

doc. Ing. Michal Holubčík, PhD.

prof. Ing. Jozef Jandačka, PhD.

Ing. Patrik Nemeč, PhD.

**Vybrané študijné texty a ilustrácie k predmetom Technika
ochrany ovzdušia, Energetické využívanie odpadov a
Monitorovanie životného prostredia študijných programov
Energetická a environmentálna technika a Technika
prostredia**

(časť. Spaľovanie tuhých palív v malých zdrojoch tepla)

Pod'akovanie

Tieto študijné texty vznikli vďaka podpore projektu 032ŽU-4/2022 Implementácia poznatkov o moderných spôsoboch znižovania záťaže životného prostredia pri energetickom využívaní tuhých palív a odpadov do pedagogického procesu. Autori ďakujú Kultúrnej a edukačnej grantovej agentúre Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky.

Obsah

| | |
|--|----|
| 1. Spaľovanie tuhých palív v malých zdrojoch tepla | 4 |
| 1.1 Proces spaľovania tuhých palív | 5 |
| 1.1.1 Chemické reakcie spaľovacieho procesu..... | 7 |
| 1.1.2 Dynamika spaľovania tuhých palív | 10 |
| 2.1 Modelovanie spaľovania v zdrojoch tepla..... | 11 |

1. Spaľovanie tuhých palív v malých zdrojoch tepla

Konštrukcia a návrh spaľovacích zariadení začína aplikáciou zákonov termodynamiky. Termodynamika poskytuje zákony zachovania hmoty, druhov a energie; definuje efektívnosť; a zaoberá sa rovnovážnymi stavmi a chemickým zložením reaktantov a produktov. Hoci systémy, ktoré prechádzajú chemickou reakciou, sú vo všeobecnosti ďaleko od chemickej rovnováhy, v mnohých zaujímavých prípadoch je možné zvoliť dostatočne malý kontrolný objem, takže tlak a teplota sú v rámci kontrolného objemu jednotné. Chemické zloženie v danom časovom okamihu je diktované termodynamickými vlastnosťami, rýchlosťami chemických reakcií a dynamikou tekutín systému.

Spaľovanie paliva zahŕňa celý rad fyzikálnych a chemických pochodov, pri ktorých súčasne prebiehajú chemické reakcie jednotlivých horľavých zložiek paliva s kyslíkom pri vysokej teplote, pričom energia chemicky viazaná v palive sa mení na teplo a na vedľajšie produkty spaľovania (spaliny a popoloviny). Oxidácia horľavých zložiek paliva prebieha najčastejšie kyslíkom z atmosférického vzduchu. Proces oxidácie horľavých látok s kyslíkom, pri ktorých sa v exotermických reakciách uvoľňuje teplo a svetlo, sa nazýva horenie.

Aby mohlo dôjsť k spaľovaciemu procesu, musia byť zabezpečené 4 nižšie uvedené podmienky, ktorých dodržanie je nevyhnutné pre dokonalé spaľovanie:

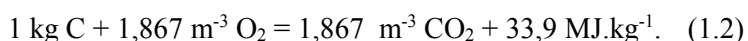
- V spaľovacom priestore musí byť prítomné palivo, ktoré obsahuje aktívne horľavé látky (C, H, S).
- Keďže spaľovanie je oxidačná reakcia, je potrebné k horľavým prvkom priviesť dostatočné množstvo kyslíka v spaľovacom vzduchu.
- Pre inicializáciu horenia je potrebné dosiahnuť zápalnú teplotu, kedy začne horieť horľavina a počas spaľovania udržať požadovanú teplotu.
- Horľavina a oksyličovadlo musia mať priestor a dostatok času (reakčná doba), aby prebehli reakcie spaľovania.

Spaľovacie reakcie, pri ktorých sa zlučujú horľavé prvky s kyslíkom, sa označujú za reakcie exotermické. Medzi horľavé prvky paliva patrí uhlík (C), vodík (H) a síra (S). Pri presných výpočtoch objemových množstiev produktov spaľovania (dymových plynov) a potrebného objemu spaľovacieho vzduchu sa pri spaľovaní palív vychádza z molekulovej hmotnosti jednotlivých prvkov horľaviny. Jednotkou molekulovej hmotnosti je jeden kilomol (kmol), ktorý predstavuje hmotnosť množstva látky v kilogramoch a je daná jej molekulovou hmotnosťou. Za normálnych podmienok, t.j. pri teplote 0 °C a tlaku 101325 Pa, zaberá jeden kilomol pri všetkých plynoch objem 22,4 m³. Molekulové hmotnosti horľavých prvkov paliva a prvkoch zúčastňujúcich sa na reakciách pri spaľovaní sú nasledovné: vodík (H) 2 kg, uhlík (C) 12 kg, kyslík (O) 32 kg, síra (S) 32 kg a dusík (N) 28 kg. Použitím molekulových hmotností jednotlivých prvkov je možné vyjadriť vzťahy pre chemické reakcie pri spaľovaní spaľovacími rovnicami.

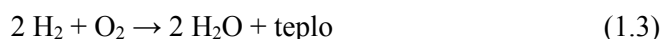
Spaľovanie uhlíka na oxid uhličité:



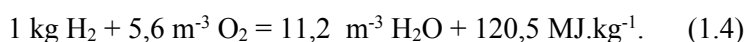
Pri uvažovaní molekulových hmotností prvkov zúčastňujúcich sa na reakcii a uvažovaní výhrevnosti čistého uhlíka 33,90 MJ·kg⁻¹:



Spaľovanie vodíka na vodnú paru:



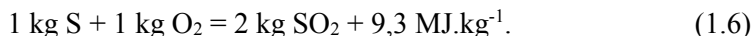
Pri uvažovaní molekulových hmotností prvkov zúčastňujúcich sa na reakcii a uvažovaní výhrevnosti čistého vodíka 120,5 MJ·kg⁻¹:



Spaľovanie síry na oxid siričitý:



Pri uvažovaní molekulových hmotností prvkov zúčastňujúcich sa na reakcii a uvažovaní výhrevnosti čistého vodíka $9,3 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$:



Tieto vzťahy nevyjadrujú presne spaľovacie pomery, ktoré existujú v skutočnej spaľovacej komore. V spaľovacej komore sa spaľovanie neuskutočňuje s čistým kyslíkom, ale za prítomnosti vzduchu, ktorý obsahuje okrem kyslíka aj dusík. Dusík, ktorý sa reakciou nezúčastňuje, prechádza ako balastná zložka do odpadových dymových plynov alebo sa zlučuje s kyslíkom na škodlivé zložky NO a NO₂. Dymové plyny tak predstavujú zmes vzdušného dusíka a produktov spaľovania horľaviny, t.j. CO₂, H₂O, SO₂, SO₃, NO, NO₂ a vodnej pary vzniknutej z vlhkosti paliva a vlhkosti vzduchu, popr. ďalších zložiek, väčšinou vo veľmi malom alebo stopovom množstve. Jednotlivé spaľovacie rovnice je možné použiť pre výpočet stechiometrického (teoretického, resp. minimálneho) množstva kyslíka, poprípade vzduchu potrebného pre dokonalé spálenie 1 kg paliva.

V určitých miestach spaľovacej komory dochádza vplyvom nedostatku spaľovacieho vzduchu k nedokonalému spaľovaniu, pričom vzniká oxid uhoľnatý. V skutočnosti neprebíha spaľovanie ako priama oxidácia, ale ako reťazová reakcia po etapách. V technickej praxi majú tieto poznatky význam len v súvislosti s prípravou a zapálením paliva. Pre tepelnú a hmotnostnú bilanciú spaľovacieho procesu úplne postačuje riešenie priamej oxidácie prvkov a z neho odvodené rovnice pre množstvo spotrebovaného kyslíka (resp. spaľovacieho vzduchu) a vzniknutých spalín. Ani pri spaľovaní s prebytkom vzduchu nie je možné prakticky zaistiť dokonalé spálenie všetkej horľaviny. Ak horľavina nezhorí úplne, hovoríme o nedokonalom spaľovaní. Identifikuje sa podľa produktov spaľovania, za ktoré sa považujú hlavne CO, sadze a polycyklické aromatické uhl'ovodíky (PAU). Uvažuje sa, že časť uhlíka nezhorí vôbec, odchádza zo spaľovacieho zariadenia spoločne s tuhými zvyškami po spaľovaní a podiel uhlíka zhorí nedokonale na plynnú zložku CO. V bežných podmienkach je objem spalín zvýšený aj vplyvom nedokonalého spaľovania, čoho následkom je vyšší objem spalín ako je stechiometrický, pretože objem CO je vyšší ako CO₂. Už spomenuté skutočnosti naznačujú, že presný výpočet množstva spalín je zložitý. Narastajúci prebytok spaľovacieho vzduchu na jednej strane prispieva k dokonalému vyhoreniu paliva, vďaka čomu sa zníži, prípadne úplne odstráni únik nevyhorenej prchavej horľaviny v spalínach. V konečnom dôsledku sa tým zvýši efektívnosť výroby tepla a zníži produkcia emisií. Na druhej strane, prebytok spaľovacieho vzduchu vedie k zvýšenému objemu produkovaných spalín a k poklesu teploty plameňa a teploty spalín. Nižšia teplota plameňa a spalín znižuje intenzitu prestupu tepla, a tým narastá tzv. komínová strata.

1.1 Proces spaľovania tuhých palív

Spaľovací proces je možné analyzovať z hľadiska statického a dynamického procesu spaľovania. Statika spaľovania sa zaoberá materiálovými a energetickými bilanciami procesu spaľovania paliva a taktiež analyzuje vlastnosti látok vstupujúcich procesu spaľovania a vystupujúcich z procesu spaľovania. Do tejto oblasti sa okrem iného zahŕňa stanovenie spotreby paliva a spaľovacieho vzduchu, teploty plameňa, množstva uvoľneného tepla a množstva vzniknutých spalín. Dynamika spaľovania sa zaoberá fyzikálnymi a chemickými dejmi spaľovacieho procesu v závislosti na čase.

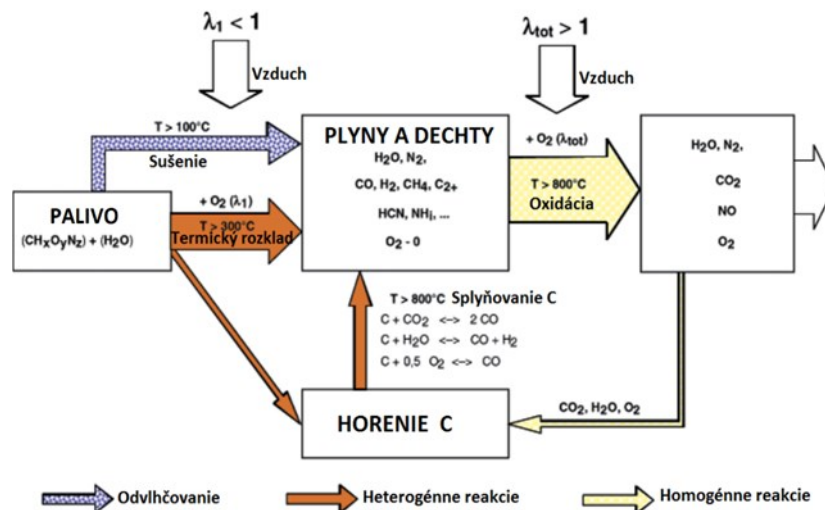
Proces spaľovania palív, najmä tuhých palív, možno z hľadiska postupnosti rozdeliť do štyroch fáz (obrázok 6.1), ktoré sú v niektorých spaľovacích zariadeniach dobre rozlíšiteľné, v iných spaľovacích zariadeniach sa tieto procesy časovo a lokálne z časti prekrývajú (*JANDAČKA, 2011*):

- ohrev a sušenie paliva,
- termický rozklad zložiek paliva,
- horenie prchavých zložiek,
- horenie pevných zložiek.

Ohrev paliva sa realizuje vplyvom žiarenia plameňa a od rozpálených stien. Následné sušenie paliva a vyparovanie vody z paliva sa deje pri teplotách od cca 100 °C, pričom vyparená voda je odvádzaná spoločne so spalínami do komína. Pri teplotách cca od 150 °C dochádza k pyrolytickému rozkladu

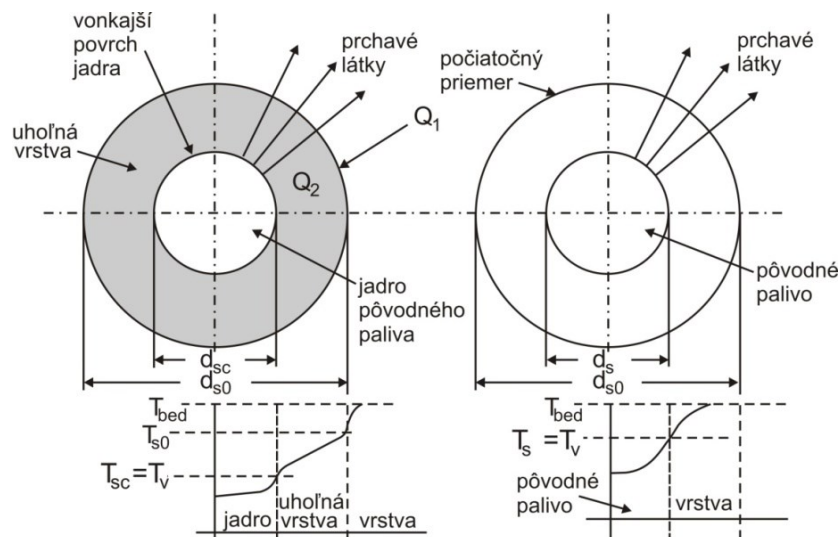
SPAĽOVANIE TUHÝCH PALÍV V MALÝCH ZDROJOCH TEPLA

suchého paliva. Vplyvom privedenia primárneho spaľovacieho vzduchu dochádza pri teplotách cca 250 °C k splyňovaniu vysušeného paliva na horľavé plyny, ako sú oxid uhoľnatý (CO) a uhl'ovodíky (C_xH_y), pričom vznikajú tuhé zvyšky paliva, tzv. pevný uhlík (C). Napríklad biomasa obsahuje viac vodíka ako väčšina iných palív, preto vzniká pri jeho spaľovaní podstatne viac uhl'ovodíkov. Poslednou fázou procesu spaľovania paliva je horenie pevného uhlíka (C) za prítomnosti kyslíka, ktoré prebieha pri teplotách cca od 600 °C, pričom ako odpad vzniká popol. Okysličovanie horľavých plynov s kyslíkom na CO_2 a vodu sa uskutočňuje pri teplotách od cca 700 °C (DZURENDA, 2010).



Obrázok 1.1 : Proces spaľovania paliva (HOLUBČÍK, 2019)

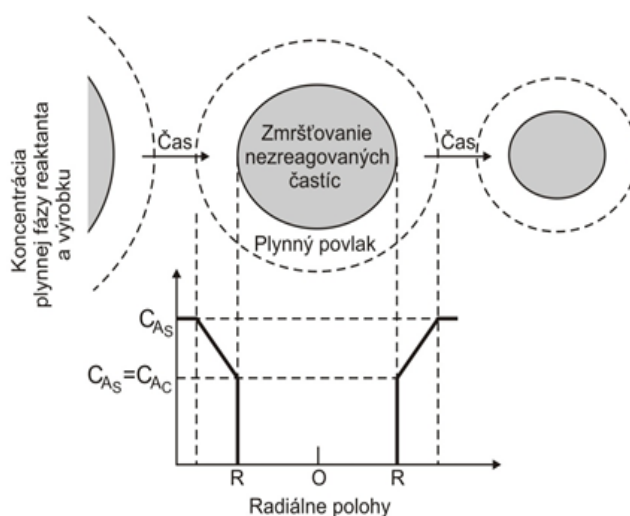
V spaľovacom systéme možno predpokladať, že (I.) častice paliva sa rozkladajú pri súčasnom uvoľňovaní prchavých látok, ktoré sú následne spaľované do formy plynných produktov alebo (II.) častice paliva vytvárajú uhlíkovú vrstvu a prchavé látky, ktoré počas horenia produkujú plynné látky (obr. 1.2).



Obrázok 1.2 : Schematický model pre spaľovanie prchavých látok (SURi, 2010)

Rýchlosť spaľovania prchavých látok sa riadi rýchlosťou prenosu tepla medzi roštom a tepelnou vodivosťou tuhého zvyšku alebo častíc paliva. Počas spaľovania prchavých látok zostáva povrchová teplota častíc konštantná, čo zodpovedá teplote, pri ktorej dochádza k tepelnému rozkladu paliva. V prípade, že nie je vytvorená uhlíková vrstva, veľkosť častíc klesá s tepelným rozkladom, zatiaľ čo v prípade tvorby uhlíkovej vrstvy zostáva vonkajší priemer častíc rovnaký ako pôvodný priemer. V prípade spaľovania tuhého zvyšku nemusí byť uvažovaná difúzia vo vonkajšej vrstve, pretože dochádza k zmršťovaniu jadra bez rozptylu vrstvy popola (obr. 1.3). (SURi, 2010).

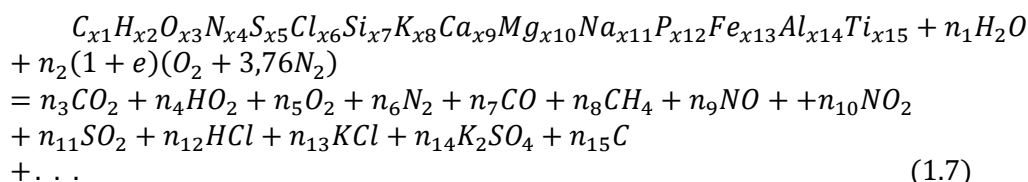
Všetky vyššie uvedené deje môžu prebiehať v každom mieste spaľovacieho procesu za iných pomerov (lokálne rozdiely teplôt, rýchlosti prúdenia, obsah kyslíka a pod.). Preto spaľovací priestor s horiacim palivom možno považovať za zložitý chemický reaktor, v ktorom sa prejavujú rôzne vplyvy chemickej, termodynamicky reakčnej kinetiky a prípadne i katalýzy (popolovín, výmurovky).



Obrázok 1.3 : Schematický model spaľovania tuhého zvyšku (zmršťovanie jadra) (SURI, 2010)

1.1.1 Chemické reakcie spaľovacieho procesu

Chemické reakcie nastávajú vtedy, keď dôjde ku zrážke častíc tak, aby medzi nimi mohli vzniknúť väzobné sily. Spaľovanie je komplexný jav zahŕňajúci súčasne prepojený prenos tepla a hmoty s chemickými reakciami a prúdením tekutín. Jeho predikcia pre návrh dizajnu a kontrolu vyžaduje znalosť vlastností paliva a spôsob, ako tieto vlastnosti vplyvajú na spaľovací proces. Globálne reakcie spaľovania tuhého paliva vo vzduchu môže mať nasledujúci tvar, pričom prvá zlúčenina reaktantov je palivo na báze biomasy (HOLUBČÍK, 2013):



Zahrnutie 15 prvkov v tabuľke 6.1 do empirického vzorca pre palivo je neúplné. V tuhom palive sa nachádza oveľa viac prvkov, z ktorých mnohé sú dôležité pre problematiku spaľovania. Napr. ťažké kovy majú veľký vplyv na správanie popola. Druhým reaktantom vplyvujúcim na proces spaľovania je vlhkosť obsiahnutá v palive, ktorá môže byť veľmi variabilná. Pokiaľ je v palive príliš veľa vlhkosti, palivo nereaguje spontánne. Tretím ovplyvňujúcim reaktantom je vzduch. Napriek tomu, že sa zjednodušenie uvažuje dvojzložková zmes kyslíka a dusíka v objemovom pomere 21 % ku 79 %, vzduch samozrejme obsahuje aj iné zložky. Tieto sú dôležité v širšej analýze, aj keď ich množstvo je veľmi nízke, môžu mať zásadný vplyv na proces spaľovania paliva. Hlavné produkty reakcie sú tie, ktoré sa objavia prvé, ale taktiež je veľa produktov dôležitých pre správnu funkciu spaľovacieho systému, ktorý musí spĺňať kritériá emisných limitov, ako sú oxid uhoľnatý, uhl'ovodíky, oxidy dusíka, oxidy síry a ďalšie. Dôležité sú aj reakcie medzi anorganickými časticami vedúce k tvorbe spekanov a trosky, ako sú alkalické chloridy, sírany, uhličitaný a kremičitaný. Detailný popis všetkých chemických reakcií je príliš komplexný a komplikovaný. (HOLUBČÍK, 2013; JANDAČKA, 2016)

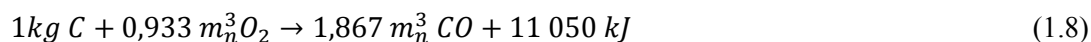
SPAĽOVANIE TUHÝCH PALÍV V MALÝCH ZDROJOCH TEPLA

Tabuľka 1.1 : Prvky zúčastňujúce sa chemických reakcií pri spaľovaní biomasy (JENKINS, 1998)

| | | Dendromasa | Fytomasa | Fytomasa/Dendromasa |
|-----------|-----------------|-------------------|-----------------|----------------------------|
| C | x ₁ | 4,1916 | 3,2072 | 0,765149346 |
| H | x ₂ | 6,0322 | 5,1973 | 0,861592785 |
| O | x ₃ | 2,5828 | 2,8148 | 1,089824996 |
| N | x ₄ | 0,0530 | 0,0625 | 1,179245283 |
| S | x ₅ | 0,0006 | 0,0057 | 9,5 |
| Cl | x ₆ | 0,0003 | 0,0165 | 55 |
| Si | x ₇ | 0,0057 | 0,5000 | 87,71929825 |
| K | x ₈ | 0,0067 | 0,0592 | 8,835820896 |
| Ca | x ₉ | 0,0337 | 0,0141 | 0,418397626 |
| Mg | x ₁₀ | 0,0205 | 0,0135 | 0,658536585 |
| Na | x ₁₁ | 0,0002 | 0,0079 | 39,5 |
| P | x ₁₂ | 0,0012 | 0,0086 | 7,166666667 |
| Fe | x ₁₃ | 0,0007 | 0,0029 | 4,142857143 |
| Al | x ₁₄ | 0,0008 | 0,0073 | 9,125 |
| Ti | x ₁₅ | 0,0002 | 0,0004 | 2 |

V určitých miestach spaľovacej komory dochádza vplyvom nedostatku spaľovacieho vzduchu k nedokonalému spaľovaniu, pričom vzniká oxid uhoľnatý.

Pri uvažovaní atómových a molekulových hmotností reagujúcich prvkov a množstve uvoľneného tepla 11 050 kJ.kg⁻¹ má rovnica tvar:



V skutočnosti neprebíha spaľovanie ako priama oxidácia podľa už uvedených rovníc, ale ako reťazová reakcia po etapách. V technickej praxi majú tieto poznatky význam len v súvislosti s prípravou a zapálením paliva. Pre tepelnú a hmotnostnú bilanciu spaľovacieho procesu úplne postačuje riešenie priamej oxidácie prvkov a z neho odvodené rovnice pre množstvo spotrebovaného kyslíka (resp. spaľovacieho vzduchu) a vzniknutých spalín.

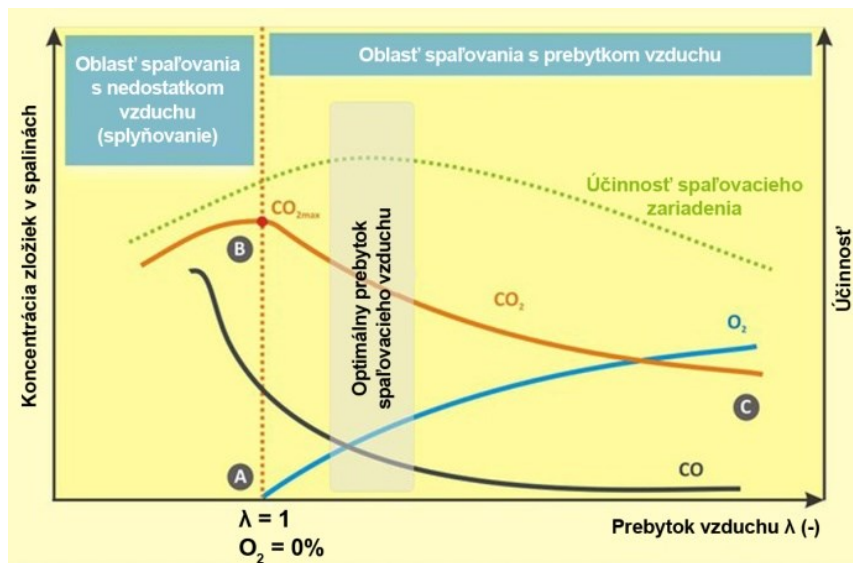
Ani pri spaľovaní s prebytkom vzduchu nie je možné prakticky zaistiť dokonalé spálenie všetkej horľaviny. Ak horľavina nezhorí úplne, hovoríme o nedokonalom spaľovaní. Identifikuje sa podľa produktov spaľovania, za ktoré sa považujú hlavne CO, sadze a polycyklické aromatické uhľovodíky (PAU). Uvažuje sa, že časť uhlíka nezhorí vôbec, odchádza zo spaľovacieho zariadenia spoločne s tuhými zvyškami po spaľovaní a podiel uhlíka zhorí nedokonale na plynnú zložku CO. Nedokonalé spaľovanie nastane, ak jedna zo štyroch už uvedených podmienok nie je úplne splnená. (HORÁK, 2012).

V bežných podmienkach je objem spalín zvýšený aj vplyvom nedokonalého spaľovania, čoho následkom je vyšší objem spalín ako je stechiometrický, pretože objem CO je vyšší ako CO₂. Už spomenuté skutočnosti naznačujú, že presný výpočet množstva spalín je zložitý. Výpočet základných parametrov spalín, ktoré charakterizujú kvalitu spaľovacieho procesu, sa realizuje na základe vyhodnotenia nameraných objemových podielov zložiek plynov v suchých spalínach v príslušnom reze spalínového traktu a podiel obsahu uhlíka C v jednotlivých zložkách tuhých zvyškov po spaľovaní podľa nižšie uvedených vzťahov (IBLER, 2002).

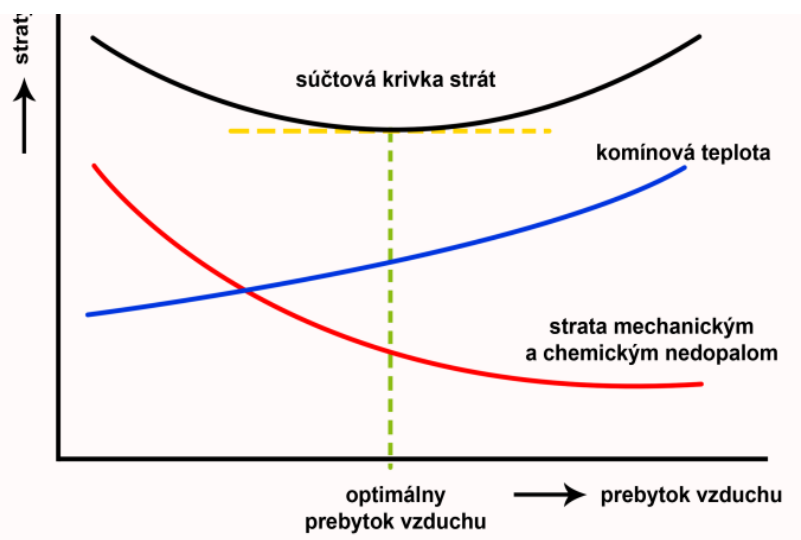
Narastajúci prebytok spaľovacieho vzduchu na jednej strane prispieva k dokonalému vyhoreniu paliva, vďaka čomu sa zníži, prípadne úplne odstráni únik nevyhorenej prechavej horľaviny v spalínach (obr. 6.4). V konečnom dôsledku sa tým zvýši efektívnosť výroby tepla a zníži produkcia emisií. Na druhej strane, prebytok spaľovacieho vzduchu vedie k zvýšenému objemu produkovaných spalín a k poklesu teploty plameňa a teploty spalín. Nižšia teplota plameňa a spalín znižuje intenzitu prestupu

tepla, a tým narastá tzv. komínová strata.

Každé spaľovacie zariadenie má svoj optimálny prebytok spaľovacieho vzduchu, ktorý sa určuje z minimálneho súčtu komínovej tepelnej straty – tepelných strát závislých od prebytku spaľovacieho vzduchu a tepelných strát chemickým nedopalom – strát spôsobených únikom prechavej horľaviny. Minimum súčtovej krivky tepelných strát (obr. 6.5) zodpovedá optimálnemu prebytku spaľovacieho vzduchu. Optimálny prebytok spaľovacieho vzduchu je vo výraznej miere závislý od druhu paliva a spaľovacej teploty. Vzhľadom na minimálnu produkciu emisií sa odporúča spaľovať palivo v malých automatických kotloch s prebytkom 1,5–2 (OBERNBERGER, 2010) a 2–4 pre kotly a kachle s ručným prikladaním (HORÁK, 2012), dendromasu odporúčajú viacerí autori spaľovať pri prebytku v intervale 1,8–2,2 (LADOMERSKÝ, 2000), (DZURENDA, 2010), niektorí autori aj menej napr. 1,6–2,0 (ANDERT, 2010), ale najčastejšie je prebytok spaľovacieho vzduchu okolo 2,0.



Obrázok 1.4 : Vplyv prebytku spaľovacieho vzduchu na proces spaľovania (HORÁK, 2012)



Obrázok 1.5: Závislosť tepelných strát na prebytku spaľovacieho vzduchu

Podstatné je, aby konštrukcia spaľovacieho zariadenia zaistila prívod okysličovadla až k horľavine. Ďalším faktorom, ktorý rozhoduje o tom, či bude privedený dostatok spaľovacieho vzduchu k horľavine a prebehnú reakcie horenia, je veľkosť častíc paliva (zrnitosť). Nestačí len priviesť dostatočné množstvo spaľovacieho vzduchu do ohniska, ale aj umožniť, aby kyslík zreagoval s palivom. Je preto potrebné spaľovací vzduch správne prerozdeliť na primárny a sekundárny (obyčajne v pomere 1 : 2,5) (DZURENDA, 2011). Teplota spaľovacieho vzduchu je väčšinou podstatne nižšia než teplota

plameňa, ktorý tvorí horiaca prchavá horľavina, zložená prevažne z uhlíkovodíkov a CO. To znamená, že ich premiešanie je z dôvodu rôznych viskozít problematické (TOMAN, 2011). Technicky sa uvedený problém zmiernuje predohrevom spaľovacieho vzduchu v konštrukcii spaľovacieho priestoru, vyššou vstupnou rýchlosťou spaľovacieho vzduchu a optimalizáciou jeho prúdenia.

1.1.2 Dynamika spaľovania tuhých palív

Dynamika spaľovania skúma priebeh spaľovacieho procesu v čase a priestore. Spaľovanie je definované ako okysličovanie látok až na konečné splodiny reakcie s maximálnym uvoľnením tepla. Spaľovanie niekedy prebieha bez svetelného efektu. Proces horenia sa definuje ako prudké okysličovanie, ktoré po inicializácii prebieha samovoľne v prítomnosti okysličovadla a je sprevádzané produkciou tepla a svetelným efektom. Každý proces horenia je možný len v určitom intervale hodnôt parametrov podmieňujúcich proces horenia, ako rýchlosť, prebytok spaľovacieho vzduchu a pod.

Spaľovanie v zdrojoch tepla predstavuje riadené horenie paliva, tvorené súborom fyzikálnych a chemických dejov, ktoré sa vzájomne prelínajú alebo na seba nadväzujú. Znamená to, že v čase prebiehajú paralelne alebo v sérii. Pri spaľovaní prebiehajú exotermické oxidačné reakcie, endotermické reakcie tepelného rozkladu, fyzikálne pochody miešania palivových a vzduchových tokov, výmena hmoty a tepla a iné. Chemické reakcie sú podľa fáz paliva a okysličovadla rozdelené na reakcie homogénne (prchavý podiel horľaviny so vzduchom) a heterogénne (horenie tuhého uhlíka s kyslíkom zo vzduchu). Difúzna kinetická teória spaľovania objasňuje tento zložitý proces po fyzikálnej a chemickej stránke, kvalitatívne analyzuje vplyv jednotlivých faktorov na priebeh horenia, zovšeobecňuje experimentálne výsledky a pod.

Celková doba horenia paliva τ je daná dobou prípravy paliva a okysličovadla k zapáleniu τ_f a dobou vlastnej chemickej reakcie τ_{ch} :

$$\tau_c = \tau_f + y \cdot \tau_{ch} \quad (1.9)$$

Ak je priebeh dejov fyzikálneho charakteru (miešanie paliva a vzduchu) neporovnateľne rýchlejší než priebeh chemickej reakcie ($\tau_f \ll \tau_{ch}$, resp. $\tau_c \approx \tau_{ch}$) priebeh spaľovania sa riadi chemickými zákonmi a proces horenia sa nazýva kinetickým spaľovaním. Opačný prípad je, keď o rýchlosti spaľovania rozhodujú fyzikálne deje. Potom je doba horenia určená časom potrebným na zmiešanie paliva a vzduchu, horenie prebieha v difúznej oblasti ($\tau_{ch} \ll \tau_f$). Súčiniteľ y vyjadruje prekrytie časov τ_f a τ_{ch} .

Proces horenia v kinetickej oblasti je určený priebehom chemických reakcií paliva a okysličovadla. Na rýchlosti reakcií závisí veľkosť reakčného priestoru a množstvo produktov za jednotku času. Znalosť faktorov ovplyvňujúcich rýchlosť reakcií umožňuje intenzifikáciu rýchlosti spaľovacieho procesu. Rýchlosť chemickej reakcie môžeme vyjadriť rýchlosťou tvorenia molekúl produktov reakcie bežnou závislosťou:

$$v_1 = k_1 \cdot C_A^{n_A} \cdot C_B^{n_B} \quad (1.10)$$

kde k je súčiniteľ úmernosti, resp. konštanta reakčnej rýchlosti a C_A , C_B sú koncentrácie látok, vyjadrené napr. počtom molekúl v jednotke objemu. Exponenty n_A , n_B určujú rád reakcie podľa daného reaktantu. Celkový rád reakcie je rovný súčtu čiastočných rádov:

$$n = n_A + n_B. \quad (1.11)$$

Ak je reakcia vratná, prebieha rýchlosťou v_2 , pričom sa rovnováha nastaví pri $v_1 = v_2$:

$$v_2 = k_2 \cdot C_C^{n_C} \cdot C_D^{n_D} \quad (1.12)$$

Z tejto podmienky je určená konštanta rovnovážneho stavu K , ktorá určuje zloženie sústavy v rovnovážnom stave:

$$K = \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_A^{n_A} \cdot C_B^{n_B}}{C_C^{n_C} \cdot C_D^{n_D}} \quad (1.13)$$

Priamymi reakciami horenia sú exotermické reakcie okysličovania horľaviny a medziproduktov horľaviny, pričom uvoľnené teplo je efektom reakcie. Vratnými reakciami procesu horenia sú

endotermické reakcie tepelného rozkladu (disociácie), napr. CO₂ na CO a O₂ alebo H₂O na H₂ a O₂ a iné. Disociačné reakcie sa však začínajú uplatňovať až pri teplote nad 1500 °C, ktorá sa v malých zdrojoch nedosahuje.

Chemické reakcie sa rozdeľujú podľa elementárneho chemického deja na reakcie prvého až eventuálne n-tého rádu. V skutočných procesoch spaľovania sa však vyskytujú prakticky len reakcie prvého rádu (reakcie sa zúčastní len jedna molekula reagujúcej látky – rozpad molekuly) a druhého rádu (elementárneho deja sa zúčastnia dve molekuly rovnakej alebo rôznej látky). Reakcie vyššieho rádu sa nevyskytujú, pretože reakcia viacerých molekúl je málo pravdepodobná. Niektoré stechiometrické rovnice chemických reakcií spaľovania sú vyššieho rádu. Rýchlosť reakcií potom ale nezodpovedá teoretickej rýchlosti chemickej reakcie, pretože v skutočnosti prebiehajú reťazové reakcie prvého a druhého rádu, za vzniku a zániku rôznych medziproduktov (OH, H, O atď.) s krátkou dobou existencie.

Na rýchlosť chemických reakcií má vplyv teplota a tlak. S rastom teploty vzrastá aj rýchlosť reakcií. Pre priebeh reakcie musia mať zlučujúce sa molekuly dostatočnú aktivačnú energiu ΔE k prekonaniu energetickej bariéry, ktorú má podľa kinetickej teórie látok len časť celkového počtu molekúl. Ak sa zlúčia pri zrážke všetky molekuly majúce aktivačnú energiu, dostaneme pre konštantu reakcie druhého rádu známy Arheniov vzťah:

$$k = k_0 \cdot e^{-\frac{\Sigma \Delta E}{kT}} \quad (1.14)$$

Závislosť rýchlosti reakcie od teploty je výrazná. Vplyv tlaku sa na reakciách prvého rádu neprejavuje, ale ovplyvňuje reakcie druhého rádu, kedy je rýchlosť úmerná tlaku (rýchlosť horenia s tlakom narastá).

V difúznej oblasti spaľovania sa intenzita miešania paliva a kyslíka oneskoruje oproti rýchlosti chemickej reakcie, a tak reguluje priebeh spaľovacieho procesu. Difúzne spaľovanie prebieha v prevažnej väčšine technických procesov spaľovania. Rýchlosť horenia je určená fyzikálnymi činiteľmi a prebiehajúce fyzikálne procesy sú veľmi zložité a nie je možné ich prakticky zvládnuť. Pri spaľovaní tuhých palív pri teplote nad 1100 °C prebiehajú chemické reakcie už tak rýchlo, že o rýchlosti horenia paliva rozhoduje len rýchlosť prívodu kyslíka k jeho povrchu. Rýchlosť tohto heterogénneho horenia je vyjadrená vzťahom:

$$v = \beta \cdot (C_{ob} - C_{st}) \quad (1.15)$$

Fyzikálne procesy môžu byť čiastočne opísané na príklade čistého uhlíka. Oxidácia uhlíka za vzniku CO₂ prebieha rýchlejšie než redukcia uhlíka s CO₂ na CO. Pri nízkej teplote spaľovanie prebieha v kinetickej oblasti a na povrchu paliva je prakticky prítomný kyslík. Pri vyšších teplotách prebieha horenie v difúznej oblasti, pretože intenzita prívodu kyslíka k povrchu brzdí priebeh chemickej reakcie. Pretože prívod potrebného množstva kyslíka k povrchu je v porovnaní s priebehom chemických reakcií pomalý, je horením vzniknutý CO₂ redukovaný na CO. Rýchlosť horenia v difúznej oblasti je možné meniť ovplyvnením fyzikálnych parametrov. Rozdiel medzi skutočnou a kinetickou rýchlosťou spaľovania predstavuje rezervu, ktorú by sa dalo ešte využiť pri vyšších teplotách napr. zintenzívnením zmiešavacích procesov.

2.1 Modelovanie spaľovania v zdrojoch tepla

Modely spaľovania v zdrojoch tepla sa dajú obecné rozdeliť na experimentálne, teoretické a modelovanie pomocou nástrojov CFD (Computational Fluid Dynamics - výpočtová dynamika tekutín). Výstupom experimentálneho modelu bývajú namerané dáta zodpovedajúce reálne vytvoreným podmienkam. Avšak samotné vytvorenie experimentálneho modelu a jeho testovanie môže byť nákladné a príliš náročné. Teoretický model býva čiastočne spojený s experimentálnym overovaním. CFD modely sú na rozhraní teoretického a experimentálneho modelovania. Pri modelovaní spaľovania v kotle sa dá jeho objem rozdeliť na viacero častí, ktoré sa vzájomne výrazne odlišujú z hľadiska prebiehajúcich dejov. (YIN, 2008)

Modelovanie spaľovania v roštových kotloch je možné rozdeliť podľa na:

SPAĽOVANIE TUHÝCH PALÍV V MALÝCH ZDROJOCH TEPLA

- modelovanie úplnej konverzie paliva na rošte, pričom model popisuje heterogénny proces konverzie,
- modelovanie spaľovania vo voľnom objeme nad nakládkou – tu je skúmané miesenie častíc, spaľovanie a tvorba škodlivín počas turbulentného spaľovania plynnej fázy.

Je bežné, že model nakládky paliva poskytuje vstupné podmienky pre simuláciu procesu vo voľnom objeme. Premena paliva počas spaľovania na rošte výrazne ovplyvňuje účinnosť celého procesu z dôvodu vzniku zuhoľnatených zvyškov z nedokonalého spaľovania, emisií škodlivých látok a tvorby tuhých znečisťujúcich látok. Samostatné modely palivovej nakládky sú vytvárané za účelom rozboru konverzie paliva a zahŕňajú sledovanie okamžiku vznietenia a počiatku spaľovacieho procesu. Vstupné podmienky pre modelovanie voľného objemu tvorí teplota, koncentrácia jednotlivých zložiek paliva a rýchlosť prúdenia stanovenej na povrchu nakládky. (YIN, 2008)

Tvorba modelu spaľovania vo voľnom objeme nad nakládkou prebieha tak, že vstupné podmienky pre modelovanie sú vypočítané z hmotnostnej alebo tepelnej bilancie. Ďalšie vstupné podmienky sú získané z výsledkov modelovania palivovej nakládky. Tieto modely sú považované za robustné a obyčajne sa využívajú na výpočty priemyselných kotlov. Modelovanie CFD poskytuje nástroj k znázorneniu pochodov vo väčšine energetických zariadení. CFD modelovanie umožňuje numerické riešenie základných fyzikálnych rovníc, ktoré popisujú zachovanie hmoty, momentu a energie. Riešením týchto rovníc v niekoľko tisícoch bodov definovaných na výpočtovej sieti, ktorá je vytvorená tak, aby sa približovala geometrii modelovaného zariadenia, je možné simulovať základné deje, napr. tok tekutín, prenos tepla a chemické reakcie. Rovnice popisujúce zachovanie hmoty, momentu a energie je možné matematicky popísať sústavou parciálnych diferenciálnych rovníc. Oblasť výpočtu sa najskôr rozdelí na diskkrétne konečné objemy pomocou obecnej krivočiarej siete. Následne sa bilancujú veličiny v jednotlivých konečných objemoch a riešia diskretizované rovnice. Diskretizácia predstavuje aproximáciu radiacích rovníc algebrickými výrazmi. Ďalej je prevedený výpočet zložiek rýchlosti a hodnôt skalárnych veličín v geometrických stredoch konečných objemov. Následne je nutné previesť interpoláciu za účelom obdržania známych hodnôt na rozhraniach konečných objemov. Ďalším predpokladom zjednodušeného výpočtového modelovania je uvažovanie ustáleného prúdenia, ktoré sa v uvedených rovnicach prejaví nulovými členmi obsahujúcimi časovú zložku. Pokiaľ sa uvažujú infinitezimálne (nekonečné, súvisiace s nekonečne malými veličinami) stacionárny (v zmysle nehybný vzhľadom k prúdiacej tekutine) kontrolný objem, tak má rovnica kontinuity pre plynnú fázu tvar:

$$\frac{\partial(\phi \rho_p)}{\partial t} + \nabla(\phi \rho_p u_p) = S_p \quad (1.16)$$

kde $\phi[-]$ je medzerovitosť nakládky paliva, ρ_p [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$] je hustota plynnej fázy, t [s] je čas, u_p [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$] je vektor rýchlosti plynnej fázy, S_p je podiel premeny tuhej fázy na plynnú. (YIN, 2008)

Princíp bilancie síl pôsobiacich v tekutine vychádza z druhého Newtonovho zákona, kde je obecné vektor celkových síl rovný súčtu hmoty a vektoru zrýchlenia. Účelom je teda vytvoriť súčet všetkých síl pôsobiacich na infinitezimálny nestacionárny kontrolný objem. Všeobecne rozoznávame dva typy pôsobiacich síl – objemové sily (gravitačné) a povrchové sily (spôsobené normálovým a šmykovým napätím). Vzhľadom k porézному charakteru média je nutné zahrnúť do celkového súčtu pôsobiacich síl ešte odpor porézneho prostredia. Celkový súčet pre plynnú fázu vedie k:

$$\frac{\partial(\phi \rho_p u_p)}{\partial t} + \nabla(\phi \rho_p u_p u_p) = -\phi \nabla p_p + \nabla(\phi \tau_p) + \phi \rho_p g + f_p \quad (1.17)$$

kde p_g [Pa] je tlak plynnej fázy. τ_p [Pa] je šmykové napätie v plynnej fáze, g [$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$] je vektor gravitačného zrýchlenia plynnej fázy, f_p [$\text{N}\cdot\text{m}^{-3}$] je vektor odporu prúdenia v dôsledku porézneho prostredia. Jednotlivé členy v tomto poradí predstavujú súčin mernej hmotnosti a zrýchlenia, konvektívnu zložku, tlakovú zložku, ktorá spôsobuje konvekciu, viskóznou zložku, gravitáciu a odpor porézneho prostredia. (YIN, 2008)

Prenos energie prebieha podľa prvého termodynamického zákona, a teda celková energia systému je nemenná. Pre plynnú fázu je rovnica zachovania energie vyjadrená ako:

$$\phi_{\rho_p} c_{pp} \left(\frac{\partial T_p}{\partial t} + u_p \nabla T_p \right) = \nabla (\lambda_p \nabla T_p) + h_{p-t} (T_t - T_p) + \Delta H_p + \dot{Q}_{rad,p} \quad (1.18)$$

kde c_{pp} [$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$] je merná tepelná kapacita plynnej fázy, T_p [K] je teplota plynnej fázy, λ_p [$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$] je súčiniteľ tepelnej vodivosti plynnej fázy, h_{p-t} [$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$] je konvektívny koeficient prestupu tepla, ΔH_p [$\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$] je reakčné teplo v plynnej fáze a $Q_{rad,p}$ [$\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$] je tepelná energia žiarenia pre plynnú fázu. (YIN, 2008)

Pre plynú fázu je rovnica zachovania energie vyjadrená ako:

$$\phi_{\rho_t} c_{pt} \left(\frac{\partial T_t}{\partial t} + u_t \nabla T_t \right) = \nabla (\lambda_t \nabla T_t) + h_{p-t} (T_t - T_p) + \Delta H_t + \dot{Q}_{rad,t} \quad (1.19)$$

kde c_{pt} [$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$] je merná tepelná kapacita tuhej fázy, T_t [K] je teplota tuhej fázy, λ_t [$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$] je súčiniteľ tepelnej vodivosti tuhej fázy, ΔH_t [$\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$] je reakčné teplo v tuhej fáze a $Q_{rad,t}$ [$\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$] je tepelná energia žiarenia pre tuhú fázu. (YIN, 2008)

Rovnica pre prenos obecnej i-tej zložky je formulovaná v tvare:

$$\frac{\partial (\phi_{\rho_p} Y_{p,i})}{\partial t} + \nabla (\phi_{\rho_p} u_p Y_{p,i}) = \nabla (\phi_{\rho_p} D_{p,i} \nabla Y_{p,i}) \quad (1.20)$$

kde $Y_{g,i}$ [-] je hmotnostný zlomok i-tej plynnej zložky a $D_{g,i}$ [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$] je difúzny koeficient i-tej plynnej zložky. Do rovníc popisujúcich prenos jednotlivých látok sa ďalej zahŕňa rýchlostný pomer, popisujúci rýchlosť premeny jednotlivých látok v dôsledku vyparovania, devolatizácie (splyňovania) alebo spaľovania koksu. Tieto rýchlostné pomery sú popísané pomocou obyčajných diferenciálnych rovníc. (YIN, 2008)