

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
Fakulta strojního inženýrství
Ústav procesního inženýrství

Ing. Jiří Strouhal

**MODELOVÁNÍ ZANÁŠENÍ PROCESNÍCH A ENERGETICKÝCH
ZAŘÍZENÍ TUHÝMI ZNEČIŠŤUJÍCÍMI LÁTKAMI**
MODELING OF PROCESS AND POWER EQUIPMENT FOULING BY SOLID
POLLUTANTS

Zkrácená verze dizertační práce

Obor: Konstrukční a procesní inženýrství

Školitel: doc. Ing. Zdeněk Jegla, Ph.D.

Oponenti: doc. Ing. Vojtěch Turek, Ph.D.
Vysoké učení technické v Brně

doc. Ing. Jiří Hájek, Ph.D.
IDIADA CZ a.s.

Datum obhajoby: 15. června 2023

Klíčová slova

partikulární zanášení, výpočtová dynamika tekutin, modely kritické rychlosti, tuhá paliva, mikronové částice

Keywords

particulate fouling, Computational Fluid Dynamics, critical velocity models, solid fuels, micron particles

Místo uložení dizertační práce

Ústav procesního inženýrství, FSI, VUT v Brně

© Jiří Strouhal

Tato práce vznikla jako školní dílo na Vysokém učení technickém v Brně, Fakultě strojního inženýrství. Práce je chráněna autorským zákonem a její užití bez udělení oprávnění autorem je nezákonné, s výjimkou zákonem definovaných případů.

ISBN 80-214-
ISSN 1213-4198

OBSAH

1 ÚVOD	5
1.1 Predikce partikulárního zanášení a výpočtová dynamika tekutin	5
1.2 Formulace cíle práce	6
2 TEORETICKÝ ZÁKLAD MODELOVÁNÍ PARTIKULÁRNÍHO ZANÁŠENÍ	7
2.1 Modelované jevy	7
2.1.1 Transport látek	8
2.1.2 Depozice	8
2.2 Přístupy k modelování	9
2.2.1 Transport a ulpívání	9
2.2.2 Stanovení okrajových podmínek	9
2.2.3 Možná zjednodušení	10
3 EXPERIMENTÁLNÍ ZAŘÍZENÍ	10
4 MODELOVÁNÍ USAZOVACÍ KOMORY	11
4.1 První model ulpívání	13
4.2 Druhý model ulpívání	16
4.3 Citlivostní studie dvou modelů ulpívání	17
4.4 Shrnutí	19
5 MODELOVÁNÍ VÝMĚNÍKU	19
5.1 Geometrie a okrajové podmínky	20
5.2 Vliv drsnosti a přítomnosti vrstvy zkondenzovaných par	21
5.3 Vícenásobná kolize a deformace nánosu	22
5.4 Shrnutí	23
6 ZÁVĚR	24
6.1 Směr budoucích prací	25
SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	26
CURRICULUM VITAE	29
ABSTRAKT	30

1 ÚVOD

Tuhá paliva tvoří pokrývají značnou část globální poptávky po energii [1]. Zároveň jsou rozvíjeny nové cesty nakládání s odpady, které zahrnují i spalování. Predikce průběhu spalování a jeho produktů slouží ke zlepšení stávajících spalovacích zařízení, hledání nových návrhů zařízení a způsobů spalování nových typů paliv – nejen odpadů, ale i dosud nevyužívaných typů uhlí [2]. K zanášení dochází ve chvíli, kdy se převážná část usazované hmoty nachází v pevném skupenství. Práce [3] uvádí typy zanášení, z nichž na straně spalin jsou relevantní tyto:

- *Partikulární.* Jde o usazování částic nesených proudem spalin a to vlivem setrvačnosti částic, vnějších sil, silových působení mezi spalinami a částicemi a tzv. intercepce (dopadu částic těsně míjejících nánosu), které vedou k jejich oddělení od proudu a dopadu na zanášený povrch.
- *Chemické.* Zahrnuje např. koksování či korozi.
- *Krystalizační.* Jde o usazování látek v důsledku dosažení/překročení nasyceného stavu díky změně teploty nebo zvýšení obsahu látky díky chemickým reakcím.
- *Kondenzační.* Lze ji rozdělit na *homogenní* a *heterogenní*; Při homogenní vznikají uvnitř proudu tekutiny sub-mikronové částice (aerosoly), při druhé kondenzují látky na povrchu buďto nánosu nebo pevných částic v proudu tekutiny a zvyšují tendenci částic ulpívat na stěně.

Důsledkem zanášení je pokles účinnosti zařízení, kdy pro dosažení stejného výkonu je nutné navýšit teplotu či průtok spalin s nutností spalování většího množství paliva [4]. To vede k nárůstu tepelného toku na méně zanesených částech teplosměnných ploch a jejich možnému poškození v důsledku nerovnoměrného rozložení hustoty tepelného toku a vysokých teplot. Hrozí nadměrné mechanické namáhání částí kotle vlivem tíhy nánosu. Opadávající kusy mohou poškodit níže ležící části kotle [5]. Při růstu nánosu může dojít k urychlení eroze teplosměnných ploch a růstu tlakové ztráty. Nános představuje prostředí s rizikem vzniku či urychlení koroze [6].

K prevenci zanášení lze přispět volbou provozních podmínek nebo optimalizací návrhu výměníku [7]. Dopady zanášení na výkon zařízení lze zohlednit při jeho návrhu volbou vhodné navýšením velikosti teplosměnné plochy, v závislosti na očekávané intenzitě zanášení. Toto navýšení však vede k nežádoucím efektům, jako je např. nárůst rozměrů výměníku spolu s náklady na jeho výrobu [8]. Proto je žádoucí mít k dispozici vhodné nástroje pro predikci zanášení.

1.1 PREDIKCE PARTIKULÁRNÍHO ZANÁŠENÍ A VÝPOČTOVÁ DYNAMIKA TEKUTIN

Mechanistické modely zanášení uvažují zanášení jako proces sestávající z dílčích částí, jako je vznik a uvolnění tuhých částic, aerosolů a par, transport a reakce během něj, dosažení zanášeného povrchu, usazení, vývoj nánosu a jeho vliv na

provoz zařízení [9]. I při „pouhém“ popisu zařízení jako celku lze získat cenné informace pro návrh provozních podmínek a intervalů čištění. Při rozdělení modelu na jednotlivé části zařízení (např. dle teplosměnných ploch) lze posuzovat návrh těchto částí dle veličin popisujících vyjmenované procesy (hmotnostní tok usazované hmoty, přenášený tepelný tok).

Mechanistický přístup pro simulace lokální míry zanášení lze implementovat pomocí výpočtové dynamiky tekutin [9]. Výpočtová dynamika tekutin (*Computational Fluid Dynamics*, dále jen CFD) je široce používaným nástrojem pro řešení řady inženýrských problémů, mimo jiné v oblasti spalování tuhých paliv.

Vznik tuhých částic, par a aerosolů závisí nejen na lokálních podmínkách, ale i na přidaných aditivech a u spoluspalování na interakcích dílčích složek. To motivovalo řadu autorů k vytvoření modelů spojujících model spalování a zanášení, např. [10].

Jedním z pozorovaných trendů je (očekávatelný) postupný přechod od malých částí (např. jednotlivých trubek k celým zařízením a kombinování modelu zanášení s modelem spalování. Zároveň jsou modely využívány k návrhům změn ve tvaru a uspořádání teplosměnných ploch a analýzám nových typů paliv. I nejnovější modely pracují s jednoduchými dílčími modely pro ulpívání tuhých částic (např. na základě viskozity odhadnuté ze známého složení částic) na základě empirických poznatků.

1.2 FORMULACE CÍLE PRÁCE

Hlavní procesy, které lze při mechanistickém přístupu k predikci zanášení rozlišit, jsou značně komplexní a sestavení komplexního modelu lze jen obtížně provést najednou. V literatuře lze najít příklady komplexních modelů, které spojují spalování a zanášení, např. [11]. Příklad využívá dříve vytvořené modely zanášení založené na přítomnosti kapalné fáze a simulují usazování při teplotách větších než 500 °C. Spalovací modely přitom mají potenciál poskytnout informace o popílku, aerosolech a kondenzujících parách, které mohou být využity k predikcím zanášení i při teplotách podstatně nižších, kdy je výskyt roztaveného podílu zanedbatelný [12] a viskozita částic vysoká. Modely zanášení, které vycházejí ze struktury povrchu nánosu a rychlosti dopadající částice, jsou v principu schopny lépe popsat zanášení na geometricky složitých a netypických plochách. Jako vstup modelu může posloužit i struktura částic (např. plné kulové částice, cenosféry nebo různé agregáty), která má vliv na rozpad částic, efektivní mechanické vlastnosti (kombinace vlastností dopadající částice a povrchu). Doposud existující modely zanášení zpravidla pracují s omezeními v podobě zanedbání některých podstatných faktorů ovlivňujících ulpívání tuhých částic, mezi které patří zejména rychlost částice [13] či vlastnosti povrchu nánosu [14].

Cílem předkládané práce je tedy najít či sestavit vhodný model pro simulace partikulárního zanášení zohledňující data získatelná ze simulace transportu a dopadu částic – dopadovou rychlost, velikost a mechanické vlastnosti dopadající

částice a vlastnosti zanášeného povrchu (mechanické vlastnosti, drsnost a přítomnost nánosu). V rámci tvorby modelu budou vzájemně srovnány výsledky ze simulací z odlišných variant modelu, čímž lze demonstrovat význam zahrnutí dílčích jevů, které lze jednotlivě nalézt v již existujících modelech, avšak takovéto srovnání modelů odlišným způsobem zohledňujících vliv dopadové rychlosti, přítomnosti a struktury nánosu nebylo v pracích věnovaných těmto modelům provedeno. CFD model zanášení umožní simulaci zanášení na straně spalin a predikci lokální intenzity zanášení individuálních částí spalovacích zařízení. Vstupy vzniklého modelu budou omezeny na tato data:

- Typ paliva, jeho hrubý a prvkový rozbor, způsob přípravy a skladování.
- Provozní podmínky ve spalovacím zařízení (teplota a průtok spalin, teplota vody nebo páry).
- Množství uvolňovaného popílku, par a aerosolů a jejich typické vlastnosti (zejména velikost, struktura a složení).

Vytvořený model poté může být implementován v komplexním modelu zahrnujícím spalování i zanášení. V rámci problému simulací zanášení v této dizertační práci není proces spalování a vzniku látek způsobujících zanášení zahrnut. Modely budou implementovány v software ANSYS[®] Fluent[®], představující vhodný základ pro tvorbu komplexního modelu zanášení. Poskytuje širokou škálu modelů turbulentního proudění směsi plynů s přenosem tepla, modely pohybu částic a vzájemné interakce s plynnou fází. Doplnění ostatních modelů je umožněno pomocí tzv. uživatelsky definovaných funkcí (*User Defined Functions*, dále jen UDF) [15]. Simulace partikulárního zanášení provedené s implementovanými modely jsou v dizertační práci porovnávány s pozorováními na experimentálním zařízení pro výzkum spalování tuhých alternativních paliv a zanášení.

2 TEORETICKÝ ZÁKLAD MODELOVÁNÍ PARTIKULÁRNÍHO ZANÁŠENÍ

Partikulární zanášení zahrnuje (mimo vzniku) transport usazovaných částic do blízkosti povrchu, jejich kolizi s povrchem, ulpívání, setrvání v nánosu a případný návrat zpět do proudu plynu. Další typy zanášení (kondenzační, chemické) ovlivňují tyto procesy.

2.1 MODELOVANÉ JEVY

Transport částic a plynů ovlivňuje průběh následných procesů (plyn nebo částice, která se nedostane k povrchu, se nemůže usadit, a tedy ani budovat nebo opustit nános). Dopad a ulpívání částic je řídicím faktorem vývoje nánosu; naopak vývoj nánosu ovlivňuje zanášení. Poslední dva jevy tedy úzce souvisí, zatímco samotný transport částic a plynu je ovlivňován na mnohem delších časových škálách (v důsledku změn teploty povrchu nánosu a geometrie zanášeného povrchu, a tedy i proudění spalin).

Vývoj nánosu zahrnuje změny v jeho tloušťce a tvaru a dále mechanických a tepelně-izolačních vlastnostech. Porozita nánosu snižuje jeho tepelnou vodivost, a mění jeho mechanické vlastnosti. Vysokou porozitu mají sypké nánosy složené ze suchých mikronových částic. Tepelná vodivost nánosu kromě porozity (a vodivosti pevných složek nánosu) záleží i na uspořádání a tvaru částic.

2.1.1 Transport látek

Největší část transportních mechanismů je spjata s částicemi (popílek, aerosoly). Popis transportu látek k povrchu je tedy z velké části popisem transportu částic. Jak molekuly plynných složek, tak i značně větší částice, jako je popílek, jsou vystaveny působení okolních molekul plynu, což vede k jevům jako je molekulární difuze či Brownův pohyb. Nehomogenní rozložení teploty, tlaku nebo např. velikosti a frekvence fluktuací rychlosti plynu vyvolávají silová působení na částice a jsou schopny je odchylovat od proudu plynu. Relativní rychlost nebo úhlová rychlost částice a plynu vyvolává další silová působení, od „prostého“ odporu po vztlakové síly různého původu, spojené s nepravidelností tvaru částice, rotací vůči proudu plynu nebo pohybu v plynu s příčným gradientem rychlosti. I při zanedbatelném odchylování částic od proudu plynu se mohou částice dostat do kontaktu se stěnou, pokud se v proudu tekutiny pohybují sice spolu s proudem plynu, ale tak blízko, že dojde ke vzájemnému dotyku se stěnou.

2.1.2 Depozice

Dopad částic provází jevy, které zvyšují tendenci částice k ulpění díky ztrátám původní kinetické energie částice (elastická a plastická deformace, tření při průchodu kapalnou vrstvou) a jevy, které přímo způsobují zachycení částice (např. gravitace).

Nejjednodušším přístupem k modelování ulpívání předpokládat, že pokud se látka dostane do kontaktu s povrchem, pak ulpí. U partikulárních látek jde o ty, u kterých dominují difuzi podobné transportní mechanismy (např. termofórzeza nebo Brownův pohyb), kdy dopadová rychlost částice je malá v porovnání s dopadem setrvačností [16]. Usazované složky tekutiny typicky ulpívají díky kondenzaci a chemickým reakcím. U větších částic může být velmi významná zejména dopadová rychlost, struktura povrchu stěny, složení částice i povrchu stěny a jejich teplota.

Dopadová rychlost částice určuje typ deformací (elastická, plastická), případně o tom, zda částice ulpí, odrazí se nebo eroduje existující nános. Nepravidelnost tvaru částice a složitá struktura (např. dutiny případně obsahující menší částice) zvyšují tendenci částic k ulpění díky větším deformacím a případně rozpadu částice při dopadu [16]. Modely zanášení běžně vycházejí z předpokladu plných kulových částic při zachování dostatečného kvalitativního i kvantitativního souhlasu s experimentem, např. [17]. Pro ulpívání částic jsou stále relevantní některé z transportních mechanismů, např. aerodynamický odpor či gravitace, které mohou buďto držet částic na povrchu nánosu, nebo naopak způsobit její odtržení.

2.2 PŘÍSTUPY K MODELOVÁNÍ

V této práci jsou vlastnosti částic a plynu, spolu s provozními podmínkami a příslušnými modely zanášení soustředěny na spalovací zařízení a produkty spalování.

2.2.1 Transport a ulpívání

Velikost částic rozhoduje o významu konkrétních transportních mechanismů. S tím souvisí i to, zda částice modelovat jako diskrétní fázi (Lagrangeovský přístup) či jako kontinuum (Eulerovský přístup). Model diskrétní fáze založený na Lagrangeovském přístupu je volen pro částice o velikosti 10 μm a větší. Umožňuje přímo simulovat množství dopadajících částic na stěnu o konkrétní geometrii za daných podmínek v proudu plynu. Dále umožňuje zjistit dopadovou rychlost částic a přímo tak aplikovat modely kritické rychlosti. Sub-mikronové částice naopak tomu jsou modelovány jako kontinuum v Eulerovském rámci [11]. Protože tyto částice již mají zanedbatelnou setrvačnost oproti ostatním transportním mechanismům, je možné pro ně použít transportní modely podobné difuzi plyných složek. Důvodem pro použití Eulerovského přístupu je dále nižší výpočtový čas. Významný vliv na množství dopadajících částic má turbulentní disperze [12] – pro mikronové částice modelované pomocí Lagrangeovského přístupu je hojně využíváný *Discrete Random Walk Model* (DRWM).

Pro modelování ulpívání je ústřední veličinou pravděpodobnost ulpění, jakožto výstupní veličina depozičních modelů, je-li na zanášení pohlíženo z pohledu konkrétní částice. Pokud je na zanášení pohlíženo z pohledu plochy, na kterou dopadá určité množství částic, jde o tzv. účinnosti ulpívání.

Běžně jsou pro tuhé částice rozlišovány tři skupiny modelů ulpívání [9]. *Modely založené na kapalném podílu* určují pravděpodobnost ulpění z podílu kapalné fáze v částici nebo na povrchu stěny. Předpokládá se existence nenulového podílu kapaliny, kdy částice ještě není schopna sama ulpívat a nejvyššího podílu, kdy je schopna odrazu od povrchu této stěny. *Modely založené na viskozitě* jsou podobného charakteru jako předchozí skupina. Pravděpodobnost ulpění zpravidla roste s klesající viskozitou μ (částice nebo nánosu) a od určité hodnoty je rovna jedné. Často citovaným příkladem je model [18], kde lepivost je rovna jedné, pokud je viskozita menší než tzv. referenční viskozita a dále s růstem viskozity klesá. *Modely kritické rychlosti* stanovují nejnižší (kritickou) hodnotu velikosti dopadové rychlosti částice u_{imp} nutnou pro její ulpění, označenou u_{crit} . Tato hodnota je dána silovou rovnováhou nebo energetickou bilancí v průběhu dopadu. Modely se liší v tom, zda je s kritickou rychlostí porovnávána velikost dopadové rychlosti nebo jen její normálové složky.

2.2.2 Stanovení okrajových podmínek

Velikosti a složení částic lze přibližně stanovit z rozboru spodního popele [19] či vzorků z odlučovačů [20], nicméně je třeba brát v úvahu nejistoty z důvodu

změn velikostí a složení v průběhu transportu, způsobené např. heterogenní kondenzací par na povrchu částic, rozpadem nebo spojováním částic. Autoři [21] využili pro stanovení okrajových podmínek modelu zanášení výstupy z vlastních CFD modelů spalování.

2.2.3 Možná zjednodušení

Díky rozdílným časovým škálám dějů z hlediska jediné částice (sekundy), iniciace nánosu (minuty až hodiny) a jeho dlouhodobého vývoje (hodiny až roky) není při velikosti běžných zařízení proveditelné simulovat časový vývoj na všech škálách najednou. Zjednodušením je simulace okamžité rychlosti zanášení pro známé provozní stavy kotle a případně i známé rozložení existujícího nánosu [19]. Simulace okamžitého stavu jsou vhodné pro parametrické studie s výstupy jako je tlaková ztráta, okamžitá rychlost zanášení nebo např. přenášený tepelný tok [22]. Pokud je žádoucí zachytit časový vývoj nánosu, přičemž krátkodobé změny podmínek a vlastností nánosu podmínek jsou dostatečně malé, lze nestacionární děj modelovat jako kvazi-stacionární [11]. Periodické změny vyvolané např. oscilacemi okrajových podmínek (např. díky rotaci pece) je možné zachytit pomocí simulace několika těchto opakování a stanovení průměrné rychlosti zanášení (příp. dalších veličin) na jednotku času [23].

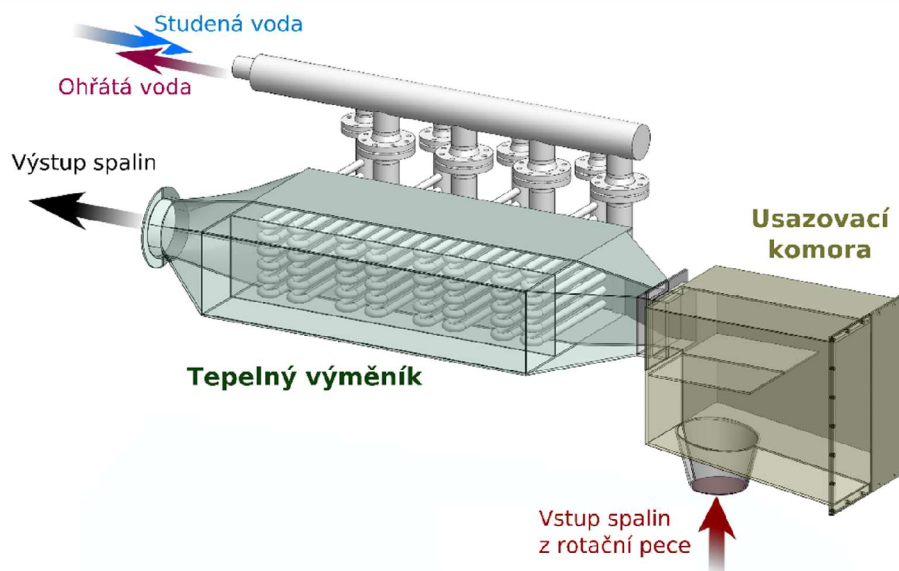
Pro zjednodušení lze často využít přenesení situace do dvou rozměrů, což vyhovuje například u trubkových svazků [12]. Často se využívá periodicitu podmínek, případně je zkoumána jen první řada trubek ve svazku [17] a geometrie je tak zjednodušena na dvourozměrnou oblast obsahující jednu trubku. Další možností je nahrazení reálného prvku geometrie jednodušším. Šotové přehříváky lze např. nahradit rovinnými deskami, v případě hustých trubkových svazků se nabízí náhrada jednoduššími geometrickými prvky [11].

3 EXPERIMENTÁLNÍ ZAŘÍZENÍ

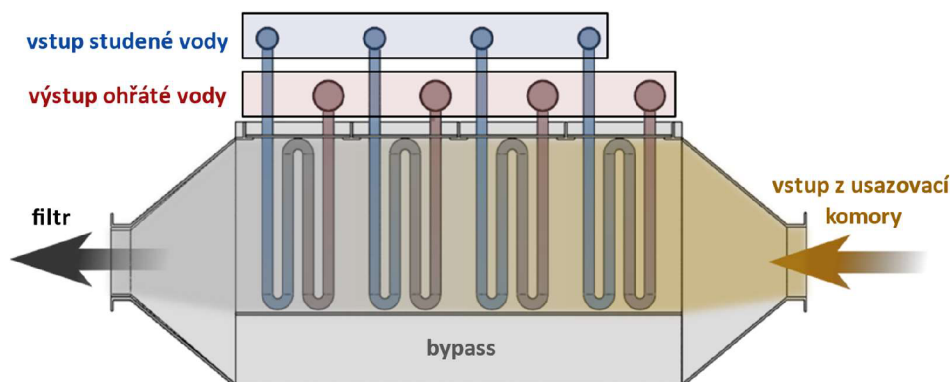
Simulace zanášení se soustředily na případ experimentálního zařízení provozovaného na Ústavu procesního inženýrství, jež umožňuje experimentální ověřování procesu zanášení včetně měření vybraných produktů spalování (zahrnující uvolněné tuhé znečišťující látky) a vznik nánosů na teplosměnných plochách. Zanášivé spaliny jsou produkovány v rotační peci. Účelem této pece je simulovat spalování v průmyslových pecích a obecných procesních a energetických spalovacích zařízeních.

Navazující části zahrnují usazovací komoru a výměník (Obr. 1). Usazovací komora slouží jako pasivní mechanická část zachycující část tuhých znečišťujících látek. Je vybavena odnímatelnou zadní stěnou umožňující dobrý přístup k vnitřku komory, prohlídku a odstranění vzniklých nánosů mezi jednotlivými spalovacími zkouškami. Z komory spaliny pokračují do výměníku, skládajícího se ze dvou paralelních kanálů, tj. hlavního kanálu (s trubkovými hady) a obtokové trasy (bypassu). Na obou koncích hlavního kanálu jsou umístěny ručně ovládané

klapky. Schéma na Obr. 2 ukazuje zapojení výměníku v protiproudém uspořádání průtoku spalin a chladicí vody. Popsané spalovací zařízení je provozováno Sekcí termických procesů a čištění spalin ÚPI.



Obr. 1: Sestava usazovací komory a výměníku. Převzato z [25] a upraveno.



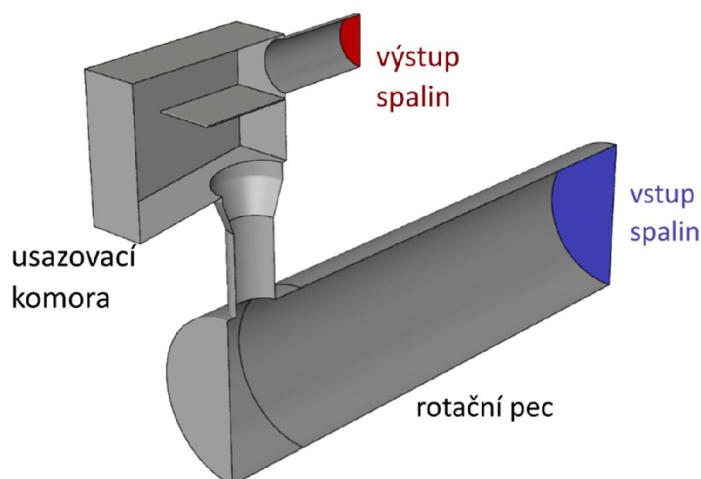
Obr. 2: Schéma výměníku s protiproudým uspořádáním spalin a chladicí vody.

4 MODELOVÁNÍ USAZOVACÍ KOMORY

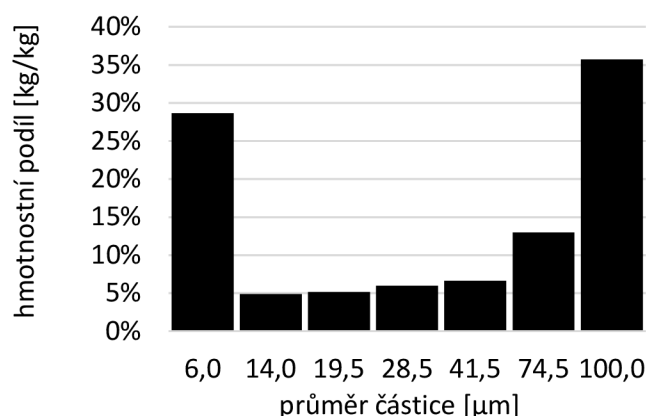
Pro účely tvorby modelu zanášení se komora představuje vhodný výchozí bod, tvarově jednodušší než výměník. Neobsahuje teplosměnné plochy, které by díky přenosu tepla ovlivňovaly vlastnosti proudu plynu a pohyb malých částic.

Tvorba modelu zahrnuje formulace vybraných modelů z dostupné literatury a jejich úpravy, charakteristiku okrajových podmínek kombinující data z měření na zařízení, vybraná data z literatury a porovnání výstupů simulací s pozorovanými nánosy. Rotační je byla do modelu zahrnuta pro poskytnutí profilu rychlosti spalin a rychlosti a množství tuhých částic na vstupu do usazovací komory. Vstup

spalin je zadán po celém čele rotační pece, která je uvažována zjednodušeně jako nerotující válcový prvek. Vlastnosti popílku jsou dány dle [24] s rozložením velikostí viz Obr. 4. Střední průměr částic $d_{p,av} = 17,53 \mu\text{m}$ je vypočten pro $d_p < 100 \mu\text{m}$, neboť dle předběžné simulace nebyly větší částice schopny dosáhnout usazovací komory. Hustota částic je stanovena dle [24] na 2770 kg/m^3 .



Obr. 3: Modelová geometrie se zjednodušenou rotační pecí a usazovací komorou. Rovina symetrie je skryta.



Obr. 4: Rozložení velikostí popílku dle [24]. Převzato z [25] a upraveno.

Pro modelování turbulence [51] je vybrán Realizable $k-\varepsilon$ model. RANS modely a zejména pak $k-\varepsilon$ jsou hojně využívány pro simulace spalování tuhých paliv, transportu spalin a popílku a zanášení za cenu relativně malých výpočtových nároků v porovnání s komplexnějšími modely [13]. Proudění v mezní vrstvě, které u středně velkých částic určuje do značné míry jejich dopadovou rychlost, je řešeno v rotační komoře za pomoci stěnových funkcí [22], což umožňuje použít hrubou síť po celém objemu pece, naopak v usazovací komoře je mezní vrstva rozlišena. Proto je Realizable $k-\varepsilon$ model použit v kombinaci s Enhanced Wall Functions. Zmíněné částice s velikostí v rozmezí 6 až $100 \mu\text{m}$ jsou modelovány jako partikulární fáze v Lagrangeovském rámci s použitím Discrete Phase Model

(DPM). Vliv turbulence na pohyb částic je modelován pomocí DRWM v kombinaci s Random Eddy Lifetime [51].

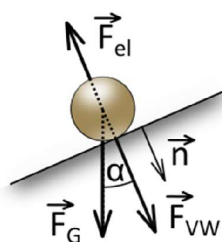
Pro všechny simulace bylo použito následující nastavení řešiče. Pro řešení rovnice pro tlak a hybnost je použito *Coupled Scheme*. Pro prostorovou diskretizaci tlaku je použit druhý řád, pro ostatní veličiny pak druhý řád *upwind*. K odhadu gradientů slouží *Cell-based* metoda nejmenších čtverců. Konvergence je posuzována dle škálovaných reziduí, s limitní hodnotou 10^{-5} .

Simulace byly prováděny na výpočetním clusteru s využitím 28 jader Intel(R) Xeon(R) E5-2690 v4. Doba výpočtu proudění na největší síti byla nižší než 15 minut. Post-process výpočet trajektorií částic (jednosměrný coupling proudění → částice) pro jedno nastavení parametrů modelu ulpívání trval pro 600 000 vpuštěných částic nejvýše 20 minut.

4.1 PRVNÍ MODEL ULPÍVÁNÍ

Jedním z jednoduchých modelů ulpívání založených na kritické rychlosti je model [12], založený na rovnováze sil působících na kulovou částici v kontaktu s hladkou stěnou. Předpoklady modelu zahrnují zanedbatelný vliv kondenzujících par na ulpívání a zanedbatelné ztráty energie v případě odrazu částice. První silou je tíhová síla \vec{F}_G . Elastická síla \vec{F}_{el} zahrnuje vliv elastické deformace částice a stěny. Její velikost roste s průměrem částice a její dopadovou rychlostí. Konstanta úměrnosti G , exponent n a referenční průměr d_{ref} charakterizují mechanické vlastnosti částice tak i stěny.

$$F_{el} = G (d_p/d_{ref})^n d_p^2 |v_{i,n}|^{1,2} \quad (1)$$



Obr. 5: Síly působící na částici [12].

Van der Waalsova síla je vyjádřena pomocí konstanty úměrnosti B , průměru částice a vzdálenosti y částice od stěny. Dle [12] je tato vzdálenost rovna $d_p/2$.

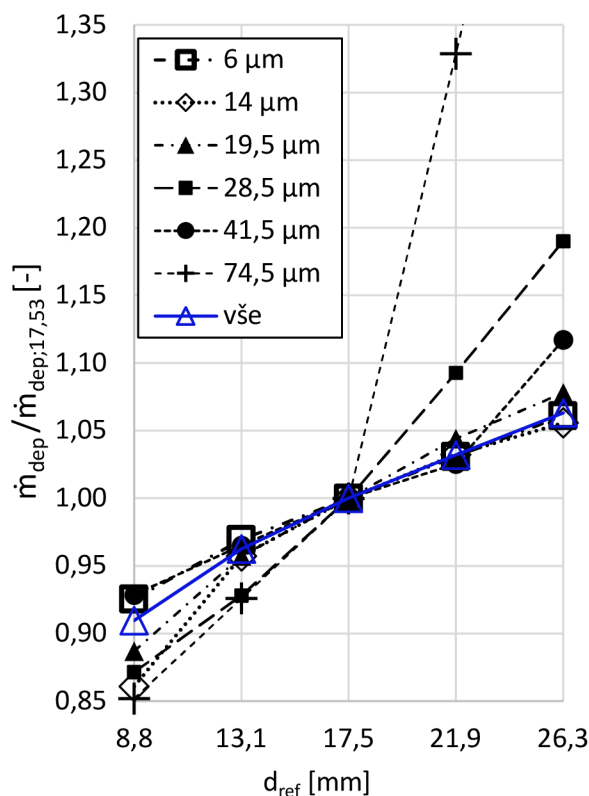
$$F_{vw} = B d_p / (6 y^2) \quad (2)$$

Výsledná pravděpodobnost ulpění částice může nabývat hodnot 0 nebo 1, tj

$$P = \begin{cases} 1 & F_{VW} + |\vec{F}_G| \cos \alpha \geq F_{el} \\ 0 & \text{jinak} \end{cases} \quad (3)$$

Okrajové podmínky (teplota spalin 950 °C, hmotnostní tok spalin 0,231 kg/s a hustota 0,288 kg/m³) jsou stanoveny dle návrhových parametrů výměníku. Srovnáno bylo pět sítí lišících se sítí v oblasti mezní vrstvy a vybrána síť o přibližně 590000 buňkách s průměrnou hodnotou $y^+ \approx 1,7$ v usazovací komoře. Srovnání výpočtových sítí ukázalo nízkou závislost deponovaných hmotnostních toků na počtu buněk v mezní vrstvě. Nejvyšší odchylka hmotnostního toku byla 5 % hodnoty nejhrubší sítě. Celkový depoziční tok na všech stěnách komory se vůči hodnotě nejhrubší sítě lišil o max. 7 %.

Odhad d_{ref} byl zvolen jako hmotnostně průměrovaný rozměr všech částic vstupujících do komory (17,53 μm). Závislost usazené hmoty na d_{ref} je podstatně výraznější pro větší průměry částic a pro vyšší obsah velkých částic lze čekat výraznější změnu celkového depozičního toku. Hmotnostní tok částic usazovaných na jednotlivých plochách usazovací komory v závislosti na d_{ref} je graficky znázorněn na Obr. 6.



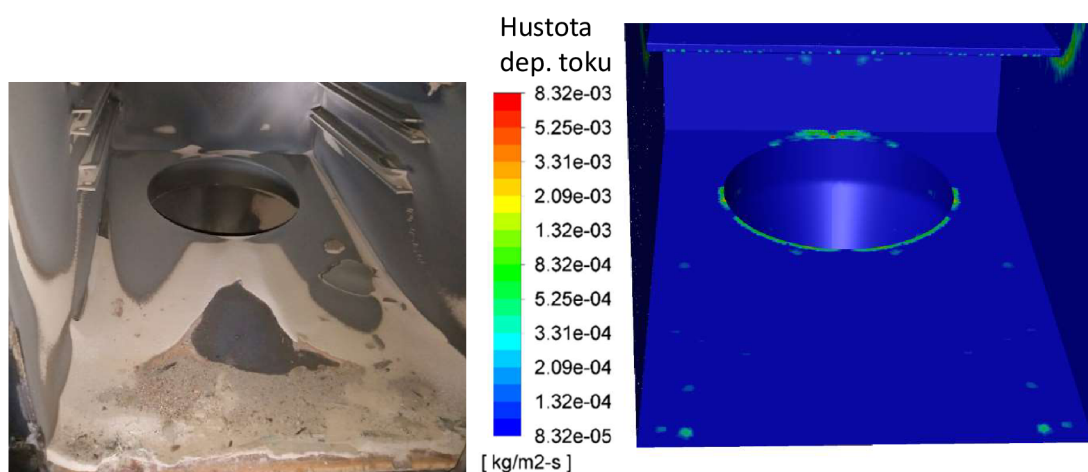
Obr. 6: Znázornění hodnot hmotnostních toků deponovaných částic pro pět hodnot d_{ref} v poměru ke hmotnostním tokům při $d_{ref} = 17,53 \mu\text{m}$.

Po provedení prvních spalovacích zkoušek na experimentálním zařízení byly provedeny simulace s okrajovými podmínkami vycházejícími z naměřených hodnot koncentrace částic, hustoty a průtoku spalin (Tab. 1). Ostatní okrajové podmínky byly ponechány dle původního nastavení (viz úvod kap. 4).

Vlastnosti částic byly ponechány beze změny. Důležitým poznatkem je téměř symetrické rozložení pozorovaných nánosů kolem roviny symetrie komory. I nadále je tak považováno zanášení komory jako rovině symetrická úloha. Výsledky simulace (oproti pozorovaným nánosům) ukazují značně podhodnocení míry zanášení na dně usazovací komory v porovnání s okolními stěnami (viz Obr. 7).

Tab. 1: Nastavení okrajových podmínek a vlastností spalin v simulaci usazovací komory na základě měření během spalovacích zkoušek.

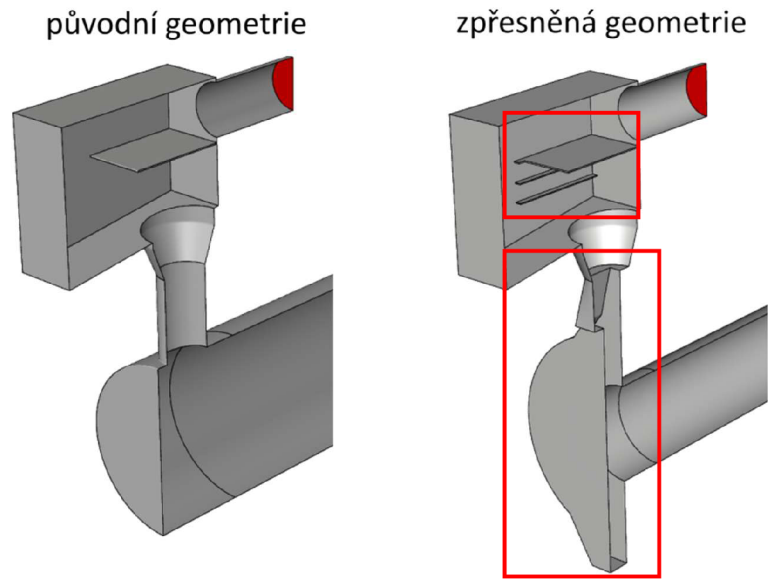
Průtok	Teplota	Hustota	Viskozita
0,120 kg/s	752 °C	0,343 kg/m ³	4,227·10 ⁻⁵ Pa s



Obr. 7: Hustota hmotnostního toku usazených částic na dně usazovací komory.

Příčina byla nejprve hledána v použitých zjednodušeních modelové geometrie. Pro simulace byla použita zjednodušená geometrie rotační pece a usazovací komory, reprezentující její základní rozměry a tvar komory. Byly tak otestovány postupně čtyři konfigurace geometrie s postupným přidáváním geometrických prvků za účelem vystižení vzorů nánosů pozorovaných uvnitř komory. Nejlepšího souhlasu mezi experimentem a simulací bylo dosaženo u geometrie obsahující zpřesnění konce rotační pece a přechodu do usazovací komory (viz Obr. 8). Výsledky pro tuto geometrii jsou prezentovány dále v kap. 4.3.

V další kapitole jsou prezentovány výsledky citlivostní studie pro druhý model ulpívání. Důvodem pro implementaci a test tohoto modelu je užší souvislost mezi parametry modelu a mechanickými vlastnostmi částic a nánosů.



Obr. 8: Geometrie pece a usazovací komory použitá v simulacích v kap. 4.3, s označeným umístěním plochy pro vypouštění částic. Rámečky jsou vyznačeny změny.

4.2 DRUHÝ MODEL ULPÍVÁNÍ

Pomocí UDF byl implementován model přímo využívající mechanické vlastnosti částic a stěny. Kromě pravděpodobnosti ulpení poskytuje i míru poklesu rychlosti částice ve směru kolmém i tečném k povrchu stěny a také vliv a změnu úhlové rychlosti. Model je složen ze dvou částí, pro normálový směr a tečný směr pohybu. Normálový směr pohybu řeší model [27], založený na energetické bilanci dopadající částice s uvažováním ztráty vlivem rychlé deformace způsobené adhezí, kdy energie uložená ve vzniklých elastických deformacích je pak zčásti odnesena prostřednictvím elastodynamických vln šířících se stěnou, a dále ztráty vlivem plastických deformací.

Tyto dva mechanismy ztrát implikují dvě charakteristické rychlosti. Pro překonání působení adheze je nutná minimální velikosti normálové rychlosti v_s (*sticking velocity*). Při překročení rychlosti v_y (*yield velocity*) dojde k plastické deformaci. Y je statická mez kluzu, Γ je měrná povrchová energie kontaktu částice a stěny, r_p je poloměr částice, E^* je efektivní modul pružnosti pro obě tělesa a ρ_p je měrná hmotnost částice.

$$v_s = 1,84 \left((2 \Gamma / d_p)^5 / (\rho_p^3 E^{*2}) \right)^{1/6} \quad (4)$$

$$v_y = 1,56 \left(Y^5 / (\rho_p E^{*4}) \right)^{1/2} \quad (5)$$

Tečný směr kolize je řešen pomocí modelu [13], který byl s pomocí experimentu odvozen pro případ popílku a ocelového povrchu.

4.3 CITLIVOSTNÍ STUDIE DVOU MODELŮ ULPÍVÁNÍ

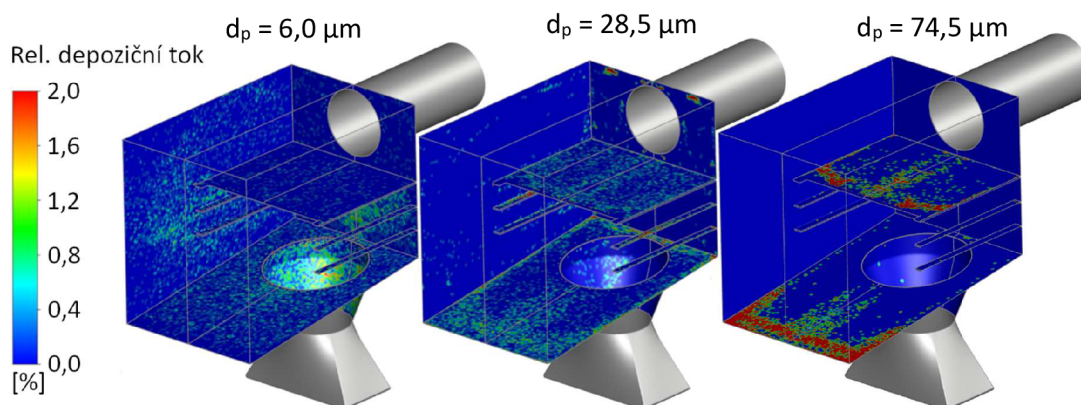
Byla simulována depozice šesti frakcí částic s cílem provedení citlivostní studie vždy pro tři zvolené parametry obou modelů ulpívání a kvalitativního porovnání rozložení hustoty toků deponované hmoty. Střední hodnoty parametrů jsou uvedeny v Tab. 2. Pro každý model bylo provedeno devět simulací, tj. jedna pro střední hodnotu všech parametrů a zbylých osm pro kombinace minimálních (50 % střední hodnoty) a maximálních (150 % střední hodnoty) testovaných hodnot parametrů. Výstupy simulací posloužily pro faktorovou analýzu s využitím softwaru Minitab 19.

Tab. 2: Střední hodnoty parametrů použité v citlivostní studii.

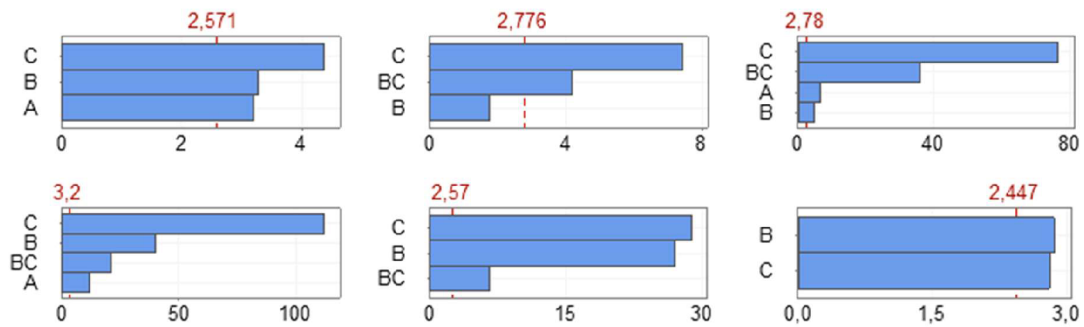
Parametr	B	n	d_{ref}	E^*	Y	Γ
Hodnota	10^{-17} N m	2	17,53 μm	50 GPa	0,5 GPa	0,2 N m ⁻²
Reference	[12]	[12]	[24]	[16]	[27]	[16]

U prvního modelu byla testována konstanta B ve výpočtu Van der Waalovy síly a dále exponent n a referenční průměr d_{ref} ve výpočtu elastické odrazné síly. Vliv změny parametrů G a y bylo možné zahrnout prostřednictvím d_{ref} a B .

První model ulpívání (viz výše Obr. 9 a Obr. 10) predikoval výrazné usazování na dně a horní straně přepážky, zejména pro hrubé částice, což odpovídá pozorovaným nánosům v usazovací komoře. Změna velikosti Van der Waalovy síly prostřednictvím B má významný dopad na usazování malých částic. Depozice vlivem tíhové síly vede k výraznému zanášení dna a horní strany přepážky. Zde a bočních stěnách o odrazu částice rozhoduje elastická síla \vec{F}_{el} skrze změnu velikosti dopadové rychlosti. Velikost \vec{F}_{el} se jevila významná pro všechny frakce částic. Je dána dvěma testovanými parametry, z nichž jako významnější se jeví d_{ref} .

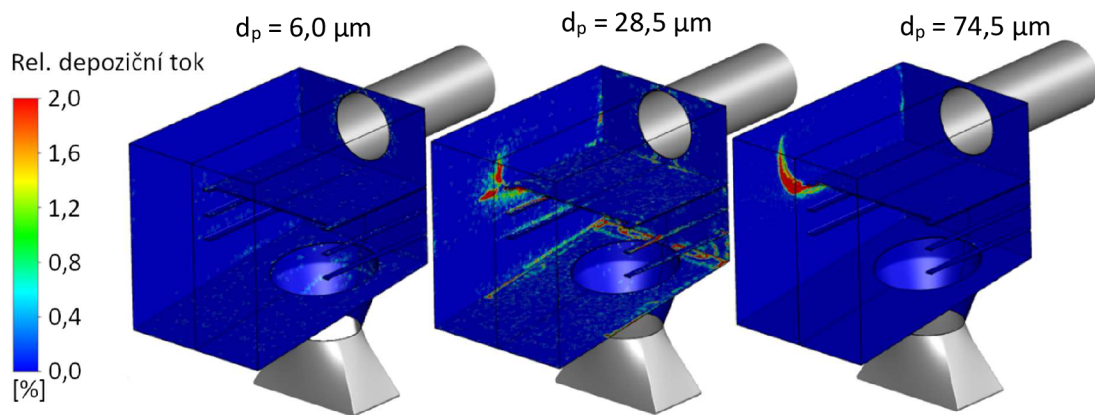


Obr. 9: Podíl lokální hodnoty depozičního toku a maximální hodnoty zjištěné v usazovací komoře pro první model ulpívání [28].

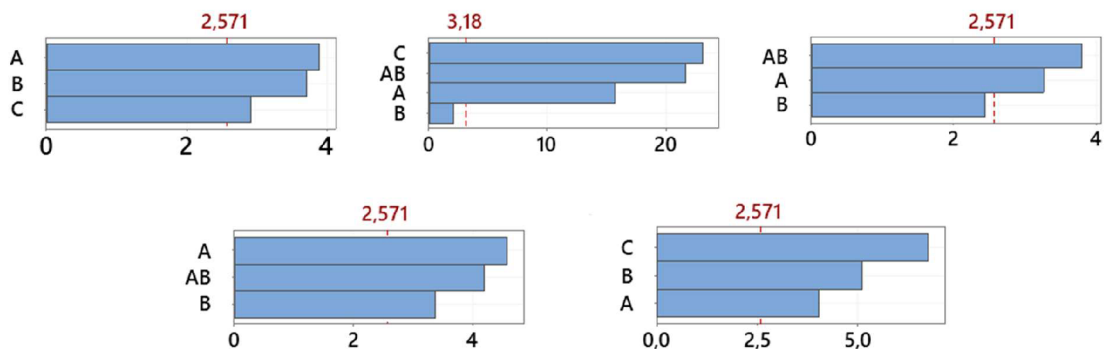


Obr. 10: Standardizované účinky významných parametrů prvního modelu ulpívání. (A) značí konstantu Van der Waalsovy síly B , (B) exponent n , (C) referenční průměr d_{ref} . Kombinace symbolů značí interakci parametrů [28].

U druhého modelu byl testován efektivní modul pružnosti E^* , statická mez kluzu Y a povrchová energie Γ . Zbylé dva parametry, tj. dynamický součinitel smykového tření μ_f a kritický úhel θ_c byly ponechány na hodnotách uvedených v publikaci [13].



Obr. 11: Podíl lokální hodnoty depozičního toku a maximální hodnoty zjištěné v usazovací komoře pro druhý model ulpívání [28].



Obr. 12: Standardizované účinky významných parametrů druhého [28]. (A) značí efektivní modul pružnosti, (B) statickou mez kluzu a (C) povrchovou energii kontaktu částice a stěny. Kombinace symbolů značí interakci parametrů.

U druhého modelu (viz výše Obr. 11 a Obr. 12) došlo k nadhodnocení intenzity zanášení na bočních stěnách komory v porovnání s dnem a horní stranou přepážky, včetně porovnání s pozorovanými nánosy. Druhý model na rozdíl od prvního v depozičním kritériu neuvažuje přímo tíhovou sílu. Ta zde hraje roli při transportu částic k povrchu. Efektivní modul pružnosti a statická mez kluzu se ukázaly jako významné pro všechny částice (s výjimkou průměru 41,5 μm). Povrchová energie se ukázala jako významná pro průměry (6 a 14,5 μm) a dále pro největší částice (74,5 μm).

4.4 SHRnutí

Hlavním výstupem simulací komory je zjištění praktické použitelnosti uvedeného modelu zanášení mikronovými částicemi popílku za podmínek odpovídajících usazovací komoře (tj. relativně malý nános, nechlazené povrchy, nízké koncentrace částic) pro kvalitativní predikci s možností identifikovat nejvíce zanášená místa zařízení. V případě omezených informací o složení, resp. mechanických vlastnostech částic je možné využít první model ulpívání založený na silové rovnováze a vyvinutý původně pro zanášení přehříváků uhelného kotle, bez přítomnosti kondenzujících par ovlivňujících lepivost částic a stěn. Zároveň je nutno počítat s citlivostí predikované intenzity zanášení na vstupním profilu rychlosti spalin a koncentrace částic. Cíl práce však směřuje k modelům, které mohou přímo zohlednit mechanické vlastnosti částic a stěny, čemuž lépe vyhovuje druhý model ulpívání. Ten je původně vyvinut pro dopady na hladkou stěnu, což však neodpovídá reálné situaci zanášení, kde je již přítomna vrstva nánosu a na významu mohou nabývat doprovodné jevy, které mohou zvyšovat tendenci částic k ulpívání (např. vícenásobný odraz částice či deformace nánosu). To je zohledněno v následující kapitole.

5 MODELOVÁNÍ VÝMĚNÍKU

Výměník představuje prostředí s relativně nízkými teplotami spalin (dle měření v rozmezí 150 až 350 $^{\circ}\text{C}$). Kondenzující látky (typické pro biomasu a odpady), tj. KCl [19, 21] a Na_2SO_4 [17] se nachází v pevném skupenství jako povlak na povrchu částic nebo stěn [16] a ovlivňují tak pravděpodobnost ulpění změnou mechanických vlastností, nikoli skrze kapilární jevy. Předpoklad ukončené kondenzace za vyšších teplot na přehříváku uhelného kotle byl úspěšně použit např. v [12] – zde je demonstrován i vliv odrazu částic a jejich pronikání do mezitrubkových prostorů. Směr a odrazná rychlost jsou podstatné pro lokální hodnoty koncentrace částic v proudu a v jejich rychlosti při následných dopadech. Nerovnosti povrchu stěny zde hrají významnou roli [14].

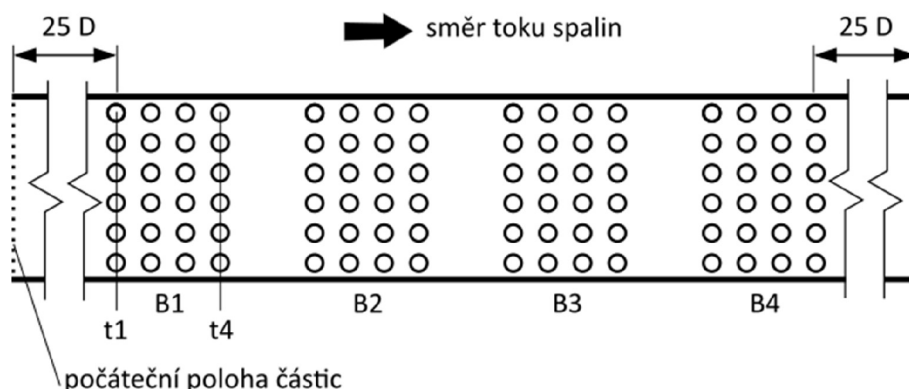
V simulaci proudění je použit SST $k\text{-}\omega$ model turbulence. Spaliny jsou považovány za směs ideálních nestlačitelných plynů. Částice s velikostí v rozmezí 6 až 74,5 μm jsou modelovány jako partikulární fáze v Lagrangeovském rámci s použitím Discrete Phase Model (DPM). Vliv turbulence na pohyb částic je

modelován pomocí DRWM v kombinaci s Random Eddy Lifetime. Výměník je řešen jako ustálený případ. Pro řešení rovnice pro tlak a hybnost je použito *Coupled Scheme*. Pro prostorovou diskretizaci tlaku je použit druhý řád, pro ostatní veličiny druhý řád *upwind*. K odhadu gradientů slouží *Cell-based* metoda nejmenších čtverců. Konvergence je posuzována na základě škálovaných reziduí, s limitní hodnotou 10^{-5} .

Simulace byly prováděny na výpočetním clusteru s využitím 16 jader Intel(R) Xeon(R) E5-2690 0. Doba výpočtu proudění byla přibližně 10 minut. Post-process výpočet trajektorií částic (jednosměrný *coupling* proudění → částice) pro jedno nastavení parametrů modelu ulpívání trval méně než 30 minut pro nejjemnější síť pro 600 000 vpuštěných částic.

5.1 GEOMETRIE A OKRAJOVÉ PODMÍNKY

Kvůli potřebě výrazně jemnější výpočtové sítě oproti usazovací komoře je model výměníku zjednodušen do dvou rozměrů (Obr. 13). Proudění a pohyb částic jsou simulovány v rovině souměrnosti hlavního kanálu výměníku. Pro vpuštění částic slouží 1000 rovnoměrně rozmístěných bodů v blízkosti vstupu spalín. Počáteční rychlost částic je rovna rychlosti spalín.

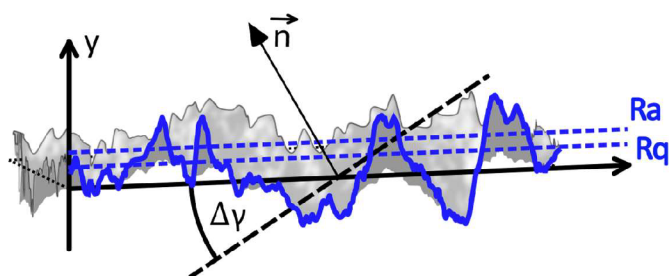


Obr. 13: Podélný řez hlavním kanálem trubkového výměníku [90].

Při modelování výměníku je přestup tepla zohledněn zadáním teplotně závislých vlastností spalín a přítomnosti termoforetické síly ovlivňující usazování částic s průměry méně než $10 \mu\text{m}$. Pro vodou chlazené vnitřní povrchy trubek je použita okrajová podmínka pevně zadané teploty vnitřních povrchů trubek. Teploty u každé trubky jsou stanoveny lineární interpolací vstupní a výstupní teploty každého modulu podle délky osy každé z trubek v místech průsečíku osy trubky a střední roviny hlavního kanálu výměníku. Vlastnosti stěny jsou určeny pro nerezovou ocel. Spaliny jsou považovány za směs ideálních nestlačitelných plynů. Vlastnosti spalín jsou stanoveny z hmotnostní bilance spalovacího procesu v rotační peci a naměřeného hmotnostního průtoku. Dle měření je na vstupu zadán hmotnostní tok $0,138 \text{ kg/s}$, teplota $315 \text{ }^\circ\text{C}$ a hmotnostní tok částic $11,1 \text{ mg/s}$. Rozložení velikostí částic je zadáno shodně s usazovací komorou (kap. 4).

5.2 VLIV DRSNOSTI A PŘÍTOMNOSTI VRSTVY ZKONDENZOVANÝCH PAR

Model drsné stěny (Rough Wall Model) [29] je použit pro zahrnutí vlivu drsnosti povrchu stěny/nánosu tvořené již usazenými částicemi. Drsnost je popsána třemi parametry: aritmetickou hodnotou Ra , průměrnou kvadratickou hodnotou Rq a průměrnou šířkou prvku profilu Rsm . Úhel dopadu částice pozměněn o náhodnou hodnotu $\Delta\gamma$ (viz Obr. 14) s normálním rozdělení pravděpodobnosti a průměrnou hodnotou rovnou nule. Model drsné stěny je přímo implementován v programu ANSYS Fluent [26], umožňuje však zadání jen konstantních hodnot Ra , Rq a Rsm . Z tohoto důvodu bylo třeba pomocí UDF provést implementaci upravené verze modelu.



Obr. 14: Model drsné stěny.

Práce [30] uvádí doporučení pro jemnost sítě v blízkosti povrchu jediné, příčně obtékané trubky pro minimalizaci vlivu sítě na množství dopadajících částic. Předmětem studie byly dva parametry – výšku stěnových buněk δ_0 přiléhajících ke stěně trubky a počet buněk po obvodu trubky N_C . Dle této studie je maximální přípustná hodnota δ_0 rovna zlomku odtlačovací tloušťky mezní vrstvy δ_1 .

Pro hlavní kanál výměníku byla provedena studie citlivosti na δ_0 a N_C . Oba parametry byly shodné pro všechny trubky. Sledován byl celkový tok usazovaných částic na všech trubkách \dot{m}_{dep} . Vybrána byla síť s 96 buňkami po obvodu trubky a výšce stěnových buněk $\delta_1/4$.

Na zvolené síti bylo provedeno porovnání pro dvě skupiny hodnot mechanických vlastností. Těmi jsou efektivní modul pružnosti E^* , statická mez kluzu Y a měrná povrchová energie kontaktu částic a stěny Γ . V případě, že je částice zcela pokryta dostatečně silnou vrstvou zkondenzovaného KCl (reprezentativní kondenzující složka par), pak jsou původní hodnoty pro částici nahrazeny hodnotami pro KCl (Tab. 3 na následující straně). Teploty po celém objemu výměníku jsou nižší než bod tuhnutí KCl [19]. Dále byly porovnány výsledky pro čtyři možné kombinace přítomnosti vrstvy KCl a drsnosti povrchu nánosu. Zahrnutí drsnosti vedlo k navýšení predikovaného hmotnostního toku usazovaných částic pro čisté částice o 30 % vůči hladké stěně a o zhruba 48 % pro částice pokryté KCl (Tab. 4 na následující straně). Srovnání toků usazované hmoty ukazuje nejvyšší rozdíly pro první dva trubkové svazky.

Tab. 3: Parametry modelu ulpívání částic pro případ čistých částic a částic pokrytých vrstvou KCl.

	Čistý povrch [31]	Povrch pokrytý KCl
Γ [N/m ²]	0,13	0,11 [32]
E^* [GPa]	192	30 [16]
Y [MPa]	38	38 [31]

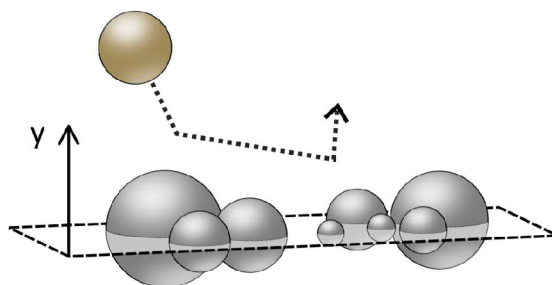
Tab. 4: Simulované hmotnostní toky usazovaných částic pro čtyři nastavení modelu usazování.

\dot{m}_{dep} [mg/s]	drsnost	
	ne	ano
KCl	ne	2,071
	ano	1,102
		2,692
		1,629

Z výsledků plyne, že i pokud je vrstva zkondenzovaných par (KCl) již v pevném skupenství, \dot{m}_{dep} je o téměř 50 % nižší v porovnání s čistými povrchy. Uvažování kondenzujících složek neovlivňuje zanášení jen v místech s vyšší teplotou, kde je povrchová vrstva zčásti kapalná, ale i v místech s teplotami pod bodem tuhnutí kondenzátu. Zahrnutí drsnosti zvyšuje predikovanou míru zanášení o více než 30 % oproti hladkému povrchu. V případě zohlednění např. vícenásobného kontaktu částice a stěny lze očekávat další nárůst míry zanášení.

5.3 VÍCENÁSOBNÁ KOLIZE A DEFORMACE NÁNOSU

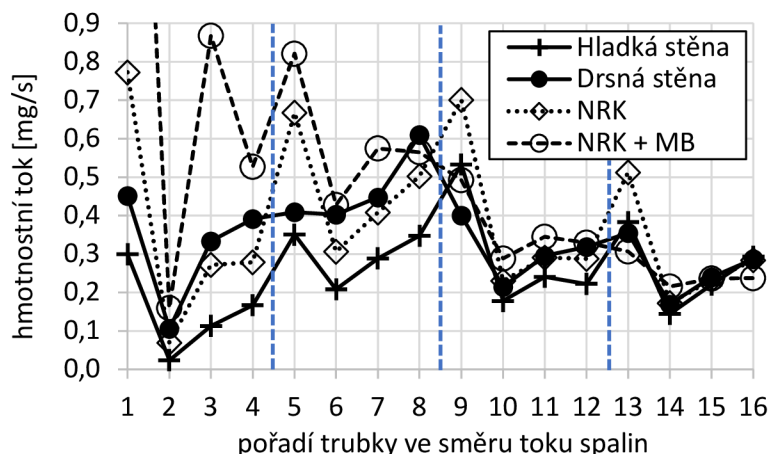
Jsou-li dostupné informace o velikosti a geometrii usazovaných částic, lze odhadnout i další vlivy nánosu na míru zanášení. To se týká deformace i eroze nánosu dopadem částic a vícenásobným odrazem od zanášeného povrchu. Model náhodně rozmístěných kulových částic [33] zohledňuje možnost vícenásobné kolize dopadající částice a nánosu (Obr. 15).



Obr. 15: Model náhodně umístěných kulových částic.

Multi-body collision model [14] uvažuje kolizi částice a nánosu jako kolizi dvou koulí. Rychlost a hmotnost první z nich odpovídá dopadající částici. Druhá má hmotnost rovnu C_m -násobku hmotnosti dopadající částice a počáteční rychlost je rovna nule. Po kolizi je rychlost první z nich považována za rychlost odražené

částice. Pro srovnání výsledků po zahrnutí drsnosti, vícenásobné kolize a deformace nánosu byly provedeny simulace pro model hladké stěny, model s rovinnou drsnou stěnou, model náhodně umístěných kulových částic (NRK) a jako poslední, model náhodně umístěných částic kombinovaný s *multi-body collision* modelem (NRK+MB). Obdržené výsledky jsou uvedeny na Obr. 16 a v Tab. 5.



Obr. 16: Hmotnostní toky usazovaných částic na nad sebou ležících úsecích trubek. Modré linie ohraničují trubkové svazky. Kvůli čitelnosti je svislá osa omezena. Chybějící hodnota křivky NRK+MB v bodě 1 je 2,39 mg/s.

Tab. 5: Celkový hmotnostní tok usazovaných částic pro čtyři nastavení modelu usazování.

	Hladká stěna	Drsná stěna	NRK	NRK+MB
\dot{m}_{dep} [mg/s]	4,014	5,205	5,988	8,783

Z výsledků plyne, že změna směru normálového vektoru pomocí modelu drsné stěny výrazně zvyšuje predikované množství usazených částic, zejména pak částic o průměru větším než 25 μm , pro které je nárůst hmotnostního toku usazovaných částic více než 100 %. U modelu náhodně rozmístěných kulových částic dochází k nárůstu oproti modelu drsné stěny dojde vždy zejména na prvních trubkách všech čtyř svazků. To může být způsobeno vyššími dopadovými rychlostmi na stranách proti proudu spalin, jejichž tlumení je při uvažování pouze jedné kolize částice a stěny podhodnoceno v porovnání s modelem s více kolizemi. U ostatních trubek jsou hmotnostní toky srovnatelné nebo nižší. Doplnění *multi-body collision* modelu vede k dalšímu nárůstu hmotnostního toku usazovaných částic na prvních dvou trubkových svazcích.

5.4 SHRUTÍ

Uvažování zkondenzované vrstvy KCl na povrchu částic či nánosu a s tím spojená změna mechanických vlastností vede k *poklesu* hmotnostního toku usazovaných částic na povrchu trubek, a to o více než 40 %. Zahrnutí přítomnosti

kondenzujících látek tak může výrazně měnit míru zanášení. V prezentovaném případě má kondenzace opačný efekt, než pokud se tyto látky nachází v kapalném skupenství a zvyšují tak tendenci částic k ulpívání.

Rozšíření modelu ulpívání o vliv přítomnosti nánosu, tj. odchylky v orientaci povrchu od ideálně hladké stěny, vícenásobná kolize částice při jednom přiblížení k nánosu a deformace nánosu téměř neovlivňují ulpívání částic o rozměru 6 μm , avšak pro částice o průměru 19,5 μm roste míra zanášení s postupným doplňováním těchto jevů o desítky % a poloha úsad se pohybuje výše proti proudu spalin.

6 ZÁVĚR

Tato dizertační práce se zabývala numerickým modelováním partikulárního zanášení na straně spalin, zahrnující návrh modelu partikulárního zanášení, jeho implementaci v CFD software ANSYS Fluent, citlivostní studie na nastavení modelu a kvalitativní porovnání výsledků simulací a nánosu pozorovaných na experimentálním zařízení.

V úvodu práce byla nastíněn význam detailních modelů partikulárního zanášení. Přehled prací na téma vývoje a aplikace modelů za poslední tři dekády poukazuje na trvající zájem o přesnější, rychlejší a obecnější modely zanášení, a to díky zavádění buďto zcela nových typů paliv nebo hledání možností využití konvenčních tuhých paliv s vyšší tendencí k zanášení. Řada autorů uvádí modely zanášení, kde části zodpovědné za predikci ulpívání hmoty na povrchu stěn používají empiricky založená kritéria, odvozená pro konkrétní typ paliva či konkrétní podmínky, dle kterých se liší význam dílčích mechanismů ulpívání. Přitom tyto modely zanedbávaly některé údaje zjistitelné z provedených simulací, jako je rychlost proudu a částic, orientace a struktura povrchu stěny. Dle literatury právě tyto aspekty mohou vést k několikanásobnému nárůstu nebo poklesu míry zanášení. Dále byly shromážděny poznatky o dílčích jevech, které přispívají k tvorbě nánosu, od transportu látek k zanášenému povrchu po mechanismy ulpívání a změny vlastností nánosu. Následuje shrnutí přístupů k modelování a možných zjednodušení pro umožnění jejich implementace prostřednictvím CFD a jejich použití pro konkrétní účely.

Po teoretickém základu je popsáno experimentální zařízení na Ústavu procesního inženýrství FSI VUT v Brně, simulující provozní podmínky v průmyslových spalovacích zařízeních, sloužící mimo jiné pro pozorování vzniklých nánosů. Výsledky měření a pozorované nánosy sloužily pro postupný vývoj jednotlivých simulačních modelů zanášení.

Nejprve byla v dizertační práci simulována usazovací komora s nechlazenými stěnami a geometricky méně členitými vnitřními částmi. První usazovací model zohledňoval dopad částic vlivem setrvačnosti a turbulentních vírů a jejich ulpívání vlivem gravitace a Van der Waalsových sil. Byly provedeny dvě citlivostní studie, první z nich na citlivost na výpočtové síti, druhá na hodnotě parametru modelu

ulpívání částic. Obě studie ukázaly rozdíly v celkovém hmotnostním toku usazovaných částic v komoře v jednotkách procent. Kvalitativní rozdíly v rozložení pozorovaných nánosů a simulovaných depozičních toků byly z významné části odstraněny úpravou modelové geometrie komory. Po implementaci druhého modelu ulpívání částic, uvažujícího plastickou deformaci částic, tření při šikmém dopadu a adhezi byla provedena citlivostní studie na parametry těchto modelů, porovnán význam parametrů dle velikosti částic. Výsledky simulací pro střední zkoumané hodnoty těchto parametrů byly porovnány s nánosy pozorovanými po spalovacích zkouškách. Oba modely poskytují kvalitativně dobré výsledky pro různé povrchy komory.

V další části dizertační práce byl simulován výměník tepla, na kterém byly porovnávány výsledky simulací pro testované verze upraveného modelu zanášení. Úpravy se týkaly zahrnutí vlivu existujícího nánosu skrze drsnost povrchu, vedoucí ke změně dopadového úhlu částic, vícenásobné kolizi a dodatečnému útlu díky deformaci nánosu. Součástí simulací byla studie citlivosti na síti v blízkosti zanášených stěn trubek výměníku. Postupné doplnění vlivu drsnosti, násobných kolizí částic a stěny a deformace nánosu vedlo k postupnému nárůstu celkového množství zachycené hmoty v desítkách procent a v některých místech výměníku byl nárůst několikanásobný.

6.1 SMĚR BUDOUCÍCH PRACÍ

V dosažené podobě dizertační práce poskytla základ pro CFD modelování partikulárního zanášení zařízení pracujících se spaliny pocházejících z tuhých paliv při relativně nízkých teplotách, kdy výskyt kapalné fáze hraje zanedbatelnou roli a průměr částic se pohybuje v rozmezí jednotek až desítek μm . Kvalitativní porovnání s pozorovanými nánosy na experimentálním modelovém zařízení poukázalo na schopnost predikovat rozložení nánosu přinejmenším v počáteční fázi nánosu. Budoucí práce by se měla soustředit mimo jiné na kvantitativní validaci popsaných modelů, tj. porovnání rozložení velikostí částic a průměrné rychlosti růstu nánosu na vybraných místech uvnitř zařízení s výsledky simulací. Možné pokračování práce dále zahrnuje:

- Zahrnutí sub-mikronových částic s využitím Eulerovského přístupu a odhadu dopadových rychlostí z koncentrace a místních podmínek v proudu spalin.
- Provedení simulací na základě rozložení velikostí částic odebraných na vstupu do simulovaného zařízení (v případě experimentálního zařízení na ÚPI jde o výměník tepla).
- Doplnění modelu zanášení o model eroze nánosu.
- Zahrnutí tepelného odporu nánosu na teplosměnných plochách.
- S využitím dynamických sítí simulovat dlouhodobý vývoj tloušťky nánosu a jeho vliv na proudění spalin.

Zvláště důležitým bodem je pak propojení modelu zanášení a modelu spalování, které umožní do určité míry nahradit potřebu znalosti vlastností popílku znalostmi o složení paliva a lépe zahrnout vliv volby provozních podmínek zařízení na míru zanášení. Příklady prací věnujících se společným simulacím spalování a zanášení lze najít v literatuře s použitím některých výrazných zjednodušení (viz kap. 2.2) nebo aplikované na části zařízení či malé kotle pro domácí použití.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] IEA. Energy Statistics Data Browser [online]. 2022 [vid. 2022-09-20]. Dostupné z: <https://www.iea.org/data-and-statistics/data-tools/energy-statistics-data-browser>
- [2] LI, Jinhui, Zhiming XU, Zhimin HAN. A practical Eulerian approach for predicting the deposition characteristics of fly ash particles on the outer surface of tubes. *International Journal of Heat and Mass Transfer* [online]. 2022, 189. ISSN 0017-9310. Dostupné z: [doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122654](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122654)
- [3] LESTINA, Thomas. Heat exchangers fouling, cleaning, and maintenance. In: *Handbook of Thermal Science and Engineering* [online]. 2018, s. 1609–1641. Dostupné z: [doi:10.1007/978-3-319-26695-4_24](https://doi.org/10.1007/978-3-319-26695-4_24)
- [4] COUCH, Gordon. Understanding slagging and fouling during pf combustion. London: International Energy Agency Coal Research, 1994. IEACR, 72. ISBN 978-92-9029-240-1.
- [5] ZBOGAR, Ana, Flemming FRANDSEN, Peter Arendt JENSEN, Peter GLARBORG. Shedding of ash deposits. *Progress in Energy and Combustion Science* [online]. 2009, 35(1), 31–56. ISSN 0360-1285. Dostupné z: [doi:10.1016/j.pecs.2008.07.001](https://doi.org/10.1016/j.pecs.2008.07.001)
- [6] BRYERS, Richard W. Fireside slagging, fouling, and high-temperature corrosion of heat-transfer surface due to impurities in steam-raising fuels. *Progress in Energy and Combustion Science* [online]. 1996, 22(1), 29–120. ISSN 03601285. Dostupné z: [doi:10.1016/0360-1285\(95\)00012-7](https://doi.org/10.1016/0360-1285(95)00012-7)
- [7] VDI Heat Atlas [online]. 2. vyd. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010 [vid. 2021-09-12]. VDI-Buch. ISBN 978-3-540-77876-9. Dostupné z: <https://www.springer.com/gp/book/9783540778769>
- [8] AWAD, Mostafa M. Fouling of Heat Transfer Surfaces. In: *Heat Transfer - Theoretical Analysis, Experimental Investigations and Industrial Systems* [online]. B.m.: InTech, 2011 [vid. 2022-07-15]. ISBN 978-953-307-226-5. Dostupné z: <http://www.intechopen.com/books/heat-transfer-theoretical-analysis-experimentalinvestigations-and-industrial-systems/fouling-of-heat-transfer-surfaces>
- [9] CAI, Yongtie, Kunlin TAY, Zhimin ZHENG, Wenming YANG, Hui WANG, Guang ZENG, Zhiwang LI, Siah KENG BOON, Prabakaran SUBBIAH. Modeling of ash formation and deposition processes in coal and biomass fired boilers: A comprehensive review. *Applied Energy* [online]. 2018, 230, 1447–1544. ISSN 0306-2619. Dostupné z: [doi:10.1016/j.apenergy.2018.08.084](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2018.08.084)
- [10] CHAPELA, Sergio, Jacobo PORTEIRO, Marco GARABATOS, David PATIÑO, Miguel A. GÓMEZ, José Luis MÍGUEZ. CFD study of fouling phenomena in small-scale biomass boilers: Experimental validation with two different boilers. *Renewable Energy* [online]. 2019, 140, 552–562. ISSN 0960-1481. Dostupné z: [doi:10.1016/j.renene.2019.03.081](https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.03.081)

- [11] KÆR, Søren Knudsen. Numerical investigation of ash deposition in straw-fired boilers: using CFD as the framework for slagging and fouling predictions: Ph.D. thesis. Aalborg, 2001. Ph.D. Thesis. Aalborg University, Institute of Energy Technology.
- [12] WACŁAWIAK, Krzysztof, Sylwester KALISZ. A practical numerical approach for prediction of particulate fouling in PC boilers. *Fuel* [online]. 2012, 97, 38–48. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2012.02.007
- [13] XIE, Jun, Ming DONG, Sufen LI, Yaokui MEI, Yan SHANG. An experimental study of fly ash particle oblique impact with stainless surfaces. *Journal of Aerosol Science* [online]. 2018, 123, 27–38. ISSN 0021-8502. Dostupné z: doi:10.1016/j.jaerosci.2018.06.001
- [14] VAN BEEK, M. C., Camilo C. M. RINDT, Johan G. WIJERS, Anton A. VAN STEENHOVEN. Rebound characteristics for 50- μm particles impacting a powdery deposit. *Powder Technology* [online]. 2006, 165(2), 53–64. ISSN 0032-5910. Dostupné z: doi:10.1016/j.powtec.2006.03.008
- [15] ANSYS, INC. Ansys® Fluent, Release 21.2, Help System, Fluent User’s Guide. B.m.: ANSYS, Inc. 2021
- [16] KLEINHANS, Ulrich, Christoph WIELAND, Flemming J. FRANDBSEN, Hartmut SPLIETHOFF. Ash formation and deposition in coal and biomass fired combustion systems: Progress and challenges in the field of ash particle sticking and rebound behavior. *Progress in Energy and Combustion Science* [online]. 2018, 68, 65–168. ISSN 0360-1285. Dostupné z: doi:10.1016/j.pecs.2018.02.001
- [17] LEE, Byeong E., Clive A. J. FLETCHER, Se H. SHIN, Soon B. KWON. Computational study of fouling deposit due to surface-coated particles in coal-fired power utility boilers. *Fuel* [online]. 2002, 81(15), 2001–2008. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/S0016-2361(02)00127-8
- [18] WALSH, Peter M., Alan N. SAYRE, David O. LOEHDEN, Larry S. MONROE, János M. BEÉR, Adel F. SAROFIM. Deposition of bituminous coal ash on an isolated heat exchanger tube: Effects of coal properties on deposit growth. *Progress in Energy and Combustion Science* [online]. 1990, 16(4), 327–345. Dostupné z: doi:10.1016/0360-1285(90)90042-2
- [19] KÆR, Søren Knudsen, Lasse Aistrup ROSEND AHL, Larry Lin BAXTER. Towards a CFD-based mechanistic deposit formation model for straw-fired boilers. *Fuel* [online]. 2006, 85(5), 833–848. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2005.08.016
- [20] BASHIR, Muhammad Shafique, Peter Arendt JENSEN, Flemming FRANDBSEN, Stig WEDEL, Kim DAM-JOHANSEN, Johan WADENBÄCK, Søren Thaaning PEDERSEN. Suspension-Firing of Biomass. Part 1: Full-Scale Measurements of Ash Deposit Build-up. *Energy & Fuels* [online]. 2012, 26(4), 2317–2330. ISSN 0887-0624. Dostupné z: doi:10.1021/ef201680k
- [21] CHAPELA, Sergio, Jacobo PORTEIRO, Miguel A. GÓMEZ, David PATIÑO, José Luis MÍGUEZ. Comprehensive CFD modeling of the ash deposition in a biomass packed bed burner. *Fuel* [online]. 2018, 234, 1099–1122. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2018.07.121
- [22] LI, Jinbo, Wenjing DU, Lin CHENG. Numerical simulation and experiment of gas-solid two phase flow and ash deposition on a novel heat transfer surface. *Applied Thermal Engineering* [online]. 2017, 113, 1033–1046. ISSN 1359-4311. Dostupné z: doi:10.1016/j.applthermaleng.2016.10.198

- [23] LIU, Chao, Zhaohui LIU, Tai ZHANG, Xiaohong HUANG, Junjun GUO, Chuguang ZHENG. Numerical Investigation on Development of Initial Ash Deposition Layer for a High-Alkali Coal. *Energy & Fuels* [online]. 2017, 31(3), 2596–2606. ISSN 0887-0624. Dostupné z: doi:10.1021/acs.energyfuels.6b03043
- [24] RACLAVSKÁ, Helena, Agnieszka CORSARO, Silvie HARTMANN-KOVAL, Dagmar JUCHELKOVÁ. Enrichment and distribution of 24 elements within the sub-sieve particle size distribution ranges of fly ash from wastes incinerator plants. *Journal of Environmental Management* [online]. 2017, 203, Environmental management as a pillar for sustainable development, 1169–1177. ISSN 0301-4797. Dostupné z: doi:10.1016/j.jenvman.2017.03.073
- [25] STROUHAL, Jiří, Tomáš JUŘENA, Zdeněk JEGLA. Analysis of influence of model input parameters on ash fouling rate predicted by CFD. In: *Engineering Mechanics 2020* [online]. 2020, s. 468–471 [vid. 2021-06-01]. Dostupné z: doi:10.21495/5896-3-468
- [26] ANSYS, INC. Ansys® Fluent, Release 21.2, Help System, Fluent Theory Guide. B.m.: ANSYS, Inc. 2021
- [27] THORNTON, Colin, Zemin NING. A theoretical model for the stick/bounce behaviour of adhesive, elastic-plastic spheres. *Powder Technology* [online]. 1998, 99(2), 154–162. ISSN 0032-5910. Dostupné z: doi:10.1016/S0032-5910(98)00099-0
- [28] STROUHAL, Jiří, Tomáš JUŘENA, Zdeněk JEGLA. Fouling Simulations of a Passive Part of the Testing Combustion Facility. *Chemical Engineering Transactions* [online]. 2021, 88, 625–630. Dostupné z: doi:10.3303/CET2188104
- [29] SOMMERFELD, Martin, Norbert HUBER. Experimental analysis and modelling of particle-wall collisions. *International Journal of Multiphase Flow* [online]. 1999, 25(6), 1457–1489. ISSN 0301-9322. Dostupné z: doi:10.1016/S0301-9322(99)00047-6
- [30] WEBER, Roman, Natalia SCHAFFEL-MANCINI, Marco MANCINI, Tomasz KUPKA. Fly ash deposition modelling: Requirements for accurate predictions of particle impaction on tubes using RANS-based computational fluid dynamics. *Fuel* [online]. 2013, 108, 586–596. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2012.11.006
- [31] WANG, Fei-Long, Ya-Ling HE, Zi-Xiang TONG, Song-Zhen TANG. Real-time fouling characteristics of a typical heat exchanger used in the waste heat recovery systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer* [online]. 2017, 104, 774–786. ISSN 0017-9310. Dostupné z: doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.08.112
- [32] WESTWOOD, A. R. C., T. T. HITCH. Surface Energy of {100} Potassium Chloride. *Journal of Applied Physics* [online]. 1963, 34(10), 3085–3089. ISSN 0021-8979, 1089-7550. Dostupné z: doi:10.1063/1.1729125
- [33] STROUHAL, Jiří, Tomáš JUŘENA, Zdeněk JEGLA. Modelling of Fly Ash Impacting a Powdery Deposit Consisting of Randomly Placed Poly-Sized Spherical Particles. In: *Proceedings of the 25th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction* [online]. 2022. Dostupné z: <https://conferencepres.site/pres22/>

CURRICULUM VITAE

Osobní informace

Jméno a příjmení Jiří Strouhal
Datum narození 25. 12. 1993
Státní příslušnost Česká republika

Vzdělání

Období od října 2019 dále
Instituce FSI, Vysoké učení technické v Brně
Studijní obor doktorský, Konstrukční a procesní inženýrství

Období září 2017 – červen 2019
Instituce FSI, Vysoké učení technické v Brně
Studijní obor navazující magisterský, Energetické inženýrství

Období září 2013 – červen 2017
Instituce FSI, Vysoké učení technické v Brně
Studijní obor bakalářský, Základy strojího inženýrství

Pracovní zkušenosti

Období listopad 2019 – leden 2023
Zaměstnavatel Vysoké učení technické v Brně
Pozice technický pracovník, výzkumný pracovník

Jazyky

Mateřský jazyk čeština
Další angličtina, pokročilý

Relevantní znalosti

ANSYS Fluent, ANSYS Workbench, Microsoft Office, Microsoft Visual Studio Code, jazyk C, jazyk Python

ABSTRAKT

Modelování partikulárního zanášení na bázi Výpočtové dynamiky tekutin umožňuje identifikovat výskyt problematických nánosů a najít vhodné úpravy podmínek a zařízení. Práce se zabývá transportem a ulpíváním tuhých částic. Velikosti částic se pohybují od jednotek po desítky μm . Simulované podmínky odpovídají zanášení tuhých částic se zanedbatelným podílem kapalně fáze, kdy ulpívání probíhá na základě ztrát energie při dopadu částice, gravitaci, adhezi, deformaci nánosů a dynamickému tření. Práce je soustředěna na výběr vhodného modelu ulpívání tuhých částic, se zaměřením na modely kritické rychlosti, které vedle lokálních podmínek, vlastností částic a stěny zahrnují i vliv dopadové rychlosti. Byly provedeny citlivostní studie pro posouzení vlivu parametrů modelu a zahrnutí některých dílčích jevů. Simulace byly provedeny na případu experimentálního zařízení pro spalování tuhých paliv a obdržené výsledky porovnány s pozorovanými nánosy.

ABSTRACT

Modelling of particulate fouling based on Computational Fluid Dynamics enables to detect a risk of deposit development and to propose improvements in operating conditions and equipment design. The work focuses on the transport and sticking of solid particles. The size of the particles lies in the range from several up to dozens of μm . The conditions correspond to the deposition of particles with a negligible liquid fraction and the deposition occurs due to particle deformation, gravity, adhesion, wall surface roughness, deposit deformation and dynamic friction. An emphasis is put on the selection of a suitable sticking model from the group of critical velocity models, which aside from the local conditions and the particle properties account for the impaction velocity. Sensitivity studies on the model settings were conducted to assess the significance of the model parameters and the included phenomena. The simulations were conducted on the case of an experimental facility for solid fuels combustion. Obtained results were compared to observed deposits.

