



DICAM

DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA CIVILE, CHIMICA, AMBIENTALE E DEI MATERIALI

Development of detailed kinetic mechanisms for sustainable production of energy

Sviluppo di modelli cinetici di dettaglio per favorire la sostenibilità della produzione energetica

Project description

The proposed project aims the characterization of the chemical behaviour of biofuels in an oxidative environment, for the sake of design and optimization of technologies for a sustainable energy supply chain. Indeed, the chemical structure of most of the species considered promising biofuels strongly differs from the traditional ones, posing new challenges for the realization of competitive solutions.

A specific focus will be given to the numerical approaches to develop a detailed kinetic mechanism suitable for bio-derived substances. Different strategies for the realization of kinetic mechanisms should be considered, refined, and implemented, including automated generator tools.

Under these premises, a new mechanism able to properly estimate the reactivity of different biofuels under operative conditions of interest for the technological community is expected as the main outcome of this project.

Descrizione del progetto

Il presente progetto è finalizzato alla caratterizzazione del comportamento chimico in ambiente ossidativo di combustibili prodotti a partire da biomasse, al fine di rendere ottimale la progettazione delle opportune tecnologie per la produzione energetica. Infatti, la struttura chimica della maggior parte delle specie considerate come potenziali biocombustibili differisce fortemente da quella dei combustibili tradizionali, ponendo nuove sfide per la realizzazione di soluzioni competitive.

All'interno del presente progetto di ricerca sarà posta particolare attenzione alle possibili analisi numeriche atte a sviluppare modelli cinetici di dettaglio per la chimica delle sostanze sopracitate. A tale scopo, saranno considerate e messe a punto diverse strategie, tra cui l'implementazione di algoritmi per la generazione automatica di meccanismi cinetici di dettaglio.

Sulla base di quanto detto, lo sviluppo di un modello cinetico in grado di predire la reattività di diversi bio-combustibili nelle condizioni operative di interesse industriale e scientifico è da intendersi come il risultato principale del progetto stesso.