



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV PROCESNÍHO INŽENÝRSTVÍ

INSTITUTE OF PROCESS ENGINEERING

MODELOVÁNÍ ZANÁŠENÍ PROCESNÍCH
A ENERGETICKÝCH ZAŘÍZENÍ TUHÝMI
ZNEČIŠŤUJÍCÍMI LÁTKAMI

MODELING OF PROCESS AND POWER EQUIPMENT FOULING BY SOLID POLLUTANTS

DIZERTAČNÍ PRÁCE

DOCTORAL THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Ing. Jiří Strouhal

ŠKOLITEL

SUPERVISOR

doc. Ing. Zdeněk Jegla, Ph.D.

BRNO 2023

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 kapalné 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.

KLÍČOVÁ SLOVA

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

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 μm 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.

KEYWORDS

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

STROUHAL, Jiří. *Modelování zanášení procesních a energetických zařízení tuhými znečišťujícími látkami*. Brno, 2023. Dostupné také z: <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/146675>. Dizertační práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Ústav procesního inženýrství. Vedoucí práce Zdeněk Jegla.

Prohlašuji, že jsem předloženou dizertační práci vypracoval zcela samostatně pod vedením školitele doc. Ing. Zdeňka Jegly, Ph.D. na základě vlastních poznatků získaných při studiu a konzultací s odborníky. Dále prohlašuji, že jsem veškeré literární a obrazové prameny úplně citoval a uvedl v seznamu zdrojů na konci práce. V souvislosti s vytvořením této práce jsem tak neporušil autorská práva třetích osob ve smyslu Zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském a o právech souvisejících s právem autorským, a jsem si plně vědom následků porušení těchto ustanovení.

V Brně, 10. 5. 2023

Jiří Strouhal

Děkuji tímto svému školiteli doc. Ing. Zdeňku Jeglovi, Ph.D. za veškeré rady a vedení v průběhu mého studia. Velké díky patří školiteli specialistovi, Ing. Tomáši Juřenovi, Ph.D. za podporu, ochotný přístup a cenné rady při vypracování této práce. Dále děkuji členům výzkumné Sekce termických procesů a čištění plynů, obzvláště Ing. Jiřímu Bojanovskému, Ph.D., za možnost účasti na experimentálním výzkumu. A nakonec, děkuji mým blízkým za vlídnost, trpělivost a podporu po celou dobu studia.

OBSAH

1	Úvod	1
1.1	Predikce partikulárního zanášení	3
1.2	Partikulární zanášení a výpočtová dynamika tekutin	4
1.3	Formulace cíle práce	8
2	Teoretický základ modelování partikulárního zanášení	10
2.1	Modelované jevy	10
2.1.1	Transport látek	10
2.1.2	Depozice	19
2.1.3	Vývoj vlastností nánosu	21
2.2	Přístupy k modelování	22
2.2.1	Režimy transportu a depozice částic	22
2.2.2	Pohyb částic	24
2.2.3	Ulpívání částic	26
2.2.4	Stanovení okrajových podmínek	27
2.2.5	Časový vývoj	28
2.2.6	Zjednodušení modelové geometrie	28
3	Experimentální zařízení	29
4	Modelování usazovací komory	34
4.1	Nastavení numerického modelu	35
4.2	První model ulpívání	36
4.2.1	Citlivostní studie	37
4.2.2	Simulace po provedení spalovacích zkoušek	39
4.2.3	Vliv zjednodušení modelové geometrie	45
4.3	Druhý model ulpívání	48
4.4	Citlivostní studie obou modelů ulpívání	51
4.5	Shrnutí	54
5	Modelování výměníku	55

5.1	Geometrie a okrajové podmínky	55
5.2	Nastavení numerického modelu	57
5.3	Vliv drsnosti a přítomnosti vrstvy zkondenzovaných par	57
5.3.1	Studie na citlivost sítě.....	58
5.3.2	Změny množství usazené hmoty při zahrnutí drsnosti a KCl	60
5.4	Vícenásobná kolize a deformace nánosu	62
5.4.1	Model náhodně umístěných kulových částic.....	63
5.4.2	Multi-body collision model	65
5.4.3	Provedené simulace	66
5.5	Shrnutí.....	73
6	Závěr.....	74
6.1	Směr budoucích prací	75
	Reference	77
	Seznam použitých symbolů a zkratk	85
	Související aktivity	89

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 a produktů spalování slouží pro zlepšení stávajících spalovacích zařízení a také hledání nových návrhů zařízení a způsobů spalování nových typů paliv, a to nejen odpadů, ale i dosud nevyužívaných typů uhlí [2], které na jedné straně poskytují hodnotný zdroj energie, avšak jejich využívání je spojeno s problémy, jako je zanášení tuhými znečišťujícími látkami.

K zanášení dochází ve chvíli, kdy se převážná část usazované (nebo usazené) hmoty nachází v pevném skupenství (narozdíl od struskování). Autoři [3, 4] 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 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 (při konstantních provozních podmínkách) pokles tepelného toku na teplosměnných plochách nebo ke snížení účinnosti zařízení, kdy pro dosažení stejného výkonu je nutné navýšit teplotu či průtok spalin s nutností spalování většího množství paliva [5]. To vede k nárůstu tepelného toku na méně zanesených částech teplosměnných ploch a jejich poškození v důsledku nerovnoměrného rozložení hustoty tepelného toku a vysokých teplot. Pro kotel na tuhá paliva s nánosem o tloušťce 1 mm uvádí [6] pokles přenášeného výkonu o 10 % a nutné zvýšení dodávky paliva o 2,5 %.

Vznikají-li velké kusy nánosu, hrozí nadměrné mechanické namáhání částí kotle vlivem tíhy nánosu. Opadávající kusy mohou poškodit níže ležící části kotle při provozu i během plánovaných odstávek a čistění [7]. Při růstu nánosu může dojít k urychlení eroze teplosměnných ploch kombinací přítomnosti tuhých částic ve spalinách a snížení průtočného průřezu a nárůstu rychlosti spalin. Souvisejícím jevem je rovněž nárůst

Úvod

tlakové ztráty. Dále nános představuje prostředí s rizikem vzniku či urychlení koroze v důsledku akumulace látek s korozivními účinky ve hmotě nánosu [8].

K odstranění nebo zastavení růstu nánosu může docházet samovolně erozivním působením dopadajících tuhých částic, případně nános opadáva ve větších množstvích vlivem vlastní tíhy při vibracích či změnách teplot nánosu. Pro účelné čištění se nabízí řada metod, jako je např. ofukování, kuličkový déšť, záměrná změna výkonu či uměle vyvolané vibrace zařízení [7]. Odstraňování nánosů je spojeno s náklady na samotné čištění, ekonomickými ztrátami způsobených zásahy do regulace zařízení nebo jeho odstávkou. Je zde riziko poškození zařízení při čištění, v závislosti na použité metodě [3].

K prevenci zanášení lze přispět volbou vhodného typu výměníku, úpravami provozních podmínek pro omezení vzniku látek způsobujících zanášení (popílek, aerosoly, anorganické páry), optimalizací návrhu výměníku (např. úpravou geometrie, vložením vestaveb, ošetřením povrchu teplosměnných ploch) a návrhem výměníku umožňujícím snadné čištění [9]. 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 či samotný proces zanášení může být urychlen díky poklesu rychlosti média [10]. Proto je žádoucí mít k dispozici vhodné nástroje pro predikci zanášení.

V roce 1992 Baxter publikoval článek [11] prezentující mechanistický přístup k modelování zanášení spalovacích zařízení, ve kterém shrnul základní jevy vzniku, transportu a usazování. Motivací bylo nahrazení běžně používaných empirických modelů, platných vždy pro úzký výběr paliv a konkrétní typ zařízení. V roce 2022 Li a kol. publikovali práci [2] motivovanou snahou zrychlit simulace tvorby úsad na trubkách kotle na uhlí, jehož význam pro získávání energie v Číně stále roste. Podobné práce jsou dokladem neustálého zájmu o přesnější a rychlejší výpočtové metody pro predikci zanášení spalovacích zařízení, a to i přes značný vývoj výpočetní techniky, spalovacích modelů a dat o palivu a znalostí o procesech vzniku látek vedoucích k zanášení.

Nasazení pokročilých výpočtových metod je dosud spojeno s hledáním kompromisu mezi přesností a rychlostí výpočtu. Při návrhu matematického modelu je tak nutné pracovat nejen se znalostmi o zákonitostech modelovaných procesů, ale i dostupností výpočtové techniky, náročností zvolených modelů a dopady vybraných zjednodušení.

Vedle zkušeností a dat z provozu a experimentálních zkoušek jsou cenným podkladem pro optimalizaci prevence zanášení výsledky poskytované matematickými modely. Modely poskytují zobecnění dat z provozních zařízení či implementaci elementárních poznatků o fyzikálně-chemických jevech, které jsou součástí zanášení.

Právě detailní, mechanistické modely umožňují propojení výsledků experimentů, provozních zkušeností a dílčích fyzikálních a chemických procesů [4].

1.1 PREDIKCE PARTIKULÁRNÍHO ZANÁŠENÍ

K nejjednodušším nástrojům patří ukazatele a veličiny obecně charakterizující palivo/popel (teplota tání, viskozita). Tyto veličiny slouží ke vzájemnému porovnání tendence paliv k tvorbě úsad [12]. Předpokladem je, že hlavní příčinou je přítomnost kapalné fáze v usazovaných částicích, na jejich povrchu nebo na povrchu nánosu v důsledku natavení popele nebo kondenzací složek spalin. Konkrétní podoba ukazatelů závisí na typu paliva (např. uhlí či biomasa) [13].

Část ukazatelů je vhodná více pro odhad míry struskování, za vyšších teplot typicky uvnitř ohniště. Příkladem může být index viskozity strusky (*slag viscosity index*) či poměr zásaditých a kyselých oxidů. Rovněž křivka tání, případně snadněji zjistitelné charakteristické teploty popele lépe charakterizují tvorbu úsad při vyšším obsahu natavené hmoty. Pro zanášení při nižším až nulovém obsahu natavené hmoty jsou výhodnější ukazatele vycházející z obsahu sloučenin alkalických kovů (Na, K), např. index zanášení či alkalický index (*alkali index*), které mají významný podíl na zanášení díky kondenzaci jejich sloučenin a růstu lepivosti popele a nánosu při nižších teplotách [14]. Mechanistické modely uvažují zanášení jako proces sestávající z těchto částí [13]:

- Vznik a uvolnění tuhých částic, aerosolů a par.
- Transport proudem spalin a probíhající reakce.
- Dosažení zanášeného povrchu.
- Usazení na povrchu.
- Vývoj nánosu.
- Vliv nánosu na provoz zařízení.

Velkou výhodou oproti ukazatelům je možnost simulovat vývoj v čase. I při „pouhém“ popisu zařízení jako celku tak už 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).

Množství částic dopadajících na stěnu lze vyjádřit účinností dopadu, tj. podílem dopadajících částic z celkového množství částic vstupujícího poblíž zanášené plochy. Závislosti jsou odvozeny z geometrie plochy, vlastností proudu plynu a tvaru, velikosti a rychlosti částic [15].

Úvod

Podíl zachycených částic je vyjádřen účinností ulpívání (*capture efficiency*) danou rychlostí a velikostí dopadající částice, orientací nebo strukturou povrchu, přítomností a složením vrstvy zkondenzovaných par nebo rychlostí a teplotou spalin [11]. Tato veličina tedy zahrnuje velmi širokou škálu vlivů.

O vývoji nánosu rozhoduje množství a charakter ulpívající hmoty, dále pak teplota a rychlost spalin, teplota zanášené stěny a porušení či opad nánosu [7]. Vliv nánosu na provoz zařízení je velmi často popisován součinitelem zanášení (*fouling factor*) [9]. Ten představuje dodatečný tepelný odpor, zahrnutý ve výpočtech množství přenášeného tepla či při návrhu typu a velikosti teplosměnné plochy. Součástí modelů založených na součiniteli zanášení je i vývoj veličin (zejména tloušťky a tepelného odporu) v čase [10]. Modely více či méně zahrnují vliv lokálních podmínek, hmotnostního toku popílku, aerosolů a par či eroze nánosu.

Díličí jevy mohou být simulovány samostatně, se zadanými průběhy ostatních dějů (např. pro zadanou rychlost růstu nánosu lze počítat vývoj přenášeného tepelného toku). Procesy, které jsou součástí mechanistických modelů zanášení, mohou být simulovány lokálně. Díky tomu lze získat navíc informace o rozložení nánosů a rychlosti růstu, stejně jako o hustotě tepelného toku [16]. Obojí je cenné pro odhalení rizika teplotního poškození teplosměnných ploch, případně pro místa s nežádoucí kondenzací složek spalin. Na základě predikce rozložení nánosu lze optimalizovat návrh zařízení pro omezení nánosů a rizika koroze/eroze a zvýšení výkonu při zachování rozměrů zařízení.

Mechanistický přístup pro simulace lokální míry zanášení lze implementovat pomocí výpočtové dynamiky tekutin [13].

1.2 PARTIKULÁRNÍ ZANÁŠENÍ A VÝPOČTOVÁ DYNAMIKA TEKUTIN

Výpočtová dynamika tekutin (*Computational Fluid Dynamics*, dále jen CFD) je široce používaným nástrojem pro řešení řady inženýrských problémů, mimo jiné i v oblasti spalování tuhých paliv. Desetiletí vývoje metod pro numerická řešení rovnic popisujících modelované systémy poskytly nejen teoretické poznatky a metody, ale i komerční a volně dostupné nástroje (software), které je možno využít a případně rozšířit pro konkrétní oblast.

Modely zanášení na bázi CFD se odlišují použitým přístupem k modelování partikulárních látek. Zatímco spaliny jsou běžně modelovány jako kontinuum, přístup k modelování částic je volen dle jejich velikosti, koncentrace a také s ohledem na dostupnou výpočtovou kapacitu v kombinaci s rozměry a geometrií simulovaného zařízení nebo jeho části [17]. Model spojitě fáze dokáže velmi dobře popsat pohyb velmi malých částic (s průměrem menším než jednotky μm , typicky nejjemnější frakce popílku a aerosoly), jejichž transport je nejvíce ovlivňován difuzí podobným mechanismům

(např. transport turbulentními víry, termoforéza nebo Brownův pohyb) [18]. Vyžadováno je použití modelů pohybu sub-mikronových částic v analogii s řádově menšími molekulami plynu [19].

Charakteristická doba fluktuací proudu (např. odtrhávání vírů v trubkových svazcích [20] v blízkosti zanášených povrchů se pohybuje v řádu sekund a menších, stejně tak děje probíhající při dopadu částic na zanášený povrch. Rychlé změny vlastností nánosu při jeho vzniku probíhají během několika minut až hodin a vývoj nánosu probíhá v řádu hodin až let [21]. Výpočtové časy pro praktické případy celých výměníků nebo celých zařízení jsou stále příliš vysoké pro simulace zanášení na všech těchto časových škálách v časovém horizontu odpovídající např. době mezi dvěma čištěními.

Vhodným řešením je tak oddělit děje na různých časových škálách. Pro popis turbulence lze využít např. modely založené na časovém středování [22]. Výsledek dopadu částice (zda částice ulpí, jaká je rychlost odražené částice či množství a rychlost částic vyražených z nánosu), lze určit pomocí bilance hybnosti [23] či energie [24] spolu se vztahy např. pro impuls třecích sil nebo ztrátu energie dopadající částice vlivem její plastické deformace. Vývoj nánosu lze simulovat tak, že nejprve jsou simulovány děje na krátkých časových škálách [25]. Následně je zvolen časový krok vývoje nánosu, pro který lze z hlediska vlivu na vývoj nánosu zanedbat změny v průběhu dějů na krátkých časových škálách [21], např. nedochází k významným změnám povrchové teploty nánosu nebo jeho tloušťky.

Další zjednodušení jsou používána pro vyrovnání se s řádově odlišujícími se délkovými škálami dějů. Na škále 1–1000 μm struktura nánosu [26], tvar a struktura částic [27] ovlivňuje dopad a ulpívání, lokální rychlosti a vlastnosti proudu spalin zase mohou výrazně ovlivňovat pohyb částic. Místní tloušťka nánosu v řádech mm až cm určuje hustotu tepelného toku nánosem. Tvar a uspořádání teplosměnných ploch na škálách cm až m určují podíl dopadajících částic [28], tlakovou ztrátu a přenesený tepelný výkon.

Pro omezení modelu na škálu, která je předmětem zájmu, tj. centimetry až metry, opět existuje řada modelů a zjednodušení. Vliv struktury nánosu na ulpívání či odraz částic lze zachytit pomocí stochastických modelů pro odchylky orientace povrchu nánosu [29]. Vliv fluktuací proudu na pohyb částic lze modelovat pomocí analogie s difuzí nebo pomocí stochastických modelů pohybu částic, kdy rozložení pravděpodobnosti rychlosti částice je odvozeno z časových a prostorových měřítek turbulence [30]. Tepelnou vodivost nánosu lze odhadovat pomocí tepelné vodivosti složek nánosu, poloempirických vztahů pro porozitu a difuzi kondenzujících látek uvnitř nánosu [31]. Prvky zařízení s komplikovanou geometrií, jako např. trubkové svazky, lze pro přibližné simulace celých zařízení modelovat jako porézní zóny s odpovídající tlakovou ztrátou a vhodnými vztahy pro účinnost dopadu částic a přenos tepla [32]. Zmíněné účinnosti dopadu nebo součinitel zanášení mohou být pro teplosměnnou plochu získány ze série

Úvod

simulací a získané závislosti používány v jednoduchých globálních modelech zanášení [15].

Jedním z omezujících faktorů pro použití empiricky založených modelů (např. pro vznik tuhých částic, par a aerosolů) je jejich spolehlivost při aplikaci Pro např. netypické teplotní rozsahy složení nebo strukturu částic.

Vznik tuhých částic, par a aerosolů závisí nejen na lokálních podmínkách, ale i na přidaných aditivech a v případě spoluspalování na interakcích dílčích složek a pořadí, ve kterém látky přijdou do kontaktu. To motivovalo řadu autorů k vytvoření modelů spojujících model spalování a zanášení, např. [21, 33–35].

Příkladem empiricky založených modelů jsou modely ulpívání částic založené na viskozitě popílku, kde se potřebné referenční hodnoty viskozity odlišují o mnoho řádů i v rámci jednoho druhu paliva (např. vlivem odlišného způsobu těžby či skladování) a dochází tak k významnému posunu teplot, při kterých se částice mohou ulpívat [13]. Pro nízké teploty (méně než 500 °C), kdy je podíl kapalně fáze zanedbatelný, jsou vhodné modely ulpívání založené např. na ztrátách deformací částice či nánosu, van der Waalsových silách nebo gravitaci [36].

Při nízkých teplotách rozhodují o ulpívání částic jak orientace povrchu stěny či nánosu, tak i struktura jeho povrchu – u velkých částic s průměrem v desítkách μm je hraje významnou roli tíhová síla a dále pro libovolný průměr částic hraje roli počet kolizí s povrchem nánosu během jediného přiblížení k povrchu nánosu [26]. Stejně tak dopadový úhel a rychlost částice a místní rychlost spalin (díky odporovému i vztlakovému působení na usazenou částici) rozhoduje o rychlosti eroze nánosu [37].

Zjednodušení na úrovni konkrétního zařízení, např. zjednodušení geometrie nebo použitý turbulentní model lze vztáhnout ke konkrétní aplikaci a požadavkům Spolehlivost výsledků je záležitostí verifikace např. studie na citlivost časového kroku. kvazi-stacionární simulace nebo známých charakteristik a limitů turbulentního modelu [38]. Naproti tomu modely ulpívání částic, eroze a vlastností nánosu jsou specifické pro oblast zanášení. Buďto je nutné vyvíjet tyto modely pro úzký výběr paliv, zařízení a podmínek, nebo tyto modely musí být založeny na elementárních poznatcích o kolizích částic, přeměnách látek v proudu spalin a dalších [13]. Druhý přístup představuje cestu k lepšímu porozumění vzájemné interakce dílčích procesů, a má potenciál ke spolehlivějším predikcím zanášení při použití nekonvenčních paliv [39], návrzích zařízení [25] či nestandardních provozních podmínkách [40].

Modelování zanášení ve spalovacích zařízeních se věnují desítky prací, z nichž reprezentativní výběr zásadních modelů uvádí Tab. 1.

Tab. 1: Výběr konkrétních prací zabývajících se zanášením spalovacích zařízení.

Autor	Rok	CFD kód	Zaměření
Lee a kol. [26]	2002	Fluent	Depozice částic s povlakem kondenzovaných solí v zařízeních spalujících uhlí.
Kær a kol. [41]	2006	Fluent	Kombinace modelu zanášení výhřevných ploch kondenzací aerosolu a nalepováním popílku a modelu spalování.
Wacławiak a kol. [15]	2012	Fluent	Model depozice částic popílku, parametrická studie vlivu velikosti částic na rychlost a charakter zanášení.
Losurdo a kol. [42]	2012	Fluent; Cinar; P3	Aplikace visko-elastického přístupu pro usazování tuhých částic.
Kleinhans a kol. [43]	2016	Fluent	Model kondenzace alkalických par na výhřevných plochách.
Wang a kol. [44]	2016	LBM O.S.	Simulace depozice částic popílku s využitím metody Lattice-Boltzmann.
Yang a kol. [45]	2017	Fluent	Model zanášení chlazených povrchů v experimentálním zařízení na spalování lignitu. Složení a rozměry částic odvozeny z uvedených experimentálních výsledků.
García Pérez a kol. [46]	2017	Fluent	Analýza vlivu velikosti částic popílku na rychlost tvorby nánosu.
Li a kol. [16]	2017	Fluent	Analýza vhodnosti uspořádání trubek ve svazku vzhledem k účinnosti přenosu tepla a rychlosti zanášení.
Tong a kol. [47]	2017	IHC	Zanášení výměníku při spalování odpadu.
Yang a kol. [48]	2017	Fluent	Vývoj dynamického modelu spalování hnědého uhlí v pilotním zařízení.
Chapela a kol. [34]	2018	Fluent	Model pevného palivového lože, studie zanášení chlazených stěn pilotního spalovacího zařízení.
Chapela a kol. [35]	2019	Fluent	Pokračování vývoje modelu zanášení jako součásti existujícího modelu spalování biomasy.
Zheng a kol. [49]	2020	Fluent	Model růstu nánosu na testovací sondě v experimentálním reaktoru spalujícím uhlí.
Li a kol. [2]	2022	Fluent	Použití Eulerovského přístupu k simulaci transportu a depozice popílku ze spalování hnědého uhlí.

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 dat.

1.3 FORMULACE CÍLE PRÁCE

Základní 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. [21, 34]. Oba příklady využívají dříve vytvořené modely zanášení založené na přítomnosti kapalně fáze a simulují usazování při teplotách více než 500 °C, se zanedbáním eroze. 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 [15] a viskozita částic vysoká. Modely zanášení, které vycházejí i ze struktury povrchu nánosu a rychlosti dopadající částice, jsou v principu schopny lépe popsat zanášení na geometricky složitých či netypických plochách. Jako vstup modelu může posloužit rovněž 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 [23] či vlastnosti povrchu nánosu [50].

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 modelů, čímž lze demonstrovat význam zahrnutí dílčích jevů, které lze jednotlivě nalézt v již existujících modelech (viz Tab. 1), 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. Tak mohou být zadané typické vlastnosti popílku, par nebo aerosolů nahrazeny výstupy získanými ze spalovacího modelu. V rámci problému simulací zanášení v této dizertační práci není proces spalování a vzniku látek způsobujících zanášení zahrnut.

Nejprve je třeba identifikovat jevy, které jsou součástí transportu, usazování a eroze nánosu. Vybrané modely těchto jevů budou následně implementovány v software ANSYS® Fluent®. Ten je příkladem softwaru představujícího 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 [51]. Doplnění ostatních modelů je umožněno pomocí tzv. uživatelsky definovaných funkcí (*User Defined Functions*, dále jen UDF) [52].

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, které je od roku 2020 součástí experimentální základny Ústavu procesního inženýrství Fakulty strojního inženýrství VUT v Brně a které má za cíl simulovat provozní podmínky v reálných spalovacích zařízeních, včetně teplot, rychlostí proudění a koncentrace popílku, par a aerosolů.

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). V této kapitole budou popsány dílčí jevy spolu s modely, které tyto jevy přímo popisují.

2.1.1 TRANSPORT LÁTEK

V případě plynných usazujících se složek jsou transportní mechanismy úzce spjaty s transportem plynné fáze, která je součástí obecné problematiky proudění plynných směsí a jejich popis je v práci uveden jen v souvislosti s modelováním proudění. Kondenzace už je úžeji spjata s jevy, ke kterým patří zanášení, a tedy jsou zde již popsány blíže. Největší část transportních mechanismů je spjata s částicemi (popílek, aerosoly). Popis transportu látek k povrchu je tedy z velké části popisem transportu částic.

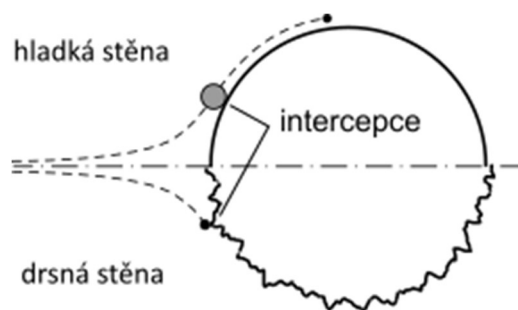
Jak molekuly plynných složek, tak i značně větší částice, jako je popílek, jsou vystaveny působení okolních molekul plynu, což vede k jevům jako je molekulární difuze či Brownův pohyb. Nehomogenní rozložení teploty, tlaku nebo např. velikosti a frekvence fluktuací rychlosti plynu vyvolávají silová působení 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.

Transportní jevy budou nyní popsány postupně pro částice a pro plynné složky. V případě částic popis začíná od nejjednoduššího případu s homogenním rozložením veličin, bez vlivu turbulence a pokračuje ke komplikovanějším situacím, zahrnujícím vnější silová působení, nehomogenní rozložení teploty apod.

Vedle vzájemného ovlivnění částic a proudu tekutiny může docházet ke vzájemným kolizím částic mezi sebou. Komplexní povaha těchto interakcí předem vyžaduje rozhodnutí o jejich zahrnutí v popisu jevů a modelů zanášení. Pro aplikace s hmotnostním zlomkem částic méně než 1 % a při jejich hustotě převyšující 1000 kg/m^3 je vliv jejich kolizí na transport částic považován za zanedbatelný (např. v [15, 33, 36]).

Intercepce

Ke kontaktu částice a stěny dojde v okamžiku, kdy dojde k průniku povrchů obou objektů. Díky tomu může k dopadu částice dojít i přes to, že se její střed pohybuje po proudnici, dále k intercepce přispívají nerovnosti povrchu stěny (Obr. 1). S růstem drsnosti roste pravděpodobnost kolize částice se stěnou. Zohlednění intercepce v modelu zanášení závisí od použitého přístupu, resp. modelu.



Obr. 1: Intercepce u hladké a drsné stěny.

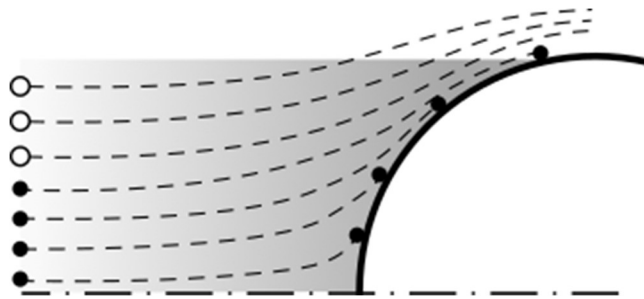
Ve zjednodušených modelech teplosměnných ploch, kdy není plně zahrnuta jejich geometrie, je intercepce zohledněna v tzv. účinnosti dopadu. V detailních modelech přímo zahrnujících geometrii zanášené plochy je nutno buďto zajistit, že dopad částice je zaznamenán ve správné vzdálenosti. V případě síťových metod lze volit výšku stěnové buňky tak, aby nepřekročila velikost největší ze sledovaných částic a následně vhodně modelovat pohyb částice uvnitř buňky a odhadnout, zda k dopadu dojde. Při použití nižší výšky stěnové buňky je pak nutno identifikovat dopad v jiné než stěnové buňce.

Setrvačnost

Při změně rychlosti proudu se částice pohybuje po určitou dobu po trajektorii mimo proudnice tekutiny. Pohyb mimo proudnice tekutiny je primárně brzděn aerodynamickým odporem.

Pro vyjádření podílu částic dopadajících na povrch trubky je použita účinnost dopadu η_{imp} , kde \dot{m}_{imp} je hmotnostní tok dopadajících částic a \dot{m}_0 je hmotnostní tok částic směřujících k povrchu (Obr. 2).

$$\eta_{imp} = \frac{\dot{m}_{imp}}{\dot{m}_0} \quad (1)$$



Obr. 2: Účinnost dopadu jako podíl součtu hmotností dopadajících částic (černé) ku hmotnosti všech částic směřujících k povrchu.

Korekce dle [53] umožňuje zahrnout vliv intercepce a drsnosti povrchu stěny pro válcové překážky (trubky umístěné napříč proudě) o průměru D . Takto upravená účinnost dopadu η'_{imp} tak může být větší než 1. Model uvažuje i vliv nerovností stěny prostřednictvím efektivní výšky nerovností povrchu překážky k_s . d_p je průměr částic.

$$\eta'_{imp} = \eta_{imp} + \frac{0,45 k_s + 0,5 d_p}{D} \quad (2)$$

Jedním ze základních kritérií při zvažování významu (nejen) setrvačných sil je jejich velikost v porovnání s aerodynamickým odporem, který brání posuvu částice vůči proudě tekutiny. Jelikož tento vztah závisí mimo velikosti částice i na jejich hustotě, na hustotě plynu a dalších parametrech, pro posouzení lépe slouží Stokesovo číslo St částice vztažené na rozměr překážky (stěny) D při rychlosti částic daleko od povrchu $u_{p,\infty}$.

$$St = \frac{\tau_p u_{p,\infty}}{D} \quad (3)$$

Relaxační čas τ_p představuje časové měřítko změny rychlosti částice při náhlé změně rychlosti proudu. Pro malá Reynoldsova čísla Re_p a kulové částice platí Stokesův zákon

odporu [54]. Z rovnosti odporové a setrvačné síly působící na kulovou částici lze vyjádřit relaxační čas [53]. ρ_f je hustota tekutiny, μ_f dynamická viskozita tekutiny, \vec{u}_f rychlost tekutiny, \vec{u}_p rychlost částice a ρ_p hustota částice.

$$Re_p = \frac{\rho_f d_p |\vec{u}_p - \vec{u}_f|}{\mu_f} \quad (4)$$

$$\tau_p = \frac{1}{18} \frac{\rho_p d_p^2}{\mu_f} \quad (5)$$

Při zrychlení částice vůči tekutině se projevuje přídavná hmotnost [55], viz vztah (6).

$$\vec{F}_{VM} = -\frac{1}{2} \frac{\rho_f}{\rho_p} m_p \frac{d}{dt} [\vec{u}_p - \vec{u}_f] \quad (6)$$

Změna rychlosti částice vůči tekutině vyvolává změny v mezní vrstvě tekutiny obklopující částici. Tyto změny se projevují odchylkou v okamžité velikosti aerodynamického odporu a vztlakových sil. Zároveň se však tyto změny projevují se zpožděním – po každé změně relativní rychlosti se vrstva vyvíjí po konečnou, ale nenulovou dobu. Výsledná tzv. Bassetova síla je tak v principu závislá na celé dosavadní historii pohybu částice a nikoli jen na okamžitém stavu (poloze, rychlosti, zrychlení apod.) a představuje značné zvýšení nároků na výpočet trajektorie částice v případě použití numerických metod [56].

Gravitace

Vedle setrvačnosti je gravitace dalším jevem, které a působí na částice bez ohledu na vlastnosti a rychlost okolní tekutiny. Výsledná tíhová síla v závislosti na orientaci zanášeného povrchu zvyšuje nebo snižuje tok usazovaných částic ke stěně. Aerostatická vztlaková síla \vec{F}_B částečně kompenzuje tíhovou sílu \vec{F}_G . \vec{g} je tíhové zrychlení.

$$\vec{F}_G + \vec{F}_B = \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p}\right) m_p \vec{g} \quad (7)$$

Síla vyvolaná gradientem tlaku

Zčásti je vliv nehomogenního rozložení tlaku zahrnut už prostřednictvím aerostatické vztlakové síly. Sílu \vec{F}_p reprezentující nehomogenní rozložení tlaku a tečných napětí v kapalině lze vyjádřit dle [55].

$$\vec{F}_p = \frac{\rho_f}{\rho_p} m_p \left[\frac{\partial \vec{u}_f}{\partial t} + \vec{u}_f \cdot \nabla \vec{u}_f \right] \quad (8)$$

Aerodynamický odpor

Reynoldsovo číslo Re_p je jedním z kritérií při volbě modelu aerodynamického odporu. Aerodynamická odporová síla \vec{F}_D je vyjádřena pomocí součinitele odporu C_D , průmětu částice ve směru pohybu A , hustoty plynu a relativní rychlosti částice vůči plynu.

$$\vec{F}_D = -\frac{1}{2} C_D A \rho_f |\vec{u}_p - \vec{u}_f| (\vec{u}_p - \vec{u}_f) \quad (9)$$

Volba modelu pro výpočet C_D je nejen funkcí Re_p ale závisí i na vzdálenosti částice od stěny, směru pohybu vůči stěně a tvaru částice [9]. Pro nejjednodušší případ kulových částic při $Re_p < 1$ platí přibližně vztah (10). Pro kulové částice je pak po dosazení výsledná odporová síla shodná se silou získanou ze Stokesova zákona.

$$C_D = 24/Re_p \quad (10)$$

Pro vyšší hodnoty Re_p pak uvádí [57] vztah

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) & Re_p \leq 1000 \\ 0,44 & Re_p > 1000 \end{cases} \quad (11)$$

Konstantní průběh C_D při $Re_p > 1000$ je ukončen v okamžiku přechodem do režimu turbulentního proudění při $Re_p \approx 10^5$ [9]. Takto vysoké hodnoty jsou však již mimo oblast zájmu této práce.

Tvar částic ovlivňuje velikost odporové síly. Oprava pro elipsoidní částice je navržena na základě detailních numerických simulací v práci [58]. Pro nepravidelné částice byla navržena v [59] korekce s využitím sféricity.

Knudsenovo číslo Kn představuje poměr střední volné dráhy pohybu molekul tekutiny λ_{free} a průměru částice d_p [4].

$$Kn = 2 \lambda_{free}/d_p \quad (12)$$

Pouze za podmínky $Kn \ll 1$ je možné zanedbat nenulovou rychlost molekul tekutiny těsně míjejících povrch částice a uvažovat tečnou složku rychlosti tekutiny na povrchu částice rovnu nule. Při vyšších hodnotách Kn je odporová síla nižší v porovnání s částicemi, vůči nimž je střední volná dráha zanedbatelně malá. Jako oprava na případy částic s $Kn \ll 1$ slouží Cunninghamův korekční faktor C_C [60]. Výpočet C_C závisí na konkrétní definici střední volné dráhy. Příklad vztahu pro C_C je uveden v publikaci [9], s definicí střední volné dráhy dle vztahu (14). p je tlak okolí.

$$C_C = 1 + Kn \left[2,514 + 0,8 \exp\left(-\frac{0,55}{Kn}\right) \right] \quad (13)$$

$$\lambda_{free} = \frac{\mu_f}{0,499 \rho_f} \sqrt{\frac{\pi \rho_f}{8 p}} \quad (14)$$

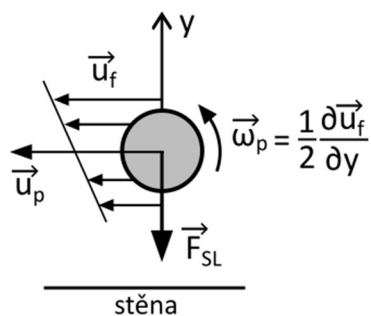
Vztlak

Při pohybu částice tekutinou se projevují síly, které z definice mají tendenci odchylovat částici mimo směr proudu. Podmínkou pro výskyt těchto sil je nenulová relativní rychlost částice vůči tekutině.

Protože při řešení zanášení je tvar částice uvažován buďto jako symetrický (koule, elipsoid) nebo zcela nepravidelný, „prostý“ dynamický vztlak působící na částici pohybující se v tekutině, která má konstantní rychlost ve všech bodech, je jako transportní mechanismus běžně zanedbáván.

Vedle nesymetrie tvaru částice může být vztlak vyvolán gradientem rychlosti tekutiny a rotací částice. Pohyb částice vůči tekutině s nenulovým gradientem rychlosti vyvolává sílu tzv. Saffmanův vztlak. Původní vztah odvodil Saffman [61] pro dvourozměrné proudění v blízkosti stěny (Obr. 3) a volně rotující částice (úhlová rychlost částice vůči tekutině je nulová). V [9] je zobecněný vztah (15) pro trojrozměrné proudění. Součinitel f představuje korekci pro $Re_p > 0,1$. $\vec{\omega}_p$ je úhlová rychlost částice.

$$\vec{F}_{SL} = 1,615 d_p^2 \sqrt{\frac{\rho_f \mu_f}{|\nabla \times \vec{u}_f|}} [(\vec{u}_f - \vec{u}_p) \times (\nabla \times \vec{u}_f)] f \quad (15)$$



Obr. 3: Saffmanův vztlak.

Na částici rotující vůči proudu tekutiny s nenulovou relativní úhlovou rychlostí $\vec{\Omega}$ vůči tekutině působí Magnusův vztlak [9]. C_{ML} je součinitel vztlaku.

$$\vec{F}_{ML} = 0,125 \pi d_p^2 C_{ML} \rho_f \frac{[\vec{\Omega} \times (\vec{u}_f - \vec{u}_p)]}{|\vec{\Omega}|} |\vec{u}_f - \vec{u}_p| \quad (16)$$

Brownův pohyb

Částice o rozměrech řádově větších než molekuly tekutiny vykonává pohyb vůči tekutině. Tento pohyb probíhá bez přítomnosti jakýchkoliv makroskopických nehomogenit v tekutině (teplota, koncentrace složek, tlak apod. v okolí částice konstantní).

V analogii k difuzi složky tekutiny uvádí [18] vztah pro výpočet hmotnostního toku částic na základě gradientu jejich koncentrace (spolu s difuzí vyvolanou turbulentními víry). Vztah (17) je zobecněním i pro oblasti mimo stěny. ρ_p je hmotnostní koncentrace částic v tekutině, D_{Brown} je difuzní součinitel, k_B je Boltzmannova konstanta, C_C je Cunninghamův korekční faktor, T_f je teplota tekutiny.

$$\vec{J}_{Brown} = -D_{Brown} \nabla \rho_p \quad (17)$$

$$D_{Brown} = \frac{k_B T_f}{3 \pi \mu_f d_p} C_C \quad (18)$$

Při numerických simulacích trajektorie jediné částice je určena tzv. Brownova síla – náhodný vektor s normálním rozložením pravděpodobnosti [62]. ξ je náhodné číslo, Δt je časový krok simulace. Parametr S_0 je určen vztahem (20).

$$\vec{F}_{Brown} = \xi \sqrt{\frac{\pi S_0}{\Delta t}} \quad (19)$$

$$S_0 = \frac{216 \mu_f k_B T_f}{\pi^2 d_p^5 \rho_p^2 C_C} \quad (20)$$

Vliv gradientu teploty

Vliv gradientu teploty tekutiny nebo přítomných částic je již úzce spojen s jejich molekulární povahou. Transport částic nebo molekul látky probíhá díky směrové nesymetrii v počtu nebo intenzitě dopadů okolních molekul. Tato nesymetrie vyvolává silové působení na částici v tekutině (termoforéza) nebo vede ke změně prostorového rozložení koncentrace složky tekutiny – termodifuze [63] (*thermal diffusion*). Zatímco termoforéza je působení tekutiny na jedinou částici, termodifuze je změna rozložení velkého počtu molekul nebo částic vlivem působení tekutiny [64].

Termoforéza se projevuje jako dodatečný vliv molekul tekutiny na pohyb částice k Brownovu pohybu v případě, že v tekutině (nebo částici) existuje teplotní gradient, výsledná síla působí typicky proti směru tohoto gradientu. Jev lze pozorovat typicky jako shromažďování částic v blízkosti chlazeného povrchu nebo jejich pohyb směrem

od povrchů s teplotou vyšší než teplota tekutiny. Na základě řešení Navier-Stokesových rovnic s nenulovou relativní rychlostí tekutiny a teplotním skokem na povrchu částice [65] ukázal původ termoforézy v tečném působení tekutiny na částici. Vztah pro výpočet termoforetické síly \vec{F}_{th} lze najít např. v [66].

$$\vec{F}_{th} = -\Phi \frac{d_p \mu_f^2 \nabla T_f}{2 \rho_f T_f} \quad (21)$$

Termoforézní součinitel Φ (*thermophoretic coefficient*) obsahuje závislost velikosti termoforézní síly zejména na velikosti částice (prostřednictvím Knudsenova čísla Kn) a tepelné vodivosti tekutiny λ_f a částice λ_p . Poměr tepelné vodivosti částice a tekutiny významně určuje velikost, a dokonce orientaci termoforetické síly. V přehledovém článku [4] jsou porovnány hodnoty termoforézního součinitele dle modelu ze čtyř publikací a v závislosti na Kn a poměru tepelných vodivostí Λ .

$$\Lambda = \lambda_p / \lambda_f \quad (22)$$

Autoři [66] za účelem vytvoření modelu pro Φ pro libovolné Kn použili model pro \vec{F}_{th} dle [67], resp. limitu pro $Kn \rightarrow 0$, jako vhodný vztah dávající přesné hodnoty pro $Kn = 0$ a $Kn \rightarrow \infty$. Po úpravě dle dat z vlastních experimentů s $Kn \approx 0,1$ a dat z literatury obdrželi vztah (23) pro libovolnou hodnotu Kn .

$$\Phi = \frac{6 \pi C_s (1 + C_t Kn \Lambda)}{(1 + 3 C_m Kn) [\Lambda + 2 (1 + C_t Kn \Lambda)]} \quad (23)$$

Záporné hodnoty Φ predikují modely uvedené v [4] v případě $Kn < 0,1$ a $\Lambda \sim 1000$. Příklady obrácené termoforézy pro sub-mikronové částice uvádí [64].

Nehomogenní složení tekutiny

Gradient koncentrace i -té složky tekutiny přispívá k toku této složky proti gradientu. Tok je úměrný difuznímu koeficientu D_{ij} v j -té složce tekutiny a vyjádřen Fickovým 1. zákonem.

$$\vec{J}_{i,Fick} = - \sum_{j \neq i} D_{ij} \nabla C_i \quad (24)$$

Difuze složky tekutiny vyvolává silové působení na částici, kterou tekutina obklopuje. Rozdíl ve složení tekutiny napříč okolím povrchu částice a s ním spojená silová nerovnováha se projevuje jako difuzioforetická síla (*diffusiophoretic force*) \vec{F}_{diff} . Na základě kinetické teorie plynu určili [68] \vec{F}_{diff} pro jednorozměrný případ difuze dvousložkové směsi plynů a kulovou částici. Při dostatečně vysokém poměru hmotností molekul obou

Teoretický základ modelování partikulárního zanášení

složek je síla vždy orientovaná ve směru gradientu koncentrace lehčí složky. Při nižších poměrech závisí směr síly na interakci dopadajících molekul tekutiny a molekul částice. Index L označuje lehčí z obou složek, n_f je počet molekul tekutiny na jednotku objemu, m_1 a m_2 jsou hmotnosti molekul obou složek, R_1 a R_2 jsou funkce charakterizující rozptyl dopadajících molekul tekutiny a jsou nezávislé na hmotnosti molekul, x je molární zlomek lehčí z obou složek.

$$F_{diff} = \frac{\sqrt{\pi}}{3} d_p^2 \frac{n_f^2}{\rho_f} m_1 m_2 D_{1,2} \sqrt{2 k_B T_f} \left[\frac{(1 + R_2)}{\sqrt{m_2}} - \frac{(1 + R_1)}{\sqrt{m_1}} \right] |\nabla x_L| \quad (25)$$

Elektrické pole

Transport nabitých částic k povrchu stěny vlivem elektrického pole ve vztahu k zanášení popisuje [18]. Elektrická síla \vec{F}_E působící mezi nabitou kulovou částicí a stěnou je určena z Coulombova zákona. Vzdálenost částice od stěny je y , náboj částice q , ϵ_0 je relativní permitivita vakua. Souřadnice \vec{F}_E ve směru kolmo ke stěně je dána vztahem (26) za předpokladu zanedbatelných změn v rozložení náboje stěny.

$$F_{Ey} = -\frac{3 q^2}{4 \pi^2 \epsilon_0 \rho_p d_p^3 y^2} \quad (26)$$

[18] dále uvádí vztah pro maximální možný náboj q_{max} nesený částicí (e je elementární náboj). Grafické znázornění závislosti q_{max} na průměru částice včetně experimentálních dat lze najít v publikaci [69], uvádějící rovněž výčet možných mechanismů vzniku nabitých částic.

Turbulence

Vliv turbulence je zohledněn zejména z důvodu „prakticky“ realizovatelných simulací zanášení, kdy typicky není proudění tekutiny modelováno na nejmenších délkových a časových škálách. Časové průměrování a prostorové filtrování [22] umožňují simulovat proudění s delšími časovými a délkovými kroky a snížit tak čas nutný k výpočtu. Vliv dějů odehrávajících se na kratších škálách je zahrnut pomocí skalárních veličin jako např. turbulentní kinetické energie k a vlastností proudu, kam patří např. turbulentní difuzní koeficient nebo tepelná vodivost.

Aerodynamická síla působící na částici v tekutině závisí na okamžité rychlosti proudu v místě částice, resp. toto platí v případě, kdy se na škále rozměru částice rychlost a vlastnosti proudu mění přibližně lineárně [61]. Pro pohyb částice jsou pak podstatné změny rychlosti a vlastností tekutiny na její trajektorii.

Turbulentní víry představují náhlé změny rychlosti proudění, které se navíc vyvíjejí v čase. V závislosti na relaxačním čase částice τ_p se liší interakce částice s těmito víry, a tedy i vliv turbulence na transport částic ke stěně. Relaxační čas musí být dostatečně malý pro to, aby částice byla vírem významně vychýlena, avšak dostatečně velký pro opuštění víru vlivem setrvačnosti a dosažení povrchu stěny [4].

Jedním z výsledných vlivů vírů na kolektivní chování částic je akumulace částic v místech s nižší mírou turbulence, typicky právě v blízkosti stěn. Výsledné silové působení na jednotlivé částice v analogii turbulentních vírů k náhodně se pohybujícím molekulám tekutiny (např. k termofořeze) popsali autoři [70] a uvádí výpočet velikosti turboforetické síly \vec{F}_{tu} v důsledku nehomogenní a anizotropní turbulence v blízkosti stěny zde upravený na vztah (27), kde m_p je hmotnost částice a u'_p je souřadnice flukтуаční složky rychlosti tekutiny ve směru ke stěně.

$$\vec{F}_{tu} = -m_p \nabla(u'_p)^2 \quad (27)$$

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).

Z hlediska simulací zanášení je 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. termofořeza nebo Brownův pohyb), kdy dopadová rychlost částice je malá v porovnání s dopadem setrvačností [4]. Jistota ulpění při kontaktu se stěnou je tak předpokládána zejména pro částice s velmi malým τ_p . Usazované složky tekutiny typicky ulpívají díky kondenzaci a chemickým reakcím. U větších částic může být velmi významná jejich dopadová rychlost, struktura povrchu, složení částice i povrchu, teplota a další parametry.

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 [4].

Modely zanášení běžně vycházejí z předpokladu plných kulových částic při zachování dostatečného kvalitativního i kvantitativního souhlasu s experimentem, např. [15, 26]. Pro ulpívání částic jsou stále relevantní některé z transportních mechanismů (kap. 2.1.1), např. aerodynamický odpor či gravitace, které mohou buďto držet částic na povrchu nánosů, nebo naopak způsobit její odtržení.

Elastická deformace

Dopadající částice vyvolávají elastickou deformaci stěny. Vzájemné silové působení částice (index p) a stěny (index w) vlivem elastické deformace je dáno mechanickými vlastnostmi obou z nich – Poissonovým číslem ν a modulem pružnosti E . Silové působení je charakterizováno ekvivalentním modulem pružnosti E^* [42].

$$E^* = \frac{1}{\frac{1 - \nu_p^2}{E_p} + \frac{1 - \nu_w^2}{E_w}} \quad (28)$$

I přesto, že deformace je v principu vratná, díky šíření deformací skrze nános v podobě elastodynamických vln nedojde k plnému návratu veškeré původní kinetické energie zpět částici [71]. Tyto ztráty jsou pro kolmý dopad částic na rovinný povrch stanoveny jako velmi malé, kdy rychlost odražené částice je o jednotky % nižší než dopadová rychlost [72] a je tak výrazně menší v porovnání s vlivem plastické deformace částice vyskytující se při vysokých dopadových rychlostech. Vyšší pokles rychlosti i při nižších dopadových rychlostech však je zčásti následkem oblasti plastické deformace vzniklé díky adhezi uprostřed kontaktní plochy částice a stěny [73], zatímco čistě elastická deformace nastává v prstencové oblasti vně oblasti plastické deformace.

Adheze

Definici adhezní síly lze najít v [73], kde je popsána jako síla působící v těžišti částice kolmo na kontaktní plochu se stěnou a jejíž velikost je rovna velikosti minimální síly nutné k odtržení částice od stěny. Přitom jde o souhrn vícero jevů, z nichž nejvýznamnější jsou Van der Waalsova síla a elektrostatická síla.

Drsnost některého z povrchů zamezuje jejich dokonalému přilnutí a výrazně redukuje adhezi. Tyto nerovnosti jsou na druhou stranu alespoň zčásti deformovány a vyhlazeny pod tlakem mezi oběma povrchy a míra tohoto vyhlazení roste s klesajícím modulem pružnosti [74].

Plastická deformace

K výrazné plastické deformaci tuhých částic (případě částic na povrchu nánosu) dochází při dostatečné dopadové rychlosti. Do dosažení této rychlosti je deformace částice elastická [74]. K plastické deformaci dle [24] dochází zejména u tělesa s nižší mezí kluzu, čistá stěna zachovává elastickou deformaci, v případě dopadu na existující nános pak dochází spíše než k plastické deformaci k posuvu částic v nánosu [50].

Minimální dopadová rychlost pro vznik plastické deformace je charakterizovaná mezí kluzu y . Pro výpočet plastické deformace je často používána fixní hodnota meze kluzu

nezávislá na dopadové rychlosti [39], která vede k podhodnocení kritické rychlosti pro vznik plastické deformace (*yield velocity*) [75], což může vést k nadhodnocení množství ulpívajících částic. Nicméně oprava z tzv. statické meze kluzu na dynamickou vyžaduje dodatečné parametry, stanovitelné experimentálně pro konkrétní materiál.

Kondenzace

Kondenzace nastává při poklesu teploty pod rosný bod dané plynné látky. Pokud ke kondenzaci dochází na povrchu částic nebo stěny, jde o tzv. *heterogenní* kondenzaci, kdy dochází k vytváření filmu, který mění lepivost a strukturu povrchu částic či nánosu. Dojde-li ke ztuhnutí kapalně vrstvy, vzniká pevný povrch s odlišnými mechanickými vlastnostmi a rovněž se mění měrná povrchová energie kontaktu částice a stěny.

Dochází-li ke kondenzaci přímo v plynné fázi mimo pevné povrchy, jde o tzv. *homogenní* kondenzaci. Jde o hlavní mechanismus vzniku sub-mikronových částic [4]. V případě vysokých koncentrací může dojít ke koagulaci částic do větších celků. Heterogenní kondenzace spalin vyžaduje přítomnost anorganických par v blízkosti povrchu částic nebo stěny.

Typ kondenzace *i*-té složky lze odhadnout na základě poměru přesycení (*supersaturation ratio*) S_i , daného parciálním tlakem složky p_i a tlakem nasycených par $p_{i,sat}$. Pro $S_i \gg 1$ je velmi pravděpodobný výskyt homogenní kondenzace za vzniku sub-mikronových částic. Heterogenní kondenzace převažuje v rozsahu $1 \leq S_i \leq 5$.

$$S_i = p_i / p_{i,sat} \quad (29)$$

Za předpokladu, že na povrchu stěny je tlak složky roven tlaku nasycených par, lze hmotnostní tok *i*-té složky plynu heterogenně kondenzující na stěně $\dot{m}_{cond,i,w}$ vyjádřit pomocí rychlosti transportu složky k povrchu stěny [76] o plošném obsahu A_w při hustotě plynu ρ_g a tlaku p . Součinitel přestupu hmoty $\beta_{i,w}^{wall}$ je určen pro vlastnosti plynu v blízkosti povrchu a charakteristický rozměr stěny.

$$\dot{m}_{cond,i,w} = \beta_{i,w} \rho_g \frac{p_i - p_{i,sat}}{p} A_w \quad (30)$$

2.1.3 VÝVOJ VLASTNOSTÍ NÁNOSU

Porozita ϕ představuje objemový zlomek plynu v nánosu. Ovlivňuje tepelnou vodivost nánosu, odolnost vůči korozi, efektivní mechanické vlastnosti a další. Nový přírůstek nánosu je charakterizován porozitou, která se následně vyvíjí v čase. Typicky dochází k jejímu poklesu díky pronikání kondenzátu do prostor mezi částicemi.

Vysokou porozitu mají typicky sypké nánosy složené zejména ze suchých mikronových částic (např. křemičité částice tvoří nános s porozitou okolo 0,6). Nicméně i v případě nánosu s obsahem ztuhlého kondenzátu lze najít velmi vysokou porozitu a to až 0,9 [21]. Výpočet porozity nánosu vznikajícího ulpíváním tuhých částic a kapalně fáze lze najít v [77], kdy pro nános bez kapaliny je porozita rovna ϕ_0 . V_l je objem kapaliny, V_s objem tuhé látky.

$$\phi = 1 - \left[(1 - \phi_0) + \frac{V_l}{V_s} (1 - \phi_0) \right] \quad (31)$$

S klesající porozitou typicky roste tepelná vodivost nánosu. Kromě porozity (a vodivosti pevných složek v nánosu) však záleží na uspořádání a tvaru částic. Model vodivosti λ_{dep} zohledňující i tyto dva vlivy vytvořili autoři [78]. Průměrování vodivostí tuhých složek λ_s a tekutiny λ_f je prováděno přes funkci porozity $f(\phi)$ s empirickým parametrem n . Je uvažován paralelní přenos tepla v tuhé látce a v tekutině [79].

$$\lambda_{dep} = [1 - f(\phi)] \lambda_s + f(\phi) \lambda_f \quad (32)$$

$$f(\phi) = \frac{2^n}{2^n - 1} \left[1 - \frac{1}{(1 + \phi)^n} \right] \quad (33)$$

Práce [78] popisuje experimentální stanovení exponentu n pro dva případy zrnitých materiálů vyplněných vodou nebo vzduchem. Pro první případ (pálené cihly) byla nejvhodnější volba $n = 3$, pro dva typy pískovce pak $n = 2$ (nezávisle na tekutině). Autoři [80] uvádí mechanisticky založený model, kombinující přenos tepla zářením, vedením i prouděním v sypkém loži a uvažuje paralelní i sériový přenos v tuhé látce i tekutině, bez uvažování vlivu tvaru částic, na rozdíl od předchozího modelu.

2.2 PŘÍSTUPY K MODELOVÁNÍ

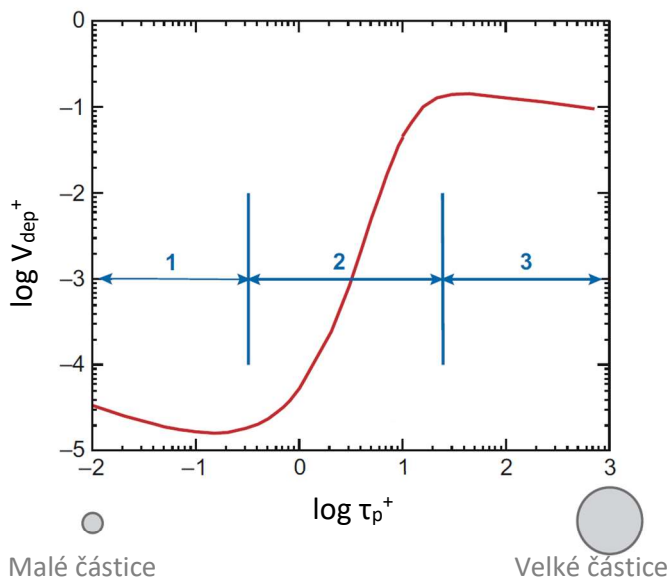
V této práci jsou vlastnosti částic a plynu, spolu s provozními podmínkami a příslušnými modely zanášení soustředěny na spalovací zařízení a produkty spalování.

2.2.1 REŽIMY TRANSPORTU A DEPOZICE ČÁSTIC

Bezrozměrný relaxační čas τ_p^+ charakterizuje míru odezvy částice na změnu směru nebo rychlosti proudu. Množství dopadajících částic je pak vyjádřeno pomocí tzv. depoziční rychlosti představující hmotnostní tok částic na jednotku plochy povrchu stěny či nánosu [18]. Míru dopadu částic na povrch v závislosti na jejich setrvačnosti lépe vyjadřuje závislost tzv. bezrozměrné dopadové účinnosti V_{dep}^+ na τ_p^+ [18], kde u^* a ν_g jsou třecí rychlost a kinematická viskozita.

$$\tau_p^+ = \tau_p (u^*)^2 / \nu_g \quad (34)$$

$$V_{dep}^+ = V_{dep} / u^* \quad (35)$$



Obr. 4: Závislost bezrozměrné depoziční rychlosti V_{dep}^+ na bezrozměrném relaxačním čase částice τ_p^+ (převzato z [38] a upraveno).

Dle Obr. 4 lze rozlišit tři režimy dopadu částic, které vyjadřují poměr dopadu částic vlastní setrvačností a působením difuzních mechanismů, které jsou vyvolány gradientem některé z veličin proudového pole (např. teplota, tlak, tečná složka rychlosti proudu plynu nebo turbulentní kinetická energie) [4]. Difuzní mechanismy umožňují částicím s malou setrvačností překonat mezní vrstvu a dosáhnout tak povrchu stěny či nánosu.

1. Částice s nejmenším relaxačním časem patří do tzv. difuzního depozičního režimu. Pro tyto částice je vhodné využít Eulerovský přístup.
2. Střední rozsah relaxačních časů odpovídá tzv. difuznímu dopadovému režimu. V tomto režimu je depoziční rychlost závislá na míře setrvačnosti částic, která zde může hrát dominantní roli. Podstatným difuzním mechanismem je zde difuze způsobená turbulentními víry v mezní vrstvě.
3. Poslední, tzv. setrvačně-řízený (*inertia moderated*), režim zahrnuje částice s nejvyšším bezrozměrným relaxačním časem. Difuzní mechanismy zde nehrají podstatnou úlohu. Částice si při průchodu mezní vrstvou zachovávají směr a rychlost, které získaly v jádře proudu. Část těchto částic je k povrchu nasměrována působením turbulentních vírů. S rostoucím relaxačním časem však klesá míra ovlivnění částic

těmito víry, což může vysvětlit pokles depoziční rychlosti s rostoucím relaxačním časem v tomto režimu.

2.2.2 POHYB ČÁSTIC

Velikost částic rozhoduje o významu konkrétních transportních mechanismů (popsaných v kap. 2.1.1). S tím souvisí i vybraný přístup k modelování jejich pohybu, tj. 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. Submikronové částice naproti tomu jsou modelovány v jako kontinuum v Eulerovském rámci [21]. Protože tyto částice již mají zanedbatelnou setrvačnost oproti ostatním transportním mechanismům, je možné pro ně použít transportní modely podobné difuzi plyných složek. Přístup k modelování částic o průměru 1 až 10 μm se mezi existujícími pracemi na téma modelování zanášení liší.

Důvodem pro použití Eulerovského přístupu je dále nižší výpočtový čas. V článku [81] autoři porovnávají Eulerovský a Lagrangeovský přístup pro tři případy transportu částic o velikosti 1 μm proudem plynu v laminárním režimu proudění. Pro tři zkoumané případy s vlivem setrvačnosti, odporu a Brownova pohybu ukázalo vzájemné porovnání obou přístupů výhodnější použití Eulerovského přístupu z hlediska výpočtového času, nicméně pro malé koncentrace částic poskytoval Lagrangeovský přístup výsledky lépe odpovídající dostupným analytickým řešením.

V práci [17] byly oba přístupy porovnány na případě usazování částic prachu o průměrech 1–16 μm ve ventilační šachtě, oba přístupy se lišily v použitém turbulentním modelu – u Lagrangeovského šlo o Reynolds Stress Model (RSM) pro lepší zachycení anizotropie turbulence v blízkosti stěny, u Eulerovského byl použit RNG $k-\varepsilon$ model. Množství deponovaného materiálu bylo vzhledem k dostupným experimentálním datům sledováno pouze na dně a stěnách ventilační šachty. Porovnání je zobrazeno v Tab. 2.

Tab. 2: Výsledky srovnání Lagrangeovského a Eulerovského přístupu k modelování transportu částic ve ventilační šachtě [17].

d_p [μm]	Lagrange	Euler
1 a 3	Odpovídající počáteční rychlost depozice, v ustáleném stavu nánosu predikce 40–60 % naměřené hodnoty.	Cca 50 % nadhodnocení deponovaného množství během 3 hodin, v ustáleném stavu odchylka v jednotkách %.
5 a 9	Rychlost depozice výrazně nadhodnocena po celou dobu, výsledné množství o desítky % větší než naměřená hodnota.	Na počátku o 20–30 % vyšší rychlost depozice oproti měření. V ustáleném stavu 10–20 % nižší hmotnost oproti měření.
16 a 24	Oba přístupy dávají téměř shodnou předpověď. Pro $d_p = 16 \mu\text{m}$ je predikované usazené množství pro oba přístupy o několik % nižší než naměřená hodnota.	

Významný vliv na množství dopadajících částic má turbulentní disperze [15]. Dva běžně užívané modely jsou popsány níže.

Cloud model

Cloud model je založen na náhradě pohybu určitého množství částic tzv. mrakem a sledování pohybu středu tohoto mraku. Koncentrace částic okolo středu mraku je určována s využitím Gaussova rozložení pravděpodobnosti, kdy rozptyl je určen z odhadnuté flukтуаční složky turbulentního proudu [51].

Discrete Random Walk Model (DRWM)

Namísto mraku částic využívá sledování zvoleného počtu reprezentativních částic. Tento přístup je běžně využíván v simulacích zanášení v průmyslových aplikacích [13]. Flukтуаční složka rychlosti proudu tekutiny je zahrnuta ve výpočtu aerodynamických sil (odpor, vztlak) [51].

$$u'_i = \zeta \sqrt{u_i'^2} \quad (36)$$

i označuje i -tou složku vektoru rychlosti tekutiny, ζ je náhodná veličina s normálním rozdělením pravděpodobnosti, které je aktualizováno vždy po uplynutí *eddy lifetime* neboli charakteristické doby existence turbulentního víru nebo doby, po kterou částice tímto vírem prochází (*crossing time*), pokud je tato menší než *eddy lifetime*. *Eddy lifetime*

Teoretický základ modelování partikulárního zanášení

může být přitom zadáno jako konstantní, případně jej lze uvažovat jako náhodnou veličinu, což umožňuje tzv. *Random Eddy Lifetime* model.

V případě RANS modelů je průměr flukтуаční složky rychlosti proudu odhadnut z turbulentní kinetické energie k , viz vztah (37). Detailní popis modelu je uveden v [51].

$$\sqrt{u_i'^2} = \sqrt{2k/3} \quad (37)$$

Použití DRWM umožňuje zahrnout vliv změn vlastností částic v čase. Může nicméně předpovídat nerealisticky vysokou akumulaci malých částic o průměru méně než 5 μm v oblastech s nízkou intenzitou turbulence v případě, vyskytují-li se v proudu s vysoce nehomogenní turbulencí. Dále v případě zmíněných částic může tento model poskytovat příliš vysoké hodnoty množství dopadajících částic na povrch stěn [51]. To je možné zčásti obejít tak, že tyto částice jsou modelovány jiným způsobem, s využitím jejich relativně nízké setrvačnosti a modelováním jako další složky proudící směsi plynu.

2.2.3 ULPÍVÁNÍ ČÁSTIC

Ústřední veličinou je pravděpodobnost ulpění P částice (*sticking probability*), 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, hovoříme o tzv. účinnosti ulpívání (*sticking efficiency*).

Pravděpodobnost ulpění částice je dána lepivostí (*sticking propensity*) částice P_p a stěny P_w [21]. k_e vyjadřuje erozivní účinek neulpívajících částic, které nejsou zachyceny vlivem lepivosti stěny.

$$P = P_p + (1 - P_p) P_w - k_e (1 - P_p) (1 - P_w) \quad (38)$$

První člen tak vyjadřuje příspěvek od lepivých částic dopadajících na lepidivé i nelepivé povrchy, druhý člen představuje dopad nelepivých částic na lepidivý povrch. Negativní vliv na účinnost ulpění mají nelepivé částice, vzhledem ke kterým není lepidivý ani povrch nánosu. Tyto částice mohou způsobovat erozi existujícího nánosu [36].

Běžně jsou pro tuhé částice rozlišovány tři skupiny modelů [13]. Modely roztaveného podílu nebo viskozity jsou více empiricky založené, modely kritické rychlosti zpravidla vycházejí z obecných poznatků z mechaniky kontaktu těles. Všechny tyto modely vyžadují jistý způsob zadání vlastností částic a povrchu stěny nebo nánosu. Vlastnosti částic je možno získat z rozboru a zkoušek vzorků popele, případně lze model zanášení propojit se spalovacím modelem a vlastnosti odvodit z predikovaných spalovacích podmínek a vlastností paliva.

Vztahy pro výpočet pravděpodobnosti P v následujících kapitolách často popisují pravděpodobnost ulpění (resp. účinnost ulpění). Lze je však využít pro stanovení lepivosti částice P_p nebo stěny P_w .

Modely založené na kapalném podílu

Pravděpodobnost ulpění je stanovena z podílu kapalně 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, přičemž pravděpodobnost ulpění zpravidla roste s klesající viskozitou μ (částice nebo nánosu) a od určité hodnoty je rovna jedné. Často citovaným příkladem je model [82], kde lepivost je rovna jedné, pokud je viskozita menší než tzv. referenční viskozita μ_{ref} a dále s růstem viskozity klesá.

$$P = \min \left\{ \frac{\mu_{ref}}{\mu}; 1 \right\} \quad (39)$$

V případě modelu *kritické* viskozity je lepivost rovna jedné při viskozitě nižší než kritická a dále je rovna nule. Obě hodnoty se však napříč pracemi různých autorů liší (referenční viskozita o tři řády, kritická až o sedm) [4].

Modely kritické rychlosti

Tyto modely 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 u_{crit} porovnávána velikost dopadové rychlosti nebo její normálové složky.

$$P = \begin{cases} 0 & u_{imp} \leq u_{crit} \\ 1 & jinak \end{cases}$$

2.2.4 STANOVENÍ OKRAJOVÝCH PODMÍNEK

Velikosti a složení částic lze přibližně stanovit na základě rozboru spodního popele [41], odběru vzorků z odlučovačů [83], nicméně je třeba brát v úvahu nejistoty z důvodu změn velikostí a složení v průběhu transportu díky heterogenní kondenzaci par na povrchu částic, rozpadu nebo spojování částic apod. Autoři [34, 41] využili pro stanovení okrajových podmínek modelu zanášení výstupy z vlastních CFD modelů spalování.

2.2.5 ČASOVÝ VÝVOJ

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 nejmenší z těchto škál.

Zjednodušením je simulace okamžité rychlosti zanášení pro známé provozní stavy kotle a případně i známé rozložení existujícího nánosu [41] Simulace okamžitého stavu jsou vhodné pro parametrické studie s výstupy jako je tlaková ztráta, okamžitá rychlost zanášení nebo např. přenášený tepelný tok [16].

Pokud je žádoucí zachytit časový vývoj nánosu, přičemž krátkodobé fluktuační okrajových podmínek modelu zanášení a stejně tak rychlosti růstu nánosu a změn jeho vlastností jsou dostatečně malé, lze skutečný nestacionární děj modelovat jako kvazistacionární [21]. Složení plynu, přestup tepla, rychlostní a teplotní pole a složení částic jsou vždy pro daný časový krok uvažovány konstantní. Následně je pro zvolený časový krok vypočten přírůstek nánosu a určeny podmínky na povrchu nánosu.

Periodické změny vyvolané odtrháváním vírů za překážkou (např. trubkou ve svazku), oscilací okrajových podmínek (např. díky periodickým dějům ve spalovacím zařízení – rotace pece, pohyb roštu, přikládání apod.) je možné zachytit pomocí simulace malého počtu těchto opakování a stanovení průměrné rychlosti zanášení (příp. dalších veličin) na jednotku času. [25].

2.2.6 ZJEDNODUŠENÍ MODELOVÉ GEOMETRIE

Kritériem pro tvorbu modelu geometrie zanášených povrchů jsou zejména dostupná výpočetní kapacita a požadované výstupy simulace. Řada prací, které řeší detailní průběh zanášení včetně rozložení teplot napříč nánosem, vyžaduje zahrnutí jeho geometrie. Pro tento případ lze často využít přenesení situace do dvou rozměrů, což vyhovuje například u trubkových svazků [15]. Často se využívá periodicitu podmínek, případně je zkoumána jen první řada trubek ve svazku [26] a geometrie je tak zjednodušena na dvourozměrnou oblast obsahující jednu trubku, případně (za předpokladu symetrie) jen její polovinu.

Je-li nutné uvažovat trojrozměrnou geometrii, další možností je přibližné nahrazení reálného prvku geometrie jednodušším. Šotové přehříváky kotle lze například nahradit rovinnými deskami [41]. V případě hustých trubkových svazků, kde je možné provést nahrazení jednoduššími geometrickými prvky, lze využít nahrazení svazku porézním médiem, např. v pracích [32, 41, 84].

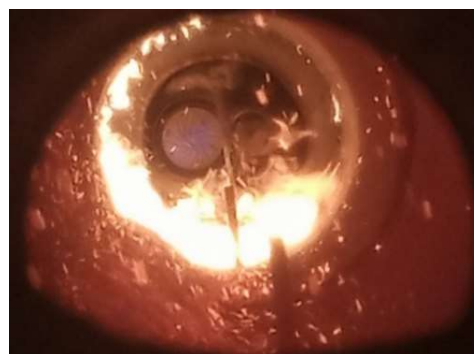
3 EXPERIMENTÁLNÍ ZAŘÍZENÍ

Simulace zanášení se soustředily na případ experimentálního zařízení provozovaného na Ústavu procesního inženýrství, jež umožňuje experimentální ověřování procesu zanášení včetně měření vybraných produktů spalování včetně uvolněných tuhých znečišťujících látek (TZL), pozorování vzniku nápeků na stěnách ohniště (rotační pec) a vznik nánosů na teplosměnných plochách. Zanášivé spaliny jsou produkovány v rotační peci (Obr. 5). Účelem pece je simulovat spalování v průmyslových pecích a dalších energetických spalovacích zařízeních. Parametry pece jsou uvedeny v Tab. 3.

Tab. 3: Parametry rotační pece.

Délka	5 m
Vnitřní průměr	400 mm
Otáčky	0,1–6 min ⁻¹
Maximální teplota	1000 °C
Výkon plynového hořáku	220 kW

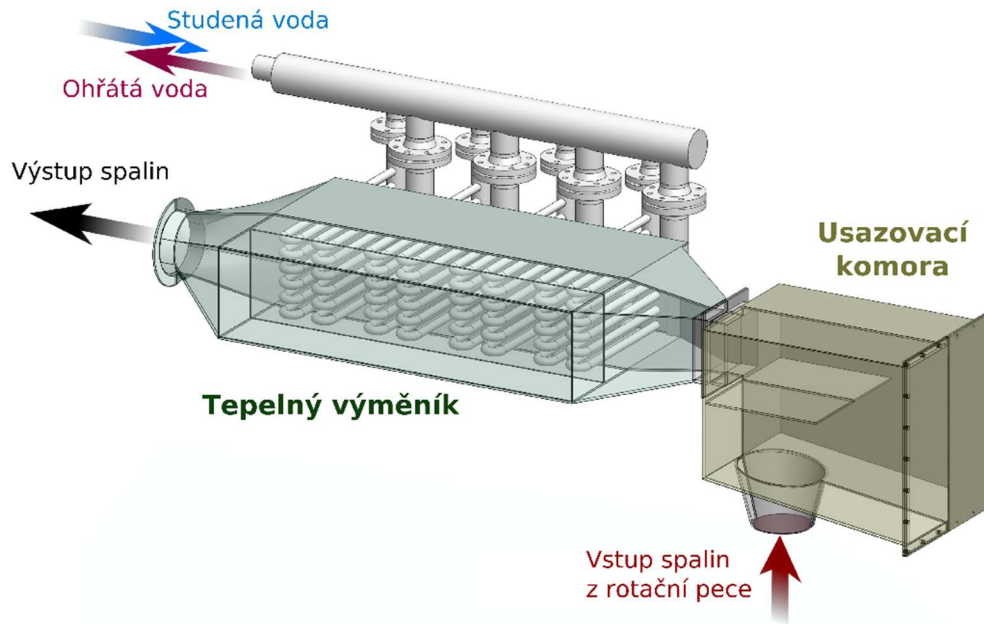
Pro předehřev pece a stabilizaci hoření slouží plynový hořák. V případě, kdy je nutné zajistit vyšší množství spalovacího vzduchu, je možné využít přídavné dmychadlo. Přívod tuhého paliva zajišťuje šnekový dopravník o vnitřním průměru 50 mm. Tento rozměr je limitující vzhledem k velikosti částic paliva, a pokud dodavatel paliva nebyl schopen zajistit dostatečně jemné nadrcení, bylo nutné nadrtit palivo svépomocí na ÚPI.



Obr. 5: Rotační pec na zkušebně ÚPI, snímek hořící palivové vrstvy skrze průhledítko (v zadní části pece je patrné ústí plynového hořáku (vlevo) a šnekového dopravníku (vpravo)).

Experimentální zařízení

Navazující části jsou navrženy tak, aby byly rozebíratelné a aby umožňovaly tak přístup k vnitřním částem za účelem prohlídky vzniklých nánosů, opravy a čištění. Zahrnují usazovací komoru a výměník (Obr. 6 a Obr. 7). Spaliny v zařízení mohou mít teplotu až 1000 °C a jako materiál tak byla zvolena žárovevná korozi-vzdorná ocel 1.4548, dlouhodobě snášející teploty do 1100 °C.



Obr. 6: Sestava usazovací komory a výměníku. Převzato z [87] a upraveno.



Obr. 7: Fotografie sestavy odvodu spalin na zkušebně Ústavu procesního inženýrství.

Usazovací komora (Obr. 8) slouží jako pasivní mechanická část zachycující část tuhých znečišťujících látek. Je tvořena plechovým svařencem a vybavena odnímatelnou zadní stěnou umožňující dobrý přístup k vnitřku komory, prohlídce a odstraňování vzniklých nánosů mezi jednotlivými spalovacími zkouškami. Mezi vstupem a výstupem z komory se nachází přepážka (Obr. 9).



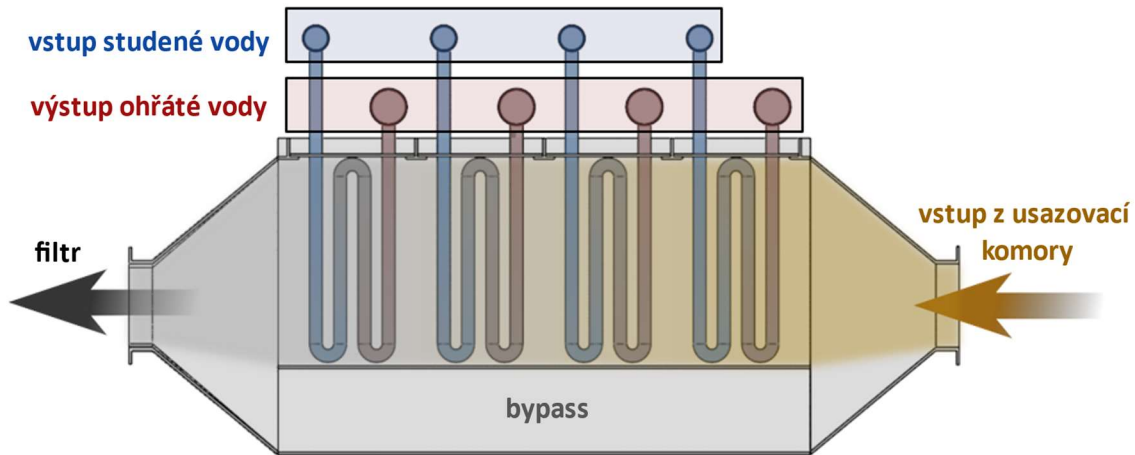
Obr. 8: Usazovací komora v průběhu spalovací zkoušky.



Obr. 9: Pohled dovnitř usazovací komory po ukončení spalovací zkoušky.

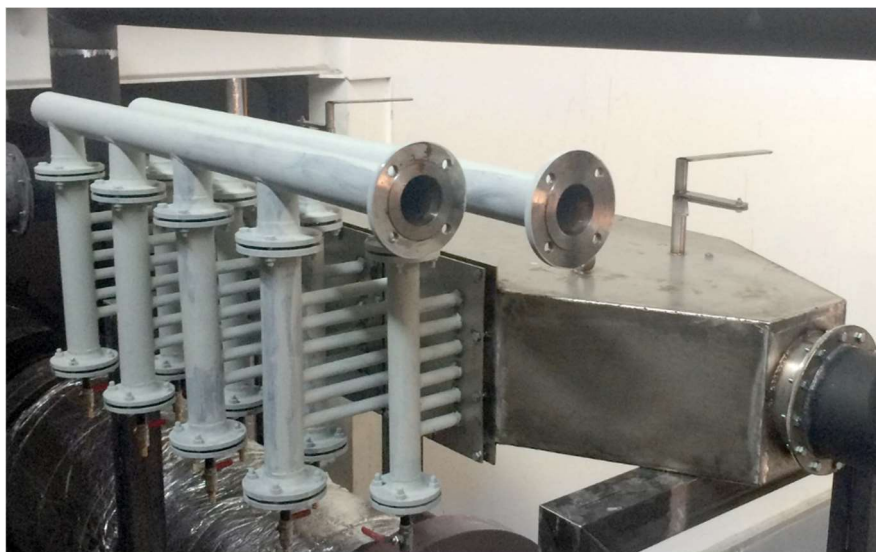
Experimentální zařízení

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. V průběhu spalovací zkoušky je možné těmito klapkami uzavřít vstup i výstup z hlavního kanálu, čímž dojde k přesměrování proudu spalin do bypassu.



Obr. 10: Schéma výměníku s protiproudým uspořádáním spalin a chladící vody.

Schéma na Obr. 10 ukazuje zapojení výměníku v protiproudém uspořádání průtoku spalin a chladící vody, a tudíž také při souproudém provozu pece. Celou sestavu včetně usazovací komory je však možné napojit na rotační pec pro souproudé uspořádání průtoku spalin i chladící vody ve výměníku a protiproudý provoz pece. Na Obr. 11 je výměník při montáži.



Obr. 11: Výměník po instalaci. Autor fotografie: J. Bojanovský.

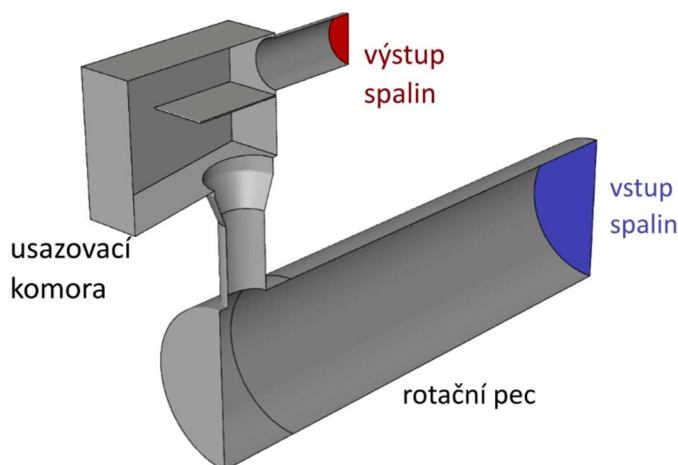
Popsané spalovací zařízení je provozováno Sekcí termických procesů a čištění spalin ÚPI. Bližší popis jeho vývoje, konstrukce a zejména provedených zkoušek, nejen za účelem výzkumu zanášení, lze nalézt v dizertační práci [85], J. Bojanovského, ze zmíněné výzkumné sekce ÚPI.

4 MODELOVÁNÍ USAZOVACÍ KOMORY

Tato kapitola popisuje postupné sestavení a implementaci modelu zanášení v usazovací komoře, viz kap 3. Pro účely tvorby modelu zanášení se komora jeví jako vhodný výchozí bod z následujících důvodů:

- Jedná se o geometricky jednodušší součást než výměník a je tak možné ji simulovat ve třech rozměrech, na rozdíl od výměníku. Počet buněk výpočtových sítí se pohybuje v rozmezí jednoho až dvou milionů.
- Komora s izolovanými stěnami neobsahuje teplosměnné plochy, které by díky přenosu tepla ovlivňovaly vlastnosti proudu plynu a pohyb malých částic

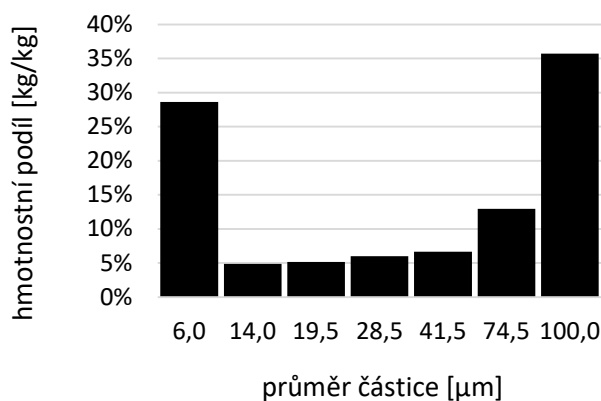
Proces tvorby modelu zahrnuje formulace vybraných modelů z dostupné literatury a jejich úpravy, charakteristiku okrajových podmínek kombinující data z měření na zařízení a vybraná data z literatury a porovnání výstupů simulací s pozorovanými nánosy po spalovacích zkouškách. Součástí jsou citlivostní studie parametrů modelů ulpívání částic a detailu zachycení geometrie zařízení. Rotační pec byla do modelu zahrnuta pro poskytnutí profilu rychlosti spalin a rychlosti a množství tuhých částic na vstupu do usazovací komory (viz Obr. 12). Vstup spalin byl zadán po celém čele rotační pece, která byla simulována zjednodušeně jako stacionární (bez rotace) a bez zahrnutí vestaveb, možných nánosů, měřících přístrojů či palivové vrstvy na dně pece.



Obr. 12: Modelová geometrie se zjednodušenou rotační pecí a usazovací komorou. Rovina symetrie je skryta.

„Zkušebním“ palivem je komunální odpad uvedený v [86], resp. popílek s částicemi (viz Obr. 13) získanými jako aritmetický průměr hodnot tří vzorků popílku (FA1, FA2, FA3). Střední průměr částic byl vypočten pro $d_p < 100 \mu\text{m}$, neboť dle předběžné simulace

nebyly větší částice schopny dosáhnout usazovací komory. Byla tak stanovena hodnota $d_{p,av} = 17,53 \mu\text{m}$. Hustota částic byla stanovena dle [86] na 2770 kg/m^3 .



Obr. 13: Podíl frací částic na vstupu do rotační pece [86]. Převzato z [87] a upraveno.

4.1 NASTAVENÍ NUMERICKÉHO MODELU

Pro modelování turbulence [51] byl 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 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 [51].

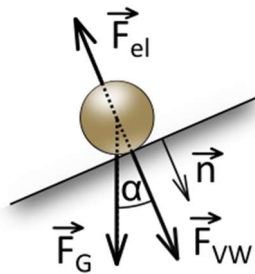
Pro řešení rovnice pro tlak a hybnost je použito *Coupled Scheme*. Pro prostorovou diskretizaci tlaku byl použit druhý řád, pro ostatní veličin pak druhý řád *upwind*. K odhadu gradientů sloužila *Cell-based* metoda nejmenších čtverců. Konvergence byla posuzována na základě škálovaných reziduí, s limitní 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 \rightarrow částice) pro jedno nastavení parametrů modelu ulpívání trval pro 600 000 vpuštěných částic nejvýše 20 minut.

4.2 PRVNÍ MODEL ULPÍVÁNÍ

Jedním z jednoduchých modelů ulpívání založených na kritické rychlosti je model [15], založený na rovnováze sil působících na kulovou částici v kontaktu s hladkou stěnou (Obr. 14). Předpoklady modelu jsou:

- zanedbatelný vliv kondenzujících par na lepivost povrchu částice a stěny/nánosu,
- částice je buďto zachycena v důsledku ztrát plastickými deformacemi, a nebo naopak dojde k dokonale pružnému odrazu,
- nezávislost směru odrazu částice na struktuře povrchu.



Obr. 14: Síly působící na částici [15]. \vec{F}_{el} je elastická síla, \vec{F}_{VW} Van der Waalsova a \vec{F}_G tíhová síla.

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} představují parametry nepřímo popisující mechanické vlastnosti jak částice, tak i stěny. Elastická síla působí proti ulpívání částic.

$$F_{el} = G (d_p/d_{ref})^n d_p^2 |v_{i,n}|^{1,2} \quad (40)$$

Van der Waalsova síla je vyjádřena pomocí konstanty úměrnosti B , průměru částice a vzdálenosti y částice od stěny. Ve zmíněné práci je tato vzdálenost rovna $d_p/2$.

$$F_{VW} = Bd_p/(6y^2) \quad (41)$$

Poslední silou je složka tíhové síly \vec{F}_G . Výsledná pravděpodobnost ulpění částice může nabývat hodnot 0 nebo 1, tj. dle orientace výslednice sil buďto částice ulpí s jistotou nebo dojde k jejímu odrazu.

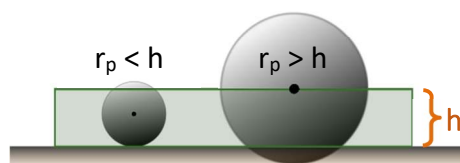
$$P = \begin{cases} 1 & F_{VW} + |\vec{F}_G| \cos \alpha \geq F_{el} \\ 0 & \text{jinak} \end{cases} \quad (42)$$

4.2.1 CITLIVOSTNÍ STUDIE

Okrajové podmínky (Tab. 4, Obr. 13) jsou stanoveny dle návrhových parametrů výměníku. Bylo provedeno porovnání pěti sítí lišících se sítí v oblasti mezní vrstvy. Byla vybrána síť o přibližně 590000 buňkách s průměrnou hodnotou $y^+ \approx 1,7$ v usazovací komoře. 0,75 % stěnových buněk mělo hodnotu $y^+ \geq 4$. 0,5 % stěnových buněk mělo výšku menší než poloměr ($36,25 \mu\text{m}$) největší částice, tudíž se téměř nevyskytují případy výskytu center částic v buňkách o příliš malém rozměru (Obr. 15).

Tab. 4: Vlastnosti spalin uvažované v první sérii simulací zanášení v usazovací komoře.

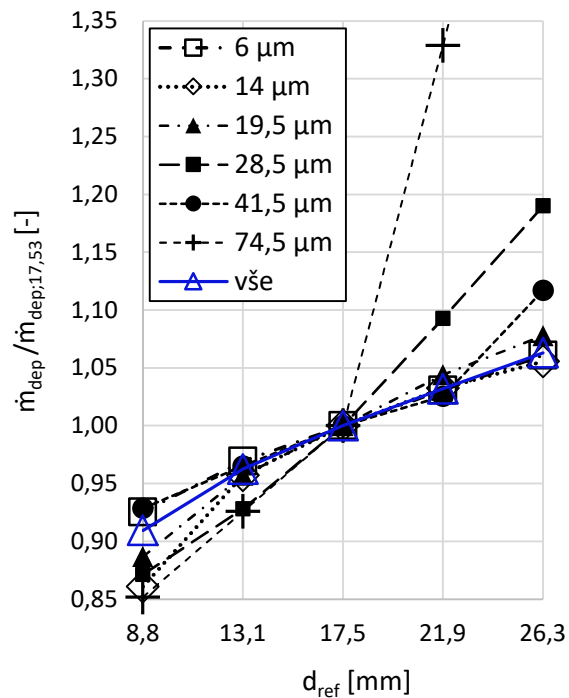
teplota	hmotnostní tok	hustota spalin
950 °C	0,231 kg s ⁻¹	0,288 kg m ⁻³



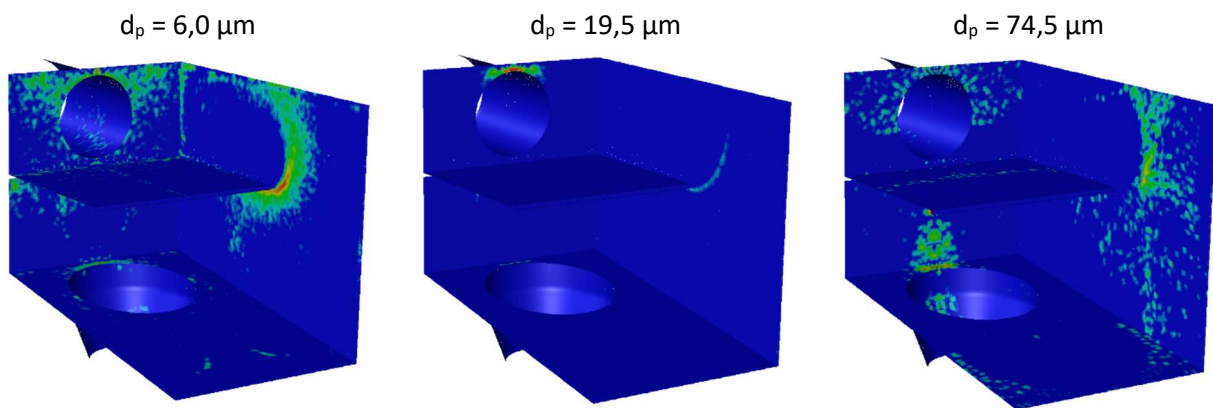
Obr. 1: Znárodnění nastavení sítě, ve které existují buňky nižší než poloměr největší částice.

Srovnání výpočtových sítí ukázalo nízkou závislost deponovaných hmotnostních toků na počtu buněk v mezní vrstvě. Nejvyšší odchylka celkového deponovaného hmotnostního toku byla 5 % hodnoty na nejhrubší síti. Simulace na všech sítích ukázaly, že nejhrubší uvažovaná frakce částic ($100 \mu\text{m}$) není schopna dosáhnout usazovací komory a zůstává v peci. Celkový depoziční tok na všech stěnách komory se vůči hodnotě nejhrubší sítě lišil o max. 7 %.

Vliv hodnoty d_{ref} byl testován pro každou uvažovanou frakci zvlášť. Odhad d_{ref} byl zvolen jako hmotnostně průměrovaný rozměr všech částic vstupujících do komory ($17,53 \mu\text{m}$). Zvýšení d_{ref} o 50 % vedlo na 6 % nárůst celkového depozičního toku částic, naopak 50 % snížení způsobilo pokles o 9 %. V rámci testovaného rozsahu lze pozorovat pokles vlivu hodnoty referenčního průměru na celkový depoziční tok. Závislost na d_{ref} je podstatně výraznější pro větší průměry částic a pro vyšší obsah velkých částic lze čekat výraznější změnu celkového depozičního toku.



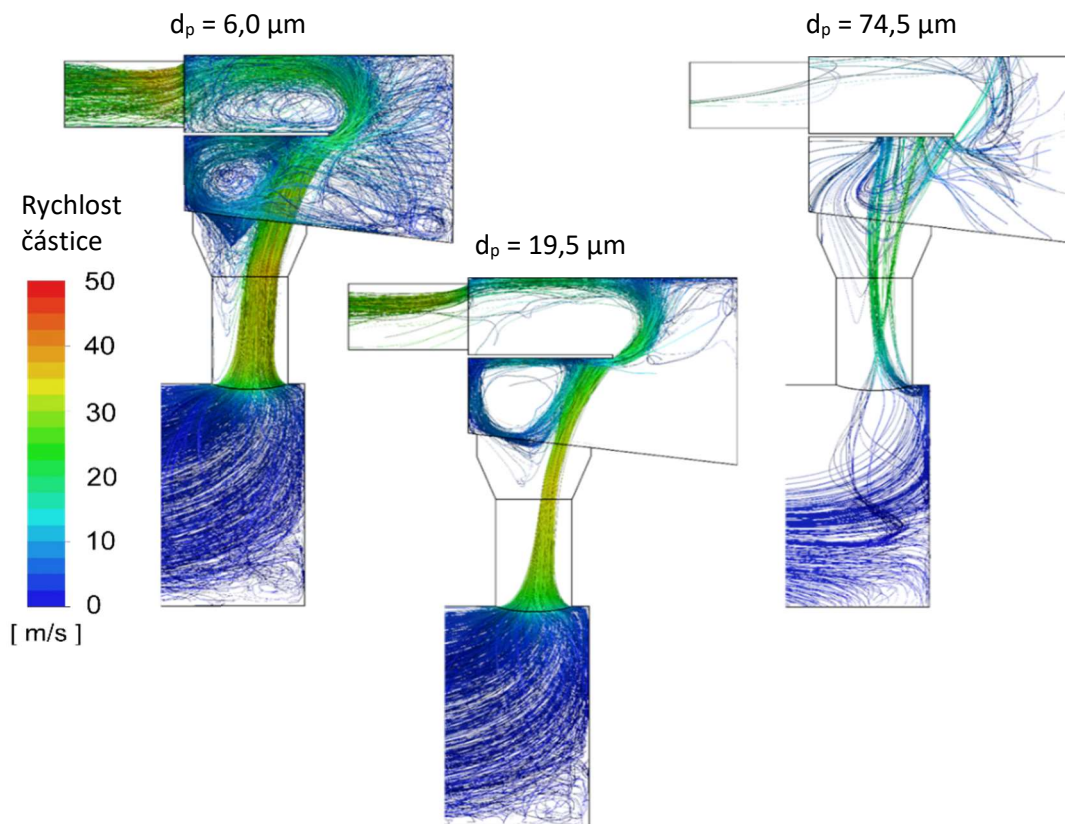
Obr. 16: Znázornění hodnot hmotnostních toků deponovaných částic pro pět hodnot d_{ref} v poměru ke hmotnostním tokům při $d_{ref} = 17,53 \mu\text{m}$.



Obr. 17: Rozložení hustoty toku deponované hmoty uvnitř usazovací komory [87].

Porovnání získaných výsledků s pozorováními na zařízení ukázalo následující:

- d_{ref} ovlivňoval predikované hmotnostní toky ulpívajících částic následovně: 50 % zvýšení (snížení) referenčního průměru vedlo k 6 % nárůstu (9 % poklesu) celkového toku ulpívajících částic, přičemž změny byly výraznější pro větší průměry částic.
- Při zvolených hodnotách průměrů částic model nedovoloval depozici částic na spodní straně přepážky komory a na stropě. Minimální průměr částice zajišťující, že Van der Waalsova síla bude větší než tíhová síla částice, byl zhruba $5 \mu\text{m}$. Nejmenší sledované částice měly průměr $6 \mu\text{m}$.



Obr. 18: Trajektorie částic v bočním pohledu na komoru a zadní část pece.

4.2.2 SIMULACE PO PROVEDENÍ SPALOVACÍCH ZKOUŠEK

První spalovací zkouška na experimentálním zařízení poskytla data o koncentraci částic, hustotě a průtoku spalin (Tab. 5). Ostatní okrajové podmínky byly ponechány dle původního nastavení (viz úvod kap. 4).

Tab. 5: Nastavení okrajových podmínek a vlastností spalin v simulaci usazovací komory na základě měření během spalovacích zkoušek.

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

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 takto zpřesněné CFD simulace s prvním depozičním modelem při užití výše zmíněných

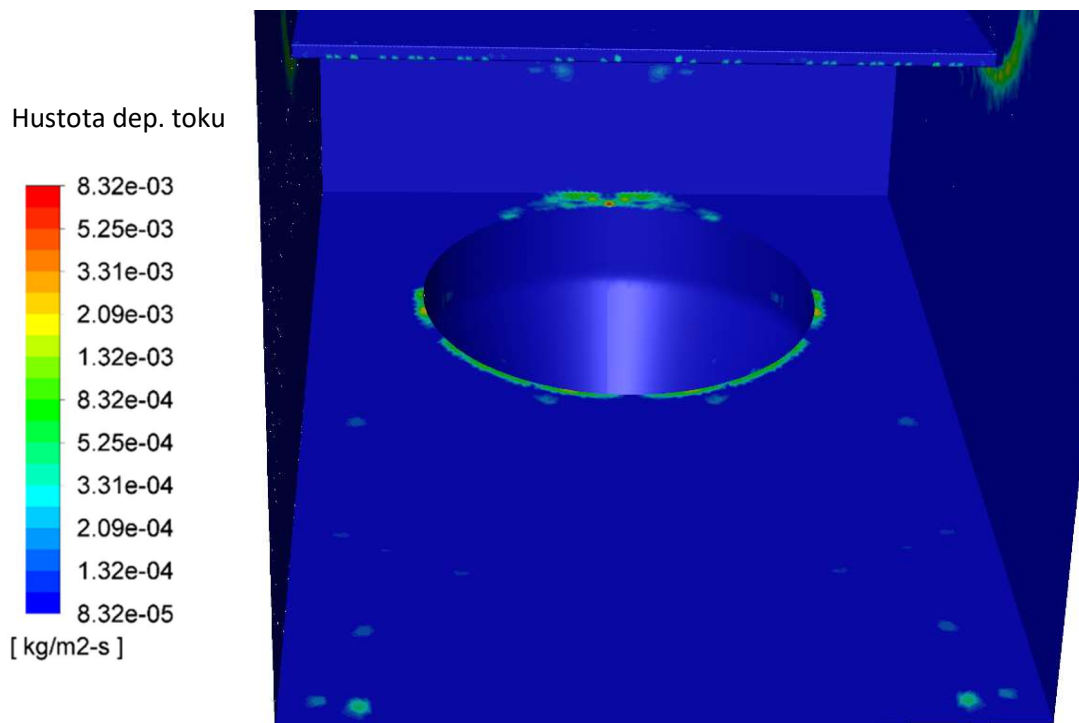
zpřesněných okrajových podmínek získaných z provedeného experimentu na zařízení zobrazují z pohledu rozložení hustoty deponované hmoty a z pohledu trajektorií vybraných velikostí částic výše uvedené Obr. 17 a Obr. 18. Srovnání pro jednotlivé části usazovací komory je přehledně provedeno v následující Tab. 6 s doprovodem série obrázků (Obr. 19 až Obr. 26) uvedených na dalších stranách.

Tab. 6: Srovnání experimentu a simulací.

Dno	<p>Obr. 19 a ukazují silný nános tloušťky až několika centimetrů. Horní vrstva nánosu je tvořena popílkem ze spalování TAP a vykazuje největší soudržnost, což bylo znát i u zadní stěny usazovací komory po odejmutí její zadní stěny, kde spodní vrstvy nánosu ze spalování předchozích paliv zůstávaly sypké.</p> <p>Obr. 20 ukazuje zanedbatelné hodnoty hustoty toku deponované hmoty s výjimkou vyústění spalin do komory a kouta mezi dnem a přední stěnou.</p>
Spodní strana přepážky	<p>Nános na spodní přepážky (Obr. 21) se nachází v soustředěné oblasti proti vstupnímu otvoru z pece, na které narážel vstupující proud spalin a zjevně došlo k opadu nánosu.</p> <p>Podle modelu (Obr. 22) by se zde neměly nalepovat částice větší než 5,5 μm, tudíž skutečně pozorovaný nános na Obr. 21 je buďto složen z částic o průměru menším než 5,5 μm, popřípadě by zde měl existovat i jiný mechanismus, než ulpění vlivem Van der Waalsových sil.</p>
Horní strana přepážky	<p>Nános má podobně jako na dně komory tloušťku několik centimetrů (Obr. 23). Podobně jako v případě dna komory také zde model předpovídá jen zanedbatelné hodnoty hustoty toku deponované hmoty (Obr. 24).</p>
Přední stěna	<p>Na přední stěně pod přepážkou (Obr. 21) se nachází oblast s nánosem v koutu mezi přední stěnou a přepážkou. Nános má tloušťku méně než 1 mm. Velmi slabý nános lze vidět i na části přední stěny nad přepážkou nad výstupním otvorem komory (Obr. 23).</p> <p>Oblast nejvyšší intenzity zanášení na přední stěně komory pod přepážkou (Obr. 22) a nad přepážkou (Obr. 24) predikovaná modelem se shoduje s pozorováním.</p>
Strop	<p>Na stropě komory nebyl pozorován téměř žádný nános (Obr. 23).</p> <p>To je v souladu s výsledky simulace (Obr. 24). Podobně jako u spodní strany přepážky, ani zde model neumožňuje depozici částic menších než 5,5 μm, což je méně než nejmenší uvažovaný průměr.</p>
Boční stěna	<p>Na boční stěně (Obr. 25) se nachází šedý nános, opět pravděpodobně ze spalování TAP o tloušťce nejvýše 1 mm a dále slabý nános v blízkosti koutů.</p> <p>Výsledky simulací ukázaly místo s nejvyšší hustotou toku deponované hmoty v blízkosti hrany přepážky, které však nebylo po experimentu v komoře patrné. Nicméně, v komoře pod přepážkou nacházejí navažené lišty sloužící k uchycení přepážky, které nejsou v modelové geometrii zahrnuty. Pozorovaný nános začíná právě u hrany jedné z nich (Obr. 26).</p>



Obr. 19: Sypký nános na dně usazovací komory.

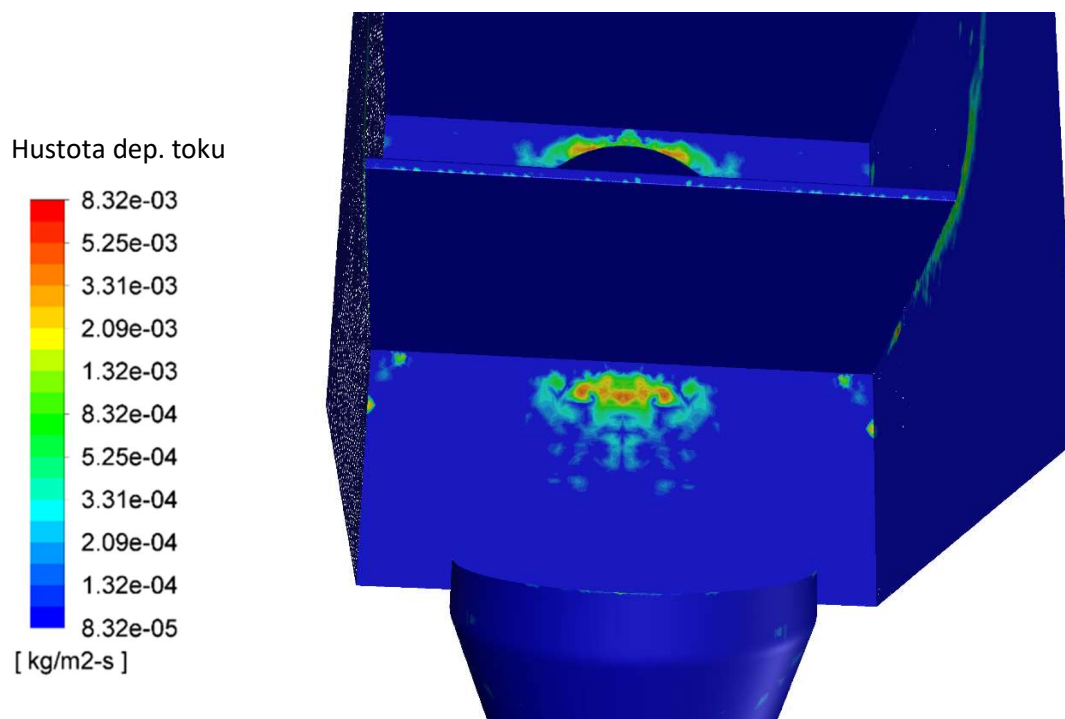


Obr. 20: Hustota hmotnostního toku deponovaných částic na dně usazovací komory.

Modelování usazovací komory



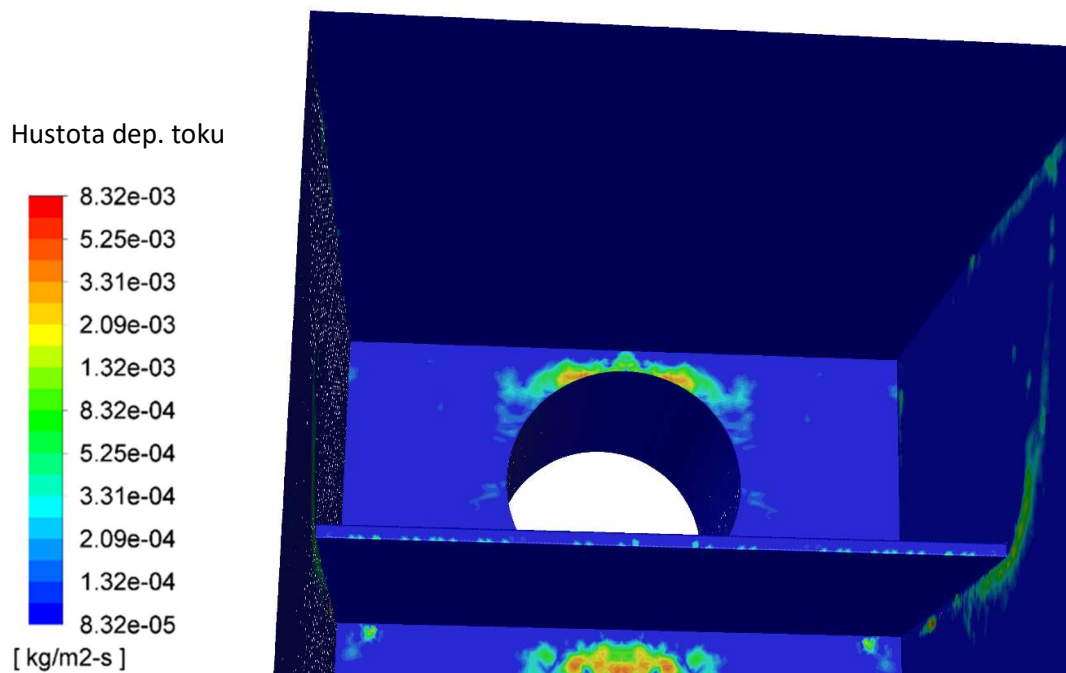
Obr. 21: Nános na spodní straně přepážky v usazovací komoře.



Obr. 22: Hustota hmotnostního toku deponovaných částic na spodní straně přepážky.



Obr. 23: Horní strana přepážky a horní část přední stěny a stropu usazovací komory.

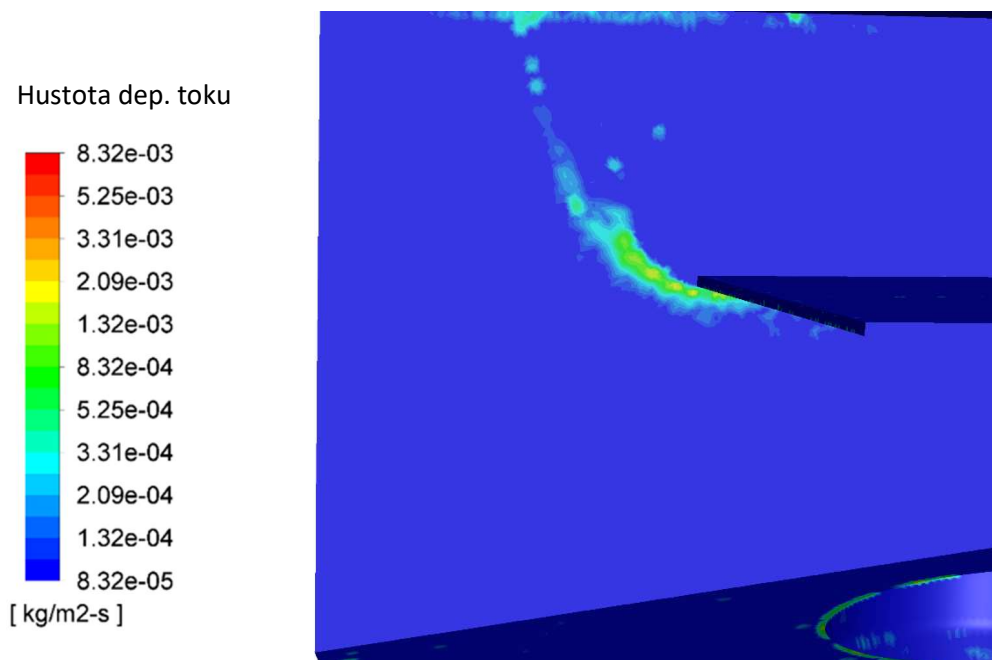


Obr. 24: Hustota depozičního toku na stropě a horní části přední stěny usazovací komory.

Modelování usazovací komory



Obr. 25: Nános na boční stěně komory.



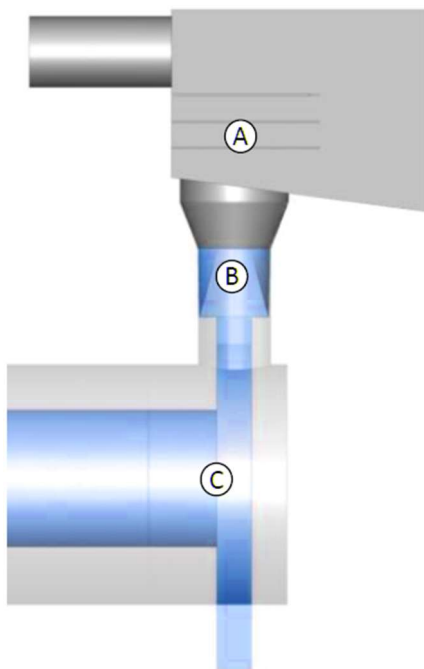
Obr. 26: Hustota hmotnostního toku deponovaných částic na stěně usazovací komory.

4.2.3 VLIV ZJEDNODUŠENÍ MODELOVÉ GEOMETRIE

Pro předchozí simulace byla použita zjednodušená geometrie rotační pece a usazovací komory, reprezentující její základní rozměry a tvar komory. Byly zanedbány návary uvnitř komory, sloužící pro uchycení přepážky. Dalším prvkem je nános v přechodu mezi pecí a komorou, který vznikl v průběhu spalovacích zkoušek, a zmenšoval průřez vstupu do komory přibližně na polovinu. Byly tak testovány geometrie s postupným přidáváním prvků za účelem vystižení vzorů nánosů pozorovaných uvnitř komory. Dodané prvky jsou řazeny dle pořadí doplnění do modelové geometrie a vyobrazeny na Obr. 27:

- A. Návary uvnitř usazovací komory. U těchto se očekává, že jejich doplnění povede ke správnému zachycení podoby nánosů na boční stěně komory v simulacích.
- B. Nános ve vstupu do usazovací komory. Tento nános vede ke dvojnásobně vyšší vstupní rychlosti a významně tak může měnit podobu proudění v usazovací komoře a měnit tak rozložení a rychlosti částic napříč komorou.
- C. Zpřesněná geometrie konce rotační pece a přechodu do usazovací komory. Oproti původní jednoduché je tvar přechodu složitější, s vícenásobnou náhlou změnou průtočného průřezu.

Byly tak vytvořeny čtyři geometrie, tj. původní verze I., verze II. doplněná o návary A, verze III. doplněná o A i nános B a poslední verze IV. doplněná o A, B i C.



a) Umístění doplněných geometrických prvků

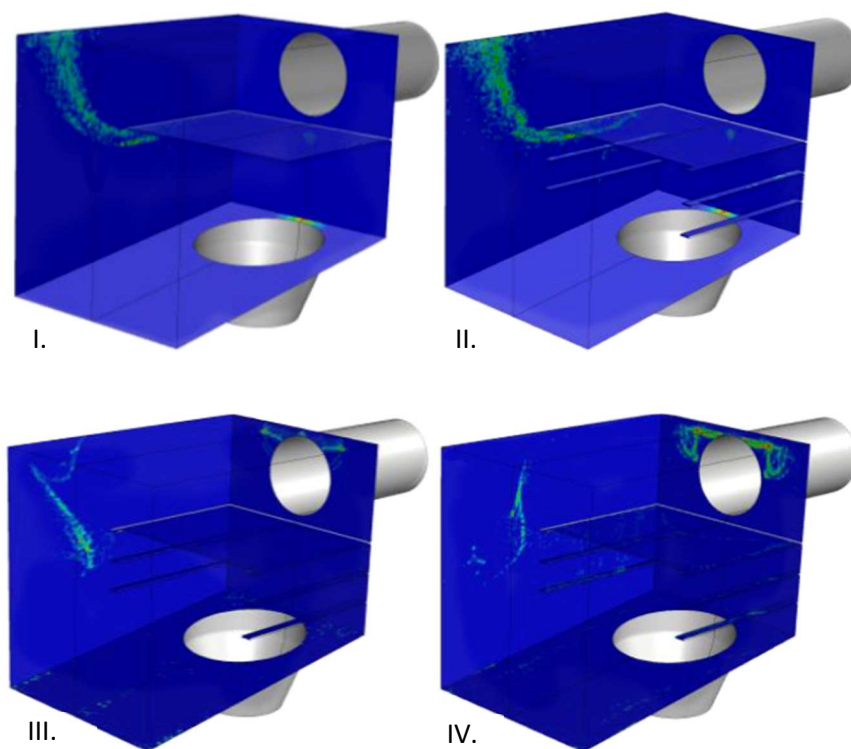


b) Nános ve vstupu do usazovací komory

Obr. 27: Změny v modelové geometrii.

Modelování usazovací komory

Sledováno bylo relativní rozložení hustot hmotnostního toku na jednotlivých vnitřních plochách usazovací komory, tj. skutečná hustota toku dopadajících částic ku maximální hodnotě hustoty toku spočtené pro tuto stěnu a tato hodnota byla kvalitativně srovnávána s pozorovanými nánosy. Podstatné bylo, zda některé z těchto zpřesnění modelové geometrie povede k výrazně vyšší intenzitě zanášení dna komory a horní strany přepážky v porovnání s ostatními stěnami komory – tak, jak ukázaly spalovací zkoušky. Nános na těchto dvou plochách představoval převážnou většinu zachycených TZL, ačkoli zčásti výrazný nános se vyskytoval i na spodní straně přepážky, došlo však k jeho opadu, buďto postupně během spalovacích zkoušek či během manipulace při demontáži víka usazovací komory za účelem pozorování nánosů. Výsledky simulací provedených na jednotlivých konfiguracích jsou na Obr. 28 zobrazeny pro největší testovanou velikost částic v rámci modelu ($74,5 \mu\text{m}$), která vykazovala nejzřetelnější změny v rozložení hustot depozičních toků ze šesti sledovaných průměrů částic, zejména pak v rámci bočních stěn komory.



Obr. 28: Rozložení intenzity usazování tuhých částic o průměru $74,5 \mu\text{m}$ pro čtyři testované modifikace modelové geometrie [9]: I.) původní geometrie; II.) doplněny návary (A); III.) doplnění nános ve vstupu do komory (B); IV.) doplněna detailní geometrie konce pece (C) [94].

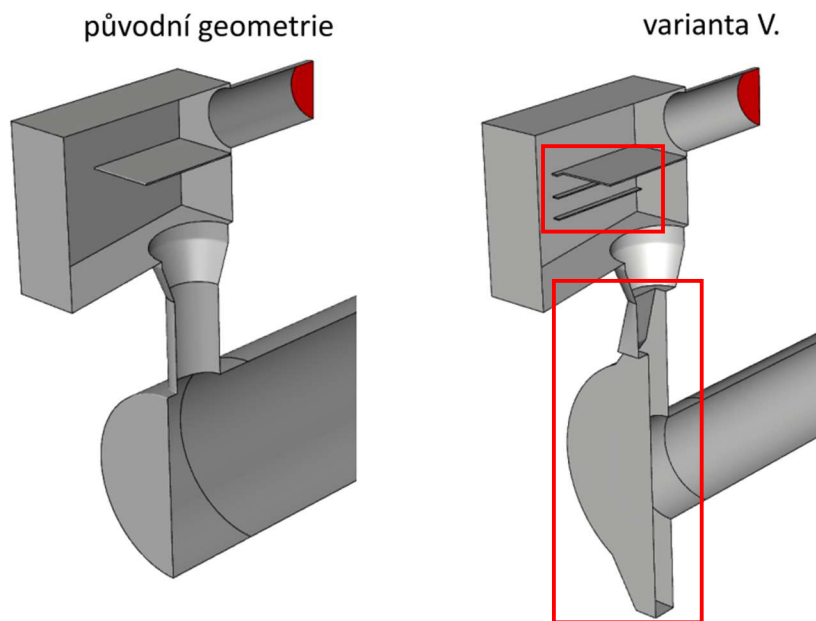
Doplnění nánosu ve vstupu do usazovací komory vedlo ke snížení množství částic ulpívajících na dně a horní straně přepážky, zatímco následné zahrnutí detailní geometrie

konce pece způsobilo vyšší predikované hmotnostní toky ulpívajících TZL na těchto plochách. Z toho důvodu byla otestována geometrická konfigurace V. bez zahrnutí nánosu ve vstupu do komory, ale s upravenou geometrií pece (viz Obr. 29 na další straně).

Pouhé zahrnutí detailní geometrie výstupu z pece (podobně jako zahrnutí nánosu), výrazně ovlivnila rozložení hustoty toku usazovaných částic, což poukazuje na potřebu správného zadání vstupního profilu rychlosti spalin a koncentrace částic.

Pro variantu V. výsledky již kvalitativně odpovídaly pozorovanému nánosu, zejména v poměrném množství částic usazovaných na dně komory a horní straně přepážky, při zachování části nánosu na bočních stěnách. Srovnání s variantou IV. tak ukazuje, že nános vede k větším rozdílům mezi pozorovaným a simulovaným rozložením intenzity zanášení. Bez přímého pozorování vývoje nánosu uvnitř komory v čase je obtížné rozhodnout, zda k této změně rozložení intenzity zanášení vlivem nánosu ve vstupu do komory opravdu došlo.

Varianta V. reprezentuje nejjednodušší změnu (resp. zpřesnění) modelové geometrie bez změny parametrů modelu zanášení, pro kterou byl zaznamenán výrazný kvalitativní souhlas. Zároveň tato varianta lépe odpovídá reálnému stavu zařízení. Byla tak byla použita pro následující práce. Výsledky simulací pro tuto variantu geometrie jsou zobrazeny v rámci kap. 4.4 (viz Obr. 33).



Obr. 29: Geometrie pece a usazovací komory použitá v simulacích v kap. 4.4, s naznačeným umístěním plochy pro vpouštění částic. Rámečky jsou vyznačeny změny.

V dalších kapitolách jsou, mimo simulace s variantou V. a původním modelem ulpívání, prezentovány výsledky citlivostní studie pro druhý model ulpívání, včetně jeho popisu. Důvodem pro implementaci a test tohoto modelu je užší souvislost mezi parametry modelu a mechanickými vlastnostmi částic a nánosu.

4.3 DRUHÝ MODEL ULPÍVÁNÍ

Pomocí UDF byl dále implementován model přímo využívající mechanické vlastnosti částic a stěny. Kromě pravděpodobnosti ulpění 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, z čehož první řeší normálový směr a druhá tečný směr a rotaci částice.

Kritérium pro ulpění částice, případně velikost normálové složky odrazné rychlosti poskytuje model [71] ze skupiny modelů kritické rychlosti. Je založen na energetické bilanci dopadající částice s uvažováním následujících ztrát:

- Ztráty vlivem rychlé deformace způsobené adhezí. V okamžiku dopadu částice dojde k náhlému poklesu síly, kterou na sebe tělesa vzájemně působí, v důsledku působení Van der Waalsových sil. Energie uložená ve vzniklých elastických deformacích je pak zčásti odnesena prostřednictvím elastodynamických vln šířících se stěnou.
- 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 dojde ke vzniku plastické deformace (*yield velocity*). 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.

$$v_s = 1,84 \left((2\Gamma/d_p)^5 / (\rho_p^3 E^{*2}) \right)^{1/6} \quad (43)$$

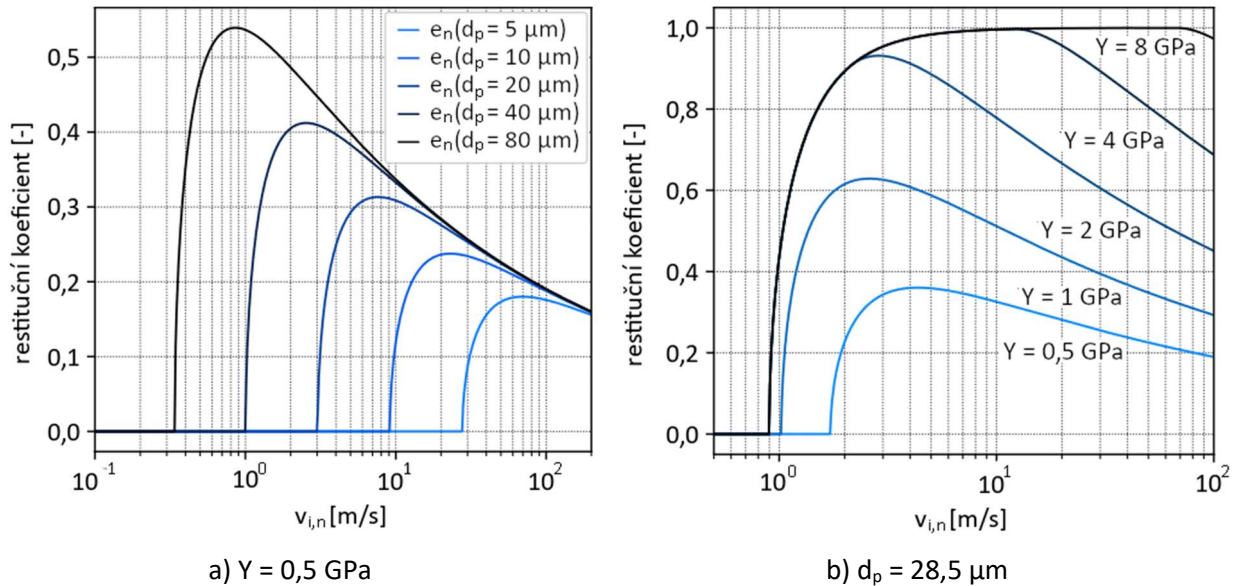
$$v_y = 1,56 \left(Y^5 / (\rho_p E^{*4}) \right)^{1/2} \quad (44)$$

Výstupem je v tomto případě normálový restituční koeficient e_n (viz níže na Obr. 30). Pro $v_i < v_s$ je $e_n = 0$. V opačném případě, je-li $v_i > v_y$

$$e_n = \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{5} \frac{6 - (v_y/v_i)^2}{\sqrt{1 + 2\sqrt{1,2 (v_i/v_y)^2 - 0,2}}} - (v_s/v_i)^2} \quad (45)$$

V případě $v_s < v_i < v_y$ je restituční koeficient

$$e_n = \sqrt{1 - (v_s/v_i)^2} \quad (46)$$



Obr. 30: Normálový restituční koeficient v závislosti na velikosti normálové složky dopadové rychlosti. $E^* = 50 \text{ GPa}$, $\rho_p = 2770 \text{ kg/m}^3$, $\Gamma = 0,2 \text{ J/m}^2$.

Tečný směr kolize je řešen pomocí modelu [23], který byl s pomocí experimentu odvozen pro případ popílků a ocelového povrchu (vybrané podmínky a vlastnosti jsou v Tab. 7).

Tab. 7: Zvolené podmínky pro experimentální stanovení závislosti poměru f/μ_f [23]

Velikost nedokonalostí povrchu	0,2 μm
Rozsah průměrů částic	47–53 μm
Testované dopadové rychlosti	2 m/s, 20 m/s; 3,4 m/s; 4,22 m/s
Rozsah testovaných úhlů	15°; 30°; 45°; 60°; 75°

Výstupy modelu jsou tečná složka odrazné rychlosti a velikost úhlové rychlosti po odrazu. K předpokladům patří tyto:

- Silové poměry tření mezi oběma povrchy jsou dány Coulombovým zákonem.
- Je znám restituční koeficient a součinitel dynamického tření.
- Částice mají kulový tvar.

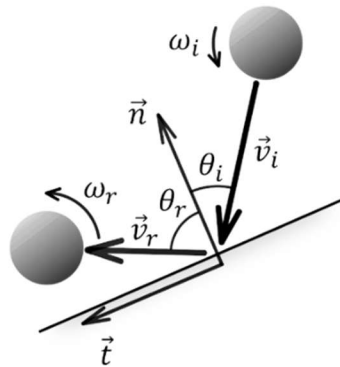
Modelování usazovací komory

- Povrch stěny i částic je dokonale hladký.
- Částice rotují podél osy kolmé na rovinu danou vektory \vec{n} a \vec{t} .

Model pro tečný směr dopadu (Obr. 31) vyžaduje zadání kritického bezrozměrného dopadového úhlu θ_c , dynamického součinitele smykového tření μ_f a empirické funkce popisující třecí účinky mezi oběma povrchy, která je pro případ popílků a nerezové stěny uvedena přímo v práci [23], kde proměnnou je bezrozměrný dopadový úhel θ_i .

$$f/\mu_f = 0,4462 - 0,6017 \tanh(0,9414 - 0,4241 \theta_i) \quad (47)$$

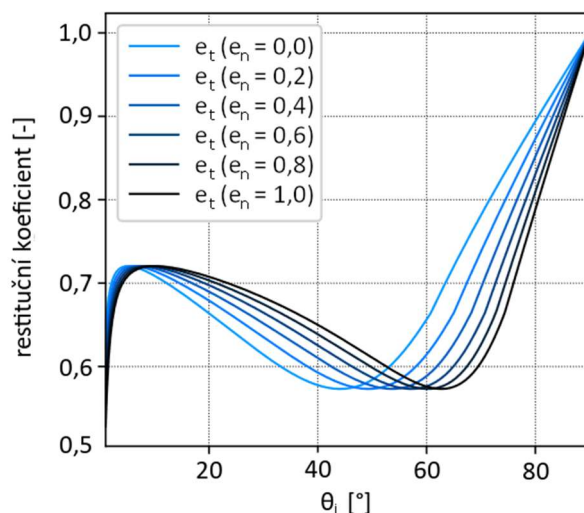
$$\theta_i = \frac{2 \tan \theta_i}{(1 + e_n) \mu_f} \quad (48)$$



Obr. 31: Veličiny popisující kinematiku dopadu částice na stěnu [23].

Je-li bezrozměrný dopadový úhel θ větší než θ_c , částice klouže po povrchu celou dobu kontaktu. V opačném případě je částice buďto zachycena nebo se valí po povrchu stěny. Pro popílek a nerezovou stěnu je $\theta_c = 0,593$ [23]. Výstupem jsou pak restituční koeficient pro tečný směr pohybu e_t a úhlová rychlost odražené částice. Pro velké dopadové úhly klesá ztráta kinetické energie částice k nule, resp. e_t se blíží k 1 (Obr. 33).

$$e_t = 1 - \frac{2 f}{\Theta_i \mu_f} \quad (49)$$



Obr. 32: $e_t(\theta_i)$ pro vybrané hodnoty normálového restitučního koeficientu. $\mu_f = 0,6$; $\Theta_c = 0,593$.

4.4 CITLIVOSTNÍ STUDIE OBOU MODELŮ ULPÍVÁNÍ

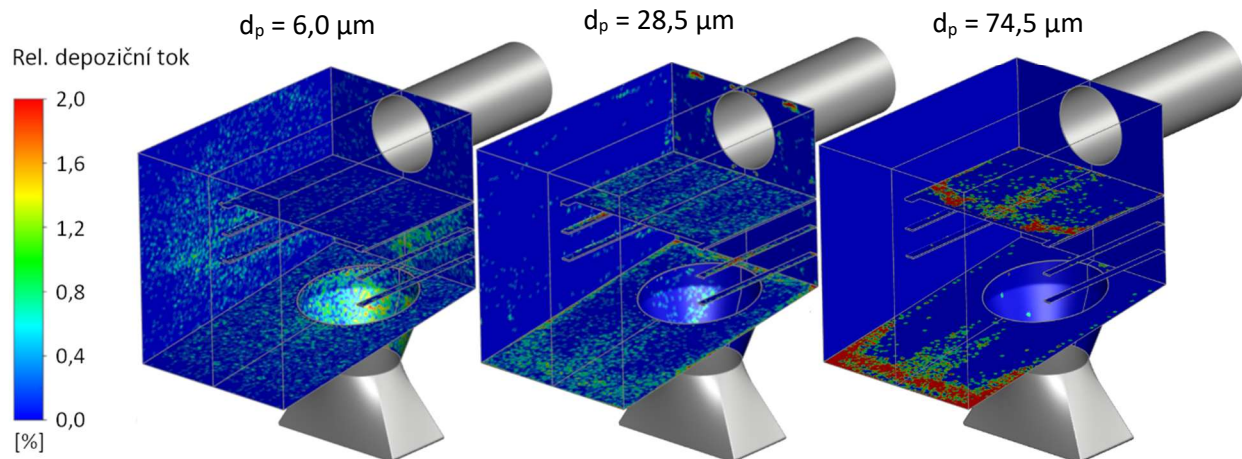
Byla simulována depozice šesti frakcí částic s cílem provedení citlivostní studie vždy pro tři zvolené parametry obou modelů ulpívání a kvalitativního porovnání rozložení hustoty toků deponované hmoty. Střední hodnoty parametrů jsou uvedeny v Tab. 8.

Tab. 8: Střední hodnoty parametrů použité v citlivostní studii.

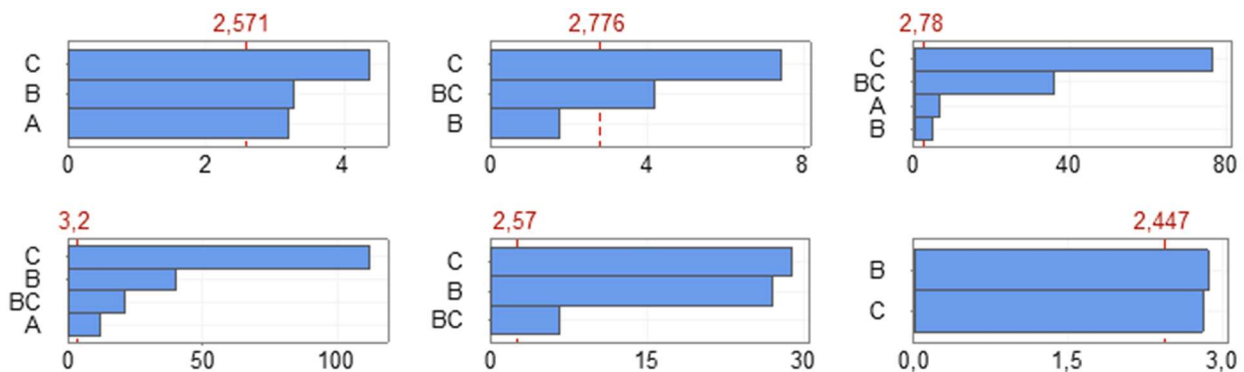
Parametr	B	n	d_{ref}	E^*	Y	Γ
Hodnota	10–17 N m	2	17,53 μm	50 GPa	0,5 GPa	0,2 N m ⁻²
Reference	[15]	[15]	[86]	[4]	[71]	[4]

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. Studie jsou provedeny a popsány pro oba modely zvlášť vzhledem k tomu, že skupiny testovaných parametrů příslušících k oběma modelům nutně nezodpovídají za tytéž vlastnosti stěny nebo částic. Výstupy simulací posloužily pro faktorovou analýzu s využitím softwaru Minitab 19. U prvního modelu byla testována konstanta B ve výpočtu Van der Waalsovy síly a dále exponent n a referenční průměr d_{ref} ve výpočtu elastické odrazné síly. Vliv změny zbylých parametrů G a y bylo možné zahrnout prostřednictvím d_{ref} a B . 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 [23].

Modelování usazovací komory



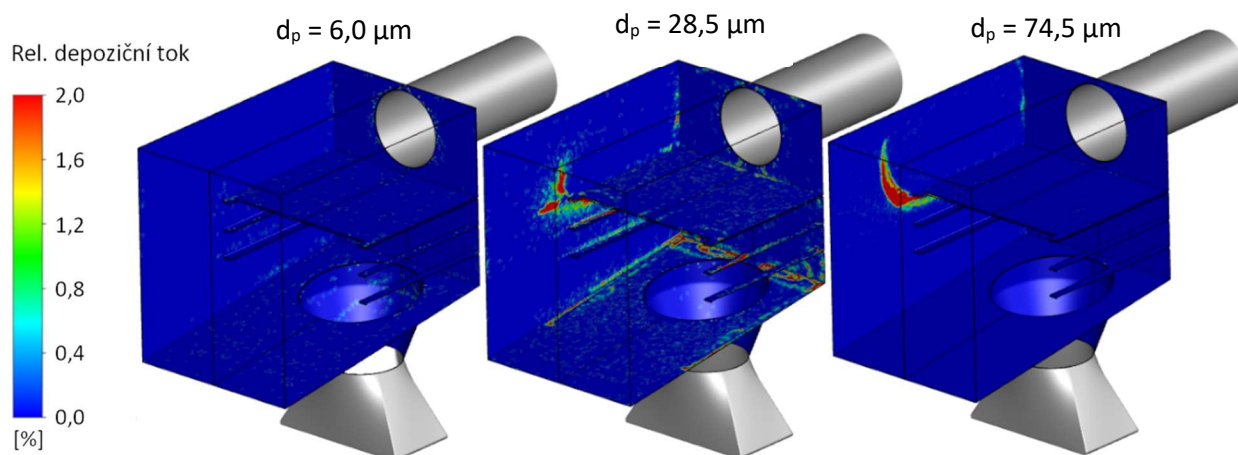
Obr. 33: Podíl lokální hodnoty depozičního toku a maximální hodnoty zjištěné v usazovací komoře pro první model ulpívání [88].



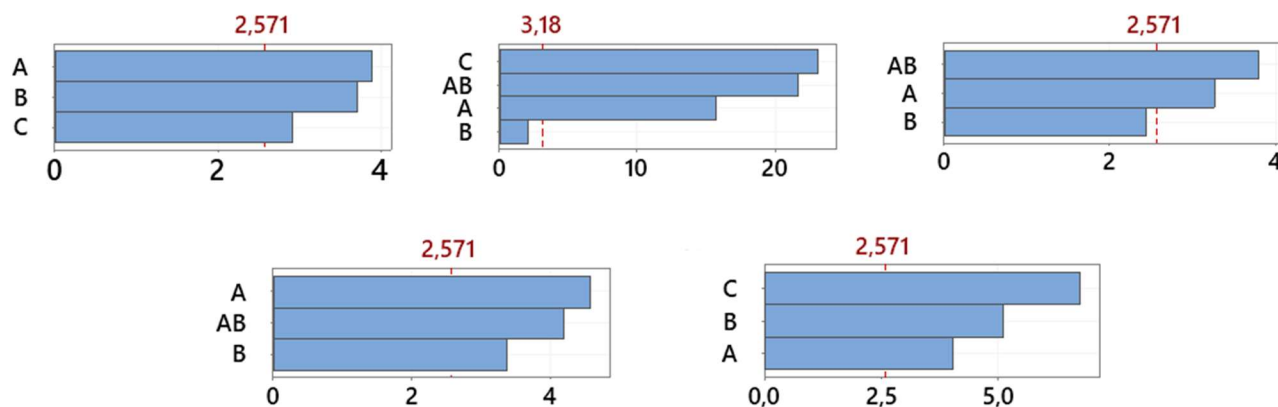
Obr. 34: Standardizované účinky významných parametrů prvního modelu ulpívání. (A) označuje konstantu Van der Waalsovy síly B , (B) označuje exponent n , (C) označuje referenční průměr částic d_{ref} . Kombinace symbolů označují interakci parametrů [88].

První model ulpívání (viz výše Obr. 33 a Obr. 34) predikoval výrazné usazování částic na dně a horní straně přepážky, zejména pro hrubé částice. Intenzivní usazování na těchto plochách odpovídá pozorovaným nánosům v usazovací komoře. Citlivostní studie ukázala následující:

- Změna velikosti Van der Waalsovy síly prostřednictvím B má významný dopad na usazování malých částic.
- Depozice vlivem tíhové síly vede k výraznému ulpívání částic na dně a horní straně přepážky. Na těchto plochách i bočních stěnách o odrazu částice rozhoduje elastická síla \vec{F}_{el} skrze změnu velikosti dopadové rychlosti.
- Velikost \vec{F}_{el} se ukázala jako významná pro všechny frakce částic. Je dána dvěma testovanými parametry, z nichž jako významnější se jeví d_{ref} .



Obr. 35: Podíl lokální hodnoty depozičního toku a maximální hodnoty zjištěné v usazovací komoře pro druhý model ulpívání [88].



Obr. 36: Standardizované účinky významných parametrů druhého modelu ulpívání [88]. (A) označuje efektivní modul pružnosti, (B) statickou mez kluzu a (C) povrchovou energii kontaktu částice a stěny. Kombinace symbolů označují interakci parametrů.

U druhého modelu (viz výše Obr. 35 a Obr. 36) 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. Studie ukázala následující:

- Pro průměr částic $41,5 \mu\text{m}$ se neukázal jako významný žádný ze tří parametrů.
- Efektivní modul pružnosti a statická mez kluzu se ukázaly jako významné pro všechny částice (s výjimkou průměru $41,5 \mu\text{m}$).

- Povrchová energie se ukázala jako významná pro průměry (6 a 14,5 μm) a dále pro největší částice (74,5 μm).

4.5 SHRnutí

Studie na citlivost na počet prizmatických vrstev sítě v blízkosti stěn usazovací komory ukázala relativně nízkou závislost hmotnostního toku usazovaných částic na jednotlivých plochách usazovací komory (s maximálním rozdílem 7 % hodnoty predikované na nejhrubší síti), přinejmenším v porovnání s rozdíly způsobenými změnou modelu usazování nebo úpravou modelové geometrie.

Citlivostní studie na změnu modelové geometrie ukázala značnou citlivost rozložení intenzity zanášení v komoře na vstupním profilu rychlosti a koncentrace částic. Byla vybrána nejvhodnější varianta geometrie na základě kvalitativního souhlasu s rozložením pozorovaných nánosů.

Studie na citlivost parametrů dvou modelů ulpívání poukázala na rozdíly ve významu vlivu parametrů dle velikosti částic. Faktorová analýza ukázala pro oba modely interakci parametrů charakterizujících elastickou (případně plastickou) deformaci částic a povrchu stěny a zanedbatelné interakce s parametry odpovědnými za adhezi. Srovnání výstupů obou modelů ukazuje pro oba modely kvalitativní souhlas s pozorovanými nánosy. První model predikuje vyšší intenzitu zanášení na dně a horní straně přepážky komory a v případě komory tak lépe predikuje místa s nejvyšší intenzitou zanášení.

Hlavním výstupem je tak zjištění praktické použitelnosti uvedeného modelu zanášení mikronovými částicemi popítku 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 dat 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 nánosů a na významu mohou nabývat doprovodné jevy, které mohou zvyšovat tendenci částic k ulpívání (např. vícenásobný odraz částice či deformace nánosů). To je zohledněno v následující kapitole.

5 MODELOVÁNÍ VÝMĚNÍKU

Výsledky z předcházející kapitoly ukázaly možnost predikovat počáteční fázi tvorby nánosu na hladkých, nechlazených plochách. Pro simulace geometricky složitých teplosměnných ploch je vhodné i na základě výsledků dostupných z literatury zahrnout další transportní jevy a mechanismy ulpívání. Výměník (viz kap. 3) představuje příklad takové teplosměnné plochy. Zde je možné použít některá zjednodušení aplikovaná v pracích zabývajících se CFD modelováním zanášení, např. [16].

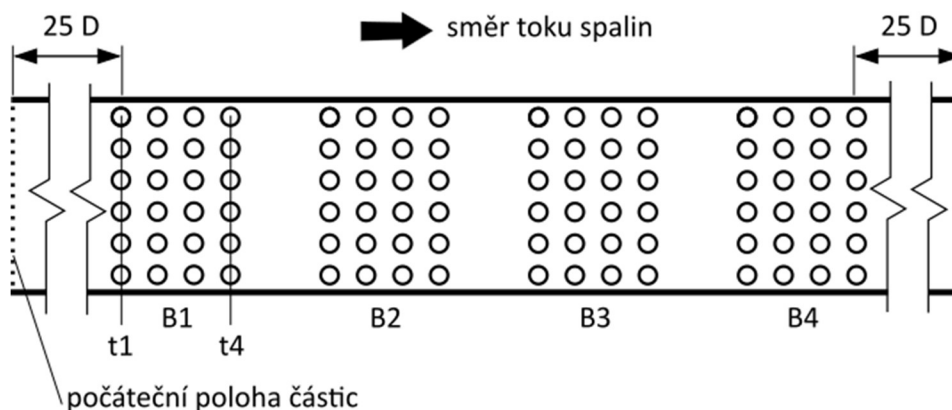
Výměník představuje prostředí s relativně nízkými teplotami spalin (dle měření v rozmezí 150 až 350 °C). Kondenzující látky (typické pro biomasu a odpady), tj. KCl [34, 41] a Na₂SO₄ [26] se v podobě diskretních částic nebo jako povlak na povrchu částic nebo stěn nachází v pevném skupenství [4] a ovlivňují tak lepivost povrchů změnou mechanických vlastností (nikoli skrze kapilární jevy). Předpoklad ukončené kondenzace za vyšších teplot na přehříváku uhelného kotle byl úspěšně použit např. v [15]. V poslední zmíněné práci je demonstrován i vliv odrazu částic a jejich pronikání do mezitrubkových prostorů. Vedle turbulentní disperze jde o hlavní způsob usazování částic s $d_p > 10 \mu\text{m}$ na zadních stěnách trubek. 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 [50].

5.1 GEOMETRIE A OKRAJOVÉ PODMÍNKY

Při modelování výměníku je přestup tepla zohledněn zadáním teplotně závislých vlastností spalin a přítomnosti termoforetické síly ovlivňující usazování částic s průměry méně než 10 μm . Kvůli potřebě použití výrazně jemnější výpočtové sítě oproti usazovací komoře je model výměníku zjednodušen do dvou rozměrů (Obr. 37).

Proudění a pohyb částic jsou simulovány v rovině souměrnosti hlavního kanálu výměníku. Vzdálenost vstupu spalin v modelu je zvolena jako 25násobek průměru trubky ($D = 25 \text{ mm}$), stejně jako ve studii [38] zaměřené na jedinou trubku. Pro vpouštění částic slouží 1000 rovnoměrně rozmístěných bodů v těsné blízkosti vstupu spalin. Počáteční rychlost částic je rovna rychlosti spalin.

Modelování výměníku



Obr. 37: Podélný řez hlavním kanálem trubkového výměníku [90].

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 (Tab. 9).

Tab. 9: Teploty na vnitřním povrchu trubek v místě řezu. Označení trubek a trubkových svazků dle Obr. 37.

T_w [°C]	t1	t2	t3	t4
B1	35,5	32,2	28,8	25,5
B2	32,3	29,9	27,4	25,0
B3	30,7	28,7	26,8	24,8
B4	29,1	27,6	26,1	24,6

Vlastnosti stěny jsou určeny pro nerezovou ocel [9]. Virtuální tloušťka stěny v okrajové podmínce vedení tepla stěnou je dle experimentálního zařízení volena 2,9 mm. Tepelná vodivost stěny je 57 W/(K m), hustota 7850 kg/m³ a měrná tepelná kapacita 430 J/(kg K). Vlastnosti spalin (Tab. 10) jsou stanoveny z hmotnostní bilance spalovacího procesu v rotační peci a naměřeného hmotnostního průtoku s pomocí vztahů pro směs ideálních plynů [51]. Dle měření je hmotnostní průtok na vstupu 0,138 kg/s a teplotu 315 °C. Intenzita turbulence je určena za předpokladu plně vyvinutého turbulentního proudění jako 4,9 % [51].

Tab. 10: Složení spalin použité pro zadání okrajových podmínek.

	N ₂	O ₂	H ₂ O	CO ₂
hm. zlomek	71,3 %	15,2 %	6,0 %	7,6 %

Z naměřené koncentrace částic na vstupu do výměníku, hmotnostního průtoku spalin a jejich hustoty je určen hmotnostní průtok částic na vstupu do výměníku 11,1 mg/s. Rozložení velikostí částic je zadáno shodně s usazovací komorou (kap. 4).

5.2 NASTAVENÍ NUMERICKÉHO MODELU

Pro simulace proudění je použit SST $k-\omega$ 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 v následujícím textu 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 \rightarrow částice) pro jedno nastavení parametrů modelu ulpívání trval méně než 30 minut pro nejjemnější síť (viz Tab. 11 dále) pro 600 000 vpuštěných částic.

5.3 VLIV DRSNOSTI A PŘÍTOMNOSTI VRSTVY ZKONDENZOVANÝCH PAR

Model [89] 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 . Pro nános složený z přibližně kulových částic lze vyjádřit tyto parametry z hmotnostních podílů částic z jednotlivých frakcí a jejich průměrů. Pro N možných průměrů částic a známý součet hmotnosti částic, které mají jeden z těchto průměrů m_i (jednotlivé částice o průměru $d_{p,i}$ mají hmotnost $m_{p,i}$). $N_{p,i}$ je počet částic o i -tém průměru usazených za jednotku času a L je vyhodnocovaná délka profilu.

$$Ra = \frac{\pi}{8L} \sum_{i=1}^N N_{p,i} d_{p,i}^2 \quad (50)$$

$$Rq = \sqrt{\frac{1}{12L} \sum_{i=1}^N N_{p,i} d_{p,i}^3} \quad (51)$$

$$Rsm = L / \sum_{i=1}^N N_{p,i} \quad (52)$$

$$L = \sum_{i=1}^N N_{p,i} d_{p,i} \quad (53)$$

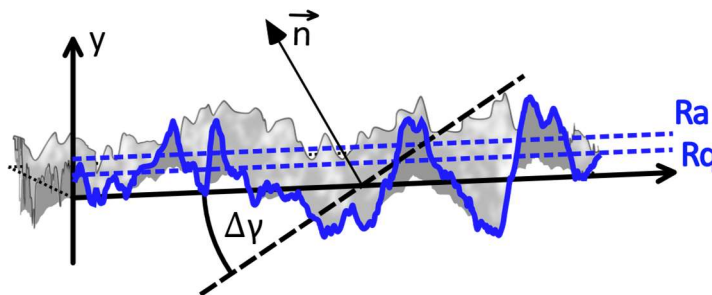
V modelu je uvažována pouze odchylka v rovině definované vektory \vec{n} a \vec{t} . Dle [89] má úhlová odchylka normální rozdělení pravděpodobnosti s průměrnou hodnotou rovnou nule. Směrodatná odchylka σ_γ je odvozena z parametrů drsnosti [51].

$$\sigma_\gamma = \begin{cases} \operatorname{atan}\left(2 \frac{Rq}{Rsm}\right) & d_p < Rsm / \sin\left(\operatorname{atan}\left(2 \frac{Rq}{Rsm}\right)\right) \\ \operatorname{atan}\left(2 \frac{Ra}{RS_m}\right) & \text{jinak} \end{cases} \quad (54)$$

Model drsné stěny (Rough Wall Model) je přímo implementován v programu ANSYS Fluent [51]. Verze modelu v programu Fluent však umožňuje zadání pouze konstantních hodnot parametrů drsnosti, což nevyhovuje případům prostorově proměnného zastoupení (poměru hmotností) částice o průměrech $d_{p,i}$. Z tohoto důvodu je upravená verze modelu schopná uvažovat prostorově proměnné hodnoty parametrů Ra , Rq a Rsm implementovaných jako součást modelu usazování částic pomocí UDF, představující knihovnu funkcí v jazyce C.

Úhel dopadu částice pozměněn o hodnotu $\Delta\gamma$ (viz Obr. 38). Pro každý dopad částice je tento úhel získán ze směrodatné odchylky σ_γ a náhodného čísla ζ s normálním rozdělením pravděpodobnosti, nulovou střední hodnotou a směrodatnou odchylkou rovnou jedné. Pro tyto účely je dostupná funkce `gauss_random()`, která je součástí knihovny funkcí a maker přímo dostupných pro psaní UDF v programu Fluent.

$$\Delta\gamma = \sigma_\gamma \zeta \quad (55)$$



Obr. 38: Model drsné stěny: naklonění roviny dopadu částice o úhel $\Delta\gamma$.

5.3.1 STUDIE CITLIVOSTI NA SÍTI

Práce [38] 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 – výška buněk δ_0 přiléhajících ke stěně trubky (konstantní po celém obvodu 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 , která je určena z průměru trubky D , rychlosti nenarušeného proudu $u_{g,\infty}$ a vlastností plynu prostřednictvím Reynoldsova čísla Re_{tube} .

$$\delta_1 = 0,324 D Re_{tube}^{-0,5} \quad (56)$$

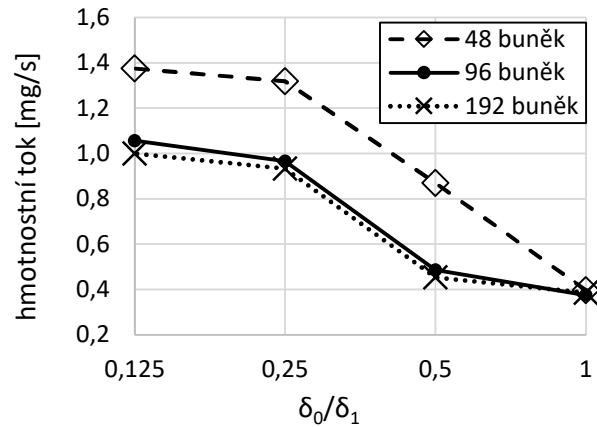
$$Re_{tube} = \rho_g u_{g,\infty} D / \mu_g \quad (57)$$

V následujícím textu je popsána podobná studie citlivosti na tyto dva parametry (δ_0 , N_C) pro dvourozměrný model výměníku. Oba parametry jsou shodné pro všechny trubky. Sledovány jsou celkový tok usazovaných částic na všech trubkách \dot{m}_{dep} a teplota spalin na výstupu. δ_0 a N_C pro dvanáct testovaných sítí jsou zobrazeny v Tab. 11. Průměrná hodnota teploty na spalin na výstupu je 175,3 °C s maximálním rozdílem mezi dvěma z testovaných sítí 3,4 °C. Tento rozdíl je dále považován za zanedbatelný a sítě nejsou na základě teploty porovnávány. Nejmenší zadaná výška stěnové buňky (31 μm) je nižší než poloměr největší částice (38 μm), které tak pro malé dopadové úhly mohou být nesprávně identifikovány jako částice míjející stěnu, ačkoli by mělo dojít k jejich dopadu díky intercepci (viz kap. 2.1.1).

Pro další simulace byla vybrána síť s 96 buňkami po obvodu trubky a výšce stěnových buněk $\delta_1/4$. Výška buňky odpovídá doporučení v [38].

Tab. 11: Charakteristika testovaných sítí y^+ .

N_C	δ_0 [mm]	počet buněk sítě	\bar{y}^+	y_{max}^+
48	0,248	127798	1,26	3,05
	0,124	136913	0,62	1,57
	0,062	154041	0,34	0,90
	0,031	170612	0,17	0,47
96	0,248	222459	1,25	3,06
	0,124	242275	0,65	1,70
	0,062	276604	0,34	0,91
	0,031	309203	0,17	0,47
192	0,248	474215	1,25	3,07
	0,124	526564	0,67	1,70
	0,062	580965	0,35	0,91
	0,031	644023	0,18	0,47



Obr. 39: Hmotnostní tok usazovaných částic na všech trubkách výměníku v závislosti na δ_0 .

5.3.2 ZMĚNY MNOŽSTVÍ USAZENÉ HMOTY PŘI ZAHRNUTÍ DRSNOSTI A KCl

Porovnání bylo provedeno 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. 12). Teploty po celém objemu výměníku jsou nižší než bod tuhnutí KCl [41].

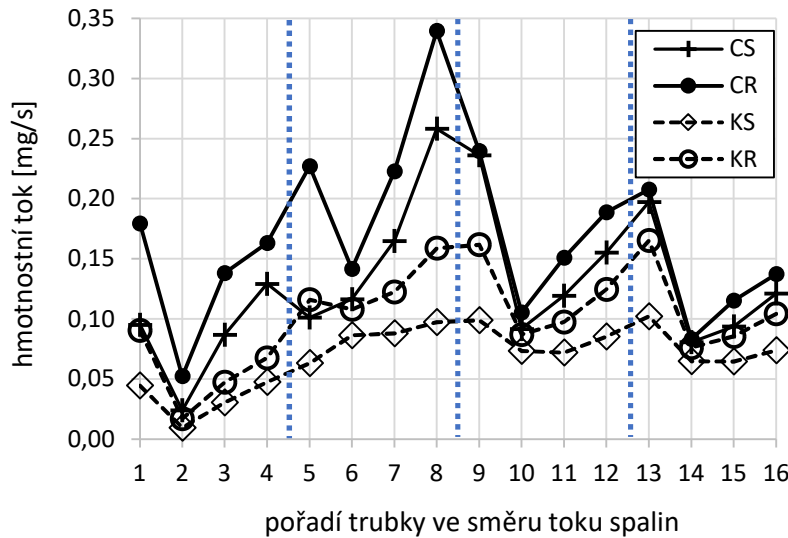
Tab. 12: Parametry modelu ulpívání částic pro případ čistých částic a částic pokrytých vrstvou KCl.

	Čistý povrch [39]	Povrch pokrytý KCl
Γ [N/m ²]	0,13	0,11 [90]
E^* [GPa]	192	30 [4]
Y [MPa]	38	38 [39]

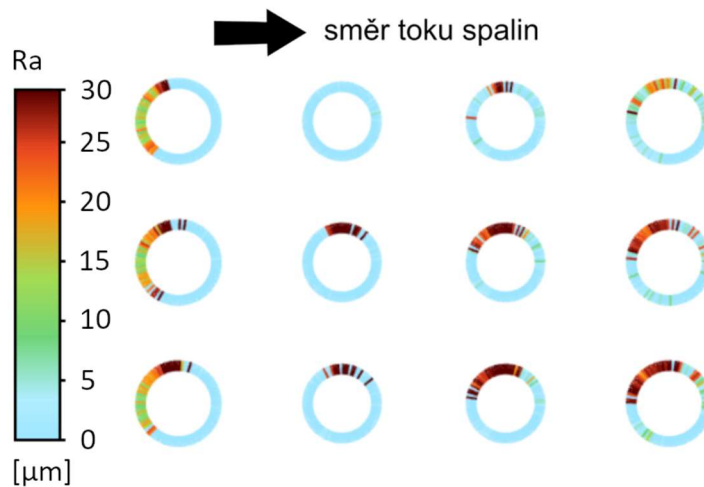
Níže jsou porovnány výsledky pro čtyři možné kombinace přítomnosti vrstvy KCl a drsnosti povrchu nánosu. Parametry drsnosti byly určeny iteračně. Na počátku byla zadána hodnota 0 pro Ra , Rq i Rsm (tj. čistá stěna). Po provedení simulace byly parametry přepočteny z přírůstků hmotnosti usazených částic z jednotlivých frakcí. Výpočet byl opakován do dosažení relativní chyby \dot{m}_{dep} mezi dvěma iteracemi méně než 1 %. Nedošlo-li k zachycení žádné z částic, pak byly parametry drsnosti položeny rovno 0. 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. 13). Srovnání toků usazované hmoty ukazuje nejvyšší rozdíly pro první dva trubkové svazky.

Tab. 13: Simulované hmotnostní toky usazovaných částic pro čtyři nastavení modelu usazování.

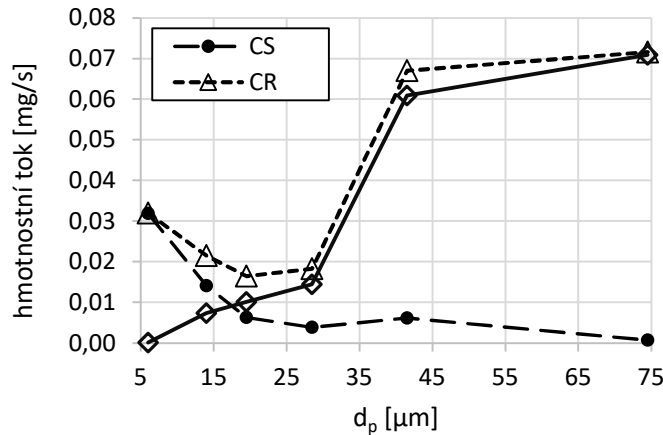
\dot{m}_{dep} [mg/s]		drsnost	
		ne	ano
KCl	ne	2,071	2,692
	ano	1,102	1,629



Obr. 40: Hmotnostní toky usazovaných částic na nad sebou ležících úsecích trubek [91]. (CS) čisté částice + hladké stěny, (CR) čisté částice + drsné stěny, (KS) částice a nános pokryté KCl + hladké stěny, (KR) částice a nános pokryté KCl + drsné stěny. Modré linie ohraničují trubkové svazky



Obr. 41: Ra pro druhou až čtvrtou trubku (počítáno směrem ode dna spalínovodu) v prvním trubkovém svazku (svazek B1). Šipka znázorňuje směr toku spalin [91].



Obr. 42: Hmotnostní tok usazovaných částic v závislosti na průměru [91]. (CS) čisté částice + hladká stěna, (CR) čisté částice + drsná stěna.

Z výsledků (jež prezentují výše uvedené Obr. 40, Obr. 41 a Obr. 42) je vyvozeno následující:

- Síť musí být v blízkosti dostatečně zjemněna s ohledem na omezení závislosti \dot{m}_{dep} na síti. Výška buněk v mezní vrstvě by měla být nejvýše čtvrtina odtlačovací tloušťky mezní vrstvy, v souladu s výsledky simulací dopadu částic popílku na jediný válec [38]. Jako nejnižší počet buněk na obvodu trubky se jeví 96.
- 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 přítomnosti 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 % v porovnání s hladkými povrchy. Model drsné stěny mění pouze směr normálového vektoru povrchu vůči dopadajícím částicím. V případě zohlednění např. vícenásobného kontaktu částice a stěny lze očekávat další nárůst míry zanášení.

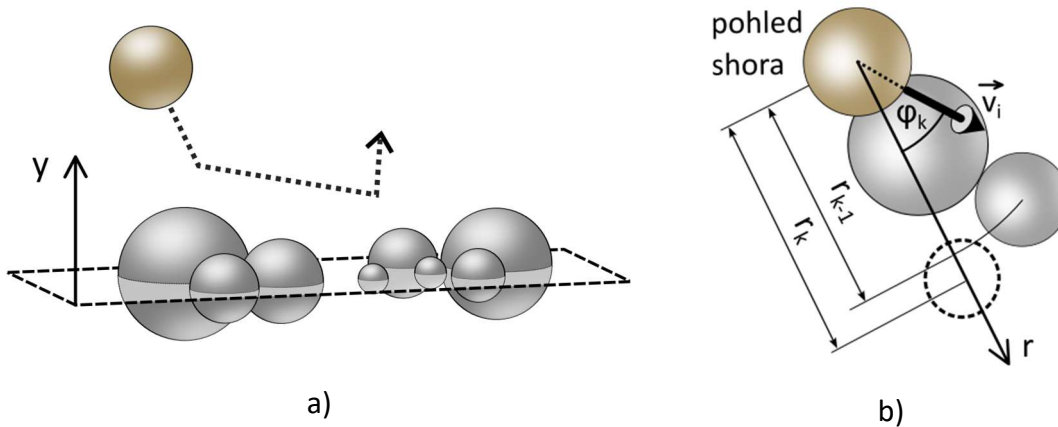
5.4 VÍCENÁSOBNÁ KOLIZE A DEFORMACE NÁNOSU

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 částice od zanášeného povrchu. Obojí vede k vyšší míře zanášení [92].

5.4.1 MODEL NÁHODNĚ UMÍSTĚNÝCH KULOVÝCH ČÁSTIC

Model [92] zohledňuje možnost vícenásobné kolize dopadající částice a nánosu, který je představován vzájemně se nepřekrývajícími kulovými částicemi se středy v rovině rovnoběžné s původním povrchem stěny, dále zvaná jako střední rovina (Obr. 43 a).

První částice je náhodně umístěna tak, že se průměty kolmo na povrch stěny obou částic zčásti překrývají (Obr. 43 b). Poloha usazené částice je vyjádřena ve válcových souřadnicích. Úhlová souřadnice $\varphi = 0^\circ$ reprezentuje tečný směr pohybu částice a y je souřadnice vyjadřující kolmou vzdálenost středu dopadající částice od střední roviny.



Obr. 43: Model náhodně umístěných kulových částic; (a) umístění usazených částic se středy ležícími ve střední rovině, (b) poloha nově umísťované částice.

Index k označuje nově umísťovanou částici. Radiální souřadnice r_k je určena pomocí modifikace výpočtu vzdálenosti k -té nejbližší bodové částice od počátku soustavy souřadnic [93]. ξ_r je náhodné reálné číslo s rovnoměrným rozložením pravděpodobnosti na intervalu $\langle 0; 1 \rangle$, \bar{N} je počet částic na jednotku plochy povrchu stěny a $\varphi_{m,k}$ je maximální velikost úhlové souřadnice částice. Úhlová souřadnice φ_k závisí na náhodném čísle ξ_φ s rovnoměrným rozložením pravděpodobnosti na intervalu $\langle -1; 1 \rangle$.

$$r_k = \sqrt{r_{k-1}^2 - \ln\left(\frac{1 - \xi_r}{\varphi_{m,k-1} \bar{N}}\right)} \quad (58)$$

$$\bar{N} = \sum_k N_k \frac{\dot{m}_{dep,k}}{\dot{m}_{dep,tot}} \quad (59)$$

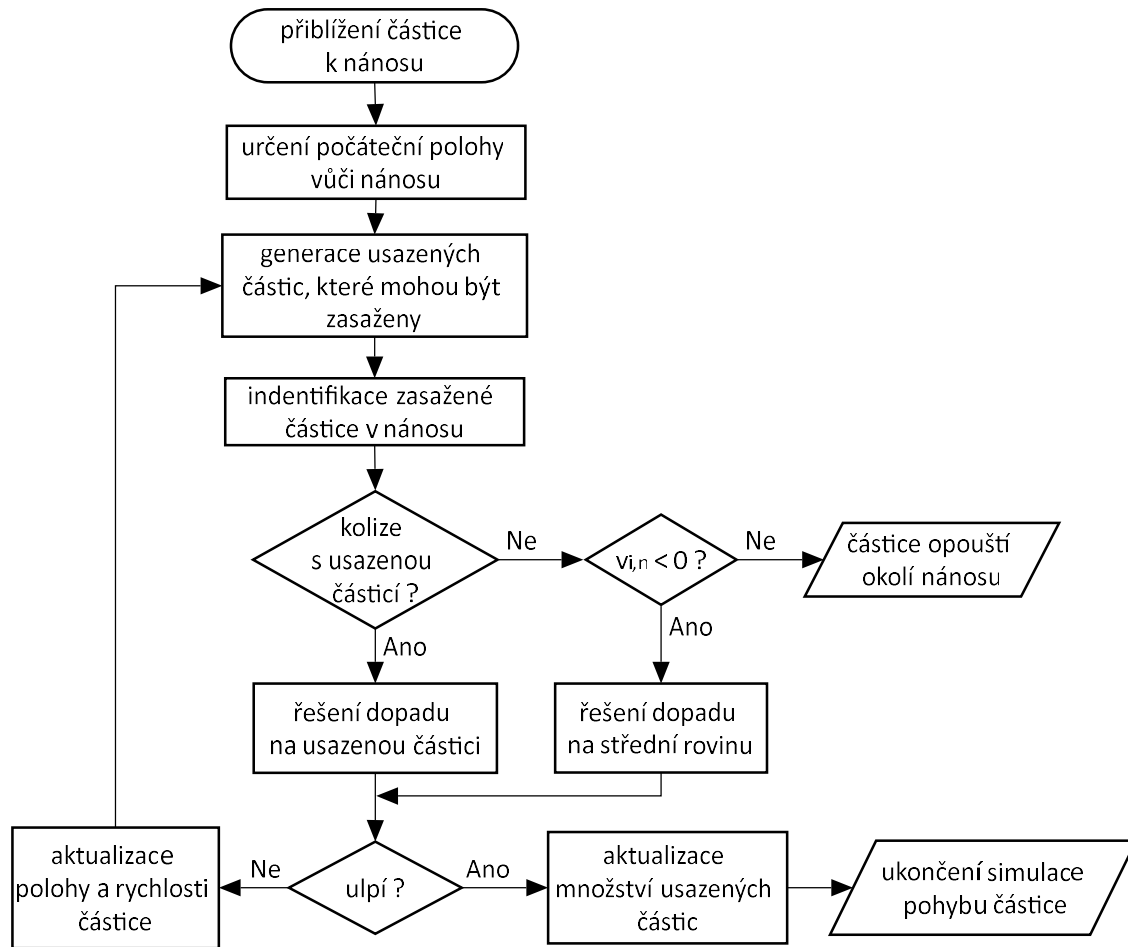
$$\varphi_{m,k} = \xi_\varphi \max\left[\frac{\pi}{2}; \operatorname{asin}\left(\frac{r_k}{R_{imp} + R_{max}}\right)\right] \quad (60)$$

Při překryvu nově přidané částice s některou z umístěných je náhodně zvolena nová úhlová souřadnice a postup je opakován, dokud není nalezena hodnota souřadnice, pro kterou k překryvu nedojde. Během pokusů je radiální souřadnice postupně zvyšována o $(R_j + R_{j-1})/(N_{try} - 1)$. N_{try} je maximální počet pokusů k umístění částice. Je-li $r_k > l$, nemůže už dojít ke kolizi dopadající a umístěné částice, umístování částic je pro daný dopad ukončeno a odražená částice opouští okolí stěny. R_{imp} je poloměr dopadající částice, R_{max} je poloměr největší částice na povrchu nánosu a y_{imp} je normálová souřadnice dopadající částice. α je dopadový úhel částice vůči společné tečné rovině dopadající a zasažené částice.

$$l = \begin{cases} (y_{imp} - R_{imp}) / \tan \alpha & \alpha > 0 \\ (R_{max} + R_{imp} - y_{imp}) / \tan \alpha & \alpha < 0 \end{cases} \quad (61)$$

Postup výpočtu (Obr. 44) lze popsat takto:

- Dojde k přiblížení částice k povrchu nánosu. Kolmá vzdálenost dopadající částice od střední roviny je rovna součtu poloměru dopadající částice a poloměru největší částice, která se může vyskytnout v nánosu.
- Je použit výše uvedený postup pro rozmístění částic.
- Částice je přemístěna do místa, kde dojde ke kolizi s některou z usazených částic. Pokud by nemělo dojít ke kolizi s žádnou z usazených částic, pak je kolize uvažována mezi dopadající částicí a střední rovinou za pomoci Modelu drsné stěny (kap. 5.2).
- Pokud trajektorie částice neprotíná střední rovinu, výpočet odrazu je ukončen a částice je uvažována jako opouštějící okolí povrchu nánosu.
- Je řešen odraz nebo ulpění částice dle použitého modelu (v tomto případě [88]).
- Dojde-li k odrazu částice, je provedena transformace souřadného systému tak, aby nová souřadnice odražené částice v okamžiku kolize byly $r = 0$ a z zůstala zachována a zároveň je systém pootočen kolem osy y tak, aby souřadnice $\varphi = 0^\circ$ odpovídala tečnému směru pohybu odražené částice.



Obr. 44: Model náhodného umístění kulových částic v kombinaci s modelem drsné stěny [92].

5.4.2 MULTI-BODY COLLISION MODEL

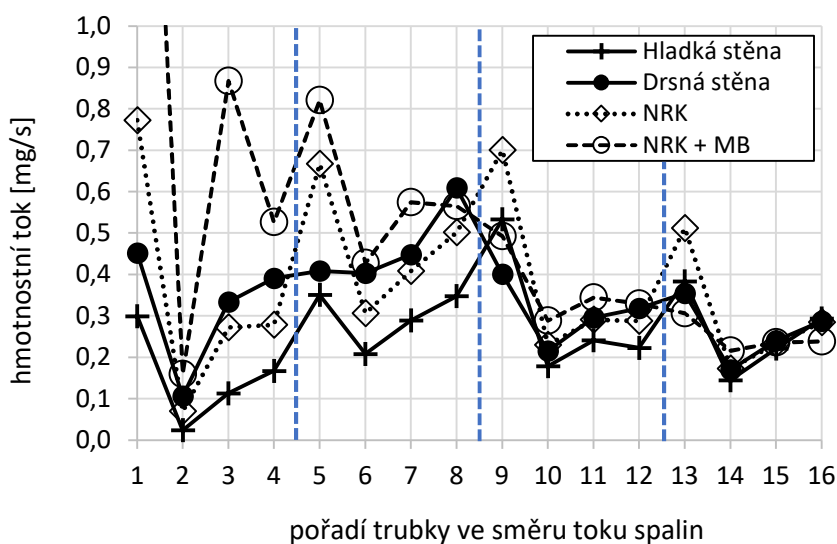
Multi-body collision model [50] uvažuje kolizi částice a nánosu jako kolizi dvou koulí. Rychlost a hmotnost první z nich odpovídá dopadající částici, druhá má pak hmotnost C_m -násobku hmotnosti dopadající částice a její počáteční rychlost je rovna nule. Po jejich kolizi je rychlost první z nich považována za rychlost odražené částice. Autoři [50] porovnávali vliv hodnoty konstanty C_m a identifikovali vhodný rozsah hodnot 2,6 až 3,5. Horní hranice odpovídá shodné hmotnosti obou těles. Tato hodnota je použita pro porovnání v dále popsáných simulacích. Pro kontakt částic a nánosu s vysokým dynamickým třením je předpokládáno odvalování částic po povrchu nánosu.

$$v_{r,n} = v_{i,n} - (1 + e_n) \frac{C_m}{1 + C_m} v_{i,n} \quad (62)$$

$$v_{r,t} = v_{i,t} - \frac{2}{7} \frac{C_m}{1 + C_m} v_{i,t} \quad (63)$$

5.4.3 PROVEDENÉ SIMULACE

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). Nastavení numerického modelu bylo provedeno shodně s kap. 5.2. Pro zadání okrajových podmínek byla použita data z měření na experimentálním zařízení. Výpočtová síť byla shodná se sítí v kap. 5.3.1. Obdržené výsledky jsou přehledně uvedeny na Obr. 45 a v Tab. 14.

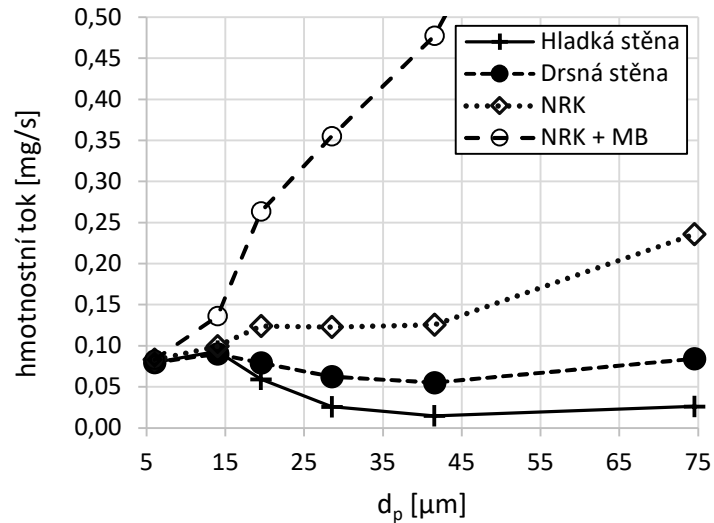


Obr. 45: Hmotnostní toky usazovaných částic na nad sebou ležících úsecích trubek [92]. (NRK) model náhodně rozmístěných kulových částic, (NRK+MB) NRK doplněný o *multi-body collision* model. Modré linie ohraničují trubkové svazky. Kvůli čitelnosti je svíslá osa omezena. Chybějící hodnota křivky NRK+MB v bodě 1 je 2,39 mg/s.

Tab. 14: 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

Největší rozdíly výsledků simulací jsou patrné na prvních trubkách každého svazku. Rozdíly v množství usazovaných částic pak značně závisí na průměru částic (Obr. 46).



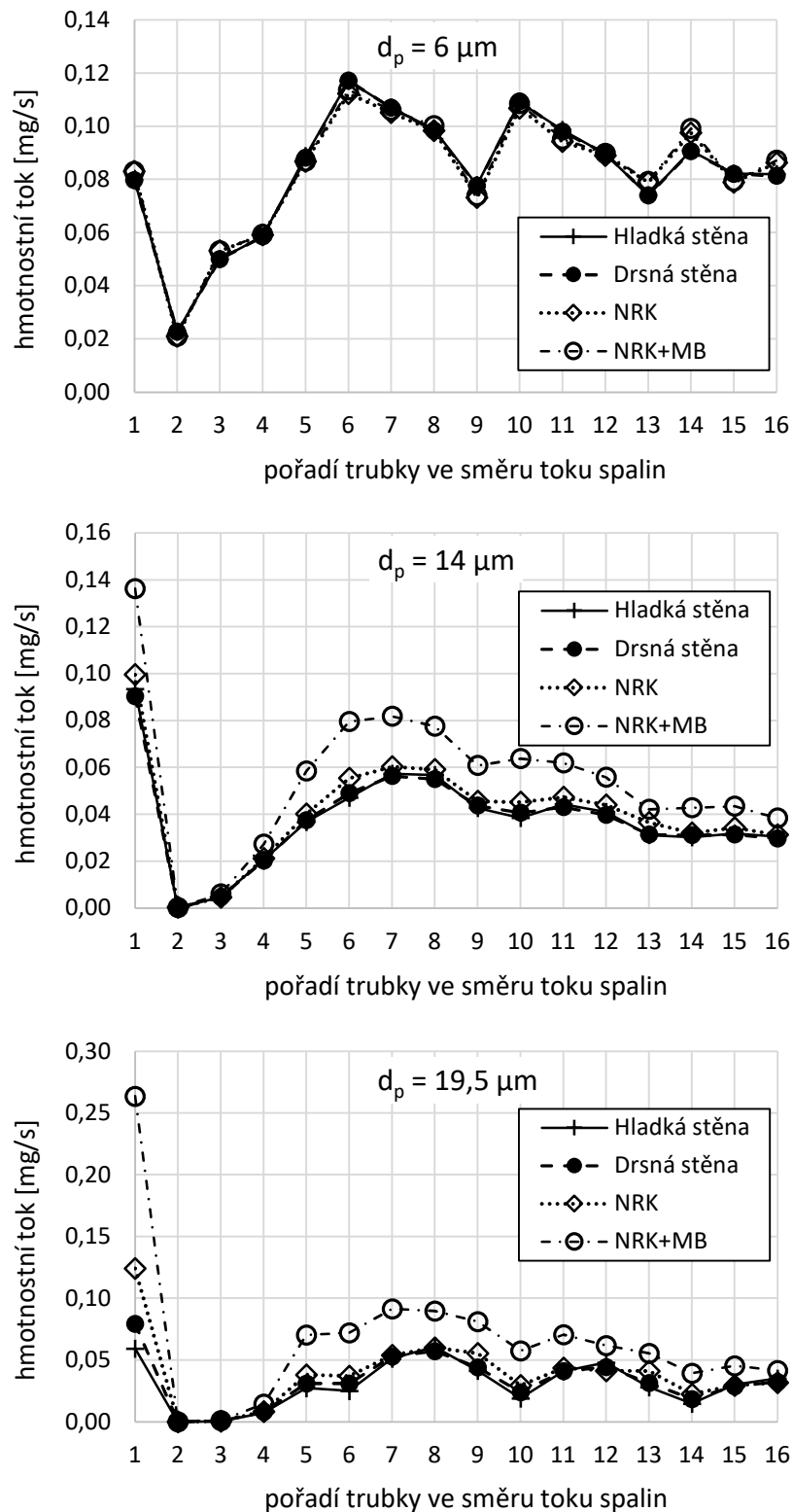
Obr. 46: Hmotnostní tok usazovaných částic v závislosti na průměru [92]. Kvůli čitelnosti je svislá osa omezena. Chybějící hodnota křivky NRK+MB ($d_p = 75 \mu\text{m}$) je 1,07 mg/s.

Z výsledků plyne následující:

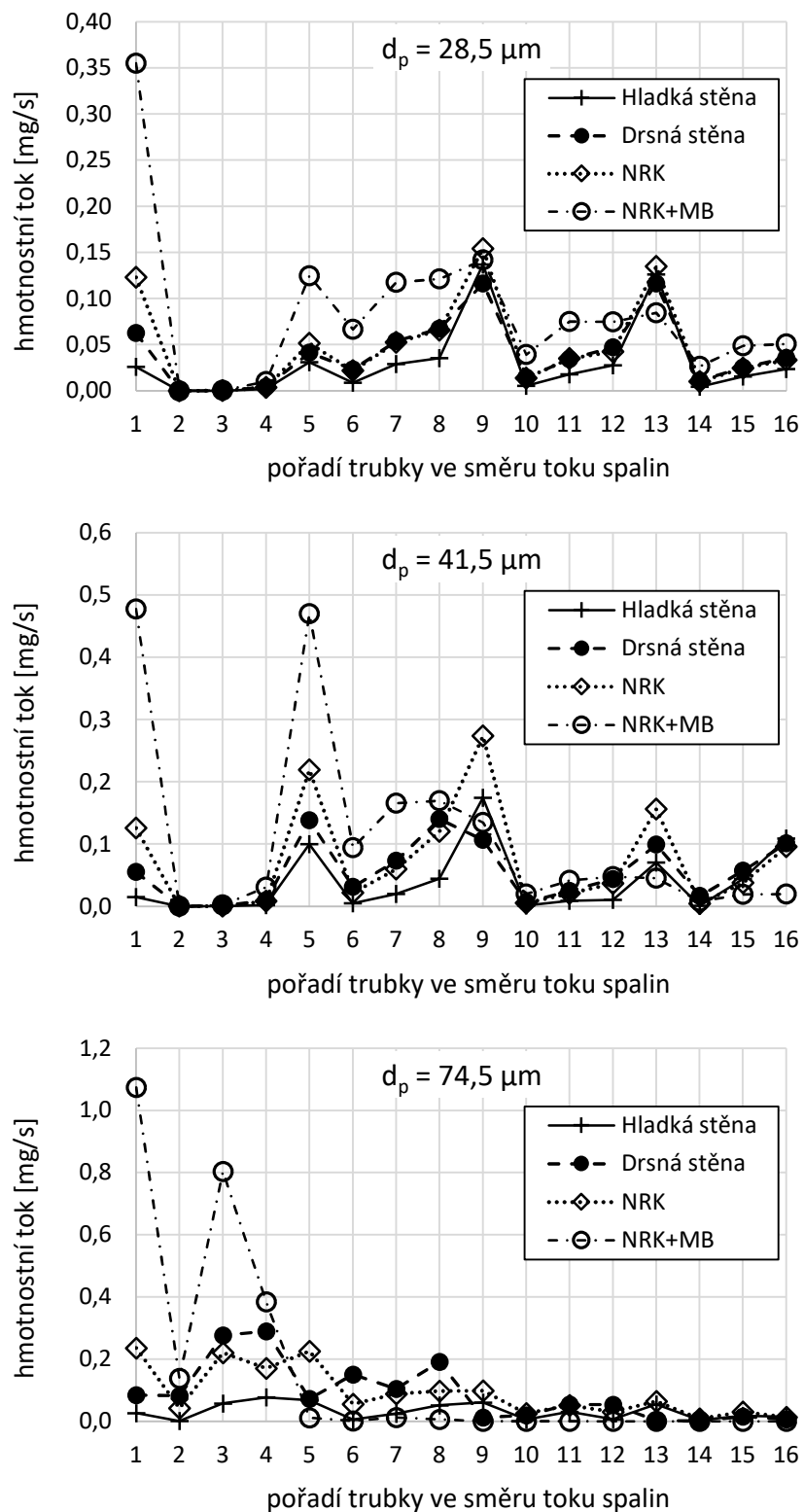
- Změna směru normálového vektoru stěny pomocí modelu drsné stěny výrazně zvyšuje predikované množství usazených částic, zejména pak částic o průměru větším než $25 \mu\text{m}$, pro které je nárůst hmotnostního toku usazovaných částic více než 100 %.
- U modelu náhodně rozmístěných kulových částic dochází 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 spalín, kde tlumení pohybu částic 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.

Výsledky simulací pro sledované průměry částic jsou znázorněny na následujících stranách. Obr. 47 prezentuje výsledky pro částice o průměru $6 \mu\text{m}$ až $19,5 \mu\text{m}$. Obr. 48 prezentuje výsledky pro částice o průměru $28,5 \mu\text{m}$ až $74,5 \mu\text{m}$.

Modelování výměníku



Obr. 47: Hmotnostní toky usazovaných částic na nad sebou ležících úsecích trubek, pro jednotlivé frakce TZL.



Obr. 48: Hmotnostní toky usazovaných částic na nad sebou ležících úsecích trubek, pro jednotlivé frakce TZL.

Modelování výměníku

Srovnávací vizuální pozorování nánosů na experimentálním zařízení (viz níže Obr. 49, Obr. 50, Obr. 51 a Obr. 52) poskytuje základní informace o poměrném rozložení hmoty nánosu po obvodu jednotlivých trubek a rovněž podává hrubou představu o intenzitě zanášení celých trubkových svazků a jednotlivých trubkových řad.

Pozorované nánosy pokrývají všechny trubky všech svazků s přibližně stejnou tloušťkou 2 až 3 mm. Situace trubkového svazku 1 je zachycena níže na Obr. 49, trubkového svazku 2 na Obr. 45, trubkového svazku 3 na Obr. 46 a trubkového svazku 4 na Obr. 52.

Při porovnání se simulovanými hmotnostními toky usazovaných TZL pro jednotlivé frakce a pro různá nastavení modelu lze za předpokladu odpovídajících hodnot vlastností částic a stěny, tj. správného zadání E^* , Y a Γ usuzovat na významný podíl částic o průměru 6 μm (viz výše Obr. 47), případně nižším, a částice o průměru 74,5 μm (viz výše Obr. 48). Pro tyto částice simulace ukazují nejmenší rozdíly v rychlosti usazování v rámci jednoho svazku i při porovnání svazků mezi sebou. U ostatních frakcí takřka nedochází k usazování na 2. až 4. úseku trubek prvního svazku (viz výše Obr. 47 a Obr. 48) a to pro všechny testované verze modelu.

U prvního trubkového svazku výměníku je na přední straně první trubky (viz Obr. 49) vizuálně patrná výrazně větší reálná tloušťka nánosu oproti zbytku trubek tohoto svazku, což dle simulace dobře odpovídá částicím o velikostech 14 až 41,5 μm (viz Obr. 47 a Obr. 48). U ostatních trubkových svazků experimentálního výměníku (Obr. 50, Obr. 51 a Obr. 52) již tak výrazný rozdíl mezi tloušťkami nánosů na jednotlivých trubkách svazků není vizuálně zaznamenatelný.

Na posledním čtvrtém trubkovém svazku experimentálního výměníku pak jsou v oblastech náběžných částí kolen (Obr. 52) dobře vizuálně patrná místa (v podstatě bodové ostrůvky) s lokálně zvýšenými tloušťkami úsad nánosů (především u kolen poslední třetí a čtvrté řady trubek svazku), jako důsledek výrazně snížené rychlosti již značně ochlazených spalin v těchto místech v kombinaci s jejich nedefinovaným režimem obtékání kolen vlivem dílčích obtokových proudů a současně narušeným mechanismem sdílení tepla.



Obr. 49: První trubkový svazek. Šipka označuje směr proudu spalin.



Obr. 50: Druhý trubkový svazek. Šipka označuje směr proudu spalin.

Modelování výměníku



Obr. 51: Třetí trubkový svazek. Šipka označuje směr proudu spalin.



Obr. 52: Čtvrtý trubkový svazek. Šipka označuje směr proudu spalin.

5.5 SHRNUTÍ

Byly provedeny simulace experimentálního výměníku obsahujícího vodou chlazené trubky, obtékané proudem spalin o teplotách v rozmezí 170 až 315 °C. Pro tyto teploty byly již potenciálně se vyskytující anorganické páry (reprezentované KCl) uvažovány jako zkondenzované buďto na povrchu částic nebo nánosu. Ulpívání částic tak probíhalo díky adhezi spolu se ztrátami energie dopadající částice vlivem elastické i plastické deformace a dynamického tření. Příklad byl vzhledem k tvarově složité geometrii vnitřních částí výměníku zjednodušen do dvou rozměrů.

Citlivostní studie na výšku stěnových buněk a jejich počet po obvodu stěn trubek experimentálního výměníku umožnila vybrat optimální variantu vzhledem k závislosti hmotnostního toku usazovaných částic na obou zmíněných parametrech a vzhledem k požadavku na minimální výšku buňky vůči velikosti dopadajících částic. Jako optimální se ukázalo umístění 96 buněk o výšce rovné čtvrtině odtlačovací tloušťky mezní vrstvy. Použití nižšího počtu nebo větší výšky stěnových buněk vede k nárůstu predikované intenzity zanášení.

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 směrem proti proudu spalin.

6 ZÁVĚR

Tato dizertační práce se zabývala numerickým modelováním partikulárního zanášení na straně spalín, 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.

Ve druhé kapitole této dizertační práce 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 a kontinuální měření množství a teploty spalín a koncentrace plynných i tuhých znečišťujících látek ve dvou bodech na trase spalín. Zařízení zahrnuje rotační pec, nechlazenou komoru s prudkým obratem a zpomalením proudu spalín a výměník tepla se čtyřmi svazky trubek chlazenými vodou. Jak komora, tak výměník tepla jsou rozebíratelné a umožňují pozorování vzniklých nánosů. Komora a výměník tepla byly v CFD simulovány jednotlivě a sloužily pro postupný vývoj jednotlivých simulačních modelů zanášení TZL.

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 útlumu 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 disertační práce poskytla základ pro CFD modelování partikulárního zanášení zařízení pracujících se spaliny pocházejících z tuhých paliv při relativně nízkých teplotách, kdy výskyt kapalně 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 popsání 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.

Závěr

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 (viz úvod práce, kap. 1.2) s použitím některých výrazných zjednodušení (viz kap. 2.2) nebo aplikované na části zařízení či malé kotle pro domácí použití.

REFERENCE

- [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] KLEINHANS, Ulrich, Christoph WIELAND, Flemming J. FRANDSEN, 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](https://doi.org/10.1016/j.pecs.2018.02.001)
- [5] COUCH, Gordon. *Understanding slagging and fouling during pf combustion*. London: International Energy Agency Coal Research, 1994. IEACR, 72. ISBN 978-92-9029-240-1.
- [6] SAPEC INDUSTRIAL CHEMICALS LTD. *Economics and cost benefits* [online]. [vid. 2022-07-14]. Dostupné z: <https://www.sapec.co.uk/cost.html>
- [7] 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)
- [8] 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)
- [9] *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>
- [10] 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>
- [11] BAXTER, Larry L. Ash deposition during biomass and coal combustion: A mechanistic approach. *Biomass and Bioenergy* [online]. 1993, **4**(2), Biomass in Combustion: The Challenge of Biomass?, 85–102. ISSN 0961-9534. Dostupné z: [doi:10.1016/0961-9534\(93\)90031-X](https://doi.org/10.1016/0961-9534(93)90031-X)

Reference

- [12] LACHMAN, Jakub, Marek BALÁŠ, Martin LISÝ, Hana LISÁ, Pavel MILČÁK, Patrik ELBL. An overview of slagging and fouling indicators and their applicability to biomass fuels. *Fuel Processing Technology* [online]. 2021, **217**, 106804. ISSN 03783820. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuproc.2021.106804
- [13] 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
- [14] RIZVI, Toor-E-Aiman, Peinong XING, Mohamed POURKASHANIAN, Leilani I. DARVELL, Jenny M. JONES, William NIMMO. Prediction of biomass ash fusion behaviour by the use of detailed characterisation methods coupled with thermodynamic analysis. *Fuel* [online]. 2015, **141**, 275–284. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2014.10.021
- [15] 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
- [16] LI, Jinbo, Wenjing DU a Lin CHENG. Numerical simulation and experiment of gas-solid two phase flow and ash deposit Ion 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
- [17] XU, Zhiming, Zhimin HAN, Hongwei QU. Comparison between Lagrangian and Eulerian approaches for prediction of particle deposition in turbulent flows. *Powder Technology* [online]. 2020, **360**, 141–150. ISSN 0032-5910. Dostupné z: doi:10.1016/j.powtec.2019.09.084
- [18] GUHA, Abhijit. Transport and Deposition of Particles in Turbulent and Laminar Flow. *Annual Review of Fluid Mechanics* [online]. 2008, **40**(1), 311–341. ISSN 0066-4189. Dostupné z: doi:10.1146/annurev.fluid.40.111406.102220
- [19] CHAPMAN, Sydney. On the Brownian displacements and thermal diffusion of grains suspended in a non-uniform fluid. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* [online]. 1928, **119**(781), 34–54. Dostupné z: doi:10.1098/rspa.1928.0082
- [20] FITZPATRICK, J. A., I. S. DONALDSON, W. MCKNIGHT. Strouhal numbers for flows in deep tube array models. *Journal of Fluids and Structures* [online]. 1988, **2**(2), 145–160. ISSN 0889-9746. Dostupné z: doi:10.1016/S0889-9746(88)80016-1
- [21] 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.
- [22] WILCOX, David C. *Turbulence Modeling for CFD*. B.m.: DCW Industries, 2006. ISBN 978-1-928729-08-2.
- [23] 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

- [24] ROGERS, L. N., J. REED. The adhesion of particles undergoing an elastic-plastic impact with a surface. *Journal of Physics D: Applied Physics* [online]. 1984, **17**(4), 677–689. ISSN 0022-3727, 1361-6463. Dostupné z: doi:10.1088/0022-3727/17/4/007
- [25] 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
- [26] LEE, Byeong E., Clive A. J. FLETCHER, Se H. SHIN a 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
- [27] GUI, Nan, Xingtuan YANG, Jiyuan TU, Shengyao JIANG. A generalized particle-to-wall collision model for non-spherical rigid particles. *Advanced Powder Technology* [online]. 2016, **27**(1), 154–163. ISSN 0921-8831. Dostupné z: doi:10.1016/j.appt.2015.12.002
- [28] WACŁAWIAK, Krzysztof, Sylwester KALISZ. Influence of Selected Parameters on Ash Particle Trajectories When Modelling Deposition on Superheater Tubes in Pulverised Coal Boilers Using Fluent Code. *Chemical and Process Engineering* [online]. 2014, **35**(3), 305–316. ISSN 2300-1925. Dostupné z: doi:10.2478/cpe-2014-0023
- [29] TSUJI, Yutaka, Takao OSHIMA, Yoshinobu MORIKAWA. Numerical Simulation of Pneumatic Conveying in a Horizontal Pipe. *KONA Powder and Particle Journal* [online]. 1985, **3**, 38–51. Dostupné z: doi:10.14356/kona.1985009
- [30] WEBER, Roman, Marco MANCINI, Natalia SCHAFFEL-MANCINI, Tomasz KUPKA. On predicting the ash behaviour using Computational Fluid Dynamics. *Fuel Processing Technology* [online]. 2013, **105**, Impacts of Fuel Quality on Power Production and Environment, 113–128. ISSN 0378-3820. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuproc.2011.09.008
- [31] SUGAWARA, Akira, Yoshihito YOSHIZAWA. An Investigation on the Thermal Conductivity of Porous Materials and its Application to Porous Rock. *Australian Journal of Physics* [online]. 1961, **14**, 469. ISSN 0004-9506. Dostupné z: doi:10.1071/PH610469
- [32] KIM, Jaemin, Thierry SIBILLI, Man Yeong HA, Kuisoon KIM, Sang Youl YOON. Compound porous media model for simulation of flat top U-tube compact heat exchanger. *International Journal of Heat and Mass Transfer* [online]. 2019, **138**, 1029–1041. ISSN 0017-9310. Dostupné z: doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.04.116
- [33] YANG, Xin, Derek INGHAM, Lin MA, Alan WILLIAMS, Mohamed POURKASHANIAN. Predicting ash deposition behaviour for co-combustion of palm kernel with coal based on CFD modelling of particle impaction and sticking. *Fuel* [online]. 2016, **165**, 41–49. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2015.10.056
- [34] 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

Reference

- [35] 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
- [36] HANSEN, Stine Broholm, Peter Arendt JENSEN, Flemming Jappe FRANDBSEN, Bo SANDER a Peter GLARBORG. Mechanistic Model for Ash Deposit Formation in Biomass Suspension Firing. Part 1: Model Verification by Use of Entrained Flow Reactor Experiments. *Energy & Fuels* [online]. 2017, **31**(3), 2771–2789. ISSN 0887-0624, 1520-5029. Dostupné z: doi:10.1021/acs.energyfuels.6b01659
- [37] BOURIS, Demetri G., Georgios BERGELES. Particle-Surface Interactions in Heat Exchanger Fouling. *Journal of Fluids Engineering* [online]. 1996, **118**(3), 574–581. ISSN 0098-2202. Dostupné z: doi:10.1115/1.2817797
- [38] 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
- [39] 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
- [40] MÁŠA, Vítězslav, Marek VONDRA. Operational problems: biomass boilers with oversized output. *Chemical Engineering Transactions* [online]. 2015, **45**, 331–336. Dostupné z: doi:10.3303/CET1545056
- [41] KÆR, Søren Knudsen, Lasse Aistrup ROSENDAHL, 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
- [42] LOSURDO, Marco, Hartmut SPLIETHOFF, Jaap KIEL. Ash deposition modeling using a visco-elastic approach. *Fuel* [online]. 2012, **102**, Special Section: ACS Clean Coal, 145–155. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2012.04.047
- [43] KLEINHANS, Ulrich, Roman RÜCK, Sebastian SCHMID, Thomas HASELSTEINER, Hartmut SPLIETHOFF. Alkali Vapor Condensation on Heat Exchanging Surfaces: Laboratory-Scale Experiments and a Mechanistic CFD Modeling Approach. *Energy & Fuels* [online]. 2016 [vid. 2016-10-27]. ISSN 0887-0624. Dostupné z: doi:10.1021/acs.energyfuels.6b01658
- [44] WANG, Liang, Bjarte ØYE, Michael BECIDAN, Johnny STUEN, Øyvind SKREIBERG. Ash deposits characterization in a large-scale municipal waste-to-energy incineration plant. *Chemical Engineering Transactions* [online]. 2016, **50**, 25–30. ISSN 2283-9216. Dostupné z: doi:10.3303/CET1650005
- [45] YANG, Xin, Derek INGHAM, Lin MA, Nanda SRINIVASAN, Mohamed POURKASHANIAN. Ash deposition propensity of coals/blends combustion in boilers: a modeling analysis based on multi-slagging routes. *Proceedings of the Combustion Institute* [online]. 2017, **36**(3), 3341–3350. ISSN 1540-7489. Dostupné z: doi:10.1016/j.proci.2016.06.060

- [46] GARCÍA PÉREZ, Manuel, Esa VAKKILAINEN, Timo HYPPÄNEN. The contribution of differently-sized ash particles to the fouling trends of a pilot-scale coal-fired combustor with an ash deposition CFD model. *Fuel* [online]. 2017, **189**, 120–130. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2016.10.090
- [47] TONG, Zi-Xiang, Ming-Jia LI, Ya-Ling HE, Hou-Zhang TAN. Simulation of real time particle deposition and removal processes on tubes by coupled numerical method. *Applied Energy* [online]. 2017, **185**, 2181–2193. ISSN 0306-2619. Dostupné z: doi:10.1016/j.apenergy.2016.01.043
- [48] YANG, Xin, Derek INGHAM, Lin MA, Hao ZHOU, Mohamed POURKASHANIAN. Understanding the ash deposition formation in Zhundong lignite combustion through dynamic CFD modelling analysis. *Fuel* [online]. 2017, **194**, 533–543. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2017.01.026
- [49] ZHENG, Zhimin, Wenming YANG, Peng YU, Yongtie CAI, Hao ZHOU, Siah Keng BOON, Prabakaran SUBBIAH. Simulating growth of ash deposit in boiler heat exchanger tube based on CFD dynamic mesh technique. *Fuel* [online]. 2020, **259**, 116083. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2019.116083
- [50] 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
- [51] ANSYS, INC. *Ansys® Fluent, Release 21.2, Help System, Fluent Theory Guide*. B.m.: ANSYS, Inc. 2021
- [52] ANSYS, INC. *Ansys® Fluent, Release 21.2, Help System, Fluent User's Guide*. B.m.: ANSYS, Inc. 2021
- [53] GUHA, Abhijit. A unified Eulerian theory of turbulent deposition to smooth and rough surfaces. *Journal of Aerosol Science* [online]. 1997, **28**(8), 1517–1537. ISSN 0021-8502. Dostupné z: doi:10.1016/S0021-8502(97)00028-1
- [54] SCHLICHTING, Hermann. *Boundary-Layer Theory*. 8th ed. Berlin: Springer, 2000. ISBN 978-3-540-66270-9.
- [55] MAXEY, Martin R., James J. RILEY. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *The Physics of Fluids* [online]. 1983, **26**(4), 883. ISSN 0031-9171. Dostupné z: doi:10.1063/1.864230
- [56] MICHAELIDES, Efstathios, Clayton T. CROWE, John D. SCHWARZKOPF, Clayton T. CROWE, John D. SCHWARZKOPF. *Multiphase Flow Handbook* [online]. B.m.: CRC Press, 2016 [vid. 2019-11-14]. ISBN 978-1-315-37192-4. Dostupné z: doi:10.1201/9781315371924
- [57] HAUGEN, Nils Erland L., Steinar KRAGSET. Particle impaction on a cylinder in a crossflow as function of Stokes and Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics* [online]. 2010, **661**, 239–261. Dostupné z: doi:10.1017/S0022112010002946
- [58] FENG, Yu, Clement KLEINSTREUER. Analysis of non-spherical particle transport in complex internal shear flows. *Physics of Fluids* [online]. 2013, **25**(9), 091904. ISSN 1070-6631. Dostupné z: doi:10.1063/1.4821812

Reference

- [59] HAIDER, A., Octave LEVENSPIEL. Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles. *Powder Technology* [online]. 1989, **58**(1), 63–70. ISSN 0032-5910. Dostupné z: doi:10.1016/0032-5910(89)80008-7
- [60] DAVIES, C. N. Definitive equations for the fluid resistance of spheres. *Proceedings of the Physical Society* [online]. 1945, **57**(4), 259. ISSN 0959-5309. Dostupné z: doi:10.1088/0959-5309/57/4/301
- [61] SAFFMAN, Phillip Geoffrey. The lift on a small sphere in a slow shear flow. *Journal of Fluid Mechanics* [online]. 1965, **22**(2), 385–400. ISSN 1469-7645, 0022-1120. Dostupné z: doi:10.1017/S0022112065000824
- [62] LI, Amy, Goodarz AHMADI. Dispersion and Deposition of Spherical Particles from Point Sources in a Turbulent Channel Flow. *Aerosol Science and Technology* [online]. 1992, **16**(4), 209–226. ISSN 0278-6826. Dostupné z: doi:10.1080/02786829208959550
- [63] DEMIREL, Yaşar. *Nonequilibrium Thermodynamics - 2nd Edition*. nedatováno. ISBN 978-0-08-055136-4.
- [64] DE MIGUEL, Rodrigo, J. Miguel RUBÍ. Negative Thermophoretic Force in the Strong Coupling Regime. *Physical Review Letters* [online]. 2019, **123**(20), 200602. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevLett.123.200602
- [65] BROCK, James R. On the theory of thermal forces acting on aerosol particles. *Journal of Colloid Science* [online]. 1962, **17**(8), 768–780. ISSN 0095-8522. Dostupné z: doi:10.1016/0095-8522(62)90051-X
- [66] TALBOT, Lawrence, Robert. K. CHENG, Robert W. SCHEFER, D.R. WILLIS. Thermophoresis of particles in a heated boundary layer. *Journal of Fluid Mechanics* [online]. 1980, **101**(4), 737–758. Dostupné z: doi:10.1017/S0022112080001905
- [67] WALDMANN, L. Über die Kraft eines inhomogenen Gases auf kleine suspendierte Kugeln. *Zeitschrift für Naturforschung A* [online]. 1959, **14**(7), 589–599. ISSN 1865-7109. Dostupné z: doi:10.1515/zna-1959-0701
- [68] CHERNYAK, Vladimir G., T. V. SOGRABI. The role of molecule-surface interaction in the diffusiophoresis of a fine aerosol particle. *Journal of Aerosol Science* [online]. 2020, **144**, 105532. ISSN 0021-8502. Dostupné z: doi:10.1016/j.jaerosci.2020.105532
- [69] DENNIS, Richard. *Handbook on aerosols: prepared for Division of Biomedical and Environmental Research and Division of Reactor Research and Development, Energy Research and Development Administration* [online]. Oak Ridge, Tenn. : Springfield, Va.: Technical Information Center, Energy Research and Development Administration ; available from National Technical Information Service, U.S. Dept. of Commerce, 1976 [vid. 2023-03-02]. ISBN 978-0-87079-024-9. Dostupné z: <https://catalog.hathitrust.org/Record/000715067>
- [70] CAPORALONI, Marina, Francesco TAMPIERI, Fernanda TROMBETTI, O. VITTORI. Transfer of Particles in Nonisotropic Air Turbulence. *Journal of the Atmospheric Sciences* [online]. 1975, **32**(3), 565–568. ISSN 0022-4928. Dostupné z: doi:10.1175/1520-0469(1975)032<0565:TOPINA>2.0.CO;2
- [71] 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

- [72] HUTCHINGS, Ian M. Energy absorbed by elastic waves during plastic impact. *Journal of Physics D: Applied Physics* [online]. 1979, **12**(11), 1819–1824. ISSN 0022-3727, 1361-6463. Dostupné z: doi:10.1088/0022-3727/12/11/010
- [73] KRUPP, Helmar. Particle adhesion theory and experiment. *Advances in Colloid and Interface Science* [online]. 1967, **1**(2), 111–239. ISSN 0001-8686. Dostupné z: doi:10.1016/0001-8686(67)80004-6
- [74] JOHNSON, Kenneth Langstreth, Kevin KENDALL, A. D. ROBERTS, David TABOR. Surface energy and the contact of elastic solids. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* [online]. 1971, **324**(1558), 301–313. Dostupné z: doi:10.1098/rspa.1971.0141
- [75] WALL, Stephen M., Walter JOHN, Simon L. GOREN. A modified elastic-plastic impact adhesion theory applied to particle kinetic energy loss measurements. *Journal of Aerosol Science* [online]. 1989, **20**(8), Proceedings of the 1989 European Aerosol Research, 983–986. ISSN 0021-8502. Dostupné z: doi:10.1016/0021-8502(89)90742-8
- [76] TOMECZEK, Jerzy, Krzysztof WACŁAWIAK. Two-dimensional modelling of deposits formation on platen superheaters in pulverized coal boilers. *Fuel* [online]. 2009, **88**(8), 1466–1471. ISSN 0016-2361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2009.02.023
- [77] RICHARDS, Galen H., Peter N. SLATER, John N. HARB. Simulation of ash deposit growth in a pulverized coal-fired pilot scale reactor. *Energy & Fuels* [online]. 1993, **7**(6), 774–781. ISSN 0887-0624. Dostupné z: doi:10.1021/ef00042a012
- [78] SUGAWARA, Akira, Yoshihito YOSHIZAWA. An Experimental Investigation on the Thermal Conductivity of Consolidated Porous Materials. *Journal of Applied Physics* [online]. 1962, **33**(10), 3135–3138. ISSN 0021-8979. Dostupné z: doi:10.1063/1.1728581
- [79] ROBINSON, Allen L., Steven G. BUCKLEY, Nancy YANG, Larry L. BAXTER. Experimental Measurements of the Thermal Conductivity of Ash Deposits: Part 2. Effects of Sintering and Deposit Microstructure. *Energy & Fuels* [online]. 2001, **15**(1), 75–84. ISSN 0887-0624. Dostupné z: doi:10.1021/ef0000375
- [80] YAGI, Sakae, Daizo KUNII. Studies on effective thermal conductivities in packed beds. *AIChE Journal* [online]. 1957, **3**(3), 373–381. ISSN 1547-5905. Dostupné z: doi:https://doi.org/10.1002/aic.690030317
- [81] SAIDI, Mohammad Said, Milad RISMANIAN, Mojdeh MONJEZI, Mohsen ZENDEHBAD, Soheil FATEHIBOROUJENI. Comparison between Lagrangian and Eulerian approaches in predicting motion of micron-sized particles in laminar flows. *Atmospheric Environment* [online]. 2014, **89**, 199–206. ISSN 1352-2310. Dostupné z: doi:10.1016/j.atmosenv.2014.01.069
- [82] 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

Reference

- [83] 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
- [84] DEHBI, Abdelouahab, Hassan BADREDDINE. CFD prediction of mixing in a steam generator mock-up: Comparison between full geometry and porous medium approaches. *Annals of Nuclear Energy* [online]. 2013, **58**, 178–187. ISSN 0306-4549. Dostupné z: doi:10.1016/j.anucene.2013.03.019
- [85] BOJANOVSKÝ, Jiří. *Spalování tuhých paliv v rotační peci a vliv jejich složení na tvorbu znečišťujících látek* [online]. B.m., 2022 [vid. 2023-04-18]. Vysoké učení technické v Brně. Dostupné z: <https://theses.cz/id/6ivgv0/>
- [86] 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
- [87] 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
- [88] 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
- [89] 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
- [90] 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
- [91] STROUHAL, Jiří, Tomáš JUŘENA, Zdeněk JEGLA. CFD modelling of an initial powdery layer on cooled tubular surfaces. In: *Heat Exchanger Fouling and Cleaning Conference XIV: Heat Exchanger Fouling and Cleaning XIV – 2022*. Wagrain, Austria: HTRI, 2022, s. 372.
- [92] 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/>
- [93] CHANDRASEKHAR, Subrahmanyan. Stochastic Problems in Physics and Astronomy. *Reviews of Modern Physics* [online]. 1943, **15**(1), 1–89. ISSN 0034-6861. Dostupné z: doi:10.1103/RevModPhys.15.1
- [94] STROUHAL, Jiří, Tomáš JUŘENA, Zdeněk JEGLA. Development of an innovative approach to the study and modelling of flue gas fouling of heat transfer surfaces by solid pollutants. In: *CHISA2021 Virtually*. 2021.

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

LATINSKÉ SYMBOLY

A	[m ²]	plošný obsah, průmět tělesa ve směru proudu
B	[N m]	konstanta pro výpočet van der Waalsovy síly
C_C	[-]	Cunninghamův korekční faktor
C_D	[-]	součinitel odporu
C_{ML}	[-]	vztlakový součinitel pro Magnusův vztlak
$C_m; C_s; C_t$	[-]	pomocné konstanty
$d; D$	[m]	průměr; velikost (průměr) překážky
D_{Brown}	[m ² s ⁻¹]	difuzní součinitel Brownova pohybu částic
D_{ij}	[m ² s ⁻¹]	difuzivita složky i ve složce j
d_{ref}	[m]	referenční průměr
E^*	[Pa]	efektivní modul pružnosti
e_n, e_t	[-]	normálový a tečný restituční koeficient
f	[N kg ⁻¹], [-]	síla na jednotku hmotnosti, poměr impulzů sil
\vec{F}_B	[N]	aerostatická vztlaková síla
\vec{F}_D	[N]	aerodynamická odporová síla
\vec{F}_{diff}	[N]	difuzioforetická síla
\vec{F}_E	[N]	elektrostatická síla
\vec{F}_{el}	[N]	elastická síla
\vec{F}_G	[N]	tíhová síla
\vec{F}_{ML}	[N]	Magnusova vztlaková síla
\vec{F}_P	[N]	síla vyvolaná gradientem tlaku
\vec{F}_{SL}	[N]	Saffmanova vztlaková síla
\vec{F}_{th}	[N]	termoforetická síla
\vec{F}_{tu}	[N]	turboforetická síla
\vec{F}_{VW}	[N]	van der Waalsova síla
\vec{g}	[m s ⁻¹]	tíhové zrychlení
G	[kg m ^{-2,2} s ^{-0,8}]	konstanta pro výpočet elastické síly
\vec{j}	[kg m ⁻² s ⁻¹]	hustota hmotnostního toku
k	[m ² s ⁻²]	turbulentní kinetická energie
k_B	[m ² kg s ⁻² K ⁻¹]	Boltzmannova konstanta
k_e	[-]	součinitel vyjadřující míru eroze
Kn	[-]	Knudsenovo číslo
l	[m]	délka oblasti možného dopadu částice
L	[m]	vyhodnocovaná délka profilu
m	[kg]	hmotnost

Seznam použitých symbolů a zkratek

\dot{m}_0	[kg s ⁻¹]	hmotnostní tok částic směřujících k povrchu
\dot{m}_{imp}	[kg s ⁻¹]	hmotnostní tok dopadajících částic
n	[-]	exponent ve výpočtu elastické síly
\vec{n}	[m]	normálový vektor
n_f	[m ⁻³]	koncentrace částic tekutiny
\bar{N}	[m ⁻²]	průměrný počet částic na jednotku plochy povrchu stěny
N_p	[-]	počet částic
N_{try}	[-]	maximální počet pokusu pro umístění částice v nánosu
p	[-], [Pa]	lepivost, statický tlak
P	[-]	pravděpodobnost ulpění částice
p_{sat}	[Pa]	tlak nasycených par
p_{stick}	[-]	účinnost ulpívání částic
q	[C]	náboj
r	[m]	radiální souřadnice
R	[m], [-]	poloměr částice, funkce charakterizující rozptyl molekul
Ra, Rq, Rsm	[m]	parametry popisující drsnost
Re	[-]	Reynoldsovo číslo
S_i	[-]	poměr přesycení
S_0	[s]	parametr ve výpočtu Brownovy síly
St	[-]	Stokesovo číslo
t	[s]	čas
\vec{t}	[m]	tečný vektor
T	[K]	termodynamická teplota
u	[m s ⁻¹]	rychlost
u^*	[m s ⁻¹]	třecí rychlost
u_{crit}	[m s ⁻¹]	kritická rychlost
$u_{p,\infty}$	[m s ⁻¹]	rychlost částice daleko od překážky
u_{rel}	[m s ⁻¹]	relativní rychlost částice vůči tekutině
V	[m ³]	objem
V_{dep}	[m s ⁻¹]	depoziční rychlosti
V_{dep}^+	[-]	bezrozměrná depoziční rychlost
v_s	[m s ⁻¹]	maximální rychlost pro zachycení částice vlivem adheze
v_y	[m s ⁻¹]	minimální rychlost pro vznik plastické deformace
y	[m]	kolmá vzdálenost od stěny
y^+	[-]	bezrozměrná vzdálenost od stěny
Y	[Pa]	statická mez kluzu

ŘECKÉ SYMBOLY

α	[rad]	úhel mezi normálovým vektorem povrchu a tíhovou silou
β	[m s ⁻¹]	součinitel přestupu hmoty
Γ	[J m ⁻²]	měrná povrchová energie
δ	[m]	vzdálenost částice od stěny

δ_0	[m]	výška stěnové buňky
δ_1	[m]	odtlačovací tloušťka mezní vrstvy
Δt	[s]	časový krok
$\Delta \gamma$	[rad]	náhodná odchylka dopadového úhlu
η_{imp}	[-]	účinnost dopadu
η'_{imp}	[-]	účinnost dopadu zahrnující intercepci
θ	[rad]	úhel
Θ	[-]	bezrozměrný úhel
Θ_c	[-]	kritický bezrozměrný dopadový úhel
λ	[W m ⁻¹ K ⁻¹]	tepelná vodivost
Λ	[-]	poměr tepelných vodivostí
λ_{free}	[-]	střední volná dráha molekul tekutiny
μ	[Pa s]	dynamická viskozita
μ_f	[-]	dynamický součinitel smykového tření
μ_{ref}	[Pa s]	referenční viskozita
ν	[-]	Poissonovo číslo
ρ	[kg m ⁻³]	hustota
σ_γ	[rad]	směrodatná odchylka náhodného úhlu dopadu
τ_p	[s]	relaxační čas částice
τ_p^*	[s]	bezrozměrný relaxační čas
ϕ	[-]	porozita
Φ	[-]	termoforézní koeficient
φ	[°]	úhlová souřadnice
ξ, ζ	[-]	náhodné číslo
$\vec{\omega}_p$	[rad s ⁻¹]	úhlová rychlost částice
$\vec{\Omega}$	[rad s ⁻¹]	relativní úhlová rychlost částice vůči tekutině

DOLNÍ INDEXY

av	průměrná hodnota
g	plyn
i	bezprostředně před dopadem
p	částice
r	bezprostředně po dopadu
s	tuhá látka
w	stěna

ZKRATKY

CFD	Výpočtová dynamika tekutin (Computational Fluid Dynamics)
DPM	Discrete Phase Model
DRW	Discrete Random Walk
FA	Fly Ash
MB	Multi-Body collision
NRK	model náhodně rozmístěných kulových částic
PDF	Probability Density Function
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RNG	Re-Normalization Group
RSM	Reynolds Stress Model
TAP	Tuhá alternativní paliva
TZL	Tuhé znečišťující látky
UDF	Uživatelsky definované funkce (User Defined Functions)
ÚPI	Ústav procesního inženýrství

SOUVISEJÍCÍ AKTIVITY

PUBLIKACE

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/>.

STROUHAL, Jiří, Tomáš JUŘENA. CFD Simulations of Packed-Bed Combustion: Accounting for Irregularities in Particle Orientation in the Estimation of Bed Radiative Properties. In: *Chemical Engineering Transactions* [online]. 2022, 94, 997–1002. Dostupné z: [doi:10.3303/CET2294166](https://doi.org/10.3303/CET2294166).

STROUHAL, Jiří, Tomáš JUŘENA, Zdeněk JEGLA. CFD modelling of an initial powdery layer on cooled tubular surfaces. In: *Heat Exchanger Fouling and Cleaning Conference XIV: Heat Exchanger Fouling and Cleaning XIV – 2022*. Wagram, Austria: HTRI, 2022, s. 372.

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](https://doi.org/10.3303/CET2188104).

STROUHAL, Jiří, Tomáš JUŘENA, Zdeněk JEGLA. Development of an innovative approach to the study and modelling of flue gas fouling of heat transfer surfaces by solid pollutants. *CHISA2021 Virtually*. 2021.

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](https://doi.org/10.21495/5896-3-468).

VÝUKA

- Účast na vedení cvičení předmětu Bilancování procesních a energetických systémů (KBP) pro 1. ročník NMS, zimní semestr, ak. rok 2019/2020.
- Vedení cvičení předmětu Technologické linky zpracovatelského průmyslu (KS2) pro 1. ročník NMS, letní semestr, ak. rok 2020/2021, 2021/2022 a 2022/2023.

PROJEKTY

- Komplexní přístup k energetickému využití odpadů a čištění spalin I.–III., zahájení: 01.09.2019, ukončení: 31.12.2022.
- Numerical model for packed bed combustion simulations, zahájení: 01.02.2021, ukončení: 31.01.2023; hlavní řešitel.

ŠKOLENÍ A KURZY

- Umění učit pro začátečníky i pokročilé (2020 až 2021) – cyklus kurzů a seminářů pro zvýšení pedagogických kompetencí
- ANSYS Fluent (2022) – kurzy zaměřené na tvorbu sítí a skriptování
- ANSYS Ensiht (2022)

OPONENTURA DIPLOMOVÉ PRÁCE

- SÝS, Tomáš. Komplexní analýza funkce distribučního systému typu U. Brno, 2021. Dostupné z: <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/132642>. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Ústav procesního inženýrství. Vedoucí práce Ing. Dominika Babička Fialová