



# Modelování procesu odsíření mokrou vápencovou vypírkou

## Disertační práce

*Studijní program:*

P2301 Strojní inženýrství

*Studijní obor:*

Aplikovaná mechanika

*Autor práce:*

**Ing. Jan Novosád**

*Školitel práce:*

prof. Ing. Tomáš Vít, Ph.D.

Katedra energetických zařízení



## Prohlášení

Prohlašuji, že svou disertační práci jsem vypracoval samostatně jako původní dílo s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím mé disertační práce a konzultantem.

Jsem si vědom toho, že na mou disertační práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci nezasahuje do mých autorských práv užitím mé disertační práce pro vnitřní potřebu Technické univerzity v Liberci.

Užiji-li disertační práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti Technickou univerzitu v Liberci; v tomto případě má Technická univerzita v Liberci právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Současně čestně prohlašuji, že text elektronické podoby práce vložený do IS/STAG se shoduje s textem tištěné podoby práce.

Beru na vědomí, že má disertační práce bude zveřejněna Technickou univerzitou v Liberci v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších předpisů.

Jsem si vědom následků, které podle zákona o vysokých školách mohou vyplývat z porušení tohoto prohlášení.

31. října 2021

Ing. Jan Novosád

## **Poděkování**

Rád bych poděkoval všem, kteří se přímo i nepřímo podíleli na vzniku této práce. Děkuji především své rodině za velkou míru podpory, trpělivosti a tolerance. Dále si dovoluji poděkovat svému školiteli prof. Tomáši Vítovi a kolegyni doc. Petře Dančové za cenné rady a významnou podporu v pracovním i osobním životě.



## Anotace

V disertační práci je řešena problematika technologického procesu odsíření spalin mokrou vápencovou vypírkou za kotlem v uhelných elektrárnách. Dílčím cílem práce je popis procesu odsíření s ohledem na fyzikální jevy a konstrukční a provozní parametry reálných zařízení. V rámci práce bylo provedeno studium současného poznání v oblasti odsířování mokrou vápencovou vypírkou. Předchozí teoretické a experimentální výzkumy popisují většinu fyzikálních jevů při procesu absorpce  $\text{SO}_2$  ve vápenné suspenzi. Numerické výzkumy se zaměřují na modelování přenosu hmoty mezi plynnou a kapalnou fází, které se zpravidla omezuje na modelování vícefázového proudění spalin a suspenze. Chemické procesy, které se odehrávají uvnitř kapek suspenze, jsou do modelů zahrnuty na základě samostatných výpočtů. Cílem disertační práce je návrh a vývoj CFD nástroje, který umožňuje modelování procesu odsíření mokrou vápencovou vypírkou v průmyslovém zařízení. Odpovídající CFD řešič je navržen na základě balíku OpenFOAM, který byl vybrán z důvodu otevřenosti zdrojového kódu. Dílčí kroky při vývoji zahrnují postupné doplňování zdrojového kódu o potřebné modely dílčích jevů a procesů. Součástí validace kódu je u dílčích kroků porovnání výsledků simulací s experimentálními daty z laboratorních i průmyslových zařízení. Výsledkem práce je řešič, který je odladěn na použití pro simulaci zachytu  $\text{SO}_2$  v průmyslovém absorbéru. V závěru práce jsou shrnuty hlavní směry dalšího vývoje řešiče pro zajištění většího rozsahu aplikovatelnosti na aktuální problémy v oblasti čištění spalin.

**Klíčová slova:** odsíření, mokrá vápencová vypírka, absorpce,  $\text{SO}_2$ , CFD, OpenFOAM.

## Annotation

The dissertation deals with the issue of the technological process of flue gas desulphurization by wet limestone scrubbing behind a boiler in coal-fired power plants. A partial goal of the work is to describe the desulfurization process with regard to physical phenomena and design and operating parameters of real equipment. Within the work, a study of current knowledge in the field of desulfurization by wet limestone scrubbing was performed. Previous theoretical and experimental research describes most of the physical phenomena in the process of  $\text{SO}_2$  absorption in lime suspension. Numerical research focuses on modeling the mass transfer between gas and liquid phase, which is usually limited to modeling the multiphase flow of flue gases and slurry. The chemical processes that take place inside the droplets of the suspension are included in the models on the basis of separate calculations. The aim of this dissertation is the design and development of a CFD tool that allows modeling of the desulfurization process by wet limestone scrubbing in an industrial facility. The corresponding CFD solver is designed based on the OpenFOAM package, which was selected due to the openness of the source code. Partial steps in development include the gradual addition of source code to the necessary models of partial phenomena and processes. Part of the code validation is to compare the results of simulations with experimental data from laboratory and industrial equipment in partial steps. The result of the work is a solver that is tuned for use to simulate the capture of  $\text{SO}_2$  in an industrial absorber. At the end of the work the main directions of further development of the solver are summarized to ensure a wider range of applicability to current problems in the field of flue gas cleaning.

**Keywords:** wet flue gas desulfurization, absorption,  $\text{SO}_2$ , CFD, OpenFOAM.



# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod .....</b>	<b>11</b>
1.1	Cíle disertační práce .....	12
<b>2</b>	<b>Odsiřování v uhelných elektrárnách .....</b>	<b>13</b>
2.1	Metody odsiřování .....	13
2.2	Historický vývoj odsiřovacích procesů .....	16
2.3	Mokrý vápencová vypírka .....	19
<b>3</b>	<b>Absorpce SO<sub>2</sub>.....</b>	<b>21</b>
3.1	Chemická termodynamika absorpce .....	21
3.2	Základy přenosu tepla .....	25
3.3	Základy přenosu hmoty .....	27
3.4	Analogie přenosu tepla a hmoty .....	28
3.5	Teorie přenosu hmoty přes fázové rozhraní .....	29
3.6	Hlavní reakce při mokré vápencové vypírce .....	33
<b>4</b>	<b>Přístupy k modelování procesu odsiřování .....</b>	<b>35</b>
4.1	Modelování absorpce SO <sub>2</sub> .....	35
4.2	Modely pro absorbéry s vnitřní vestavbou .....	44
4.3	Kombinovaný záchyt SO <sub>2</sub> a dalších znečišťujících látek .....	47
4.4	Shrnutí přístupů k modelování procesu odsiřování .....	49
<b>5</b>	<b>Experimentální část .....</b>	<b>52</b>
5.2	Měření provozních dat .....	53
5.3	Provozní parametry absorbéru .....	54
5.4	Experimentální absorbér .....	56
5.5	Provozní data reálného absorbéru .....	62
<b>6</b>	<b>Vývoj a validace CFD kódu.....</b>	<b>64</b>
6.1	Volba hlavních parametrů modelu .....	64
6.2	Výběr výchozího řešiče .....	64
6.3	Modelování proudění primární fáze .....	66
6.4	Modelování vícefázového proudění .....	73
6.5	Modelování absorpce SO <sub>2</sub> z primární fáze .....	78
6.6	Validace kompletního CFD kódu na jednoduchém zařízení .....	83
6.7	Ověření funkčnosti kódu pro průmyslové zařízení .....	87
<b>7</b>	<b>Zhodnocení a závěr .....</b>	<b>91</b>
7.1	Podněty pro další práci .....	92

## Seznam vybraných veličin a zkratek

$a$	$(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	teplotní vodivost,
$A_{\text{int}}$	$(\text{m}^{-1})$	plocha rozhraní vztažená k jednotce objemu (viz (6.4)),
$c$	$(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	měrná tepelná kapacita,
$c_A$	$(\text{mol} \cdot \text{m}^{-3})$	molární koncentrace,
$d$	$(\text{m})$	průměr,
$D$	$(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	difuzní koeficient,
$g$	$(\text{m} \cdot \text{s}^{-2})$	gravitační zrychlení,
$g$	$(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	měrná Gibbsova energie,
$G$	$(\text{J})$	celková Gibbsova energie (Gibbsova funkce),
$E$	$(1)$	součinitel zvýšení přenosu hmoty v důsledku chem. reakcí,
$F$	$(\text{N})$	síla,
$h$	$(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	měrná entalpie,
$H$	$(\text{J})$	entalpie,
$H$	$(\text{Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1})$	Henryho koeficient (rozpuštnosti),
$\Delta H$	$(\text{J})$	reakční teplo,
$J$	$(\text{mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1})$	intenzita molárního toku,
$k_g, k_l$	$(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	součinitel přestupu hmoty na straně plynu/kapaliny,
$k_H$	$(1)$	bezrozměrný Henryho koeficient, pro IP: $k_H = H / RT$ ,
$k$	$(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2})$	turbulentní kinetická energie (TKE),
$K$	$(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	celkový součinitel přestupu hmoty,
$K_a$	$(1)$	rovnovážná konstanta reakce,
$L$	$(\text{m})$	charakteristický rozměr, délka,
$L/G$	$(\text{dm}^3 \cdot \text{m}^{-3})$	poměr průtoků suspenze a plynu (spalin),
$\dot{m}$	$(\text{kg} \cdot \text{s}^{-1})$	hmotnostní tok,
$M$	$(\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1})$	molární hmotnost,
$n$	$(\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1})$	hmotnostní tok jednotkovou plochou,
$N$	$(\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$	rychlost absorpce,
$Nu$	$(1)$	Nusseltovo číslo,
$p$	$(\text{Pa})$	tlak,
$Pr$	$(1)$	Prandtlovo číslo,
$\dot{q}$	$(\text{W} \cdot \text{m}^{-2})$	plošná hustota tepelného toku,
$r$	$(\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1})$	hmotnostní tok v důsledku homog. chemické reakce,
$R$	$(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	univerzální plynová konst.: $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ,
$Re$	$(1)$	Reynoldsovo číslo,
$S$	$(\text{J} \cdot \text{K}^{-1})$	entropie,
$Sc$	$(1)$	Schmidtovo číslo,
$Sh$	$(1)$	Sherwoodovo číslo,
$S_{\text{en}}$	$(\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-3})$	zdrojový člen energie,
$S_h$	$(\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-2})$	zdrojový člen hybnosti,
$S_m$	$(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$	zdrojový člen hmotnosti,
$t$	$(^\circ\text{C})$	teplota,
$T$	$(\text{K})$	termodynamická teplota,
$u, v, w$	$(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	složky vektoru rychlosti,
$U$	$(\text{J})$	vnitřní energie,
$\bar{U}$	$(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	střední rychlost,



$V$	( $m^3$ )	objem,
$V_m$	( $m^3 \cdot mol^{-1}$ )	molární objem,
$x_i$	(1)	molární zlomek složky $i$ .
$x, y, z$	(m)	souřadnice,
$Y$	(1)	hmotnostní zlomek.

### Řecké symboly

$\alpha$	(1)	objemový zlomek,
$\alpha$	( $W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$ )	součinitel přestupu tepla,
$\beta$	( $K^{-1}$ )	součinitel teplotní roztažnosti,
$\beta_c$	( $m \cdot s^{-1}$ )	součinitel konvektivního přenosu hmoty,
$\delta$	(m)	tloušťka filmu,
$\varepsilon$	( $m^2 \cdot s^{-3}$ )	disipace TKE,
$\eta$	(Pa·s)	dynamická viskozita,
$\eta_{SO_2}$	(1)	účinnost zachytu $SO_2$ ,
$\theta$	(s)	čas, doba mezifázového kontaktu (kapalina-plyn),
$\rho$	( $kg \cdot m^{-3}$ )	hustota,
$\rho_i$	( $kg \cdot m^{-3}$ )	hmotnostní koncentrace složky $i$ .
$\lambda$	( $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ )	součinitel tepelné vodivosti,
$\mu$	( $J \cdot mol^{-1}$ )	chemický potenciál,
$\nu$	( $m^2 \cdot s^{-1}$ )	kinematická viskozita,
$\tau$	(s)	čas,
$\tau_{ij}$	( $N \cdot m^{-2}$ )	tenzor vazkých napětí,
$\varphi$	(1)	objemový zlomek,
$\omega$	( $s^{-1}$ )	specifická rychlost disipace TKE.

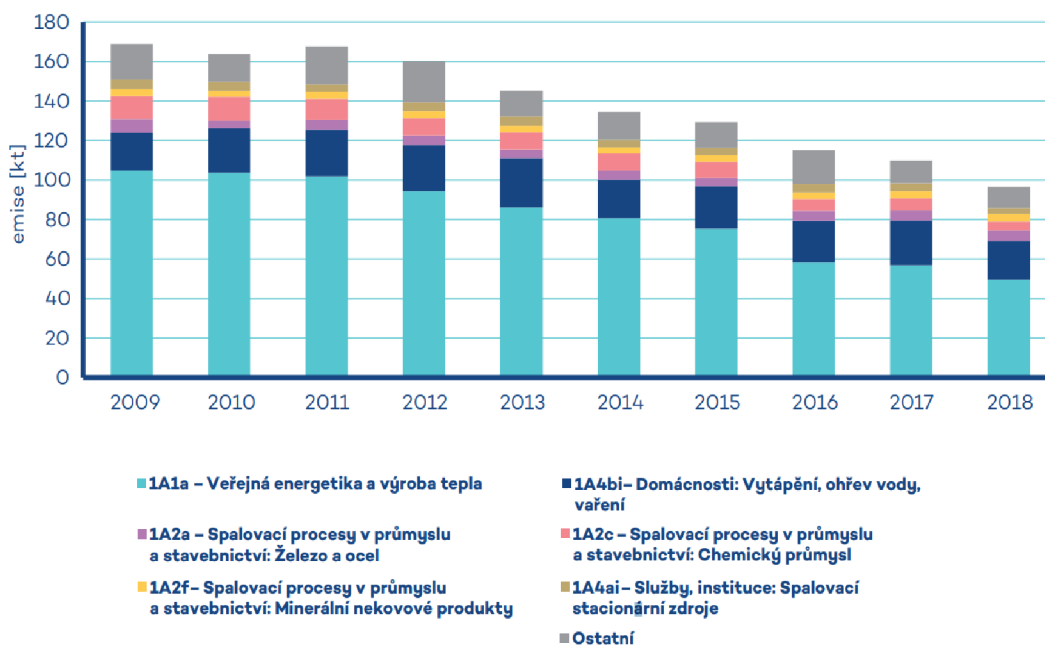
### Indexy

0	za normálních podmínek,
aq	vodný roztok (z angl. <i>aqueous solution</i> ),
Ab	absorbér,
A, B	složky směsi,
c	celkový,
d	diferenční,
F	obecná fáze,
g	plynná fáze (z angl. <i>gas</i> ),
i	index (pořadí), parciální, složka
i, j, k	kartézské souřadnice,
in	vstup (z angl. <i>inlet</i> ),
int	mezifázové rozhraní (z angl. <i>interface</i> ),
k	konvektivní (teplo, přenos),
k	index (pořadí) kapky (částice),
l	kapalná fáze (z angl. <i>liquid</i> ),
l	latentní,
m	směs (z angl. <i>mixture</i> ),
out	výstup (z angl. <i>outlet</i> ),
P	provozní (měřený) stav,
R	referenční stav (při $p = 101\,325\text{ Pa}$ , $t = 0^\circ\text{C}$ ),
s	statický,

SS	suché spaliny,
TR	tryska,
v	var,
VS	vlhké spaliny,
x, y, z	osy v kartézském souřadnicovém systému,
X, Y, Z	rovina s normálou ve směru x, y, z.
<u>Zkratky</u>	
CFD	výpočetní mechanika tekutin (z angl. <i>Computational Fluid Dynamics</i> ),
E-E	Euler-Euler,
E-L	Euler-Lagrange,
IP	ideální plyn,
KEZ	Katedra energetických zařízení,
N-S	Navier-Stokesovy rovnice,
PM	pevné částičky (z angl. <i>Particulate Matter</i> ),
SMD	Sauterův střední průměr (z angl. <i>Sauter Mean Diameter</i> )
TKE	turbulentní kinetická energie,
TUL	Technická univerzita v Liberci,
WFGD	mokrý odsiřování spalin (z angl. <i>Wet FLue Gas Desulphurization</i> ),
ZEVO	zařízení na energetické využití odpadů,
ZL	znečišťující látky,
ZTD	zákon termodynamiky.

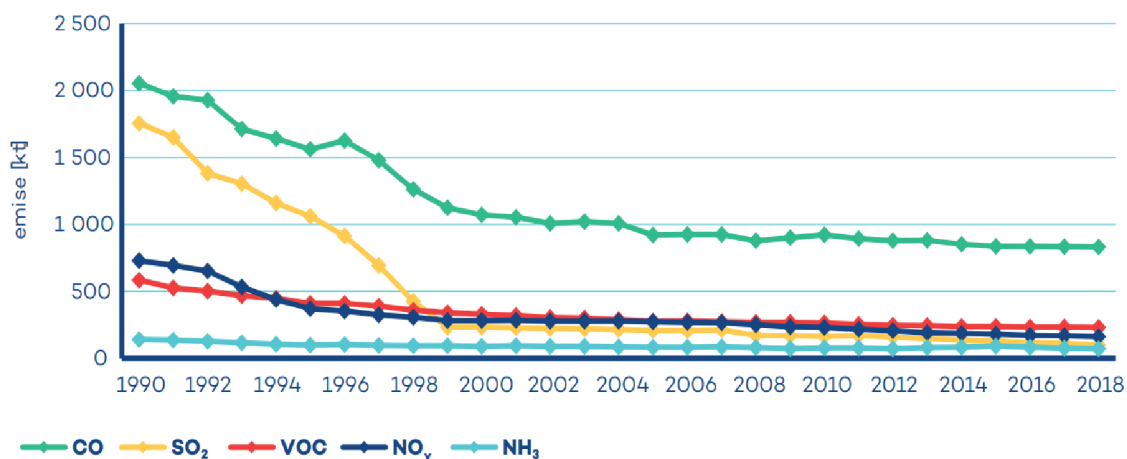
# 1 Úvod

Největším zdrojem znečištění ovzduší v ČR je energetický a hutnický průmysl. Energetická zařízení spalující uhlí, nebo uhelné produkty mají více než 50% podíl na výrobě elektřiny v ČR [1]. Velké zdroje, tj. spalovací zdroje se jmenovitým tepelným výkonem nad 5 MW, produkují dlouhodobě v ČR přes 80 % emisí oxidu siřičitého [2]. Podíl jednotlivých zdrojů a vývoj znečištění oxidem siřičitým je uveden na Obr. 1.1.



Obr. 1.1: Vývoj celkových emisí SO<sub>2</sub>, 2009–2018 [3].

Úroveň emisí znečišťujících látek (viz Obr. 1.2) se v posledních desetiletích daří snižovat díky zavedení legislativních a technických opatření vyplývající ze zákona 201/2012 Sb. (Zákon o ochraně ovzduší [4]) a souvisejících předpisů. U uhelných elektráren provozovaných v ČR došlo mezi lety 1993 a 2003 k výstavbě a zprovoznění odsiřovacích technologií. Těmito opatřeními došlo k poklesu emisí SO<sub>2</sub> o cca 90 % [5]. „K největšímu poklesu emisí došlo u SO<sub>2</sub> mezi lety 2007 a 2008 především v důsledku uplatnění Národního programu snižování emisí ze stávajících zvláště velkých spalovacích zdrojů, dále snížením výroby elektřiny a tepla v důsledku nastupující krize a plánovanými rekonstrukcemi velkých spalovacích zařízení.“ [6]. V rámci národních programů v gesci Ministerstva životního prostředí ČR a Ministerstva průmyslu a obchodu ČR by měly být nadále zpřísnovány emisní limity [6].



Obr. 1.2: Vývoj celkových emisí hlavních znečišťujících látek, 1990–2018 [3].

## 1.1 Cíle disertační práce

V rámci disertační práce bude řešena problematika technologického procesu odsíření spalin mokrou vápencovou vypírkou za kotlem v uhelných elektrárnách.

**Hlavním cílem disertační práce je vytvořit a validovat nástroj vhodný pro simulaci zařízení technologického procesu odsíření spalin mokrou vápencovou vypírkou za kotlem v uhelných elektrárnách.**

K naplnění hlavního cíle je třeba provést dílčí činnosti:

- provést rozbor procesu odsíření včetně vlivu vstupních parametrů,
- provést rešerši v oblasti modelování absorpce SO<sub>2</sub> mokrou vápencovou vypírkou,
- provést bilanci přenosových jevů při absorpci SO<sub>2</sub>,
- navrhnout a validovat postup pro numerickou simulaci.

Nástroj pro numerickou simulaci bude sloužit při návrhu dalších technických opatření pro snižování emisí SO<sub>2</sub>. Předpokládané využití by mělo vést k vyšší efektivitě procesu návrhu nových odsířovacích zařízení a dále umožnit optimalizaci provozu stávajících zařízení za účelem snížení energetické a materiállové náročnosti procesu.

## 2 Odsiřování v uhelných elektrárnách

Odsiřování je technologický proces, který vede ke snížení koncentrace sloučenin síry (zejména pak SO<sub>2</sub>) ve spalínách. V praxi se jedná o snížení množství SO<sub>2</sub> vypouštěného ze spalovacího zdroje do ovzduší na úroveň nižší, než je zákonem stanovený limit.

### 2.1 Metody odsiřování

Principiálně je možné odsiřování realizovat v různých fázích technologického řetězce, a to:

- ve fázi přípravy paliva,
- ve fázi spalování.

V článku [7] je uveden přehled v současnosti užívaných metod pro snižování obsahu síry ve fázi přípravy paliva i odsiřování spalín. Pro charakterizaci účinnosti odsiřovacích technologií se používají pojmy „míra odstranění“, „účinnost odstraňování oxidu siřičitého“ nebo „spolehlivost procesu“. Tyto parametry charakterizují snížení znečištění životního prostředí oxidem siřičitým (SO<sub>2</sub>).

#### 2.1.1 Snižování obsahu síry v palivu

Způsoby odstraňování síry z uhlí před spalováním (tzv. preventivní opatření) lze podle [7] rozdělit do čtyř hlavních skupin:

- fyzikální,
- biologický,
- fyzikálně-chemický,
- chemický.

Pro porovnání různých technologií se zavádí tzv. stupeň odsíření *RDS* (z angl. *Removal Degree of Sulphur*):

$$RDS = \frac{Y_0^d - Y^d}{Y_0^d} \cdot 100, \quad (2.1)$$

kde  $Y_0^d$  je hmotnostní zlomek síry v suchém vzorku,  $Y^d$  hmotnostní zlomek v suchém vzorku odsířeného uhlí.

Fyzikální metody odsíření zajišťují odstranění minerálních složek z uhlí. Jsou založeny na různých fyzikálních vlastnostech (hustotě, elektromagnetických vlastnostech, schopnosti smáčení) organických a minerálních látek uhlí. Mezi fyzikální metody patří flotace, gravitační metody, magnetická a elektrická separace. Tyto metody dosahují různých stupňů odsíření v důsledku snížení obsahu anorganické (převážně pyritické) síry.

Podstatou biologických metod je selektivní oxidace síry v uhlí v důsledku zavádění biologicky aktivních složek nebo vytváření podmínek pro intenzivní aktivitu bakterií přítomných v uhlí. Bakterie umožňují odstranit (40–100) % pyritu a (20–100) % organické síry (zdroje citovány v [7]).

Fyzikálně-chemické metody spočívají v selektivním rozpouštění (extrakci) síry různými chemickými činidly při zvýšených teplotách. Jako činidla se používají alkoholy, peroxid vodíku, perchlorethylen, oxid uhelnatý. „Čistá“ extrakce umožňuje v průměru dosáhnout *RDS* (pyrit / organický) až (20–60) % a *RDS* (celkem) - až (20–50) %. Tato skupina metod

zahrnuje extrakci uhelné síry, která je nejprve přeměněna na (primárně ve vodě) rozpustnou formu. Stupeň odsíření je asi (90–100) %.

Chemická úprava je založena na oxidaci nebo redukci síry v uhlí za vzniku plyných produktů. Síra se před spalováním uhlí přeměňuje na nehořlavou (sírovou) formu. Bylo zjištěno, že síra v černém uhlí se přeměňuje na oxid siřičitý a síra v lignitu na sirovodík (detaily viz [7]).

### **2.1.2 Metody odsiřování spalin**

Vzhledem k vyšší ekonomické náročnosti a nízké účinnosti odsiřování paliva jsou v dnešní době nejčastěji používané metody odsiřování spalin. Metody odsiřování při/po spalovacím procesu lze rozdělit na neregenerativní (mokrý, polosuchý a suchý) a regenerativní. Odsiřování spalin je možné realizovat [8], [9]:

- katalytickou oxidací na  $\text{SO}_3$ ,
- vázáním na vhodné tuhé aditivum (absorpci).

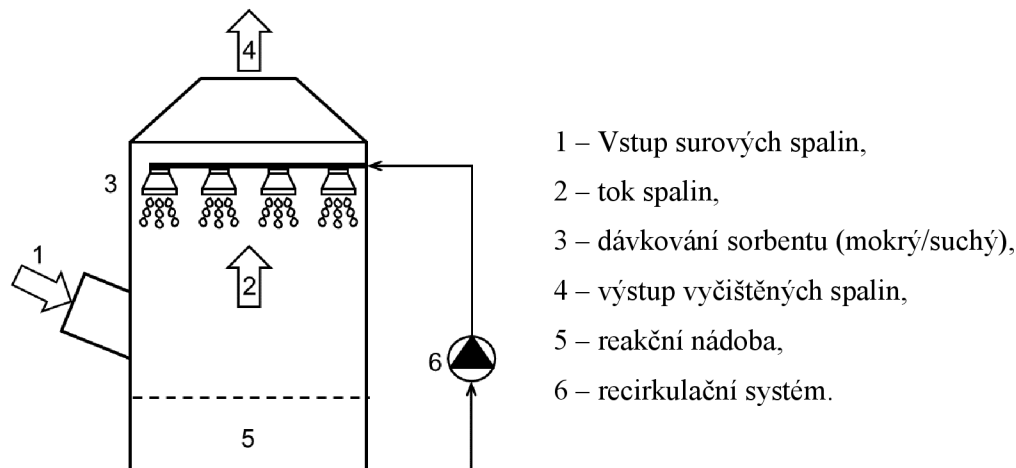
Ve velkých energetických zařízeních se s ohledem na ekonomiku provozu a účinnost využívají zejména absorpční metody. Absorpce je proces, při kterém se některé složky plyné směsi v důsledku fyzikálních a chemických procesů zachycují (absorbují) v tuhé látce (absorbentu). Nejčastěji používaným absorbentem je vápenec, příp. dolomit.

Suchá metoda je proces dávkování jemně mletého vápence do spalovacího prostoru. Absorpce probíhá za vysokých teplot (řádově kolem 1000 °C). Částice vápence s oxidy síry jsou z proudu spalin odstraněny ve filtrech.

Polosuchá metoda spočívá v rozprašování vodné suspenze vápence do proudu spalin ve spalovacím prostoru (zpravidla v horní části kotle). Produkty tohoto procesu jsou odloučeny ve filtrech.

Mokrý absorpční metoda (mokrý vypírka) využívá jako absorbentu vodné suspenze vápenatých hornin (vápence, dolomitu). Proces probíhá za výrazně nižších teplot než u suché metody. Teploty v absorbéru se pohybují mezi cca 60 °C (výstup) a 200 °C (vstup). Výsledným produktem mokré vypírky je síran vápenatý (sádrovec), který se následně odděluje a vzniklá sádra se dále využívá (např. ve stavebním průmyslu).

V českých uhelných elektrárnách je nepoužívanější metodou odsiřování spalin mokrá vápencová vypírka [5]. Funkční schéma absorbéru pro mokrou vápencovou vypírku je uvedeno na Obr. 2.1. Surové spaliny [1] vstupují do absorbéru. Změnou tvaru vstupního kanálu dojde ke změně směru toku spalin [2]. Do proudu spalin je tryskami [3] rozstříkována/rozprašována látka (absorbent), do které je plyn absorbován. Při kontaktu spalin s vhodným absorbentem dochází k absorpci  $\text{SO}_2$ . Vyčištěné spaliny vystupují z horní části absorbéru [4]. V této části jsou u metod používajících kapalné absorbenty zpravidla instalovány odlučovače kapek. V případě použití kapalné suspenze se zařízení označují jako mokré pračky.



Obr. 2.1: Absorbér – funkční schéma.

### 2.1.3 Porovnání odsiřovacích metod

Srovnání výše uvedených metod odsiřování je uvedeno v Tab. 1 [7]. Pro vzájemné porovnání metod používaných při přípravě paliva a při spalovacím procesu se zavádí koeficient konverze síry  $SC$  (z angl. *Sulfur Conversion*):

$$SC = \frac{Y_0^a \cdot 100 - Y^a \cdot Y_c}{Y_0^a}, \quad (2.2)$$

kde  $Y_0^a$  je hmotnostní zlomek síry ve výchozím analyzovaném vzorku,  $Y^a$  hmotnostní zlomek síry ve vzorku po odsiřování,  $Y_c$  hmotnostní zlomek odsiřovaného uhlí.

Tab. 1 dále uvádí náklady na kW instalovaného výkonu a na tunu zachyceného  $SO_2$ .

Tab. 1: Metody odstraňování  $SO_2$  ze spalin – výhody/nevýhody a orientační náklady [7].

Metoda	Výhody	Nevýhody	SC (%)	Cena (USD/kW)	Náklady (USD/t <sub>SO2</sub> )
Mokrě	Vysoký stupeň odsiřování Jednoduchá technologie. Převážná část průmyslových instalací.	Vysokoteplotní koroze částí zařízení. Vysoké investiční náklady. Omezené použití produktů.	85-100	65-310	750-1265
Polosuché a suché	Relativně drahé. Minimalizují vysokoteplotní korozi.	Nízký stupeň odsiřování. Omezené použití produktů.	85-95 30-100	40-205 170	660-880 490
Regenerační	Možnost recyklace síry ve formě $SO_{2(aq)}$ . Vyčištěné spaliny 5-10 ppm $SO_2$ .	Velmi vysoké náklady. Účinnost silně závislá na obsahu $SO_2$ ve spalinách.	90-100	380-650	1500-2530

## 2.2 Historický vývoj odsiřovacích procesů

### 2.2.1 Počátky studia odsiřovacích procesů

Historický průzkum odsiřovacích procesů provedl v 70. letech 20. století analytik energetických systémů J. C. Marten [10], který datoval počátky odsiřovacích procesů po roce 1850. Prvotní experimenty byly zaměřeny na absorpci  $\text{SO}_2$  ve vodě. Krátce poté byl objeven význam katalyzátorů a od té doby vědci zkoumali absorpci a adsorpci  $\text{SO}_2$  se širokou škálou látek. V období 1900-1940 se postupně přesunuly výzkumné aktivity od katalytické oxidace  $\text{SO}_2$  k absorpci ve vápenných/vápencových suspenzích, čímž byly položeny základy moderních odsiřovacích metod. Značného pokroku bylo dosaženo ve strukturování experimentální práce a stanovení základních principů chemických jevů. Tyto výzkumy také sloužily jako odrazový můstek k vyšším úrovním propracovanosti. Například studie absorpce vody nakonec vedly k myšlence použití různých přísad v roztoku nebo suspenzi ke zvýšení absorpce. Většina aktivity v oblasti odsiřování spalin od roku 1850 do roku 1950 se týkala následujících procesů:

- a) čištění vodou,
- b) použití kovových iontů,
- c) katalytická oxidace,
- d) suchá adsorpce,
- e) mokrá vápenná/vápencová vypírka,
- f) použití alkalických látek,
- g) čištění pomocí amoniaku,
- h) procesy založené na redukci  $\text{SO}_2$ .

Další práce související s absorpcí plynů byly zaměřeny na rozvoj znalostí v oblasti přenosových jevů ve vícefázovém systému plyn-kapalina. Mezi prvními, kdo se touto problematikou zabývali, byli J. C. Maxwell a S. Berg (oba zmíněni v [11]). W. G. Whitman [12] se zabýval experimentálním ověřením filmové teorie. Experimentální výzkum byl také realizován v oblasti studia rychlosti absorpce [13] a rozpustnosti plynů v různých roztocích [14], včetně absorpce ve sprchových věžích [15] a věžích s výplní [16]. Na základě těchto výzkumů byly postupně definovány a zpřesňovány postupy návrhu odsiřovacích zařízení [17], [18].

### 2.2.2 Průmyslové aplikace odsiřování

První velká průmyslová instalace odsiřovací technologie byla uvedena do provozu v elektrárně Battersea v Londýně v roce 1931. Voda, čerpaná z řeky Temže, byla rozprašována v horní části absorberu. Při pádu kapek proti proudu spalin dochází k absorpci  $\text{SO}_2$ . Tato technologie však ukázala nedostatečné znalost v několika oblastech:

- nedostatek údajů o rozpustnosti  $\text{SO}_2$  ve vodě při nízkých parciálních tlacích,
- nedostatek v porozumění vlivu pH na rovnováhu obsahu síranu,
- žádné důkladné pochopení mechanismu absorpce plynů v kapalině, ačkoli byl poté vypracován základní mechanismus,
- omezené znalosti obecných zásad při navrhování praček pro absorpci plynů.

Jeden z hlavních konstruktérů uvedeného zařízení, Dr. R. Lessing [19], popsal největší úskalí při použití vypírky vodou. Jednalo se zejména o vysokou spotřebu vody, která



by při plném výkonu elektrárny čítala dvojnásobek průtoku Temží. U vody nedocházelo k žádné regeneraci, a proto hrozilo okyselení řeky s vážnými biologickými důsledky. Provozu dále komplikovala tvorba vodního kamene na ocelových površích.

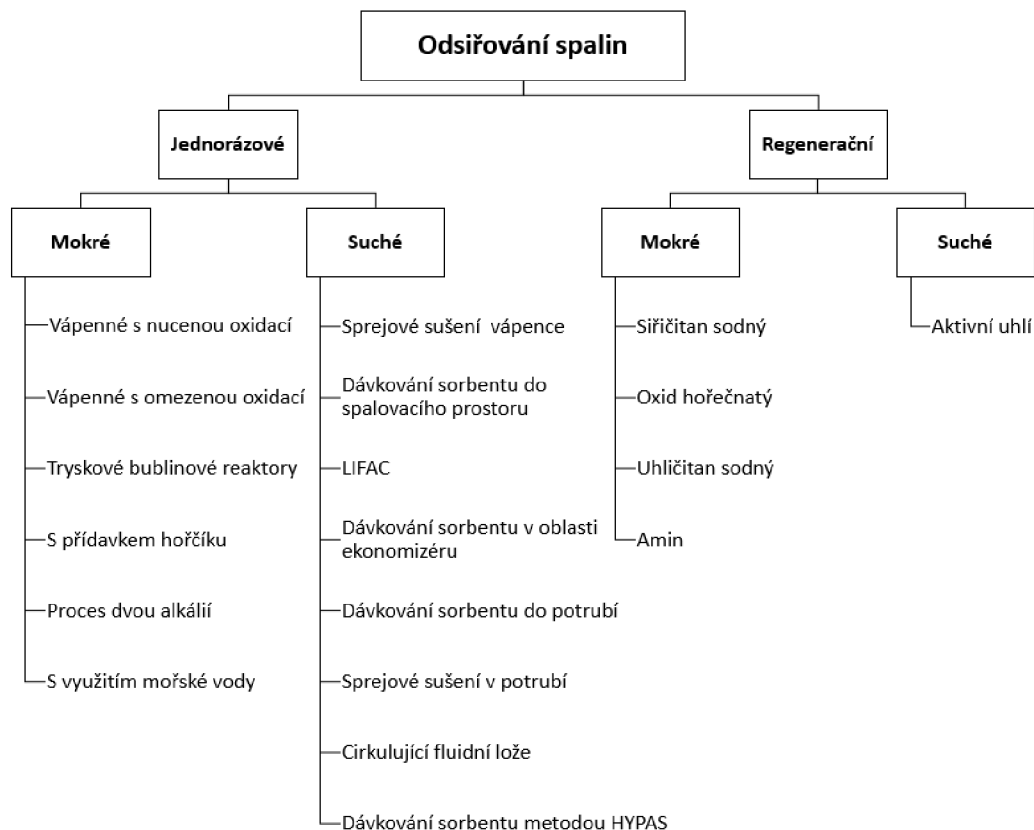
Výše uvedené nedostatky první instalace byly částečně odstraněny v následujících instalacích v britských elektrárnách Swansea a Fulham [10]. Hlavní vylepšení konstrukce spočívala v:

- míchání vápenné suspenze do proudu vody před jejím vstřikováním do pračky,
- instalace retenční nádrže bezprostředně za výstupem kapaliny z pračky.

Tato opatření zajistila vyšší míru absorpce, dostatečný čas pro chemické reakce přeměny na sulfity a sulfáty a možnost recirkulace suspenze a tím snížení spotřeby vody. Ve Fulhamu dále proběhla rozsáhlá studie tvorby vodního kamene. Při testech bylo zjištěno, že dávkování krystalů síranu vápenatého ovlivní srážení síranem a siřičitanem tak, aby mělo tendenci probíhat spíše na krystalech než na povrchu zařízení.

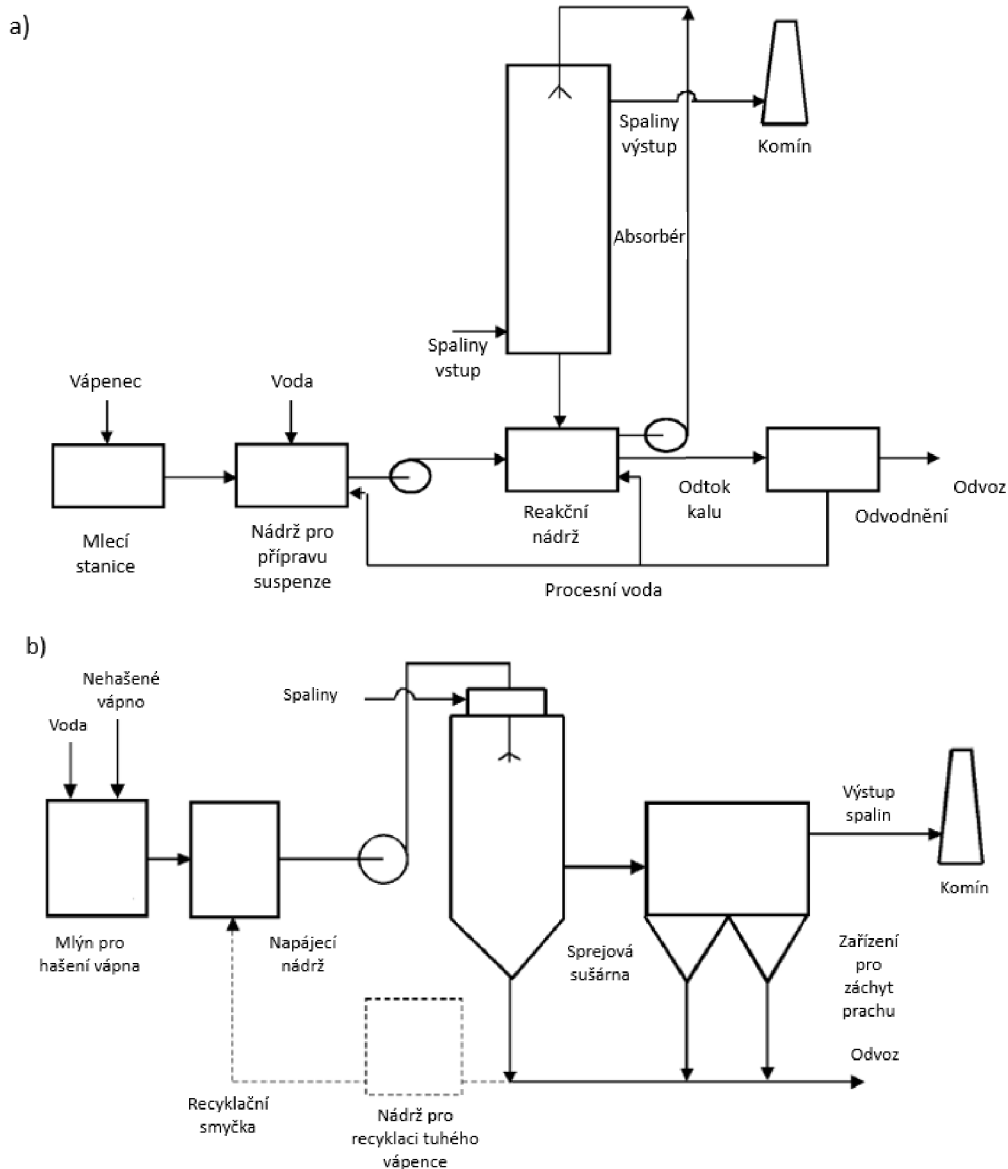
První zařízení pro mokrou vápencovou vypírku bylo uvedeno do provozu v únoru 1972 v elektrárně ve Will County, Illinois [10]. Během počátečního provozu došlo k mnoha problémům s ucpáváním a korozi. Většina těchto problémů byla zmírněna mechanickými revizemi. Dále se objevily problémy při zpracování spalin z uhlí s vysokým obsahem síry. Mezi tyto problémy patří přetížení praček a eliminátorů mlhy, znečištění a netěsnosti v ohřivačích.

V roce 1977 byly na počátku komerční implementace i metody katalytické oxidace a suché absorpce. Další rozvoj a přehled metod uvádí ve své práci Srivastava a Jozewicz [20], kteří se zaměřují na stav v USA do roku 1998. Dostupné technologie odsíření spalin jsou uvedené na Obr. 2.2.



Obr. 2.2: Rozdělení odsiřovacích procesů (převzato z [20]).

U amerických aplikací technologie odsíření, které začaly fungovat v letech 1991–1995, byly podle [20] použity převážně procesy mokré vápencové vypírky (WFGD, z angl. *Wet Flue Gas Desulfurization*) s použitím vápence s nucenou oxidací (LSFO), příp. s přidavkem MgO (MEL, z angl. *Magnesium Enhanced Lime*) a dále suché vápenné procesy (LSD). Schéma mokrých a suchých procesů je ilustrováno na Obr. 2.3.



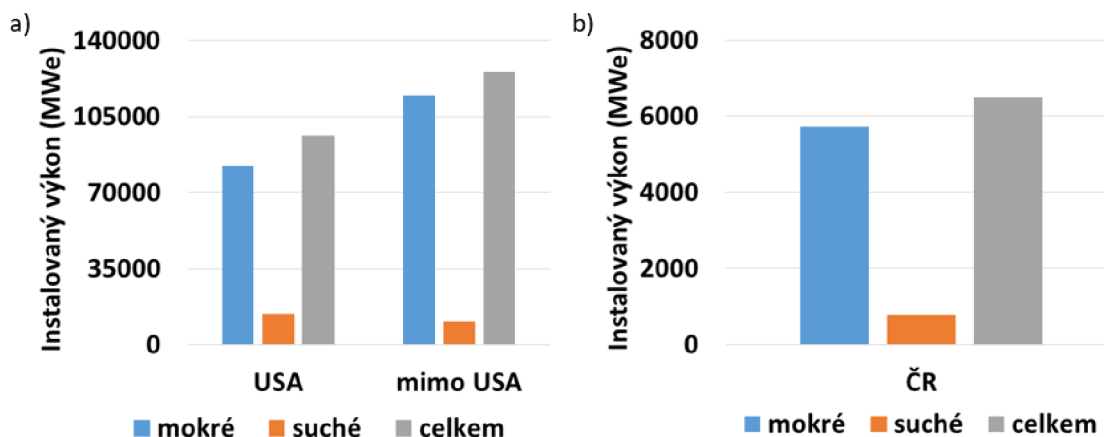
Obr. 2.3: Schéma odsíření: a) mokrá vypírka (LSFO), b) suché metody (LSD) (převzato z [20]).

Metoda LSFO (z angl. *Limestone Forced Oxidation*) používá jako sorbent kapalnou suspenzi vápna/vápence. Nucená oxidace je realizována v reakční nádobě ve spodní části absorberu, kde dochází k vefukování vzduchu. Kyslík obsažený ve vzduchu způsobuje přeměnu  $\text{CaSO}_3$  na  $\text{CaSO}_4$ . Tato reakce způsobí krystalizaci sádry přímo v reakční nádobě, což snižuje míru poškození ostatních částí zařízení.

Metoda LSD (z angl. *Lime Spray Drying*) používá k jemnému rozptýlení vápenné kaše do spalin rotační rozprašovače nebo dvou kapalinové trysky. Tento proces nejčastěji využívají zdroje, které spalují uhlí s nízkým až středním obsahem síry.

Celkový výkon zařízení s instalovanými technologiemi odsíření ilustrovaný na Obr. 2.4 odráží skutečnost, že většina mokrých vápencových systémů běžně dosahuje cca 90%

účinnosti při snížení koncentrace  $\text{SO}_2$ . Mokrý pračky s příslušnými modifikacemi a optimalizací provozu jsou schopny dosáhnout účinnosti odsíření více než 95 %.



Obr. 2.4: Rozšíření odsiřovacích technologií podle instalovaného výkonu uhelných elektráren: a) údaje k roku 1998 z [20], b) údaje pro ČR k roku 2006 z [5]).

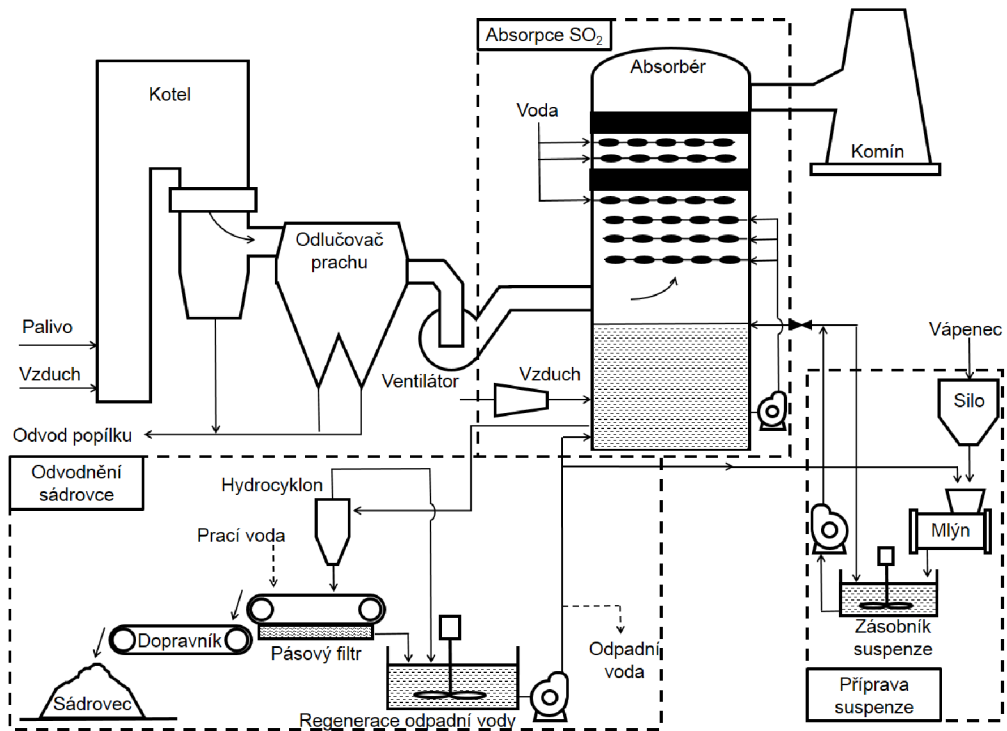
Vhodnost použití jednotlivých metod jednotlivých metod je značně závislá na ekonomice provozu. Srivastava a Jozewicz [20] uvádí, že investiční náklady systému LSD jsou vždy nižší než u systémů LSFO a MEL stejné velikosti. Pro elektrárny o velikosti do zhruba 250 MWe spalující uhlí s nízkým až středním obsahem síry (tj. uhlí s obsahem síry do 2 %) jsou obecně vhodnější suché metody (LSD). Mokrý metody (LSFO a MEL) jsou zpravidla vhodnější pro elektrárny s výkonem nad 250 MWe spalující uhlí se středním až vysokým obsahem síry (tj. uhlí s obsahem síry 2% nebo vyšším).

### 2.3 Mokrý vápencová vypírka

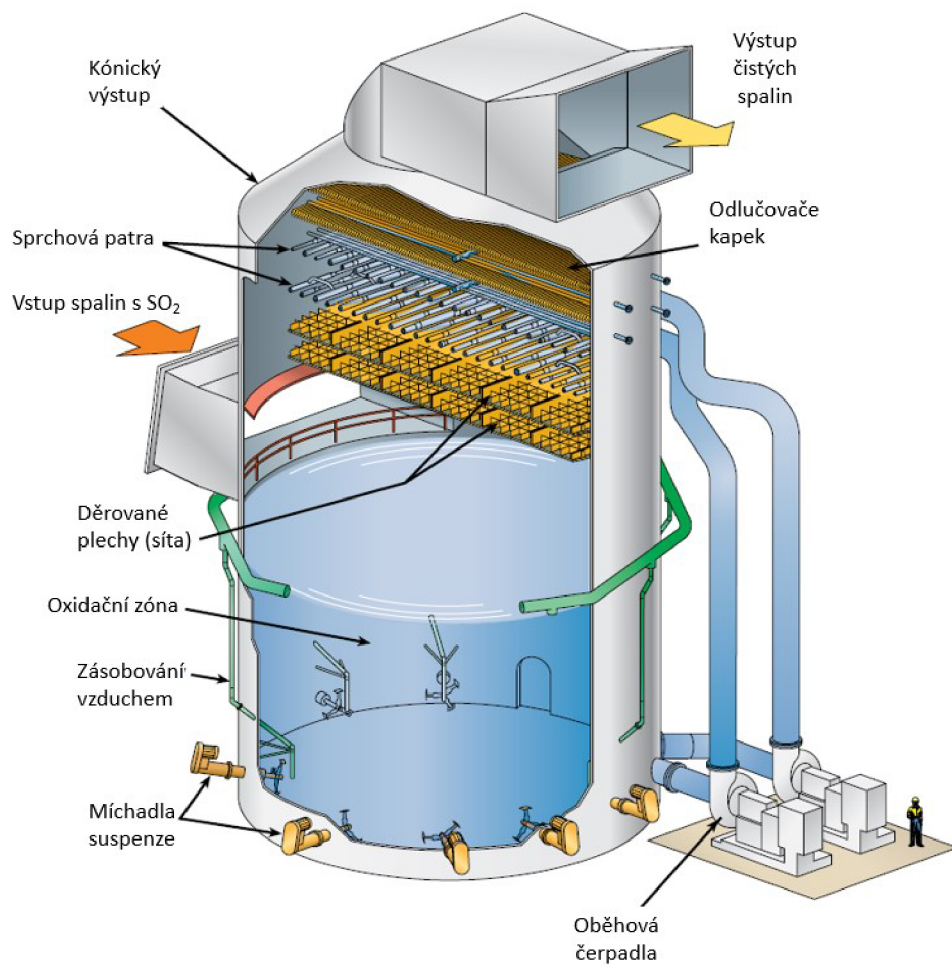
S ohledem na zadání disertační práce se další text zaměřuje pouze na odsiřování mokrou metodou, tzv. mokrou vápencovou vypírku. Mokrý vápencová vypírka probíhá v zařízení, které se nazývá absorber. Absorbér je umístěn v rámci technologického řetězce čištění spalin mezi kotlem a výstupem spalin do atmosféry (komínem). Umístění v rámci spalinové cesty je ilustrováno na Obr. 2.5.

Koncentrace  $\text{SO}_2$  ve spalinách se v závislosti na obsahu síry v palivu (uhlí s obsahem síry 2 % nebo vyšším) pohybuje v rozmezí (1 až 4)  $\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ . Mokrý vápencová vypírka umožňuje běžně dosáhnout koncentrace  $\text{SO}_2$  pod 400  $\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$  [21], [22]. Vhodné konstrukční úpravy umožňují snížit koncentrace až pod 200 mg. Příkladem je instalace děrovaných košů (angl. *trays* [23] ilustrovaných na obr. 2.6), které zajišťují tvorbu souvislé několikacentimetrové vrstvy suspenze, skrz kterou „probublávají“ spaliny. Zároveň dochází ke zrovnoměrnění rychlostního pole spalin. Tím je dosaženo účinnosti odsíření přes 99 % [24].

Pro mokrou vápencovou vypírku je dále možné použití jiných absorbentů, např. suspenzí hydroxidu sodného [25], nebo dalších aditiv na bázi  $\text{Na}^+$ , hořčnatých solí, organických kyselin apod.



Obr. 2.5: Technologické schéma mokré vápencové vypírky – převzato z [26].



Obr. 2.6: Absorbér s instalací děrovaných plechů (sít) [24].

### 3 Absorpce SO<sub>2</sub>

Absorpce je difusní proces, při kterém dochází k přestupu tepla a hmoty mezi plynnou a kapalnou fází [21]. Z pohledu termodynamiky je absorpce realizována v důsledku nerovnováhy v systému, přičemž hnací silou procesu je rozdíl chemických potenciálů složek mezi jednotlivými fázemi [22].

#### 3.1 Chemická termodynamika absorpce

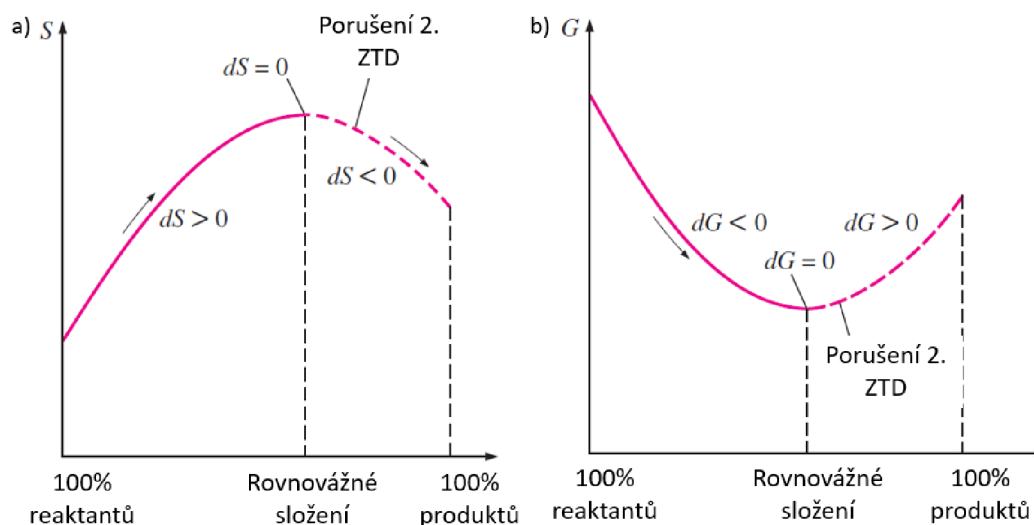
Tato kapitola dále popisuje podmínky, za kterých je z pohledu termodynamiky reakční systém v rovnováze. Chemická rovnováha systému je zpravidla definována při konstantní teplotě a tlaku. V důsledku dodávání tepla do systému dochází v běžném, nereakčním, i v reakčním systému k nárůstu entropie podle 2. zákona termodynamiky [27], [28]:

$$dS \geq \frac{dQ}{T}. \quad (3.1)$$

V případě adiabatického systému platí pro entropii

$$dS \geq 0. \quad (3.2)$$

Chemická reakce v systému probíhá ve směru nárůstu entropie (viz obr. 3.2a). Dosažení rovnováhy odpovídá stavu, kdy entropie dosahuje maxima, tedy  $dS = 0$ .



Obr. 3.1: Kritéria rovnováhy [27]: a) adiabatické ch. reakce, b) ch. rovnováhy při daném p,T.

Pro systémy, u kterých dochází k přenosu tepla mezi systémem a okolím je vhodnější definovat rovnovážná kritéria pouze na základě vlastností reakčního systému. Sloučením 1. a 2. zákona termodynamiky je odvozen vztah

$$dU + pdV - TdS \leq 0. \quad (3.3)$$

##### 3.1.1 Gibbsova funkce

Diferenciál Gibbsovy funkce ( $G = H - T \cdot S$ ) při konstantní teplotě a tlaku je

$$(dG)_{T,p} = dU + pdV - TdS, \quad (3.4)$$

příčemž kombinací rovnic (3.3) a (3.4) lze definovat podmínku chemické rovnováhy v souladu s ilustrací na obr. 3.1b jako

$$(dG)_{T,p} = 0. \quad (3.5)$$

Pro popis chemické rovnováhy směsi dále platí vztahy (3.6) až (3.8):

$$(dG)_{T,p} = \sum (dG_i)_{T,p} = \sum (\mu_i dn_i)_{T,p} = 0, \quad (3.6)$$

kde  $\mu_i$  je chemický potenciál, někdy též nazýván jako parciální molární Gibbsova energie, složky  $i$ . Hodnota chemického potenciálu je při dané konstantní teplotě a tlaku také konstantní.

Podmínka rovnováhy pro jednosložkový vícefázový systém předpokládá směr fází na mezi sytosti, tj. např. směs syté kapaliny a syté páry při dané teplotě a tlaku. Celková Gibbsova energie takové směsi je

$$G = m_l g_l + m_g g_g \quad (3.7)$$

a změna Gibbsovy energie

$$(dG)_{T,p} = g_l dm_l + g_g dm_g, \quad (3.8)$$

příčemž  $g$  je měrná Gibbsova energie a  $m$  hmotnost jednotlivých fází. V rovnovážném stavu, kde je  $(dG)_{T,p} = 0$ , platí v souladu se zákonem zachování hmoty  $dm_l = -dm_g$ . Rovnici (3.8) lze tedy přepsat ve tvaru

$$(dG)_{T,p} = (g_l - g_g) dm_l \leq 0. \quad (3.9)$$

Fáze jsou tedy v rovnováze, pokud jsou si chemické potenciály, tj. hodnoty měrné Gibbsovy energie, jednotlivých fází rovny. Pokud je systém v nerovnovážném stavu, chemické potenciály jsou rozdílné a jejich rozdíl je hnací silou pro dosažení rovnováhy.

### 3.1.2 Rovnovážná konstanta reakce

Pro uzavřenou soustavu složenou z látek B, C, D, mezi nimiž probíhá chemická reakce



kde  $b$ ,  $c$  představuje látkové množství výchozích látek (reaktantů) a  $d$ ,  $e$  množství produktů lze odvodit z obecné rovnice (3.6) tzv. intenzivní kritérium chemické rovnováhy:

$$\Delta G = d\mu_D + e\mu_E - b\mu_B - c\mu_C = 0. \quad (3.11)$$

Vzhledem k tomu, že není možné určit absolutní hodnotu chemického potenciálu látky, je pro praktické použití určena hodnota relativní, tj. hodnota rozdílu chemického potenciálu látky v uvažovaném a zvoleném (normálním) stavu:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln a_i, \quad (3.12)$$

kde aktivita  $a_i$  je zde mírou rozdílu chemických potenciálů [29]. Dalším odvozením (viz [29]) přechází rovnice (3.11) do tvaru

$$-\Delta G^0 = RT \ln K_a, \quad (3.13)$$

kde  $\Delta G^0$  je standardní změna Gibbsovy funkce a  $K_a$  představuje rovnovážnou konstantu reakce.

### 3.1.3 Závislost rovnovážné konstanty na teplotě

Pro určení teplotní závislosti rovnovážné konstanty vychází z rovnice (3.13) úprava

$$\frac{\Delta G^0}{T} = -R \ln K_a. \quad (3.14)$$

Dalším odvozením (viz [29]) vyplývá rovnice van't Hoffovy reakční isobary

$$\left[ \frac{\partial \ln K_a}{\partial T} \right]_p = \frac{\Delta H^0}{RT^2}, \quad (3.15)$$

kteřá platí pro teplotní změny za stálého tlaku. Neomezenou integrací rovnice (3.15) je teplotní závislost rovnovážné konstanty dána za předpokladu  $\Delta H^0 = \text{konst.}$  v mezích užití aproximace výrazem

$$\log K = \frac{B}{T} + C, \quad (3.16)$$

kde  $B, C$  jsou experimentálně získané konstanty.

### 3.1.4 Pravidlo fází

Vztahy a poznatky uvedené v předchozích kapitolách vycházely z předpokladu, rovnováhy při dané konstantní teplotě a tlaku. Rovnováhy může být nicméně dosaženo při různých podmínkách teploty (a tlaku). Typickým příkladem je různá teplota varu vody při změně atmosférického tlaku s nadmořskou výškou. V tomto případě je pro určení konkrétního stavu nutné definovat alespoň jednu z proměnných (teplota, tlak) přičemž druhá proměnná je na první závislá. Obecně je tedy nutné definovat minimální počet nezávisle proměnných, které jsou nutné pro popis konkrétního stavu. Počet nezávisle proměnných vychází z Gibbsova pravidla fází

$$v = k - f + 2, \quad (3.17)$$

kde  $v$  je počet stupňů volnosti systému,  $k$  je počet složek v systému a  $f$  počet fází.

Obecně je funkci pro Henryho koeficient možno definovat na základě chemických potenciálů [22]:

$$k_H = \exp\left(-\frac{\mu_{il} - \mu_{ig}}{RT}\right). \quad (3.18)$$

V případě plynu s malou koncentrací ve směsi je jeho parciální tlak nízký. Pro nízké tlaky (cca do  $5 \cdot 10^5$  Pa) je Henryho koeficient pouze funkcí teploty [27]. Rozpustností plynů

s potenciálním významem v chemii životního prostředí se zabýval Sander [30], který definoval Henryho koeficient několika způsoby:

- a) na základě molární koncentrace složky  $i$  v kapalně fázi a parciálního tlaku stejné složky v plynné fázi

$$k_H = \frac{c_{i,l}}{p_{i,g}}, \quad (3.19)$$

- b) jako poměr mezi koncentrací v kapalně a plynné fázi

$$k_H^{cc} = \frac{c_{i,l}}{c_{i,g}} = k_H RT. \quad (3.20)$$

Pokud je koeficient vztažen na normální (standardní) podmínky, tj.  $p^0 = 101325 \text{ Pa}$ ,  $T^0 = 298,15 \text{ K}$  je označen s doplňkovým indexem jako  $k_H^0$ . Teplotní závislost pak Sander [30] vyjadřuje rovnicí

$$k_H = k_H^0 \cdot \exp \left[ \frac{-\Delta H_r}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T^0} \right) \right], \quad (3.21)$$

kde  $\Delta H_r$  je rozpouštěcí entalpie. Rovnici (3.21) lze převést do tvaru:

$$\frac{-d \ln k_H}{d(1/T)} = \frac{\Delta H_r}{R}. \quad (3.22)$$

Hodnoty teplotní závislosti  $\frac{-d \ln k_H}{d(1/T)}$  jsou uvedeny v příslušných tabulkách, např. [30].



## 3.2 Základy přenosu tepla

Přenos tepla, stejně jako všechny ostatní přenosové jevy, lze popsat obecnou bilanční rovnicí, vyjadřující jednotlivé mechanismy přenosu:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Rychlost} \\ \text{akumulace} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Rychlost} \\ \text{konvektivního} \\ \text{přenosu} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Rychlost} \\ \text{molekulárního} \\ \text{přenosu} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Rychlost} \\ \text{vzniku} \end{array} \right\}. \quad (3.23)$$

Pro přenos tepla je odvozena tzv. Fourier Kirchhofova rovnice ve tvaru

$$\rho c_p \frac{DT}{D\tau} = -\nabla \cdot \dot{q} + \tau_{ij} : \Delta + Q^g, \quad (3.24)$$

kteřá vychází z bilance energie s definicí tepelného toku kondukcí pomocí Fourierova zákona

$$\dot{q} = -\lambda \cdot \nabla T \quad (3.25)$$

a tepelného toku konvekcí pomocí Newtonova ochlazovacího zákona

$$\dot{q} = \alpha \cdot \Delta T. \quad (3.26)$$

Analytické řešení přenosu tepla je pro případy v inženýrské praxi zpravidla komplikované. Přenos tepla vedením je možné řešit analyticky pouze pro jednoduché případy, např. jednoduché stěny, případy bez zdrojů tepla apod. Vztah (3.26) pro výpočet tepelného toku konvekcí se zdá být triviálním. Výpočet je v podstatě založen na správném určení součinitele přestupu tepla, který ale zahrnuje různorodé vlivy druhu proudění tekutiny, jejích termofyzikálních vlastností závislých na teplotě a geometrického uspořádání (tvaru) teplosměnné plochy. Tyto vlivy způsobí, že součinitel přestupu tepla je funkcí mnoha proměnných, jejichž zahrnutí do matematického modelu je komplikované. V praxi se proto určuje součinitel přestupu na základě empirických vztahů, přičemž se využívá teorie podobnosti [31], [32].

Teorie podobnosti vychází z předpokladu, že dva různé systémy jsou podobné, pokud mají shodné hodnoty tzv. kritérií podobnosti. Kritéria podobnosti (nazývaná též kritériální čísla) jsou bezrozměrná čísla, určená na základě parametrů charakterizujících skutečnosti a jevy podstatné pro řešení konkrétního problému. Nejjednodušším případem je podobnost geometrická, která vztahuje základní rozměry řešeného případu, např. poměr průměru a výšky válce.

Při řešení přenosu tepla konvekcí jsou často používána tato bezrozměrná kritéria [31]:

- Nusseltovo číslo

$$\text{Nu} = \frac{\alpha L}{\lambda}, \quad (3.27)$$

kteřé vyjadřuje podobnost přenosu tepla konvekcí a kondukcí v mezní vrstvě tekutiny.

- Prandtlovo číslo

$$\text{Pr} = \frac{v}{a}, \quad (3.28)$$

které popisuje termofyzikální podobnost tekutin.

- Reynoldsovo číslo

$$\text{Re} = \frac{v \cdot L}{\nu}, \quad (3.29)$$

které vyjadřuje podobnost setrvačných a vazkých sil.

- Grashofovo číslo

$$\text{Gr} = \frac{\beta \cdot g \cdot L^3 \cdot \Delta T}{\nu^2}, \quad (3.30)$$

které vyjadřuje podobnost vztlkových a vazkých sil.

Tento výčet není kompletní, uvádí pouze základní a lokálně nejpoužívanější podobnostní čísla. Pro řešení problematiky konvekce je výchozím Nusseltovo číslo, z něhož se dále určuje součinitel přestupu tepla. Nusseltovo číslo je určeno na základě podobnostních kritérií, např. pro volnou konvekci

$$\text{Nu} = f(\text{Pr}, \text{Gr}), \quad (3.31)$$

a pro nucenou konvekci

$$\text{Nu} = f(\text{Pr}, \text{Re}), \quad (3.32)$$

Konkrétní podoba funkce pro Nusseltovo číslo vychází z empirických vztahů, které lze pro konkrétní případy nalézt v odborných publikacích (např. [32], [33]).

Vzájemnou kombinací podobnostních čísel mohou vznikat další podobnostní kritéria, jako např. Rayleighovo číslo

$$\text{Ra} = \text{Pr} \cdot \text{Gr}, \quad (3.33)$$

které souhrnně vyjadřuje podobnost tíhových, vazkých a vztlkových sil.

### 3.3 Základy přenosu hmoty

Uvnitř vícefázového systému může docházet k přenosu hmoty, který představuje přenos jednotlivých složek systému mezi fázemi v důsledku difuze a/nebo chemických reakcí [32].

#### 3.3.1 Koncentrace složek ve směsi

Pro určení stavových veličin směsi je zásadní znalost složení směsi. Pro určení lokálních hodnot vlastností směsi je nutné určit lokální zastoupení jednotlivých složek. Jedním ze způsobů je definice hmotnostního zlomku složky  $i$  ve směsi

$$Y_i = \frac{\rho_i}{\rho} = \frac{\text{hmotnost složky } i}{\text{hmotnost směsi}}, \quad (3.34)$$

přičemž platí  $0 \leq Y_i \leq 1$  a  $\sum_i Y_i = 1$ .

Při řešení přenosu hmoty s chemickými reakcemi je dále hojně využíváno molární koncentrace složky  $i$

$$c_i = \frac{\rho_i}{M_i}. \quad (3.35)$$

Molární koncentrace směsi je  $c = \sum_i c_i$ . Poměr koncentrace složky k celkové molární koncentraci směsi je nazývána molárním zlomkem

$$x_i = \frac{c_i}{c}, \quad (3.36)$$

pro který platí obdobně jako pro hmotnostní zlomek  $0 \leq x_i \leq 1$  a  $\sum_i x_i = 1$ .

#### 3.3.2 Transport složek v rámci systému

Přenos hmoty je realizován dvěma základními mechanismy, tj. molekulárním (difuzním) a konvektivním přenosem.

Složka  $i$  ve směsi difunduje z oblasti s vyšší koncentrací do oblasti s nižší koncentrací. Přenos hmoty složky  $i$  difuzí je popsán Fickovým zákonem

$$j_i = -\rho D_{im} \nabla Y_i. \quad (3.37)$$

K transportu složky konvektivním přenosem dochází v důsledku proudění. Pro systém pohybující se rychlostí  $v$  a jeho jednotlivé složky  $i$  pohybující se rychlostí  $v_i$  platí pro hmotnostní tok systému

$$n = \rho v = \sum_i \rho_i v_i. \quad (3.38)$$

Hmotnostní tok složky je poté roven součtu difuzního a konvektivního přenosu

$$n_i = Y_i n + j_i. \quad (3.39)$$

Celková bilance složky v rámci systému, včetně vzniku či zániku v důsledku chemické reakce v rámci jedné fáze (homogenní reakce), je definována na základě obecné rovnice pro zachování hmoty

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i v) = -\nabla \cdot j_i + r_i. \quad (3.40)$$

Tato rovnice nezahrnuje reakce na hranicích systému (heterogenní reakce). Tyto reakce však mohou být zahrnuty v rámci okrajových podmínek. Způsob řešení konkrétních příkladů je uveden např. v [32].

### 3.4 Analogie přenosu tepla a hmoty

Vztahy používané při řešení přenosu tepla i přenosu hmoty obecně bilancují toky v důsledku rozdílu potenciálů. V případě přenosu tepla se jedná o rozdíl teplot, u přenosu hmoty rozdíl koncentrací v různých místech řešené oblasti. Analogické jsou i základní vztahy, popisující konvektivní přenos tepla a hmoty

$$\dot{q} = \alpha \cdot (T_1 - T_2) \quad (3.41)$$

$$\dot{n} = \beta_c \cdot (c_1 - c_2). \quad (3.42)$$

Obdobně jako při řešení přenosu tepla používáme i při řešení přenosu hmoty bezrozměrná kritéria. Analogické k Nusseltovu číslu je Sherwoodovo číslo

$$Sh = \frac{\beta_c L}{D}, \quad (3.43)$$

kteřé vyjadřuje podobnost konvektivního a difuzního přenosu hmoty.

Analogie mezi přenosem hybnosti a hmoty popisuje Schmidtovo kritérium

$$Sc = \frac{\nu}{D}. \quad (3.44)$$

Tvarově podobné dvojice kritérií používané pro přenos tepla a hmoty jsou z dříve uvedených:

- Nusseltovo a Sherwoodovo,
- Prandtlovo a Schmidtovo.

Reynoldsovo číslo je použitelné pro přenos tepla i přenos hmoty.

Jako příklad je níže uvedena analogie mezi rovnicí pro přenos hmoty v plynech ve válcových kolonách se stěnami smáčenými kapalinou [31]:

$$Sh = 0,023 Re^{0,83} Sc^{0,33} \quad (3.45)$$

a rovnice pro konvektivní přenos tepla v potrubí při turbulentním proudění [31]:

$$Nu = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,33}. \quad (3.46)$$

Pro použití výsledků platných pro přenos tepla při řešení přenosu hmoty je nutné respektovat několik zásad [31]:

- platí úplná geometrická podobnost,

- vztahy byly získány pro přestup tepla bez přenosu hmoty, tudíž odpovídají případům přenosu pro nízké hodnoty konvektivního přenosu hmoty,
- fyzikální parametry složek a směsi jsou konstantní,
- v řešených systémech nejsou zdroje tepla/hmoty,
- je možné zanedbat záření (radiaci) a disipaci mechanické energie.

### 3.5 Teorie přenosu hmoty přes fázové rozhraní

Přenos hmoty ve vícefázových systémech se vyskytuje v mnoha technických aplikacích, např. v chemickém, energetickém a potravinářském průmyslu. Ve vícefázovém systému je přenos hmoty řízen nejen stavem systému a gradientem koncentrací, ale také v důsledku kinetiky chemických reakcí, aktivačních energií apod. Popis přenosu hmoty přes mezifázové rozhraní, např. kapalina – plyn, je obsaženo v několika základních teoriích [34].

#### 3.5.1 Filmová teorie

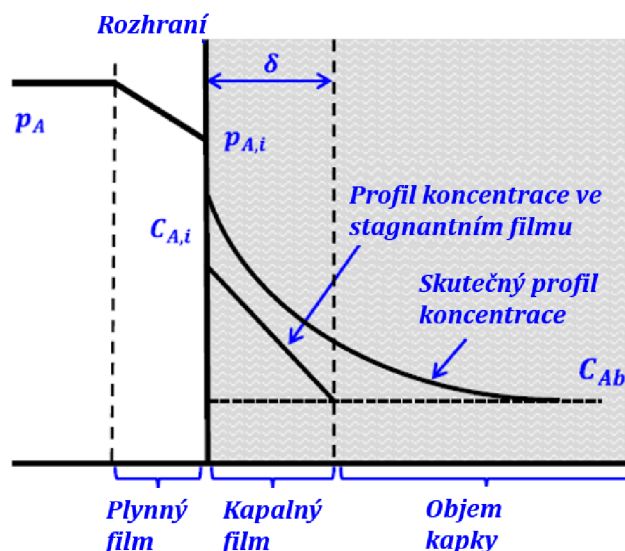
Filmová teorie (z angl. *Two Film Theory*) představuje nejstarší popis pro přenos hmoty v soustavě kapalina – plyn. Lewis a Whitman [35] zavedli předpoklad existence filmu určité tloušťky  $\delta$  na obou stranách rozhraní, tj. v kapalině i plynu (viz obr. 3.2). Film v blízkosti fázového rozhraní představuje dominantní odpor přestupu hmoty. Teorie je založena na několika hlavních předpokladech:

- k difuznímu přenosu hmoty dochází pouze v rámci filmu, mimo něj je koncentrace složky  $c_{AB}$  homogenní v důsledku dokonalého promíchání tzv. turbulentního jádra,
- přenos hmoty ve filmu probíhá za ustálených podmínek v souladu s Fickovým zákonem,
- celkový tok hmoty je malý a přenos probíhá při malých koncentracích.

Následně vychází profil koncentrace lineárně, přičemž koeficient přenosu hmoty na straně kapaliny je

$$k_1 = \frac{D_{g-l}}{\delta_1}. \quad (3.47)$$

Lineární průběh je značně odlišný od skutečného průběhu koncentrace, nicméně pro případy, kdy je součinitel přestupu hmoty přímo úměrný difuznímu koeficientu lze tento přístup použít. Tato teorie nicméně neumožňuje přímo určit tloušťku filmu.



Obr. 3.2: Filmová teorie – schématické znázornění filmů v blízkosti rozhraní (převzato z [34]).

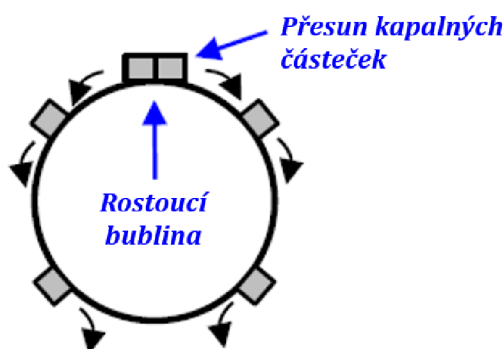
### 3.5.2 Penetrační teorie

Rozšíření filmové teorie pro nestacionární děje představuje penetrační teorie popsaná Higbiem [36]. Teorie předpokládá, že každý element kapaliny na rozhraní kapalina-plyn je v kontaktu s plynem pouze během velmi krátkého času, jak je schématicky ilustrováno na obr. 3.3. Hlavní předpoklady pro užití penetrační teorie jsou:

- přenos hmoty z plynu do elementu kapaliny probíhá za neustálených podmínek v okamžiku kdy je kapalina a plyn ve vzájemném kontaktu,
- všechny elementy kapaliny jsou v kontaktu s plynem stejně dlouhou dobu,
- na rozhraní kapalina-plyn je dosaženo rovnovážného stavu.

Součinitel přestupu hmoty na straně kapaliny je závislý na době kontaktu  $\theta$  a hodnotě difuzního koeficientu:

$$k_1 = 2 \left( \frac{D_{g-1}}{\pi\theta} \right)^{0,5} \quad (3.48)$$



Obr. 3.3: Penetrační teorie – schématické znázornění (převzato z [34]).

### 3.5.3 Teorie obnovy povrchu

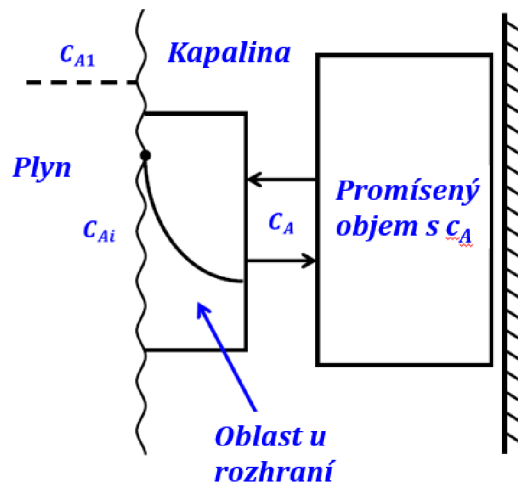
Teorie obnovy povrchu, neboli Danckwertsova teorie [37], rozšiřuje penetrační teorii na věrohodnější situaci, kdy je kapalina rozdělena na dvě oblasti. První je rozsáhlá, dobře

promísená oblast. V blízkosti rozhraní se nachází druhá oblast, která se obnovuje tak rychle, že se chová jako tlustý film (viz obr. 3.4). Hlavní předpoklady této teorie jsou:

- elementy kapaliny na rozhraní jsou náhodně nahrazovány elementy z vnitřní oblasti kapaliny,
- v každém okamžiku má každý element na rozhraní stejnou pravděpodobnost, že bude nahrazen,
- přenos hmoty z plynu do elementu kapaliny během jeho přítomnosti na rozhraní probíhá za neustálých podmínek.

Součinitel přestupu hmoty na straně kapaliny je závislý na frekvenci obnovování povrchu  $s$  a hodnotě difuzního koeficientu:

$$k_1 = (sD_{g-l})^{0,5}. \quad (3.49)$$

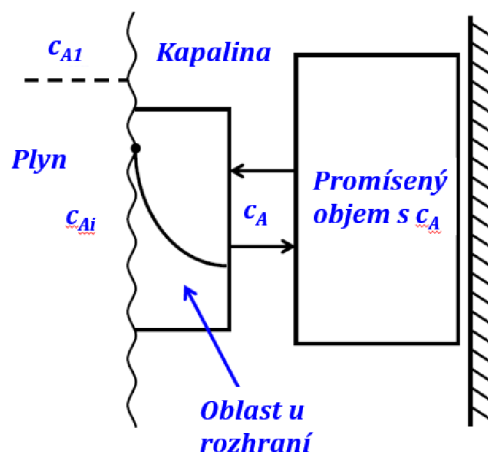


Obr. 3.4: Teorie obnovy povrchu – schématické znázornění (převzato z [34]).

### 3.5.4 Přenos hmoty v systému kapalina-plyn s chemickou reakcí

Pokud současně s přenosem hmoty probíhá v systému chemická reakce, jsou profily koncentrací nelineární (viz obr. 3.5) a výše uvedené teorie musí být modifikovány. Průběh koncentrace je značně závislý na rychlosti reakce. Extrémně rychlé (okamžité) reakce probíhají přímo na fázovém rozhraní. Čím je reakce pomalejší, tím dále se šíří do kapaliny. Pro zahrnutí vlivu chemických reakcí je zaveden součinitel zvýšení přenosu hmoty v důsledku chemických reakcí

$$E = \frac{\text{přenos hmoty s chemickou reakcí}}{\text{přenos hmoty bez chemické reakce}} > 1. \quad (3.50)$$



Obr. 3.5: Přenos hmoty s chemickou reakcí – ilustrace profilů koncentrace (převzato z [34]).

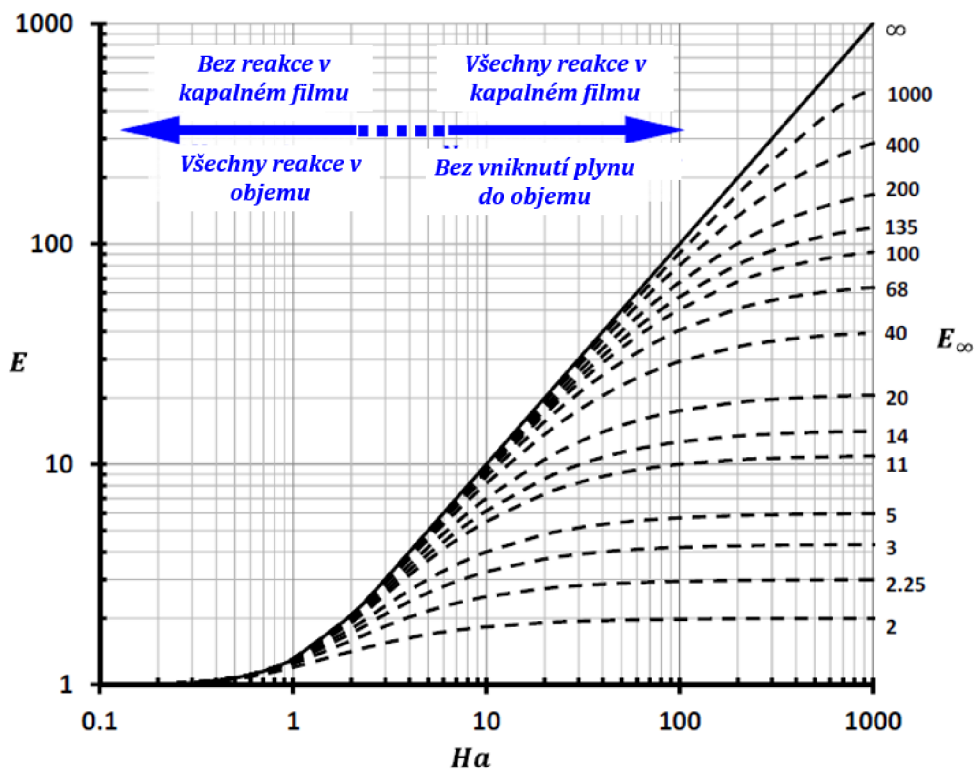
Reakční rychlost nevratné chemické reakce látek A, B řádu  $m$ ,  $n$  je

$$-r_A = k_{m,n} c_A^m c_B^n. \quad (3.51)$$

Koeficient zvýšení přenosu hmoty  $E$  je nejčastěji aproximován podle van Krevelena a Hoftijzera [38] jako funkce Hattova čísla

$$Ha = \frac{\sqrt{\frac{2}{m+1} k_{m,n} c_{A,i}^{m-1} c_{B,i}^n D_{A,B}}}{k_1}. \quad (3.52)$$

Závislost koeficientu zvýšení  $E$  na Hattově čísle pro chemickou rovnici prvního řádu je uvedena na obr. 3.6.

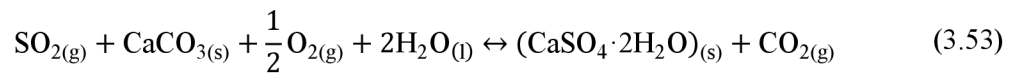


Obr. 3.6: Součinitel zvýšení přenosu hmoty pro chemickou rovnici 1. řádu (převzato z [34]).



### 3.6 Hlavní reakce při mokré vápencové vypírce

Chemické reakce při procesu odsíření mokrou vápencovou vypírkou lze popsat souhrnnou reakční rovnicí [21]:



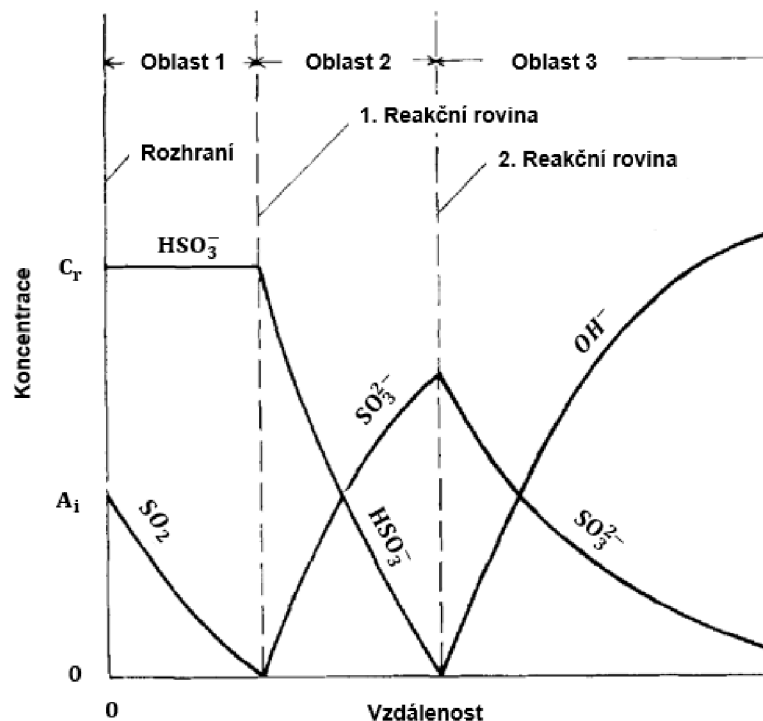
Z pohledu procesu souhrnná rovnice (3.53) zahrnuje dílčí reakce, které probíhají současně v různých částech absorbéru. Jedná se o reakce, které probíhají převážně:

- v prostoru pod tryskami, tj. *absorpce a neutralizace*,
- v zásobníku suspenze, tj. *regenerace, oxidace a srážení*.

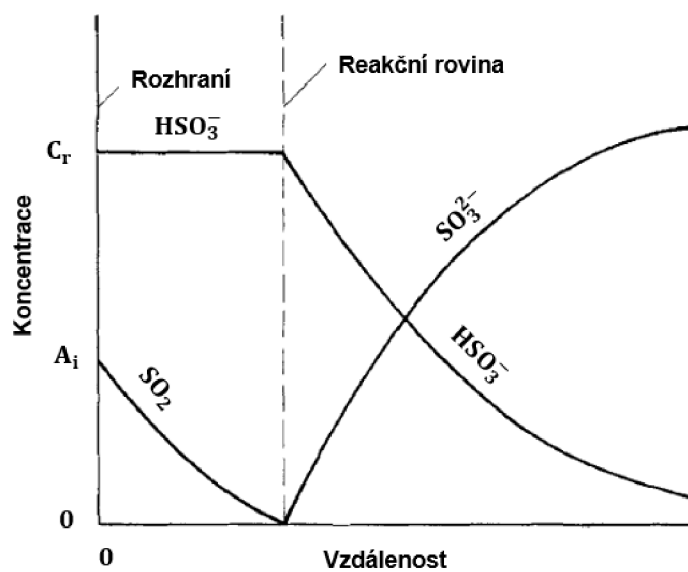
Tyto reakce představují komplexní děje z pohledu chemie i přenosů hmoty v pevné, kapalně i plynné fázi. Vlastní absorpce  $\text{SO}_2$  v kapalně suspenzi probíhá podle rovnic [39], [25], [40]:



Reakce (3.54) a (3.55) popisují rovnováhu v rámci kapalně fáze. Tyto dvě okamžité vratné reakce zvyšují přenos  $\text{SO}_2$  v rámci kapalně fáze pomocí přenosu  $\text{SO}_{2(\text{aq})}$  ve formě  $\text{HSO}_3^-$  a  $\text{SO}_3^{2-}$ . Průběhy koncentrací v kapalně fázi při absorpci  $\text{SO}_2$  ve vodných roztocích jsou ilustrovány na Obr. 3.7 a Obr. 3.8.



Obr. 3.7: Koncentrační profily při absorpci  $\text{SO}_2$  v roztoku  $\text{NaOH}$  – schéma (převzato z [25]).



Obr. 3.8: Koncentrační profily při absorpci  $\text{SO}_2$  v roztoku  $\text{Na}_2\text{SO}_3$  – schéma (převzato z [25]).

## 4 Přístupy k modelování procesu odsíření

Modelování fyzikálních procesů jsou dnes nedílnou součástí inženýrské a vědecké praxe. Numerická simulace je počítačové zpracování programu, který implementuje matematický model pro fyzický systém. Ke studiu chování systémů (většina nelineárních systémů), jejichž matematické modely jsou příliš složité na to, aby poskytly analytická řešení, jsou numerické simulace jediným použitelným řešením.

V oblasti odsířovacích procesů se modelování začalo uplatňovat zhruba před 30 lety. V dalších podkapitolách jsou uvedeny vybrané publikace týkající se problematiky modelování odsířovacích procesů v absorbéru. Publikace jsou v rámci podkapitol seřazeny chronologicky, přičemž oblast původu autorů ilustruje celosvětový vývoj v oblasti ochrany životního prostředí a aplikaci a optimalizaci odsířovacích technologií. Výčet publikací představuje zároveň přehled vztahů a přístupů testovaných při zpracování této práce. Obsah publikací bude dále využit pro definici testovacích úloh a volbu vstupních parametrů numerických modelů, např. materiálových konstant, teplotních závislostí některých parametrů atd. Součástí této kapitoly jsou vlastní rozborů (např. v kapitole 4.4, Obr. 4.10) při odlišnosti použitých rovnic, modelů a dalších vstupních parametrů při srovnání více autorů.

### 4.1 Modelování absorpce SO<sub>2</sub>

#### 4.1.1 S. Olausson a kol., Švédsko, 1993

Tým Ollausona [41] vyvinul model pro odstraňování oxidu siřičitého ze spalin absorpcí do vápencové suspenze. Cílem jejich práce bylo vytvořit matematický model, který popisuje chemické procesy v systému mokrého absorbéru, přičemž bylo důležité zajistit krátký výpočetní čas. Při tehdejších možnostech výpočtu na Macintosh SE / 30 pomocí numerického koprocesoru Motorola 68882 je čas v rozsahu 5-10 min.

Modelovaná jednotka odsíření spalin sestává z absorpční věže a oxidační nádrže. Spaliny vstupují do absorpční věže ve spodní části a setkávají se s vápencovou suspenzí. Proces absorpce je popsán pěti hlavními chemickými reakcemi, tj. rozpouštění CaCO<sub>3</sub> a Ca(OH)<sub>2</sub>, srážení a rozpouštění CaSO<sub>3</sub>, srážení CaSO<sub>4</sub>, absorpce SO<sub>2</sub> a oxidace SO<sub>3</sub><sup>2-</sup>.

Reakcemi omezujícími rychlost jsou rozpouštění vápence, srážení a rozpouštění siřičitanu vápenatého, srážení sádry, absorpce oxidu siřičitého a oxidace siřičitanu v suspenzi. Míra absorpce oxidu siřičitého a oxidu uhličitého ve věži se počítá podle modelu odvozeného z filmové teorie. Autoři uvádí, že tok SO<sub>2</sub> přes plynný film je v rovnováze s celkovým tokem síry v kapalném filmu:

$$-D_{\text{SO}_2} \frac{d[\text{SO}_2]}{dx} - D_{\text{HSO}_3^-} \frac{d[\text{HSO}_3^-]}{dx} - D_{\text{SO}_3^{2-}} \frac{d[\text{SO}_3^{2-}]}{dx} = k_{\text{SO}_{2g}} (p_{\text{SO}_2} - p_{\text{SO}_2}^{\text{int}}), \quad (4.1)$$

kde je  $k_{\text{SO}_{2g}}$  součinitel přestupu SO<sub>2</sub> na straně plynu,  $p_{\text{SO}_2}$  je parciální tlak SO<sub>2</sub> a  $p_{\text{SO}_2}^{\text{int}}$  je parciální tlak SO<sub>2</sub> na rozhraní.  $D_i$  jsou difúzní koeficienty s hodnotami dle Tab. 2.

Tab. 2: Difúzní koeficienty  $D_i$  ( $10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) při 25°C [33].

$D_{\text{SO}_2}$	$D_{\text{HSO}_3^-}$	$D_{\text{SO}_3^{2-}}$
200	133	96

Model byl testován na základě údajů z literatury a shoda mezi údaji a modelem byla dle autorů uspokojivá. Pro součinitel přestupu na straně plynu byla použita hodnota

$k_{\text{SO}_2, \text{g}} = 4 \cdot 10^{-5} \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  při uvažované hodnotě tloušťky filmu na straně plynu  $\delta_{\text{g}} = 10 \text{ } \mu\text{m}$ . Autoři dále konstatují, že součinitel přestupu je pro konkrétní zařízení konstantou, která závisí na vnitřním uspořádání a toku plynu. Míra záchyty  $\text{SO}_2$  roste se vzrůstající hodnotou součinitele přestupu na straně plynu.

Dále byla provedena analýza citlivosti modelu na vstupní hodnoty, ze které vyplývá výrazný vliv tloušťky filmu na straně kapaliny. Autoři zmiňují, že vhodnou volbou tloušťky filmu je možné odladit simulované hodnoty tak, aby odpovídaly hodnotám naměřeným. Z uvedených výsledků pro absorpci ve vodě vychází součinitel přestupu na straně kapaliny v rozsahu  $(3 \cdot 10^{-5}, 4 \cdot 10^{-4}) \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  pro tloušťky filmu  $\delta_{\text{g}} = (3-30) \text{ } \mu\text{m}$ .

Celkové zhodnocení potvrzuje použitelnost prezentovaného modelu, přičemž dochází k mírnému nadhodnocení koncentrací některých iontů v kapalně fázi.

#### **4.1.2 Ch. Brogren a H. T. Karlsson, 1997, Švédsko**

Článek [42] prezentovaný týmem z Lund University popisuje model pro predikci rychlosti rozpouštění vápencové suspenze jako funkce distribuce velikosti částic a stupně rozpouštění vápence. Výsledky modelu byly porovnány s experimentálními daty z laboratoře i reálného provozu. Práce se v podstatě omezuje pouze na kapalnou fázi (suspenzi) a oblast nádrže ve spodní části absorberu s uvažováním jejího promíchávání.

Přenos hmoty je modelován na základě předpokladů pro použití filmové teorie, tj. přenos hmoty je ustálený a kulové částice vápence jsou obklopeny stagnantním filmem. Součástí modelu je korekční faktor umožňující změnu toku v závislosti na stupni rozpuštění. Tento faktor odpovídá za účinky, jako je stárnutí, zaslepení, hromadění inertů na rozhraní pevné látky / kapaliny, změny aktivní oblasti atd. Bylo zjištěno, že změny v toku s rozpuštěnou frakcí mohou být způsobeny přítomností siřičitanu, ale také hromaděním inertních látek na rozhraní kapalina-pevná látka a/nebo změnami v oblasti efektivního (intenzivního) přenosu hmoty. Výpočty ukazují, že pokles toku udávaný pro siřičitany může mít významný dopad na kal a podmínky v reakční nádrži, tj. dopad na přeměnu vápence a vztah mezi zásaditostí kapaliny a pevné fáze. Při nepřítomnosti siřičitanů se tok z vápencových částic předpokládá konstantní s ohledem na stupeň rozpouštění. Bylo zjištěno, že výsledky modelování jsou v dobré shodě s naměřenými hodnotami z kontinuálně míchané nádrže. Model dokázal přesně předpovědět vliv distribuce velikosti částic a dobu zdržení reakční nádrže na konverzi a rychlosti rozpouštění vápence.

#### **4.1.3 D. Eden a M. Luckas, 1998, Německo**

Němečtí autoři publikovali ve své práci [43] poukazují na složitost procesu odsíření. Dále uvádí, že účinnost pračky spalin závisí na tak velkém počtu parametrů, že jejich vliv na absorpci nelze dostatečně zkoumat pouze pomocí experimentálních měření v pilotních nebo plnohodnotných zařízeních. Systematická a nákladově efektivní optimalizace dnes vysoce vyvinuté technologie je možná pouze s podporou simulačního modelu, který je založen na základních vědeckých a technických principech a obsahuje malý počet fyzikálně přesně definovaných parametrů, které lze použít k naladění modelu na vhodné laboratorní a průmyslové údaje.

Prezentovaný model se zaměřuje převážně na oblast absorberu, kterou proudí spaliny. Reakční nádrž je modelována pouze zjednodušeně jako rovnovážný reaktor, který nezohledňuje procesy rozpouštění vápence a krystalizace sádry. V článku jsou popsány velmi detailně všechny předpoklady užití modelu, mezi nimiž je opět použití filmové

teorie pro přenos hmoty přes fázové rozhraní. Pro výpočet přenosů tepla a hmoty používá rovnice:

$$Q_g = \alpha_g A_d (T_g - T_i), \quad (4.2)$$

$$J_{g,i} = \beta_{g,i} c_g A_d (x_i - x_i^{\text{int}}) + J_g x_i, \quad (4.3)$$

přičemž pro určení součinitelů přestupu tepla a hmoty používá obecně známé rovnice pro kulové částice

$$\text{Nu}_d = 2,0 + 0,6 \text{Re}_d^{1/2} \text{Pr}^{1/3}, \quad (4.4)$$

$$\text{Sh}_d = 2,0 + 0,6 \text{Re}_d^{1/2} \text{Sc}^{1/3}, \quad (4.5)$$

Oproti předchozím článkům je nově zaveden součinitel zvýšení přenosu hmoty na straně kapaliny v důsledku chemických reakcí  $E$ , který autoři uvádí pro každou chemicky aktivní složku na základě koncentrací složek v kapalně fázi. Pro  $\text{SO}_2$  je uveden vztah:

$$E_{\text{SO}_2} = 1 + \frac{D_{\text{HSO}_3^-}}{D_{\text{SO}_2,\text{aq}}} \frac{x_{\text{HSO}_3^-}^{\text{int}} - x_{\text{HSO}_3^-}}{x_{\text{SO}_2,\text{aq}}^{\text{int}} - x_{\text{SO}_2,\text{aq}}} + \frac{D_{\text{SO}_3^{2-}}}{D_{\text{SO}_2,\text{aq}}} \frac{x_{\text{SO}_3^{2-}}^{\text{int}} - x_{\text{SO}_3^{2-}}}{x_{\text{SO}_2,\text{aq}}^{\text{int}} - x_{\text{SO}_2,\text{aq}}}. \quad (4.6)$$

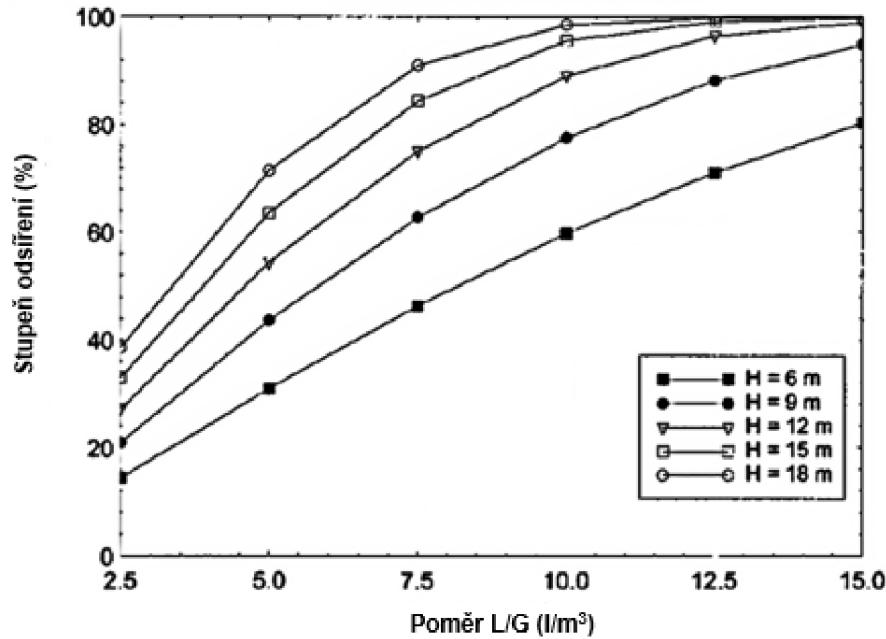
Prezentovaný model umožňuje simulovat absorber se sprchami jako souprůdý, nebo protiprůdý. Jsou zahrnuty následující složky ve fázi:

- plynné:  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SO}_2$ ,
- kapalně:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_{2,\text{aq}}$ ,  $\text{CO}_{2,\text{aq}}$ ,  $\text{SO}_{2,\text{aq}}$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{HSO}_3^-$ ,  $\text{SO}_3^{2-}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,
- pevné:  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{CaSO}_3 \cdot \frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ .

Termofyzikální vlastnosti složek jsou definovány v polynomickém tvaru v závislosti na teplotě a koncentraci. Pro simulaci jsou jako hlavní vstupní data definovány tyto:

- objemový průtok, teplota a rychlost surových spalin ve vstupním průřezu do absorberu,
- koncentrace složek v surových spalinách,
- poměr  $L/G$ ,
- úroveň pH v nádrži,
- obsah pevné složky a poměr mezi reagentem a sádrou v suspenzi,
- střední průměr kapek a jejich distribuce (omezena na 5 velikostí),
- rychlost suspenze na výstupu z trysek a úhel rozstříku,
- výška trysek, nebo střední výška sprchové zóny.

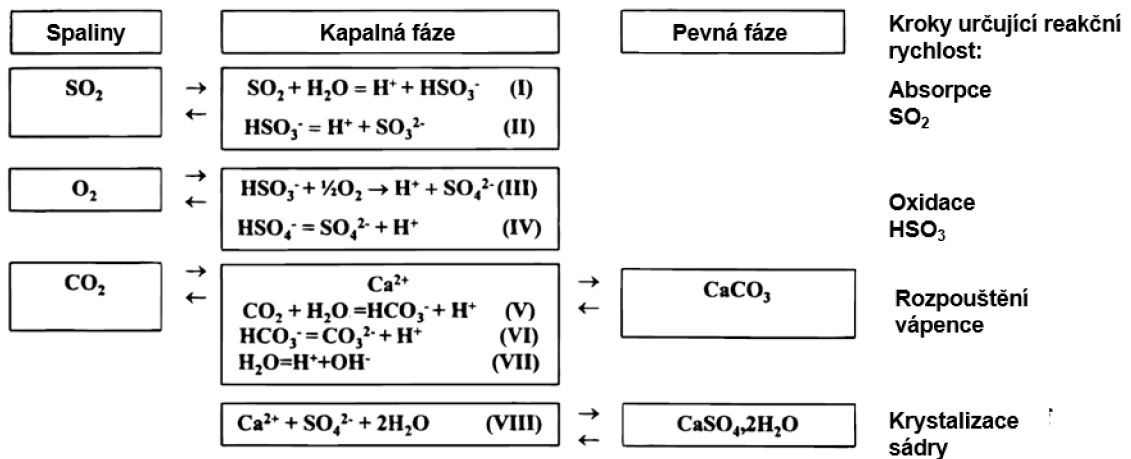
Výsledky simulací na Obr. 4.1 ukazují účinnost odsíření v závislosti na konstrukčních a provozních parametrech absorberu. Nejvyšších hodnot účinnosti je dosahováno pro vysoko umístěné sprchové zóny s vyšším poměrem  $L/G$ .



Obr. 4.1: Účinnost odsíření v závislosti na poměru  $L/G$  a výšce absorpční zóny (převzato z [43]).

#### 4.1.4 S. Kill a kol, 1998, Dánsko

Kolektiv autorů z Technical University of Denmark publikoval [39] svůj experimentální a numerický výzkum na zkušebním zařízení na mokré odsiřování spalin, založený na koncepci věže s výplní. Prezentovaný model je sestaven na základě 4 hlavních procesů uvedených ve schématu na Obr. 4.2.



Obr. 4.2: Schéma chemických a přenosových jevů při mokré vápencové vypírce (převzato z [39]).

Tok hmoty při absorpci  $\text{SO}_2$  je definován na základě rovnice:

$$N_{\text{SO}_2} = \frac{K_{\text{SO}_2} \frac{4}{d_{\text{Ab}}} (p_{\text{SO}_2} - k_{\text{H,SO}_2} c_{\text{SO}_2,\text{g}})}{4 \frac{\delta_{\text{Ab}}}{d_{\text{Ab}}}}, \quad (4.7)$$

Kde celkový součinitel přestupu hmoty je definován na základě součinitelů na straně plynné a kapalně fáze:

$$\frac{1}{K_{\text{SO}_2}} = \frac{1}{k_{\text{g,SO}_2}} + \frac{k_{\text{H,SO}_2}}{E_{\text{SO}_2} k_{\text{l,SO}_2}} \quad (4.8)$$

Součinitel zvýšení přenosu hmoty na straně kapaliny v důsledku chemických reakcí je definován stejně jako v kapitole 4.1.3 v rovnici (4.6).

Výsledky simulací dobře odpovídají experimentálním datům. Autoři uvádí, že navržené postupy modelování mohou být použity obecně pro jiná odsiřovací zařízení, ale hodnoty parametrů specifických pro zařízení, jako jsou koeficienty přenosu plynu a kapaliny, by se měly přednostně měřit v příslušném zařízení nebo hledat v literatuře. V příloze článku jsou uvedeny hodnoty rovnovážných konstant pro chemické rovnice, Henryho konstant a difúzních koeficientů při teplotě 50°C. Článek popisuje modelování absorberu s výplní, tedy jiný typ, než na který je zaměřena tato disertační práce, ale obsahuje matematický popis absorpce aplikovatelný na problematiku otevřeného absorberu.

Tab. 3: Vybrané rovnovážné konstanty [39].

Chemická rovnice	Rovnovážná konstanta (mol · m <sup>-3</sup> )
$\text{SO}_{2,\text{aq}} + \text{H}_2\text{O} = \text{H}^+ + \text{HSO}_3^-$	6,24
$\text{HSO}_3^- = \text{SO}_3^{2-} + \text{H}^+$	$5,68 \cdot 10^{-5}$
$\text{HSO}_4^- = \text{SO}_4^{2-} + \text{H}^+$	5,16

#### 4.1.5 Gómez a kol., 2007, Španělsko

Model prezentovaný v článku [40] je založen na vztazích a předpokladech popsáných dříve Brogrenem a Karlsonem [42] a Killeem [39]. Simulace jsou realizovány pomocí modelu, který postihuje podrobně aerodynamiku, hydrodynamiku a chemii v zařízení na mokré odsíření spalin. Model využívá přístup Euler-Euler pro vícefázové proudění v absorberu i nádrži. Jsou zohledněny základní mechanismy přenosu hmoty (jako je absorpce SO<sub>2</sub> a O<sub>2</sub> a desorpce CO<sub>2</sub>), stejně jako hlavní chemické reakce vedoucí k tvorbě sádry. Vzhledem k odlišné povaze toku v absorberu a nádrži byly realizovány dvě oddělené simulace provedené pro každou z domén a jejich řešení byla iterativně spojena přes okrajové podmínky během výpočtů.

Vyvinutý model byl aplikován na reálné zařízení. Výsledky jsou kvalitativně věrohodné a hodnoty dobře souhlasí s experimentálními daty pro čtyři různé provozní režimy. Ačkoli je model poměrně detailní, zmiňují autoři možné budoucí úpravy, konkrétně implementovat model vypařování kapek namísto předpokladu okamžitého odparu. Dále doporučují vytvořit složitější model rozpouštění vápence.

#### 4.1.6 X. Gao a kol., 2008, Čína

Čínský výzkumný tým publikoval v roce 2008 dva vzájemně se doplňující články [44] a [45]. Na základě dvou filmové teorie je absorpce pro SO<sub>2</sub> z plynné fáze v kapkách vápenné suspenze realizována výpočtem procesu přenosu hmoty pro SO<sub>2</sub> z kontinuální fáze do diskrétní fáze. Vliv vstupní koncentrace SO<sub>2</sub> na účinnost odsíření ukazuje, že zvýšení koncentrace na vstupu způsobí pokles účinnosti zachytu SO<sub>2</sub>. Jak se zvyšuje koncentrace SO<sub>2</sub> (parciální tlak) na vstupu, zvyšuje se přenos hmoty SO<sub>2</sub> do kapičky, což přispívá ke zvýšení koncentrace HSO<sub>3</sub><sup>-</sup> v kapkách a následně brání absorpci SO<sub>2</sub>. Při zachování ostatních parametrů byly simulace prováděny s různými průtoky a výsledky naznačují, že účinnost se zvyšuje s rostoucí rychlostí toku. Důvodem je, že zvýšená rychlost spalin zvýšila hybnost SO<sub>2</sub> a následně zvýšila celkovou retenci plynu [46]. Zvyšující se vliv vápencových částic na absorpci SO<sub>2</sub> závisí na délce doby kontaktu povrchu kapaliny a plynu. Vyšší rychlost navíc zvyšuje turbulenci v plynné fázi, a co je ještě důležitější, zvyšuje zadržení suspenze (množství kapek v definovaném objemu)

v absorberu [47]. Delší doba kontaktu by vedla k většímu zesilovacímu účinku pevných částic a následně ke zvýšení účinnosti odstraňování SO<sub>2</sub>. Při zachování rychlosti odvodu spalin (3 m/s) a vstupní koncentrace SO<sub>2</sub> (1200·10<sup>-6</sup> mol/m<sup>3</sup>) ukazují výsledky koncentrací SO<sub>2</sub>, že při zvyšování hodnoty L/G dochází ke zvýšení účinnosti odsíření. Lze vysvětlit, že zvýšení množství postřiku zvyšuje mezi povrchové oblasti pro přenos hmoty mezi SO<sub>2</sub> a vápenným absorbentem. Proto je parametr L/G důležitým pro dosažení uspokojivé hodnoty účinnosti odstraňování SO<sub>2</sub> s ohledem na provozní náklady.

#### 4.1.7 L. Marocco a F. Inzoli, 2009, Itálie

Autoři Luca Marocco a Fabio Inzoli pracovali na modelu aplikovatelném na zařízení pro mokrou vápencovou vypírku. V publikacích z roku 2009 [48] a 2010 [49] popsali CFD model protiproudého odsiřovacího absorberu a jeho aplikaci při simulaci průmyslového zařízení. V rámci práce byl vyvinut model pro výpočet rychlosti absorpce oxidu siřičitého do kapiček vápencové suspenze a implementován do komerčního CFD kódu (ANSYS Fluent). Kromě absorpce SO<sub>2</sub> model vyhodnocuje také odpařování kapiček suspenze a interakci kapiček se stěnou. Při testování modelu byly provedeny numerické simulace zkušebního zařízení při třech různých stupních diskretizace domény a výsledky byly porovnány s naměřenými daty. Výsledky získané s jemnou a střední sítí jsou přijatelné pro technické účely. V rámci analýzy sítě autoři dále uvádí, že diskretizace v oblasti vstupu do absorberu (počátek sprchové zóny) by měla být pečlivě analyzována, aby bylo možné získat přesná řešení.

První [48] z článků je zaměřen více na popis samotného modelu, který je založen na přístupu Euler-Lagrange pro modelování spalin jako kontinuální fáze a kapek suspenze jako fáze diskretní. Základní bilanční rovnice pro kontinuální (plynnou) fázi jsou:

a) rovnice kontinuity

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho u) = S_m, \quad (4.9)$$

kde zdrojový člen je

$$S_m = -\frac{1}{V} \sum_k \dot{m}_k. \quad (4.10)$$

b) zákon zachování hybnosti

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla p + \nabla \cdot (\tau + \tau^R) + \rho g + S_h, \quad (4.11)$$

kde zdrojový člen je

$$S_h = -\frac{1}{V} \sum_k v_k \dot{m}_k - \frac{3\pi\mu}{V} \sum_k D_k f_k (u - v_k). \quad (4.12)$$

c) zákon zachování energie

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\rho u h) = -\nabla p \cdot u + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + S_{en}, \quad (4.13)$$

kde zdrojový člen je

$$S_{en} = -\frac{1}{V} \sum_k \dot{m}_{k,H_2O} h_{lv,H_2O} + \frac{\pi\lambda}{V} \sum_k Nu_k D_k (T_k - T). \quad (4.14)$$



d) bilance složek

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_A) + \nabla \cdot (\rho m_A u) = \nabla \cdot (\rho D_{AB} \nabla m_A) + S_{A,m}, \quad (4.15)$$

kde zdrojový člen je

$$S_{A,m} = -\frac{1}{V} \sum_k m_{A,k}. \quad (4.16)$$

Absorpce SO<sub>2</sub> vychází z určení celkového součinitele přestupu hmoty podle vztahu (4.8), který použil dříve Kill [39]. Pro součinitel přestupu hmoty na straně kapaliny předpokládá Marocco [48] podmínky daleko od trysek, kde platí:

$$k_{l,SO_2} = 10 \frac{D_{l,SO_2}}{d}. \quad (4.17)$$

Henryho koeficient je definován jako teplotně závislý podle Maurera [50]. Součinitel zvýšení  $E_{SO_2}$  uvažuje Marocco [48] s odkazem na práci Brogrena a Karlssona [42] konstantní s hodnotou  $E_{SO_2} = 10$ . Tato hodnota je odhadnuta z intervalu hodnot 5-15, platných pro většinu pracovní části absorberu. V blízkosti trysek může tato hodnota nabývat hodnot  $> 25$ . Konstantní hodnota  $E_{SO_2}$  představuje parametr pro odladění modelu tak, aby výsledky modelu odpovídaly experimentálním hodnotám. Součinitel přestupu hmoty na straně plynu je definován na základě modifikované Ranz-Marshallovy rovnice:

$$Sh = \frac{k_{g,SO_2} d}{D_{SO_2(g)}} = 2 + 0,69 Re^{1/2} Sc^{1/3}. \quad (4.18)$$

Modelovaný testovací absorber je protiproudý s rozstříkem kapek směrem dolů. Spaliny proudí směrem nahoru. Frakce s největším objemem kapaliny jsou z důvodu velkého úhlu rozstříku trysek (120°) lokalizovány blízko obvodových stěn. Hodnoty objemových frakcí kapaliny jsou však nižší než 5%, což odůvodňuje základní předpoklad velmi zředěné kapalně fáze, pro kterou jsou jak interakce částice-částice, tak vliv objemové frakce částic na plynnou fázi zanedbatelné. Při proudění absorberem se spaliny ochlazují a jejich relativní vlhkost se zvyšuje v důsledku přenosu tepla a hmoty s kapičkami suspenze. Experimenty ukazují, že nasycení se dosáhne velmi brzy za vstupem plynu do absorberu. Pro další práci autoři navrhuji, aby spaliny byly považovány za již nasycené vodou na vstupu do absorberu, což ušetří výpočetní čas. Číselné hodnoty poklesu tlaku, teploty spalin a účinnosti odstraňování SO<sub>2</sub>, vyhodnocené ze simulací jsou v dobré shodě s odpovídajícími experimentálními údaji.

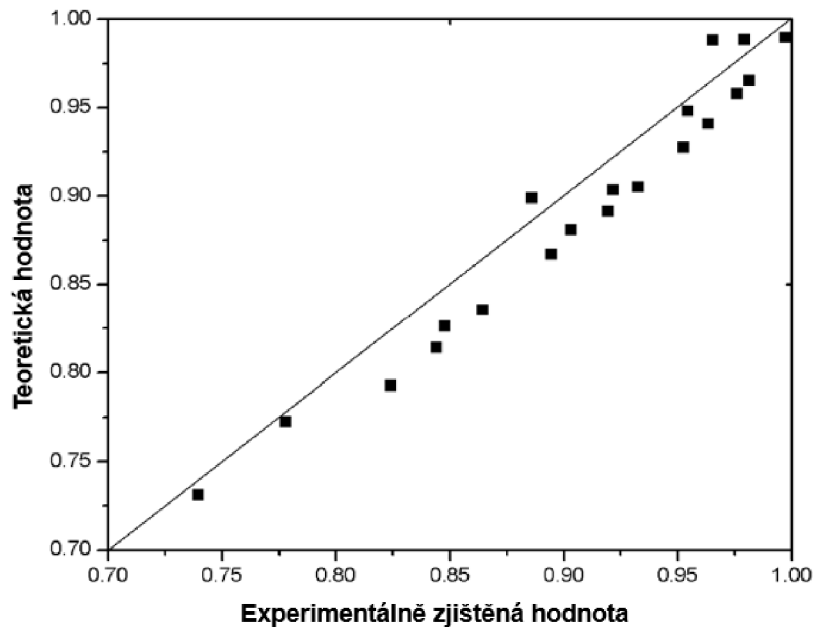
Ve druhé publikaci je dříve vyvinutý model aplikován na reálný absorber. Byly simulovány tři různé provozní podmínky změnou počtu provozních úrovní postřiku. Vypočítaná hodnota účinnosti odstraňování oxidu siřičitého se významně nemění u případů s pěti a čtyřmi úrovněmi postřiku v provozu, s odskoky kapek na stěnách a bez nich. Simulace se třemi úrovněmi v provozu ukazuje poněkud odlišné výsledky pro dva modely interakce kapiček a stěn. Příklad s depozicí kapaliny na stěnách vykazuje nehomogenní distribuci SO<sub>2</sub> a hodnoty účinnosti odstraňování mnohem nižší než případ s ideálním odrazem dopadajících kapiček. Důvodem je to, že podstatná část rychlosti vstříkované suspenze se ztrácí na stěnách, což přispívá k odstraňování oxidu siřičitého pouze částečně. Tento účinek není významný pro případy s pěti a čtyřmi provozními úrovněmi s ukládáním na stěnu, protože rychlost proudění suspenze je tak vysoká, že kapalná frakce usazená na stěnách neovlivňuje výslednou účinnost odstraňování SO<sub>2</sub>.

Vypočtené číselné hodnoty poklesu tlaku a účinnosti odstraňování SO<sub>2</sub> se dobře shodují s experimentálními daty pro různé provozní podmínky. Zejména vypočtené hodnoty účinnosti odstraňování SO<sub>2</sub> jsou ve velmi dobré shodě s měřením. Vyvinutý model je dle autorů užitečným nástrojem při navrhování a optimalizaci odsiřovacího zařízení, např. vyhodnotit nejlepší umístění trysek, vzdálenost mezi sprchovými patry a další.

Publikace od Marocca [48], [49] jsou základem pro tvorbu a použití CFD modelů dalších autorů, jejichž práce jsou stručně popsány dále, např. Liu [51], Arif [52], [53]. Výsledky těchto autorů jsou dále použity při vývoji CFD řešiče pro OpenFOAM v rámci této práce.

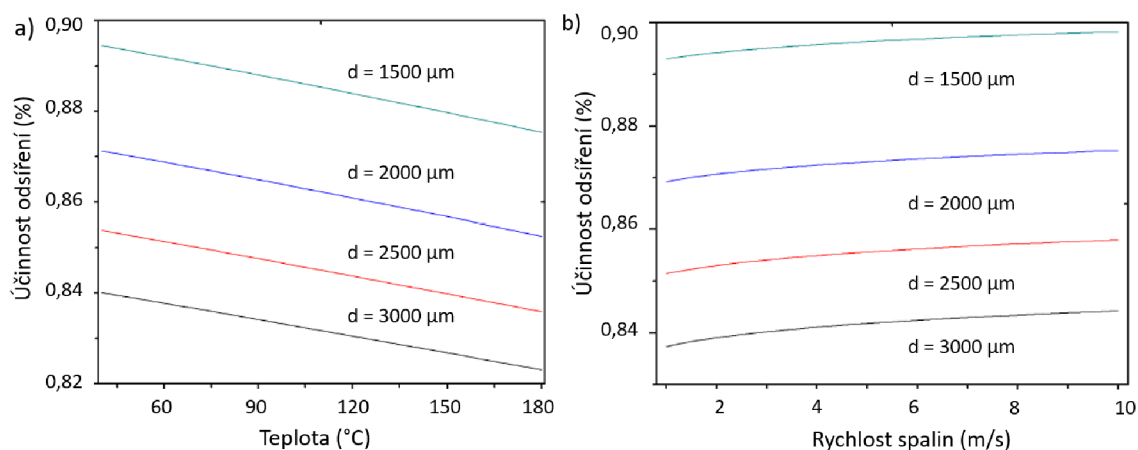
#### 4.1.8 D. Liu a H. Yu, 2012, Čína

Model vytvořený čínskými autory [51] na základě filmové teorie vychází z matematického modelu Marocca [48]. Výsledky modelu byly stejně jako u dříve popsaných prací porovnány s experimentálními daty. Na Obr. 4.3 je uvedeno porovnání hodnot účinnosti odsíření získané ze simulací a experimentu. Z těchto výsledků vyplývá, že model mírně podhodnocuje míru absorpce a tudíž predikuje nižší účinnost odsíření.



Obr. 4.3: Účinnost odsíření – porovnání hodnot ze simulace a experimentu (převzato z [51]).

Na Obr. 4.4 jsou shrnuty vlivy provozních parametrů na účinnost odsíření. Z uvedených výsledků vyplývá, že pro maximalizace účinnosti absorpce je třeba, aby reakce probíhala za nižších teplot při vyšším průtoku spalin. Pro menší velikosti kapiček suspenze je dosahováno vyšší účinnosti odsíření.



Obr. 4.4: Účinnost odsíření – vliv provozních parametrů (převzato z [51]).

#### 4.1.9 A. Arif a kol, 2014, JAR

Jihoafrický tým se věnoval CFD simulacím průmyslového odsiřovacího absorberu. Jejich model je založen na stejném matematickém modelu jako v případě Marocca [48]. V publikacích [54], [52] a [53] se věnují modelování kompletního absorberu včetně reakční nádrže a odlučovačů kapek. CFD modelování je realizováno přístupem Euler-Lagrange, přičemž spjitá fáze (spaliny) je modelována jako nestlačitelná tekutina s uvažováním turbulentního proudění. Diskrétní fáze (kapky) interagují s tekutinou i stěnami. Pro modelování rozpadu kapek je aplikován TAB (z angl. *Taylor analogy breakup*) model. Výpočet je stacionární a odpar vody z kapek je modelován v kvazi-stacionárním režimu. Odlučovače kapek jsou modelovány jako porézní oblasti.

Předmětem výzkumu bylo testování parametrů pro nastavení numerického modelu, např. vliv velikosti sítě, počet proudů a jednotlivých kapek, nastavení interakce kapek se stěnou a další. Cílem byly analýzy vlivu provozních parametrů absorberu, jako rychlost spalin, průtok suspenze, poměr průtoků L/G a průměr kapiček i kvalita jihoafrického vápence. Po zahrnutí odpařování vody bylo zjištěno, že spaliny se na vstupu rychle ochladí a tím dojde k jejich nasycení vlhkostí. Byly tedy vhodně stanoveny izotermické podmínky. Dále bylo zjištěno, že i dále v absorberu téměř nedochází ke kondenzaci a spaliny jsou nasyceny vlhkostí. Validace modelu byla provedena na základě experimentálních dat. Rychlostní profil na výstupu ze spalinového kanálu a účinnost odsíření, teplota spalin a rychlost spalin na výstupu z absorberu byly v dobrém souladu s výsledky experimentů na testovacím zařízení s přibližnou odchylkou  $\pm$  (5 až 8)%. Výsledky CFD simulací byly diskutovány s ohledem na možnost nasazení do reálných instalací.

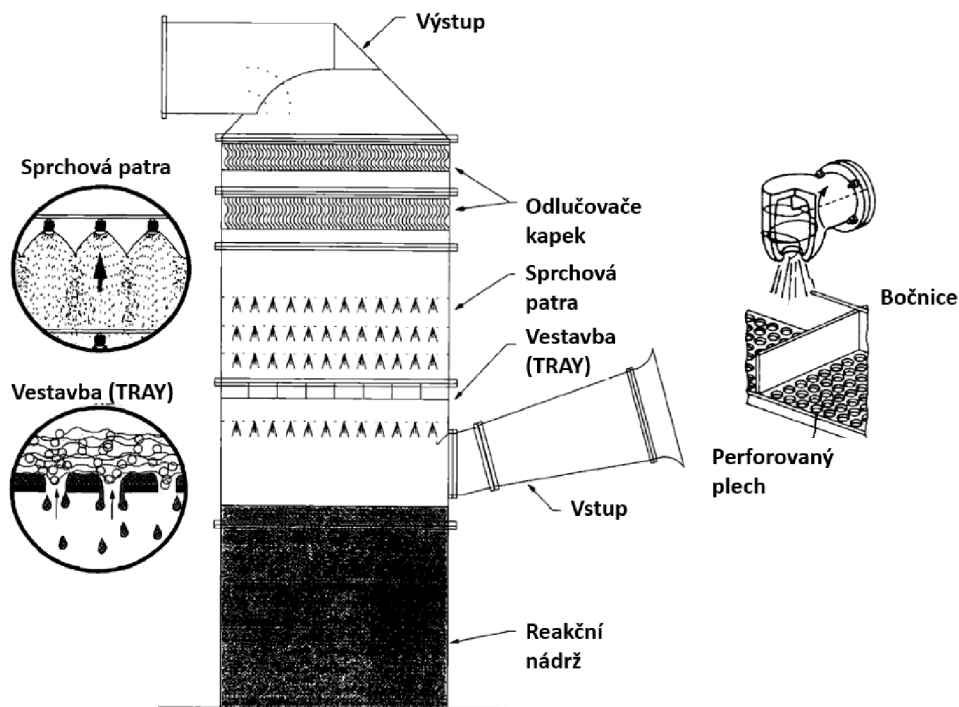
Členové tohoto výzkumného týmu se tématem dále zabývají, jak ukazuje článek publikovaný v roce 2020 [55]. Na základě experimentů byly stanoveny závislosti vstupních hodnot důležitých veličin při absorpci SO<sub>2</sub> v míchané reakční nádrži. Mezi tyto veličiny patří součinitel přestupu hmoty přes rozhraní plyn-kapalina, konstanty pro rozpouštění a krystalizaci, rovnovážné konstanty, součinitele difuze a další.

## 4.2 Modely pro absorbéry s vnitřní vestavbou

V rámci opatření na zvýšení záchytu  $\text{SO}_2$  v odsiřovacím absorbérů jsou používány vnitřní vestavby, které mají zajistit:

- rovnoměrné rozložení rychlosti v průřezu absorbérů pod sprchovými patry,
- zvýšení účinné plochy rozhraní plyn-kapalina,
- prodloužení doby kontaktu plynu a kapek.

Tyto vestavby jsou umístěny mezi vstup spalin a první sprchové patro (viz Obr. 4.5), případně i mezi jednotlivými sprchovými patry. Detaily principu funkce a použití, včetně CFD simulací, jsou uvedeny v následujících podkapitolách.



Obr. 4.5: Odsiřovací absorbér s vnitřní vestavbou (převzato z [56] a [57]).

### 4.2.1 T. Strock a W. Gohara, 1995, USA

Příspěvek [56] firmy Babcock & Wilcox z USA popisuje studium dějů v zařízení pro odsiřování spalin z pohledu mechaniky tekutin. Mechanika tekutin v mokrých pračkách zahrnuje několik složitých dvoufázových interakcí plyn/kapalina. Článek pojednává o vývoji experimentálního přístupu a testovacího zařízení pro pochopení a optimalizaci charakteristik toku v mokré pračce. Konkrétně jsou shrnuty postupy škálování pro zmenšení mokré pračky pro laboratorní prostředí. Dále jsou diskutovány experimentální techniky pro měření rozložení toku spalin, poklesu tlaku, charakteristik velikosti kapek a poměru kapaliny a plynu. Nakonec jsou představeny vlastnosti a možnosti nového testovacího zařízení, které obsahuje i vnitřní vestavby v podobě kazet/vaniček, tzv. *trays*. Tento konstrukční prvek byl následně firmou Babcock & Wilcox patentován [57].

Tyto vnitřní vestavby (*trays*), ilustrované na Obr. 4.5, jsou tvořeny vaničkami z vodorovných perforovaných plechů s plnými bočními přepážkami. Uvnitř vaničky je vytvořena dvoufázová oblast, kde kapalina odtéká dolů skrz otvory, zatímco spalinový proud probublává skrz kapalinu směrem nahoru. Obecně platí, že proud plynu a kapaliny

pulzuje, přičemž konkrétním otvorem prochází plyn i kapalina přerušovaně. Přepážky udržují rovnoměrný tok kapaliny v rámci pevných hranic, a tím zabraňují velkým přesunům kapaliny v rámci průřezu absorberu. Tlaková ztráta vaniček je výrazně vyšší než v případě absorberu bez vestavby a tudíž podporuje rovnoměrné rozložení spalin.

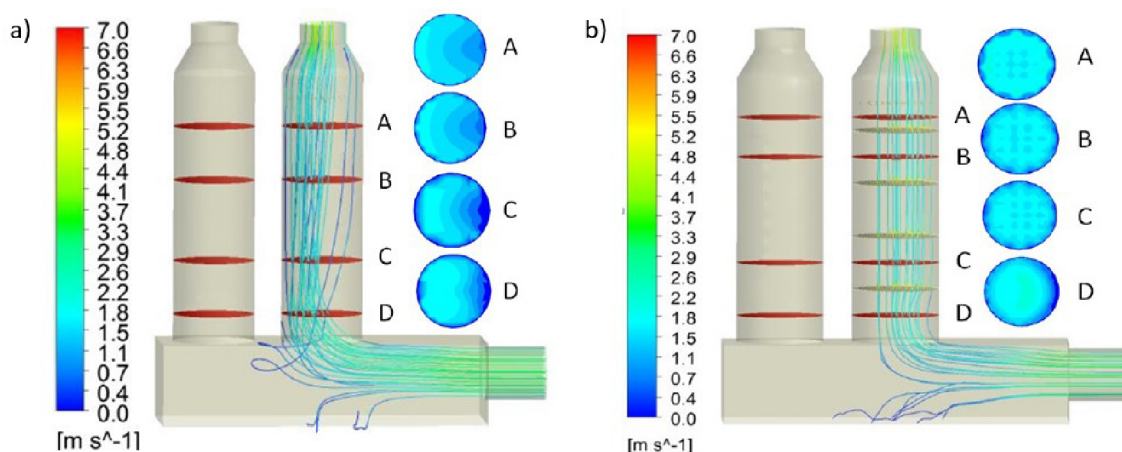
Celá práce je experimentální, nicméně má zásadní význam i pro vývoj postupů modelování odsiřovacích zařízení s novým typem vnitřní vestavby.

#### 4.2.2 A. Silaen a kol., 2014, USA

Kolektiv autorů [58] představil svůj model pro simulaci odsiřovací jednotky. Předmětem simulací je kompletní sestava absorberu a reakční nádrže. K modelování vícefázového proudění uvnitř zařízení bylo použito metody CFD. Model byl rozdělen na dvě části, tj. model absorpční věže a model reakční nádrže. V modelu absorpční věže byl použit přístup Euler-Lagrange. K modelování kapiček vápenné suspenze byl použit model diskrétní fáze a do modelu byla zahrnuta absorpce  $\text{SO}_2$ . V reakční nádrži byl použit přístup Euler-Euler. Zde byla modelována oxidace suspenze za vzniku sádry. Modely obou částí jsou vzájemně propojeny. V rámci článku jsou publikovány výsledky parametrické studie za účelem zjištění účinnosti odstraňování  $\text{SO}_2$ . Případ založený na běžných provozních podmínkách ukazuje, že účinnost odstraňování  $\text{SO}_2$  se zvyšuje, když se sníží zatížení kotle. Dále účinnost odstraňování  $\text{SO}_2$  klesá se snižováním rychlosti postřiku vápenné suspenze.

#### 4.2.3 Y. Huang a kol., 2015, Čína

V publikaci [59] popisují čínští autoři, obdobně jako většina autorů zmíněná v kapitole 4.1, základní vztahy použité v modelu pro simulaci odsiřovacího procesu. Předmětem simulace je odsiřovací věž s vnitřní zástavbou v podobě perforovaných plechů. Pórovitost perforovaných otvorů je 34%, průměr je 8 mm a rozteč 13 mm. S ohledem na poměr průměrů věže (7 m) otvoru v plechu (8 mm) dosahuje počet perforovaných otvorů přes  $2 \cdot 10^5$ , což je výpočetně velmi komplikované pro řešení. Pro výpočet byla proto oblast sít nahrazena porézní zónou. Model porézní zóny umožňuje zachycení vlivu perforované struktury ve výpočetní doméně jednoduchým použitím zdrojového členu hybnosti v rovnici zachování hybnosti. Zdrojový člen je funkcí tloušťky perforovaného plechu a součinitele setrvačných ztrát  $C_2$ , jehož hodnota slouží k naladění modelu.



Obr. 4.6: Výsledky simulací (proudnice): a) bez perf. plechů, b) s perf. plechy (převzato z [59]).

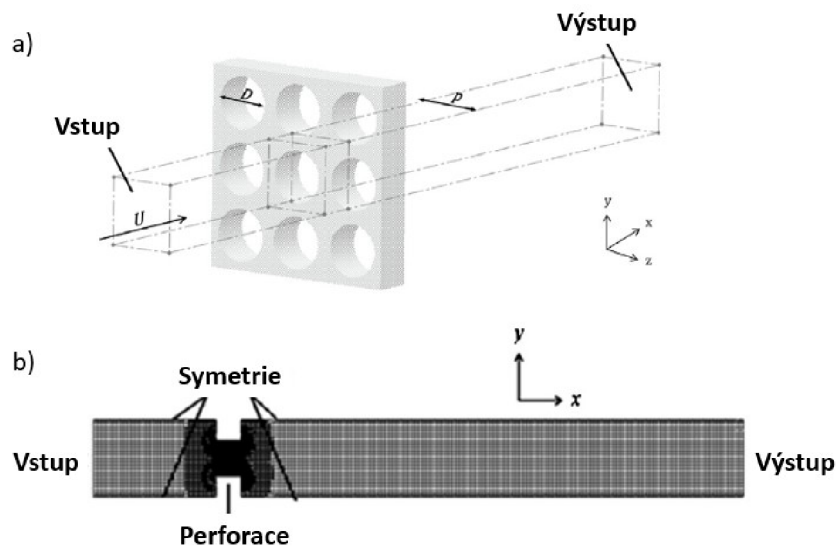
Výsledky potvrzují, že patra s perforovanými plechy mohou zlepšit rovnoměrnost toku tekutiny a snížit rychlost v absorberu (viz Obr. 4.6). Tím lze dosáhnout lepšího promísení

a delší doby zdržení, které podporují chemické reakce. Výsledky CFD simulací skutečných perforovaných struktur i s použitím modelu porézního média jsou srovnatelné a konzistentní s experimentálními daty. Model porézního média je tedy vhodný pro simulace v měřítku průmyslových odsiřovacích věží.

#### 4.2.4 Ch. Tseng a Ch. Li, 2016, Čína

Část týmu čínských autorů [60] se zabývala detailněji stanovením součinitele setrvačných ztrát perforovaných plechů. Cílem bylo vyvinout rychlý a spolehlivý výpočetní rámec pro analýzu chování toku v odsiřovací věži založený na modelu porézního média, který využívá další zdrojové členy v rovnicích hybnosti ke kompenzaci ztráty tlaku na perforovaném plechu.

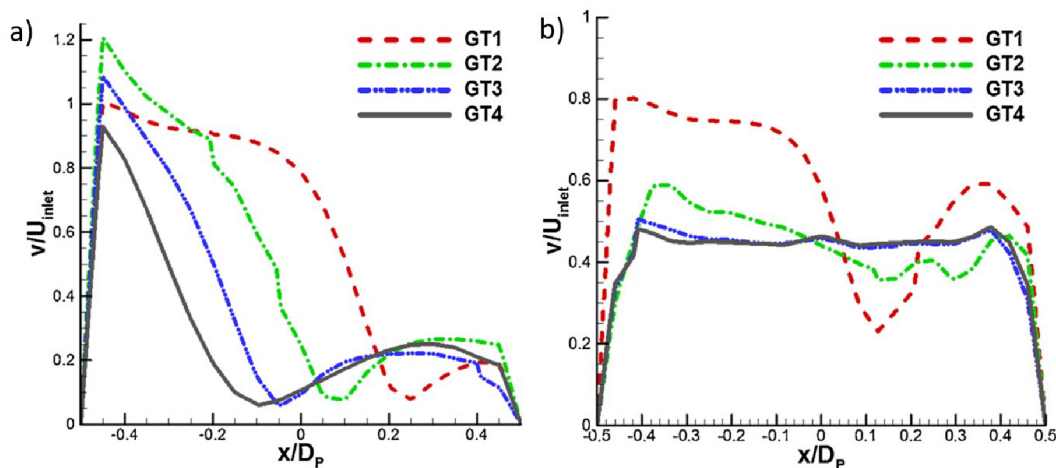
V prvním kroku autoři prováděli výpočet jednotkové buňky k detailní analýze proudění v rámci jednoho perforovaného otvoru (ilustrace na Obr. 4.7) a tím získali koeficient setrvačné ztráty. Dosahované hodnoty se shodovaly s empirickými rovnicemi z literatury. Dále byl tok plynu v malé odsiřovací věži. Srovnání výsledků těchto simulací s experimentálními daty prokázalo, že model porézního média poskytuje srovnatelné rozložení (i pokles) tlaku a rychlosti i při použití velkých buněk sítě v okolí perforované struktury.



Obr. 4.7: Jednotková buňka perforovaného plechu: a) náčrt, b) výpočetní síť s OP (převzato z [60]).

Výsledky simulací dále ukazují vliv perforované struktury na změnu proudového pole v absorbéru. Rychlostní profily v několika úrovních po výšce absorbéru (GT1-GT4) uvedené na Obr. 4.8 potvrzují, že po instalaci perforovaných plechů dojde ke zrovnoměnění proudového pole a snížení rychlosti proudění v oblasti sprchových trysek.

O rok později publikovali stejní autoři pokračování své práce [61], kdy zahrnuli do modelu i chemické reakce a byli tak schopni kompletně simulovat proces odsiřování v absorbéru s vnitřní vestavbou perforovaných plechů. Porovnáním výsledků simulací s experimentálními daty opět prokázali použitelnost vyvinutého modelu.



Obr. 4.8: Rychlostní profily: a) bez perforovaných plechů, b) s perforovanými plechy (převzato z [60]).

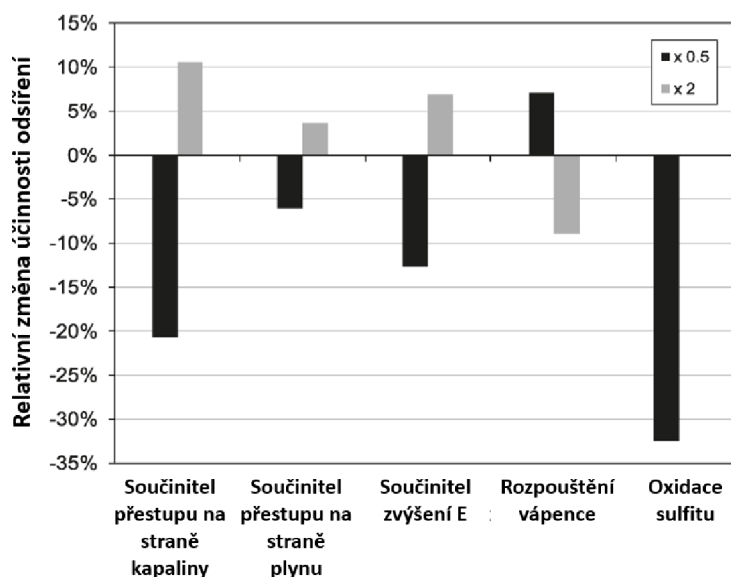
### 4.3 Kombinovaný záchyt $\text{SO}_2$ a dalších znečišťujících látek

V posledních letech je v souvislosti se změnami legislativy týkající se životního prostředí stále více kladen důraz na snižování limitů emisí znečišťujících látek (ZL). Vzhledem k tomu, že tyto limity jsou často na hranici technických možností provozovaných zařízení, je výzkum v této oblasti zaměřen i na využití stávajících zařízení pro čištění spalin pro souběžné odstraňování dalších ZL, na které nebyla tato zařízení původně navržena. V následujících podkapitolách jsou nejprve uvedeny práce zabývající se záchytem zbytkových prachových částic v odsiřovacím absorberu. Dále jsou uvedeny dva příspěvky zabývající se záchytem rtuti spolu s  $\text{SO}_2$ . V této oblasti se jedná o citaci experimentálních výzkumů. Vzhledem ke změně limitů pro emise Hg, které jsou předepsány aktuální legislativou EU je však dle autora i modelování společného záchytu v odsiřovacím absorberu aktuálním tématem.

#### 4.3.1 T. Neveux a Y. Le Moullec, 2011, Francie

Autoři z Francie ve svém příspěvku [62] popisují CFD simulaci průmyslového odsiřovacího zařízení ve francouzském Cordemais. Postupy tvorby modelu a simulací jsou obdobné jako v případě autorů uvedených v kapitole 4.1. Obdobně jsou výsledky simulací porovnány s experimentálními daty z průmyslového zařízení. Předmětem zkoumání je absorber i reakční nádrž. Dále jsou analyzovány vlivy hlavních parametrů modelu na výslednou účinnost odsíření, přičemž se ukazuje (viz Obr. 4.9), že nejvíce ovlivňuje výsledky hodnota součinitele přestupu hmoty na straně kapaliny a míra oxidace sulfitu.

Na rozdíl od dříve publikovaných prací zde autoři zahrnují i záchyt popílku a pevných látek, aby bylo možné předpovědět kvalitu sádrovce. Popílek zbývající ve spalinách po elektrostatickém filtru (asi 0,3%) se částečně zachytí v absorberu a nakonec se shromáždí v pevné fázi (sádrovci). Odhad účinnosti odstraňování popílku v absorberu je velmi důležitý pro hodnocení kvality vyráběné sádry. Přesné stanovení složení kapalné fáze je obtížné, protože většina kovových sloučenin pochází z částečného rozpuštění zachyceného popílku. Proto je zapotřebí implementovat vhodné modely zachycování a rozpouštění popílku. Koncentrace kovových sloučenin, jako je rtuť, mangan, draslík a sodík, jakož i dusičnanů (pocházejících z absorpce  $\text{NO}$  a z promývání vodou) byly pro simulace v rámci tohoto příspěvku definovány konstantní hodnotou.



Obr. 4.9: Vliv vstupních parametrů na účinnost odsíření při změně 0,5x a 2x (převzato z [62]).

#### 4.3.2 Huang a kol., 2019, Čína

Článek [63] čínských autorů popisuje numerické simulace současného zachytu pevných znečišťujících látek (PM). Pro analýzu základního mechanismu a účinnosti odstraňování byl v této studii numericky simulován proces odstraňování PM v odsiřovacím systému na základě modelu populační rovnováhy a rovnice obecné dynamiky. Rovnice byly řešeny pomocí metody Monte Carlo s pevným krokem k určení charakteristik úniku PM za různých provozních podmínek (jako je intenzita postřiku, rychlost spalin a vrstvy suspenze). Výsledky ukazují, že snížení rychlosti spalin zvyšuje účinnost odstraňování PM v řádu několika procent. Velikosti kapiček má výrazný vliv na zachyt PM, při zmenšení středního průměru kapiček z 3 mm na 1 mm se účinnost odstraňování zvýšila z 67,18 na 99,14%. V rámci studie bylo zjištěno, že větší částice (v řádu mikronů) jsou ovlivňovány hlavně setrvačnými účinky, zatímco malé částice ( $d_p < 0,01 \mu\text{m}$ ) byly primárně ovlivněny Brownovým difuzním mechanismem. Výsledky numerických simulací jsou v dobré shodě s výsledky měření. Numerický model lze tedy použít k výpočtu účinnosti odstraňování PM v zařízení pro mokrou vápencovou vypírku pro praktické inženýrské aplikace. Jedním z omezení této studie bylo, že odstranění PM v odsiřovací věži bylo modelováno nezávisle na procesu odsiřování. Proto by měl být proveden další výzkum za účelem vytvoření numerického modelu simulace trojfázových systémů pevná látka-pára-kapalina, které obsahují kapičky suspenze, přenos hmoty  $\text{SO}_2$  a odstraňování PM.

#### 4.3.3 S. Niksa a N. Fujiwara, 2012, Japonsko

V Japonsku se zabývali spojitostí mezi zachytem  $\text{SO}_2$  a Hg v odsiřovacím absorbéru. Článek [64] představuje možnosti predikce zachytu Hg v jakékoli pračce mokrého odsiřování spalin na bázi vápenných sloučenin v závislosti na složení spalin a účinnosti zachycení oxidu siřičitého. Výsledky analýzy dat ze 17 odsiřovacích zařízení ukazují, že chemie roztoku v rámci absorbéru určuje míru zachytu Hg. Důkladnější analýza založená na termochemické rovnováze přináší vysoce přesné předpovědi pro celkovou retenci Hg bez úprav parametrů. Bilance rovnováhy naznačují, že retence Hg je nejcitlivější na hladinu HCl a  $\text{O}_2$  na vstupu a teplotu v absorbéru a slabě závislá na účinnosti zachycování  $\text{SO}_2$ . Mezi parametry, které neovlivňují míru zachytu Hg patří koncentrace  $\text{HgCl}_2$ , NO, poměr Ca:S, úroveň ředění suspenze a hladiny  $\text{MgSO}_3$



v systémech Mg / vápno. Analýza také předpovídá opětovné emise  $Hg^0$ , ale pouze pro úrovně koncentrací vstupního  $O_2$ , které jsou mnohem nižší než hladiny v plnohodnotných FGD.

#### 4.3.4 Xing a kol., 2017, Čína

Přehledový článek čínských autorů [65] popisuje možnosti použití metody mokrého odsíření spalin k odstranění  $Hg^0$ . Jako nejlepší pro odstraňování  $Hg^0$  ze spalin v průmyslových aplikacích je uváděno použití Fentonova roztoku. Tato technologie má zjevné výhody při současném čištění více znečišťujících látek, jako jsou  $SO_2$ ,  $NO_x$  a  $Hg^0$ , a může být široce používána pro svou vysokou účinnost odstraňování znečišťujících látek a nízkou spotřebu energie. Inženýrské aplikace vyžadují pouze úpravy stávajících zařízení, což může ušetřit investiční náklady. Článek nepopisuje přístupy k modelování, ale obsahuje detailní výčet chemických rovnic, které popisují reakce  $Hg$ ,  $SO_2$  a dalších látek v absorbéru. Dále je popsáno vzájemné ovlivnění zachytu znečišťujících látek.

### 4.4 Shrnutí přístupů k modelování procesu odsíření

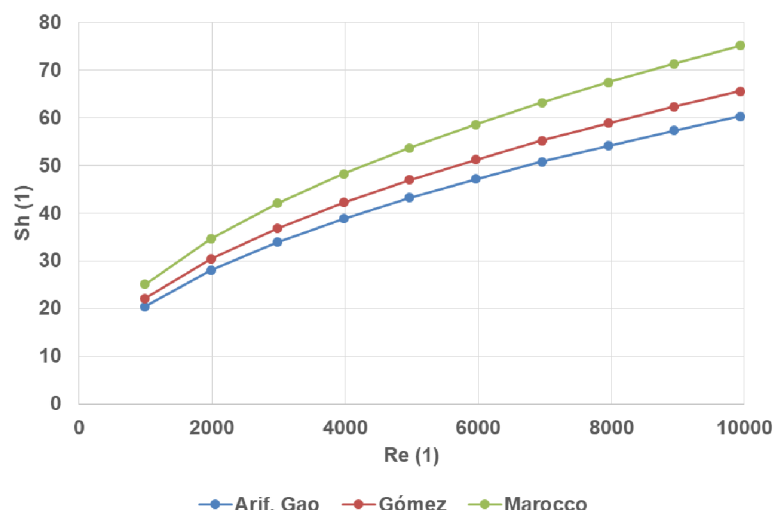
V Tab. 4 je uveden přehled přístupů používaných různými autory pro modelování procesu odsíření pomocí CFD metod. V tabulce jsou uvedeny kromě použitého software i oblasti v absorbéru, ve kterých je model použitelný, přístup k popisu proudění a použitý model turbulence. Různí autoři dále používají různé koeficienty v kritériální rovnici pro Sherwoodovo číslo. Rovnice použité různými autory jsou uvedeny v Tab. 5, srovnání hodnot Sherwoodova čísla pro modelový případ je na Obr. 4.10.

Tab. 4: Přehled přístupů k modelování odsířování spalin – vybraní autoři (abecedně).

Zdroj	SW	Přístup	Model turbulence	Oblasti
Arif [52]	Star-CCM	E-L	Standard $k-\epsilon$	Sprchové zóny, reakční nádrž, odlučovače kapek
Gao [44]	Fluent	E-L	Standard $k-\epsilon$	Sprchové zóny
Gómez [40]	Vlastní	E-E	neuveden	Sprchové zóny, reakční nádrž
Huang [59]	neuveden	E-E	RNG $k-\epsilon$	Sprchové zóny, perforované plechy
Liu [51]	Vlastní	-	neuveden	Sprchové zóny, reakční nádrž
Marocco [48]	Fluent	E-L	Realizable $k-\epsilon$	Sprchové zóny
Silaen [58]	Fluent	E-L, E-E	Realizable $k-\epsilon$	Sprchové zóny, reakční nádrž
Tseng [60], [61]	Fluent	E-E	SST $k-\omega$	Sprchové zóny, perforované plechy
Neveux [62]	neuveden	E-E	neuveden	Sprchové zóny, reakční nádrž

Tab. 5: Kritériální rovnice pro Sherwoodovo číslo – vybraní autoři (abecedně).

Zdroj	Sherwoodovo číslo	Poznámka
Arif [52], Gao [44]	$Sh = 2 + 0,55 Re^{0,5} Sc^{0,33}$	
Brogren, Karlsson [42]	$Sh = 2 + 0,552 Re^{0,5} Sc^{0,33}$	
Gómez [40]	$Sh = 2 + 0,60 Re^{0,5} Sc^{0,33}$	platné pro kulové kapky
Marocco [48]	$Sh = 2 + 0,69 Re^{0,5} Sc^{0,33}$	modif. Ranz-Marshallova rovnice



Obr. 4.10: Hodnoty Sherwoodova čísla podle různých autorů: vzduch-voda,  $d = 1 \text{ mm}$ ,  $Sc = 1.2$ .

Pro určení podobnostních čísel jsou použity rovnice pro Reynoldsovo (3.29) a Schmidtovo číslo (3.44). Pro výpočet Reynoldsova čísla je vstupními hodnotami relativní rychlost kapek, tj. rozdíl absolutní rychlosti kapky a proudu spalin a viskozita kapalná fáze. Pro určení Schmidtova čísla jsou výchozí hodnoty viskozity a difuzivity  $\text{SO}_2$  v plynné fázi.

Konkrétní hodnoty fyzikálních vlastností jsou dohledatelné v literatuře, např. [66]. Recelj a Golob [67] ve své práci uvádí s odkazem na další zdroje hodnoty:

- difuzního koeficientu  $D_{\text{SO}_2(\text{g})} = 1,26 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  při teplotě  $25^\circ\text{C}$ ,
- Henryho konstanty  $H_{\text{SO}_2} = 82,5 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ,
- součinitele přestupu hmoty na straně kapaliny  $k_{1,\text{SO}_2} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ .

V plynné fázi je závislost hodnoty difuzního koeficientu na teplotě možné vyhodnotit pomocí Fuller-Schettler Giddingsovy rovnice

$$D_{\text{SO}_2(\text{g})} = \frac{9,86 \cdot 10^{-3} T^{1,75} \left( \frac{1}{M_g} + \frac{1}{M_{\text{SO}_2}} \right)^{0,5}}{p \left( V_{\text{m,g}}^{0,33} + V_{\text{m,SO}_2}^{0,33} \right)^2}. \quad (4.19)$$

Teplotní závislost difuzního koeficientu v kapalně fázi je dána Stokes-Einsteinovou rovnicí v závislosti na změně viskozity kapaliny s teplotou

$$\frac{D_{\text{SO}_2(\text{l})} \mu_l}{T_1} = \text{konst.} \quad (4.20)$$

V článku [39] je uvedena hodnota  $D_{\text{SO}_2(\text{l})} = 2,89 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  při teplotě  $323,15 \text{ K}$ , čemuž odpovídají hodnoty difuzního koeficientu pro  $\text{SO}_2$  ve vodě dle rovnice (4.20) uvedené v Tab. 6.

Závislost Henryho konstanty na teplotě je podle Maurera [50] dána rovnicí

$$\ln H_{\text{SO}_2} = -\frac{5160,4}{T_1} - 7,61 \ln T_1 + 60,538. \quad (4.21)$$

Tab. 6: Hodnoty difuzního koeficientu pro SO<sub>2</sub>(l).

$T$ (K)	$\mu_1$ (Pa · s)	$D_{\text{SO}_2(l)}$ (m · s <sup>-1</sup> )
283,15	1,305E-03	1,07E-09
293,15	1,004E-03	1,43E-09
303,15	8,012E-04	1,86E-09
313,15	6,531E-04	2,36E-09
323,15	5,492E-04	2,89E-09
333,15	4,697E-04	3,48E-09
343,15	4,060E-04	4,15E-09
353,15	3,550E-04	4,89E-09
363,15	3,148E-04	5,67E-09
373,15	2,824E-04	6,49E-09

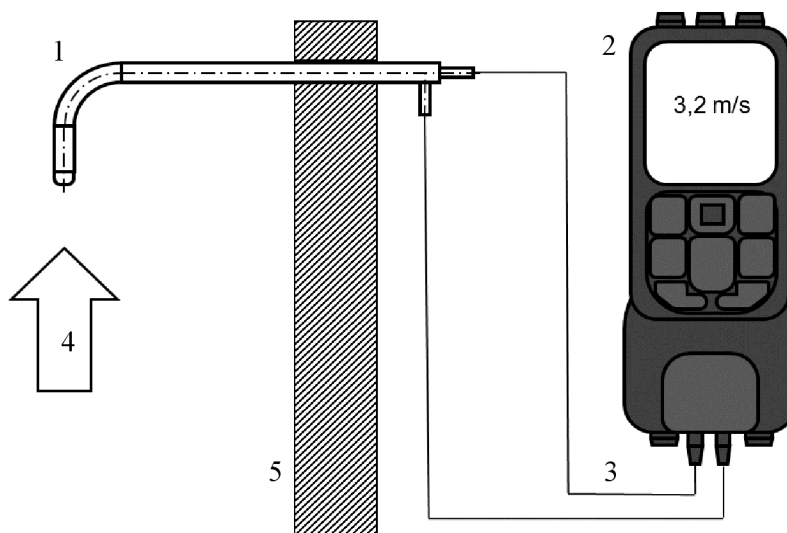
## 5 Experimentální část

Za účelem ověření funkčnosti CFD řešiče a jeho dílčích částí v různých fázích vývoje a testování byly definovány příslušné experimenty. Data z experimentů jsou porovnávána s CFD výsledky. Ověření výsledků CFD řešiče je prováděno na základě porovnání s provozními daty z reálných zařízení, která byla poskytnuta v rámci řešení výzkumných projektů ve spolupráci s komerčním sektorem.

### 5.1.1 Měření rychlosti proudění plynů

Měření rychlosti proudění plynů je provedeno pomocí Prandtlovy trubice podle schématu na obr. 5.1. Měřicí konec trubice je umístěn do měřicího místa v proudu plynu. Pro vyhodnocení rychlosti proudění je použit měřicí přístroj TESTO 480 [68]. Tento přístroj s připojenou Prandtlovou sondou měří diferenční tlak a podle jeho hodnoty vyhodnocuje hodnotu rychlosti z rovnice

$$u = \sqrt{2 \cdot \frac{p_d}{\rho}} \quad (5.1)$$



1 – Prandtlova trubice, 2 – TESTO 480, 3 – propojovací hadice, 4 – proud plynu, 5 – stěna.

Obr. 5.1: Měření rychlosti proudění – schéma.

Přístroj umožňuje přímo vyhodnotit hodnotu rychlosti proudění plynu dle rovnice (5.1). Hodnota hustoty plynu, kterou používá přístroj k výpočtu rychlosti proudění ve vzduchu, je určena přístrojem z hodnot absolutního tlaku, teploty a relativní vlhkosti vzduchu. Hodnoty těchto veličin je možné zadat manuálně v rámci nastavení přístroje před experimentem, případně změřit pomocí dalších sond pro měření teploty a vlhkosti. Tyto sondy nebyly dostupné.

Přesný způsob vyhodnocení není znám, neboť výrobce přístroje při komunikaci s autorem této disertace uvedl, že „se jedná o konstrukční informaci a není veřejně dostupná“. Vzhledem k tomu, že je přístroj určen pro použití v oboru vzduchotechniky a klimatizace autor předpokládá, že je přístroj naprogramován k vyhodnocení rychlosti proudění ve vzduchu.

Pouze s užitím Prandtlovy trubice je tedy přístroj schopen vyhodnotit správně hodnotu rychlosti jen pro suchý vzduch, příp. vlhký vzduch, za předpokladu nevýrazných změn teploty a vlhkosti, tzn. při zanedbatelné změně hustoty během měření. Pro případy změn hustoty vzduchu nebo jiné plyny je tedy vhodnější měřit přístrojem diferenční tlak a následně určit hodnotu rychlosti podle rovnice (5.1). Hodnotu hustoty je nutné určit jiným způsobem, např. z tabulek, výpočtem na základě dalšího měření nebo na základě stavových veličin plynu.

### 5.1.2 Rozbor nejistoty měření

Pro vyhodnocení rychlosti proudění  $u$  na základě naměřeného tlakového rozdílu je použito vztahu (5.1). Výběrová směrodatná odchylka vypočtené veličiny je obecně dána rovnicí:

$$S_{\bar{x}} = \sqrt{\sum \left( \frac{\partial x}{\partial i} \cdot S_i \right)^2} \quad (5.2)$$

Výběrová směrodatná odchylka rychlosti  $u$  je tedy

$$S_{\bar{u}} = \sqrt{\left( \frac{\partial u}{\partial p_d} \cdot S_{p_d} \right)^2} \quad (5.3)$$

kde parciální derivace je

$$\frac{\partial u}{\partial p_d} = \sqrt{\frac{\rho}{2 \cdot p_d}} \quad (5.4)$$

Absolutní chyba je dána dosazením derivace (5.4) do rovnice (5.3)

$$\Delta u = \sqrt{\frac{\rho}{2 \cdot p_d} \cdot \Delta p_d^2} \quad (5.5)$$

kde  $\Delta p_d$  je přesnost přístroje uvedená výrobcem. Pro přístroj TESTO 480 výrobce uvádí pro rozsah (0 až 25) hPa přesnost  $\pm (0,3 \text{ Pa} + 1\% \text{ měřené hodnoty})$  a pro rozsah (25,001 a 100) hPa přesnost  $\pm (0,1 \text{ Pa} + 1,5\% \text{ měřené hodnoty})$ .

Vzhledem k tomu, že nebylo prováděno opakované měření při jednotlivých režimech proudění, nebyla při vyhodnocení řešena nejistota typu A.

## 5.2 Měření provozních dat

Provozní data reálných zařízení byla získána od provozovatelů odsiřovacích zařízení, příp. spolupracujících firem. Jedná se o hodnoty:

- průtoku, teploty a složení spalín na vstupu/výstupu zařízení,
- koncentraci znečišťujících látek na vstupu/výstupu zařízení,
- průtok a hustota vápenné suspenze.

Metody měření uvedených veličin jsou utajeny s ohledem na vnitřní předpisy provozovatelů. Z tohoto důvodu nebylo možné získat veškeré informace o způsobech

měření a příslušných nejistotách. Nejistoty měření pro provozní data tedy nejsou vyhodnocovány ani uváděny.

### 5.3 Provozní parametry absorberu

Hlavní provozní parametry absorberu jsou:

- průtok a parametry spalin,
- průtok a parametry vápenné suspenze.

#### 5.3.1 Parametry spalin

Spaliny představují vícesložkový systém (směs). Reprezentativní složky směsi na vstupu do absorberu jsou  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $SO_2$  a  $H_2O$  (většinou ve formě vodní páry). Vzhledem k přítomnosti vody je nutné rozlišovat suché (SS) a vlhké spaliny (VS), přičemž platí:

$$m_{VS} = m_{SS} + m_{H_2O}. \quad (5.6)$$

Vlhké spaliny a jejich vlastnosti jsou odvozeny na základě obdobných zákonitostí a principů jako v případě vlhkého vzduchu (viz [69]). Suché spaliny lze v technické praxi považovat za směs ideálních plynů [28]. V rámci technických zadání pro návrh absorberu jsou obvykle definovány parametry uvedené v Tab. 7.

Tab. 7: Vlastnosti spalin.

Parametr	Jednotky	Popis
Množství spalin	$Nm^3/h$	Spaliny v suchém nebo vlhkém stavu.
Teplota spalin	$^{\circ}C$	
Tlak (relativní přetlak vůči $p_b$ )	Pa	
Hustota spalin	$kg/Nm^3$	Spaliny v suchém nebo vlhkém stavu.
Vlhkost	% obj.	
Koncentrace $O_2$	% obj.	Spaliny v suchém nebo vlhkém stavu.
Koncentrace $CO_2$	% obj.	Spaliny v suchém nebo vlhkém stavu.
Koncentrace $SO_2$	$mg/Nm^3$	

Emisní limity (koncentrace znečišťujících látek) jsou předepsány pro suché spaliny při referenčním obsahu kyslíku (zpravidla) 6% obj. za normálních podmínek, tj. teplotě  $t = 0^{\circ}C$  a absolutního tlaku  $p = 101\,325\,Pa$ .

Pro přepočítání průtoků suchých a vlhkých spalin se používá vztah:

$$\dot{V}_{SS} = \frac{\dot{V}_{VS}}{1 + \varphi_{H_2O}}, \quad (5.7)$$

kde  $\varphi_{H_2O}$  je objemový podíl vlhkosti.

Přepočítání vlastností na stav při referenčním obsahu kyslíku vychází z rovnice

$$\dot{V}_{SS-O_2ref} = \dot{V}_{SS} \cdot \frac{0,21 - \varphi_{O_2}}{0,21 - \varphi_{O_2ref}}, \quad (5.8)$$

kde se za referenční obsah kyslíku dosazuje hodnota předepsaná legislativními předpisy (zpravidla 6%, příp 9%).

Bilanci hmotnosti s použitím stavové rovnice ideálního plynu ve tvaru  $pV = mrT$ , pro provozní (měřený) stav a normální (referenční) stav je odvozen vztah pro přepočítání provozního (měřeného) objemu spalin na objem spalin při referenčním stavu:

$$\dot{V}_{SS}^R = \frac{p_P}{p_R} \cdot \frac{T_R}{T_P} \cdot \dot{V}_{SS}^P = \frac{T_R}{T_P} \cdot \frac{p_P}{p_R} \cdot \dot{V}_{SS}^P = \frac{273,15}{101325} \cdot \frac{p_P}{T_P} \cdot \dot{V}_{SS}^P. \quad (5.9)$$

Významnou hodnotou pro hodnocení provozu absorberu je účinnost odsíření definovaná jako rozdíl koncentrací na vstupu/výstupu absorberu:

$$\eta = \frac{\dot{m}_{SO_2}^{\text{vstup}} - \dot{m}_{SO_2}^{\text{výstup}}}{\dot{m}_{SO_2}^{\text{vstup}}}. \quad (5.10)$$

### 5.3.2 Parametry vápenné suspenze

Vápenné mléko je suspenzí, tedy heterogenní směsí, vápenného hydrátu  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  ve vodě. Hlavními parametry pro popis suspenze vstupující do absorberu jsou:

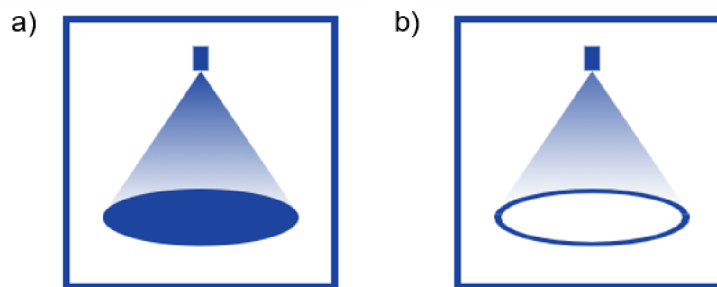
- hustota,
- průtok, příp. poměr  $L/G$ .

Hustota suspenze vychází z hustot a poměru množství vody a přidaného vápence. Obvykle jsou v provozu dosahovány hodnoty hustoty v rozsahu (1100 až 1250)  $\text{kg/m}^3$ . Průtok suspenze je definován buď přímo v jednotkách objemového průtoku ( $\text{m}^3/\text{h}$ ) nebo na základě poměru mezi průtokem suspenze a spalin, tzv.  $L/G$  poměr (z angl. *Liquid to Gas Ratio*). Poměr  $L/G$  je zpravidla uváděn v litrech suspenze na 1  $\text{m}^3$  spalin.

Účinnost procesu odsíření dále závisí na způsobu rozstříku suspenze tryskami do proudu plynu. U trysek se uvádí jako hlavní parametry:

- průtok tryskou,
- úhel rozstříku,
- typ rozstříku,
- distribuce velikosti kapek.

Základní typy rozstříku se označují podle tvaru a míry zaplněnosti v prostoru pod tryskou. Pro rozstřík suspenze se jedná zejména o trysky s kuželovým rozstříkem s plným nebo dutým kuželem (ilustrováno na Obr. 5.2).



Obr. 5.2: Způsoby kuželového rozstříku: a) plný kužel, b) dutý kužel (převzato z [70]).

Při průchodu kapaliny tryskou dochází k její atomizaci a tvorbě kapiček. Velikost těchto kapiček není v praxi konstantní, průměr kapiček je v určitém rozmezí. Pro popis rozložení velikosti kapek se používá tzv. Rosin-Rammlerova distribuční funkce [71] ve tvaru

$$F_m(d) = 1 - \exp \left[ - \left( \frac{d}{\delta} \right)^n \right], \quad (5.11)$$

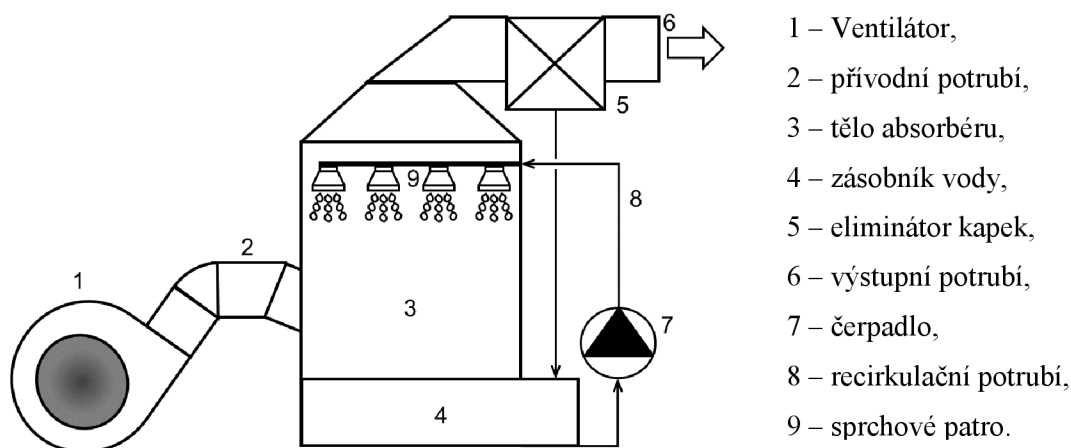
kde  $\delta, n$  jsou konstanty pro konkrétní případ.

## 5.4 Experimentální absorbér

V rámci řešení projektu TAČR TA04021338<sup>1</sup> byl navržen a sestaven zjednodušený model odsiřovacího absorbér. Absorbér umožňuje provádění experimentů za podmínek, které odpovídají podmínkám v reálných absorbérech. K tvorbě zmenšeného modelu bylo přikročeno z důvodu omezených možností provádění experimentů a modifikací na reálném zařízení. Pracovními látkami v modelovém zařízení jsou vzduch a voda.

Modelové zařízení zobrazené na obr. 5.3, obr. 5.4 se skládá z:

- ventilátoru a přívodního potrubí,
- těla absorbér,
- výstupního potrubí s eliminátorem kapek,
- zásobníku vody, čerpadla a recirkulačního potrubí s tryskami.



Obr. 5.3: Experimentální absorbér – schéma [72].

Toto uspořádání umožňuje studium proudění směsi plynů (vzduch) a jeho interakce s kapalnou fází (kapkami vody). Zařízení dále umožňuje měnit parametry proudění pracovních médií změnou provozních parametrů, např. výkonu ventilátoru, nebo změnou konstrukčního uspořádání, tj. výměnou trysek a vnitřních vestaveb. Základní parametry hlavních částí absorbér (rozměrový výkres, parametry ventilátoru), jsou popsány v Příloze 1.

<sup>1</sup> TA04021338 – řešitelé Kafka (DIZ Bohemia), Vít, Dančová, Novosád (TUL)



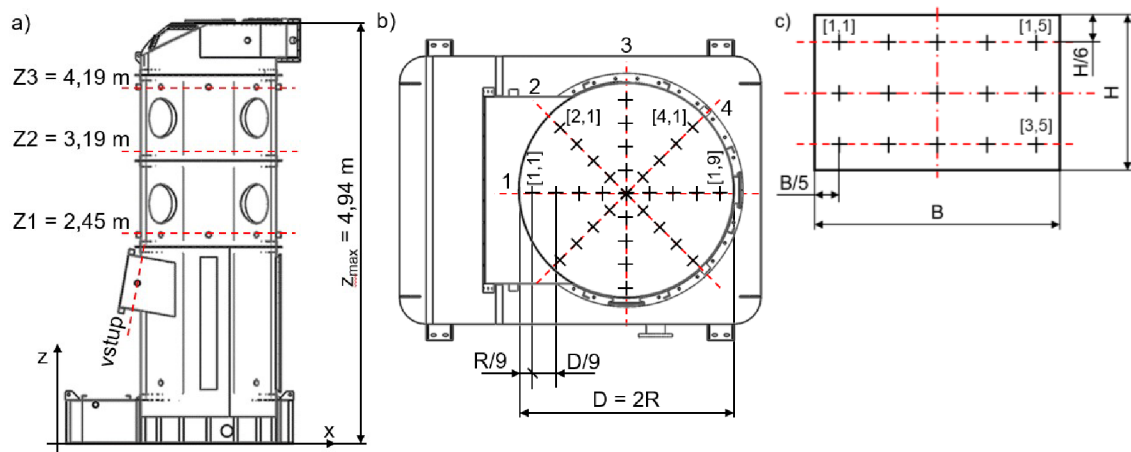


- 1 – Ventilátor,
- 2 – přívodní potrubí,
- 3 – tělo absorbéru,
- 4 – zásobník vody,
- 5 – eliminátor kapek,
- 6 – výstupní potrubí,
- 7 – čerpadlo,
- 8 – recirkulační potrubí,
- 9 – sprchové patro.

Obr. 5.4: Experimentální absorbér [72].

#### 5.4.1 Měření rychlosti v experimentálním absorbéru

Pro měření rychlostních polí v absorbéru je použito Prandtlovy trubice připojené k přístroji TESTO 480 (viz kapitola 5.1.1). Ve vnitřním prostoru absorbéru jsou definovány měřicí body v několika rovinách podle obr. 5.5a. V každé z rovin Z1, Z2 a Z3 je definováno 33 bodů, v rovině vstupu je celkem 15 bodů. Každý bod je označen souřadnicemi  $[z, m, n]$ , kde  $z$  určuje měřicí rovinu (Z1, Z2, Z3),  $m, n$  odpovídá pozici bodu v dané rovině podle obr. 5.5b, c.



Obr. 5.5: Experimentální absorbér: a) Roviny Z1, Z2, Z3, b) body v  $\{Z1, Z2, Z3\}$ , c) body – vstup.

#### 5.4.2 Režimy měření

Měření v absorbéru bylo realizováno při několika různých režimech:

- I. bez dávkování vody,
- II. vstřík vody tryskou SPJU,
- III. vstřík vody tryskou Twin Absorb.

V každém režimu bylo provedeno měření při 40 % a 70 % výkonu ventilátoru. Parametry obou typů použitých trysek jsou uvedeny v Příloze 2. Dva různé typy trysek byly použity za účelem porovnání vlivu úhlu rozstříku a různé distribuce kapiček suspenze. Pro možnost záměny trysek bylo dodatečně instalováno přírodní potrubí pro vodu zakončené přírubami. Trysky jsou umístěny v ose absorberu ve výšce  $z = 3,5$  m.

### 5.4.3 Výsledky experimentů

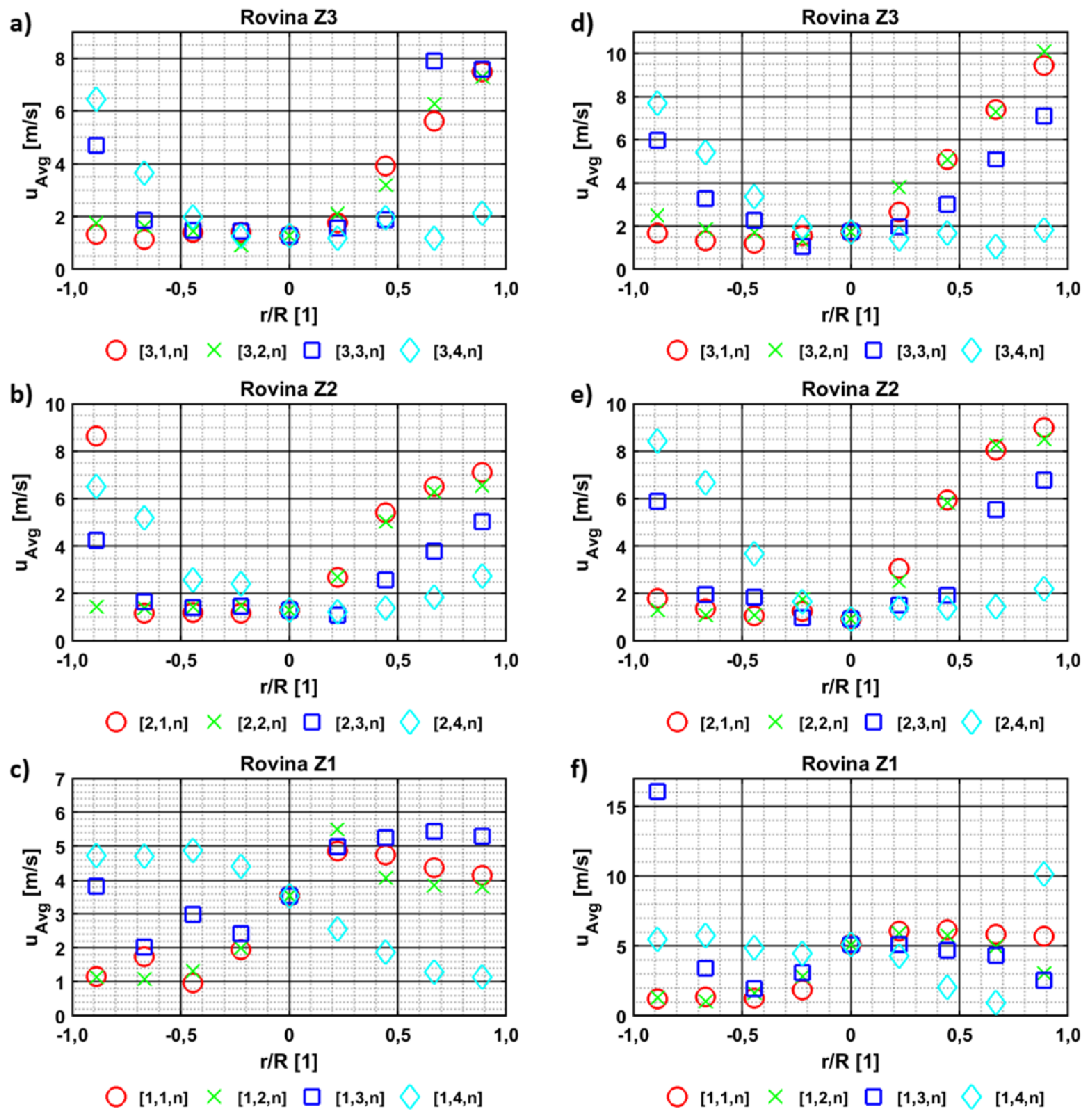
Rychlostní profily získané z měření při definovaných režimech jsou uvedeny na Obr. 5.6, Obr. 5.7 a Obr. 5.8. Výsledky v režimu I, ilustrované na Obr. 5.6, ukazují pro oba výkonové stupně patrný vývoj rychlostního profilu po výšce absorberu. Výsledky v různých výškách absorberu ukazují oblast vyšších rychlostí na straně protilehlé ke vstupnímu průřezu. Po zvýšení průtoku dochází k nárůstu hodnot rychlosti, ale poloha oblasti vyšších rychlostí se výrazně nemění.

Dodatečná instalace trysky a přírodního potrubí v místě měření zasahuje do měřicích míst v rovině Z3. Tím se snížil počet měřicích bodů v této rovině o dva body, v rovině Z3 je tedy pouze 31 měřicích bodů. Po instalaci trysky došlo v obou případech (režim II na Obr. 5.7 a režim III na Obr. 5.8) k výrazné změně rychlostního pole. Vstříkování kapiček způsobí v místě jednotlivých kapek výrazný lokální nárůst tlakové ztráty. To způsobí zmenšení průtočného průřezu a tím navýšení rychlosti v bodech měření. Vzhledem k pohybu kapek se předpokládá, že naměřené hodnoty, které představují časový průměr, odpovídají průměrné hodnotě rychlosti v měřicích bodech bez ohledu na (ne)přítomnost kapek.

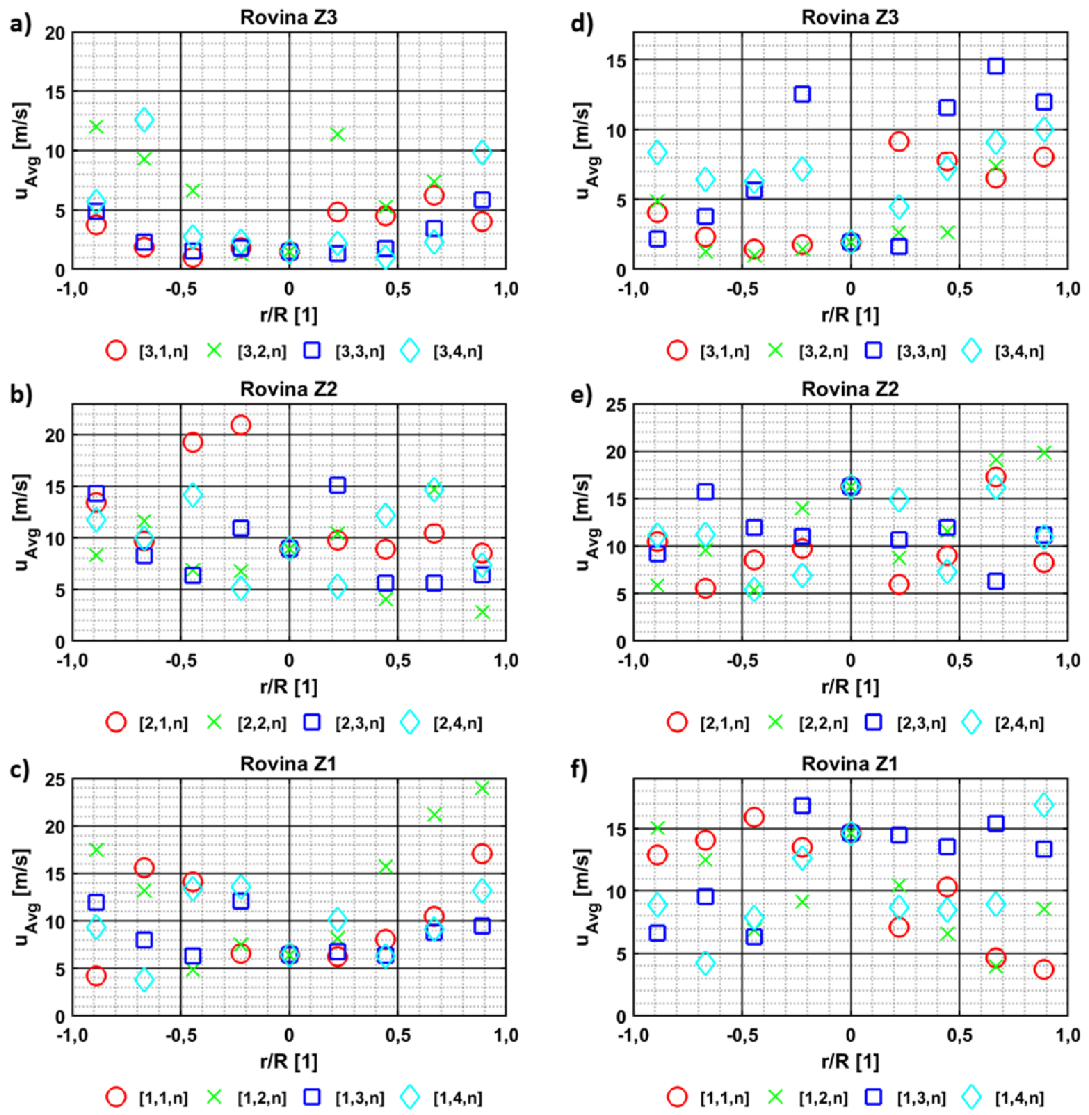
Ve vstupním průřezu byly naměřeny rychlosti v bodech dle Obr. 5.5 c pro dva výkony ventilátoru (40 % a 70 %). Data pro režim I jsou uvedena v Tab. 8. Z uvedených dat byla vyhodnocena střední rychlost při 40% výkonu  $U = (5,92 \pm 0,79) \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ , při 70 % výkonu  $U = (7,66 \pm 1,15) \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . Při velikosti vstupního průřezu je průtok vzduchu  $5,14 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  při 40 % výkonu, resp.  $6,65 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  při 70 % výkonu.

Tab. 8: Rychlosti ve vstupním průřezu pro dva různé stupně výkonu ventilátoru.

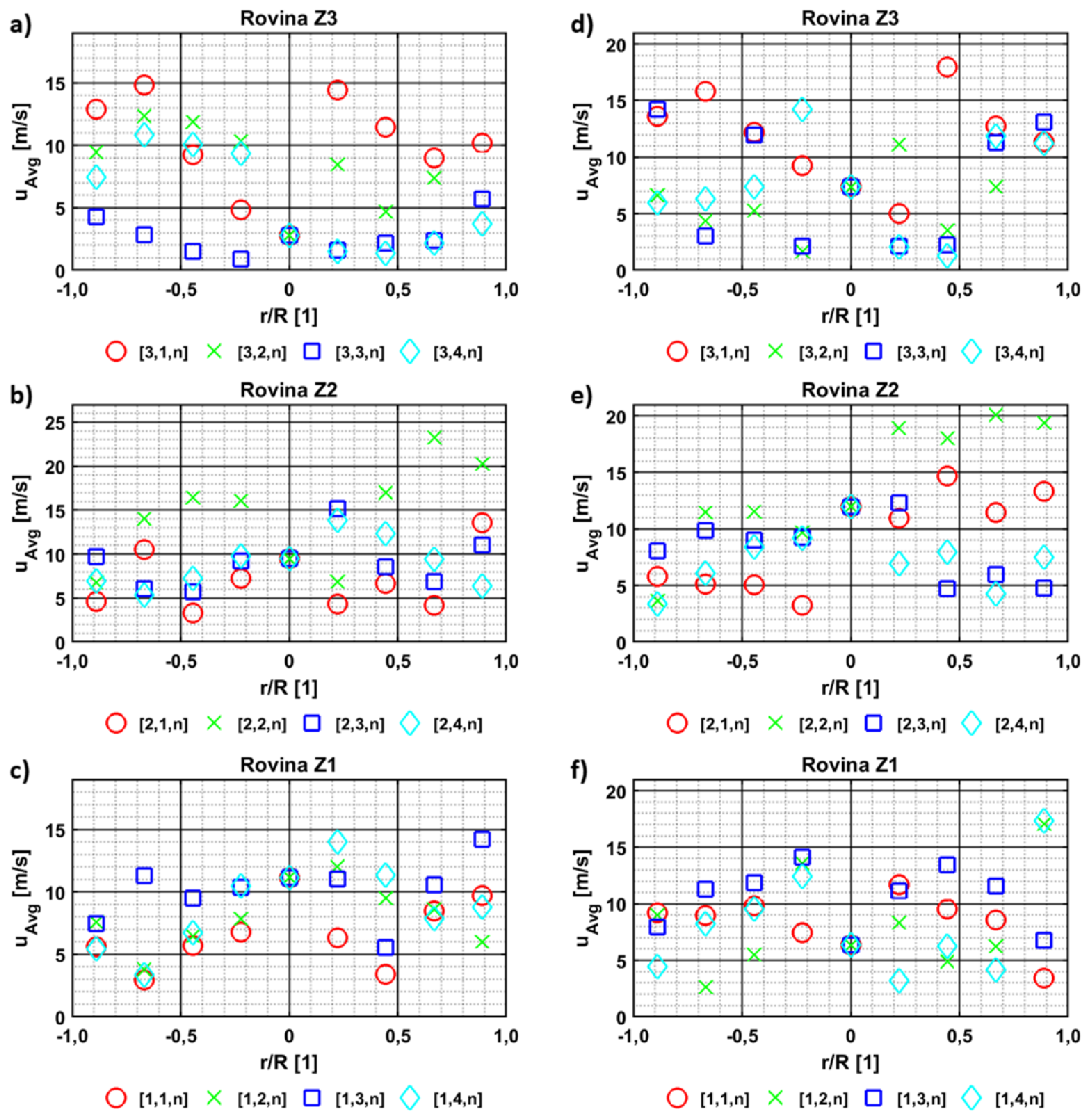
Bod	Rychlost (m/s)	
	Výkon 40 %	Výkon 70 %
[1,1]	6,28	8,43
[1,2]	6,32	8,37
[1,3]	6,70	8,99
[1,4]	6,85	8,98
[1,5]	6,67	8,72
[2,1]	5,08	6,75
[2,2]	4,90	5,87
[2,3]	5,37	6,60
[2,4]	6,08	7,97
[2,5]	6,70	8,51
[3,1]	4,68	6,13
[3,2]	4,70	5,47
[3,3]	5,33	7,40
[3,4]	6,62	8,30
[3,5]	6,58	8,47



Obr. 5.6: Rychlostní profily – režim I: a, b, c) 40 % výkon ventilátoru, d, e, f) 70 % výkon ventilátoru.



Obr. 5.7: Rychlostní profily – režim II: a, b, c) 40 % výkon ventilátoru, d, e, f) 70 % výkon ventilátoru.



Obr. 5.8: Rychlostní profily – režim III: a, b, c) 40% výkon ventilátoru, d, e, f) 70% výkon ventilátoru.

## 5.5 Provozní data reálného absorberu

V rámci zapojení autora do projektů a zakázek smluvního výzkumu byla získána od průmyslových partnerů data z reálného provozu. Jak je uvedeno v kapitole 5.2, detaily ohledně metod získávání těchto dat nejsou veřejně publikovatelné a proto autor používá pouze hodnoty měřených veličin bez dalšího rozboru tak, jak byly získány od průmyslových partnerů.

### 5.5.1 Absorbér bez vnitřních vestaveb

Pro potřeby validace numerického modelu byly v rámci spolupráce na projektu TA04021338 poskytnuta data ze dvou reálných absorberů (stejně konstrukce), které neobsahovaly kromě sprchových trysek a příslušenství žádné další vnitřní vestavby. Součástí podkladů byla i výkresová dokumentace a parametry použitých trysek. Mezi provozní parametry patří:

- průtok spalin,
- teplota spalin na vstupu a výstupu,
- koncentrace SO<sub>2</sub> na vstupu a výstupu,
- koncentrace O<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> a CO<sub>2</sub> na vstupu.

Parametry absorberu jsou uvedeny v Tab. 9. Provozní hodnoty z absorberu byly poskytnuty pouze v režimu konstantního výkonu během cca 3 hodin provozu. Časově průměrované hodnoty z obou absorberů jsou uvedeny v Tab. 10.

Tab. 9: Průmyslový absorber bez vnitřních vestaveb – hlavní parametry.

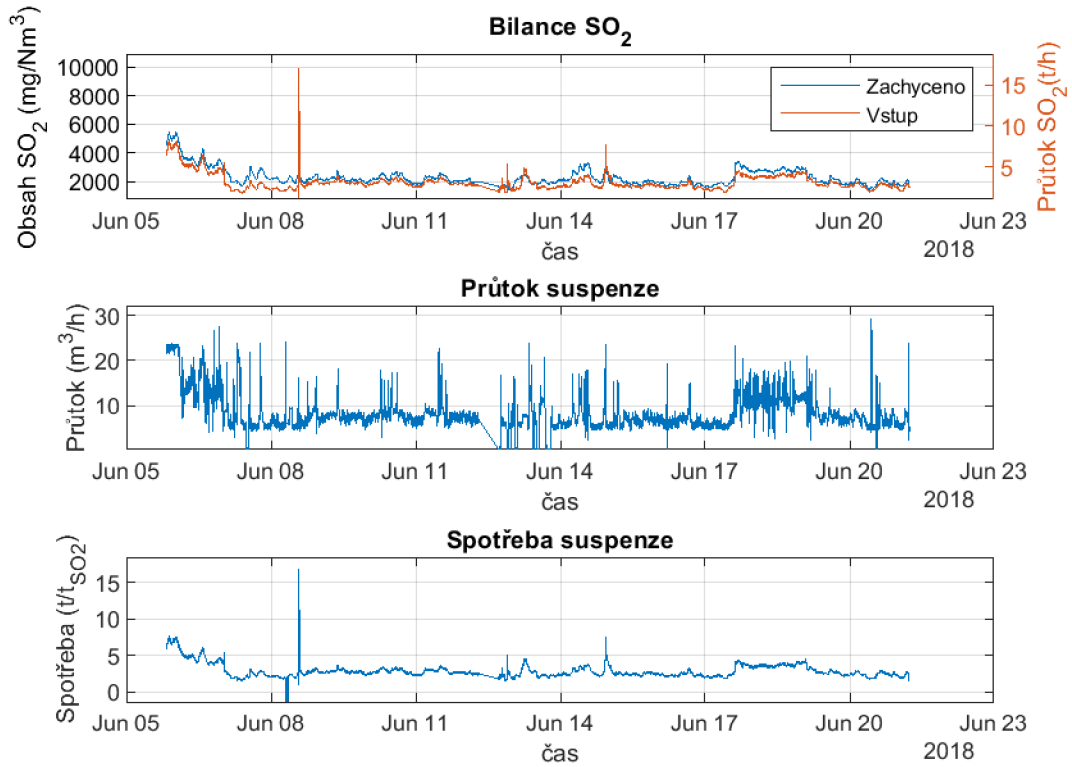
Průměr válcové části absorberu	11340 mm
Výška – vstup spalin	3670 mm
Výška – nádrž absorberu	11700 mm (normální stav)
Vzdálenost horní hrany vstupu spalin od 1. sprchového patra	cca. 2.000 mm
Vzdálenost mezi sprchovými patry	1.525 mm
Počet sprchových pater	3
Počet recirkulačních čerpadel	3
Výkon recirkulačního čerpadla	6223 m <sup>3</sup> /h
Počet trysek na jedno sprchové patro	84
Tlak na trysece	0,55 bar
Průtok trysky	1233 l/min (suspenze)
Stávající trysky	Protiproudé / excentrické / prázdný kužel /

Tab. 10: Průmyslový absorber bez vnitřních vestaveb – střední hodnoty provozních parametrů.

	Absorbér 1	Absorbér 2
Provozní průtok spalin (m <sup>3</sup> /h)	1053439	1037839
Teplota spalin – vstup (°C)	161	157
Teplota spalin – výstup (°C)	95	94
Koncentrace SO <sub>2</sub> – vstup (mg/Nm <sup>3</sup> )	4076	4324
Koncentrace SO <sub>2</sub> – výstup (mg/Nm <sup>3</sup> )	327	425
Koncentrace O <sub>2</sub> (%)	6,23	6,44
Koncentrace NO <sub>x</sub> (%)	295	256
Koncentrace CO <sub>2</sub> (%)	12,87	13,05
Účinnost záchytu SO <sub>2</sub> (%)	91,96	90,17

### 5.5.2 Absorbér s vnitřní vestavbou

Provozní data absorbéru s vnitřní vestavbou v podobě perforovaných plechů byla získána v rámci spolupráce autora na optimalizaci regulačního algoritmu pro odsiřovací jednotku. Kompletní data nejsou vzhledem k rozsahu publikována, pro účely této práce se autor omezuje pouze na výběr dat pro režimy, které byly předmětem simulací. Ukázka časového průběhu vybraných provozních hodnot je ilustrována na Obr. 5.9.



Obr. 5.9: Časový průběh hodnot provozních parametrů [73].

## 6 Vývoj a validace CFD kódu

Na základě teoretických poznatků v kapitole 3 a rešerše k ověřeným přístupům k modelování procesu odsíření uvedené v kapitole 4 byl navržen postup pro CFD modelování procesů odsíření v programovém prostředí OpenFOAM<sup>2</sup>. Hlavní výhody tohoto řešení, oproti počátečním pokusům o řešení v komerčním software ANSYS Fluent [74], jsou otevřený zdrojový kód v jazyce C++ a absence licenčních poplatků. Otevřený zdrojový kód umožňuje přizpůsobení a odladění řešiče pro konkrétní úlohu. Vzhledem k absenci licenčních poplatků a možnosti paralelizace úloh je možné řešit i výpočetně velmi náročné úlohy bez navýšení provozních nákladů

OpenFOAM disponuje rozsáhlou řadou funkcí, které dokáží řešit různé komplexní úlohy proudění tekutin, zahrnujících modelování turbulence, přenos tepla, chemických reakcí a další. Systém je v podstatě založen na souboru dílčích jednoduchých nástrojů, které řeší elementární fyzikální děje. Kombinací těchto nástrojů vznikne řešič pro komplexní problém. Zdrojové kódy i konfigurační soubory jsou v prostředí OpenFOAM implementovány ve formě textových souborů, přičemž části se zdrojovým kódem mají převážně přípony \*.c a \*.h.

Společnost OpenCFD Ltd., která stojí za vývojem OpenFOAM udržuje vzhledem k otevřenosti systémového kódu veškerou dokumentaci v online podobě. Základní manuály jsou dostupné z webů [75], [76] a [77].

Cílem této práce je navrhnout a odladit řešič pro modelování procesu odsíření v prostředí OpenFOAM. Nejprve byl vytipován vhodný výchozí řešič. Zdrojový kód byl následně upravován tak, aby výsledný řešič dokázal postihnout problematiku proudění a absorpce SO<sub>2</sub> v odsiřovacím absorbéru. Posledním krokem bylo odladění řešiče na základě porovnání výsledků s experimentálními daty.

### 6.1 Volba hlavních parametrů modelu

V souladu s poznatky a závěry autorů, kteří se problematikou odsíření zabývali dříve, je modelování procesů odsíření v této práci řešeno s následujícími základními předpoklady:

- model řeší ustálené provozní stavy v absorbéru,
- turbulentní vícefázové proudění je modelováno přístupem Euler-Lagrange. Primární fáze (spaliny) jsou tedy uvažovány jako kontinuum, kapky suspenze jako diskrétní částice. Pro uzavření soustavy Navier-Stokesových rovnic je použito RANS přístupu [78],
- chemické procesy nejsou přímo modelovány, ale jsou zahrnuty v rámci součinitelů přestupu hmoty,
- důraz je kladen na jednoduchost modelu a jeho aplikovatelnost na velká průmyslová zařízení.

### 6.2 Výběr výchozího řešiče

Primární fáze je uvažována jako kontinuum. Jedná se o směs plynů, které tvoří spaliny. V rámci balíku OpenFOAM byl jako výchozí pro modelování proudění primární fáze vybrán řešič *simpleFoam*, který je vhodný pro stacionární řešení proudění nestlačitelné

---

<sup>2</sup> <https://www.openfoam.com>



tekutiny, včetně modelování turbulence. Řešič používá tzv. SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) algoritmus pro řešení rovnic kontinuity a hybnosti. Do řešiče *simpleFoam* je implementována podpora několika přístupů k modelování turbulence:

- *Reynolds Averaged Simulation* (RAS),
- *Detached Eddy Simulation* (DES),
- *Large Eddy Simulation* (LES).

V rámci této práce je zvoleno použití turbulentních modelů ze skupiny RAS, konkrétně dvourovnicových modelů  $k-\varepsilon$ . Primárně nebude zasahováno do zdrojového kódu modelů turbulence, u jednotlivých řešených případů budou pouze uvedeny parametry okrajových podmínek a volba stěnových funkcí.

Řešič však nezahrnuje energetickou rovnici, bilanci složek směsi a další potřebné součásti. Další výběr byl zaměřen na řešiče, které obsahují i vícekomponentní a vícefázové modely, tj. modelování směsi plynů a lagrangovské částice. Těmto požadavkům je nejbližší řešič *simpleReactingParcelFoam*.

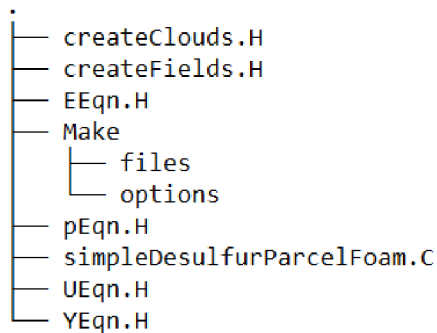
### 6.2.1 Řešič *simpleReactingParcelFoam*

Jedná se o stacionární řešič pro turbulentní proudění stlačitelné tekutiny s rozstříkem částic a volitelnými zdrojovými členy. Zahrnuje fyzikální modely pro turbulenci, přenos tepla, rozstřík částic (kapek), reakce mezi primární fází a částicemi, a spalování. V rámci řešených úloh je možné deaktivovat vstřík diskrétní fáze, reakce i spalování. Pokud není třeba modelovat tyto jevy, není tedy nutné upravovat zdrojový kód řešiče. Úprava kódu však zajistí rychlejší běh programu a vzhledem k tomu, že nově vyvíjený řešič pro modelování odsíření bylo nutné po úpravách kompilovat, byly odstraněny i nepotřebné části.

Kompletní zdrojový kód řešiče *simpleReactingParcelFoam* je dostupný v dokumentaci k OpenFOAM [77]. V rámci instalace OpenFOAM je k dispozici i testovací úloha s názvem *verticalChannel*, která řeší rozstřík vody a její odpar ve vertikálním kanále. Tato testovací úloha byla během testování vyvíjeného řešiče pro odsíření použita jako výchozí šablona složek a dílčích souborů.

### 6.2.2 Vlastní řešič *simpleAbsorptionParcelFoam*

Nově vyvíjený řešič byl pojmenován *simpleAbsorptionParcelFoam*. Název byl zvolen tak, aby zachoval část původního názvu výchozího řešiče a již z názvu bylo patrné, že slouží pro modelování procesu odsíření. V souladu se zvyklostmi při úpravách zdrojového kódu v OpenFOAM, byla provedena změna názvu řešiče ve všech dílčích textových souborech. Základní struktura programového kódu řešiče (viz Obr. 6.1) v podstatě odpovídá výchozímu řešiči. Výsledná podoba zdrojového kódu je uvedena v Příloze 3. Ve všech dílčích souborech se zdrojovým kódem byly odstraněny části zahrnující přenos tepla radiací a spalování. Vývoj kódu řešiče a jeho testování je popsáno v následujících kapitolách.



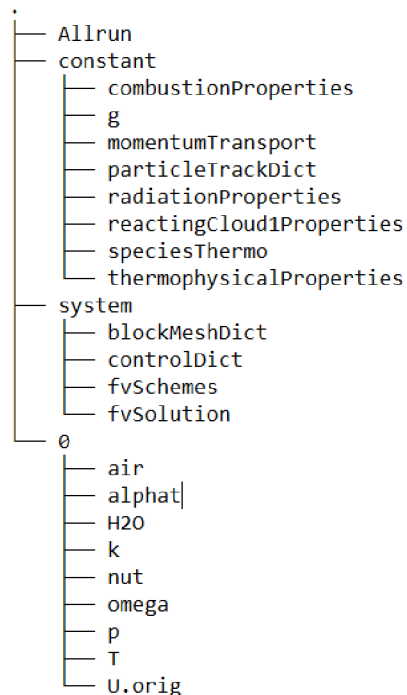
Obr. 6.1: Řešič *simpleAbsorptionParcelFoam* – struktura souborů se zdrojovými kódy.

## 6.3 Modelování proudění primární fáze

Nově vyvíjený řešič je bez dalších úprav vhodný pro simulaci samostatného proudění primární fáze, tj. směsi plynů tvořících spaliny. Přestože se jedná o jednodušší úlohu, je použit přímo komplexní řešič z důvodu otestování jeho funkčnosti v rámci řešené problematiky.

### 6.3.1 Zadání testovací úlohy

Hlavním úkolem pro potřeby testování je tvorba testovací úlohy. Tvorba adresářové struktury vychází z úlohy s názvem *verticalChannel*, jejíž výchozí struktura je ilustrována na Obr. 6.2. Detailní popis dílčích souborů není v této práci uveden, vzhledem k tomu, že se jedná o verzi souborů obsaženou v základní instalaci OpenFOAM.



Obr. 6.2: Úloha *verticalChannel* – adresářová struktura.

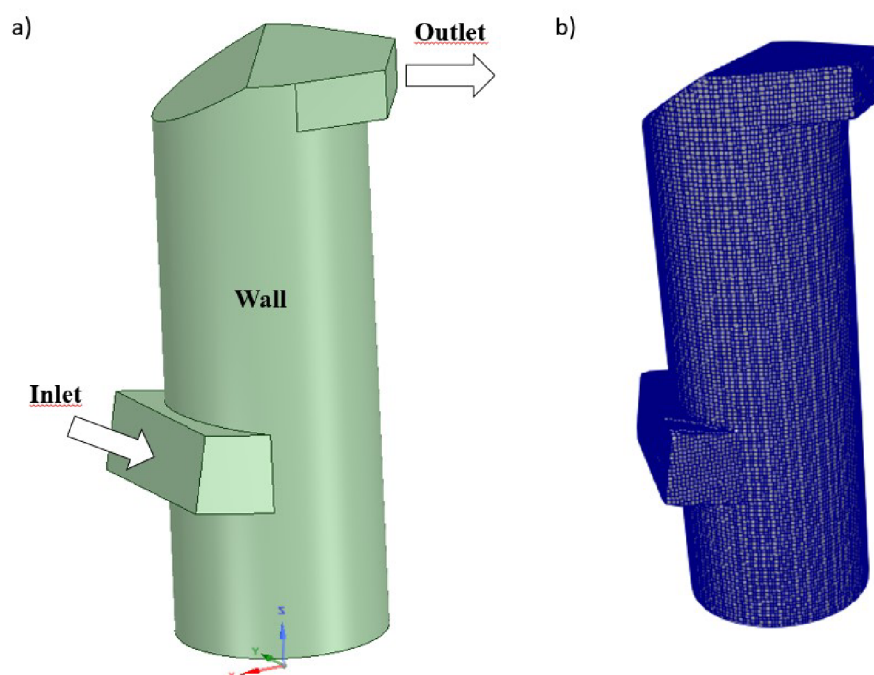
Pro ověření funkčnosti řešiče byla v této fázi použita experimentálně získaná data experimentálního absorbéru (viz kapitola 5.4) v režimu I, tj. bez dávkování vody. Na základě rozměrů experimentálního absorbéru byl vytvořen zjednodušený CAD model. Obdobně k situaci při experimentu v režimu I nebyla uvnitř absorbéru žádná vnitřní vestavba. Testování řešiče bylo provedeno pro oba experimentálně zkoumané stupně výkonu, tj. 40% a 70% max. výkonu ventilátoru.

V souladu s experimentem byly definovány okrajové podmínky na hraniční plochy modelu (viz Obr. 6.3). Názvy a parametry okrajových podmínek jsou uvedeny v Tab. 11 tak, jak jsou zadány do konfiguračních souborů pro OpenFOAM. Hodnota střední rychlosti proudění ve vstupním průřezu, uvedená v kapitole 5.4.3, pro oba režimy byla použita pro výpočet počátečních hodnot turbulentních veličin podle vztahů:

$$k = \frac{3}{2} (I|\bar{U}|)^2, \quad (6.1)$$

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{0,75} k^{1,5}}{L}, \quad (6.2)$$

kde byla použita intenzita turbulence  $I = 5\%$  a  $C_\mu = 0,09$ . Vztahy (6.1), (6.2) budou dále používány pro stanovení hodnot turbulentních veličin při definici okrajových podmínek.



Obr. 6.3: Experimentální absorbér – a) model s vyznačením okrajových ploch, b) výpočetní síť (hrubá).

Tab. 11: Okrajové podmínky pro testovací výpočet proudění primární fáze.

	<b>Inlet</b>	<b>Wall</b>	<b>Outlet</b>
$U$	fixedValue	0	inletOutlet
$p$	zeroGradient	zeroGradient	$10^5$
$T$	293	zeroGradient	zeroGradient
$k$ (40%)	0,022	kqfWallFunction	zeroGradient
$\varepsilon$ (40%)	0.017	epsilonWallFunction	zeroGradient
$k$ (70%)	0.029	kqfWallFunction	zeroGradient
$\varepsilon$ (70%)	0.025	epsilonWallFunction	zeroGradient

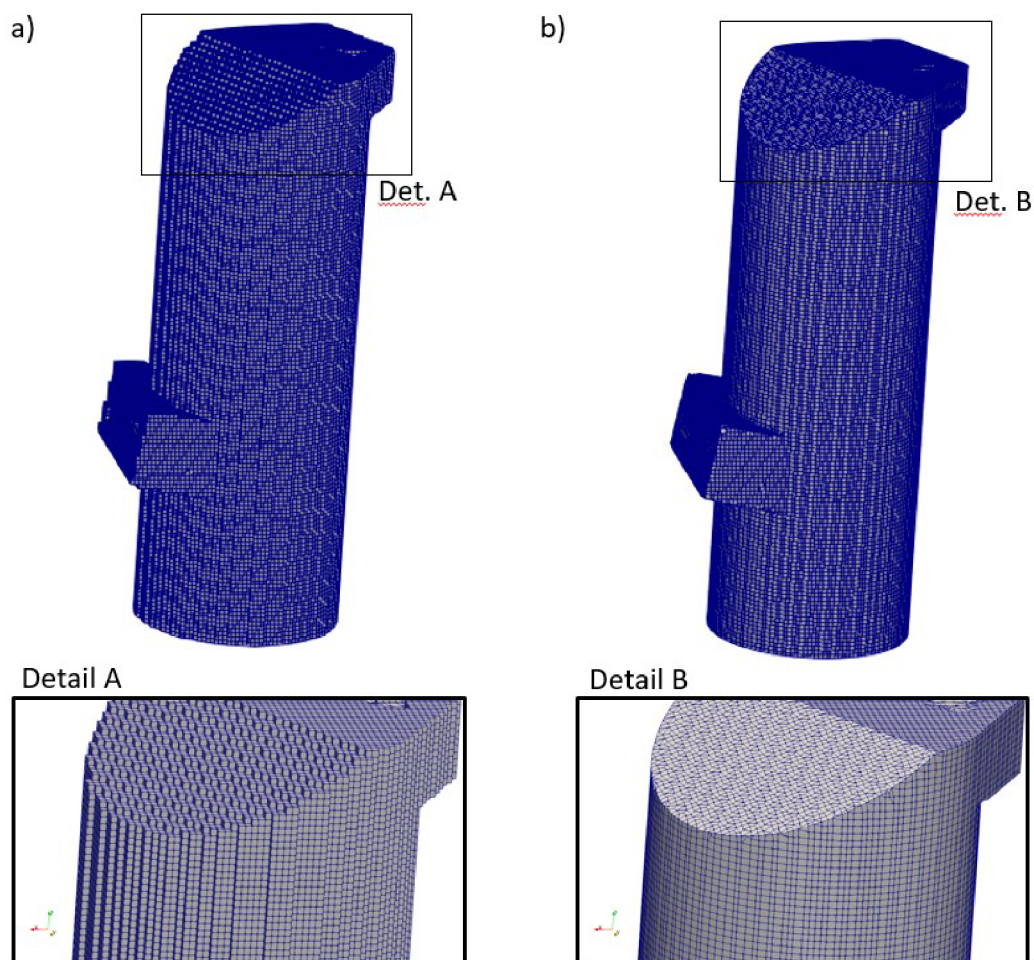
### 6.3.2 Příprava výpočtové sítě

Nejprve je pro každou řešenou úlohu nutné vytvořit 3D CAD model. Vhodným vstupním formátem je sada souborů \*.stl, přičemž každý soubor obsahuje data hraničních ploch. Základem pro tvorbu sítě je obecný základní tvar (např. kvádr) s hrubou sítí vytvořený pomocí nástroje *blockMesh*, jehož nastavení je uvedeno v souboru *blockMeshDict* (viz Obr. 6.4). Parametry  $\{x, y, z\}_{\min/\max}$  definují hranice výpočetní oblasti tvaru kvádru.

```
FoamFile
{
  version 2.0;
  format  ascii;
  class  dictionary;
  object  blockMeshDict;
}
// ***** //
convertToMeters 1;
//hranice oblasti
xMin -0.15 ; xMax 0.045;
yMin -0.045; yMax 0.045;
zMin -0.1; zMax 1.055;
vertices
( //rovina půdorysu - z=zMin
  ($xMin $yMin $zMin ) //bod 0
  ($xMax $yMin $zMin ) //bod 1
  ($xMax $yMax $zMin ) //bod 2
  ($xMin $yMax $zMin ) //bod 3
  // rovina z=zMax
  ($xMin $yMin $zMax ) //bod 4
  ($xMax $yMin $zMax ) //bod 5
  ($xMax $yMax $zMax ) //bod 6
  ($xMin $yMax $zMax ) //bod 7
);
Blocks ( hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (10 10 50) simpleGrading (1 1 1));
edges();
boundary ();
```

Obr. 6.4: Hlavní část souboru *blockMeshDict* – vlastní kód.

V dalším kroku je potřeba vytvořit hraniční křivky z modelu pomocí nástroje *surfaceFeatures*. Definice dílčích položek v souboru s nastavením *surfaceFeaturesDict* odpovídá konkrétnímu \*.stl modelu. Po extrakci hraničních křivek je použit nástroj *snappyHexMesh* pro navázání uzlů strukturované sítě vytvořené pomocí nástroje *blockMesh* na hraniční křivky. Nástroj *snappyHexMesh* pracuje ve dvou krocích. Nejprve dojde k odstranění buněk, které jsou mimo oblast uzavřenou hraničními křivkami. Buňky, které jsou protnuty hraničními křivkami, zůstanou zachovány a v druhém kroku dojde k jejich vyhlazení posunem uzlových bodů do blízkosti hraničních křivek. Postup tvorby sítě je ilustrován na Obr. 6.5.



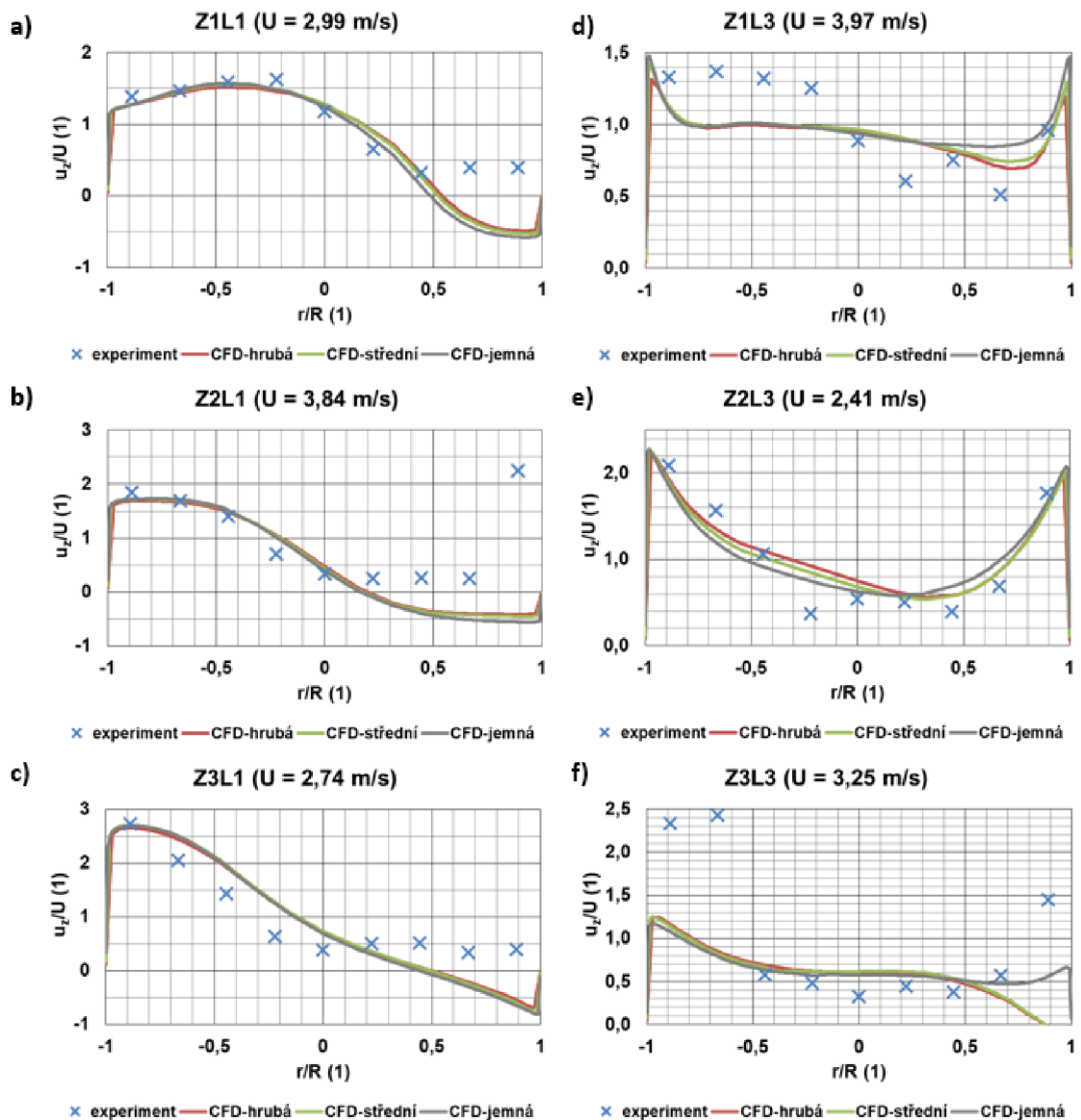
Obr. 6.5: Postup tvorby sítě pomocí *snappyHexMesh*: a) krok 1, b) krok 2.

### 6.3.3 Vliv velikosti sítě

Objem modelu byl diskretizován pomocí nástroje *snappyHexMesh* postupem uvedeným výše. Bylo vytvořeno několik sítí s různou velikostí. Počet buněk sítě u jednotlivých variant je uveden v Tab. 12. Následně bylo provedeno porovnání vlivu sítě při výkonu 40%. Porovnání rychlostních profilů (stoupavé složky rychlosti, tj. rychlosti ve směru osy absorbéru) v liniích ve směru vstupního průřezu ( $L1 \approx y = 0$ ) a kolmo ke vstupnímu průřezu ( $L3 \approx x = 0$ ) v řezech Z1, Z2 a Z3 je uvedeno na Obr. 6.6. Při výpočtech byl použit standardní  $k-\varepsilon$  model, přičemž koeficienty modelu byly zachovány defaultně tak, jak jsou nastaveny v OpenFOAM.

Tab. 12: CFD simulace experimentálního absorbéru – varianty výpočetní sítě.

Varianta sítě	hrubá	střední	jemná
Počet buněk	125 628	522 100	2 101 767



Obr. 6.6: Rychlostní profily v experimentálním absorběru - vliv velikosti sítě, výkon 40%.

Výsledné rychlostní profily ukazují dobrou shodu výsledků ze simulací s experimentálními daty. Výrazné odchylky jsou patrné v oblastech, kde hodnoty rychlosti ze simulací nabývají záporných hodnot. V tomto případě se autor domnívá, že při měření byla Prandtlova trubice orientována po směru proudu tekutiny v měřicím místě, ale měřicí přístroj vyhodnocoval absolutní hodnotu diferenčního tlaku, tedy bez určení směru vektoru rychlosti. Dále dochází k rozdílům hodnot v příčném směru (linie 3) na okrajích absorběru, kde je patrný vliv nesymetricky umístěného výstupu.

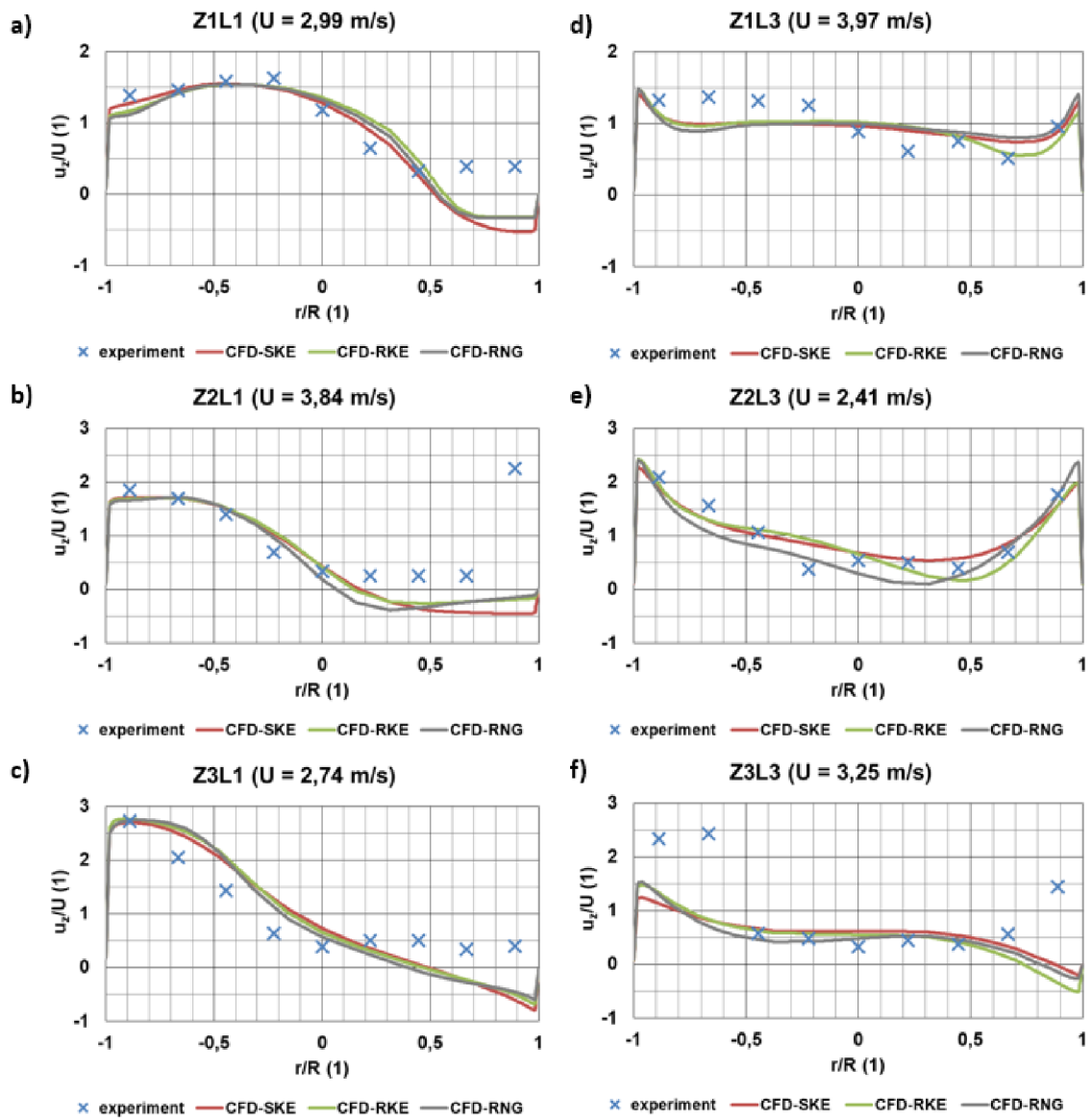
Profily získané z výpočtů se sítěmi s různou velikostí jsou prakticky shodné. Použití velikosti sítě v testovaném rozsahu je tedy univerzální a pro další výpočty lze použít jakoukoliv síť bez výrazného vlivu na výsledky. Pro další práci bude použita síť střední velikosti, tj. síť s cca 0,5 mil. buněk. Výraznější rozdíly jsou patrné pouze v případě jemné sítě v linii Z3L3 (Obr. 6.6f), kde je v oblasti  $r/R = (0,5;1)$  odlišný průběh rychlostního profilu, který se více blíží experimentálním datům. Tato oblast je ovlivněna nesymetricky umístěným výstupem z absorběru.

#### 6.3.4 Volba turbulentního modelu

Přehled turbulentních modelů, použitých dříve autory, kteří se zabývali problematikou CFD simulací procesu odsíření, ukazuje dominantní použití dvourovnicového turbulentního modelu  $k-\varepsilon$ . Pro simulaci průmyslových zařízení, je tento model vhodný i s ohledem na použití stěnových funkcí. Přístup s řešením oblastí u stěny, který vyžaduje výrazné zjemnění sítě v oblasti blízko stěny, by vzhledem k rozměrům zařízení vyžadoval vytvoření výpočtové sítě s velkým počtem elementů, což zvyšuje výpočetní nároky výkonové i časové.

Pro výběr vhodné modifikace modelu  $k-\varepsilon$  byly nejprve provedeny pokusné simulace proudění, jejichž výsledky byly publikované v [72], [79] a [80]. Tyto výsledky byly získány v raných fázích práce na tématu a využívali standardní řešiče v OpenFOAMu. Po vytvoření základního řešiče přímo pro řešenou problematiku byly provedeny opět simulace proudění vzduchu v experimentálním absorbéru. Pro simulace byla použita střední velikost sítě. Cílem je porovnat data z experimentu s výsledky simulací s použitím základního (standardního)  $k-\varepsilon$  modelu (výsledky v kapitole 6.3.2) a dále modifikací Realizable  $k-\varepsilon$  (RKE) a RNG  $k-\varepsilon$ . Okrajové podmínky a nastavení řešiče bylo stejná jako v kapitole 6.3.2. Modelové konstanty turbulentních modelu jsou použity s výchozími hodnotami, definovanými v OpenFOAM.

Vypočtené rychlostní profily jsou uvedeny v Obr. 6.7. Relativní rychlost je vztažena ke střední rychlosti vyhodnocené z experimentu pro každou linii. Porovnání výsledků s použitím různých modifikací turbulentního modelu  $k-\varepsilon$  ukazuje pouze drobné odchylky v oblastech blíže u stěny. Ve střední části průřezu absorbéru jsou rychlostní profily prakticky totožné. Z prezentovaných výsledků je obtížné stanovit nejvhodnější verzi turbulentního modelu. Jak bylo potvrzeno i dříve různými autory, použití standardního  $k-\varepsilon$  modelu a modifikace Realizable jsou vhodné pro řešení turbulentního proudění v absorbéru. Pro další práci bude i nadále použito standardního modelu  $k-\varepsilon$ .

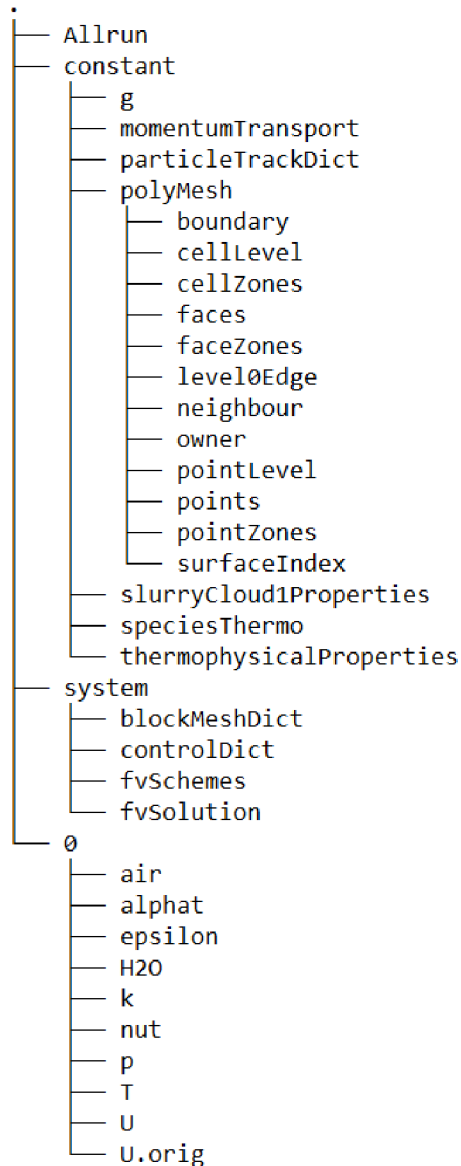


Obr. 6.7: Rychlostní profily v experimentálním absorbéru - vliv volby turb. modelu, výkon 40%.



## 6.4 Modelování vícefázového proudění

Pro modelování kapalné fáze byl použit přístup s Lagrangeovskými částicemi. V rámci plynné fáze byla přidána složka vodní páry (H<sub>2</sub>O). Pro testovací simulaci proudění v absorberu se vstřikem vody, která odpovídá experimentu v režimu III, byla použita stejná síť jako v případě proudění. V geometrii modelu je zanedbán objem přívodního potrubí a pozice výstupu z trysky je popsána pouze v konfiguračním souboru vstřiku kapalné fáze umístěného v adresáři *constant/slurryCloud1Properties*. Kompletní výpis adresářové struktury je uveden na Obr. 6.8.



Obr. 6.8: Úloha pro modelování experimentálního absorberu – vlastní adresářová struktura.

V souboru *slurryCloud1Properties* jsou definovány všechny parametry diskrétní fáze. V rámci tohoto souboru jsou v části *constantProperties* definovány fyzikální vlastnosti, tj. hustota, teplota a měrná tepelná kapacita. Pro vodu jsou hodnoty jednotlivých veličin při teplotě 20°C [81], použité pro výpočet, uvedeny v Obr. 6.9

Dále je možné specifikovat složení částice na základě podílu jednotlivých fází a v rámci fází i dílčích složek. Pro aktuální úlohu je definována pouze kapalná složka obsahující H<sub>2</sub>O (viz Obr. 6.9) pomocí modelu *singleMixtureFractionCoeffs*.

```

constantProperties
{
rho0      998;
T0        293;
Cp0       4182;
constantVolume false;
}

singleMixtureFractionCoeffs
{
phases
(
gas { }
liquid {H2O 1;}
solid { }
);
YGasTot0  0;
YLiquidTot0  1;
YSolidTot0  0;
}

```

Obr. 6.9: Lagrangeovské částice – definice vlastností v *slurryCloudIProperties*.

V části definice submodelů je možné definovat síly působící na částice (např. gravitační, odporová, vztlaková), interakce částic se stěnami a okrajovými plochami, model přenosu tepla, model pro fázové změny (vypařování, var, kondenzace), model povrchových reakcí, model vzájemné interakce částic a další.

Pro aktuálně řešenou úlohu je zásadní model vstřiku částic (položka *injectionModels*). První definovaný parametr je volba typu vstřiku s možnostmi:

- *cellZoneInjection* – vstřik s definovanou hustotou částic z definované sady buněk, kdy je definován celkový tok a výstupní rychlost,
- *coneInjection* – v definovaných bodech je definován vstřik kuželového tvaru (plný, dutý kužel). Uživatel definuje čas počátku a trvání vstřiku, počet shluků pro trasování, výstupní rychlost a úhly vnitřního a vnějšího kužele. Toto nastavení nevyžaduje v rámci sítě předpřipravenou pojmenovanou plochu,
- *fieldActivatedInjection* – podmíněné vstřikování, pokud pole definované veličiny ve výpočtové doméně nabývá vyšších hodnot než je definovaná prahová hodnota, dochází ke vstřiku,
- *patchFlowRateInjection* – parametry vstřiku (rychlost a koncentrace částic) jsou vypočteny na základě toku definovanou plochou. Vstupní parametry jsou celkové vstřikované množství, název plochy, doba trvání vstřiku a cílová koncentrace vztahovaná k průtoku nosné fáze,
- *patchInjection* – vstřik definovanou plochou. Vstupní parametry jsou celkové vstřikované množství, objemový tok, označení plochy, doba trvání vstřiku a výstupní rychlost,
- *reactingMultiphaseLookupTableInjection* – vstřik je definován na základě údajů z referenční tabulky. Každý řádek tabulky představuje jednu pozici vstřiku.

Pro aktuální úlohu (III dle experimentu), kde je třeba definovat vstřik vody jednou tryskou se dvěma výstupy (Twin Absorb) byl vybrán pro definici vstřiku model *coneInjection*. Kompletní parametry jsou uvedeny v Tab. 13. Pozice trysek je vypočtena podle umístění připojovací příruby, která má zajistit polohu trysky v ose absorberu, ve výšce  $z = 3558$  mm. Ostatní geometrické parametry vychází z rozměrů trysek a údajů od výrobce uvedených v Příloze 2.

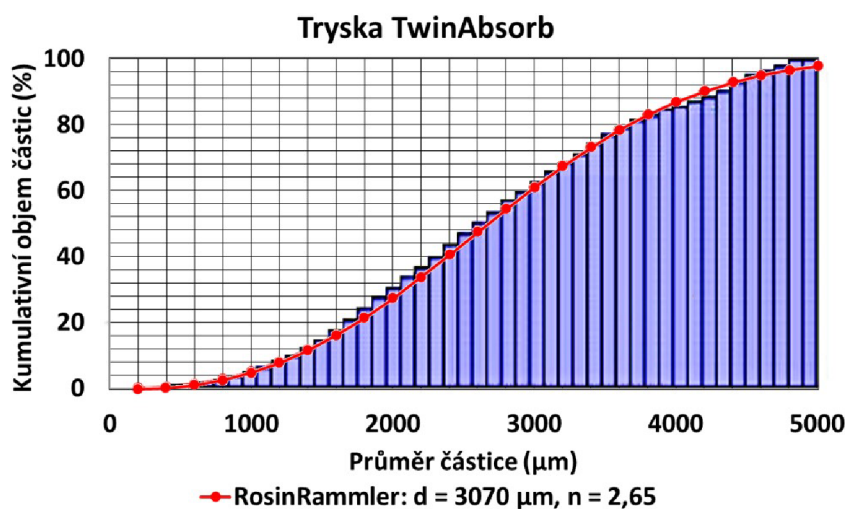
Tab. 13: Parametry nastavení trysek.

Parametr	Tryska TwinAbsorb
Počet hrdel	2
Průměr hrdla (mm)	100
Objemový průtok ( $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ )	0,01455 (každou tryskou)
Výstupní rychlost (m/s)	4,8
Úhel rozstříku	80°/90°
Typ rozstříku	Plný kužel
Pozice [x,y,z]	[0;-0,085;3,40], [0;0,085;3,40]
Osa vstříku [x,y,z]	[0;-0,087;-1], [0;0,087;-1]
SMD ( $\mu\text{m}$ )	2218

Rozložení distribuce kapek je možné v OpenFOAM definovat několika způsoby:

- *fixedValue* – konstantní hodnota, jedna velikost kapek.
- *uniform* – rovnoměrné rozdělení všech velikostí kapek.
- *exponential* – exponenciální rozdělení.
- *normal* – normální rozdělení.
- *multiNormal* – normální rozdělení s váhovými koeficienty.
- *RosinRammler* – kumulativní rozložení podle rovnice  $Y = 1 - e^{-\left(\frac{d_i}{d}\right)^n}$ .
- *massRosinRammler* – Rosin-Rammlerovo rozložení na základě hmotnostních podílů.

Pro simulaci trysky TwinAbsorb bylo vzhledem k dostupnosti dat z měření výrobce zvoleno Rosin Rammlerovo rozložení. Porovnání naměřených dat a zvoleného Rosin Rammlerova rozložení je uvedeno na Obr. 6.10.



Obr. 6.10: Tryska TwinAbsorb – porovnání dat výrobce a navrženého Rosin Rammlerova rozložení.

Pro nastavení každého výstupu z trysky byl v souboru *shurryCloud1Properties* definován podmodel v *injectionModels* podle Obr. 6.11.

```

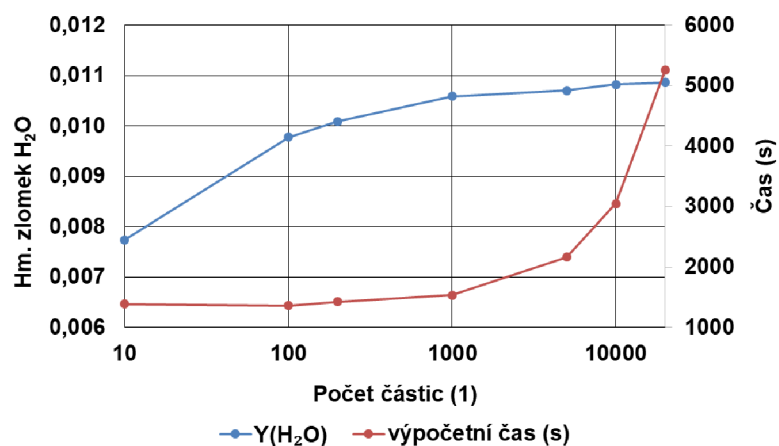
injectionModels
{
  TwinAbsorb1
  {
    type          coneInjection;
    position      (0 -0.085 3.4);
    direction     (0 -0.087 -1);
    Umag          4.8;
    massFlowRate  14.52;
    duration      1;
    parcelBasisType mass;
    parcelsPerSecond 1000;
    flowRateProfile constant 1;
    thetaInner   0;
    thetaOuter   85;
    sizeDistribution
    {
      type RosinRammler;
      RosinRammlerDistribution
      {
        minValue 1000e-6;
        maxValue 4800e-6;
        d        3070e-6;
        n        2.65;
      }
    }
  }
}

TwinAbsorb2
{
  type          coneInjection;
  position      (0 0.085 3.4);
  direction     (0 0.087 -1);
  Umag          4.8;
  massFlowRate  14.52;
  duration      1;
  parcelBasisType mass;
  parcelsPerSecond 1000;
  flowRateProfile constant 1;
  thetaInner   0;
  thetaOuter   85;
  sizeDistribution
  {
    type RosinRammler;
    RosinRammlerDistribution
    {
      minValue 1000e-6;
      maxValue 4800e-6;
      d        3070e-6;
      n        2.65;
    }
  }
}

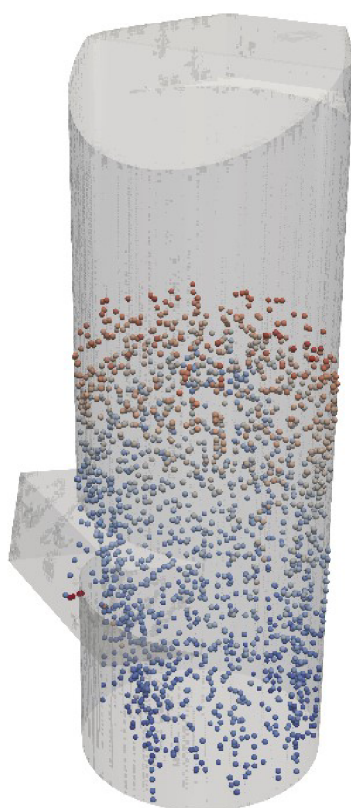
```

Obr. 6.11: Vstřikování vody tryskou TwinAbsorb – vlastní nastavení v *slurryCloud1Properties*.

Nejprve bylo provedeno několik výpočtů s cílem analyzovat vliv nastavení počtu částic (položka *parcelsPerSecond*). Do výpočtu byl zahrnut model pro odpar kapaliny, který je implementován v základní instalaci OpenFOAM. Pro vyhodnocení vlivu počtu vstřikovaných částic byla sledována koncentrace H<sub>2</sub>O ve výstupním průřezu. Tato veličina byla vybrána z důvodu podobného přenosového jevu k dalšímu řešení absorpce SO<sub>2</sub>. Vzhledem k tomu, že na vstupu je koncentrace H<sub>2</sub>O nastavena nulová, je veškerá vlhkost na výstupu získána odparem z kapiček vody. Závislost výstupní koncentrace H<sub>2</sub>O na nastavení počtu vstřikovaných částic je uvedeno na Obr. 6.12. Výsledky ukazují, že pro další výpočty je nutné použít minimálně 1000 částic pro každou trysku, aby bylo dosaženo nezávislosti výsledků na nastavení vstřiku. S použitím většího počtu částic značně vzrůstá i celková doba výpočtu.



Obr. 6.12: Vliv nastavení počtu částic na odpar vody a dobu výpočtu.

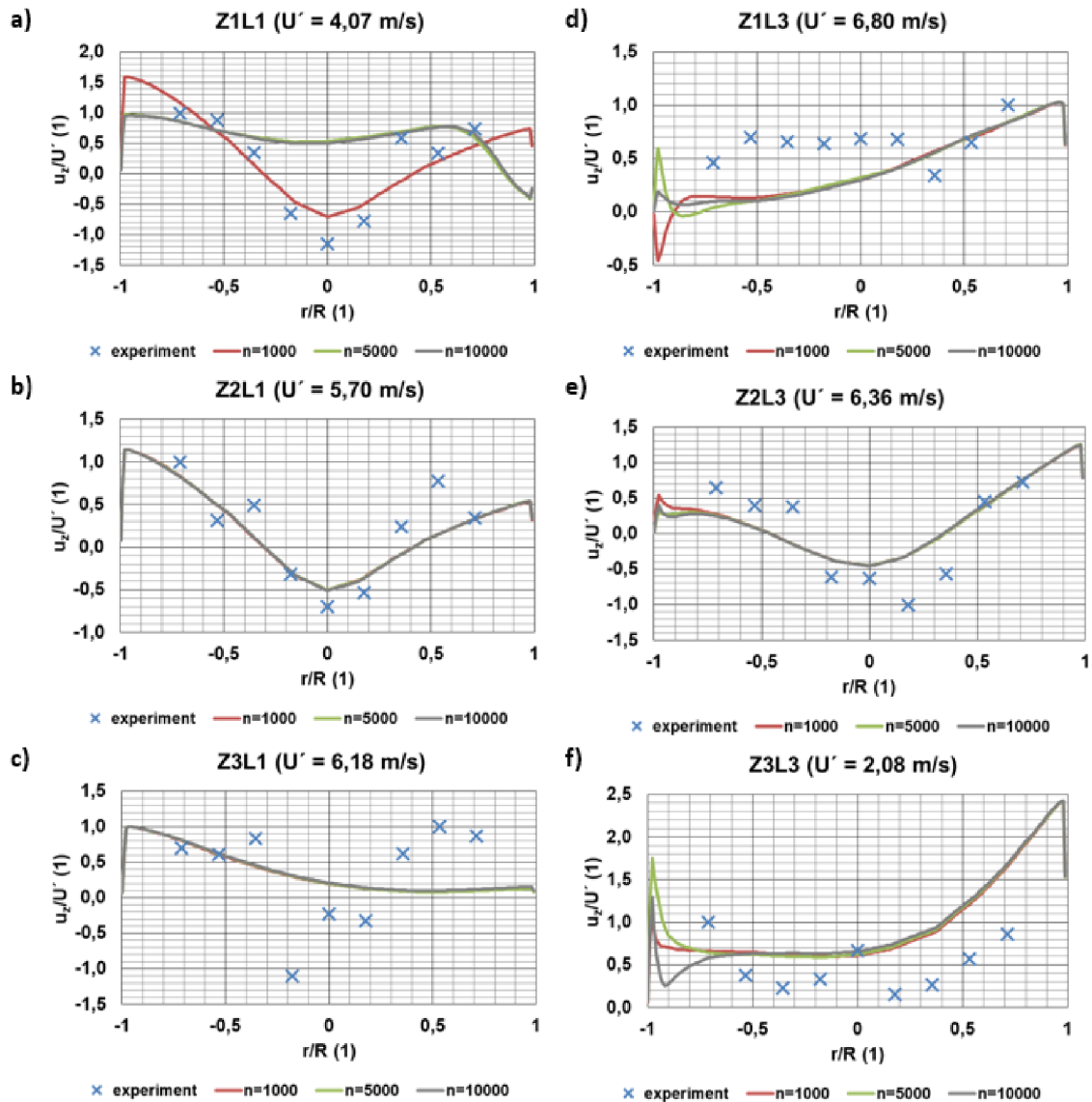


Obr. 6.13: Rozložení kapek v absorbéru – ilustrační obrázek.

Počet částic, který bude následně používán pro simulace, byl zvolen větší než 1000. Pro varianty s počtem částic {1000, 5000 a 10000} byly analyzovány rychlostní profily porovnané s experimentálními daty. Pro porovnání byla použita bezrozměrná rychlost definovaná jako poměr rychlosti v daném bodě k maximální rychlosti  $U'$ . V grafech na Obr. 6.14 je patrná shoda s experimentálními daty. V linii Z1L1 je patrný výrazný rozdíl při použití menšího počtu částic. To je pravděpodobně způsobeno jejich nižší hustotou v oblasti nad vstupem do absorbéru a tím nevýrazným ovlivněním primární fáze. V linii Z3L1 je dále patrná odchylka v oblasti  $r/R > 0,2$ . V této oblasti bylo v experimentu

umístěno přívodní potrubí pro trysku, které nebylo zahrnuto do modelu absorbéru pro CFD.

Celkově potvrzují výsledky uvedené v této kapitole použitelnost navrženého postupu řešení pro modelování vícefázového proudění v experimentálním absorbéru.



Obr. 6.14: Výpočet s různým nastavením počtu částic  $n$  – výkon 40%.

## 6.5 Modelování absorpce $\text{SO}_2$ z primární fáze

Na základě provedené rešerše bude provedena implementace rovnic pro přenos hmoty při procesu absorpce  $\text{SO}_2$  do zdrojového kódu CFD řešiče. Vybraný řešič umožňuje pro diskrétní fázi použít model povrchových reakcí (v souboru *shurryCloud1Properties* se jedná o nastavení podmodelu *surfaceReactionModel*). Modely dostupné v OpenFOAM jsou zaměřeny převážně na reakce na povrchu uhlíkových částic při spalování (oxidaci) uhlí, model řešící absorpci zde není přítomen. Kompletní zdrojové kódy jsou k dispozici v rámci instalace OpenFOAM nebo v online příručce [77]. Pro další řešení v rámci disertační práce je u těchto modelů důležité, že jsou v nich zahrnuty rovnice pro bilanci

přenosu hmoty ve formě zdrojových členů. Dále obsahují části kódu pro práci s koncentracemi složek v primární i diskrétní fázi. Při návrhu modelu absorpce SO<sub>2</sub> tedy bude zdrojový kód těchto modelů po částech použit a modifikován.

### 6.5.1 Matematický model přenosu SO<sub>2</sub> přes fázové rozhraní

Matematický popis pro přenos SO<sub>2</sub> mezi fázemi vychází z rovnice, použité dříve několika autory (viz kapitola 4) pro zdrojový člen SO<sub>2</sub>:

$$S_{m,SO_2} = M_{SO_2} \cdot \frac{A_{int}}{V_k} \cdot K_{SO_2} \cdot (p_{g,SO_2} - k_H c_{g,SO_2}). \quad (6.3)$$

kde pro poměr povrchu a objemu kulové částice platí

$$\frac{A_{int}}{V_k} = \frac{\pi d_k^2}{\frac{1}{6} \pi d_k^3} = \frac{6}{d_k}. \quad (6.4)$$

Celkový součinitel přestupu hmoty je vypočten na základě součinitelů v plynné a kapalně fázi

$$\frac{1}{K_{SO_2}} = \frac{1}{k_{g,SO_2}} + \frac{k_{H,SO_2}}{E_{SO_2} k_{l,SO_2}}. \quad (6.5)$$

Součinitel přestupu hmoty na straně plynu je vyjádřen z rovnice (4.18), s použitím koeficientu 0,6 na základě analýz v kapitole 4.4:

$$k_{g,SO_2} = \frac{D_{g,SO_2}}{d_k} \cdot (2 + 0,6 Re_k^{0,5} Sc^{0,33}) \quad (6.6)$$

Pro součinitel přestupu hmoty na straně kapaliny je použit vztah podle Marocca (4.17) pro podmínky daleko od trysek, kde platí:

$$k_{l,SO_2} = 10 \frac{D_{l,SO_2}}{d_k}. \quad (6.7)$$

Pro potřeby simulací budou difuzní koeficienty a další vlastnosti SO<sub>2</sub> použity v první fázi s konstantními hodnotami, následně bude model rozšířen o teplotní závislosti těchto vlastností. Pro určení difuzního koeficientu v kapalně fázi je použit vztah podle [82]:

$$D_{l,SO_2} = -1,21 \cdot 10^{-3} + 4,33 \cdot 10^{-6} T. \quad (6.8)$$

### 6.5.2 Obecná struktura kódu pro model absorpce SO<sub>2</sub>

V první fázi bude na základě existujících podmodelů pro přenos hmoty přes fázové rozhraní plyn-kapalina vytvořena nová knihovna pojmenovaná *sulfurAbsorption*. Uspořádání zdrojových kódů této knihovny vychází ze struktury zdrojového kódu knihoven *intermediate* a *coalCombustion*, která obsahují modely pro Lagrangeovské částice. Nová knihovna bude navržena a implementována tak, aby ji bylo možné pro budoucí použití pouze zkompileovat z uživatelské složky v Ubuntu nebo jiném linuxovém prostředí. Struktura složek a zdrojových souborů pro kompilaci knihovny *sulfurAbsorption* je uvedena na Obr. 6.15. Pro propojení nově vytvořené knihovny

*sulfurAbsorption* je přidána cesta ke zdrojovému kódu v nastavení pro kompilaci řešiče *simpleAbsorptionParcelFoam*. Kompletní zdrojový kód je uveden v Příloze 3.

Jádrem modelu absorpce  $\text{SO}_2$  jsou soubory *sulfurAbsorption.C* a *sulfurAbsorption.H*. Část kódu pro definici přenosu hmoty mezi fázemi je uvedena na Obr. 6.16. Pro první testy funkčnosti je zde hmotnostní tok definován zvolenou konstantní hodnotou. Po ověření funkčnosti tohoto kódu bude v dalších kapitolách popsána úprava a implementace rovnic pro výpočet toku hmoty uvedených v kapitole 6.5.1.



Obr. 6.15: Knihovna pro model absorpce  $\text{SO}_2$  – vlastní adresářová struktura.



```

template<class CloudType> Foam:: scalar Foam::sulfurAbsorption<CloudType>::calculate
(
    const scalar dt,
    const label celli,
    const scalar d,
    const scalar T,
    const scalar Tc,
    const scalar pc,
    const scalar rhoc,
    const scalar mass,
    const scalarField& YGas,
    const scalarField& YLiquid,
    const scalarField& YSolid,
    const scalarField& YMixture,
    const scalar N,
    scalarField& dMassGas,
    scalarField& dMassLiquid,
    scalarField& dMassSolid,
    scalarField& dMassSRCarrier
) const
{
    scalar dmSO2 = 1e-12; // zvolená hodnota pro testování
    dMassGas -= dmSO2; // zdrojový člen hmoty v kontinuální fázi
    // Heat of reaction [J]
    return 0; }

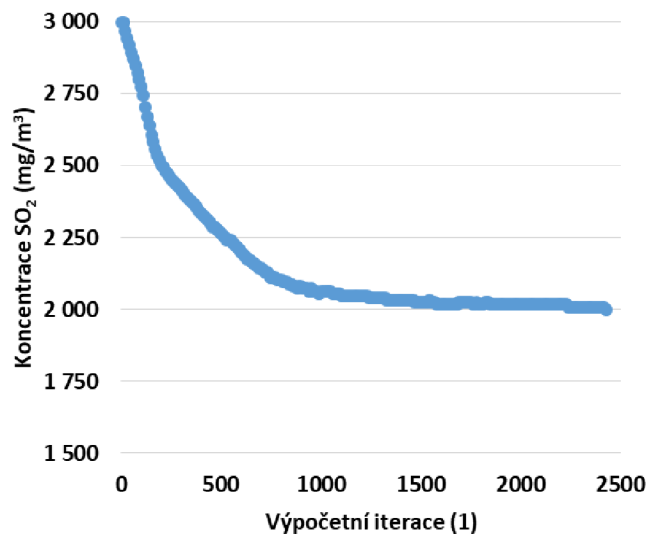
```

Obr. 6.16: Část vlastního zdrojového kódu modelu pro přenos  $\text{SO}_2$  s konstantní hodnotou toku hmoty.

### 6.5.3 Testovací úloha pro ověření funkčnosti kódu pro přenos hmoty

Cílem první testovací úlohy bylo ověřit, že s modifikacemi kódu popsanými v kapitole 6.5.2, je řešič schopen bilancovat záchyt  $\text{SO}_2$ , tj. snížení koncentrace  $\text{SO}_2$  v kontinuální fázi. Testovací úloha vychází ze simulace experimentálního absorbéru v režimu III (viz kapitola 6.4). Směs plynů (kontinuum) byla obohacena o  $\text{SO}_2$ , pro který byl vytvořen nový definiční soubor *SO2* ve složce *0* a přidány parametry pro výpočet termofyzikálních vlastností  $\text{SO}_2$  v souboru *constant/speciesThermo*.

Po kompilaci kódu byl realizován výpočet při vstupní koncentraci  $\rho_{\text{SO}_2} = 3000 \text{ mg/m}^3$ , která odpovídá nastavené hodnotě  $Y_{\text{SO}_2} = 3,75 \cdot 10^{-3}$ . Cílem výpočtu bylo ověřit snížení koncentrace  $\text{SO}_2$  na výstupu z absorbéru. Průběh výstupní koncentrace  $\text{SO}_2$  během výpočtu na Obr. 6.17 ukazuje výrazný pokles a následné ustálení hodnoty koncentrace  $\text{SO}_2$  na výstupu na hodnotě blízké 0. Vzhledem k tomu, že výpočet je orientační a vychází ze situace modelového zařízení, které není primárně určené pro záchyt  $\text{SO}_2$ , je účinnost záchytu  $\text{SO}_2$  nízká (cca 30%). Jedná se nicméně o limitní hodnotu pro danou konfiguraci absorbéru a trysky, neboť přenos hmoty nebyl žádným způsobem limitován. Graf dále ukazuje, že pro dosažení ustáleného stavu výpočtu je třeba řádově několik tisíc iterací.



Obr. 6.17: Výstupní koncentrace SO<sub>2</sub> v průběhu výpočtu.

#### 6.5.4 Implementace rovnic pro bilanci absorpce SO<sub>2</sub>

V rámci knihovny *sulfurAbsorption* je pro Lagrangeovské částice opět definován *slurryCloud*. Vstupní hodnoty proměnných, které budou zadány uživatelem a následně načteny ze souboru *slurryCloudProperties* a hodnoty, které budou získané v průběhu výpočtu z výpočtové domény, jsou uvedeny v Tab. 14. Hodnoty veličin, které vycházejí z proudového pole, budou načteny v rámci běhu výpočtu.

Tab. 14: Vstupní proměnné pro podmodel *sulfurAbsorption*.

Proměnná	Zdroj	Fáze
$d_k$	doména	Kapka
Re	doména	Kapka
Sc	doména	Kapka
$M_{SO_2}$	doména	Kontinuum
$c_{g,SO_2}, c_{l,SO_2}$	doména	Kontinuum, Kapka
$D_{l,SO_2}$	<i>slurryCloudProperties</i>	Kapka
$D_{g,SO_2}$	<i>slurryCloudProperties</i>	Kontinuum
$E_{SO_2}$	<i>slurryCloudProperties</i>	Kapka
$k_{h,SO_2}$	<i>slurryCloudProperties</i>	

Pro definici a načtení hodnot byly v souborech *sulfurAbsorption.C* a *sulfurAbsorption.H* přidány části kódu dle Obr. 6.18. Dále byly do kódu implementovány rovnice (6.3) až (6.7). Nejprve jsou vyhodnocena podobnostní čísla. Postupně jsou vyhodnoceny součinitele přestupu hmoty v plynné a kapalně fázi, a z nich dále určen celkový součinitel přestupu hmoty. Zdrojový člen hmoty je pak vypočten z upravené rovnice (6.3):

$$S_{m,SO_2} = M_{SO_2} \cdot \frac{6}{d_k} \cdot K_{SO_2} \cdot (c_{g,SO_2} - k_H \cdot c_{l,SO_2}). \quad (6.9)$$

Kompletní kód knihovny *sulfurAbsorption* zahrnující rovnice pro bilanci přenosu hmoty je uveden v Příloze 4. Značení ve zdrojovém kódu vychází částečně ze zvyklostí zavedených v OpenFOAM, některé veličiny jsou tedy v rámci zdrojových kódů přeznačeny.

Výsledný kód byl nejprve testován na jednoduchém případě a postupně upravován. Postupy a důležité výsledky simulací dílčích fází vývoje budou popsány v následujících kapitolách. Po odzkoušení byl řešič *simpleAbsorptionParcelFoam* se zahrnutím knihovny *sulfurAbsorption* následně nasazen na výpočty průmyslového zařízení.

#### **sulfurAbsorption.C**

```
SurfaceReactionModel<CloudType>(dict, owner, typeName),
Dg_(this->coeffDict().template lookup<scalar>("Dg")),
DI_(this->coeffDict().template lookup<scalar>("DI")),
kH_(this->coeffDict().template lookup<scalar>("kH")),
E_(this->coeffDict().template lookup<scalar>("E")),
```

#### **sulfurAbsorption.H**

```
// Private Data
// Model constants
// - Diffusivity coefficients [m^2/s]
const scalar Dg_;
const scalar DI_;
// - Dimless Henry coefficient [1]
const scalar kH_;
// - Enhancement factor [1]
const scalar E_;
```

Obr. 6.18: Vlastní kód pro načtení hodnot ze souboru *slurryCloudIProperties*.

### **6.5.5 Definice vstupních hodnot modelu**

V souboru s definicí částic *slurryCloudIProperties* byly doplněny parametry modelu *sulfurAbsorption*. Jako výchozí byly zvoleny konstantní hodnoty vstupních parametrů při teplotě 25°C převzaté z literatury, uvedené v Tab. 15. V rámci definičního souborů je možné při přípravě výpočtu tyto parametry snadno předefinovat pouhým přepsáním.

Tab. 15: Vstupní parametry testovací úlohy modelu *sulfurAbsorption*.

Proměnná	Hodnota	Zdroj
$D_{l,SO_2}$	$1,7 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	Perry a Green [66]
$D_{g,SO_2}$	$1,22 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	Recelj a Golob [67]
$E_{SO_2}$	6 (1)	Brogren a Karlsson [42]
$H_{SO_2}$	$82,5 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	Goldberg a Parker [83]
$k_{h,SO_2}$	0,0332 (1)	

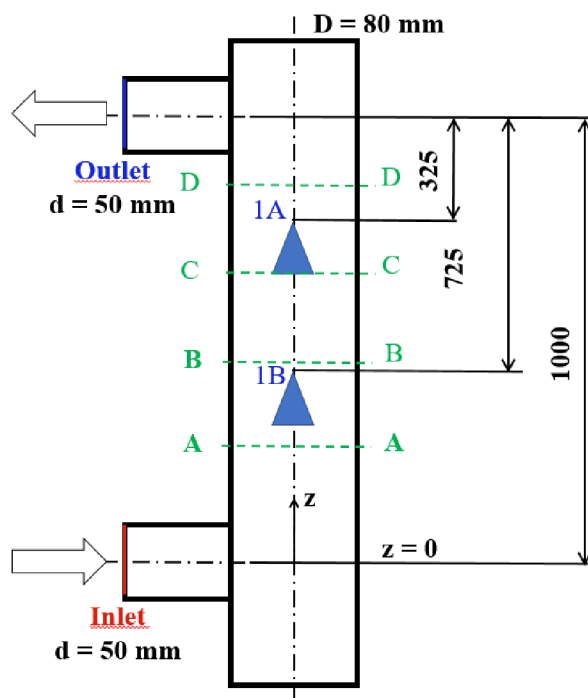
## **6.6 Validace kompletního CFD kódu na jednoduchém zařízení**

Pro validaci řešiče pro odsíření byla použita úloha, kterou popisuje Gao [44]. Cílem je provést simulaci s použitím vlastního CFD kódu při dodržení stejných vstupních parametrů a následně porovnat výsledné účinnosti odsířování.

### **6.6.1 Nastavení úlohy**

Předmětem simulace je válcový reaktor s rozměry podle Obr. 6.19. Gao ve své práci měřil a simuloval několik režimů s proměnnou rychlostí a koncentrací  $SO_2$  na vstupu při různých poměrech L/G. Parametry jednotlivých režimů jsou uvedeny v Tab. 16. Tučně vyznačené režimy (a, b, c) byly zvoleny pro otestování vlastního CFD kódu pro výpočty při změně vstupní koncentrace, rychlosti a poměru L/G. Teplota plynu i kapaliny byla

shodně 298 K. Dávkování suspenze je realizováno dvěma tryskami s úhlem rozstříku 70°. Pozice trysek 1A, 1B je ilustrována na Obr. 6.19. Distribuce kapek je popsána Rosin-Rammlerovým rozložením s parametry  $\bar{d} = 94,5 \mu\text{m}$  a  $n = 4,5$ . Průtok suspenze vyplývá z poměru L/G.

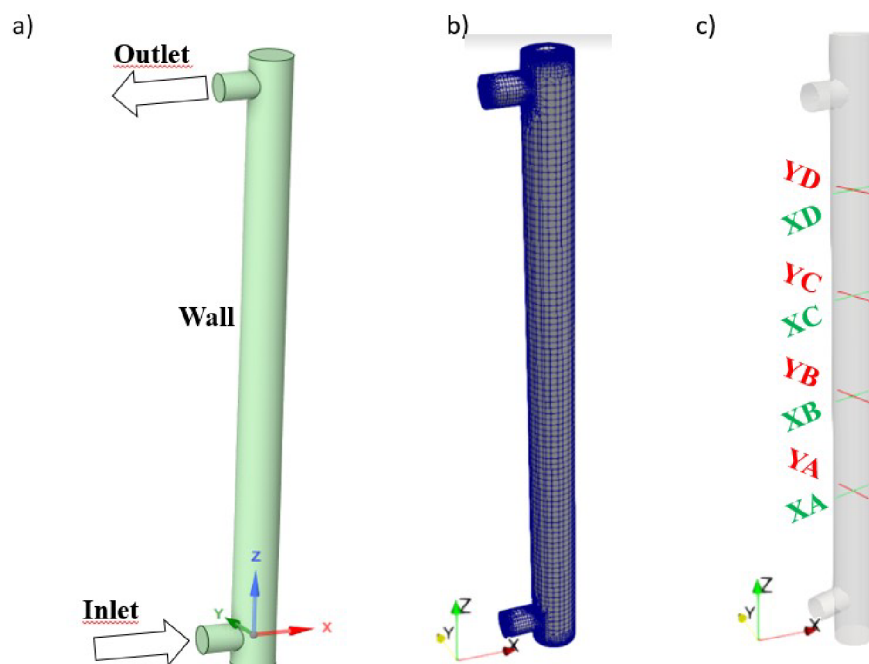


Obr. 6.19: Reaktor pro jednoduchou úlohu – náčrtek s rozměry dle Gaa [44].

Tab. 16: Nastavení úlohy pro simulace (zadáni převzato z [44]).

Režim	$c_{\text{SO}_2}$ ( $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ )	$u_{\text{in}}$ ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )	L/G ( $\text{dm}^3 \cdot \text{m}^{-3}$ )	$u_{\text{tr}}$ ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
a	$800 \cdot 10^{-6}$	3	15	5,73
b	$1200 \cdot 10^{-6}$	3	15	5,73
c	$1500 \cdot 10^{-6}$	3	15	5,73
d	$1200 \cdot 10^{-6}$	2,5	15	5,13
e	$1200 \cdot 10^{-6}$	3,5	13	6,27
f	$800 \cdot 10^{-6}$	3	13	5,73
g	$200 \cdot 10^{-6}$	3	13	5,73
h	$1500 \cdot 10^{-6}$	3	13	5,73
i	$1200 \cdot 10^{-6}$	3	11	5,73
j	$1500 \cdot 10^{-6}$	3,5	15	6,27

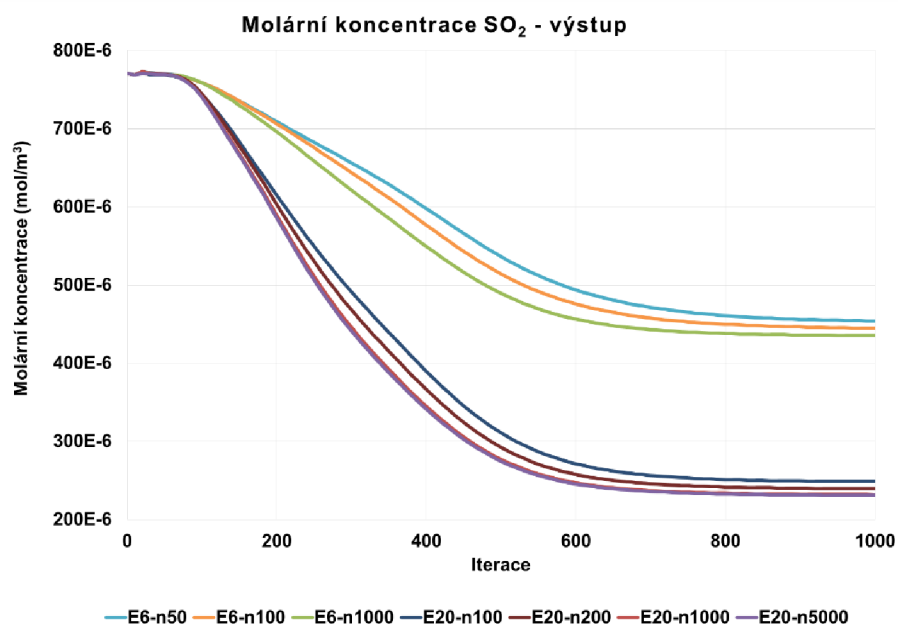
Na základě rozměrů uvedených v [44] byl vytvořen CAD model, který byl následně diskretizován pomocí nástrojů *snappyHexMesh*. Výsledná síť je ilustrována na Obr. 6.20.



Obr. 6.20: Validace na jednoduchém zařízení – a) model, b) výpočtová síť, c) linie pro vyhodnocení.

### 6.6.2 Výsledky simulací

Nejprve byly simulovány v režimu a (dle Tab. 16) různé varianty nastavení výpočtu pro ilustraci chování řešiče s různým nastavením počtu částic (při zachování průtoku) a hodnoty součinitele zvýšení  $E = \{4, 20\}$ . Průběh koncentrace  $\text{SO}_2$  ve výstupním průřezu je ilustrován na Obr. 6.21. Výsledky ukazují, že se zvýšením počtu částic dochází k poklesu výsledné (ustálené) koncentrace  $\text{SO}_2$  na výstupu. Při dosažení počtu vstříkovaných částí  $n = 1000$  nedochází při dalším zvyšování počtu k výrazné změně sledované hodnoty. Dále je při porovnání variant pro různé hodnoty součinitele zvýšení přenosu hmoty v důsledku chemické reakce zřejmé, že se zvýšením součinitele  $E$  se snižuje koncentrace  $\text{SO}_2$  na výstupu a tedy narůstá míra záchytu  $\text{SO}_2$ .



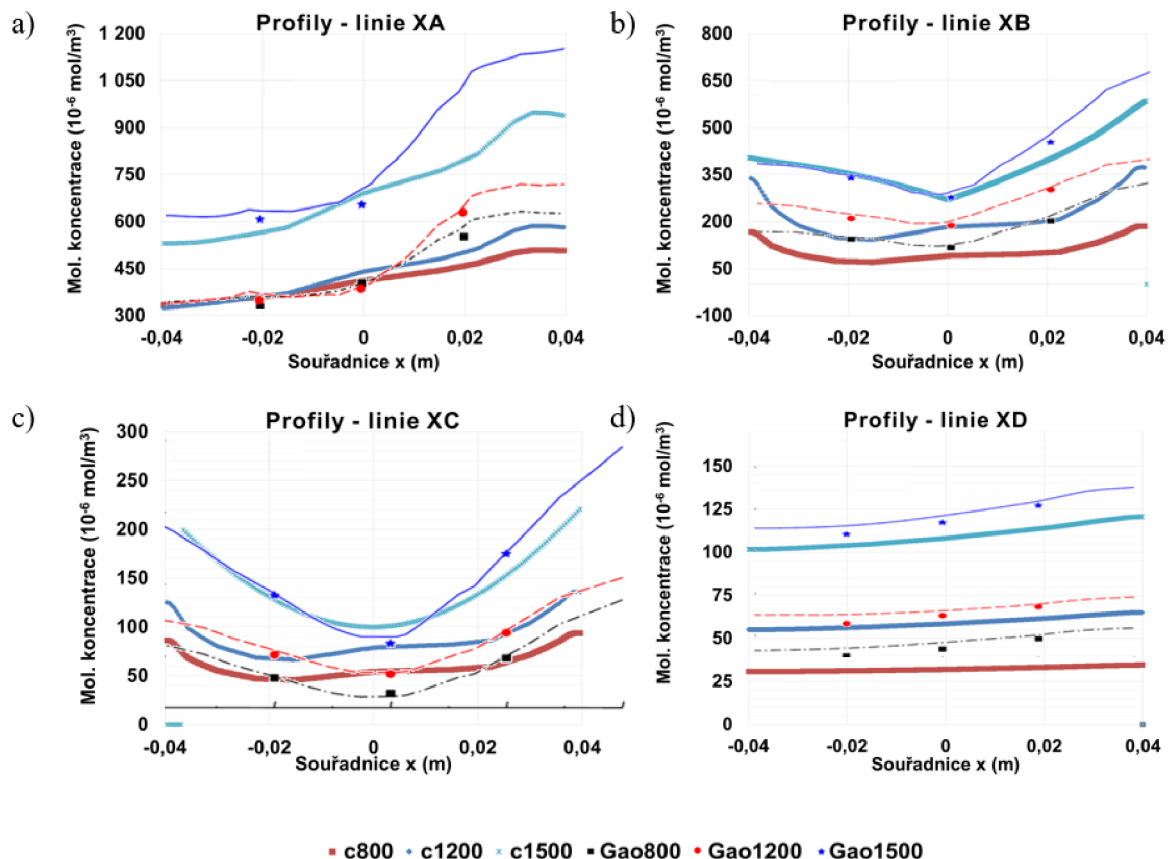
Obr. 6.21: Průběh výstupní koncentrace  $\text{SO}_2$  během výpočtu – různé vstupní parametry.

Pro vyhodnocení výsledků bylo definováno několik řezů reaktorem, které odpovídají liniím, na kterých prezentoval výsledky Gao [44] (viz Obr. 6.19). Linie jsou umístěny v několika úrovních A-A až D-D se souřadnicemi  $z = \{0,225; 0,425; 0,625; 0,825\}$  m. V každé úrovni jsou definovány vždy dvě linie, jedna ve směru x, druhá ve směru y, jak je ilustrováno na Obr. 6.20.

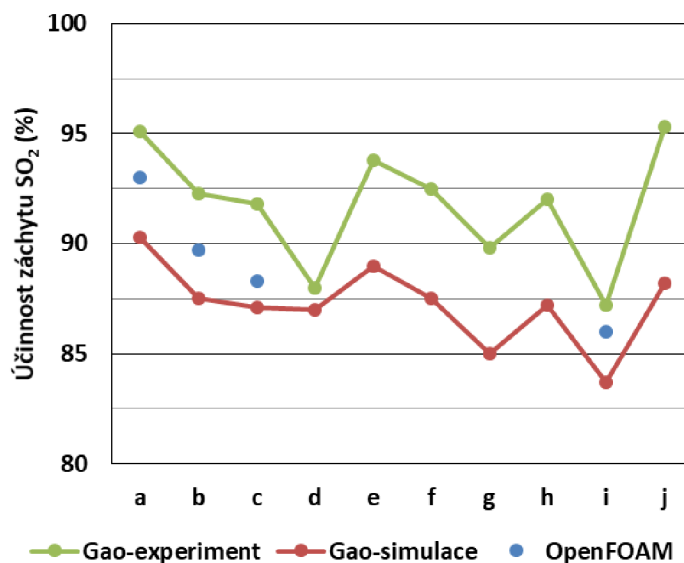
Výsledné profily ve směru x jsou uvedeny na Obr. 6.22. V rovině A-A jsou v části dále od vstupu do reaktoru (v oblasti  $x > 0$  m) dosahují hodnoty z vlastní simulace nižších hodnot koncentrací. V této oblasti tedy dochází k většímu záchytu  $\text{SO}_2$ , tj. výsledná účinnost záchytu je mírně vyšší. Obdobný trend je možné pozorovat i pro hodnoty koncentrací na Obr. 6.22d. Tyto odchylky zřejmě vedou k odlišné hodnotě celkové účinnosti záchytu (ilustrováno na Obr. 6.23). Linie XB a XC vykazují taktéž relativně dobrou shodu tvaru profilu i hodnot v jednotlivých bodech.

Pro případy ve směru y již Gao [44] prokázal symetrický tvar profilů, což odpovídá symetrickému uspořádání úlohy. Tyto výsledky nebyly s ohledem na shodu profilů ve směru x zahrnuty.

Celkově je na základě uvedených výsledků potvrzena správnost výpočetního postupu navrženého řešiče na jednoduchém laboratorním zařízení.



Obr. 6.22: Reaktor pro jednoduchou úlohu – porovnání výsledků simulací s prací Gao [44].



Obr. 6.23: Reaktor pro jednoduchou úlohu – porovnání účinnosti zachytu  $\text{SO}_2$  s prací Gaa [44].

## 6.7 Ověření funkčnosti kódu pro průmyslové zařízení

Vzhledem k potvrzení použitelnosti nově vyvinutého řešiče bylo v dalším kroku překročeno k ověření řešiče pro použití k simulaci velkého průmyslového zařízení, tj. porovnání výsledků simulací s daty z reálného provozu absorberu uhelné elektrárny.

### 6.7.1 Simulace absorberu bez vnitřních vestaveb

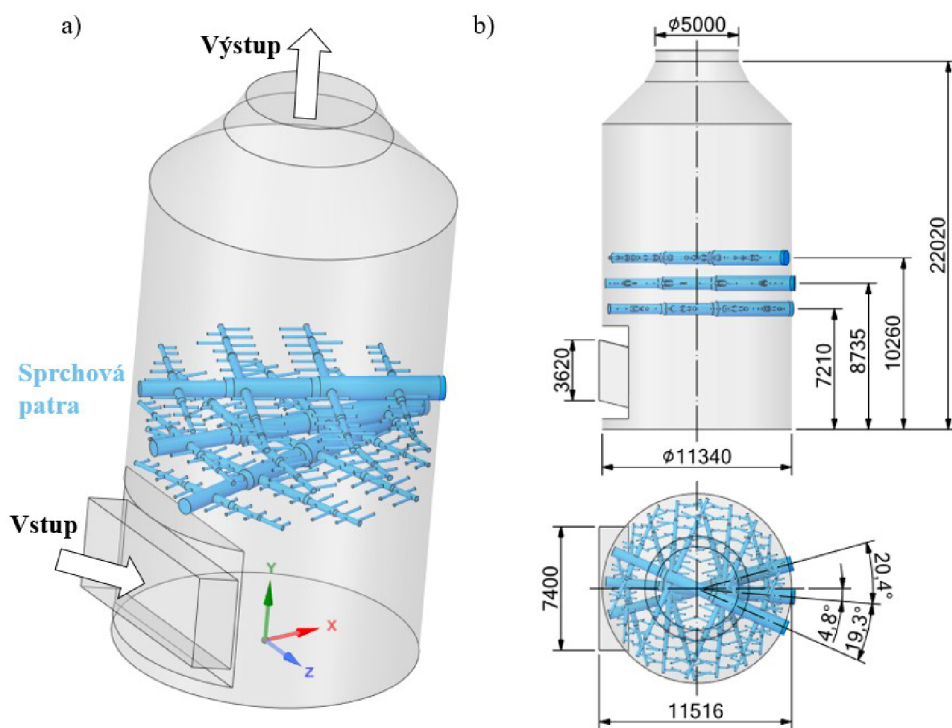
Pro ověření použitelnosti řešiče byl zvolen průmyslový absorber, pro který byla k dispozici výkresová dokumentace a sada provozních dat. Na základě výkresové dokumentace byl vytvořen zjednodušený model absorberu, který zahrnuje vnější stěny kanálů a potrubí pro přívod suspenze ke sprchovým tryskám. Samotné sprchové trysky nejsou z důvodu zjednodušení modelu modelovány. Trysky pro vstřik suspenze budou do výpočtu zahrnuty pouze formou nastavení parametrů vstřiku, jako v předchozích případech.

### 6.7.2 Geometrie absorberu a řešené varianty

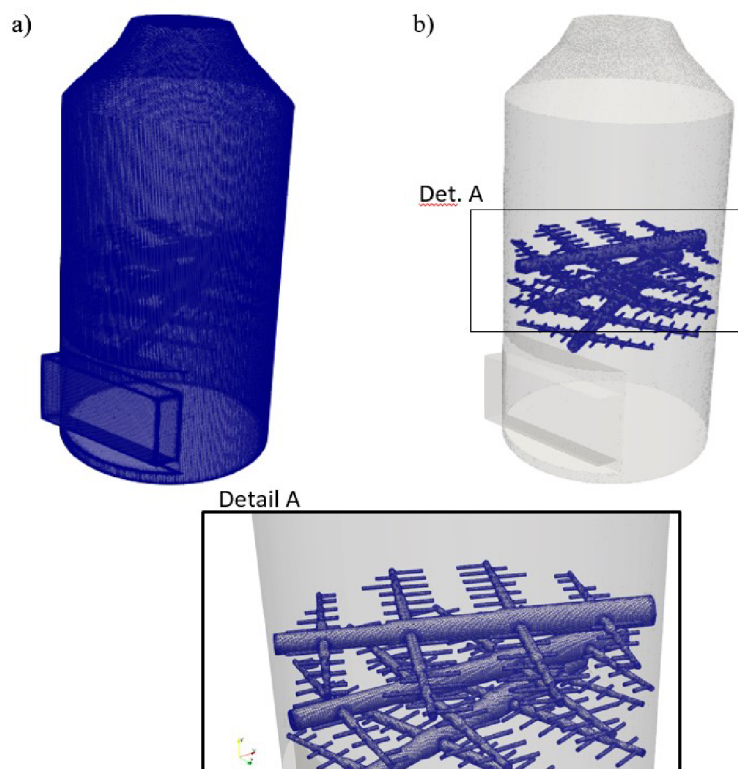
Na základě poskytnuté výkresové dokumentace byl vytvořen 3D CAD modelu absorberu, který zahrnuje hlavní části absorberu a přívodní potrubí k tryskám (viz Obr. 6.24). Trysky budou do výpočtu zahrnuty definicí příslušného vstřiku namísto přesné geometrie, objemy trysek nejsou tudíž součástí CAD modelu

Průměr hlavní části absorberu je 11,34 m, výška absorberu je 30,15 m. Vzhledem k tomu, že předmětem simulace není reakční nádrž, je model omezen ve spodní části úrovní hladiny suspenze. Výška řešené části je tedy pouze 22,02 m.

Sprchové trysky jsou umístěny ve 3 patrech, v každém patře se nachází 84 trysek s rozstříkem ve tvaru dutého kuželu. Rozměrové schéma trysky a základní parametry jsou uvedeny v Příloze 5. Výpočtová síť na Obr. 6.25 byla opět vytvořena pomocí nástroje *snappyHexMesh* se zjemněním v oblasti okolo trysek.



Obr. 6.24: Průmyslový absorbér – a) 3D CAD model, b) základní rozměry.



Obr. 6.25: Průmyslový absorbér – a) výpočtová síť, b) síť v oblasti sprchových pater.

Z poskytnutých provozních dat bylo pro porovnání se simulacemi zvoleno několik režimů proudění v absorbér, konkrétně různé koncentrace  $\text{SO}_2$  na vstupu při různém průtoku spalín. Parametry jsou uvedeny v Tab. 17. Hodnoty ve vstupním průřezu byly nastaveny



jako parametry vstupní okrajové podmínky. Pro každou z variant bylo provedeno několik simulací s různou hodnotou  $E_{SO_2}$  pro odladění výpočtu na základě provozních dat.

Tab. 17: Provozní data průmyslového absorberu – výběr dat pro porovnání se simulací.

Var	Průtok spalin (m <sup>3</sup> /h)	Teplota vstup (°C)	Teplota výstup (°C)	SO <sub>2</sub> vstup (mg/Nm <sup>3</sup> )	SO <sub>2</sub> výstup (mg/Nm <sup>3</sup> )	Záchyt SO <sub>2</sub> (%)
1	1037839	155,976	93,061	3557,25	281,25	92,09%
2	1037839	157,633	94,128	4324,34	425,04	90,17%
3	1037839	159,496	95,026	4863,72	643,46	86,77%
4	1053439	158,892	94,191	2826,69	189,98	93,28%
5	1053439	160,892	95,098	4076,93	327,74	91,96%
6	1053439	162,397	95,589	4863,25	429,45	91,17%

### 6.7.3 Nastavení simulace

Simulace reálného absorberu vychází z dříve řešených úloh. Pro určení turbulentních veličin jsou použity vztahy (6.1), (6.2), přičemž rychlost ve vstupním průřezu je přepočtena z průtoku a vstupního průřezu absorberu. Souhrn aplikovaných okrajových podmínek pro jednotlivé veličiny je uveden v Tab. 18. Hodnoty nastavených veličin (*fixedValue*) jsou určeny na základě provozních parametrů pro jednotlivé varianty uvedené v Tab. 17.

Tab. 18: Okrajové podmínky pro výpočet průmyslového absorberu.

	Inlet	Wall	Outlet
$U$	fixedValue	0	inletOutlet
$p$	zeroGradient	zeroGradient	10 <sup>5</sup>
$T$	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
$k, \varepsilon$	fixedValue	kqr/epsilon WallFunction	zeroGradient
SO <sub>2</sub>	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient

Vzhledem k tomu, že aktuální výpočtový model nezohledňuje chemické složení suspenze, je pro definici suspenze použita kapalina, jejíž hustota odpovídá hustotě suspenze ( $\rho_k = 1200 \text{ kg/m}^3$ ). Vzhledem k vysokému počtu trysek, které jsou definovány stejnými parametry vstřiku, jsou pozice jednotlivých trysek definovány v souboru se seznamem bodů *slurryCloudIPositions* (viz Příloha 6).

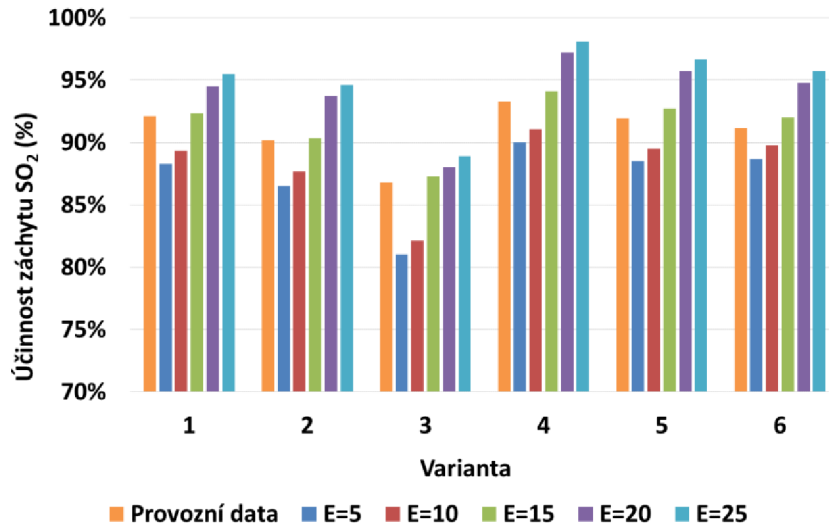
### 6.7.4 Výsledky simulací

Pro porovnání výsledků simulací byly hodnoceny střední hodnoty teploty a koncentrace SO<sub>2</sub> ve výstupním průřezu. Z koncentrací SO<sub>2</sub> na vstupu a výstupu byla vyhodnocena účinnost záchytu SO<sub>2</sub> podle vztahu

$$\eta_{SO_2} = 1 - \frac{\rho_{SO_2\text{-vstup}}}{\rho_{SO_2\text{-výstup}}} \quad (6.10)$$

Výsledné hodnoty byly porovnány s provozními daty. Porovnání účinnosti záchytu na Obr. 6.26 ukazuje, že pro různé nastavení součinitele zvýšení  $E_{SO_2}$  jsou výsledné

hodnoty účinnosti záchytu  $\text{SO}_2$  různé. Porovnáním s provozními daty je možné identifikovat vhodnou hodnotu parametru  $E_{\text{SO}_2}$  pro konkrétní konfiguraci absorberu a tu následně aplikovat na jiné provozní režimy. Pro řešený případ se jako vhodná jeví hodnota  $E_{\text{SO}_2} = 15$ , pro kterou vychází u všech řešených variant blížká shoda výsledné účinnosti s provozními daty.



Obr. 6.26: Průmyslový absorber – účinnost záchytu  $\text{SO}_2$ .

## 7 Zhodnocení a závěr

V této disertační práci byla řešena problematika procesu odsíření spalin mokrou vápencovou vypírkou se zaměřením na možnosti numerických simulací.

Hlavním cílem disertační práce bylo vytvořit a validovat nástroj vhodný pro simulaci zařízení technologického procesu odsíření spalin mokrou vápencovou vypírkou za kotlem v uhelných elektrárnách.

V rámci teoretické přípravy je v práci popsán základní přehled odsiřovacích technologií se zaměřením na technologii mokré vápencové vypírky. Historický vývoj výzkumných prací v této oblasti vede od základního výzkumu přenosových jevů v souvislosti s chemickými reakcemi k návrhu laboratorních a později i průmyslových zařízení. V podstatě se dá říci, že v druhé polovině 20. století byl k dispozici komplexní popis procesu odsíření s mokkými sorbenty. V následujícím období se výzkum zaměřoval na zvyšování účinnosti zachytu  $\text{SO}_2$  v průmyslových zařízeních, k čemuž výraznou měrou přispěly a stále přispívají numerické simulace.

Předmětem této práce byl vývoj numerického řešiče v prostředí OpenFOAM, který je aplikovatelný na simulace průmyslových zařízení. Při vývoji řešiče byly použity základní programové prvky OpenFOAMu, které byly vhodným způsobem modifikovány na řešení zachytu  $\text{SO}_2$  ze spalin. Návrh řešiče probíhal v několika krocích, přičemž každá etapa vývoje zahrnovala testovací simulace a porovnání jejich výsledků s experimentálními daty.

Experimentální data byla získána v rámci spolupráce při řešení výzkumného projektu TA04021338. V lokalitě Praha Malešice byl vybudován modelový experimentální absorbér. Pracovními látkami byly vzduch a voda. Absorbér byl modifikován pro potřeby aktuálních experimentů. Měření rychlostních polí v absorbéru probíhala při různé konfiguraci systému, tj. různém průtoku vzduchu a použití sprchových trysek. Naměřené hodnoty byly dále použity pro validaci numerického modelu.

V první etapě byl navržen a otestován model, simulující jednofázové proudění vzduchu. Validace modelu proběhla porovnáním s experimentálními daty získanými v režimu bez instalované sprchové trysky. V této etapě byl řešen výběr vhodného turbulentního modelu. Na základě dřívějších zkušeností jiných autorů byly pro výpočet používány dvourovňové modely a jako nejvhodnější byl potvrzen standardní model  $k-\varepsilon$ .

V další etapě byl numerický model rozšířen o model vstříku kapalné fáze. Byl proveden návrh výpočtu včetně definice parametrů vstříku tryskou. Výsledky simulací byly opět porovnány s experimentálními daty. V této části byl analyzován vliv nastavení počtu částic na výsledné rychlostní profily. Vzhledem k výrazně dynamickému chování kapek, které způsobily velký rozptyl měřených hodnot rychlostí, bylo obtížné porovnání výsledků stacionárních výpočtů s experimentem. Proto zde byly zjištěny větší odchylky dat z experimentu a ze simulací. Porovnáním variant s různým nastavením simulace však nedochází k lepšímu přiblížení k experimentálním datům.

Poslední etapa vývoje řešiče byla zaměřena na implementaci rovnic popisujících zachyt  $\text{SO}_2$  z kontinuální fáze do kapek. Implementace rovnic do zdrojového kódu byla provedena tak, aby výsledný kód co nejvíce odpovídal zvyklostem OpenFOAM. Tím bude usnadněna případná implementace do jiných řešičů, nebo naopak propojení dalších knihoven OpenFOAM s vlastním kódem. Řešič byl v této fázi aplikován na vybraný případ modelového zařízení jiného autora. Výsledky simulací byly porovnány s dříve publikovanými výsledky. Shoda těchto dat vedla k závěru, že vyvinutý řešič

je možné dále použít pro simulaci zachytu SO<sub>2</sub> v průmyslovém absorberu. Vzhledem k plánovanému využití pro analýzu velkých průmyslových zařízení byl řešič navržen pro stacionární výpočet. Tím se výsledky získané ze simulací omezují na řešení ustálených režimů proudění v absorberu.

Výsledky simulací průmyslového absorberu ukazují, že zvolením vhodné hodnoty parametru  $E_{SO_2}$  je možné simulaci odladit na základě omezeného souboru provozních dat a následně použít pro další analýzy stávajících zařízení. Tyto analýzy jsou pak využitelné pro optimalizaci a návrh dalších technických opatření.

Vzhledem k tomu, že postupně dochází k omezování provozu uhelných elektráren, se již předpokládá omezené použití vyvinutého řešiče v této oblasti. Metodika výpočtu však neomezuje použití pouze na spaliny z uhelných elektráren, ale autor předpokládá možné využití i u dalších spalovacích zařízení, např. kotelny na biomasu, ZEVO apod.

## 7.1 Podněty pro další práci

Vyvinutý řešič lze považovat za řešení vhodné pro návrh a úpravy stávajících zařízení. Vzhledem k tomu, že výpočet nezahrnuje všechny složky, které se podílí na chemických reakcích, není řešič v aktuální konfiguraci vhodný pro analýzu vlivu koncentrací jednotlivých složek, pH apod. Dále nejsou v současném modelu zahrnuty prvky vnitřních vestaveb, které způsobují dodatečnou tlakovou ztrátu.

### 7.1.1 Detailní modelování chemie v kapalně fázi.

Pro výpočet pH, rychlosti krystalizace a vzájemné ovlivnění iontů v kapalně fázi je nutné vyvinutý model doplnit o model chování složek v objemu kapky.

### 7.1.2 Rozšíření modelu o řešení prvků vnitřních vestaveb

Pro dosažení vysokých hodnot účinnosti se při návrhu odsiřovacích absorberů využívají i prvky vnitřních vestaveb, např. děrované plechy (TRAYS) zmíněné v kapitole 2.3. Pro řešení těchto prvků je neefektivní a z hlediska výpočetní náročnosti často i nemožné simulovat detailně proudění v okolí vnitřních vestaveb. Pro řešení těchto oblastí se v praxi často využívá tzv. porézních zón, tj. částí objemu, ve kterých je tlaková ztráta definována jako funkce rychlosti proudění. V OpenFOAMu jsou dostupné nástroje pro modelování těchto zón. V rámci dalších činností na vývoji řešiče mohou být tyto nástroje implementovány do kódu řešiče *simpleAbsorptionParcelFoam*.

### 7.1.3 Současný zachyt SO<sub>2</sub> a dalších znečišťujících látek.

Vzhledem k situaci v energetickém sektoru v celé EU bude pravděpodobně docházet k dalšímu uzavírání uhelných elektráren. Potřeba dalších investic do modernizace odsiřovacích zařízení bude tedy pravděpodobně klesat, což vede i k omezenému použití numerického řešiče vyvinutého v rámci této práce. Pro další využití na jiné spalovací zdroje by mohlo být perspektivní zahrnutí dalších prvků, které jsou prokazatelně absorbovány spolu s SO<sub>2</sub>. V posledních letech se výzkumy zaměřují např. na zachycování rtuti.

## Použité zdroje

1. Ministerstvo průmyslu a obchodu ČR. Vývoj hrubé výroby elektřiny podle paliv a technologií. [Online] 2017. [cit.2018-04-13]. Dostupné z: <https://www.mpo.cz/assets/cz/energetika/statistika/elektrina-a-teplo/2017/10/Hruba-vyroba-elektriny-2010-2016.pdf>.
2. Kauzální monitoring vlivu imisí na zemědělskou výrobu (Souhrnná zpráva za období 2004-2010). [Online] 2010. [cit.2018-04-13]. Dostupné z: <https://sites.google.com/a/eto.vurv.cz/monitoring-imisi/monitoring-imisi/vyzkumna-zprava/2-atmosfericka-depozice-a-vliv-imisi-na-zemedelskou-vyrobu/2-6-hlavni-zdroje-emisi-v-cr-a-jejich-podil>.
3. Český hydrometeorologický ústav. Znečištění ovzduší na území České republiky v roce 2019. [Online] [cit.2020-10-11]. Dostupné z: [https://portal.chmi.cz/files/portal/docs/uoco/isko/grafroc/19groc/gr19cz/Obsah\\_CZ.html](https://portal.chmi.cz/files/portal/docs/uoco/isko/grafroc/19groc/gr19cz/Obsah_CZ.html)
4. Ministerstvo životního prostředí ČR. Zákon o ochraně ovzduší. 2012. 201/2012 Sb..
5. ČEZ a.s. Odsiřování spalin v elektrárnách skupiny ČEZ. [Online] 2006. [cit.2015-04-14]. Dostupné z: <https://www.cez.cz/edee/content/file/investori/odsirovani.pdf> .
6. Ministerstvo životního prostředí ČR. Národní program snižování emisí České republiky. [Online] [cit.2015-04-15]. Dostupné z: [https://www.mzp.cz/C1257458002F0DC7/cz/narodni\\_program\\_snizovani\\_emisi/\\$FILE/OOO-NPSE\\_final-20151217.pdf](https://www.mzp.cz/C1257458002F0DC7/cz/narodni_program_snizovani_emisi/$FILE/OOO-NPSE_final-20151217.pdf).
7. Pyshyev, S. a kol. State of the art in the field of emission reduction of sulphur dioxide produced during coal combustion. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*. 2017, 24, Sv. 47, str. 2387-2414.
8. Budín, J. Odsiřování aneb technologické postupy snížení emisí v praxi. [Online] [cit.2015-04-06]. Dostupné z: <http://oenergetice.cz/elektrina/odsireni-aneb-technologicke-postupy-snizeni-emisi-v-praxi>.
9. Wang, L. K, Perreira, N. C. a Hung, Y. T. Air pollution control engineering. Handbook of environmental engineering, Vol. 1. Humana Press Inc., New Jersey, 2004. eISBN 1-59259-778-5..
10. A History Of Flue Gas Desulfurization Systems Since 1850. *Journal of the Air Pollution Control Association*. 27. 10. 1977, str. 948-961.
11. Hanks, W. V. a McAdams, W. H. Studies in absorption. I - Very soluble gases. *Ind. Eng. Chem*. 1919, Sv. 21:1034.
12. Whitman, W. G. Preliminary experimental confirmation of the two film theory of gas absorption. *Chem. Met. Eng*. 1923, Sv. 29, 4.
13. Hatta, S. Absorption velocity of gases by liquids. *Tech. Rept. Tohoku Imp. Univ*. 1932, Sv. 10, 119.
14. Hatta, S., Ueda, T. a Baba, A. C. Theoretical study of the absorption of a very soluble gas. *J. Soc. Chem. Ind. Japan*. 1933, Sv. 37, 165.
15. Hixon, A. W. a Scott, C. E. Absorption of gases in spray towers. *Ind. Eng. Chem*. 1935, Sv. 27, 307.

16. Chilton, T. H., Duffey, H. R. a Vernon, H. C. The absorption of gases in packed towers. *Ind. Eng. Chem.* 1937, Sv. 29, 298.
17. Walker, W. H., Lewis, W. K. a McAdams, W. H. *Principles of Chemical Engineering*. New York : McGraw-Hill, 1927.
18. Sherwood, T. K. a Pigford, R. L. *Absorption and Extraction*. New York : McGraw-Hill, 1937 (1952).
19. Lessing, R. The Economic Value of Coal Cleaning in Relation to the Problem of Dust and Sulphur Emission From Chimneys. *Second World Power Conference (1930)*, Vol. 4. str. 175-195. Berlin, 1930.
20. Srivastava, R. K. a Jozewicz, W. Flue Gas Desulfurization: The State of the Art. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 2001, Sv. 51, str. 1676-1688. ISSN 1096-2247.
21. Kohl, A. a Nielsen, R. *Gas purification*. 5th Ed. Gulf Publishing Company, Houston, Texas, 1997. ISBN 0-88415-220-0.
22. Vejvoda, J., Machač, P. a Buryan, P. *Technologie ochrany ovzduší a čištění odpadních plynů*. VŠCHT, Praha, 2003. ISBN 80-7080-517-X.
23. Richter, M. *Technologie ochrany ovzduší*. Fakulta životního prostředí Univerzity J.E.Purkyně v Ústí n. L., Ústí nad Labem, 2014.
24. Parsons, T. R., Chenevey, J. P. a Mitchell, J. M. *Adding a Tray to a Wet FGD Absorption Tower: A Simple but High-Impact Upgrade for an Existing Absorber*. Power-Gen Asia. Seoul, South Korea, 2016.
25. Babcock & Wilcox. *Wet flue gas desulfurization (FGD) systems: Advanced multi-pollutant control technology*. Ohio, USA, 2014.
26. Hikita, H., Asai, S. a Tsuji, T. Absorption of Sulfur Dioxide into Aqueous Sodium Hydroxide and Sodium Sulfite Solutions. *AIChE Journal*. 1977, 4, Sv. 23, str. 538-544.
27. Cengel, Y. A., Boles, M. A. a Kanoglu, M. *Thermodynamics: An engineering approach*. 5th. Ed. McGraw-Hill, 2006. ISBN 978-0-070-60659-3.
28. Středa, I. *Základy rovnovážné termodynamiky*. Technická univerzita v Liberci, Liberec, 2009. ISBN 978-80-7372-459-7.
29. Hála, E. *Úvod do chemické termodynamiky*. Academia, Praha, 1975.
30. Sander, R. *Compilation of Henry's law constants (version 4.0) for water as solvent*. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2015, 15, str. 4399-4981.
31. Vacek, V. a Hlavačka, V. *Přenos tepla a hmoty*. Ediční středisko ČVUT, Praha, 1990.
32. Lienhard IV, J. H. a Lienhard V, J. H. *A Heat Transfer Textbook*. 5. ed. Phlogiston Press, Cambridge, Massachusetts, 2020.
33. Incropera, F. P. a kol. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley & Sons, Hoboken, 2002. ISBN 978-0-471-45728-2.
34. Morsi, B. I. a Basha, O. M. *Mass Transfer in Multiphase Systems*. *Mass Transfer: Advancement in Process Modelling*, 2015, 9. Lodz University of Technology, Lodz, 2015.
35. Lewis, W. K. a Whitman, W. G. *Principles of Gas Absorption*. *Industrial & Engineering Chemistry*, 1924, Sv. 16, str. 1215-1220.

36. Higbie, R. The rate of absorption of a pure gas into still liquid during short periods of exposure. *Transaction of the American Institute of Chemical Engineers*, 1935, Sv. 31, str. 365-389.
37. Danckwerts, P. V. Gas absorption accompanied by chemical reaction. *AIChE Journal*, 1955, Sv. 1, str. 456-463.
38. van Krevelen, D. W. a Hoftijzer, P. J. Kinetics of gas-liquid reactions part I. General theory. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas*, 1948, Sv. 67, str. 563-586.
39. Kiil, S., Michelsen, M. L. a Dam-Johansen, K. Experimental Investigation and Modeling of a Wet Flue Gas Desulfurization Pilot Plant. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 1998, 7, Sv. 37, str. 2792-2806.
40. Gómez, A., Fueyo, N. a Tomás, A.. Detailed modelling of a flue-gas desulfurisation plant. *Computers & Chemical Engineering*, 2007, 11, Sv. 31, str. 1419-1431.
41. Olausson, S., Wallin, M. a DJerle, I. A model for the absorption of sulphur dioxide into a limestone slurry. *The Chemical Engineering Journal*, 1993, Sv. 51, str. 99-108.
42. Brogren, Ch. a Karlsson, H. T. A Model for Prediction of Limestone Dissolution in Wet Flue Gas. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1997, Sv. 36, str. 3889-3897.
43. Eden, D. a Luckas, M. A Heat and Mass Transfer Model for the Simulation of the Wet Limestone Flue Gas Scrubbing Process. *Chem. Eng. Technol*, 1998, 1, Sv. 21, str. 56-60.
44. Gao, X. a kol. CFD simulation with enhancement factor of sulfur dioxide absorption in the spray scrubber. *Journal of Zhejiang University SCIENCE A*, 2008, 11, Sv. 9, str. 1601-1613. ISSN 1673-565X.
45. Zhong, Y. a kol. A model for performance optimization of wet flue gas desulfurization systems of power plants. *Fuel processing technology*, 2008, Sv. 89, str. 1025-1032.
46. Romain, L. a kol. An algorithm for predicting the hydrodynamic and mass transfer parameters in bubble column reactors. *Fuel Processing Technology*, 2008, Sv. 89, str. 322-343.
47. Vandu, C. O., Berg, B. V. a Krishna, R. Gas-liquid mass transfer in a slurry bubble column at high slurry concentrations and high gas velocities. *Chemical Engineering&Technology*, 9/2005, Sv. 28, str. 998-1002.
48. Marocco, L. a Inzoli, F. Multiphase Euler–Lagrange CFD simulation applied to Wet Flue Gas Desulphurization technology. *International Journal of Multiphase Flow*, 2009, Sv. 35, str. 185-194.
49. Marocco, L. Modeling of the fluid dynamics and SO<sub>2</sub> absorption in a gas–liquid reactor. *Chemical Engineering Journal*, Sv. 162, str. 217-226. Elsevier B.V., 2010.
50. Maurer, G. On the solubility of volatile weak electrolytes in aqueous solutions. *ACS Symp. Ser.*, Sv. 133, str. 139-172. 1980.
51. Liu, D. a Yu, H. A Study of Experimental and Improved Absorption Model for the Spray. *Advanced Materials Research*, Sv. 550, str. 574-579. Trans Tech Publications, 2012.
52. Arif, A., a kol. Modeling wet flue gas desulfurization. *Conference of the National Association for Clean Air (NACA 2015)*.

53. Everson, R. C. a kol. CFD Simulation of an Industrial Wet Flue Gas Desulfurization Spray Tower: A Comprehensive Model with Special Attention Devoted to the Modeling of Absorption and Chemical Reactions. THIRTY - THIRD ANNUAL INTERNATIONAL PITTSBURGH COAL CONFERENCE, Cape Town, South Africe, 2016.
54. Everson, R. C., Arif, A. a Neomagus, H. W. CFD Modelling and Simulations of an Industrial Wet Flue Gas Desulphurization Unit. 6th International Freiberg Conference on IGCC & Xtl Technologies, Coal Conversion and Syngas. Dresden, Germany, 2014.
55. Mchabe, D. a kol. Development of an integrated model for absorption of sulphur dioxide in limestone slurry. Chemical Engineering Science, Sv. 229. Elsevier Ltd., 2021. ISSN 0009-2509.
56. Strock, T. W. a Gohara, W. F. EXPERIMENTAL APPROACH AND TECHNIQUES FOR THE EVALUATION OF WET FLUE GAS DESULFURIZATION SCRUBBER FLUID MECHANICS. Chemical Engineering Science, Sv. 49, 24A, 1995, str. 4667-4679.
57. Rogers, K. J., Myers, R. B. a Gohara, W. F. Spray header integrated tray. US005527496A USA, 18. 06 1996.
58. Silaen, A. a kol. NUMERICAL MODEL OF FGD UNIT IN POWER PLANT. Proceedings of the ASME 2014 International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Montreal, Quebec, 2014.
59. Huang, Y. S., Tseng, Ch. Ch. a Chen, Ch. Ch. Numerical Simulation of the Flue Gas Desulfurization in the Sieve Tray Tower. China Steel Technical Report, 2015, 28, str. 52-57.
60. Tseng, Ch. Ch. a Li, Ch. J. Numerical investigation of the inertial loss coefficient and the porous media model for the flow through the perforated sieve tray. Chemical Engineering Research and Design, 106, str. 126-140. Elsevier B.V., 2016.
61. Tseng, Ch. Ch. a Li, Ch. J. Eulerian-Eulerian numerical simulation for a flue gas desulfurization tower with perforated sieve trays. International Journal of Heat and Mass Transfer, 116, str. 329-345 Elsevier, 2018.
62. Neveux, T. a Le Moullec, Y. Wet Industrial Flue Gas Desulfurization Unit: Model Development and Validation on Industrial Data. Industrial & Engineering Chemistry Research, 50, str. 7579-7592. ACS Publications, 2011.
63. Huang, Y. a kol. Numerical simulation of the simultaneous removal of particulate matter in a wet flue gas desulfurization system. Environmental Science and Pollution Research, 27, str. 1598-1607. Springer-Verlag GmbH Germany, 2020.
64. Niksa, S. a Fujiwara, N. The Impact of Wet Flue Gas Desulfurization Scrubbing on Mercury Emissions from CoalFired Power Stations. Journal of the Air & Waste Management Association, 2005, 55, str. 970-977. ISSN 1047-3289.
65. Xing, Y. a kol. Purification of Hg<sup>0</sup> from flue gas by wet oxidation method. Environ. Sci. Pollut. Res., 24, str. 26310-26323. Springer, 2017.
66. Perry, R. H. a Green, D. W. Perry's chemical engineers' handbook. McGraw-Hill, 1997. ISBN 0-07-049841-5.



67. Recelj, T a Golob, J. Equilibrium and mass transfer in the  $\text{Ca}^{2+}$ - $\text{SO}_2$ - $\text{H}_2\text{O}$  system for the analysis of the flue gas desulphurization process. Institution of Chemical Engineers, Process Safety and Environmental Protection, 2004, 82, str. 371-380.
68. Testo, s.r.o. Testo 480 • Přístroj pro měření klimatických veličin. [Online] [cit. 2014-11-23]. Dostupné z: <https://static-int.testo.com/media/c2/96/802bf4156398/Navod-testo-480.pdf>.
69. Šafařík, P. a Vestfálová, M. Termodynamika vlhkého vzduchu. ČVUT v Praze, 2016. ISBN 978-80-01-06020-09.
70. Lechler GmbH. General Industry Lechler. [Online] [www.lechler.com](http://www.lechler.com).
71. Crowe, C. T., a kol. Multiphase flows with droplets and particles. CRC Press Taylor & Francis, New York, 2012. ISBN 978-1-4398-4051-1.
72. Novosád, J., Dančová, P. a Vít, T. Velocity fields in FGD reactor by different flow regimes. WSEAS Transactions on Fluid Mechanics, 11, 2016, str. 143-150. E-ISSN: 2224-347X.
73. Novosád, J., Dančová, P. a Vít, T. Příprava algoritmu pro regulaci procesu odsíření. Katedra energetických zařízení, Technická univerzita v Liberci, Liberec, 2018. ID: 6166/2220.
74. Novosád, J., Dančová, P. a Vít, T. Numerical simulation of flow in the wet scrubber for desulfurization. EFM14 – Experimental Fluid Mechanics 2014. EPJ Web of Conferences, 92, 2015.
75. OpenCFD Ltd. OpenFOAM: User Guide. [Online] [cit. 2021-02-20]. Dostupné z: <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide>.
76. OpenCFD Ltd. OpenFOAM: Tutorial Guide. [Online] [cit. 2021-02-20]. Dostupné z: <https://www.openfoam.com/documentation/tutorial-guide>.
77. OpenCFD Ltd. OpenFOAM: User Guide v2012. [Online]. [cit. 2021-02-20]. Dostupné z: <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/>.
78. Příhoda, J. a Louda, P. Matematické modelování turbulentního proudění. Vydavatelství ČVUT, Praha 2007. ISBN 978-80-01-03623-5.
79. Novosád, J., Dančová, P. a Vít, T. Experimental and numerical study of velocity profiles in FGD reactor. WSEAS TRANSACTIONS on APPLIED and THEORETICAL MECHANICS. 2016, 11.
80. Novosád, J., Dančová, P. a Vít, T. Modelling the Turbulent Flow Inside a FGD Tower Model Using OpenFOAM. 2018 International Conference on Applied Mathematics & Computational Science (ICAMCS.NET). Budapest (Hungary), 2018. ISBN 978-1-5386-9468-8.
81. Petříková, M. a Kryštůfek, P. Tabulky a diagramy pro termodynamiku. Technická univerzita v Liberci, Liberec 2013. ISBN 978-80-7372-945-5.
82. Koliadima, A, Kapolos, J a Farmakis, L. Diffusion coefficients of  $\text{SO}_2$  in water and partition coefficients of  $\text{SO}_2$  in water-air interface at different temperature and pH values. Instrumentation Science and Technology, 2009, Sv. 37, str. 274-283. ISSN: 1073-9149.
83. Goldberg, R. N. a Parker, V. B. Thermodynamics of solution of  $\text{SO}_2(\text{g})$  in water and of aqueous sulfur dioxide solutions. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1985, Sv. 90, 5, str. 341-358.

## Seznam obrázků

Obr. 1.1: Vývoj celkových emisí SO <sub>2</sub> , 2009–2018 [3].	11
Obr. 1.2: Vývoj celkových emisí hlavních znečišťujících látek, 1990–2018 [3].	12
Obr. 2.1: Absorbér – funkční schéma.	15
Obr. 2.2: Rozdělení odsířovacích procesů (převzato z [20]).	17
Obr. 2.3: Schéma odsíření: a) mokrá vypírka (LSFO), b) suché metody (LSD) (převzato z [20]).	18
Obr. 2.4: Rozšíření odsířovacích technologií podle instalovaného výkonu uhelných elektráren: a) údaje k roku 1998 z [20], b) údaje pro ČR k roku 2006 z [5].	19
Obr. 2.5: Technologické schéma mokré vápencové vypírky – převzato z [26].	20
Obr. 2.6: Absorbér s instalací děrovaných plechů (sít) [24].	20
Obr. 3.1: Kritéria rovnováhy [27]: a) adiabatické ch. reakce, b) ch. rovnováhy při daném p, T.	21
Obr. 3.2: Filmová teorie – schématické znázornění filmů v blízkosti rozhraní (převzato z [34]).	30
Obr. 3.3: Penetrační teorie – schématické znázornění (převzato z [34]).	30
Obr. 3.4: Teorie obnovy povrchu – schématické znázornění (převzato z [34]).	31
Obr. 3.5: Přenos hmoty s chemickou reakcí – ilustrace profilů koncentrace (převzato z [34]).	32
Obr. 3.6: Součinitel zvýšení přenosu hmoty pro chemickou rovnici 1. řádu (převzato z [34]).	32
Obr. 3.7: Koncentrační profily při absorpci SO <sub>2</sub> v roztoku NaOH – schéma (převzato z [25]).	33
Obr. 3.8: Koncentrační profily při absorpci SO <sub>2</sub> v roztoku Na <sub>2</sub> SO <sub>3</sub> – schéma (převzato z [25]).	34
Obr. 4.1: Účinnost odsíření v závislosti na poměru L/G a výšce absorpční zóny (převzato z [43]).	38
Obr. 4.2: Schéma chemických a přenosových jevů při mokré vápencové vypírce (převzato z [39]).	38
Obr. 4.3: Účinnost odsíření – porovnání hodnot ze simulace a experimentu (převzato z [51]).	42
Obr. 4.4: Účinnost odsíření – vliv provozních parametrů (převzato z [51]).	43
Obr. 4.5: Odsířovací absorbér s vnitřní vestavbou (převzato z [56] a [57]).	44
Obr. 4.6: Výsledky simulací (proudnice): a) bez perf. plechů, b) s perf. plechy (převzato z [59]).	45
Obr. 4.7: Jednotková buňka perforovaného plechu: a) náčrt, b) výpočetní síť s OP (převzato z [60]).	46
Obr. 4.8: Rychlostní profily: a) bez perforovaných plechů, b) s perforovanými plechy (převzato z [60]).	47
Obr. 4.9: Vliv vstupních parametrů na účinnost odsíření při změně 0,5x a 2x (převzato z [62]).	48
Obr. 4.10: Hodnoty Sherwoodova čísla podle různých autorů: vzduch-voda, d = 1 mm, Sc = 1,2.	50
Obr. 5.1: Měření rychlosti proudění – schéma.	52
Obr. 5.2: Způsoby kuželového rozstříku: a) plný kužel, b) dutý kužel (převzato z [70]).	55
Obr. 5.3: Experimentální absorbér – schéma [72].	56
Obr. 5.4: Experimentální absorbér [72].	57
Obr. 5.5: Experimentální absorbér: a) Roviny Z1, Z2, Z3, b) body v {Z1, Z2, Z3}, c) body – vstup.	57
Obr. 5.6: Rychlostní profily – režim I: a, b, c) 40 % výkon ventilátoru, d, e, f) 70 % výkon ventilátoru.	59
Obr. 5.7: Rychlostní profily – režim II: a, b, c) 40 % výkon ventilátoru, d, e, f) 70 % výkon ventilátoru.	60
Obr. 5.8: Rychlostní profily – režim III: a, b, c) 40% výkon ventilátoru, d, e, f) 70% výkon ventilátoru.	61
Obr. 5.9: Časový průběh hodnot provozních parametrů [73].	63
Obr. 6.1: Řešič <i>simpleAbsorptionParcelFoam</i> – struktura souborů se zdrojovými kódy.	66
Obr. 6.2: Úloha <i>verticalChannel</i> – adresářová struktura.	66
Obr. 6.3: Experimentální absorbér – a) model s vyznačením okrajových ploch, b) výpočetní síť (hrubá).	67
Obr. 6.4: Hlavní část souboru <i>blockMeshDict</i> – vlastní kód.	68
Obr. 6.5: Postup tvorby sítě pomocí <i>snappyHexMesh</i> : a) krok 1, b) krok 2.	69
Obr. 6.6: Rychlostní profily v experimentálním absorbéru - vliv velikosti sítě, výkon 40%.	70
Obr. 6.7: Rychlostní profily v experimentálním absorbéru - vliv volby turb. modelu, výkon 40%.	72
Obr. 6.8: Úloha pro modelování experimentálního absorbéru – vlastní adresářová struktura.	73
Obr. 6.9: Lagrangeovské částice – definice vlastností v <i>slurryCloudProperties</i> .	74
Obr. 6.10: Tryska TwinAbsorb – porovnání dat výrobce a navrženého Rosin Rammlerova rozložení.	75
Obr. 6.11: Vstříkávání vody tryskou TwinAbsorb – vlastní nastavení v <i>slurryCloudProperties</i> .	76
Obr. 6.12: Vliv nastavení počtu částic na odpar vody a dobu výpočtu.	77
Obr. 6.13: Rozložení kapek v absorbéru – ilustrační obrázek.	77
Obr. 6.14: Výpočet s různým nastavením počtu částic n – výkon 40%.	78
Obr. 6.15: Knihovna pro model absorpce SO <sub>2</sub> – vlastní adresářová struktura.	80
Obr. 6.16: Část vlastního zdrojového kódu modelu pro přenos SO <sub>2</sub> s konstantní hodnotou toku hmoty.	81
Obr. 6.17: Výstupní koncentrace SO <sub>2</sub> v průběhu výpočtu.	82
Obr. 6.18: Vlastní kód pro načtení hodnot ze souboru <i>slurryCloudProperties</i> .	83
Obr. 6.19: Reaktor pro jednoduchou úlohu – náčrt s rozměry dle Gaa [44].	84
Obr. 6.20: Validace na jednoduchém zařízení – a) model, b) výpočetová síť, c) linie pro vyhodnocení.	85
Obr. 6.21: Průběh výstupní koncentrace SO <sub>2</sub> během výpočtu – různé vstupní parametry.	85
Obr. 6.22: Reaktor pro jednoduchou úlohu – porovnání výsledků simulací s prací Gaa [44].	86
Obr. 6.23: Reaktor pro jednoduchou úlohu – porovnání účinnosti zachytu SO <sub>2</sub> s prací Gaa [44].	87

Obr. 6.24: Průmyslový absorbér – a) 3D CAD model, b) základní rozměry. ....	88
Obr. 6.25: Průmyslový absorbér – a) výpočtová síť, b) síť v oblasti sprchových pater. ....	88
Obr. 6.26: Průmyslový absorbér – účinnost zachytu SO <sub>2</sub> . ....	90

## Seznam tabulek

Tab. 1: Metody odstraňování SO <sub>2</sub> ze spalin – výhody/nevýhody a orientační náklady [7]. ....	15
Tab. 2: Difúzní koeficienty $D_i$ ( $10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) při 25°C [33]. ....	35
Tab. 3: Vybrané rovnovážné konstanty [39]. ....	39
Tab. 4: Přehled přístupů k modelování odsířování spalin – vybraní autoři (abecedně). ....	49
Tab. 5: Kritériální rovnice pro Sherwoodovo číslo – vybraní autoři (abecedně). ....	49
Tab. 6: Hodnoty difuzního koeficientu pro SO <sub>2</sub> (l). ....	51
Tab. 7: Vlastnosti spalin. ....	54
Tab. 8: Rychlosti ve vstupním průřezu pro dva různé stupně výkonu ventilátoru. ....	58
Tab. 9: Průmyslový absorbér bez vnitřních vestaveb – hlavní parametry. ....	62
Tab. 10: Průmyslový absorbér bez vnitřních vestaveb – střední hodnoty provozních parametrů. ....	62
Tab. 11: Okrajové podmínky pro testovací výpočet proudění primární fáze. ....	67
Tab. 12: CFD simulace experimentálního absorbérů – varianty výpočetní sítě. ....	69
Tab. 13: Parametry nastavení trysek. ....	75
Tab. 14: Vstupní proměnné pro podmodel <i>sulfurAbsorption</i> . ....	82
Tab. 15: Vstupní parametry testovací úlohy modelu <i>sulfurAbsorption</i> . ....	83
Tab. 16: Nastavení úlohy pro simulace (zadání převzato z [44]). ....	84
Tab. 17: Provozní data průmyslového absorbérů – výběr dat pro porovnání se simulací. ....	89
Tab. 18: Okrajové podmínky pro výpočet průmyslového absorbérů. ....	89

## Seznam příloh

- Příloha 1 – Experimentální absorbér - schéma.
- Příloha 2 – Experimentální absorbér – sprchové trysky.
- Příloha 3 – Řešič *simpleAbsorptionParcelFoam* – zdrojový kód.
- Příloha 4 – Knihovna *sulfurAbsorption* – výsledný zdrojový kód.
- Příloha 5 – Průmyslový absorbér – základní parametry.