu aceste combustibili.

În cadrul tezei, cercetările s-au desfășurat cu o rigoare metodologică ridicată, prin utilizarea unor instrumente de simulare de ultimă generație și printr-o abordare aplicativă solid fundamentată științific. Arhitectura inovativă a sistemului propus și calitatea rezultatelor experimentale susțin ideea că hidrogenul nu este doar o promisiune a viitorului, ci o soluție reală pentru prezent, atunci când este susținut de cercetare avansată și inginerie de precizie. Această lucrare se adresează nu doar comunității academice, ci și specialiștilor implicați în

dezvoltarea de tehnologii sustenabile pentru sectorul energetic. Teza aduce o contribuție semnificativă în drumul către o economie neutră climatic, combinând cercetare aplicată cu cea teoretică într-o viziune de viitor.

În dezvoltarea sa, teza a abordat Capitolul 1 "***Hidrogenul - Vector Energetic În Industrie***" fundamentează rolul esențial al hidrogenului în contextul tranziției energetice, accentuând potențialul său ca vector strategic în reducerea emisiilor de carbon. Integrarea acestuia în amestecuri combustibile cu metan permite valorificarea infrastructurii existente, facilitând decarbonizarea rapidă a sectoarelor industriale și energetice. Deși protiul este utilizat pe scară largă în aplicațiile comerciale, o înțelegere aprofundată a comportamentului hidrogenului necesită analiza diferențelor izotopice. Acestea determină variații semnificative în proprietăți precum difuzivitatea, conductivitatea termică și cinetica reacțiilor chimice. În acest sens, deuteriul și tritiul devin tot mai relevanți în cercetarea avansată și în dezvoltarea tehnologiilor nucleare emergente, în special în contextul fuziunii controlate. Pentru a surprinde maturitatea științifică actuală a subiectului, este necesară o incursiune istorică în evoluția cunoașterii acestui element. De la observațiile empirice ale alchimiștilor și experimentele timpurii ale lui Cavendish și Lavoisier, până la utilizările moderne în propulsia spațială, reactoare nucleare și tehnologii cuantice, hidrogenul s-a impus drept un element-cheie al progresului tehnologic. Descoperirea deuteriului și tritiului a marcat o schimbare de paradigmă în fizica nucleară, deschizând noi direcții de cercetare și aplicații strategice. Capitolul detaliază caracteristicile fundamentale ale celor trei izotopi naturali ai hidrogenului – protiu (^1H), deuteriu (^2H sau D) și tritiu (^3H sau T) – evidențiind diferențele de masă și impactul acestora asupra performanței în procese tehnologice. Sunt analizate proprietățile specifice ale fiecărui izotop, metodele de obținere, precum și aplicațiile relevante în industrie, energie și cercetare științifică. De asemenea, este subliniată influența acestor diferențe asupra eficienței sistemelor de ardere, comportamentului combustibililor nucleari și modelării numerice în ingineria energetică. Deuteriul este prezentat ca un instrument valoros pentru investigarea mecanismelor de reacție și funcționarea reactoarelor cu apă grea, în timp ce tritiul este considerat indispensabil pentru succesul viitor al fuziunii nucleare. Capitolul explorează parcursul experimental și teoretic al descoperirii acestor izotopi, incluzând contribuțiile esențiale ale savanților Urey, Aston, Rutherford și Alvarez. Sunt analizate, totodată, metodele de detecție, implicațiile de siguranță și aplicațiile critice în cadrul proiectelor ITER și DEMO. O secțiune extinsă este dedicată tehnologiilor de producere și separare a izotopilor hidrogenului. Se prezintă metode industriale consacrate precum reformarea metanului cu abur (SMR), oxidarea parțială și reformarea autotermală, alături de alternative sustenabile precum electroliza apei sau exploatarea surselor naturale de hidrogen. Procesele avansate de separare – distilarea criogenică, schimbul izotopic catalitic (VPCE, LPCE, CECE), permeația prin membrane, termodifuzia și adsorbția diferențială – sunt analizate în detaliu. În acest context, este evidențiată contribuția cercetărilor desfășurate la ICSI Râmnicu Vâlcea, în special în ceea ce

privește dezvoltarea instalațiilor de detritiere și infrastructurii de separare destinate proiectelor CANDU și ITER. Capitolul abordează și aspectele tehnologice, economice și de siguranță asociate izotopilor hidrogenului, incluzând provocările privind selectivitatea izotopică, consumul energetic, compatibilitatea materialelor și riscurile de contaminare (în special în cazul tritiului). Sunt discutate soluții moderne de monitorizare, protecție, recuperare și reglementare, precum și direcții emergente de cercetare – inteligență artificială, noi catalizatori și integrarea cu surse regenerabile. Un accent suplimentar este pus pe importanța purității hidrogenului în aplicații de înaltă precizie, fiind analizate metodele de rafinare: adsorbția prin variație de presiune (PSA), adsorbția termică (TSA), separarea cu hidruri metalice și membrane selective. În final, sunt evidențiate aplicațiile industriale și energetice ale izotopilor, consolidând imaginea hidrogenului ca resursă multidisciplinară și element central al transformării sistemelor energetice. Utilizările în reactoarele CANDU, fuziunea nucleară, stocarea energiei și sinteza de compuși speciali reflectă relevanța strategică a hidrogenului în tranziția către o economie curată și sustenabilă. Structura capitolului oferă astfel un cadru conceptual solid pentru înțelegerea aprofundată a hidrogenului și izotopilor săi, esențial pentru dezvoltarea de soluții tehnologice inovatoare. Analiza izotopică nu reprezintă doar o preocupare academică, ci un pilon al strategiilor globale privind neutralitatea climatică, securitatea energetică și economia circulară.

Capitolul 2 „***Hidrogenul Verde - Vector Energetic***” abordează, într-o manieră integrată și fundamentată științific, problematica tranziției către o economie bazată pe hidrogen, evidențiind rolul esențial al acestuia ca vector energetic strategic în procesul de decarbonizare a sistemului energetic. În cadrul capitolului sunt analizate principalele etape ale tranziției energetice, precum creșterea ponderii surselor regenerabile de energie (SRE), dezvoltarea tehnologiilor de captare și valorificare a dioxidului de carbon (CCU) și importanța implementării tehnologiilor de tip Power-to-Gas (PtG) pentru stocarea energiei. O atenție deosebită este acordată sistemelor Power-to-X (PtX), care permit conversia energiei electrice regenerabile în hidrogen verde, metan sau alți combustibili sintetici cu aplicabilitate extinsă în industrie, transport și sectorul rezidențial. Capitolul include și o analiză comparativă a celor trei tehnologii majore de electroliză – alcalină (AEC), cu membrană schimbătoare de protoni (PEM) și cu oxid solid (SOEC) – evaluându-le din perspectiva eficienței energetice, flexibilității operaționale, maturității tehnologice și costurilor de implementare. Sunt prezentate aspecte economice și tehnice privind producerea hidrogenului verde la scară europeană, fiind evidențiat potențialul energetic național și regional pentru integrarea acestor soluții. Se abordează, de asemenea, posibilitățile de stocare, transport și interconectare a rețelelor de gaz natural și hidrogen, subliniindu-se avantajele unor soluții hibride pentru echilibrarea rețelelor electrice în contextul creșterii ponderii surselor regenerabile intermitente. De asemeneaproblematica abordată în capitolul 2 oferă și o bază teoretică și aplicativă solidă pentru înțelegerea complexității tranziției energetice și pentru identificarea rolului strategic pe

care hidrogenul îl poate juca în construcția unei infrastructuri energetice durabile. Se subliniază faptul că viitoarele sisteme energetice vor integra tot mai mult hidrogenul verde, nu doar ca vector de stocare, ci și ca soluție eficientă în transport și industrie, prin injecție în rețeaua de metan sau utilizare în instalații dedicate. Tehnologiile Power-to-X devin instrumente esențiale pentru transformarea surplusului de energie regenerabilă în combustibili utili, contribuind la stabilitatea rețelelor și la stocarea sezonieră. Exemple concrete, precum proiectele pilot 20HyGrid din România și Green Hysland din Spania, confirmă fezabilitatea acestor soluții pentru condiții reale. În acest cadru, lucrarea propune dezvoltarea unui arzător difuziv dedicat combustiei amestecurilor H_2–CH_4, ca parte a modelelor predictive pentru optimizarea proceselor de ardere cu reducerea emisiilor poluante, contribuind astfel la consolidarea bazei tehnologice necesare tranziției către o economie sustenabilă.

Capitolul 3, „***Particularități tehnologice alr combustiei de combustibili gazoși, inclusiv Hidrogen – Metan pentru tranziția energetică***” dedicat utilizării amestecurilor de hidrogen și metan, examinează în profunzime provocările tehnice și economice asociate integraării acestor soluții în tranziția energetică. Sunt analizate aspecte esențiale precum impactul asupra infrastructurii existente, siguranța operațională, costurile de implementare și implicațiile de mediu, conturând un cadru complex în care hidrogenul poate deveni un substitut viabil pentru combustibilii fosili tradiționali, în special pentru metan. Un accent important este pus pe rolul tehnologiilor de ardere, care reprezintă o verigă critică în valorificarea energetică a hidrogenului. În acest sens, lucrarea investighează principiile de funcționare ale arzătoarelor de combustibili gazoși prezentând diverse configurații - cu preamestec, flacără difuzivă, autoaspirație și emisii reduse de Nox - și analizând aplicabilitatea acestora în contexte industriale reale inclusiv pentru amestecul combustibil H_2 - CH_4. Pe baza unui cadru teoretic fundamental privind tehnologia arderii, capitolul detaliză comportamentul jeturilor turbulente, interacțiunea între combustibil și curenții de aer, precum și criteriile care determină stabilitatea flăcării și eficiența procesului de ardere. Se subliniază faptul că adoptarea hidrogenului necesită o reevaluare profundă a proprietăților fizico chimice ale combustibillilor gazoși, a configurațiilor constructive ale arzătoarelor și a strategiilor de control ale arderii.

Capitolul 4 „***Simularea CFD a unui Arzător Difuziv pentru Amestecuri de Metan și Hidrogen: Performanțe și Provocări***” investighează, prin simulare numerică avansată, comportamentul unui arzător difuziv proiectat special pentru arderea amestecurilor hidrogen și metan, cu un conținut de până la 50% H_2 în volumul amestecului de combustibil. Obiectivul principal al cercetării constă în analiza proceselor de ardere - cu accent pe stabilitatea flăcării, distribuția temperaturii și formarea emisiilor - în vederea promovării combustibililor alternativi cu emisii scăzute de carbon. Modelarea a fost realizată în ANSYS Fluent, într-un cadru riguros de dinamică computațională a fluidelor (CFD), aplicată asupra unui model detaliat al unui arzător industrial funcționând în regim controlat. Studiul evaluează performanțele procesului de ardere pentru diferite compoziții ale amestecului H_2 – CH_4 în regim stoichiometric și

substoichiometric și cu exces de aer, comparând rezultatele obținute cu cele pentru arderea exclusivă a metanului.

Rezultatele obținute au relevat condiții optime de funcționare și o stabilitate ridicată a flăcării, demonstrând astfel fezabilitatea utilizării industriale a amestecurilor bogate în hidrogen. Se evidențiază faptul că tehnologia de combustie difuzivă poate susține arderea sigură și eficientă a unor amestecuri cu până la 50% H_2, depășind limitele uzuale ale aplicațiilor actuale realizate în special pentru arderea premixatăcu aer, care de regulă nu trece de 30% H_2 în amestec. Cercetarea a inclus, în prima parte, analiza distribuției curgerii, urmată de investigarea procesului de combustie în interiorul arzătorului, caracterizarea câmpului de temperatură și a concentrațiilor speciilor reactive (CO, CO_2, H_2O), precum și studiul energiei cinetice turbulente în zona de ardere. Arhitectura conceptuală a arzătorului a fost brevetată. Validarea numerică s-a realizat pe baza unui arzător fizic construit special și testat în regim controlat pe un stand experimental, ceea ce a permis corelarea datelor simulate cu comportamentul real al sistemului. Prin abordarea integrată și nivelul ridicat de detaliu, lucrarea aduce o contribuție semnificativă la înțelegerea fenomenologiei arderii amestecurilor metan–hidrogen în regim difuziv și la dezvoltarea unor soluții tehnologice pentru aplicații industriale sustenabile. Concluziile cercetării susțin potențialul arzătoarelor adaptate combustibililor alternativi de a sprijini tranziția energetică, asigurând atât performanțe termice ridicate, cât și reducerea emisiilor de poluanți. Datele obținute pot constitui baza dezvoltării viitoare a unor modele predictive și a unor tehnologii inovatoare în domeniul arderii curate.

Cercetarea experimentală desfășurată este prezentată în Capitolul 5 "***Cercetări Experimentale de Ardere a Amestecului de Gaze CH_4-H_2***" cercetare ce a urmărit validarea modelării numerice aplicate arzătorului difuziv special proiectat pentru arderea amestecurilor de hidrogen și metan, cu un conținut de hidrogen de până la 50%. Standul experimental realizat în acest scop a fost conceput pentru a simula condiții reale de funcționare, permițând obținerea de date precise și relevante, standul ca element original, constituind obiectul unui brevet realizat. Arzătorul pilot utilizat este echipat cu cinci ajutaje pentru alimentarea cu combustibil, fiecare țuț fiind încadrat de o secțiune circular pentru admisia aerului, facilitând o ardere verticală în regim de dezvoltare liberă. Măsurătorile efectuate – temperatură, presiune, debit, compoziția flăcării – au evidențiat un comportament stabil al flăcării, în acord cu predicțiile CFD, demonstrând eficiența arhitecturii constructive. Rezultatele au evidențiat o scădere progresivă a vitezei flăcării pe direcția axială și o ardere completă, fără formare de poluanți din CO sau Nox peste limitele specific caracteristicilor combustibilului pentru regimuri cu exces de aer controlat ($\lambda \leq 1{,}3$). De asemenea, prin arhitectura sa concentrică, standul a permis alimentarea separată cu hidrogen și metan, oferind flexibilitate și adaptabilitate în configurarea amestecurilor combustibile de H_2 – CH_4 realizate. Validarea modelului numeric prin datele experimentale confirmă potențialul combustiei hibride H_2–CH_4 în regim difuziv–turbulent, deschizând perspective clare pentru aplicații industriale eficiente și sustenabile. Standul

experimental și arzătorul testat oferă o platformă robustă pentru cercetări ulterioare privind combustia hidrogenului în diverse proporții și condiții operaționale. Concluziile acestei cercetări susțin ideea că integrarea hidrogenului în mixul energetic este nu doar fezabilă tehnologic, ci și eficientă din punct de vedere al performanței și protecției mediului.

Contribuțiile tezei sunt detaliate în Capitolul 6 „***Concluzii Generale, Contribuții Originale și Direcții Viitoare de Cercetare***”, împreună cu concluziile generale și perspectivele de cercetare viitoare.

Exprimarea recunoștinței

Anii de cercetare dedicați studiilor doctorale au fost plini de provocări, de eforturi susținute pentru aprofundarea propriilor cunoștințe și de dorința de a contribui la îmbogățirea literaturii științifice prin rezultatele investigațiilor desfășurate într-un mediu academic de prestigiu - Universitatea Națională de Știință și Tehnologie POLITEHNICA București.

Îmi exprim profunda recunoștință îndrumătorului meu, Profesorul Gheorghe LAZĂROIU, pentru oportunitatea de a mă dezvolta și de a desfășura cercetări inovatoare, precum și pentru sprijinul oferit în stabilirea unor colaborări remarcabile. De asemenea, îi mulțumesc pentru rolul său de mentor în mediul academic și de cercetare, pentru îndrumarea binevoitoare și pentru motivația constantă din acești ani de studiu.

Adresez mulțumiri speciale Profesorului Lucian MIHĂESCU pentru comentariile constructive, observațiile deosebit de utile și sprijinul acordat în finalizarea tezei de doctorat.

Nu în ultimul rând, doresc să le mulțumesc Profesorului Gabriel Paul NEGREANU și Profesorului Ionel PISA pentru discuțiile valoroase și sfaturile oferite în cadrul întâlnirilor de progres.

Din toată inima, doresc să mulțumesc omului minunat care mi-a fost sprijin neclintit în această perioadă provocatoare – dragului meu Honey – precum și fiicelor mele dragi, Alexia și Alma, cărora le sunt profund recunoscător pentru înțelegerea, liniștea și prezența lor neprețuită.

Le sunt profund recunoscător părinților mei, Elena și Alecu, pentru că au crezut în mine și m-au susținut neclintit.

Dedic această cercetare fiicelor mele, Alexia și Alma, a căror iubire și zâmbete mi-au dat puterea de a merge înainte, cu mesajul *Toate visurile noastre pot deveni realitate, dacă avem curajul să le urmăm* ***-Walt Disney.***

Energia viitorului nu se află în resursele materiale, ci în ingeniozitatea și curajul oamenilor de știință ***- Nikola Tesla***

Capitolul 1: Hidrogenul - Vector Energetic În Industrie

1.1. Introducere

Hidrogenul se conturează drept un vector industrial esențial în contextul tranziției energetice și al tehnologiilor curate, datorită rolului său multiplu de transport, stocare și furnizare a energiei în aplicații variate, fără emisii directe de poluanți. Intensificarea politicilor de decarbonizare și inovațiile tehnologice recente au determinat o creștere substanțială a interesului față de hidrogen, în special în sectoarele strategice precum transporturile, industria grea și sectorul rezidențial. Prin versatilitatea sa, hidrogenul susține restructurarea sistemului energetic și industrial, contribuind decisiv la reducerea emisiilor de gaze cu efect de seră. În paralel, izotopii hidrogenului se dovedesc a fi resurse valoroase pentru cercetare și aplicații avansate, cu relevanță în energia nucleară, medicina de frontieră și știința materialelor, lărgind semnificativ orizontul utilizărilor acestui element. [1, 2].

1.2. Hidrogenul - scurt istoric

Primele observații asupra hidrogenului datează din secolul al XVI-lea, când Paracelsus descria apariția unui gaz inflamabil rezultat din reacția dintre metale și acizi. Ulterior, Jan Baptist van Helmont introduce termenul de „gaz” (1625), iar Robert Boyle documentează (1670) producerea și arderea unui gaz obținut din fier și acid sulfuric, detaliu publicat în lucrarea sa din 1672 [3]. Nicolas Lemery a confirmat caracterul exploziv al substanței (1700). Un progres major a fost realizat de Henry Cavendish, care în 1766 a izolat „aerul inflamabil” și a descris formarea apei prin arderea acestuia [4]. Antoine-Laurent Lavoisier a identificat în 1783 hidrogenul ca element distinct, atribuindu-i denumirea actuală. În același an, Jacques Charles a lansat primul balon cu hidrogen, iar Lavoisier și Laplace au măsurat căldura de combustie. Secolul al XIX-lea a adus descoperirea electrolizei apei (Nicholson și Carlisle), dezvoltarea pilelor de combustie (Schönbein și Grove) și studii criogenice ce au condus la lichefierea și solidificarea hidrogenului (Wróblewski, Dewar). În fizica modernă, hidrogenul a avut un rol esențial: studiile lui Bohr, Schrödinger și Pauli asupra atomului au fundamentat teoria cuantică, iar descoperirea izotopilor săi – deuteriul (Urey, 1931) și tritiul (Rutherford, 1934) – a revoluționat cercetarea nucleară. Secolul XX a adus aplicarea hidrogenului lichid ca combustibil pentru rachete (1943), folosirea sa în testele termonucleare (Ivy Mike, 1952) și inițierea programelor de fuziune controlată, de la Tokamak (1956) până la ITER (1985). Această evoluție, de la primele observații empirice la aplicații în energie, fizică și industrie, confirmă hidrogenul ca un element central al progresului științific și tehnologic, iar izotopii săi deschid perspective promițătoare pentru cercetarea fundamentală și aplicată.

1.3. Importanța izotopilor hidrogenului în industrie și aspecte teoretice ale separării

Izotopii hidrogenului – protiu (^1H), deuteriu (^2H sau D) și tritiu (^3H sau T) – sunt fundamentali în aplicații industriale variate, de la reactoare nucleare până la tehnologii de răcire și analiză spectroscopică. Proprietățile lor fizico-chimice diferite le conferă utilizări specifice, dar separarea acestora reprezintă o provocare tehnologică, din cauza diferențelor foarte mici de masă relativă. În prezent, metodele principale de separare folosite în industrie sunt distilarea criogenică, schimbul chimic izotopic și difuzia gazoasă, fiecare prezentând avantaje și limitări proprii.

1.3.1. Protiu, Deuteriu și Tritiu: Vectori Strategici în Energia Viitorului

Hidrogenul, cel mai ușor și cel mai abundent element din Univers, joacă un rol esențial în contextul tranziției energetice, fiind considerat un vector energetic strategic pentru reducerea emisiilor de carbon. Utilizarea sa în amestecuri combustibile, în special alături de metan, reprezintă o soluție viabilă pentru decarbonizarea sectoarelor industriale și energetice, fără a impune modificări semnificative asupra infrastructurii existente. Combustia amestecurilor de hidrogen și metan contribuie astfel la scăderea emisiilor de CO_2 și la diversificarea surselor de energie cu impact redus asupra mediului. Deși în aplicațiile comerciale curente se utilizează predominant protiul, izotopul cel mai ușor și mai stabil al hidrogenului, înțelegerea aprofundată a comportamentului acestui element impune analiza proprietăților izotopice. Deuteriu și tritiu, ceilalți doi izotopi naturali ai hidrogenului, prezintă caracteristici fizico-chimice distincte și sunt utilizați în mod diferențiat în funcție de cerințele proceselor tehnologice. Hidrogenul și izotopii săi au aplicații relevante în industria energetică, chimică și nucleară, fiecare necesitând metode specifice de producție, separare și purificare. În contextul dezvoltării surselor de energie durabilă, izotopii deuteriu și tritiu capătă o importanță strategică, fiind considerați combustibili esențiali pentru viitoarele reactoare de fuziune nucleară. Acest tip de reacție, care imită procesele naturale din interiorul stelelor, se conturează drept una dintre cele mai promițătoare tehnologii pentru obținerea unei surse de energie verzi, sustenabile și sigure pe termen lung. Cunoașterea diferențelor izotopice este, de asemenea, esențială în caracterizarea și optimizarea proceselor tehnologice avansate. Deuteriul, sub forma apei grele, este utilizat ca moderator de neutroni în reactoarele nucleare de tip CANDU. Tritiul este vizat în mod activ în cadrul proiectelor internaționale de fuziune nucleară, precum ITER, datorită potențialului său de a genera reacții energetice de mare

randament, cu emisii poluante aproape nule. Aceste aplicații evidențiază faptul că izotopii hidrogenului nu sunt doar o extensie academică a studiului chimiei elementare, ci instrumente strategice pentru ingineria energetică modernă. Pentru a înțelege pe deplin comportamentul și aplicabilitatea izotopilor hidrogenului, este esențială analiza comparativă a proprietăților lor fizice și chimice fundamentale, care influențează direct performanța în diverse procese industriale și științifice. În concluzie, analiza aprofundată a izotopilor hidrogenului – protiu, deuteriu și tritiu – reprezintă o premisă esențială pentru dezvoltarea de soluții tehnologice inovatoare. Acestea au aplicabilitate directă în tranziția energetică globală, în optimizarea proceselor de ardere a amestecurilor combustibile și în elaborarea tehnologiilor nucleare de ultimă generație, cu impact semnificativ asupra securității energetice și sustenabilității globale.

1.3.2. Proprietățile generale ale izotopilor hidrogenului

În natură, hidrogenul există sub trei forme izotopice: protiu (^1H), deuteriu (^2H sau D) și tritiu (^3H sau T). [5] Protiul domină aplicațiile comerciale și industriale actuale, iar deuteriu și tritiu sunt anticipați să joace un rol esențial în viitorul producției de energie curată, în special prin dezvoltarea tehnologiilor de fuziune nucleară controlată. ***Protiul*** (^1H) este izotopul predominant al hidrogenului, reprezentând ≈ 99,985 % din abundența naturală. [6, 7] La presiune atmosferică se prezintă sub formă gazoasă, devenind lichid la ≈ 20 K (–253 °C) și solid la ≈ 14 K (–259 °C). [8] Deuteriul și tritiul sunt prezenți în cantități foarte mici în mod natural și necesită procese specifice pentru obținerea unor cantități utilizabile. Aceștia sunt utilizați în aplicații științifice și industriale și reprezintă combustibilul reactoarelor de fuziune nucleară, proces considerat a fi una dintre cele mai promițătoare alternative pentru obținerea sustenabilă de energie verde. ***Deuteriul***, izotopul stabil al hidrogenului, conține un neutron suplimentar față de protiu și are o masă atomică de 2,0141 u.m.a. [7] Deși reprezintă doar 0,0156% din hidrogenul natural, acest izotop are o importanță strategică în aplicații energetice și științifice. În prezent, deuteriu are aplicații importante în cercetarea proceselor de ardere, fiind utilizat ca trasor izotopic pentru investigarea mecanismelor de reacție prin înlocuirea controlată a protiului. Astfel, devine un instrument valoros în analiza etapelor limitative din procese precum arderea amestecurilor metan-hidrogen. De asemenea, deuteriu joacă un rol esențial în industria nucleară, fiind utilizat în reactoarele de tip CANDU, unde apa grea (D_2O) acționează ca moderator de neutroni. [13, 14] ***Tritiul***, simbolizat prin ^3H (sau T), este singurul izotop natural radioactiv al hidrogenului, având nucleul alcătuit dintr-un proton și doi neutroni, cu o masă atomică relativă de 3,016049 u.m.a. [7]. Proprietățile fizice ale izotopilor influențează direct performanțele acestora în aplicații tehnologice. Difuzia moleculară este mai lentă pentru deuteriu și tritiu, iar conductivitatea termică scade odată cu creșterea masei izotopice. În procesele de ardere, aceste caracteristici afectează transferul de căldură și masa, factori critici în proiectarea sistemelor de ardere eficiente. Efectele izotopice cinetice sunt utilizate nu doar pentru studii fundamentale, ci și pentru validarea modelelor numerice avansate, care simulează comportamentul amestecurilor combustibile. [17] Deuteriul, prin intermediul apei grele, asigură funcționarea eficientă a reactoarelor nucleare, fără a necesita îmbogățirea combustibilului. În același timp, tritiul este considerat cheia dezvoltării viitoarelor reactoare de fuziune, precum ITER și DEMO, datorită caracteristicilor sale favorabile în reacțiile D-T. [14] În contextul actual al decarbonizării și al tranziției către o economie neutră climatic, izotopii hidrogenului joacă un rol esențial prin diversitatea aplicațiilor lor. Protiul rămâne principalul vector energetic utilizat în procesele de ardere și în pilele de combustie, contribuind la reducerea emisiilor de CO_2. Deuteriul și tritiul, în schimb, susțin dezvoltarea tehnologiilor nucleare avansate, oferind soluții pe termen lung pentru producerea de energie curată și durabilă. Integrarea acestor cunoștințe în proiectele energetice actuale este esențială pentru atingerea obiectivelor de neutralitate climatică și pentru asigurarea unui viitor energetic sustenabil.

1.4. Tehnologii de obținere a izotopilor hidrogenului

Acest capitol prezintă principalele tehnologii de obținere a izotopilor hidrogenului, acoperind atât procesele industriale consacrate, cât și cele emergente. Sunt analizate metodele de producere a protiului (^1H) utilizat pe scară largă, a deuteriului (^2H) valoros în cercetare și aplicații nucleare, precum și a tritiului (^3H) cu relevanță pentru fuziunea controlată.

1.4.1. Obținerea hidrogenului din hidrocarburi

Gazul natural, compus în principal din metan, reprezintă în prezent cea mai accesibilă, eficientă și economică sursă pentru producerea hidrogenului la scară industrială. Această metodă contribuie cu aproximativ 70% la producția globală de hidrogen. Utilizarea infrastructurii existente pentru distribuția gazelor naturale constituie un avantaj semnificativ, facilitând implementarea pe scară largă a acestui proces de producție. [18] Hidrogenul poate fi obținut prin conversia hidrocarburilor, în special a gazului natural, utilizând trei procese chimice principale: (i) oxidarea parțială, (ii) reformarea metanului cu abur și (iii) reformarea autotermală.

1.4.1.1. Reformarea metanului cu abur

Cea mai utilizată metodă pentru obținerea hidrogenului este reformarea metanului cu abur (Steam Methane Reforming – SMR), care este o tehnologie matură și eficientă din punct de vedere tehnic, însă asociată cu emisii semnificative de dioxid de carbon, estimate între 9 și 12 tone pentru fiecare tonă de hidrogen produs. Metoda presupune un consum energetic ridicat, determinat de necesitatea generării unor cantități mari de vapori de apă supraîncălziți, atât pentru menținerea unui raport molar H_2O/CH_4 apropiat de 3, cât și pentru atingerea temperaturilor operaționale necesare în zona activă a reactorului. [27]

Reacția chimică principală este endotermă, necesitând un aport continuu de energie termică, și poate fi descrisă astfel:

$$CH_4 + H_2O \left(+\frac{21MJ}{kmol\ CH_4}\right) \rightarrow CO + 3H_2 \quad (1)$$

Produsul principal este un amestec de hidrogen și monoxid de carbon, iar pentru creșterea randamentului în hidrogen, are loc o etapă ulterioară numită reacția de conversie a gazului de reacție (Water-Gas Shift). În această reacție, monoxidul de carbon reacționează suplimentar cu abur, formând dioxid de carbon și hidrogen:

$$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2 + \frac{41MJ}{kmol\ CO} \quad (2)$$

În vederea reducerii impactului asupra mediului, sunt în curs de dezvoltare și implementare tehnologii de captare și stocare a carbonului (Carbon Capture and Storage - CCS). CCS poate capta până la 90% din emisiile de CO_2, însă implică investiții semnificative în infrastructură [28]. O alternativă complementară constă în înlocuirea sursei termice convenționale cu energie furnizată de reactoare nucleare, eliminând astfel dependența de combustibili fosili în generarea aburului necesar procesului de reformare.

1.4.1.2. Reformarea prin oxidare parțială

Pe lângă optimizarea procesului SMR, o altă metodă industrială cu aplicabilitate largă pentru obținerea hidrogenului este reformarea parțială a metanului (oxidarea parțială). Oxidarea parțială este un proces exoterm, caracterizat prin degajare de căldură. Comparativ cu reformarea cu abur, reacția are loc într-un interval de timp semnificativ mai scurt și necesită un volum de reactor mai redus. Totuși, randamentul de conversie în hidrogen este mai scăzut, deoarece cantitatea de hidrogen obținută pe unitate de combustibil introdus este inferioară celei din reformarea cu abur.

Transformările chimice caracteristice procesului pot fi reprezentate prin următoarea ecuație de reacție:

$$CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow 2H_2 + CO, \quad \Delta H°_r = -35.6\ \text{kJ/mol} \quad (3)$$

1.4.1.3. Reformarea autotermala

O metodă hibridă, care combină avantajele reformării cu abur și ale oxidării parțiale, este reformarea autotermală a metanului (Autothermal Reforming – ATR). Această tehnologie utilizează simultan abur și oxigen în amestecul de alimentare, permițând echilibrarea aportului și consumului de energie în cadrul aceluiași proces.

În ATR, aportul termic necesar reacțiilor endoterme este furnizat prin oxidarea parțială a metanului, ambele reacții având loc într-un singur volum de reacție. Obiectivul principal al ATR constă în obținerea unui gaz de sinteză cu un conținut ridicat de hidrogen, sub constrângerile impuse de echilibrul termodinamic.

Cu toate acestea, constrângerile impuse de necesitatea reducerii amprentei de carbon impun reevaluarea acestor tehnologii în contextul obiectivelor de decarbonizare. În acest sens, integrarea unor soluții precum captarea și stocarea carbonului (CCS), utilizarea surselor de căldură regenerabile sau tranziția către metode nepoluante, precum electroliza apei cu energie regenerabilă, devine esențială pentru viitorul producției sustenabile de hidrogen.

1.4.2. Obținerea hidrogenului prin electroliza apei

O altă materie primă utilizată pentru obținerea hidrogenului, care permite integrarea surselor regenerabile de energie, este apa. Electroliza constă în aplicarea unui curent electric printr-o soluție electrolitică sau un mediu solid pentru a separa apa în componentele sale elementare. Întrucât nu implică emisii directe de gaze cu efect de seră, această metodă este considerată neutră din punct de vedere climatic și sustenabilă [46]. Dacă energia electrică utilizată provine din surse regenerabile (eoliană, solară, hidro) sau din surse nucleare, electroliza devine o tehnologie de producere a hidrogenului cu emisii zero.

1.4.3. Sursă emergentă de energie - Hidrogenul natural

Hidrogenul natural, o formă de hidrogen molecular care se formează și se acumulează în mod natural în scoarța terestră, a devenit recent o nouă direcție de interes în domeniu. În prezent, estimările indică faptul că aproximativ 20 Mt/an de hidrogen natural scapă în atmosferă [49], mare parte ajungând în ionosferă și pierzându-se în spațiu [50]. Formarea sa este atribuită în principal procesului geochimic de serpentinizare. Deși se credea că nu pot exista acumulări exploatabile de hidrogen natural, studii recente au identificat formațiuni geologice în care hidrogenul este eliberat continuu. [51] În ansamblu, hidrogenul natural are potențialul de a sprijini decarbonizarea

mai multor sectoare industriale – rafinării, producția de metanol, amoniac – precum și sectorul transporturilor, prin noi e-combustibili sau utilizarea amoniacului. Producția locală de energie pe bază de hidrogen este o alternativă viabilă, iar amestecul de hidrogen cu gaz natural pentru încălzire (deja implementat în Marea Britanie) confirmă compatibilitatea cu infrastructura existentă [85,86]. Pentru procese industriale cu temperaturi ridicate (ex. cracare cu abur, cuptoare de ciment), hidrogenul este o alternativă promițătoare la combustibilii fosili [87]. Integrarea hidrogenului natural în economie poate accelera tranziția către un viitor sustenabil, cu emisii reduse de carbon. O direcție inovatoare în domeniul producerii hidrogenului este reprezentată de conversia deșeurilor din plastic în hidrogen. Conform unui studiu recent publicat în Nature Catalysis, această metodă permite extragerea a peste 97% din masa de hidrogen conținută în materialele plastice, utilizând un proces tehnologic simplificat. Această abordare promite nu doar o sursă alternativă de hidrogen, ci și o soluție sustenabilă pentru valorificarea deșeurilor plastice, contribuind simultan la reducerea poluării cu microplastice și la decarbonizarea proceselor industriale. [58]

1.4.4. Metode de obținere a deuteriului și tritiului

ICSI Râmnicu Vâlcea a dezvoltat și validat la scară de laborator o tehnologie combinată pentru separarea D și T din ape deuterate/tritiate (schimb izotopic catalitic + distilare criogenică), transpusă într-o instalație pilot semi-industrială echivalentă unei unități de detritiere pentru apă grea tip CANDU, cu scop direct de aplicare la CNE Cernavodă. Cercetarea vizează tehnologii scalabile, cu consum energetic optimizat și selectivitate izotopică ridicată, condiții esențiale pentru fezabilitatea industrială a separării izotopilor de hidrogen [59]. Deși există peste o sută de metode pentru separarea deuteriului, producerea industrială a apei grele se bazează pe schimb izotopic și distilare, iar alte tehnici rămân preponderent analitice; metodele clasice (distilare criogenică, difuzie termică, cromatografie) sunt limitate de complexitate și costuri energetice [16, 60]. În practica modernă, procese precum CECE și LPCE/VPCE — adesea integrate cu distilarea criogenică — sunt centrale atât în soluțiile ICSI, cât și în sistemele de detritiere de la ITER [61]. Distilarea criogenică a hidrogenului rămâne referința pentru obținerea D/T de înaltă puritate, susținută de modele matematice pentru coloane multicomponente (Lewis-Matheson, Underwood, simulări dinamice) [61, 62, 63, 64], în timp ce abordările pe membrane indică factori de separare promițători (până la 5,66) pentru amestecuri sărace în deuteriu [65–67]. În acest context, proiectul CTRF de la CNE Cernavodă avansează implementarea soluțiilor criogenice și catalitice pentru reducerea tritiului din apa grea, consolidând rolul ICSI ca centru de excelență și facilitând transferul către aplicații energetice emergente [69].

1.5. Provocări, siguranță și perspective viitoare

Utilizarea izotopilor hidrogenului, în special a deuteriului și tritiului, aduce beneficii tehnologice importante în procese industriale și nucleare, dar implică și provocări tehnice, de siguranță și de reglementare. Principalele dificultăți țin de eficiența separării izotopice, consumul energetic ridicat și complexitatea instalațiilor, în special în cazul tehnologiilor pentru tritiu, precum distilarea criogenică și schimbul catalitic. Probleme suplimentare apar prin permeația și corodarea materialelor, degradarea catalizatorilor și necesitatea unor soluții robuste pentru operarea continuă. În fuziunea nucleară, integrarea ciclului combustibilului D–T presupune recuperare și reciclare eficiente ale tritiului, gestionate în condiții stricte de siguranță, având în vedere radioactivitatea acestuia și riscurile de contaminare. Lipsa unor standarde internaționale complete complică transportul și manipularea, ceea ce accentuează necesitatea unor reglementări clare. Progresele recente în materiale avansate, modele matematice și simulări predictive, alături de tehnologii emergente precum inteligența artificială și senzoristica miniaturizată, oferă perspective promițătoare pentru optimizarea proceselor și reducerea impactului asupra mediului. În acest context, reutilizarea și recuperarea izotopilor devin componente esențiale pentru o economie circulară a hidrogenului, cu rol strategic în tranziția energetică globală.

1.6. Puritatea hidrogenului: factor-cheie în alegerea tehnologiei de producție

Puritatea hidrogenului este esențială pentru aplicații avansate precum pilele de combustie, industria semiconductorilor și procese chimice de precizie, fiind necesare niveluri între 99,5% și peste 99,9999%. Alegerea metodei de purificare depinde de compoziția gazului brut, tipul impurităților și cerințele de puritate, iar tehnologiile utilizate includ procese mecanice (PSA, VSA, TSA, membrane, distilare criogenică), chimice (hidruri metalice, purificare catalitică) și fizice (separări pe bază de masă sau difuzie) [70–72]. Adsorbția cu schimbare de presiune (PSA) este metoda industrială dominantă, dar cercetările recente explorează soluții hibride cu membrane și criogenie, capabile să reducă semnificativ consumul energetic și să crească rata de recuperare [80–82]. Membranele metalice pe bază de paladiu pot asigura puritate ultra-înaltă (99,999%) [86], în timp ce distilarea criogenică rămâne standardul pentru obținerea H_2 de foarte înaltă puritate, deși cu costuri energetice ridicate [89]. Integrarea metodelor hibride și a controlului avansat al contaminanților oferă soluții promițătoare pentru producerea sustenabilă a hidrogenului, facilitând tranziția către economia hidrogenului [91].

1.7. Aplicații ale izotopilor hidrogenului în industrie și energie

Hidrogenul este un purtător de energie versatil, cu aplicații industriale și energetice majore, de la producerea amoniacului și metanolului până la hidrocracare, desulfurare și reducerea directă a minereurilor de fier, având un rol esențial în tranziția către o economie cu emisii scăzute de carbon [92, 93]. În sectorul energetic, este utilizat pentru stocarea energiei regenerabile, alimentarea pilelor de combustie, integrarea în rețele de gaze și producerea de combustibili sintetici. În acest context, izotopii săi au utilizări specifice: deuteriul (D_2O) ca moderator în reactoare nucleare și ca solvent/trăsor în aplicații farmaceutice și spectroscopice, iar tritiul, izotop radioactiv, în fuziunea nucleară, surse luminescente, aplicații medicale și cercetări de mediu [46]. Caracteristicile unice ale deuteriului și tritiului îi fac combustibili strategici pentru fuziunea nucleară, considerată o sursă curată și sustenabilă de energie, iar separarea izotopică devine esențială pentru alimentarea cercetării și tehnologiilor de vârf în domeniul energetic și al științei materialelor [46].

Capitolul 2: Hidrogenul Verde - Vector Energetic

Economia bazată pe hidrogen reprezintă una dintre direcțiile fundamentale ale tranziției energetice, vizând renunțarea treptată la combustibilii fosili. În prezent, producerea hidrogenului se bazează în mare parte pe gazul natural, considerat un substitut promițător al cărbunelui și petrolului, datorită emisiilor relativ reduse de gaze cu efect de seră [94]. Scenariile de neutralitate climatică includ creșterea masivă a producției de energie din surse regenerabile (fotovoltaic, eolian, bioenergie), aplicarea tehnologiilor de captare și stocare/utilizare a dioxidului de carbon (CCS/CCU), dezvoltarea combustibililor sintetici (CH_4, CH_3OH, NH_3) și integrarea hidrogenului verde ca vector energetic multifuncțional, utilizat pentru stocare, transport și echilibrarea rețelelor. În această ecuație, tehnologia Power-to-X (PtX), și în special Power-to-Gas (PtG), joacă un rol central, prin conversia energiei regenerabile în hidrogen și combustibili gazoși, cu posibilități extinse de stocare și aplicații în transport, industrie și locuințe.

Electroliza apei constituie nucleul proceselor PtX. Electrolizoarele alcaline (AEC) sunt cele mai mature și răspândite, fiind caracterizate prin robustețe, fiabilitate și costuri mai reduse în comparație cu tehnologiile emergente. Acestea utilizează o soluție alcalină pe bază de KOH și ating eficiențe de 66–74%, corespunzătoare unui consum de aproximativ 51 kWh/kg H_2. Durata de viață a sistemelor moderne depășește 60.000 de ore, iar costurile investiționale actuale în Europa se situează la ~500 EUR/kW. Costul nivelat al hidrogenului (LCOH) obținut variază între 2,5–3,7 USD/kg H_2, cu estimări pentru 2030 care indică scăderi sub 2,0 EUR/kg datorită progresului tehnologic și economiilor de scară [95–97].

Tehnologia cu membrană schimbătoare de protoni (PEM) oferă flexibilitate operațională superioară, cu timpi de pornire/oprire reduși, răspuns rapid la variații de sarcină și funcționare eficientă în regim tranzitoriu, ceea ce o face ideală pentru integrarea cu sursele regenerabile variabile. Limitările acesteia sunt legate de costurile ridicate (CAPEX), de utilizarea catalizatorilor pe bază de metale nobile și de degradarea membranei, însă se anticipează reduceri semnificative prin optimizarea designului și creșterea producției industriale [98–100].

O direcție de cercetare promițătoare o reprezintă electrolizoarele cu oxid solid (SOEC), care funcționează la temperaturi înalte (700–850 °C) utilizând electroliți ceramici. Acestea pot atinge eficiențe de 75–80% prin integrarea energiei termice externe, reducând consumul de energie electrică. Analize exergetice au arătat o creștere de până la 11% a eficienței exergetice comparativ cu tehnologiile la temperaturi joase, însă costurile mari și maturitatea redusă limitează deocamdată implementarea industrială [101].

La nivel european, costurile hidrogenului verde variază în prezent între 3,3–3,7 EUR/kg H_2 în România [101], 5–8 EUR/kg H_2 în Europa Centrală [102] și circa 5,6 USD/kg H_2 la nivelul Uniunii Europene [103]. Proiecțiile pentru 2050 stabilesc un orizont realist pentru maturizarea tehnologică și economică, cu implementări pe scară largă ale electrolizoarelor și dezvoltarea infrastructurii Power-to-Gas. În acest context, au fost dezvoltate proiecte pilot, precum WOMBAT (Germania), monitorizat prin platforma europeană dedicată [104], sau centralele e-gas care transformă surplusul de energie regenerabilă în metan sintetic, confirmând fezabilitatea tehnologiilor [105]. Alte inițiative includ proiectul românesc 20HyGrid și programul spaniol Green Hysland, care demonstrează integrarea hidrogenului în rețelele de distribuție de gaz natural.

Din perspectiva stocării și utilizării, hidrogenul verde poate fi injectat în rețelele de metan (CH_4), utilizat în transporturi prin pile de combustie, în industrie (amoniac, metanol) sau în procese de metanizare a CO_2, generând combustibili sintetici cu amprentă redusă de carbon. Proiectarea unor arzătoare dedicate arderii amestecurilor H_2–CH_4 și dezvoltarea de modele predictive permit optimizarea parametrilor de ardere și reducerea emisiilor de poluanți, aspecte esențiale pentru aplicabilitatea industrială. În acest sens, cercetările experimentale și numerice dedicate combustiei amestecurilor H_2–CH_4 pot contribui la dezvoltarea unor soluții inovative pentru tranziția către o economie durabilă bazată pe hidrogen.

Capitolul 3: Particularități Tehnologice ale Combustiei Amestecurilor de Combustibili Gazoși, inclusiv Hidrogen-Metan pentru Tranziția Energetică

3.1. *Hidrogenul și tranziția energetică: provocări și oportunități*

Tranziția energetică are ca obiectiv reducerea emisiilor de gaze cu efect de seră, iar hidrogenul devine un vector energetic esențial datorită utilizării sale fără emisii de carbon. O soluție intermediară o reprezintă amestecurile de hidrogen și metan (H_2–CH_4), ce pot fi transportate prin rețelele de gaze existente, permițând o tranziție treptată fără investiții majore. În etapa actuală, se recomandă limitarea hidrogenului la 15%, cu perspective de creștere spre 30% pe termen mediu. Totuși, implementarea implică provocări tehnice, economice și de reglementare, dar oferă și oportunități pentru reducerea dependenței de combustibili fosili. În acest context, tehnologiile de ardere și dezvoltarea arzătoarelor adaptate pentru H_2 sau amestecuri H_2–CH_4 joacă un rol crucial în valorificarea potențialului hidrogenului în tranziția energetică.

3.2. Caracteristicile combustibililor gazoși

Orice combustibil gazos este format dintr-un amestec de gaze combustibile, gaze inerte și vapori de apă. Combustibilii gazoși sunt fie naturali, fie artificiali. Gazul natural este constituit în special din metan. El poate fi obținut din zăcăminte proprii, non asociate cu țițeiul sau din gaz asociat cu țițeiul, obșinut în același timp cu acesta.

3.2.1. Compoziția volumetrică

Compoziția volumică cuprinde participația fiecărui component al combustibilului gazos, cu exprimarea în procente de volum. Se exprimă la starea anhidră sau la starea umedă (numită și inițială). Cele două stări rezultă în urma condensării vaporilor de apă la determinarea compoziției volumice. Umiditatea combustibilului se notează cu d și se exprimă în grame pentru un m_N^3 combustibil gazos uscat.

3.2.2. Calitatea combustibililor gazoși

Gazele naturale asociate zăcămintelor de țiței exploatate pe teritoriul României, rezultate ca produse secundare în procesul de extracție a țițeiului, sunt compuse predominant din hidrocarburi ușoare (metan, etan, propan și butani), alături de fracțiuni variabile de gaze inerte sau impurități (cum ar fi dioxidul de carbon). Cunoașterea compoziției acestora este esențială atât pentru evaluarea potențialului energetic, cât și pentru determinarea măsurilor de pretratare și utilizare industrială eficientă. Datele evidențiază o similaritate ridicată între cele două tipuri de gaze, în special prin prisma proporției dominante de metan (care poate depăși 97–98% în anumite zăcăminte), ceea ce conferă gazului natural din Transilvania o puritate remarcabilă. Această puritate ridicată justifică frecvent utilizarea expresiei conform căreia gazul natural din regiune poate fi confundat cu metanul pur din punct de vedere al comportamentului termodinamic, al valorii energetice și al caracterului de ardere. Această apropiere compozițională și energetică are implicații tehnice importante: permite utilizarea directă a gazului natural în aplicații industriale de înaltă performanță fără necesitatea unui pretratament complex, asigură o ardere completă cu emisii reduse, și facilitează integrarea în rețelele de transport și distribuție proiectate pentru metan. De asemenea, similitudinea cu metanul pur contribuie la standardizarea proceselor de proiectare și operare a echipamentelor termice și energetice. De remarcat este faptul că hidrocarburile (precum metanul, etanul, propanul sau butanul) au valori ridicate ale puterii calorifice, crescând odată cu masa moleculară. Hidrogenul, deși are cea mai mică densitate, oferă un conținut energetic semnificativ raportat la masa proprie. Gaze precum azotul, oxigenul sau dioxidul de carbon nu au valoare calorică, dar pot influența procesul de ardere atunci când sunt prezente în amestecuri. Aceste informații sunt utile în selecția combustibililor gazoși în funcție de aplicația dorită și cerințele de eficiență energetică.

3.2.3. Amestecuri de combustibili

Se acordă o atenție deosebită puterii calorifice și participației calorice în contextul utilizării simultane a doi sau mai mulți combustibili gazoși. Dacă se notează cu $H_i^{i_1}$ puterea calorifică a unui gaz din amestec și cu $H_i^{i_2}$ al celuilalt, participația volumetrică a primului gaz în amestec fiind r_1, puterea calorifică a amestecului se determină cu relația:

$$H_{i,am}^{i} = r_1 * H_i^{i_1} + (1 - r_1) * H_i^{i_2}, [kJ/(m_N^3)] \quad (3.12)$$

Participația în procente de căldură (termice) q_1, a primului gaz în amestec va fi:

$$q_1 = \frac{100 * r_1 * H_i^{i_1}}{r_1 * H_i^{i_1} + (1 - r_1) * H_i^{i_2}}, [\%] \quad (3.13)$$

Puterea calorifică a unui amestec de combustibil gazos cu un combustibil lichid se determină cu ajutorul relației:

$$H_{i,am}^{i} = H_i^{i_1} + n * H_i^{i_2}, [\text{kJ/kg}] \quad (3.14)$$

unde $H_i^{i_1}$, [kJ/kg] este puterea calorifică a combustibilului lichid, iar $H_i^{i_2}$ este puterea calorifică a combustibilului gazos, $[kJ/(m_N^3)]$. Cu n s-a notat raportul dintre debitul de combustibil gazos și cel de combustibil lichid, $[m_N^3/kg]$. Participația calorică q_2 a combustibilului gazos în amestecul cu combustibilul lichid se determină cu relația:

$$q_2 = \frac{100*n*H_i^{i_2}}{Q_i^{i_1}+n*H_i^{i_2}}, [\%] \quad (3.15)$$

3.2.4. Proprietățile fizico-chimice ale amestecurilor H_2-CH_4

Amestecurile de hidrogen și metan prezintă caracteristici fizico-chimice distincte față de gazele naturale convenționale, influențând modul în care pot fi utilizate. Procesul de combustie al hidrogenului se realizează fără a produce emisii de dioxid de carbon, particule sau alți poluanți, cu excepția oxizilor de azot (NOx). [107]

În tabelul 3.4 sunt sumarizate și comparate câteva proprietăți fizice, chimice și energetice ale hidrogenului și metanului. Se poate observa că din punct de vedere volumic, hidrogenul necesită mai puțin aer decât metanul pentru o combustie stoichiometrică, însă din punct de vedere masic este exact invers. Din punct de vedere al puterii calorifice se constată că hidrogenul înmagazinează o cantitate de energie pe kilogram mult mai mare decât metanul, pe când din punct de vedere volumic este valabil opusul. Deoarece masa moeculară a metanului este de aproximativ 8 ori mai mare decât cea a hidrogenului, prin arderea unei molecule de metan se degajă de aproximativ 3 ori mai multă căldură decât prin arderea unei molecule de hidrogen. Hidrogenul are temperatura de auto aprindere și conductivitatea termică mai mare decât metanul. [108] Din cauza diferențelor între valorile vitezei laminare de ardere a celor două gaze vor fi necesare modificari de concepție pentru arzătoare. Hidrogenul fiind mai solubil în materiale, ratele de scăpare ale acestuia în sistemele de distribuție sunt mai crescute decât cele ale gazului metan, acest aspect fiind important atât din punct de vedere al siguranței, cât și din punct de vedere economic. Pentru o funcționare sigură și eficientă, arzătoarele pe hidrogen necesită un design și o operare adecvate. Sunt, însă, necesare măsuri de siguranță suplimentare, având în vedere că hidrogenul este extrem de inflamabil. Hidrogenul se aprinde ușor în atmosferă, având un interval de inflamabilitate între 4,65% și 93,9% în oxigen, iar în aer, acest interval variază între 4% și 75% [109]. Arderea hidrogenului pur prezintă riscuri datorită intervalului său extins de inflamabilitate și a energiei scăzute necesare pentru inițierea reacției de combustie, generând probleme de siguranță.

3.3. Elemente de teoria arderii pentru combustibilii gazoși

3.3.1. Procesele fizice și chimice

S-a constatat că mecanismul de propagare a flăcării combustibililor gazoși cuprinde și reacții cu radicali alchilici, OH și atomi liberi de oxigen și hidrogen. Pentru partea fizică a arderii trebuie cunoscuți așa numiții parametrii de transfer termogazodinamici: conductivitatea termică, coeficientul de difuzie moleculară și coeficientul de difuzie termică. Se poate face o analogie între schimbul de căldură prin convecție (caracterizat prin criteriul Nu) și schimbul de masă (caracterizat prin criteriul Nu_d). De regulă, simultan cu procesul de difuzie moleculară, are loc și o deplasare de substanță prin convecție, fluxul convectiv fiind egal cu produsul dintre viteza u a curentului și concentrația masei C.

3.3.2. Elemente de teoria arderii combustibililor gazoși

Din punct de vedere al procesului fizic, arderea combustibilului gazos cuprinde două tehnologii. Se distinge astfel arderea cinetică, când există un preamestec de combustibil și oxidant și arderea difuzivă, când contactul combustibilului cu aerul are loc în zona flăcării.

3.3.2.1. Arderea cinetică a combustibililor gazoși

Un element de masă de amestec combustibil gazos – aer primește la început căldură prin conductivitate. Ca urmare, temperatura crește de la valoarea inițială T_0 la valoarea T_1, când elementul de volum începe să cedeze căldură. Reacțiile chimice vor conduce la creșterea temperaturii de la valoarea T_1 la valoarea T_f. viteza normală de ardere este perpendiculară pe frontul flăcării și de sens contrar față de sensul de curgere. În funcție de regimul curgerii, se distinge viteza normală de ardere pentru regim laminar de curgere SL și respectiv pentru regimul turbulent de curgere ST. Viteza normală de ardere în regim turbulent de curgere este superioară celei pentru regimul laminar de curgere. Există mai mukte modele pentru a defini viteza de ardere în regim de curgere turbulen. Modelul Damkoehler se bazează pe deformația frontului de flacără sub acțiunea turbulenței. Modelul Karlovitz consideră dezvoltarea flăcării turbulente ca rezultat a curgerii laminare combinată cu difuzia turbulentă. Prelucrarea datelor obșinute experimental au dus la un nonconcept și anume turbulența generată de dezvoltarea flăcării. Modelul Summerfield consideră flacăra turbulentă ca o zonă de reacții disperse, propagate pe paza teoriei flăcării laminare. Excesul de aer din amestecul combustibil-aer se numește grad de aerare. Scăderea strabilității flăcării are loc odată cu creșterea gradului de aerare. Astfel, pentru combustibilii de masă molară mică sau cu

molecule de hidrogen, stabilitatea este maximă pentru concentrațiile stoichiometrice sau cu o ușoară deplasare spre amestec sărac. Din contră, pentru hidrocarburile grele, domeniul de stabilizare este spre amestecul bogat în combustibil. Limitele de stabilitate cresc odată cu creșterea temperaturii.

3.3.2.2. Curgerea turbionară (jeturile turbionare)

Stabilitatea prin rotirea jeturilor (turbionarea jeturilor) este o metoda general valabilă pentru toate tipurile de flacără și pentru orice combustibil. Stabilitatea flăcării se datorează recirculației interne ce apare în zona centrală depresionară din centrul jetului turbionat. Jeturile turbionate, numite și rotaționale, sunt generate de dispositive speciale dispuse în corpul arzătorului. Caracteristica unei curgeri turbionare, constă în existența unui vector spatial al vitezei, la care domină componenta axială și tangențială. În funcție de mărimea caracterului rotațional al curgerii, în zona centrală apare și un curent de recirculare cu curgere axială inversă.

3.4. Arderea difuzivă a combustibililor gazoși

Procesul este caracterizat prin amestecul aer-combustibil gazos în afara corpului arzătorului. Forma flăcării depinde de excesul de aer. La mărirea vitezei de curgere a combustibilului are loc o creștere progresivă a lungimii flăcării, dar o dată cu intrarea în regim turbulent de curgere lungimea flăcării se stabilizează, iar flacăra devine zgomotoasă. Pentru flacăra difuzivă, se poate admite că aceasta este foarte stabilă, deoarece ruperea flăcării nu se poate realiza decât atunci când viteza în axul jetului în secțiunea unde se realizează concentrația stoichiometrică depășește viteza de ardere pentru acel punct ($u_m \leq S_T$).

3.4.1. Jeturi libere

Viteza de ardere în regim de curgere turbulent S_T, are un profil ce rezultă din valoarea minimă pentru concentrații mari ale combustibilului (în zona centrală) și pentru concentrații mici ale combustibilului (la periferia jetului) și din valoarea maximă pentru zona de concentrație stoichiometrică aer combustibil. Într-un mod simplificat, se consideră un jet liber de combustibil. Viteza de desfășurare a procesului de ardere în regim difuziv este determinată numai de viteza de difuziune dintre gaz și aer. Procesul de difuzie are loc pe direcția perpendiculară la direcția de curgere.

3.4.2. Jeturi de combustibil însoțite de un curent de aer de viteză constantă

Jetul de combustibil este însoțit de un curent paralel infinit de aer cu viteza u_{o2}. Dacă viteza ambiantă este nulă ($u_{o2} = 0$), viteza de rupere superioară ($(u_{or})^s$) devine egală cu u_{or}, iar viteza de rupere inferioară devine nulă, $(u_{or})^i = 0$. Pe măsură ce viteza curentului însoțitor u_{o2} crește, scade mărimea vitezei de rupere inferioară (rezultă deci o scădere a domeniuluio de stabilitate a flăcării).

3.4.3. Jeturi de combustibil însoțite cu viteză ambiantă variabilă

Pentru această situație, pentru câmpul de viteze pentru diverse secțiuni în jet, se utilizează ecuația integrală de conservare a impulsului. În care I_1 și I_2 reprezintă impulsul inițial al jetului central și respectiv al jetului periferic. În care T_f este temperatura flăcării; σ este raportul dintre numărul de moli intrați în reacție și numărul de moli rezultați din reacție; T_0 este temperatuta inițială la ieșirea din ambrazură.

3.4.4. Jeturi limitate

Un jet limitat față de unul liber are principala caracteristică interacțiunea acestuia cu camera de ardere (focarul). Ca urmare, va trebui să existe o strânsă corelație între dezvoltarea jetului și dimensiunile camerei de ardere. Impulsul jetului se transformă în cea mai mare parte în presiune statică. Cantitatea de fluid ce înconjoară jetul este limitată, astfel ca dacă m_0 este masa de fluid ce iese din arzător, iar m_a masa de fluid antrenată din mediul înconjurător, concentrația de fluid la finele camerei de ardere va fi $C_\infty = m_0/(m_0 + m_a)$. Rezultă că jeturile limitate nu sunt similare de la sine ca jeturile libere, ci depind de parametrul de recirculație. În momentul când jetul intersectează pereții camerei de ardere se atinge concentrația C_∞.

3.5. Tipuri de arzătoare pentru utilizarea hidrogenului

În contextul utilizării amestecurilor de hidrogen-metan în rețelele de gaze naturale, una dintre provocările semnificative este adaptarea echipamentelor de ardere, inclusiv a arzătoarelor. Arzătoarele trebuie să fie, astfel, concepute pentru a răspunde la particularitățile hidrogenului, cum ar fi viteza de ardere foarte mare cu formarea de flăcării stabile, ceea ce impune soluții tehnice inovative.

3.5.1. Arzătoare cu preamestec

Arzătoarele cu preamestec sunt utilizate atât în centralele termice rezidențiale, unde asigură o combustie eficientă și emisii reduse de poluanți, cât și în aparatele de gătit, precum aragazele. O centrală termică pe gaz reprezintă un sistem utilizat pentru producerea căldurii prin arderea preamestecului de gaz natural sau a amestecurilor de hidrogen și metan cu aer. Arzătorul asigură amestecul optim dintre combustibil și aer, garantând o ardere eficientă și reducerea emisiilor poluante. Alimentarea cu gaz este controlată prin intermediul unei valve de gaz, care reglează debitul de combustibil și contribuie la optimizarea arderii. Pentru siguranță, sistemul este

echipat cu o supapă de închidere (shut-off valve), care întrerupe automat alimentarea cu gaz în cazul unor defecțiuni sau scurgeri. Schimbătorul de căldură facilitează transferul energiei termice de la gazele de ardere către agentul termic, optimizând randamentul energetic al sistemului. Gazele de ardere rezultate în urma combustiei sunt evacuate în exterior printr-un canal de evacuare (exhaust vent), cu respectarea normelor de siguranță și protecția mediului. Funcționarea centralei este reglată prin intermediul termostatului și al panoului de control, care monitorizează și ajustează parametrii pentru eficiență maximă. Prin integrarea acestor componente, centrala termică funcționează în mod eficient, oferind un sistem de încălzire sigur și economic pentru diverse aplicații rezidențiale și industriale. Controlul procesului de ardere este utilizat doar la arzatoarele care folosesc amestec premixat. La utilizarea unui continut de pana la 20% hidrogen in fluxul de gaz metan, nu s-au gasit observatii de flashback pentru acest tip de arzatoare. În contextul descrierii arzătorului clasic cu preamestec, este important de menționat că cercetările actuale continuă să exploreze și să îmbunătățească performanța acestui tip de echipamente. Articolul [118] descrie un studiu care include atât analize experimentale, cât și numerice, realizate pe un arzător cu preamestec derivat dintr-o unitate industrială care utilizează gaz natural. Scopul designului acestui tip de arzător a fost de a reduce distanța dintre premixer și arzătorul real al turbinei pe gaz, pentru a optimiza procesul de combustie și performanța sistemului. Arzătorul a fost testat utilizând gaz metan, amestec de hidrogen și metan, si chiar hidrogen pur, într-o instalație de testare a combustiei, care simulează condițiile de ardere la presiune atmosferică. Rezultatele au arătat că în timpul funcționării arzătorului cu hidrogen, viteza de ieșire a gazelor rezultate în urma procesului de ardere (80 m/s și 130 m/s) este mai mare decât atunci când arzătorul funcționează cu gaz natural. De asemenea, au fost măsurate emisiile de oxizi de azot (NOx) și s-au determinat limitele de flashback ale flăcării pentru cele două configurații ale arzătorului. Pentru a face trecerea treptată pentru o puetere termică medie și mare de la arzătoarele care folosesc gaz metan, la utilizarea hidrogenului s-a făcut operarea la tehnologia de ardere difuzivă. Această abordare permite adaptarea echipamentelor existente pentru a folosi hidrogen, înainte de a face trecerea completă. În analiza științifică [121] se evidențiază faptul că arderea amestecurilor de hidrogen și metan face parte din strategia practică pe termen scurt și mediu pentru atingerea decarbonizării. Un amestec de hidrogen/metan cu 20% hidrogen în volum duce la o reducere a emisiilor de CO_2 de aproximativ 7%. Creșterea conținutului de hidrogen la 30% conduce la o reducere de puțin peste 10%.

3.5.3. Arzătoare cu autoaspirație

Aceste arzătoare au aplicație la instalațiile termice de debit redus (cazane de apă caldă și fierbinte și unele cuptoare industriale). Aerul este aspirat direct din atmosferă (nu este preîncălzit). Arzătoarele cu autoaspirație funcționează, de regulă, cu gaz natural de joasă presiune. Ca urmare a amestecării combustibilului cu aerul în difuzor se obține o flacără cu ardere în regim cinetic. Pentru creșterea stabilității arderii, apare apropae ca obligatoriu echiparea cu un stabilizator de flacără în secțiunea de ieșire din arzător.

3.6. Concluzii

Prezenta lucrare a abordat în mod integrat problematica utilizării hidrogenului ca vector energetic în contextul tranziției energetice, cu accent pe particularitățile proceselor de ardere și pe soluțiile tehnologice adaptate acestui combustibil. Analiza realizată a evidențiat că adoptarea hidrogenului în mixul energetic necesită o reevaluare profundă a caracteristicilor fizico-chimice ale combustibililor gazoși, a fenomenologiei arderii și a configurațiilor constructive ale echipamentelor de ardere. În ceea ce privește caracteristicile combustibililor gazoși, s-au identificat variații semnificative în compoziția și calitatea acestora, cu implicații directe asupra proceselor de ardere, stabilității flăcării, eficienței termice și emisiilor poluante. Comportamentul amestecurilor H_2–CH_4 relevă o serie de particularități, între care se remarcă viteza mare de propagare a flăcării și potențialul crescut de formare a oxizilor de azot (NOx), impunând cerințe suplimentare de control și optimizare a arderii. Capitolele dedicate teoriei arderii au furnizat un cadru riguros asupra mecanismelor fizico-chimice implicate, precum și a comportamentului jeturilor turbulente în regimuri variate de curgere și amestec. În special, arderea difuzivă a combustibililor gazoși a fost analizată din perspectiva interacțiunii între jeturile de combustibil și curenții de aer, fiind considerate și criteriile relevante ce caracterizează procesul de recirculare și eficiența amestecului. În ceea ce privește tehnologia arzătoarelor, au fost examinate diferite configurații compatibile cu utilizarea hidrogenului: arzătoare cu preamestec, cu flacără difuzivă, cu autoaspirație și cu emisii reduse de NOx. S-a demonstrat că eficiența acestor soluții este condiționată atât de arhitectura internă a sistemului de ardere, cât și de posibilitatea controlului precis al parametrilor de funcționare, în special a raportului aer-combustibil și a distribuției aerului terțiar. Controlul emisiilor de NOx rămâne un obiectiv prioritar, realizabil prin tehnici avansate de amestecare, recirculare a gazelor arse și arhitecturi optimizate ale arzătoarelor. Perspectivele de cercetare includ dezvoltarea de soluții hibride, algoritmi de control în timp real și validări experimentale pentru condiții reale de funcționare.

Capitolul 4: Simularea CFD a unui Arzător Difuziv pentru Amestecuri de Metan și Hidrogen: Performanțe și Provocări

Cercetarea realizată investighează prin simulare numerică funcționarea unui arzător difuziv proiectat pentru arderea amestecurilor de hidrogen și metan, cu o concentrație de hidrogen de până la 50% în metan. Pentru rezolvarea problemei s-au utilizat metode avansate de dinamică computațională a fluidelor (CFD) în cadrul platformei ANSYS Fluent. Scopul principal al cercetării este analiza în ansamblu a proceselor de ardere – stabilitatea flăcării, distribuția temperaturii și nivelul emisiilor gazoase – în contextul promovării utilizării combustibililor alternativi cu emisii reduse de carbon. Modelul elaborat reproduce un arzător difuziv operând în limite industriale, în condiții controlate de debit și compoziție a amestecului de combustibil. Rezultatele obținute evidențiază condițiile optime de operare ale arzătorului și subliniază potențialul amestecurilor de hidrogen și metan ca soluție de tranziție către o economie bazată pe hidrogen. Studiul furnizează informații relevante pentru proiectarea și operarea arzătoarelor compatibile cu combustibili alternativi. Prin aceste contribuții, cercetarea aduce un sprijin pentru o mai bună înțelegere a mecanismelor de ardere specifice arzătoarelor difuzive și propune soluții tehnologice menite să reducă impactul asupra mediului în sectorul energetic.

4.1. Introducere

Combustia în regim difuziv a amestecului gazos $H_2 – CH_4$ a cuprins multiple cercetări pe baza modelării numerice. Această abordare cuprinde avantajul realizării interacțiunii dintre turbulență și reacțiile chimice. Aceste aspecte determinate prin modelare numerică au stat la baza concepției constructive și la dimensionarea arzătoarelor. De o importanță deosebită este definirea speciilor chimice ca și a reacțiilor chimice în care sunt implicare acestea. [122] Modelul de vâscozitate cel mai des întâlnit este WALE (Wall Adapting Local Eddy Viscozity). Se urmărește: recuperarea vâscozității la valorile reale în apropierea pereților și păstrarea proprietășilor de dispersie pentru turbulențele de amortizare la trecerea de la curgerea laminară la cea turbulentă. Metoda funcției de densitate a probabilității (PDF) s-a utilizat ca o soluție de închidere SGS în LES.

Concluziile desprinse din studiile de modelare numerică a combustiri gazului $H_2 – CH_4$ sunt: aprinderea și arderea componentei H_2 în prima parte a flăcării generate; valorile maxime ale fracțiunii de masă CO sunt în centrul flăcării, cu cea mai mare concentrare în prima sa treime; componenta H_2 mărește proporțional viteza axială a flăcării; excese de ardere a combustiei esențială a emisiei de Nox. Hidrogenul este considerat un combustibil cu potențial ridicat de utilizare viitoare, pe fondul epuizării resurselor de combustibili fosili și al creșterii nivelului de poluare atmosferică. În mod particular, concentrația în continuă creștere a dioxidului de carbon în atmosferă stimulează tranziția către soluții energetice mai sustenabile. Hidrogenul se remarcă printr-o serie de avantaje semnificative, precum arderea curată și eficientă, viteza ridicată de realimentare, densitatea energetică de stocare mare și disponibilitatea sa ca resursă regenerabilă. În plus, arderea hidrogenului nu produce gaze cu efect de seră, cum este dioxidul de carbon, ci doar vapori de apă, ceea ce îl transformă într-un aliat esențial în reducerea emisiilor de carbon și în combaterea schimbărilor climatice. Extinderea utilizării hidrogenului ca vector energetic prezintă un potențial considerabil în reducerea emisiilor poluante și, implicit, în ameliorarea calității aerului, cu efecte pozitive directe asupra mediului înconjurător și sănătății umane. Datorită caracteristicilor sale favorabile – cum ar fi absența emisiilor de dioxid de carbon în timpul arderii și posibilitatea producerii din surse regenerabile – hidrogenul se afirmă ca o soluție energetică viabilă pe termen lung, capabilă să răspundă cerințelor tot mai stringente privind sustenabilitatea și securitatea energetică în contextul tranziției către un sistem energetic decarbonizat. Procesul de combustie al hidrogenului are loc fără a genera emisii de dioxid de carbon, particule sau alți poluanți, cu excepția oxizilor de azot (NO_x) [133]. Astfel, hidrogenul este considerat un vector energetic cu emisii zero, întrucât nu contribuie la poluarea atmosferică. El poate înlocui combustibilii fosili într-o varietate de aplicații, inclusiv în industrie și în sectorul rezidențial, contribuind semnificativ la reducerea impactului asupra mediului [134]. Hidrogenul față de gazul natural prezintă diferențe semnificative în ceea ce privește caracteristicile fizico-chimice, precum puterea calorică, proprietățile de curgere și ardere, caracteristicile termice, densitatea, viteza de propagare a flăcării și interacțiunea cu rețeaua de distribuție. Amestecul hidrogenului în cantități reduse, de până la 15% în fluxul de gaz natural induce modificări moderate ale caracteristicilor acestuia; însă, aceste modificări sunt acceptabile în contextul obiectivului de decarbonizare a rețelelor de gaze. Potrivit literaturii de specialitate, adăugarea unui procent de chiar până la 30% hidrogen în metan poate fi implementată industrial și gestionată în condiții de siguranță, fără riscuri semnificative. [135 – 136]

4.2. Configurația/geometria arzătorului

Arzătorul este alcătuit din două camere distincte, fiecare cameră fiind echipată cu ștuțuri dedicate pentru alimentarea cu combustibil și, respectiv, cu aer. Combustibilul este introdus în zona de combustie prin intermediul

a cinci țevi (ștuțuri) având diametrul interior de 4 mm, amplasate simetric pentru a asigura o distribuție uniformă a fluxului. Aerul de combustie este furnizat din camera de aer și pătrunde în flacără printr-un spațiu inelar, dispus în jurul fiecărui ștuț de combustibil, asigurând astfel un aport controlat și echilibrat de oxidant în zona de reacție. Pentru optimizarea procesului de amestec și evitarea formării zonelor cu neomogenități de compoziție, fiecare cameră este prevăzută cu o placă perforată, având rolul de a uniformiza curgerea atât a combustibilului, cât și a aerului, înainte de intrarea în sistemul de combustie propriu-zisă. Dispunerea și geometria perforațiilor sunt proiectate cu rigurozitate astfel încât să reducă formarea de jeturi turbulente sau de zone stagnante, factori care pot compromite uniformitatea distribuției debitelor și stabilitatea regimului de curgere. De asemenea, arderea neuniformă poate favoriza o dezechilibrare spațială a flăcării în formarea de depuneri de funingine. În mod particular, pentru amestecurile de hidrogen și metan, controlul distribuției amestecului devine și mai critic datorită proprietăților specifice ale hidrogenului, cum ar fi viteza de propagare a flăcării mult mai mare și intervalul extins de inflamabilitate.

4.3. Modelarea combustiei non-premixate utilizând modelul turbulent k−ε în ANSYS Fluent

În cadrul cercetărilor efectuate, procesul de ardere a fost simulat utilizând ANSYS Fluent, prin implementarea modelului de combustie non-premixată în combinație cu modelul de turbulență standard k−ε. Această abordare a permis o predicție robustă a câmpului de temperatură, a distribuției speciilor chimice și a formării emisiilor poluante, oferind o înțelegere detaliată a fenomenelor termochimice asociate arderii amestecurilor de hidrogen și metan din flacără.

4.3.1 Modelarea geometrică și discretizarea domeniului

Modelul fizic al arzătorului a fost realizat prin modelarea tridimensională a arzătorului la scară, utilizând software-ul CATIA V5. Geometria rezultată a fost ulterior importată în ANSYS Fluent, unde au fost definite volumele de curgere corespunzătoare combustibilului și aerului. Discretizarea a fost realizată folosind un algoritm avansat de generare a rețelei, optimizat pentru a echilibra numărul de elemente cu calitatea geometrică a acestora. Această abordare a permis obținerea unei rețele coerente, cu un cost computațional rezonabil, care asigură o rezoluție adecvată pentru captarea fenomenelor turbulente din zona de ardere.

4.3.2. Setări numerice în ANSYS Fluent

Simulările au fost realizate utilizând următoarele opțiuni și configurații:

- Solver pe bază de presiune (Pressure-based solver), adecvat pentru fluxuri incomprimabile sau slab comprimate [134];
- Simulări în regim staționar (Steady-state simulation), potrivite pentru captarea comportamentului staționar al flăcării;
- Model de echilibru chimic (State Relation: Chemical Equilibrium), presupunând atingerea instantanee a echilibrului între speciile chimice implicate [138];
- Tratament energetic non-adiabatic, care permite schimbul de căldură între fluidul de combustie și pereții domeniului de simulare.

4.3.3. Condiții la limită

Condiții la intrare

La intrarea în domeniu, au fost impuse următoarele condiții de frontieră:Profiluri de viteză (Velocity Inlet) pentru combustibil și aer; Concentrarea combustibilului; Intensitate a turbulenței de 5%; Raportul vâscozității turbulente/laminare setat la 10.

Condițiile respective de intrare asigură o dezvoltare reală a câmpului turbulent și facilitează corecta predicție a amestecului combustibil-oxidant [133].

Condiții la pereți

Pereții domeniului au fost tratați pe baza următoarei ipoteze: Non-adiabatici (permițând schimbul de căldură), Modelați utilizând Standard Wall Functions pentru tratamentul regiunii near-wall [135]. Această alegere este justificată în cazul regimurilor de curgere turbulentă dezvoltată, deoarece reduce cerințele de discretizare fină în stratul limită, facilitând o simulare mai eficientă din punct de vedere computațional.

Condiții la ieșire

La ieșire au fost utilizate condițiile: Pressure Outlet cu presiune manometrică de 0 Pa, Backflow Pressure Specification setat la Total Pressure. Această abordare asigură o gestionare adecvată a recirculării, în cazul în care aceasta apare, și contribuie la menținerea stabilității numerice la ieșire (un aspect esențial în simulările de ardere). [134]

4.3.4. Modelul de combustie non-premixată

Modelul de combustie utilizat este cel non-premixat, fundamentat pe: Fracția de amestec (Z), Funcția de densitate a probabilității (PDF) [139] Proprietățile reactive ale sistemului sunt evaluate prin integrarea asupra Funcției de Distribuție a Probabilității (PDF - Probability Density Function), care permite o descriere detaliată a variabilității și aleatorietății fenomenelor chimice în cadrul procesului de ardere. În cadrul simulării, a fost luată în considerare și formarea oxizilor de azot (NO_x), utilizând modelele de predicție a emisiilor disponibile în ANSYS Fluent, care permit estimarea cu precizie a concentrațiilor de NO_x în funcție de condițiile de ardere și parametrii de operare [136].

4.3.5. Modelul turbulent standard k−ε

Modelarea câmpului turbulent a fost realizată utilizând modelul standard k−ε, care rezolvă două ecuații adiționale pentru energia turbulentă cinetică (k) și rata de disipare turbulentă (ε), fiind un model larg utilizat datorită simplității și eficienței sale în simularea fluxurilor turbulente în multe aplicații ingineresti [135]. Modelul k−ε este adecvat pentru regimuri de curgere turbulentă cu numere Reynolds mari și a fost ales datorită robusteții și eficienței sale numerice, fiind un instrument eficient în simularea fluxurilor turbulente în multe aplicații ingineresti, inclusiv în cazurile de ardere turbulentă [135].

4.4. Analiza și interpretarea rezultatelor simulărilor numerice

4.4.1. Analiza distribuției curgerii în interiorul arzătorului

Procesul de simulare a cuprins în prima parte analiza curgerii la rece a fluidelor atât în interiorul arzătorului, cât și la ieșirea din acesta în spațiul de combustie. În figura 4.3 este prezentat profilul vitezelor la curgerea în interiorul arzătorului, precum și în zona imediat adiacentă admisiei spre spațiul de ardere, pentru amestecul combustibil compus din 50% hidrogen și 50% metan, cu un raport de exces de aer $\lambda = 1$.

4.4.2. Analiza procesului de combustie

Matricea de simulare a inclus 5 cazuri principale de lucru: variația compoziției combustibilului și raportul aer-combustibil exprimat prin excesul de aer λ. Rezultatele simulărilor au fost interpretate pe baza evoluției temperaturii flăcării, a compoziției gazelor de ardere (CO, CO_2, H_2O, NO_x), a energiei cinetice turbulente și vitezei flăcării. Simularea 1, corespunzătoare combustiei unui amestec format din 100% CH_4, este considerată caz de referință pentru caracterizarea procesului de ardere, atât din perspectiva temperaturilor atinse, cât și a emisiilor generate. S-a testat în principal capacitatea de ardere cu aerul aspirat din mediu. S-au constatat totuși valorile ridicate ale emisiilor de monoxid de carbon (CO), conform graficului dedicat. Simularea 2 este caracterizată de un raport aer-combustibil real (AFR) de 17,6, corespunzând unui factor lambda λ foarte apropiat de cel stoichiometric, cu completarea aerului din mediul exterior, definit ca raportul dintre AFR real și AFR stoechiometric, egal cu 0,9. Deși $\lambda < 1$ indică o scădere a fracției de monoxid de carbon (CO) datorată și prezenței hidrogenului. În același timp, prezența H_2 a contribuit și la creșterea temperaturii flăcării și la favorizarea aprinderii. Simularea 3 corespunde unui regim de ardere stoichiometrică, caracterizat printr-un factor lambda λ egal cu 1. Creșterea debitului de aer determină o eficiență mai mare a procesului de ardere, evidențiată prin intensificarea vitezei și turbulenței flăcării, precum și prin reducerea formării monoxidului de carbon (CO). Atât în Simularea 2, cât și în Simularea 3, emisiile de oxizi de azot (NO_x) se mențin la un nivel relativ ridicat. Simularea 4 este caracterizată printr-un factor lambda (λ) de 1,3, corespunzător unui regim de ardere cu exces de aer. Creșterea debitului de aer a îmbunătățit eficiența arderii, aspect evidențiat atât prin intensificarea vitezei și a turbulenței flăcării, cât și prin reducerea formării de monoxid de carbon (CO). Emisia de oxizi de azot (NO_x), comparativ cu simulările anterioare a fost mai redusă. Simularea 5, a cuprins creșterea debitului de aer până la valoarea lambda (λ) de 1,6. Se observă atingerea unei temperaturi maxime similare celei din cazul cu $\lambda = 1,3$, ceea ce sugerează că un exces suplimentar de aer nu conduce automat la o reducere semnificativă a temperaturii flăcării, ci contribuie la îmbunătățirea procesului de ardere. Acest efect este susținut atât de valorile crescute ale turbulenței, cât și de scăderea concentrației de monoxid de carbon (CO). Vârful de temperatură al este localizat mult mai aproape de arzător, ceea ce permite un transfer termic mai eficient către eventualele suprafețe de încălzire. Analizând evoluția temperaturii pentru cazurile celor 5 simulări, se evidențiază o creștere rapidă a temperaturii după ieșirea din arzător, pentru o lungime de maxim 0.05 m. Numai într-un singur caz, când excesul de aer este ridicat, se constată un maxim al temperaturii într-o zonă mai îndepărtată de arzător, la circa 0.17 m. Prezența hidrogenului a condus la o aprindere rapidă. Reprezentările grafice obținute oferă o imagine detaliată asupra comportamentului termic al flăcării și evidențiază influența compoziției combustibilului și a excesului de aer asupra distribuției de temperatură. În cazul arderii pure de metan, (100% CH_4, cu un coeficient de exces de aer $\lambda = 0,6$), s-a obținut o temperatură maximă a flăcării de aproximativ 1750°C, care se menține relativ constantă

pe o porțiune semnificativă a flăcării. Prin introducerea hidrogenului în amestecul combustibil, se observă o creștere semnificativă a vitezei de reacție și o îmbunătățire a omogenizării amestecului de gaze, datorită difuzivității și reactivității ridicate a hidrogenului. Aceste caracteristici au condus la obținerea unor temperaturi maxime mai mari în flacără, dar și la o distribuție termică mai extinsă și mai uniformă în spațiul de ardere. Creșterea excesului de aer în amestecul combustibil a condus la o modificare semnificativă a structurii flăcărilor. Astfel, după atingerea nucleului de temperatură maximă — zona în care reacțiile chimice sunt cele mai intense și rata de eliberare a energiei este maximă — se observă o diminuare progresivă a valorii termice pe direcția axei flăcării. Cercetările legate de influența valorilor excesului de aer indică un optim în domeniul 1 – 1.3. Pentru a explicita această comcluzie s-a apelat la noi date din rezultatele simulării numerice, prezentate în continuare. Prin această abordare, se evidențiază comportamentul tridimensional al flăcării și s-au putut identifica că nu există eventuale dezechilibre de alimentare sau turbulențe locale care să afecteze performanța termică. Astfel, rezultă o nouă confirmare pentru soluția performantă a arzătorului pilot realizat.

Evoluția emisiilor componentelor arderii (CO, CO_2, H_2O)

Evoluția fracțiilor masice ale componentelor gazelor de ardere s-a considerat o constituire pentru o reprezentare fidelă a desfășurării procesului de combustie. O emisie rapidă de H_2O indică o aprindere și o ardere dominantă pentru componenta hidrogen din amestecul H_2-CH_4, la fel și pentru o creștere întârziată a concentrației de CO_2. Creșterea întârziată a componentei CO_2 din gazele de ardere indică o flacără în care hidrogenul s-a aprins și a ars înaintea metanului. În cazul arderii pure de metan (100% CH_4) la $\lambda = 0,6$, se observă o emisie ridicată de monoxid de carbon (CO), ca urmare a arderii incomplete, datorită lipsei de aer, fapt ce indică evitarea arderii cu aer neinsuflat (atmosferic). Creșterea excesului de aer nu modifică concluzia anterioară cu privire la o flacără care este reprezentată în prima parte de arderea hidrogenului.

Evoluția emisiilor de NO_x

Deoarece formarea NO_x este strâns corelată cu temperatura și durata expunerii la temperaturi ridicate, s-a constatat: pentru amestecurile cu 50% H_2 și ardere stoichiometrică ($\lambda = 1$), emisiile de NO_x cresc semnificativ, datorită temperaturii maxime ridicate; la creșterea excesului de aer la valorile $\lambda = 1,3$ și mai ales la $\lambda = 1,6$, emisiile de NO_x se stabilizează sau scad ușor, beneficiind de efectul de răcire generat de excesul de aer și de diluția reprezentată de aerul în exces.

Analiza energiei cinetice turbulente

Energia cinetică turbulentă reprezintă o componentă esențială în analiza fenomenelor de turbulență în fluxuri de fluide, cum ar fi arderile turbulente. Aceasta măsoară intensitatea mișcărilor pulsatorii ale particulelor dintr-un fluid, având un impact semnificativ asupra proceselor de amestecare, transfer de căldură și reacții chimice. S-a observat existența unui maxim al energiei turbulente în apropierea ambrazurii arzătorului, rezultat din interacțiunea intensă dintre fluxul de combustibil și aerul de ardere, accentuat de reacția rapidă de combustie a hidrogenului. Ulterior, energia turbulentă se diminuează rapid după punctul de aprindere. Un al doilea vârf al energiei a fost înregistrat între 0,25 și 0,35 m, fiind asociat cu dilatarea termică a produselor de ardere.

Evoluția vitezei flăcării

S-a observat o creștere semnificativă a vitezei flăcării odată cu majorarea fracției de hidrogen și cu excesele de aer lambda (λ). Pentru a asigura stabilitatea flăcării, viteza de insuflare a combustibilului și a aerului la nivelul duzelor arzătorului trebuie să depășească viteza de ardere, luând în considerare scăderea complexă a vitezei pe direcțiile axială și radială. Valorile înregistrate ale vitezei de curgere flăcării indică faptul că aceasta depășește viteza de ardere în regim de curgere turbulent, demonstrând astfel totala stabilitate a flăcărilor simulate. Viteza maximă de ardere a hidrogenului în regim laminar este de aproximativ 3,1 m/s, în timp ce în regim turbulent valorile variază în intervalul 1,0 – 3,0 m/s. Chiar și pentru zona de ardere pentru metan, corespunzător distanțelor axiale de 0.2 – 0.3 m, viteza de curgere are valori de peste 3 m/s.

4.5. Concluzii

Modelarea numerică a evidențiat performanțe ridicate ale arderii difuzive în amestecuri hidrogen–metan cu până la 50% H_2, utilizând un arzător real construit special pentru validarea prin experimente pe stand de testare. Simulările arată o stabilitate a flăcării în toate cazurile studiate, chiar și la viteze mari (cazul excesului de aer de 1.6) flacăra a rămas atașată de orificiile arzătorului. Distribuția simetrică a temperaturilor și concentrațiilor fără dezechilibre majore de alimentare sau turbulențe locale confirmă că arzătorul favvorizează un amestec uniform și un control termic bun. Prin introducerea fluxului de hidrogen în metan, arderea este mai completă cu emisii de CO și CO_2 mai reduse, acestea fiind corelate cu o oxidare completă, iar emisiile de oxizi se pot controla prin reglarea excesului de aer.

Capitolul 5: *Cercetări Experimentale de Ardere a Amestecului de Gaze $CH_4 - H_2$*

5.1. Probleme generale

Cercetările experimentale efectuate au urmărit validarea datelor obținute prin modelare și simulare numerică. Acestea au condus la rezultate remarcabile pentru arzătorul pilot conceput și realizat în acest scop. Standul experimental a fost proiectat și realizat cu scopul de a explora în detaliu procesul de ardere al amestecurilor de hidrogen (H_2) și metan (CH_4), având implementat arzătorul inovativ prezentat la paragraful 5.2. Alimentarea separată cu metan și hidrogen oferă flexibilitatea de a crea amestecuri variabile de gaze combustibile. Proiectarea standului a fost realizată astfel încât să simuleze condiții reale de operare. Acest lucru face posibilă obținerea unor date experimentale precise și valoroase care să sprijine dezvoltarea și optimizarea experimentărilor. În plus, standul experimental este dotat cu o gamă largă de instrumente avansate de măsurare și control, care permit monitorizarea continuă a parametrilor de alimentare și de ardere, cum ar fi temperatura flăcării, presiunea și debitul gazelor.

5.2. Instalația experimentală

Concepția generală

Instalația experimentală a cuprins un stand special proiectat și executat, penru testarea combustiei amestecului CH_4 cu H_2, în proporții variabile. Standul cuprinde și un arzător original conceput special pentru studiul flăcărilor difuzive cu aplicație pentru următoarea gamă de combustibili gazoși reprezentați de CH_4 , $CH_4 - H_2$ sau chiar pentru H_2 pur. Alimentarea separată cu metan și hidrogen impusă standului oferă flexibilitatea de a crea amestecuri variabile de gaze combustibile, esențiale pentru studierea detaliată a comportamentului flăcării în funcție de participațiile specifice ale combustibililor utilizați. Proiectarea standului a fost realizată astfel încât să simuleze condiții reale de operare industrială. Esențial al acestui experiment este utilizarea unui arzător difuziv inovativ, care cuprinde 5 jeturi de combustibil gazos încadrate fiecare de distribuția aerului prin jeturi concentrice. Acest concept permite o distribuție uniformă a curgerii și o ardere dinamic controlată, fără fluctuații semnificative care ar putea afecta stabilitatea flăcării sau performanța procesului. În plus, standul experimental este dotat cu o gamă largă de instrumente avansate de măsurare și control, care permit monitorizarea continuă a parametrilor, cum ar fi presiunea, debitul gazelor și temperatura flăcării. Compoziția gazelor de ardere a reprezentat un control pentru a garanta un proces optimizat, care să permită nu doar studii aprofundate de performanță, dar și evaluarea siguranței stabilității arderii. În acest sens a fost concepută o schemă de proces, al cărui element central este arzătorul, reductoare de presiune conectate la sursele de gaz și elemnte de control a debitelor alimentate. Schema permite alimentarea arzătorului cu combustibil și aer în condiții de siguranță operațională. Astfel, pe lângă instrumente de control a gazelor care se alimentează pentru obținerea proporțiilor dorite de metan și hidrogen, au fost prevăzute și supape de sens care previn curgerea inversă și amestecarea nedorită, și un arestor de flăcări pentru prevenirea formării și propagării flăcării prin țevile de alimentare.

Arzătorul cu combustie difuzivă

Arzătorul difuziv utilizat în acest stand experimental a fost conceput pentru a funcționa eficient la presiune atmosferică, având un design inovator bazat pe utilizarea jeturilor concentrice de combustibil și aer. Această configurație asigură o ardere uniformă și controlată, în care amestecul de combustibil – un amestec de hidrogen și metan – și aerul sunt alimentate prin canale concentrice separate. La ieșirea din arzător, aceste fluxuri de gaz și aer se amestecă, creând un amestec optim pentru aprindere și ardere. Mai mult, acest tip de arzător permite prin intermediul standului o funcționare precisă pentru proporțiilor de aer și combustibil, optimizând astfel amestecul gazos. Un alt aspect important în studiul experimental cuprinde impactul asupra emisiilor de CO_2 și NOx. Emisia de CO va scădea odată cu creșterea eficienței combustiei. Prin realizarea experimentului cu standul experimental se urmărește obținerea de date precise despre modul în care diferitele concentrații de hidrogen și metan afectează stabilitatea flăcării și eficiența procesului de ardere. Rezultatul experimental urmează a valida și modelul de simulare numerică. Standul experimental și arzătorul au fost supuse brevetării, nr. înregistrare OSIM A/00239, respectiv A/00033.

5.3. Rezultate preliminare ale cercetărilor experimentale

Cercetările experimentale s-au realizat cu un arzător construit la scara 1:1 față cele de calcul din faza de simulare numerică. Atât cercetările numerice cât și cel experimentale au avut obiectivele: testarea tehnologică de combustie în regim difuziv; testarea evoluției performanțelor combustiei la creșterea proporției de H_2 în CH_4. Testările experimentale s-au realizat până la o proporție de H_2 de 53% (0.53) în amestecul cu CH_4. Programul experimental a cuprins două serii, prima de testare a funcționării generale, iar a doua de evidențiere a performanțelor arderii. Anterior acestor două serii de testări experimentale s-a realizat o referință de funcționare

prin punerea în funcțiune a arzătorului numai cu CH_4, sarcină minimă și exces de aer unitar, conform datelor din tabelul 5.1. Față de această flacără de referință se va evidenția efortul prezenței hidrogenului.

5.4. Testări privind stabilitatea flăcării pentru amestecul combustibil $H_2 – CH_4$

Următoarea serie experimentală a cuprins creșterea progresivă a proporției de H_2, progres similar și pentru aer, cu scopul determinării condițiilor de funcționare cu flacără stabilă. Dozajul $H_2/(H_2 + CH_4)$ notat cu "r" a fost progresiv crescut de la 17 la 50%. Prima experimentare cuprinde arderea $H_2 – CH_4$ cu proporția H_2 = 17%, cu aer atmosferic, constituie o bază de referință pentru evidențierea evoluției flăcării în funcție de valoarea excesului de aer (se remarcă o lungime foarte mare a flăcării pentru combustia cu aerul atmosferic). Variația temperaturii flăcării în punctele de amplasare a termocuplelor (t_1 la 50 mm), (t_2 la 100 mm), demonstrază o creștere pentru dozaje mai ridicate pentru H_2, ca urmare a aprinderii mai rapide a hidrogenului. Experimentările au evidențiat importanța valorii excesului pentru aerul însoțitor, asupra dezvoltării arderii, datele pentru arderea cu excesul de aer stoichiometric ($\lambda = 1$), prezentând cele mai ridicate valori ale temperaturilor, cu Δt notându-se diferența dintre datele experimentale pentru λ=1.05 și cele teoretice cu λ=1. Măsurătorile experimentale au evidențiat că o dată cu creșterea proporției de H_2, are loc o ardere mai apropiată de secțiunea de ieșire din arzător, manifestată prin creșterea temperaturii t_1 și t_2, dar și prin scurtarea lungimii „ℓ" a flăcării.

5.5. Cercetări experimentale privind performanța combustiei melanjului H_2/CH_4

Aceste rezultate au avut la bază concluziile desprinse din cercetările experimentale prezentate anterior, urmând definirea unor performanțe pentru combustia amestecului H_2/CH_4, precum și validarea modelului de calcul pentru simularea numerică realizată. Pentru testele de performanță punctul de referință pentru experimentări a constat în păstrarea unei puteri termice constante a flăcărilor, la valoarea $P_t = 9.5kW$ precum și un exces de aer constant la valoarea stoichiometrică ($\lambda = 1$), pentru o variație a dozajului gazului H_2 în amestecul cu gazul CH_4 de la 34 la 53%. Așa cum s-a demonstart prin simularea numerică, creșterea participației de H_2 , datorită vitezei de ardere mai mare a acestuia față de CH_4, a condus la următoarele concluzii asupra flacării: creșterea temperaturii în zona de ieșire din arzător; scăderea lungimii flacării. Scăderea temperaturii la ieșirea din arzător la creșterea proporției hidrogenului se datorează scurtării zonei de reacție ca o consecință a vitezei ridicate de ardere a acestuia în prima treime a flăcării. Acest aspect este prezent și în evoluția temperaturii în modelul matematic de simulare numerică pentru proporțiile ridicate de H_2.

Rezultatele experimentale și cele obținute prin simulare numerică prezintă o convergență calitativă semnificativă. Principalele similitudini se regăsesc în domeniul lungimii flăcării, al vitezei de degajare a componentelor gazelor de ardere, în forma curbelor de variație a temperaturii, precum și în valoarea temperaturii finale atinse. Diferențele cantitative observate se explică prin condițiile la limită distincte ale celor două abordări: modelarea numerică a fost realizată într-un mediu închis, pe când experimentul s-a desfășurat în atmosferă deschisă. Acest aspect introduce efecte suplimentare în experiment, cum ar fi pierderile de căldură și interacțiunile cu aerul ambiant, care nu sunt complet surprinse de model. Temperaturile măsurate constituie un criteriu esențial pentru validarea simulării numerice. Abaterea relativă între datele experimentale și cele simulate este de aproximativ 9%, valoare care se încadrează în limite acceptabile pentru acest tip de analiză și care confirmă capacitatea modelului numeric de a reproduce cu acuratețe fenomenul de ardere.

În cercetare, întrebările sunt infinite, iar fiecare răspuns deschide alte drumuri - **Marie Curie**

Capitolul 6: Concluzii Generale, Contribuții Originale și Direcții Viitoare de Cercetare

6.1. Concluzii generale

Teza de doctorat intitulată „***Hidrogenul – vector industrial și energetic pentru perioada de tranziție către o societate neutră climatic***" realizează o investigație aprofundată asupra utilizării amestecurilor de hidrogen și metan în procesele de ardere, având ca obiectiv evaluarea fezabilității tehnologice, a performanțelor energetice și a impactului asupra mediului ale acestei soluții hibride, în contextul extinderii surselor regenerabile de energie (SRE) și al nevoii de integrare eficientă a acestora în infrastructura energetică existentă. Pentru a conferi flexibilitate sistemelor bazate pe SRE în condițiile variațiilor de consum și producție, sunt dezvoltate arhitecturi hibride care integrează diverse tehnologii regenerabile și soluții de stocare a energiei. Aceste soluții contribuie la creșterea rezilienței și eficienței rețelelor energetice moderne și sprijină obiectivele de decarbonizare. *Componenta experimentală a cercetării* s-a desfășurat pe un stand special conceput, dezvoltat în parteneriat cu Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Tehnologii Criogenice și Izotopice – ICSI Râmnicu Vâlcea și Universitatea Politehnica din București (UPB), fiind amplasat în incinta UPB. Infrastructura a fost proiectată pentru a simula condiții reale de funcționare ale unui arzător difuziv alimentat cu amestecuri variabile de hidrogen și metan, în scopul investigării performanțelor de ardere în regim turbulent, a stabilității flăcării și a nivelului emisiilor poluante. *Arhitectura sistemului este complet inovatoare*, integrând elemente constructive optimizate pentru combustibili alternativi. Complexitatea acestuia reflectă o abordare multidisciplinară, capabilă să răspundă provocărilor actuale privind decarbonizarea și eficientizarea proceselor termice din sectorul energetic industrial. Datele experimentale obținute constituie o bază solidă pentru validarea modelelor CFD și pentru formularea unor strategii de proiectare și optimizare a arzătoarelor compatibile cu amestecuri de gaze regenerabile. Abordarea holistică a problematicii arderii amestecurilor H_2 – CH_4 a permis o investigare completă a fenomenelor implicate, pornind de la o revizuire critică a literaturii de specialitate, continuând cu simulări analitice și numerice în ANSYS Fluent, și încheind cu validări experimentale pe standul experimental dedicat. Această metodologie complexă a oferit o imagine clară asupra fezabilității tehnice și a potențialului aplicativ al soluțiilor propuse. Principalele concluzii rezultate în urma cercetării desfășurate pe parcursul elaborării tezei intitulate „***Hidrogenul – vector industrial și energetic pentru perioada de tranziție către o societate neutră climatic***" sunt: Integrarea hidrogenului în mixul energetic reprezintă o soluție viabilă și sustenabilă pentru tranziția către un sistem energetic decarbonat, cu potențial ridicat de utilizare în industrie, transport și sectorul rezidențial. Amestecurile de hidrogen și metan oferă un echilibru eficient între inovație tehnologică și compatibilitate cu infrastructura existentă; Modelarea numerică CFD a permis investigarea detaliată a proceselor de ardere într-un arzător difuziv alimentat cu amestecuri H_2–CH_4, relevând distribuții termice omogene, stabilitate ridicată a flăcării și un comportament favorabil pentru aplicații industriale. Utilizarea unui amestec cu 50% hidrogen s-a dovedit fezabilă din punct de vedere operațional; Datele experimentale obținute pe standul dedicat de testare au confirmat fidel rezultatele simulărilor numerice, validând atât configurația geometrică a arzătorului, cât și regimurile de funcționare simulate. Valorile înregistrate pentru viteza flăcării, temperatură și emisii au fost în concordanță cu modelele teoretice; Designul arzătorului pilot, prevăzut cu cinci ajutaje de gaz și zone concave pentru admisia aerului, a contribuit semnificativ la optimizarea amestecului combustibil–aer și la reducerea formării poluanților. Regimul difuziv de ardere a demonstrat o eficiență superioară în controlul emisiilor de Nox; Injectarea hidrogenului în rețelele de gaz metan este tehnologic posibilă și economic justificată până la un prag de 30%, iar rezultatele cercetării extind această limită la 50% în condiții controlate, deschizând perspective reale pentru implementări industriale; Tehnologia Power-to-Gas (PtG) și utilizarea hidrogenului verde joacă un rol central în transformarea sistemelor energetice, atât prin capacitatea de stocare sezonieră, cât și prin integrarea în infrastructura convențională de gaze naturale; Condițiile experimentale atent controlate, împreună cu instrumentarea avansată a standului, au oferit o platformă solidă pentru validarea teoretică și testarea practică a soluțiilor propuse, confirmând eficiența arderii în regim difuziv-turbulent; Rezultatele obținute evidențiază o bună corespondență între simulările numerice și datele experimentale, în special pentru amestecuri cu 42% și 50% hidrogen, unde forma și panta curbelor de temperatură sunt similare. Această corelare confirmă că modelarea numerică este capabilă să surprindă cu acuratețe procesele fizice fundamentale ale arderii, precum localizarea nucleului termic și distribuția căldurii. S-a constatat că, odată cu creșterea proporției de hidrogen în amestec, se obțin temperaturi maxime mai ridicate și o extindere a frontului termic, atingând valori de peste 1900–2000°C. Acest comportament este în concordanță cu caracteristicile cinetice ale hidrogenului, care favorizează reacții rapide și ardere completă, consolidând premisele utilizării acestuia ca vector energetic în soluții hibride sustenabile; Creșterea procentului de hidrogen în amestec determină nu doar o intensificare a temperaturii maxime și o extindere a zonei active de reacție, ci și un comportament favorabil în ceea ce privește eficiența arderii și reducerea emisiilor incomplete. Prin urmare, rezultatele obținute validează atât

capacitatea predictivă a modelului CFD, cât și potențialul real al amestecurilor hidrogen–metan în aplicații energetice durabile. Cercetarea contribuie substanțial la dezvoltarea tehnologiilor de ardere adaptate combustibililor alternativi, punând bazele pentru proiectarea unor arzătoare eficiente, sigure și ecologice în contextul decarbonizării sectorului energetic.

6.2. Contribuții originale ale tezei de doctorat

Contribuțiile originale ale tezei și relevanța acesteia în raport cu provocările energetice actuale la nivel global sunt de înaltă calitate, fiind publicate în reviste de specialitate cu factor de impact ridicat, prezentate la conferințe indexate internațional. Inovația și importanța cercetărilor realizate în cadrul tezei sunt detaliate în continuare pentru fiecare capitol, oferind referințe către publicațiile autorului tezei, în calitate de autor sau coautor, validând astfel contribuțiile valoroase ale acestuia în comunitatea științifică. Principalele elemente de noutate și contribuții originale ale tezei intitulată ***„Hidrogenul – vector industrial și energetic pentru perioada de tranziție către o societate neutră climatic”*** sunt: O evaluare detaliată, pe baza literaturii și a datelor recente, a utilizării industriale a hidrogenului și a izotopilor acestuia în perioada 2021–2025, cu focalizare pe dinamica consumului de energie primară, analiza comparativă a tehnologiilor de producere a hidrogenului și izotopilor săi (inclusiv metode termochimice, electrochimice și criogenice), și integrarea acestora în scenarii orientate spre reducerea emisiilor de gaze cu efect de seră și atingerea neutralității climatice; Realizarea unei analize integrate privind rolul hidrogenului ca vector energetic strategic în tranziția către un sistem energetic sustenabil, prin evaluarea critică a tehnologiilor Power-to-X și a principalelor tipuri de electroliză (AEC, PEM, SOEC), completată de investigarea potențialului național și european pentru producția și integrarea hidrogenului verde; Investigarea aprofundată a comportamentului arderii amestecurilor hidrogen–metan în condiții relevante pentru aplicații industriale, prin analiza configurațiilor constructive ale arzătoarelor (preamestec, difuziv, autoaspirant, low-NOx) și evaluarea criteriilor de stabilitate a flăcării, eficiență energetică și emisii. Am dezvoltat o abordare integrată care combină fundamentele teoretice ale fenomenologiei arderii cu modelarea interacțiunii jeturilor turbulente și a parametrilor de control, oferind suport conceptual pentru proiectarea de soluții compatibile cu noile cerințe de flexibilitate și sustenabilitate ale sistemelor energetice hibride; Am elaborat propunerea conceptuală, proiectarea și realizarea unui arzător difuziv inovator, capabil să funcționeze în siguranță cu amestecuri hidrogen–metan având un conținut ridicat de hidrogen (până la 50% H_2), adaptat cerințelor specifice regimului de ardere difuziv–turbulent; Am realizat o modelare numerică detaliată a procesului de ardere utilizând platforma ANSYS Fluent, care a inclus analiza curgerii interne în camera de ardere, distribuția câmpurilor de viteză și temperatură, precum și predicția formării principalelor specii reactive și poluante. Această abordare CFD a permis investigarea în profunzime a fenomenologiei arderii în regim difuziv–turbulent, oferind suport esențial pentru optimizarea configurației arzătorului și reducerea emisiilor; Arzătorul a fost validat prin testare experimentală utilizând un stand special conceput, echipat cu sisteme de măsurare și control pentru monitorizarea parametrilor de ardere (temperatură, stabilitate a flăcării, emisii). Această etapă experimentală a permis validarea rezultatelor obținute din simulările numerice, demonstrând coerența dintre modelul matematic și comportamentul real al sistemului. Pe baza acestor rezultate, au fost dezvoltate modele predictive destinate optimizării proceselor de ardere și reducerii emisiilor poluante, cu aplicabilitate directă în infrastructurile hibride gaz-hidrogen; Am realizat o analiză comparativă a procesului de ardere pentru două compoziții de combustibil – metan 100% și un amestec H_2–CH_4 în proporție 50–50% – în regim stoichiometric și cu exces de aer, cu scopul de a evalua influența compoziției asupra stabilității flăcării, distribuției de temperatură și nivelului emisiilor poluante. Studiul a evidențiat modificările semnificative ale caracteristicilor de ardere generate de prezența hidrogenului, contribuind la fundamentarea deciziilor privind utilizarea amestecurilor în instalații hibride; Au fost formulate și depuse două cereri de brevet la OSIM, având ca obiect: (1) un dispozitiv de ardere de tip difuziv pentru amestecuri combustibile hidrogen–metan, destinat aplicațiilor rezidențiale, și (2) un stand experimental modular, echipat cu sisteme integrate de măsurare și control, conceput pentru caracterizarea și optimizarea arderii în instalații hibride gaz–hidrogen. Ambele propuneri vizează soluții tehnologice originale, cu aplicabilitate directă în contextul tranziției către surse energetice curate; Am stabilit condițiile optime de funcționare pentru un arzător industrial alimentat cu amestecuri metan–hidrogen, prin identificarea regimului ideal de ardere și a pragurilor de stabilitate a flăcării, în funcție de compoziția combustibilului și parametrii de operare. Rezultatele obținute oferă un ghid tehnologic valoros pentru implementarea sigură și eficientă a acestor soluții în aplicații industriale viitoare, în contextul tranziției către utilizarea combustibililor cu emisii reduse de carbon. Contribuțiile aduse dezvoltării domeniului de cercetare sunt demonstrate prin calitatea ridicată și impactul rezultatelor obținute, validate printr-un număr semnificativ de lucrări științifice publicate: 5 articole în reviste ISI clasate în Q_2, 6 articole în reviste ISI clasate în Q_3, un articol

în revistă ISI clasată Q_4, lucrări publicate în reviste și volume de conferințe indexate ISI și Scopus, 2 cereri de brevet la OSIM așa cum este detaliat în secțiunea de diseminare a rezultatelor.

6.3. Direcții viitoare de cercetare

Integrarea pe scară largă a surselor regenerabile (RES) necesită o abordare multicriterială pentru alegerea și dimensionarea tehnologiilor de stocare. Hidrogenul se conturează ca vector energetic esențial, capabil să reducă intensitatea carbonului și să sprijine tranziția către neutralitate climatică. Dacă estimările anterioare indicau o capacitate de stocare de 6% din consumul anual, datele actuale (2025) arată necesitatea unor valori de 10–20%. În acest context, soluțiile Power-to-Gas bazate pe hidrogen verde devin critice, mai ales în configurații hibride, asigurând echilibrarea pe termen scurt și lung. O direcție aplicabilă imediat este injectarea controlată a amestecurilor H_2–CH_4 în rețelele de gaz existente, reducând gradual utilizarea combustibililor fosili fără modificări majore de infrastructură. Această soluție este relevantă atât în sectorul rezidențial, cât și în cel industrial, facilitând o tranziție pragmatică și sustenabilă către o economie cu emisii reduse. Direcțiile viitoare de cercetare urmăresc extinderea și aprofundarea acestor soluții, în concordanță cu prioritățile UE privind decarbonizarea, securitatea energetică și inovarea tehnologică. Ele sunt prezentate în continuare: Soluții inovatoare pentru reducerea emisiilor de CO_2 prin utilizarea amestecurilor de hidrogen și metan; Interacțiuni între factori climatici și de mediu în procesele de ardere; Adaptare și atenuare la nivel regional, local și sectorial; Reducerea amprentei de carbon prin captarea și utilizarea CO_2; Dezvoltarea tehnologiilor eficiente de producere a hidrogenului; Promovarea vectorilor energetici curați în aplicații reale; Extinderea studiului experimental prin testarea arzătorului la puteri mai mari (adica debite mai mari de combustibil – procentele pot ramane aceleasi) si identificarea limitelor de functionare, Extinderea studiului experimental prin crestereaconcentratiei de H2 in amestec, Studiul emisiilor în timp real și dezvoltarea unor strategii de control automatizat al arderii, bazate pe reglarea dinamică a excesului de aer și recircularea gazelor arse. Scopul acestei abordări este reducerea emisiilor de NO_x, CO și H_2 nears, în conformitate cu cerințele tot mai stricte privind calitatea aerului, Evaluarea posibilității de integrare a arzătorului într-un sistem energetic inteligent – corelat cu surse regenerabile intermitente și tehnologii de tip Power-to-Gas – poate aduce un plus de flexibilitate și sustenabilitate sistemului energetic, în special în aplicații distribuite sau descentralizate; Proiectarea unor configurații modulare de arzătoare, adaptabile diferitelor aplicații industriale, precum cuptoare, turbine sau centrale termice.

Diseminarea rezultatelor – Contribuțiile autorului la dezvoltarea domeniului de cercetare al tezei

Diseminarea rezultatelor obținute în cadrul acestei teze reflectă contribuțiile științifice semnificative ale autorului la dezvoltarea și aprofundarea domeniului de cercetare abordat. Aceste contribuții sunt susținute de un portofoliu de lucrări publicate în reviste științifice cotate internațional și prezentate la conferințe de specialitate recunoscute la nivel național și internațional. Totodată, activitatea de cercetare s-a concretizat în înregistrarea a două brevete de invenție, care atestă caracterul aplicativ și inovator al rezultatelor obținute. Publicațiile și brevetele nu doar validează relevanța și originalitatea cercetărilor întreprinse, ci demonstrează și capacitatea autorului de a integra rezultatele într-un cadru științific și tehnologic larg, contribuind astfel la progresul cunoașterii și la potențiala valorificare practică a acestora în domeniul tratat.

- **Articole publicate în Jurnale ISI**
  - ✓ 1 articol publicat în UPB Scientific Bulletin (Q_4)
  - ✓ 5 articole în Q2
  - ✓ 6 articole în Q_3

1. Mihăescu Lucian; Lăzăroiu Gheorghe; **Niculescu Alina**; Pîșă Ionel; Stoica Dorel; Grigoriu Rodica-Manuela - Diffusive combustion evaluation model for [[EQUATION]] mixture with high hydrogen content, through numerical simulation and experimental validation, International Journal Hydrogen Energy, **2025**

2. Ana George, Bulubasa George, **Niculescu Alina**, Craciun, Maria, Bucur Ciprian, Ștefan Iuliana - *Characterization of water adsorption capacity at high pressure of the molecular sieve proposed to be used in TER RMSB*, Fusion Engineering and Design, vol. 215, 115039, **2025**, https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2025.115039

3. **Niculescu Alina**, Bulubasa Gheorghe, Ana George, Bornea Anisia - *Helium-3 Applications and Recovery Techniques*, Journal of Fusion Energy, vol. 44, issue 1, article number 20, **2025**, https://doi.org/10.1007/s10894-025-00491-6

4. Bulubasa Gheorghe; **Niculescu Alina**; Ana George; Bucur Ciprian; Crăciun Maria; Bornea Anisia - *Investigations on Hydrogen Isotope Separation Factor Employing Palladium-Based Solid Metallic Membranes*, Fusion Science and Technology, Vol. 81(4), pg. 310-314, **2025**, https://doi.org/10.1080/15361055.2024.2353967

5. Ana George; **Niculescu Alina**; Cristescu Ion; Bulubasa Gheorghe - Preliminary evaluation of NEG materials in view of CMSB replacement in HCPB TER architecture, Fusion Engineering and Design, Vol. 199, **2024**, Article number 114135, https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2023.114135
6. **Niculescu Alina**, Gheorghe Lazaroiu - Studies regarding the energetic properties of hydrogen and methane mixtures for domestic and industrial applications, UPB Scientific Bulletin, Series C: Electrical Engineering and Computer Science, Vol. 86 (2), pg. 383 – 397, **2024**
7. Bulubasa Gheorghe; **Niculescu Alina**; Ana George; Bucur Ciprian; Ștefan Iuliana; Crăciun Maria; Bornea Anisia - *Investigations on 3He: Hydrogen Isotope Separation Employing Palladium/Silver Membranes*, Fusion Science and Technology, vol. 80 (3-4), pg. 411 – 415, **2024**, https://doi.org/10.1080/15361055.2023.2271242
8. **Niculescu Alina**, Bulubașa Gheorghe, Ana George, Bucur Ciprian, Crăciun Maria, Bornea Anisia - *Integration of a Microchannel Reactor in a CECE Process for H2 Removal from the O2 Stream Produced by the H2 Generator*, Fusion Science and Technology, 80 (3-4), pg. 416 – 421, **2024,** https://doi.org/10.1080/15361055.2023.2273043
9. Brad Sebastian; Vijulie Mihai; Lazar Alin; Bogdan Claudia; Sirosh Oleksandr, Brill Catalin, Grafov Aleksandr; Oubraham Anisoara; **Niculescu Alina**; Bulubasa, George - *New Achievements of H2-HD-D2 Isotopic Separation with the Cryogenic Distillation Experimental Stand from ICSI Cryogenic Laboratory,* Fusion Science and Technology, Vol. 80 (3-4), pg. 455-464, **2024**, https://doi.org/10.1080/15361055.2023.2236473
10. Bornea Anisia, Ana George, Bălteanu Ovidiu, **Niculescu Alina** et. Al. - Experimental Investigation of CECE Process to Recover Tritium and Deuterium from Low Tritiated/Deuterated Liquid Waste, Fusion Science and Technology , vol. 80(3-4), pg. 365-373, **2024**, https://doi.org/10.1080/15361055.2023.2214700
11. Popescu Gheorghe; Bornea Anisia; Stefan Liviu; Ana George; Stefan Iulia; **Niculescu Alina**; Bulubasa Gheorghe; Bucur Ciprian **-** *Semi-quantitative determination of a tritium removal facility characteristic risk;* Fusion Engineering and Design, Vol.196, **2023**, https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2023.113994
12. Bulubasa Gheorghe, **Niculescu Alina**, Vasut Felicia, Ana Radu – "New method for calibration of a quadrupole mass spectrometer for hydrogen isotopes measurements" - Fusion Engineering and Design, Vol. 166, **2021**, https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2021.112274 ,
13. Ionete Eusebiu Ilarian; **Niculescu Alina Elena**; Spiridon Stefan Ionut; Monea, Bogdan Florian - *Magnetoresistance Behavior of Cryogenic Temperature Sensors Based on Single-Walled Carbon Nanotubes;* IEEE Sensors Journal, Vol. 21 (3), pg. 2767-2774, **2021**, https://doi.org/10.1109/JSEN.2020.3027038

- **Participări conferințe naționale și internaționale:**

1. Lucian Mihăescu, Gheorghe Lăzăroiu, **Alina Niculescu**, Dorel Stoica, Rodica-Manuela Grigoriu, Mohammed Osman – *Results of combustion test of H_2 – CH_4 mixture with high H_2 content*, paper ID: #60, 9th International Hydrogen Technologies Congress, Dokuz Eylul University, Izmir, Turkiye 25 – 28 May **2025**
2. **Niculescu Alina**, Bulubasa Gheorghe, Ana George, Bornea Anisia - *Simulation of Helium-3 Separation by Cryogenic Distillation on Experimental Facility from ICSI Râmnicu Vâlcea*, 22nd International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, Universitatea Ovidius Constanța, România, S3 P2, pg 66, Book of Abstracts, 09 – 12 iulie **2024**
3. Maria Craciun, **Alina Niculescu**, Gheorghe Bulubașa, George Ana, Anisia Bornea - Current State of Research Regarding the Hydrogen Isotope Separation by Permeation through Palladium-Based Membranes, S3 P2, pg 67, Book of Abstracts, 09 – 12 iulie **2024**
4. George Ana, **Alina Niculescu**, George Bulubașa, Ovidiu Balteanu, Radu Ana - *Tritium Extraction Processes from a Fusion Reactor Breeding Blanket*, S3 P3, pg 67, Book of Abstracts, 09 – 12 iulie **2024**
5. **Niculescu Alina Elena**, Ciprian Bucur, Gheorghe Lăzăroiu, George Ana, *Impact of Hydrogen and Methane Mixtures for Domestic and Industrial Applications under the Lens of Climate Change: A Vital Synthesis for the Energy Future*, S5 P7, pg. 95 – 96, Book of Abstracts, 09 – 12 iulie **2024**
6. George Ana, Ion Cristescu, Ovidiu Balteanu, Radu Ana, George Bulubașa, **Alina Niculescu** - *Progress in the development of the HCPB TER architecture,* 33RD Symposium on Fusion Technology, University of Dublin, Ireland, P4-130, pg. 715, Book of Abstracts, 22–27 September **2024**
7. **Alina Niculescu**, George Bulubasa, Ciprian Bucur, Iuliana Stefan, Ion Cristescu, Gheorghe Popescu - HCPB TER components performance validation, 33RD Symposium on Fusion Technology, University of Dublin, Ireland, P4-131, pg. 716, Book of Abstracts, 22–27 September **2024**
8. **Alina Niculescu**, Romulus George Ana, Ion Cristescu, Gheorghe Bulubasa - *Preliminary evaluation of NEG materials in view of CMSB replacement in HCPB TER architecture*, 15th International Symposium on Fusion

Nuclear Technology (ISFNT-15), PS2-57, Fuel Cycle and Tritium Processing, Abstract-5117, pg. 443, Book of Abstracts, Las Palmas de Gran Canaria, Spania, 09 – 16 septembrie **2023**

9. Gheorghe Bulubasa, **Niculescu Alina**, Craciun Maria, Ana George, Bucur Ciprian, Bornea Anisia - *Investigations on Hydrogen Isotopes Separation Factor Employing Palladium-based Solid Metallic Membranes*, 15th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-15), PS1-52, Fuel Cycle and Tritium Processing , Abstract-129d, pg. 284, Book of Abstracts, Las Palmas de Gran Canaria, Spania, 09 – 16 septembrie **2023**

10. Gheorghe Popescu, Anisia Bornea, Liviu Stefan, George Ana, Iuliana Stefan, **Alina Niculescu**, Gheorghe Bulubasa, Ciprian Bucur - *Preliminary risk analysis for a CECE-CD system at ICSI Rm.Valcea,* 15th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-15), PS3-93, Safety Issues and Waste Management , Abstract-6bf1, pg. 625, Book of Abstracts, Las Palmas de Gran Canaria, Spania, 09 – 16 septembrie **2023**

11. **Alina Niculescu**, Gheorghe Bulubasa, George Ana - *Development of a Thermal Cycling Processforthe Recovery of Tritium Used in the Research Programsfrom ICSI,* XXIV the International Conference New Cryogenic and Isotope Technologies for Energy and Environment, Energen 2023, Băile Govora, Romania, TFF 19- P, pg. 329, Book of Abstracts, 18–20 October **2023**

12. Sebastian Brad, Catalin Brill, Claudia Dumitrescu, Aleksandr Grafov, Alin Lazar, Andrii Rozhentsev, Oleksandr Sirosh, Mihai Vijulie, George Bulubașa, Anișoara Oubraham, **Alina Niculescu -** New Achievements of the ICSI Cryogenic Laboratory, XXIV the International Conference New Cryogenic and Isotope Technologies for Energy and Environment, Energen 2023, Băile Govora, Romania, TFF 9- O, pg. 316, Book of Abstracts, 18–20 October **2023**

13. Gheorghe Bulubasa, Alina Niculescu - *Exploratory Studies on the Separation of Helium Isotopes Using GasChromatography,* XXIV the International Conference New Cryogenic and Isotope Technologies for Energy and Environment, Energen 2023, Băile Govora, Romania, TFF 13- O, pg. 322, Book of Abstracts, 18–20 October **2023**

14. Maria Crăciun, Alina Niculescu, Gheorghe Bulubasa, George Ana - *Literature review on barriers against hydrogen isotopes permeation through stainless steel and EUROFER97 for use in DEMO systems,* XXIV the International Conference New Cryogenic and Isotope Technologies for Energy and Environment, Energen 2023, Băile Govora, Romania, TFF 18- P, pg. 328, Book of Abstracts, 18–20 October **2023**

15. Radu Ana, George Ana, Ovidiu Balteanu, **Alina Niculescu**, George Bulubasa - *Development of the tentative 3-D layout for the TER HCPB concept based on tritium adsorption on getter bed technology,* XXIV the International Conference New Cryogenic and Isotope Technologies for Energy and Environment, Energen 2023, Băile Govora, Romania, TFF 20- P, pg. 331, Book of Abstracts, 18–20 October **2023**

16. George Ana, Ion Cristescu, Gheorghe Bulubasa, **Alina Niculescu**, Ciprian Bucur, Iuliana Stefan, Gheorghe Popescu - *HCPB TER components performance validation,* 32nd Symposium on Fusion Technology (SOFT 2022), University of Dubrovnik, Croatia*,* P-2.256, Fuel Cycle and Breeding Blankets, pg. 748, Book of Abstracts, 18–23 September **2022**

17. **Alina Elena Niculescu**, George Ana, Gheorghe Bulubasa - *TCAP Integration in the Tritium Infrastructure of the Tritium Laboratory from ICSI RM. Valcea,* 32nd Symposium on Fusion Technology (SOFT 2022), University of Dubrovnik, Croatia, P-2.265, Fuel Cycle and Breeding Blankets, pg. 757, Book of Abstracts, 18–23 September **2022**

18. Gheorghe Popescu, Liviu Stefan, George Ana, Iulia Stefan, Alina Elena Niculescu, Gheorghe Bulubasa, Ciprian Bucur - *Semi-quantitative determination of a tritium removal facility characteristic risk,* 32nd Symposium on Fusion Technology (SOFT 2022), University of Dubrovnik, Croatia, P-2.266, Fuel Cycle and Breeding Blankets, pg. 758, Book of Abstracts, 18–23 September **2022**

- **Brevete**

1. Lăzăroiu George Cristian, Pîșă Ionel, Mihăescu Lucian, Ștefănescu (Niculescu) Alina Elena Ansamblu modular destinat dozării raportului gazelor $\frac{H_2}{CH_4}\Big/_{aer}$ pentru controlul decarbonatării, **2025**

2. Lăzăroiu Gheorghe, Pîșă Ionel, Ștefănescu (Niculescu) Alina Elena, Negreanu Gabriel-Paul, Mihăescu Lucian, Stoica Dorel - *Modul de arzator $CH_4 – H_2$ pentru instalatiile rezidentiale dintr-un Smart City*, **2023**

- **Participări în proiecte naționale și internaționale:**

1. Agreement On Academic, Scientific and Technical Cooperation between the National Research and Development Institute for Cryogenic and Isotopic Technologies and the ITER International Fusion Energy

Organization Academic, Scientific and Technical Cooperation ITER Organization CTR LGA-2024-A-149 - **2025**

2. Maximizing the Renewable Energy Hosting Capacity of Distribution networks - **2025**
3. Participarea Romaniei la EUROfusion WPBB1 si cercetari complementare / WPBB1-RO 2022 – 2024 contract nr. EU-02_03.01.**2022**
4. Participarea Romaniei la EUROfusion WPBB1 si cercetari complementare / WPBB1-RO 2024 – 2026 contract nr. EURATOM-RO/CDI/2024_001/**2024**
5. *Program Nucleu "Lab-2-Field" - Generarea de tehnologii inovative prin cercetare-dezvoltare, de la nivel de laborator la aplicație, pentru România de mâine,* Contract nr. 20N / 05.01.2023
   - ✓ proiectul: PN23150105 "Tehnologii complexe de producere si stocare a hidrogenului lichid pentru aplicatii mobile" an 2023, an **2024**
   - ✓ proiectul: PN23150106 „Nanostructuri 2D în fabricarea aditivă pentru energia și stocarea hidrogenului" an **2024**
   - ✓ proiectul: PN 23 15 03 02 "Dezvoltarea tehnologiei inovative de separare a izotopilor Litiului prin electromobilitate şi algoritmi de inteligenţă artificială" an **2024**
   - ✓ proiectul: PN 23 15 03 03 "Către un management modern al tritiului şi al materialelor asociate - Sistem modular avansat bazat pe dezvoltarea tehnologiei de separare a tritiului prin procesul CECE" an 2023, an **2024**
   - ✓ proiectul: PN 23 15 03 04 "Dezvoltarea unei tehnologii de distilare criogenică pentru separarea speciilor izotopice ale hidrogenului și heliului" an 2023, an **2024**
   - ✓ proiectul: PN 23 15 03 05 ''Tehnologie inovativă pentru recombinarea/arderea catalitică cu oxigenul, la temperatură joasă a izotopilor hidrogenului'' an 2023, an **2024**
6. *Program Nucleu Dezvoltare de tehnologii pentru tranziţia energetică şi impact asupra mediului – Aducând ştiinţa în scop societal – „ICSI-4EE",* Contract nr. 9N / 07.02.2019
   - ✓ proiectul: PN 19 11 01 01 "Cercetări teoretice și experimentale privind permeația simultană a izotopilor hidrogenului prin metale și barierele antipermeație" an **2022**
   - ✓ proiectul: PN 19 11 01 02 "Dezvoltarea metodelor de testare a materialelor utilizate în domeniul criogeniei și a sistemelor tehnologice criogenice de purificare și separare izotopică" an 2021, an **2022**
   - ✓ proiectul: PN 19 11 01 04 "Soluție inovatoare de proces CECE în scopul promovării unei noi tehnologii de decontaminare a deșeurilor lichide, slab concentrate în tritiu și de recuperare a deuteriului" an 2021, an **2022**
   - ✓ proiectul: PN 19 11 01 03 "Catalizatori inteligenți pentru creșterea eficienței proceselor chimice desfășurate în prezența apei și a umidității cu aplicații în domeniul nuclear și al protecției mediului" an **2021**
   - ✓ proiectul: PN 19 11 02 04 "Dezvoltarea de electroliți solizi cu conductivitate ultra-ridicată și electrozi cu stabilitate ciclică îmbunătățită pentru baterii solid-state" an **2021**
   - ✓ proiectul: PN 19 11 02 05 "Nanostructuri de carbon obținute prin metoda creșterii prin depunere chimică din faza de vapori (CVD) pentru dispozitive electrochimice de producere a energiei electrice" an **2021**
   - ✓ proiectul: PN 19 11 03 03 "Tehnici avansate pentru identificarea surselor de contaminare și a reacțiilor biochimice în ecosistemele acvatice" an **2021**