

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ

МАШИНСКИ ФАКУЛТЕТ

Иван Д. Томановић

**МОДЕЛИРАЊЕ ПРОЦЕСА  
ОДСУМПОВАЊА ГАСОВА  
УНОШЕЊЕМ СПРАШЕНОГ СОРБЕНТА У  
ЛОЖИШТЕ ЕНЕРГЕТСКОГ КОТЛА НА  
УГЉЕНИ ПРАХ**

докторска дисертација

Београд, 2017

UNIVERSITY OF BELGRADE  
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

Ivan D. Tomanovic

**MODELLING OF FLUE GAS  
DESULFURIZATION PROCESS BY  
SORBENT INJECTION INTO THE  
PULVERIZED COAL-FIRED UTILITY  
BOILER FURNACE**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2017

## ПОДАЦИ О МЕНТОРУ И ЧЛАНОВИМА КОМИСИЈЕ

**Ментор:** др Драган Туцаковић, редовни професор,  
Универзитет у Београду, Машински факултет

**Чланови комисије:** др Драган Туцаковић, редовни професор,  
Универзитет у Београду, Машински факултет

др Драгослава Стојиљковић, редовни професор,  
Универзитет у Београду, Машински факултет

др Срђан Белошевић, научни саветник,  
Универзитет у Београду, Институт за нуклеарне  
науке „Винча“

**Датум одбране:** \_\_.\_\_.2017.

*Породици*



## Захвалница

---

Ова докторска дисертација је настала као резултат рада на пројекту ТР-33018 „Повећање енергетске и еколошке ефикасности процеса у ложишту за угљени прах и оптимизација излазне грејне површине енергетског парног котла применом сопствених софтверских алата“ реализованог у оквиру Института за нуклеарне науке „Винча“, под покровитељством Министарства просвете, науке и технолошког развоја.

Посебно се захваљујем свом ментору редовном професору др Драгану Туцаковићу на помоћи и уложеном времену у израду и завршетак ове дисертације, професор др Драгослави Стојиљковић на конструктивним саветима који су значајно помогли у току израде и обликовања дисертације, као и руководиоцу пројекта ТР-33018, научном саветнику др Срђану Белошевићу уз чију подршку и разумевање је било могуће истраживање и рад на изради ове дисертације.

Такође се захваљујем Лабораторији за термотехнику и енергетику Института за нуклеарне науке „Винча“ у којој су ми обезбеђени услови за извођење нумеричких симулација које чине основу ове дисертације.

Захвалност дугујем и колегама и пријатељима Јели и Бојану на подршци коју су ми пружили током протеклих година.

# МОДЕЛИРАЊЕ ПРОЦЕСА ОДСУМПОВАЊА ГАСОВА УНОШЕЊЕМ СПРАШЕНОГ СОРБЕНТА У ЛОЖИШТЕ ЕНЕРГЕТСКОГ КОТЛА НА УГЉЕНИ ПРАХ

## Резиме

Еколошки проблеми приликом претварања енергије садржане у угљу у електричну енергију су од изузетног значаја и посвећује им се посебна пажња. Пре предузимања конкретних мера на унапређењу постојећих постројења, или приликом планирања и изградње нових потребно је извести детаљне анализе, како техно-економске, тако и анализе утицаја на животну средину. Средином прошлог века отпочео је убрзан развој рачунара, уз истовремено појевтињење и доступност крајњем кориснику, а 21. век је столеће које ће обележити и већ обележавају значајне промене у структури рачунара, могућностима и употреби. Напредак у развоју рачунара омогућио је развој нових прорачунских метода у машинству као и другим областима. Вођење процеса и пројектовање постројења уз примену рачунара постају наша свакодневница у којој је могуће решити проблеме који су раније били нерешиви и приступало им се искључиво емпиријски.

Један од ових проблема јесте и проблем емисије штетних једињења из стационарних извора великих капацитета, односно, у нашем конкретном случају из енергетских парних котлова на угљени прах. Предмет проучавања у овој дисертацији јесте нумеричко моделирање сложених процеса у ложишту парног котла при уношењу спрашеног сорбента на бази калцијума (кречњака, или креча) директно у ложиште ради смањења емисије оксида сумпора, а циљеви дисертације су развој модела, као и нумеричка анализа и оптимизација ових процеса. Процес је познат, али, као што се може пронаћи у литератури, понашање сорбента приликом уношења у ложиште је и даље недовољно познат процес, и на стварним постројењима ефикасност процеса значајно варира између постројења исте или сличне снаге. Проблеме и узроке значајних разлика у ефикасности могуће је тражити у лошем вођењу процеса. Нумеричко моделирање нам омогућава да испитамо понашање ложишта приликом различитих организација процеса везаних за уношење сорбента у ложите, пре било каквих измена на постојећем постројењу, што је од изузетног значаја при анализама и одлучивању о правцима у којима треба вршити измене на постојећим постројењима, односно дати смернице при дизајну нових.

Развијен је софтвер за прорачун процеса у тродимензионалном котловском ложишту који укључује диференцијални модел струјнотермичких процеса, модел реакција сагоревања, реакција настајања и деструкције оксида азота, и два одабрана и оптимизована модела реакција честица сорбента са оксидима сумпора из ложишних гасова, примењена у сложеном моделу процеса у ложишту. Употребљава се  $k - \epsilon$  модел турбуленције, док се за моделирање радијационе размене топлоте користи модел шест флуксева. Двофазни гас-честице турбулентни ток се моделира применом *Euler-Lagrange*-овог поступка. Интеракција између гасовите фазе и честица се третира помоћу PSI-Cell методе, односно у транспортним једначинама за гасну фазу постоје изворни чланови којима се узима у обзир утицај честица.

Значај развоја и примене оваквог софтвера за прорачун се огледа у могућности сагледавања и анализе процеса унутар ложишта које на други начин није могуће анализирати нити предвидети понашање система другим једноставнијим методама. Познавање понашања котловског ложишта при одређеним радним режимима, уз употребу различитих горива, као и при модификацијама попут уношења сорбента у ложиште је од изузетног значаја, и представља предуслов за постизање ефикасног, поузданог и еколошки прихватљивог рада уз компромисе који из та три битна, али донекле супротстављена захтева произилазе.

Овде је посебна пажња посвећена моделирању уношења спрашеног сорбента у ложиште парног котла, с обзиром да је главни циљ провера могућности смањења емисије оксида сумпора помоћу директног уношења спрашеног сорбента у ложиште. Решавању проблема приступљено је кроз етапе, почев од провере имплементације одабраних модела реакција калцинације, синтеровања и сулфатизације честице сорбента, провере њихове стабилности и понашања у дводимензионалним каналима којима се симулирају реактори и у којима је посебно посвећена пажња поређењу резултата са доступним експерименталним резултатима ради валидације модела. Надаље су модели примењени у тродимензионалном нумеричком коду за симулацију процеса у ложишту парног котла и ту је посебно интересантно било посматрати, поред утицаја сорбента на садржај оксида сумпора, и утицај на излазне температуре и друге релевантне параметре процеса у ложишту.

У току истраживања изведена је обимна нумеричка анализа могућности уношења спрашеног сорбента у ложиште и пратећих појава. Симулирано је уношење кроз етаже

горионичких пакета, као и кроз посебне отворе изнад горионичких пакета, појединачно и у комбинацији. Анализиране су могућности процеса са више горива, са различитим топлотним моћима и садржајима сумпора и приказани су утицаји које различити радни режими и конфигурације сагоревања имају на садржаје гасовитих продуката на излазу из ложишта. Разматран је утицај великог броја радних параметара процеса одсумпоравања, као што су: место уношења и дистрибуција честица сорбента, температурска историја и време боравка честица у ложишту, локална температура гаса у ложишту, моларни однос калцијума и сумпора, локална концентрација оксида сумпора и кисеоника у ложишту, итд. Изведени су закључци о могућностима уношења спрашеног сорбента у ложиште парног котла, као и проналажењу оптималног начина уношења у зависности од радног режима котла.

Развијени софтвер је опремљен корисничким интерфејсом који омогућава једноставно задавање улазних података за предметно ложиште, што олакшава анализе, а омогућава и инжењерском кадру олакшан рад са софтвером, а у циљу сагледавања предметног процеса као могуће технологије и њене потенцијалне примене на ложиштима парних котлова.

Кључне речи: нумеричка механика флуида, спрашени сорбент, калцијум, одсумпоравање, ложиште, угљени прах, сагоревање, нумерички модел, софтвер.

Научна област: Машинство

Ужа научна област: Термотехника

УДК број: 621.182.4  
662.963.074.37  
66.074.62

# MODELLING OF FLUE GAS DESULFURIZATION PROCESS BY SORBENT INJECTION INTO THE PULVERIZED COAL-FIRED UTILITY BOILER FURNACE

## Abstract

Environmental problems during energy conversion from coal into electric power are of great importance and must be addressed as such. Before undertaking measures to improve existing utility boilers, or during planning and building new plants, detailed analysis are required, considering both techno-economic and the environmental issues. During the middle of the last century a rapid development of computers started, and at the same time computers became affordable and available to the end user. Thus, the 21st century becomes the era that will be marked by significant changes in computer structure, possibilities and use. Advances in computer development allowed for improvement of the computational methods in mechanical engineering and in other fields as well. Process control and plant design with the aid of computers are becoming everyday task and allow dealing with engineering problems that have previously been unsolvable and required empirical approach.

One of the major contributors to environmental pollution is the emission of pollutants from large stationary sources, that is, more precisely, from the pulverized coal powered utility steam boilers. The subject of research in the dissertation is numerical modelling of complex processes in utility boiler furnace during direct injection of pulverized calcium-based sorbent (limestone, or lime) into the furnace for sulfur oxides reduction, with the model development, as well as numerical analysis and optimization of the processes as the primary goals. Process is well known in theory, however, as it can be found in the literature, the sorbent behavior during the furnace sorbent injection is still not understood enough, and thus on the full-scale plants the efficiency of the process significantly varies. Problems and the causes of significant drops in efficiency can be attributed to the poor process control. Numerical modeling allows for investigation of furnace behavior during various configurations of the sorbent injection process, before any changes are made at the plant itself, which is of primary importance during analysis and decision making about directions of the changes and upgrades of the existing plants, and can give good ideas about the design of the new plants.

Developed software for three-dimensional furnace calculation includes differential model of flow and heat transfer processes, combustion reactions model, nitrogen oxides formation and destruction reactions model, and two selected and optimized models of sorbent particle reactions with sulfur oxides from furnace gasses, applied within the comprehensive model of furnace processes. A  $k-\epsilon$  model is used for turbulence modeling, while the radiative heat exchange is modelled by using the six fluxes model. Two-phase gas-particle turbulent flow is modeled with Euler-Lagrangian approach. Interaction between gas phase and particles is treated by PSI-Cell method, with transport equations for gas phase having source terms that takes into account the particles influence.

Significance of development and application of such a software for calculations is mostly notable in possibility to perceive and analyze processes inside of the furnace which cannot be analyzed and (the entire system cannot be) predicted by other means. Understanding the behavior of the boiler furnace during certain operation regimes, with the use of various fuels, as well as under modifications such as the furnace sorbent injection is of great importance, and represents a prerequisite for achieving efficient, reliable and environmentally friendly boiler operation with compromises between the three, important but to some extent opposed conditions.

Particular attention is devoted to the modeling of pulverized sorbent furnace injection, regarding that a primary goal is investigation of possibility to reduce sulfur oxides emission by means of direct sorbent injection into the boiler furnace. Problem is approached through several phases, starting with the analysis of selected models of calcination, sintering and sulfation reactions, their stability and behavior in two-dimensional simulated reactors with focus on comparison with available experimental results in order to validate the models implementation. In further study, models are implemented in three-dimensional numerical code for simulation of in-furnace processes, with particular interest to observe, beside the sorbent influence on sulfur oxides content, the influence it has on the furnace exiting gas temperature and other relevant process parameters in the furnace.

During the research, a complex numerical study of the furnace sorbent injection possibilities and accompanying phenomena was performed. Sorbent injection was simulated through the burner tiers, and through the special injection ports above the burner tiers, individually and in combination. Process was analyzed for several fuels with different heating values and varied sulfur content, and various the impacts of different operation regimes and combustion

configurations on the gaseous combustion products at the furnace exit were shown. Influence of wide range of desulfurization process parameters was considered, such as: sorbent injection position and particle distribution, particle temperature history and residence time, local gas temperature within the furnace, calcium – sulfur molar ratio, local sulfur oxides concentration, local oxygen concentration, etc. Conclusions were drawn considering possibilities for direct sorbent injection into the pulverized coal fired boiler furnace, as well as suggestions were given on optimal furnace sorbent injection configuration, depending on the boiler operation parameters.

The developed software includes a user interface for easier data input for the case-study boiler furnace, allowing for easier boiler analysis, and provides engineering staff with a tool for an efficient software control, with the purpose of considering and analyzing better the furnace sorbent injection technology and its potential applications in the utility boiler furnaces.

Keywords: computational fluid dynamics, pulverized sorbent, calcium, desulfurization, furnace, pulverized coal, combustion, numerical model, software.

Keywords: computational fluid dynamics, pulverized sorbent, calcium, desulfurization, furnace, pulverized coal, combustion, numerical model, software.

Scientific field: Mechanical engineering

Scientific subfield: Thermal engineering

UDC number: 621.182.4  
662.963.074.37  
66.074.62

## Садржај

---

Захвалница.....	5
Увод .....	1
Мотивација и значај истраживања .....	1
Предмет, научне методе и циљеви истраживања .....	5
Научни допринос дисертације и потенцијалне примене развијеног софтвера у пракси .....	7
Проблем аерозагађења и емисија оксида сумпора .....	11
Преглед доступних метода за умањење емисије оксида сумпора из парних котлова ..	12
Опис поступака уношења спрашеног сорбента у ложиште или канале парног котла и анализа процеса.....	15
Преглед постојећих модела и досадашњих истраживања .....	18
Модел реакција честица сорбента са оксидима сумпора.....	18
Поређење модела .....	20
Модел калцинације.....	20
Модел синтеровања.....	23
Модел сулфатизације .....	24
Одабир модела реакција честице сорбента за примену на решавање разматраних проблема .....	27
Математички модел процеса и нумерички код .....	31
Основне претпоставке на којима се заснива математички модел.....	31
Основне једначине механике флуида .....	34
Моделирање турбуленције.....	37
Моделирање двофазног тока и међусобног утицаја фаза .....	39
Једначине одржања топлотне енергије и масе .....	44
Основне једначине радијационе размене топлоте.....	46
Гранични и почетни услови неизотермног турбулентног тока.....	48
Размена масе у двофазном току.....	49
Моделирање хемијских реакција честица угљеног праха .....	50
Моделирање сагоревања спрашеног угља.....	51
Моделирање реакција формирања и деструкције азотних оксида .....	54
Једначине масених концентрација гасовитих компоненти .....	56
Термодинамичка и транспортна својства.....	59
Нумеричке методе и аспекти проблема .....	60
Математички опис и физичка позадина одабраних модела реакција честица сорбента при одсумпоравању у ложишту.....	64



Емпиријски <i>Borgwardt</i> -ов модел непрореагованог језгра – употребљен за крупније честице калцијум карбоната .....	67
PSS Модел ( <i>Alvfors, Lindner</i> ) из групе модела зрна – примењен за ситније честице калцијум карбоната .....	73
Шематски приказ подрутине за прорачун реакција честица сорбента .....	82
Валидација модела реакција честица сорбента у лабораторијским условима .....	83
Валидација модела непрореаговановог језгра уграђеног у нумерички код за симулацију процеса сулфатизације у реактору .....	83
Валидација модела делимично синтерованих сфера примењеног на цевном реактору .....	89
Нумеричке симулације комплексних процеса у ложишту и оптимизација предметног поступка одсумпоравања .....	96
Провера утицаја мреже на резултате прорачуна .....	100
Валидација модела процеса у ложишту .....	101
Кориснички интерфејс развијеног софтвера .....	103
Битни параметри предметног процеса одсумпоравања .....	107
Употреба честица сорбента реда величине 100 $\mu\text{m}$ .....	107
Резултати симулација.....	108
Употреба честица сорбента реда величине 10 $\mu\text{m}$ .....	110
Основни радни режими – горива и радни параметри .....	110
Поставке тест-случајева за симулације директног уношења ситних честица спрашеног сорбента у ложиште .....	111
Резултати симулација и параметарска анализа .....	112
Утицај моларног односа калцијума из сорбента и сумпора из горива.....	114
Утицај места уношења сорбента.....	116
Уношење сорбента кроз етаже горионика и уношење кроз отворе изнад горионичких пакета.....	122
Комбиновано истовремено уношење сорбента кроз етаже горионика и отворе изнад горионичких пакета .....	125
Време боравка честице сорбента унутар ложишта .....	127
Параметарска анализа утицаја садржаја сумпора у гориву.....	128
Утицај предметног поступка одсумпоравања на температуру ложишних гасова и емисију оксида азота .....	129
Утицај на енергетску ефикасност котла.....	134
Закључак.....	135
Номенклатура.....	139
Литература .....	149
Прилог .....	160

## Увод

---

### Мотивација и значај истраживања

Континуалан развој рачунарских технологија омогућава приступ значајним прорачунским могућностима већем броју корисника. Пораст употребе рачунара у свакодневном животу људи, и њихова свеопшта присутност у нашем окружењу допринели су значајном појефтињењу рачунарских компоненти, а некад незамисливе прорачуне учинили доступним великом броју крајњих корисника. Двдесет први век је постао столеће које ће обележити значајне промене у структури рачунара, њиховим могућностима, као и начинима употребе. На пример, индустрија забаве, пре свега видео игара, условила је и значајно убрзала појаву моћних графичких процесора који су способни да извршавају обимне паралелне прорачуне. Ово је познато и научно-истраживачкој заједници која у својим истраживањима има потребе за обављањем обимних, често дуготрајних и хардверски захтевних прорачуна, а који су до пре неколико година били тешко доступних институцијама са скромнијим буџетом или истраживачким тимовима.

Пратећи развој и могућности рачунарске технике, данас су могући, на личним рачунарима, прорачуни и обрада података у размерама које су некад биле везане искључиво за употребу супер рачунара и кластера. Боља доступност рачунарских ресурса води према већој улози рачунара у анализирању процеса, процесу пројектовања и доношењу одлука.

Рачунарска техника се тако користи при анализи свих енергетских постројења, од конвенционалних система који су још увек најзаступљенији, попут термоенергетских постројења за сагоревање фосилних горива, или

хидроенергетских постројења, па до нових постројења, попут ветро-генератора, постројења за прикупљање и складиштење соларне енергије, у различитим облицима, која су тек у експерименталним размерама или постоје као пилот постројења ради доказивања њиховог потенцијала и понашања у систему. Рачунари проналазе своју битну улогу од пројектовања до експлоатације постројења: почевши од анализе исплативости саме инвестиције, преко прорачуна постројења, његовог дизајна и симулација процеса, до његове израде и управљања готовим постројењем након његовог пуштања у рад.

Пројектовање нових и адаптација постојећих енергетских постројења, у овом конкретном случају уз моделирање и оптимизацију процеса одсумповања у ложишту парног котла, јесте један од примера да је уз употребу рачунара могуће брже превазићи проблеме и недоумице приликом дизајна, те број експеримената пре примене на стварном постројењу значајно умањити. Повезана примена проверених рачунарских модела и експерименталних података данас може дати кључне податке при одлучивању о вођењу постојећег постројења, с обзиром да може пружити увид у његово понашање при одређеним радним условима, пре него што се стварно постројење доведе у такав режим, и тако спречити потенцијалне проблеме и застоје у раду постројења.

Чињеница је да енергетски парни котлови имају најзначајнији удео у укупној производњи електричне енергије, како код нас, тако и у свету, и уколико се не предузимају одговарајуће мере, они представљају и један од највећих извора атмосферског загађења. У 2013. години укупан удео електричне енергије произведене употребом угља, нафте и природног гаса износио је 67,4% од укупне количине произведене енергије [1], [2], а удео самог угља је износио 41,3%. У односу на стање од пре 30 година, дошло је до повећања удела употребе природног гаса, до незнатног повећања удела угља, и до значајног пада у употреби нафте при производњи електричне енергије. Али, уколико се упореде доступни подаци о укупној светској потрошњи енергије са овим процентима, из података у [1] може се приметити да је потрошња фосилних горива приближно утростручена у односу на прве доступне податке из 1973. године.

Повећање потрошње фосилних горива неминовно доводи до повећања емисије штетних једињења у атмосферу.

Убрзан рад на развоју алтернативних извора електричне енергије, попут соларних електрана и ветро-генератора, изградња нових и побољшање постојећих хидро-електрана и електрана на биомасу могу, посматрано у дужем временском периоду, помоћи смањењу употребе фосилних горива, али једини прави конкурент капацитетима које обезбеђују фосилна горива је нуклеарна енергија, која се још увек недовољно користи и чија употреба за собом повлачи значајне ризике. Стога је потребно радити на побољшању процеса претварања енергије из фосилних горива, у смислу економске, енергетске и еколошке ефикасности, а посебно што се у блиској будућности тренд употребе фосилних горива, пре свега угљева различитог састава и квалитета по свој прилици неће битно променити, и она ће, уколико не дође до значајног развоја других извора енергије, остати сигурно још неко време најзначајнији енергетски извор са највећим уделом у светској енергетици.

С обзиром да употреба угља као извора енергије, у скорије време нема изгледа да буде замењена чистијим изворима, потребно је уложити значајне напоре ради спречавања или умањења штетних утицаја продуката сагоревања на околину. Ради тога се развијају различите технологије, које са мање или више успеха смањују емисију загађивача. За редукцију емисије оксида сумпора, на које се овај рад првенствено и односи, убедљиво најефикаснија су постројења за третман гасова применом влажних скруберских поступака, са ефикасношћу која досеже и преко 90% [3], [4], али ова постројења карактеришу веома високи трошкови при увођењу одговарајућих мера и експлоатацији [5], [6], као и највећа потрошња воде, што може изазвати додатне проблеме у њиховој примени, или онемогућити њихову примену на одређеним местима. Пример томе су локације са веома ограниченом количином воде, или специфични екосистеми где употреба доступне воде услед потенцијалног утицаја на околину мора бити сведена на минимум [5].

Овде се разматра једно од могућих решења за проблем смањења емисије оксида сумпора из парних котлова на чврсто спрашено гориво. Ради испитивања могућности смањења емисије оксида сумпора на економичан, енергетски

ефикасан и еколошки прихватљив начин, пажња је посвећена моделирању сложених процеса при уношењу спрашеног сорбента на бази калцијума у ложиште парног котла, где сорбент, у повољним условима може апсорбовати значајну количину оксида сумпора. Комбиновањем метода, и увођењем спрашеног сорбента у ложиште котла опремљеног скруберским системима, садржај овог загађивача може се знатно редуковати већ у самом ложишту, и тако смањити потребни капацитет скрубера, чиме се смањује и потрошња воде у условима где је њено очување или ограничење експлоатације битно.

Широка доступност рачунарске опреме и њена приступачност омогућила је већу заступљеност и могућности употребе бољих математичких модела са практичном применом. Ово је како у другим гранама науке, тако и у машинству допринело развоју широког спектра разноврсних модела. Развој модела у одређеној области условљава потреба за решавањем одређених експлоатационих или пројектних проблема.

Код моделирања процеса у ложиштима парних котлова могу се препознати три врсте модела и разврстати по томе ко са њима располаже и коме су намењени [7]: научноистраживачки модели које развијају научне академске институције и углавном доносе новине у погледу моделирања и често нису довољно прилагођени примени у техничкој пракси, затим модели развијени унутар фирми које се баве пројектовањем и изградњом постројења, богати великом количином експерименталних података, и емпиријских и полумемпиријских коефицијената, што даје одличне резултате за ложишта која те фирме пројектују, и на крају комерцијални програми прорачунске механике флуида, доступни ширем аудиторијуму, који имају значајну количину имплементираних модела за општу намену.

Најпоузданије резултате свакако дају сопствени модели у оквиру фирми које се баве пројектовањем и изградњом котловских постројења, али ти модели су недоступни јавности и често представљају пословну тајну. Комерцијални програми, уз уградњу одређених модела, могу се користити у анализама рада постројења без много улажења у сам начин рада програма, али питање поузданости резултата за конкретне случајеве остаје отворено с обзиром на

њихову општу намену. Научни програми углавном имају отворен код и могу се у потпуности модификовати, мада због своје сложености често изискују значајан утрошак времена за развој и адекватну проверу.

У циљу решавања конкретног проблема – моделирања струјнотермичких процеса унутар котловског ложишта са сагоревањем угљеног праха и директним уношењем сорбента, усвојен је приступ у коме је кроз развој и проширење сопственог кода створен модел који у пракси омогућава техничком особљу да задавањем улазних параметара рада котла, по завршетку симулација а као резултате предвиђања, добије преглед свих излазних величина потребних за анализу процеса.

Овде је акценат на моделирању хемијских реакција и струјнотермичких процеса при уношењу честица сорбента у котловско ложиште. Модел се ослања на претходни рад истраживача из Лабораторије за термотехнику и енергетику, Института за нуклеарне науке „Винча“, Универзитета у Београду. Као основа од које се полази користе се претходно установљени диференцијални модели процеса и појава у котловском ложишту са сагоревањем угљеног праха [7], [8], и даље се проширују са циљем анализе потенцијалних модификација процеса у котловским ложиштима ради смањења емисије оксида сумпора применом предметне методе одсумповања.

## **Предмет, научне методе и циљеви истраживања**

Предмет истраживања дисертације обухвата развој математичког модела и рачунарског кода за симулацију комплексних процеса при одсумповању ложишних гасова применом поступка додавања спрашеног сорбента на бази калцијума у ложиште парног котла за сагоревање угљеног праха, нумеричку анализу процеса и испитивање могућности оптимизације предметног поступка одсумповања.

Уочено је да постоји несразмера између потребних параметара за ефикасну примену система за одсумповање унутар ложишта и расположивих информација. Процес се одиграва у комплексним условима међусобно повезаних

симултаних процеса струјања, сагоревања и размене топлоте, па одвојено разматрање процеса одсумповања не обезбеђује поуздане резултате. Превазилажење ових проблема омогућава метода математичког моделирања дајући читав низ детаљних неопходних информација.

Из наведених разлога приступило се решавању посматраног проблема нумеричким путем. Методе које се у истраживањима користе обухватају:

- критичку анализу и међусобно поређење различитих приступа моделирању разматраних процеса и хемијских реакција; избор алтернативних модела калцинације, синтеровања и сулфатизације честице сорбента;
- валидацију развијеног модела процеса и реакција честица сорбента, поређењем са доступним референтним експерименталним или нумеричким резултатима из литературе;
- математичко моделирање разматраних комплексних процеса у предметном ложишту котла са сагоревањем угљеног праха;
- верификацију нумеричког кода;
- нумеричку студију посматраних процеса и појава у разматраној геометрији, нумеричке експерименте и параметарску анализу.

Основни циљ истраживања је развити математички модел реакција честица сорбента (које обухватају њихову калцинацију, синтеровање и сулфатизацију) и пратећих процеса, при променљивим температурама и другим реалним радним условима унутар ложишта енергетског котла и проверити модел ради могуће примене у техничкој пракси. При томе је од суштинског значаја нумерички испитати утицај аеродинамике ложишта, као и размене топлоте и масе, на реагујуће честице сорбента.

Циљеви истраживања предвиђених дисертацијом су и научни и практични, а обухватају:

- избор оптималног приступа моделирању реакција калцинације, синтеровања и сулфатизације честице сорбента на бази калцијума, проверу нумеричке имплементације и валидацију модела предметних реакција;

- развој и унапређење математичког модела и нумеричког кода за симулацију процеса при одсумповању ложишних гасова поступком уношења спрашеног сорбента на бази калцијума у ложиште енергетског котла на угљени прах, уз адекватну верификацију кода и
- нумеричку оптимизацију предметног поступка одсумповања и одговарајућих струјно-термичких процеса и хемијских реакција, са аспекта редукције емисије оксида сумпора и енергетске ефикасности процеса у ложишту котла.

### **Научни допринос дисертације и потенцијалне примене развијеног софтвера у пракси**

У оквиру ове дисертације је изведено унапређење математичких модела ложишта [7], [9]–[11], развојем и инкорпорацијом модела одсумповања, ради стварања услова за комплексну анализу еколошких аспеката рада предметног котловског ложишта. Модел је по својим особинама близак истраживачким моделима, а по сложености моделима какве примењују фирме које се баве пројектовањем котлова.

Модел је развијен ради анализе утицаја посматраног поступка одсумповања на емисију штетних једињења, као и у циљу оптимизације процеса сагоревања ради ефикасног смањења њихове емисије. Поред анализе процеса, модел даје и средњу температуру на излазу из ложишта, која представља потребан податак за извођење термичког прорачуна парног котла [12].

Примена тродимензионалног модела ложишта у прорачуну је значајна, с обзиром на комплексност процеса који се ту одвијају и које није могуће у довољној мери обухватити једноставнијим моделима. Уз то, изражена зависност процеса и реакција формирања и деструкције штетних једињења од ложишних услова намеће потребу за оптималним управљањем процесом сагоревања унутар котловског ложишта, водећи рачуна и посвећујући потребну пажњу радним условима, да би се поред поузданог и стабилног рада котла остварио и циљ смањења њиховог утицаја на околину.



Научни допринос и резултати обухватају доприносе математичком моделирању комплекса међусобно спрегнутих процеса при одсумповању уношењем честица сорбента у ложиште парног котла са сагоревањем угљеног праха у лету. Остварено је значајно проширење нумеричког кода и имплементација новог модела уз потпуно међусобно спрезање новог и постојећих модела и праћење међусобних утицаја. Модел процеса који се одигравају на честицама сорбента на бази калцијума и њиховог понашања при одсумповању унутар котловског ложишта може да пружи потребна полазна знања при ревитализацији постројења и њиховом прилагођавању постојећим регулативама.

Изведена је обимна нумеричка анализа могућности оптимизације разматраних процеса и места уношења сорбента у реалним радним условима ложишта дате геометрије. Анализиран је утицај радних параметара котла на емисију оксида сумпора и азотних оксида, као и утицај на ефикасност рада котла. Нумеричким симулацијама се добијају као резултат поља свих учествујућих променљивих – температура, брзине, концентрације и топлотни флуksеви, у функцији промене параметара битних за рад котловског постројења. Добијени резултати омогућавају анализу рада ложишта и дају идеје у којим правцима треба да иде оптимизација постројења ради побољшања енергетских и еколошких показатеља рада. Због спроведених анализа и разматрања, дисертација поред научног има и практичан карактер, с обзиром да се могу увидети конкретне мере и поступци које би било пожељно спровести на реалном постројењу, ради побољшања и постизања мањих очекиваних вредности садржаја оксида сумпора, а које је могуће симулирати помоћу модела и анализирати.

Очекивани резултати и научни доприноси су вишеструки. Ради се о приступу који је заснован на математичком моделирању читавог комплекса међусобно спрегнутих процеса при одсумповању уношењем честица сорбента у ложиште парног котла са сагоревањем угља у лету.

С једне стране, развијен је нови математички модел и нумерички код, као унапређење софтверског алата претходно развијеног у циљу симулације процеса у ложишту, са подмоделом и нумеричким поступком за симулацију процеса при одсумповању и одговарајућих хемијских реакција. Развијени подмодел процеса

који се одигравају на честицама сорбента на бази калцијума при одсумпоровању пружа и нова потребна полазна знања и искуства за будућа истраживања и моделирање апсорпције и пратећих процеса при коришћењу сорбената.

С друге стране, на основу симулација, изведена је обимна нумеричка анализа могућности оптимизације разматраних процеса и места уношења сорбента у реалним условима рада ложишта дате геометрије, са аспекта редукције емисије сумпор-диоксида, али и азотних оксида, а дат је и осврт на утицај који сам процес има на ефикасност постројења. Добијени резултати представљају основу за анализу рада ложишта у променљивим условима и повећање енергетске и еколошке ефикасности ложишних процеса. Допринос развијеног модела поред научног-истраживачког карактера се огледа и у томе што модел може да послужи за истраживања и анализу процеса у ложишту у циљу усавршавања предметне технологије одсумпоровања и бољег вођења ложишта и котлова реалних постројења. Из тога произилази практични значај дисертације, уз могућност проширења домена примене на различите геометријске конфигурације и радне услове у ложишту и снаге котлова, посебно домаћих термоенергетских постројења.

Допринос дисертације се може описати у неколико главних целина:

- Унапређени су математички модел комплексних процеса са могућношћу праћења процеса одсумпоровања честицама спрашеног сорбента и пратећи софтвер који омогућава симулацију комплексних процеса;
- Постоји боље познавање предметног технолошког поступка одсумпоровања ложишних гасова и разумевање потребе за оптималним управљањем процесом због разлика у условима који владају унутар ложишта при различитим радним параметрима;
- Изведена је нумеричка анализа и оптимизација поступка уклањања сумпор-диоксида –  $SO_2$  додавањем спрашеног сорбента (кречњака или креча) у предметно ложиште на угљени прах;
- Подизање нивоа знања и разматрања комплексних процеса који се паралелно одвијају унутар ложишта енергетских котлова са примењеним технологијама за редукцију емисије сумпор-диоксида и других загађивача.

Добијени резултати се могу употребити као основ за планирање нумеричких експеримената и мерења, истраживања у области сагоревања, анализу процеса, формирање експертских система за управљање и надзор над процесима – формирање база знања, ревитализацију и оптимизацију постројења, стицање услова за продужење радног века постројења. Уз сарадњу, могућ је и трансфер знања према индустрији, што уз потенцијалну примену, може допринети уштедама и побољшању процеса.

## Проблем аерозагађења и емисија оксида сумпора

---

Потребе за енергијом, као што је речено, савремено друштво највећим делом намирује из фосилних горива. У Републици Србији котлови на угљени прах представљају један од највећих извора загађења. С обзиром на њихову доступност, у употреби приликом производње електричне енергије најзаступљенија су чврста фосилна горива - угљеви. У зависности од порекла, у свом саставу угљеви могу имати мањи или већи садржај једињења сумпора, азота и других материја. Садржај сагорљивог сумпора у гориву утиче на емисију  $\text{SO}_2$  из котла. Емисија  $\text{SO}_2$ , као и других једињења, попут  $\text{NO}_x$  представља значајан еколошки проблем.

Значајни напори морају бити уложени да би се ове емисије смањиле у што је могуће већој мери, а свакако до вредности прописаних законским регулативама које важе на територијама држава у којима се постројења налазе. У Европској Унији овај проблем је регулисан путем директиве 2010/75/EU [13]. У домаћем законодавству, граничне вредности емисије сумпор-диоксида су регулисане Уредбом о условима за мониторинг и захтевима квалитета ваздуха („Сл. гласник РС“, бр. 11/10, 75/10, 63/13). По овој уредби усредњена гранична вредност у току календарске године за сумпор диоксид износи  $50 \mu\text{g}/\text{Nm}^3$ , док европска директива предвиђа знатно строже вредности, и у зависности од капацитета котлова, максимална гранична вредност може ићи и до  $150 \text{mg}/\text{Nm}^3$  у случају котлова снаге веће од  $350 \text{MW}_e$ . У Зеленој књизи Електропривреде Србије [14] се могу пронаћи подаци о емисијама штетних једињења, из којих се види, да с обзиром на непостојање одговарајуће опреме, ова постројења имају емисије значајно изнад прописаних, те је планирана модернизација постројења ради

задовољавања стандарда. Услед интензивне и сталне емисије загађивача у атмосферу долази до учестале појаве киселих киша, фотохемијског смога [15], као и других проблема који могу настати услед повећања потрошње фосилних горива услед пораста захтева за енергијом.

Приликом изградње старијих котловских постројења није била посвећена довољна пажња проблемима екологије и заштите животне средине, односно штетне последице сагоревања фосилних горива нису биле у довољној мери познате, да би им се посветила неопходна пажња и уложио напор ради њиховог умањења или уклањања. То је довело до тога да данас та постројења имају проблем са прекомерним емисијама загађивача у атмосферу, и тешко задовољавају прописане вредности емисије. Из овог разлога планирано је увођење метода за смањење емисије загађивача и оспособљавање постојећих постројења да задовоље постављене стандарде емисије. Више података о овоме могу се пронаћи у Зеленој књизи Електропривреде Србије [14].

### **Преглед доступних метода за умањење емисије оксида сумпора из парних котлова**

Смањење емисије  $SO_2$  из парног котла могуће је извршити применом више различитих поступака. Емисију је могуће, одређеним поступцима и до одређене границе, контролисати мерама примењеним пре самог процеса сагоревања, у току сагоревања и након сагоревања. Садржај  $SO_3$  се, с обзиром на мали удео у димним гасовима у односу на удео  $SO_2$  не моделира директно, већ се приписује укупном  $SO_2$  и моделира заједно са њим. Овакав приступ је оправдан, с обзиром да удео  $SO_3$  у односу на  $SO_2$  мали, и да се додатно разлаже у присуству катализатора [16].

Поступци за контролу емисије пре процеса сагоревања се заснивају на контролисаном замешавању угљева са високим и ниским садржајем сагорљивог сумпора [17]–[19], што умањује садржај  $SO_2$  у димним гасовима, али глобално гледано, сав сагорљиви сумпор из горива опет доспева у атмосферу, уколико се не одстрани другим методама. Поред тога, смањење емисије замешавањем угљева често није довољно да се оствари прописано смањење емисије. Такође могућ је и

био-хемијски третман угља [17], [20], [21], што у великим размерама није практично, с обзиром на време потребно за такав третман и време које угљь проведе у транспорту и складиштењу од копа до котла.

У току процеса сагоревања, смањење емисије  $SO_2$  могуће је остварити уношењем спрашеног сорбента [4], [22]–[27], најчешће сорбента на бази калцијума, као што су кречњак ( $CaCO_3$ ), креч ( $CaO$ ), или хидратисани (тј. гашени) креч ( $Ca(OH)_2$ ), у зоне ложишних гасова са погодним температурама. Суви поступци, у које спада и уношење честица сорбента у ложиште парног котла, имају мању ефикасност, али су знатно економичнији и нарочито погодни при ревитализацији и продужењу радног века постројења, а економски оправдани обично код енергетских блокова релативно мањих снага. Процес одсумповања овим поступком заснива се на реакцији  $SO_2$  са честицама спрашеног сорбента, које се одстрањују са летећим пепелом у уређајима за отпашивање. Кречњак и доломит су најдоступнији, па и најчешће коришћени сорбенти. Спрашени сорбент се у ложиште може уносити директно кроз посебне отворе изнад зоне пламена, или са угљеним прахом кроз линију за гориво. У ову групи метода би се могла сврстати и редукација  $SO_2$  услед утицаја летећег пепела код угљева који у саставу минералних материја имају једињења калцијума [28], [29]. Проблем са редукацијом  $SO_2$  помоћу летећег пепела је што само одређени угљеви, са одређених копова у свом саставу имају значајан садржај једињења калцијума.

Такође одсумповање димних гасова је могуће накнадно извршити у конвективном каналу уношењем сорбента или у скруберима посебно намењеним за одсумповање кроз које се воде димни гасови. У групу поступака за смањење емисије  $SO_2$  након процеса сагоревања спадају скруберски поступци [3], [30]–[33]. На самом крају гасног канала могуће је применити суве или влажне скруберске поступке [3], [17], [30], [33]–[35], код којих се постављају скрубери, кроз које се димни гас преусмерава кроз скрубери и у њему се меша са сорбентом на нижим температурама (приближно  $200\text{ }^\circ\text{C}$ ) од оних које владају у гасном каналу или ложишту. Суви скруберски поступци представљају групу поступака код којих се спрашени сорбент меша са димним гасовима директно, док влажни скруберски поступци чине групу поступака где се помоћу воде сорбент распршује у струји

гасова. Најчешће примењивани су влажни скруберски поступци, који спадају у групу најефикаснијих процеса и омогућавају скоро потпуно уклањање  $SO_2$ , али уједно су економски, експлоатационо и технички, а посебно економски, најзахтевнији. Део уложених средстава код ових процеса може се повратити пласирањем гипса који се добија овим процесима даље на тржиште [35]. Примена скрубера за собом повлачи значајне падове притиска у гасном тракту котла, а самим тим додатно повећава сопствену потрошњу постројења за погон вентилаторског постројења. Такође, инсталација скрубера и пратеће опреме на постојећим постројењима често може бити отежана, услед недостатка простора за постројења. Услед значајне потрошње воде, која може представљати ограничен ресурс и када је пожељно смањити њену потрошњу, влажне скруберске поступке могуће је комбиновати са директним уношењем сорбента у ложиште котла, у оквиру влажних скруберских технологија са смањеном потрошњом воде [5], [36], [37]. Због наведених разлога, погоднија могућност одсумповања уз знатно мање трошкове, у многим случајевима је директно уношење спрашеног сорбента у ложиште парног котла, или комбинација ових метода.

Истраживања и извештаји о ефикасности скруберских поступака се могу пронаћи за велики број котлова, са различитим горивима и конфигурацијама сагоревања. На пример извештај [38] покрива добрим делом до 1977. године употребу скруберских поступака на парним котловима у Јапану. У том извештају се види, поред добрих утицаја на смањење емисије и проблем повећања сопствене потрошње постројења, што за последицу има мању количину енергије коју је могуће испоручити потрошачима. Са друге стране, у књизи *Clean Coal Technologies* [2] наводи се да је ефикасност поступка директног уношења сорбента у ложиште између 30% и 90%. На основу уочених великих разлика унутар опсега ефикасности овог поступка може се закључити да постоји огромна несразмера у начину имплементације на појединачним постројењима, што говори о недовољном разумевању процеса и потреби за његовом оптимизацијом. Широки опсег ефикасности процеса се појављује код још неколико аутора [39], [40], и код свих се може приметити да исти начин управљања поступком на различитим постројењима даје веома различите резултате у погледу ефикасности. Уколико се посматра процес са добро оптимизованим постројењем, енергетски и економски

показатељи процеса могу бити очекивано бољи и могу се наћи у рангу скруберских поступака. Препознавање потребе за решавањем експлоатационих проблема и нарочито оптимизацијом процеса условило је испитивања процеса на постројењима у реалној размери. Експериментални приступ проблему може се пронаћи у [24], [36], [41]–[44], док приступ помоћу нумеричког моделирања процеса се појављује у нпр. [42], [45]. Из наведених радова се види да су препознате добре могућности процеса, али се такође примећује и потреба за оптималним вођењем процеса на котловском постројењу. Предуслов овоме је познавање процеса унутар ложишта. Изазов представља начин уношења сорбента у ложиште, односно проналажење параметара при којима ће смањење емисије бити најбоље, што у случају комбинације са скруберима значи мању потрошњу енергије и воде на скруберима. Нумеричко моделирање процеса представља добар приступ испитиваном проблему, и као такво је значајан алат за анализу и оптимизацију предметног поступка одсумповања.

### **Опис поступака уношења спрашеног сорбента у ложиште или канале парног котла и анализа процеса**

Поступци одсумповања уношењем спрашеног сорбента у ложиште или гасне канале се могу груписати по месту уношења, а посебно са освртом на локалну температуру гасова у месту уношења. Тако уношење у ложиште представља уношење сорбента на местима са веома високом температуром – и преко 1000°C, па је физички и хемијски гледано је најсложенији процес. Уношење сорбента у конвективни канал одвија се у средњем опсегу температура – око 600°C. Сорбент се најчешће уноси у виду праха или водене суспензије у ложишне или димне гасове.

Уколико посматрамо могуће поступке по месту уношења честица сорбента у гасном тракту котла, прва од могућности је уношење сорбента директно у ложиште – FSI<sup>1</sup> [4], [22]–[27]. Сорбент је могуће унети директно кроз горионике, са угљеним прахом, или кроз посебне отворе изнад горионика, посебно

---

<sup>1</sup> FSI – Furnace Sorbent Injection



пројектоване за ову намену. Начин уношења, односно, одабир да ли ће уношење бити кроз горионичке пакете или кроз посебне отворе, као и положај тих отвора највише зависе од температуре пламена у котлу, и начин уношења се оптимизује према максималним температурама којима је пожељно изложити сорбент приликом уношења, што захтева детаљније анализе и оптимизацију самог процеса. Као сорбенти, у овом процесу се најчешће користе  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  [46] и  $\text{CaCO}_3$  [47]–[50], као и доломити [49], [50] различитог састава и друга минерална једињења која су мање заступљена. Највећа ефикасност издвајања оксида сумпора постиже се погодном дисперзијом честица сорбента одговарајуће гранулације и мешањем са продуктима сагоревања за време оптималног времена боравка у зонама ложишта које одговарају тзв. температурном прозору („*temperature window*“), који у случају сорбената на бази калцијума износи  $950 - 1250 \text{ }^\circ\text{C}$  [24], [41], без деактивације сорбента услед синтеровања. Изнад температурне границе, настали  $\text{CaSO}_4$  може бити нестабилан. Неопходно је испитати и утицај наслага на зидовима услед примене сорбента на интензитет размене топлоте у котлу. Све наведене параметре процеса је потребно оптимизовати, што довољно говори о сложености овог поступка [51].

Друга могућност је уношење сорбента у конвективни гасни канал – DSI<sup>2</sup> [30], [33], [52], [53], где сорбент на нижим температурама реагује са димним гасовима. Приликом уношења спрашеног сорбента на бази калцијума у гасни канал, потребна је посебна припрема сорбента – претходно излагање повишеним температурама, ради развоја реактивне (унутрашње) површине честице, с обзиром да због нижих температура унутар канала и кратког времена боравка није могуће остварити брз развој реактивне површине честица у самом каналу. Такође сама брзина реакције и степен искоришћења сорбента је значајно мањи, те је потребно користити рециркулационе и регенеративне процесе, ради бољег искоришћења сорбента. Ради повишења ефикасности одсумповања постоје и решења са комбинованим уношењем спрашеног сорбента како у ложиште тако и у конвективни канал, у оквиру тзв. хибридних система [5], [17], [30].

---

<sup>2</sup> DSI – Duct Sorbent Injection

Добра особина поступка уношења сорбента у ложиште и/или у канал огледа се и у томе што омогућавају комбиновано деловање са другим поступцима одсумпоравања – добар пример овакве праксе су LIFAC<sup>3</sup> системи [5], [36], [37], код којих се сорбент убацује прво директно у ложиште – FSI, где долази до брзог развоја реактивне површине сорбента, истовремено реагује са SO<sub>2</sub>, и смањује њихову концентрацију. Сорбент се затим може на излазу из ложишта рециркулисати и регенерисати и користити даље у посебном реактору за активацију непрореагованог сорбента и додатну редукацију SO<sub>2</sub>. У другим варијантама реактора, фино спрашени сорбент (нпр. креч) уводи се као хидромешавина у виду финих распршених капљица у посебно уграђени реактор, на тракту димног гаса иза котла, а испред филтера. Овакав дизајн инсталације омогућава употребу реактора мањег капацитета, уместо класичних скрубера, а самим тим смањује потребу за потрошњом воде, што је битно са еколошког аспекта, а на местима са ограниченим приступом свежој води, омогућује веће редукације, с обзиром на техничка ограничења локалитета.

Даље оптимизације процеса односе се на измене у врсти сорбента који се користи (а које зависе од локалне географске доступности одређеног материјала), и што је такође битно, дистрибуције – вишестепеног уношења сорбента ради додатне контроле процеса, што је условљено обликом и процесима унутар сваког индивидуалног ложишта и обавезно се разматра пре инсталације постројења.

---

<sup>3</sup> LIFAC – Limestone Injected into the Furnace with Activation of untreated Calcium oxide

## Преглед постојећих модела и досадашњих истраживања

---

Ради бољег увида у постојеће моделе и досадашња истраживања у овој области извршен је детаљан преглед литературе. Овде су приказани изводи и главни закључци из битних радова који се баве тематиком моделирања реакција сорбента на бази калцијума са  $SO_2$ . Сама проблематика моделирања реакција честица сорбента и реакција честица уопште није нова, али до напретка рачунара у погледу брзине процесора и количине радне меморије могућност њене примене у пракси је била знатно ограничена. Данас су доступни модели различити по сложености и перформансама, који су ретко или нису примењивани у спреси са CFD<sup>4</sup> кодовима за предвиђање процеса у реалним постројењима. С обзиром на природу посматраних реакција и њихову значајну зависност од локалног стања флуида дуж трајекторија праћења честица, од великог је значаја моделе реакција честице повезати са моделираним процесима унутар реалних постројења, пошто се на тај начин може добити стварна слика и предвидети ток и ефикасност процеса који се одвијају при различитим организацијама рада котловског постројења.

### Модели реакција честица сорбента са оксидима сумпора

Прегледом доступне литературе могуће је пронаћи математичке поставке више различитих модела реакција честица сорбента на бази калцијума са  $SO_2$  из димних гасова. Модели би се оквирно могли поделити у две групе. Прву групу чине полуемпиријски модели који описују хемијску кинетику честице, према полуемпиријским једначинама, добијеним анализом експерименталних резултата

---

<sup>4</sup> CFD – Computational Fluid Dynamics

и искуственим знањима аутора. Неки од представника ове групе модела су *Borgwardt*-ови полуемпиријски модели [47], [48] за релативно крупне и ситне честице сорбента (у смислу да су базирани на параметрима мереним за честице одређеног реда величине) и *Makarytchev*-љев модел [54]. У другу групу спадају модели који детаљније описују унутрашњу структуру честице сорбента, продор гасовитог реактанта у њу и процесе унутар саме честице. Различити аутори користе приступе попут моделирања чврстог материјала у честици [55], или моделирања пора[55]. Покушавају једначинама модела да квантификују и осредње стање унутар честице [48], [56], или да по појединачним слојевима унутар честице одреде концентрације реактаната и ток реакције[46], [50], [57], [58]. Постоји више различитих модела, али им је свима заједничко да покушавају да опишу развој унутрашње површине честице и продор SO<sub>2</sub> по запремини честице, и да симулацијом овог процеса одреде брзину реакције. Овакве моделе можемо пронаћи у радовима *Alvfors*-а [49], [50], *Lindner*-а [55], *Milne*-а [57]–[59], *Li*-а [60], *Silcox*-а [61] и *Damle*-а [62]. Осим ових модела могу се примењивати и тзв. мрежни модели[55], код којих је у односу на модел пора „замењена“ улога пора и чврстог материјала. Односно, претпоставка је да структуру честице чине цилиндри од чврстог материјала, а око њих се налази простор испуњен порам, док код модела пора цилиндричан облик имају поре, а чврст материјал их окружује.

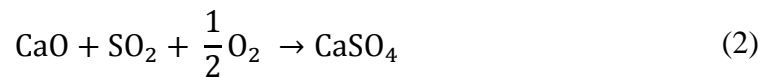
Свим моделима је заједничко разматрање реакција у два корака – калцинација са синтеровањем као први корак и сулфатизација честице као други који директно зависи од првог, сматрајући да се, у суштини, сва три процеса одвијају паралелно, зависно од локалних услова. У зависности од сорбента који се посматра (CaCO<sub>3</sub> [48]–[50], [63], [64] или Ca(OH)<sub>2</sub> [46]) ендотермна реакција калцинације се моделира према једначини (1):



Приликом калцинације, која се одиграва веома брзо на повишеним температурама, долази до развоја унутрашње површине честице, уз знатно

повећање порозности честице CaO. Боравак честице на вишим температурама убрзава сам процес калцинације, међутим, на повишеним температурама, поред калцинације долази и до синтеровања честица [47], [50], односно спајања пора унутар честице, што је нарочито изражено уколико се прекорачи одређени температурни праг (обично 1000 – 1100 °C [17]), након ког синтеровање постаје веома интензивно. Услед интензивног синтеровања, долази до значајног губитка унутрашње површине честице. Губитак унутрашње површине представља кључни утицајни параметар на брзину сулфатизације који се мора пратити и у што је могуће већој мери избећи.

Реакција сулфатизације (апсорпције), се моделира према једначини (2), [46], [48]–[50], [63], [64]:



У овој егзотермној реакцији честица CaO реагује са SO<sub>2</sub> и кисеоником из гаса који је окружује и при тој реакцији формира се CaSO<sub>4</sub> (калцијум сулфат) уз смањење емисије SO<sub>2</sub> и утрошак O<sub>2</sub>. Да би сулфатизација могла да се одвија, у гасној запремини где бораве честице сорбента, поред присуства SO<sub>2</sub> нужно је и присуство O<sub>2</sub>.

## Поређење модела

У овом одељку ће бити укратко дато поређење различитих модела доступних у литератури, као и ограничења примене модела у погледу величина честица, температура и других утицајних параметара процеса.

## Модел калцинације

Добар преглед различитих модела калцинације као и синтеровања дао је *Stanmore* [65] који је на једном месту прикупио значајну количину података о примењеним моделима код различитих аутора.

*Borgwardt* [47] је брзину калцинације одређивао за услове који владају у флуидизованом слоју при температурама у опсегу од 516 °C до 1000 °C и дао функционалну зависност тренутне брзине реакције калцинације у зависности од температуре у облику *Arrhenius*-ове једначине:

$$R_c = R_{c,0} e^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (3)$$

Ова једначина је примењива у области температура блиских температури на којој је мерена брзина реакције. У температурном опсегу од 800 °C до 975 °C, у флуидизованом слоју аутори *Dennis* и *Hayhurst* [16], [65] су мерењима дошли до закључка да у овом опсегу не постоји значајан утицај температуре на брзину калцинације, што води до закључка да је у том опсегу енергија активације  $E_a$  блиска нултој енергији. Сличан закључак је извео и *Borgwardt* [65] за честице пречника мањег од 90  $\mu\text{m}$ . *Dennis* и *Hayhurst* су брзину калцинације за свој модел дефинисали у облику, који је приказао *Stanmore* [65]:

$$R_c = k_c (P_{eq} - P_i - c \cdot P) \quad (4)$$

где  $P_{eq}$  представља равнотежни притисак разлагања компоненте,  $P_i$  парцијални притисак  $\text{CO}_2$  у смеши,  $c$  константу, и  $P$  представља укупан притисак.

*Silcox* [61] је брзину калцинације повезао такође са парцијалним притиском  $\text{CO}_2$  на површини на којој се одвија реакција и равнотежним притиском, без утицаја тоталног притиска  $P$ , према следећем изразу:

$$R_c = k_D (P_{eq} - P_i) \quad (5)$$

Овде се коефицијент  $k_D$  и равнотежни притисак  $P_{eq}$  одређују из израза *Arrhenius*-овог облика. У изразу за  $R_c$  вредност  $k_D$  се добија према једначини [65]  $k_D = 1,22 \exp(-4026/T)$  и, иако има нешто нижу енергију активације, када се преведе на облик упоредив са претходним приказује сличну температурну зависност као и модели других аутора. *Hu* и *Scaroni* [66] су у зависности од релације између

парцијалног притиска увели корекциони фактор којим се множи коефицијент  $k_c$  (6):

$$\begin{cases} (P_{eq} - P_i)/P_{eq} & | & P_{eq} \cdot 10^{-2} < P_i < P_{eq}, \\ 1 & | & P_i \leq P_{eq} \cdot 10^{-2} \end{cases} \quad (6)$$

Овако уведена корекција је потврђена као исправна од стране *Barker*-а [67], с обзиром да концентрација  $CO_2$  нема утицаја уколико је њена вредност значајно мања од вредности равнотежног притиска. *Khinast* [68] је модел засновао на експоненцијалној зависности:

$$R_c = k_c e^{-coef \frac{P_i}{P_{eq}}} \quad (7)$$

*García-Labiano* је разматрао и упоредо анализирао већину горе поменутих израза у свом раду [69]. *Milne* [59] у свом моделу калцинације користи модификовани модел смањења непрореагованог језгра –  $SCM^5$ , чији се пречник смањује током реакције, а густина остаје иста. Модификовани модел је подразумевао увођење средње величине зрна  $d_0$  [m], која фигурише у једначини за степен калцинације заједно са коефицијентом брзине реакције калцинације:

$$X = 1 - \left( 1 - \frac{k}{d_0^{0,6} t} \right)^3 \quad (8)$$

где се сама брзина реакције  $k$  одређује слично као код *Borgwardt*-а и других аутора који користе *Arrhenius*-ов облик једначине да би описали зависност од локалне температуре у посматраном тренутку времена. *Alvfors* у свом моделу калцинације [50] користи претпоставку да је профил температура по пресеку веома мале честице (величине приближно 10  $\mu m$  и мање) униформан, на основу чега је закључио да је и сам процес калцинације униформан по дубини честице. Оправданост ове претпоставке се заснива на чињеници да је време за које се температурни профил унутар честице уједначи неколико редова величине мање

---

<sup>5</sup> SCM – Shrinking Core Model

од времена трајања осталих процеса, што је *Fan* експерименталним мерењима показао као тачно [46]. Као основну једначину за калцинацију кречњака користи *Borgwardt*-ов модел, развијен за ситне честице – једначина (9):

$$\frac{d(N_{\text{CaCO}_3})}{dt} = -k_c N_{\text{CaCO}_3} S_{\text{CaCO}_3} M_{M, \text{CaCO}_3} \quad (9)$$

Коефицијент брзине реакције у овом моделу такође користи *Arrhenius*-ов облик једначине који је могуће пронаћи у литератури, а овде је њен облик приказан у оквиру једначине (3), према којој се аналогно записује за величину  $k_c$ .

### Модел синтеровања

У моделима из доступне литературе могу се пронаћи два модела синтеровања. Први, који су дефинисали *German* и *Munir* [70] и који примењују *Borgwardt* [71] и *Alvfors* [50], а који претпоставља да се честица састоји од ситних зрна сферичног облика у међусобном контакту, која се у одређеној мери преклапају. На местима преклопа се образује област, која, услед транспорта материје, задебљава пропорционално пречнику задебљања честице и првобитном броју контактних тачака. Овај модел се описује помоћу следеће једначине [70]:

$$\left(\frac{S_0 - S}{S_0}\right)^\gamma = k_s t \quad (10)$$

Вредности коефицијената  $\gamma$  и  $k_s$  се везују за парцијалне притиске  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}_2$  и температуру гасова. Величине  $S$  и  $S_0$  представљају тренутну унутрашњу реактивну површину честице, односно почетну. Други модел синтеровања дефинисао је *Nicholson* [72] а на проблем синтеровања честице сорбента на бази калцијума га је применио *Silcox* [61] и заснива се на једначини:

$$\frac{dS}{dt} = -k_s (S - S_{as})^2 \quad (11)$$

Код овог модела је вредност коефицијента  $k_s$  везана само за парцијални притисак  $\text{CO}_2$  и температуру гасова, али се не користи стандардан *Arrhenius*-ов облик



једначине, већ су примењена емпиријска искуства при одређивању веза између утицајних параметара. Проблем код овог приступа може представљати потреба за познавањем асимптотске вредности површине  $S_{as}$ , која представља ону теоријску вредност површине коју сорбент може достићи у идеалним условима.

### Модели сулфатизације

Модели сулфатизације – реакције између чврсте и гасовите фазе, попут модела који се могу пронаћи код *Borgwardt*-а [48], [63], [73], *Kocaefe*-а [74], *Ramachandran*-а [75], [76], *Doraiswamy*-а [77], *Milne*-а [57], [58], *Alvfors*-а [49], [50], *Lindner*-а [55], *Li*-ја [60], *Fan*-а [46], [64] и других, могли би се начелно поделити у три групе према начину на који се посматра структура честице [78]: модел непрореагованог језгра, модел зрна и модел пора.

Модел непрореагованог језгра – USCM<sup>6</sup> за реакцију сулфатизације се може пронаћи у литератури попут књиге од *Levenspiel*-а [79]. Претпоставка је да постоји јасна граница између непрореагованог језгра CaO и сулфатног омотача честице CaSO<sub>4</sub>. Током реакције претпоставља непромењивост пречника честице сорбента, већ се трансформише њена унутрашња структура. Исте претпоставке и сличан приступ моделирању реакције користили су и *Ramachandran* [75], [76], *Doraiswamy* [77], *Szekely* и *Evans* [80] и *Borgwardt* [48]. *Borgwardt*-ова формулација за брзину реакције код оваквог модела дата је једначином (12), која подразумева да брзина сорпције зависи од фактора ефективности и сулфатног оптерећења честице, чиме се ефективно узима у обзир утицај синтеровања на брзину реакције.

$$r = \frac{1}{W} \frac{dn'}{dt} = \frac{\eta}{\rho} k_s C^m \quad (12)$$

Уз мање варијације код свих модела се у основи може пронаћи оваква једначина, која изоставља дубље разумевање процеса унутар честице и само посматра крајње резултате на граници између честице и гаса. Модел из ове групе не дају много података о самом процесу који се догађа унутар честице, већ квантификују

---

<sup>6</sup> USCM – Unreacted Shrinking Core Model

продукте тог процеса. Типично, ово је полуемпиријски приступ, који се користи у склопу повезивања синтеровања и калцинације, уз претпоставку да је калцинација тренутна [48]. Математички модели који стоје иза оваквих приступа су једноставни и често не захтевају претерану рачунарску снагу.

Модел зрна – GM<sup>7</sup> и модел делимично синтерованих сфера – PSSM<sup>8</sup> који су веома слични, а између којих је најзначајнија разлика у начину на који дефинишу распоред зрна унутар честице, у основи претпоставља да се честице састоје од зрна, која су прекривена омотачем од продуката реакције, а око којих су шупљине – поре. С тим да PSSM уводи додатну претпоставку да су зрна у међусобном контакту, те да постоји међусобно преклапање зрна. Модел можемо пронаћи у употреби код *Alvfors*-а [49], [50], *Lindner*-а [55], *Kocaefe*-а [74] и других. Брзина реакције појединачних зрна је контролисана механизмом сличним као код модела непрореагованог језгра, и зависи од дифузије кроз шупљине, дифузије кроз сулфатни омотач и брзине реакције на површини непрореагованог језгра сваког зрна. Током реакције, приликом трансформације CaO у CaSO<sub>4</sub> долази до пораста зрна и порозност честице се смањује. Пречник честице сорбента се не мења значајно, док промене трпе појединачни пречници зрна унутар честице. То се одражава на порозност честице и њену густину. Овде је у изводу дата једначина за брзину реакције сумпор-диоксида у квазиравнотежном стању, док су детаљи о овом моделу дати у каснијем тексту:

$$r_{\text{SO}_2} = \frac{C_{\text{SO}_2}}{\frac{1}{kVS_2} + \frac{L}{D_s S_{\text{avg}}}} \quad (13)$$

Механизам реакције подразумева праћење утицаја дифузије реактанта кроз саму честицу, као и брзине реакције која се одвија на површини зрна.

Модел зрна су током година развијали *Szekely* и *Evans* [80], *Pigford* и *Sliger* [81] – претпоставка баланса масе гасне фазе у сферној честици, *Hartman* и *Coughlin* [82] – смањење порозности услед моларне запремине продуката реакције – сулфата.

---

<sup>7</sup> GM – Grain Model

<sup>8</sup> PSSM – Partially Sintered Spheres Model

Између две претходне групе модела налази се *Borgwardt*-ов [63] модел за ситне честице калцијум-хидроксида. Коефицијент брзине реакције сулфатизације у моделу обликом и једноставношћу одговара моделима непрореагованог језгра, узимајући у обзир реакцију честице као целине у проширеном облику *Arrhenius*-ове једначине, где је придодата зависност од парцијалног притиска оксида сумпора у околини честице и унутрашње реактивне површине честице:

$$k_d = 2,65S^2 P_{SO_2}^{0,64} \exp\left(-\frac{36600}{RT}\right) \quad (14)$$

Овде је сама брзина сулфатизације такође изражена у функцији унутрашње површине честице која се добија сложенијим моделом, сличним моделу калцинације и синтеровања који се може пронаћи код *Alvfors*-а [50].

Модел пора –  $PM^9$ , који припада тзв. структуралним моделима [55], користи такође чињеницу да је запремина порозне честице испуњена порама. Током одвијања реакције долази до смањења пора што утиче на целокупну брзину реакције. Механизми који контролишу целокупну брзину су дифузија гасне фазе кроз поре, дифузија кроз сулфатни омотач на зидовима пора и реакција на граници реактанта и омотача. Основна разлика модела пора у односу на модел зрна је у приступу моделирања геометрије честице. Модел зрна је заснован на посматрању сферних зрна унутар честице – димензија, непрореагованог и прореагованог дела и промена у међусобном преклапању, а само постојање пора се индиректно посматра, док се приликом моделирања пора у овом моделу посебна пажња посвећује опису поре, њеном облику и структури, односно промене унутрашње структуре честице се прате кроз промене које трпе поре – промене у геометрији и саставу материјала зида који ограничавају пору, и самим тим чврста материја у честици се посматра индиректно. *Szekely* и *Evans* [80] су приказали један од првих модела пора, са порама униформног радијуса и без праћења структурних промена честице. *Ramachandran* и *Smith* [75] су увели модел праћења једне поре који подразумева и феномене зачепљења пора током реакције. Приступ моделирању пора са стохастичком расподелом (прецизније „pores with

---

<sup>9</sup> PM – Pore Model

random intersections“) употребили су *Lindner* и *Simonsson* [55], и *Bhatia* и *Perimutter* [78]. Моделирањем дистрибуције величине пора бавили су се *Christman* и *Edgar* [83], и *Kocaeffe* [74]. *Simons* и *Garman* [84], [85] су развијали модел код кога се развој пора одвија као гранање стабла од корена ка крајевима грана. Поред набројаних постоји значајан број сличних варијанти ових модела.

### **Одабир модела реакција честице сорбента за примену на решавање разматраних проблема**

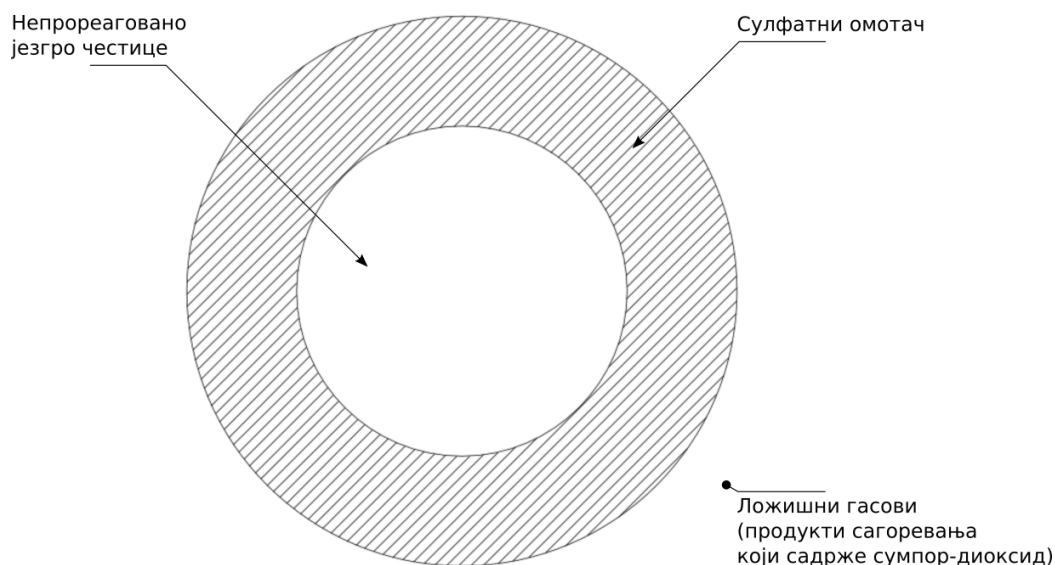
Проблем налажења компромисног решења приликом примене одређених модела је изузетно сложен. Модели, са порастом комплексности доносе већу захтевност у смислу потребе за рачунарским ресурсима, а истовремено доносе нове потенцијалне нестабилности. Једноставни модели, са једноставном хемијском кинетиком, попут [48] углавном не доносе значајно повећање трајања прорачуна, али понекад не могу описати стварно понашање и интеракцију гаса и честица који међусобно реагују, те не могу са задовољавајућом тачношћу предвидети процес који се одвија у реалним условима. Са друге стране, сложенији модели који решавају развој реактивне површине честице, па на развијеној површини примењују поједностављен модел сулфатизације [63] могу боље испратити ток реакција. Најсложенији су модели који поред развоја површине акценат стављају на унутрашњу структуру и промене унутар саме честице попут [50] који честицу дели по слојевима и у сваком слоју решава тренутни степен сулфатизације и брзину реакције. Такав модел свакако може имати одлично слагање са експерименталним подацима, што је *Alyfors* и показао у наведеном раду. С обзиром да решавање свих једначина по свим слојевима унутар честице изискује значајне рачунарске ресурсе, што је посебно проблематично у ситуацијама када је потребно решити исте једначине за велики број честица и при томе довољно пута поновити тај прорачун да би се обезбедила тачност прорачуна целокупног модела ложишта котла, долази се до проблема значајног времена трајања прорачуна. Модел је из тог разлога поједностављен [86] и уместо решавања појединачних слојева, са локалним концентрацијама користи једну, репрезентативну концентрацију приликом решавања једног, репрезентативног слоја у честици

сорбента. Такав приступ се показао као добар до момента затварања пора. Пошто време боравка честице у реалном ложишту износи свега неколико секунди, док одступања почињу да се појављују тек након неколико минута реакције, овакав приступ је оправдано користити зарад вишеструког убрзања прорачуна котловског ложишта, без губитка тачности коначног резултата.

Модели зрна су по својој формулацији физички донекле ближи правој природи процеса, међутим као и модели пора захтевају познавање структуре саме честице и великог броја експериментално добијених података о честици. Са друге стране, модели непрореагованог језгра су једноставнији и захтевају знатно мање података, јер не разматрају саму унутрашњу структуру честице, већ се базирају на посматрању макроскопских ефеката реакције. Овде су за примену у ложишту реалног котловског постројења изабрана два модела, с обзиром на величину честица сорбента, тачност нумеричких предвиђања, али и време трајања симулација и потребне рачунарске ресурсе.

*Borgwardt*-тов модел [48] за крупније честице користи поједностављену хемијску кинетику реакције сулфатизације, а калцинацију и синтеровање узима у обзир само преко емпиријских фактора. Развијен је за крупније честице сорбента, реда величине 90 – 1300  $\mu\text{m}$ , и доступни су подаци за ниже температурне опсеге. Крупније честице сорбента су карактеристичне за сагоревање у флуидизованом слоју, али је потребно урадити и њихову анализу при уношењу у ложиште за сагоревање у лету да би се боље разумели проблеми који се јављају при уношењу крупнијих фракција спрашеног сорбента – попут мале искоришћености сорбента и слабије редукције  $\text{SO}_2$ . Разматрани *Borgwardt*-тов модел са поједностављеном хемијском кинетиком је класичан представник модела непрореагованог језгра. Овај модел претпоставља да је честица сферичног облика и да фронт реакције напредује од спољњег омотача честице ка средини. У првом временском кораку сулфатизације честица се састоји искључиво од  $\text{CaO}$  и претпоставља се да је потпуна калцинација постигнута пре почетка реакције. Како реакција одмиче у времену, услед реакције сулфатизације долази до појаве спољњег омотача који се састоји од  $\text{CaSO}_4$  и непрореагованог унутрашњег језгра од чистог  $\text{CaO}$  које се непрестано смањује, до тренутка кад реакција стаје, односно успорава у тој мери

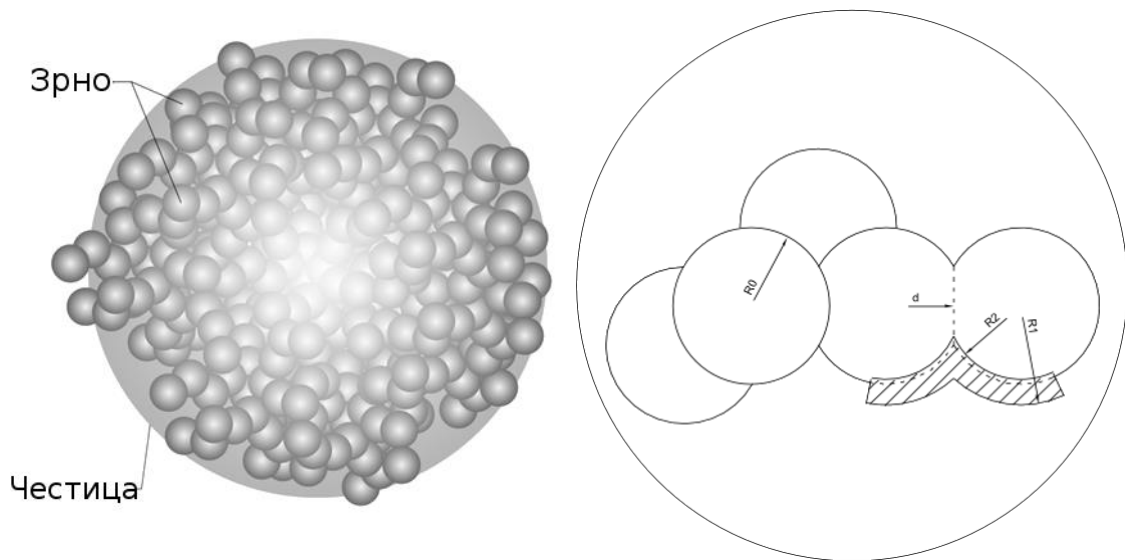
да се може сматрати да је стала. Слика 1 приказује модел честице какав претпоставља *Borgwardt*-ов модел сулфатизације.



Слика 1 *Borgwardt*-ов модел сулфатизације честице сорбента, типа модела непрореагованог језгра

Други одабрани модел за анализу предметног поступка одсумповања у ложишту парног котла је *Alvfors*-ов модел паралелне калцинације, синтеровања и сулфатизације [49], [50] који се заснива на моделу делимично синтерованих сфера. Модел у временским корацима посматра процес калцинације честица  $\text{CaCO}_3$  и синтеровања и прорачуном добија степен развоја унутрашња реактивне површина честице у сваком временском тренутку у функцији од топлотне историје, односно температура којима је честица била изложена на путањи којом се кретала током времена њеног боравка у ложишту. Након што је позната тренутна унутрашња површина честице, модел је узима у обзир приликом одређивања степена сулфатизације честице у датом временском тренутку. Процеси калцинације и синтеровања, као и процес сулфатизације теку паралелно, односно у сваком временском кораку се врше прорачуни сва три процеса. Претпоставка модела је да се честица сорбента састоји од ситних сферичних зрна распоређених по запремини честице која су у међусобном контакту и код којих постоји одређено преклапање. Овакав модел честице је заснован на моделу *German* и *Munir* [70], који су први разматрали делимично синтероване честице.

Простор између зрна је порозна средина. Модел је уз корекције могуће применити и на  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  као сорбент. Слика 2 приказује унутрашњу структуру овакве честице, са преклапањем између зрна и њиховим растом услед дебљања сулфатног омотача.



Слика 2 Alvfors-ов модел – облик и унутрашња структура честице сорбента

## Математички модел процеса и нумерички код

---

Одабир и поставка ваљаног математичког модела за примену у нумеричким симулацијама сложених и спрегнутих процеса у тродимензионалном моделу котловског ложишта представља посебан проблем. Модел мора да задовољи више услова који су често супротстављени, као што су тачност прорачуна, стабилност и брзина извршавања кода. У овом конкретном случају моделирају се процеси у котловском ложишту са пламено-гасне стране. Битне су реакције између гасова и процеси и реакције који прате честице спрашеног угља и сорбента, као и интеракција честица и гасне смеше. Сама унутрашња структура честица сорбента и шта се са њима догађа током боравка унутар ложишта се може квантификовати, до извесне мере, поједностављеним моделима. Ту се превасходно мисли на поједностављења модела структуре саме честице, па и хемијске кинетике. Детаљни модели, иако пружају одличан увид у процесе који се одвијају унутар саме честице, захтевају значајне рачунарске ресурсе. С тим на уму, такви модели се често поједностављују, нарочито у практичним применама, ради брзине прорачуна, који је дуготрајан чак и са једноставнијим моделима. У сваком случају, неопходно је да изабрани модел, ма ког степена сложености био, опише анализиране процесе и предвиди њихово одвијање у реалним условима, са тачношћу добијених нумеричких резултата и прорачунском ефикасношћу који одговарају конкретној примени.

### Основне претпоставке на којима се заснива математички модел

У дисертацији се разматра тзв. диференцијални математички модел, што значи да се посматрани сложени процеси описују диференцијалним једначинама одржања



појединих величина, које се потом решавају неким од нумеричких поступака. Ради ефикасног решавања једначина доступним рачунарским ресурсима уведе се одговарајуће претпоставке у моделу [7]. Претпоставке које се односе на турбулентни ток са конвективно-радијационом разменом топлоте и сагоревањем су следеће:

- Струјање се дефинише као тродимензионално, стационарно и нестишљиво у потпуно развијеном турбулентном току;
- Гасовита фаза (ложишни гасови) разматра се у *Euler*-овом пољу, чврста (дисперзна) фаза (честице спрашеног угља и сорбента) у *Lagrange*-овом пољу, а утицај чврсте фазе на гасовиту инкорпорира се преко посебних изворних чланова у транспортним једначинама за гас, док се утицај гасовите фазе на чврсту моделира дифузионом брзином честице;
- За затварање једначина користи се  $k - \varepsilon$  модел турбуленције за тродимензионални ток;
- Примењен је шестофлуксни модел преноса топлоте зрачењем – билансно решавање флукса зрачења у позитивним и негативним смеровима по координатним осама;
- Интеракција турбуленције и радијације је занемарена;
- Термодинамичка и транспортна својства се одређују емпиријским и полуемпиријским изразима, апроксимацијама и аналогијама на основу претходних искустава;
- Почетни и гранични услови се решавају уобичајеним приступом математичком моделирању примењеном за елиптички тип парцијалних диференцијалних једначина;
- Моделирана честица угљеног праха у струји флуида је идеална сфера;
- Повезивање фаза у току је двосмерно – узима се у обзир само интеракција честица са флуидом, али се занемарују директне међусобне интеракције честица, а честице интерагују посредством гасне фазе;
- Судари честица са зидовима се сматрају потпуно еластичним;

- Утицај чврсте фазе на гасовиту се моделира помоћу PSI-Cell<sup>10</sup> метода којим се уводе посебни изворни чланови у једначинама гасне фазе услед присуства честица;
- Утицај гасовите фазе, односно турбуленције на честице се разматра преко дифузионе брзине честица;
- Комплексни процес сагоревања угљеног праха може се моделирати помоћу јединствене кинетике добијене мерењем привидне брзине сагоревања честице угљеног праха као целине;
- Реакције сагоревања честице спрашеног угља су хетерогене, а реакције формирања и деструкције оксида азота су хомогене;
- Честице у току сагоревања мењају пречник, док им густина остаје иста;
- Гасовити продукти сагоревања су угљен-диоксид, водена пара, сумпор-диоксид и оксиди азота, цијановодоник;
- У подмоделу формирања и деструкције азотних оксида, разматрају се горивни и термички азот-моноксид;
- Струјно поље се описује коначним бројем контролних запремина и добро апроксимира континуално струјно поље;
- Парцијалне диференцијалне једначине могу се дискретизовати, а добијени систем линеарних алгебарских једначина нумерички решити.

Поред ових општих претпоставки, битне су и претпоставке које произилазе на основу примене изабраних и унапређених модела честица сорбента у комплексном нумеричком коду за симулацију процеса унутар ложишта:

- Честица сорбента је сферног облика;
- Процеси, тј. реакције калцинације, синтеровања и сулфатизације честице сорбента теку симултано [50], а прва два процеса утичу на сулфатизацију;
- Загревање честица сорбента је довољно брзо да се може сматрати тренутним, што је нарочито тачно за честице малих пречника [46];
- Температура честице је веома блиска температури гаса који је окружује и константна унутар целе запремине честице – произилази из претходне претпоставке;

---

<sup>10</sup> PSI-Cell – Particle Source in Cell

- Количина сорбента који се уноси сразмерна је садржају сумпора у гориву и количини горива.

## Основне једначине механике флуида

Полазне једначине модела, које чине његову основу су базне једначине механике флуида за гасну фазу у *Euler*-овом пољу: једначина одржања масе (једначина континуитета), једначине одржања количине кретања вискозног флуида (*Navier-Stokes* једначине), као и једначине одржања енергије гаса, и концентрација појединих компонената гасне смеше. Све ове једначине могуће је, у једном општем облику представити помоћу парцијалне диференцијалне једначине (15) у виду принципа о одржању поља [8]:

$$\frac{\partial(\rho\mathcal{L})}{\partial\tau} + \frac{\partial(\mathfrak{S}_i)}{\partial x_i} - \mathfrak{R} = 0 \quad (15)$$

У једначини (15)  $\mathfrak{R}$  представља продукцију (извор или понор) посматране величине,  $\mathcal{L}$  вредност посматране величине по јединици масе унутар контролне запремине и  $\mathfrak{S}$  ( $\mathfrak{S} = \rho u_i \mathcal{L}$ ) њен флукс кроз граничну површ посматране запремине.

Уколико посматрамо масу флуида,  $\mathcal{L}$  ће имати вредност  $\mathcal{L} = 1$ , а с обзиром да материја не настаје, нити нестаје, тада  $\mathfrak{R}$  поприма вредност  $\mathfrak{R} = 0$ . Уколико се ове вредности уврсте у једначину (15), добија се једначина континуитета (16) која описује транспорт масе унутар струјног домена:

$$\frac{\partial\rho}{\partial\tau} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (16)$$

Уколико постоји допунски извор или понор масе, у овој једначини је потребно додати одговарајући изворни члан. За осредњен ток, у *Descartes*-овом координатном систему, једначина поприма следећи облик [7]:

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W)}{\partial z} = S_p^m \quad (17)$$

На сличан начин може се доћи и до *Navier-Stokes*-ових једначина - уврштавањем одговарајућих величина у једначини одржања поља (15) добија се, на сличан начин, и *Navier-Stokes* једначине уз помоћ једначине кретања флуида и конститутивних једначина механике флуида, тј. *Newton*-ове хипотезе о напонима (18) [8]:

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial \tau} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \rho f_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (18)$$

Једначина (18) представља *Navier-Stokes* једначине струјања добијене уз претпоставку о нестишљивости флуида. У овој једначини први члан са леве стране представља промену количине кретања по јединици запремине унутар посматране контролне запремине, тзв. нестационарни члан. Други члан је промена услед конвективног преношења количине кретања кроз површину која ограничава контролну запремину. Са десне стране, први члан представља утицај запреминских сила по јединици запремине, док су други и трећи члан утицаји површинских сила изражених по јединици запремине.

Општепознато је да се тренутна вредност брзине флуида може изразити преко осредњене вредности брзине и флукутирајуће компоненте:  $u = U + u'$ . Средња вредност брзине се добија интегралњем по времену, где време  $\tau_E$  мора бити значајно дуже од времена трајања највећих вртлога [8]:

$$U = \frac{1}{\tau_E} \int_{\tau_0}^{\tau_0 + \tau_E} u d\tau \quad (19)$$

Друге скаларне величине се такође разлажу на осредњену и флукутирајућу компоненту и осредњавају на исти начин. Уколико уврстимо осредњавање у *Navier-Stokes* једначине (18) добија се *Reynolds*-ова једначина [8], у тензорској нотацији:

$$\rho U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = \rho f_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u'_i u'_j} \right] \quad (20)$$

Овом једначином је описано по времену осредњено струјање флуида. Последњи члан на десној страни једначине садржи *Reynolds*-ове, односно турбулентне напоне ( $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ ) који представљају симетричан тензор другог реда.

Једначине количине кретања, се могу записати у развијеном облику, у *Descartes*-овом координатном систему:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho UU)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho VU)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho WU)}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial U}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial U}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial U}{\partial z} \right] - \frac{\partial P}{\partial x} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial U}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial V}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial W}{\partial x} \right] + S_p^u \\ &+ U \cdot S_p^m \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho UV)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho VV)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho WV)}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial V}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial V}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial V}{\partial z} \right] - \frac{\partial P}{\partial y} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial U}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial V}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial W}{\partial y} \right] + S_p^v \\ &+ V \cdot S_p^m \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho UW)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho VW)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho WW)}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial W}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial W}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial W}{\partial z} \right] - \frac{\partial P}{\partial z} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial U}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial V}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu_{eff} \frac{\partial W}{\partial z} \right] + S_p^w \\ &+ W \cdot S_p^m \end{aligned} \quad (23)$$

Приказаним једначинама је описано монофазно турбулентно струјање флуида без додатних изворних чланова услед размене масе, количине кретања и других утицаја који постоје у вишефазним струјањима, као и двофазно турбулентно струјање флуида са допунским изворним члановима у посматраним једначинама ради детаљнијег описа размене материје и енергије између фаза.

У једначинама (21), (22) и (23) се употребљава ефективна динамичка вискозност која представља заједнички утицај ламинарне и турбулентне вискозности, с обзиром да је реч о турбулентном току:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (24)$$

Турбулентна динамичка вискозност се одређује помоћу [7]:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (25)$$

## Моделирање турбуленције

У једначинама турбулентног тока постоји проблем затварања *Reynolds*-ове једначине (20), односно начина на који ће бити решени *Reynolds*-ови напони. У досадашњој пракси  $k - \varepsilon$  модел турбуленције се показао као поуздан и у довољној мери тачан приликом примене у симулацијама процеса унутар котловског ложишта. Турбулентни напони се изражавају у функцији турбулентне вискозности и градијента брзине главног (средњег) тока, а  $k - \varepsilon$  модел обухвата израз за турбулентну вискозност  $\mu_t = C_\mu \rho k^2 / \varepsilon$  и једначине турбулентне кинетичке енергије и њене дисипације. Моделирана једначина за турбулентну кинетичку енергију користи се у облику [7], [8]:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon \quad (26)$$

Одговарајућа једначина за дисипацију турбулентне кинетичке енергије, у моделираном облику гласи:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\mu_t}{k} \varepsilon \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (27)$$

Константе  $k - \varepsilon$  стандардног модела имају следеће вредности:

Табела 1. Константе  $k - \varepsilon$  модела турбуленције [8]

$C_\mu$	$C_D$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$
[-]	[-]	[-]	[-]	[-]	[-]	[-]
0,09	1,00	1,44	1,92	0,70	1,00	1,22

Вредности константи (Табела 1) су стандардне у литератури и могу се пронаћи у књигама и уџбеницима који су детаљније посвећени тематици моделирања турбуленције и конкретног модела турбуленције.

У развијеном облику, у *Descartes*-овом координатном систему једначина турбулентне кинетичке енергије се може написати у облику:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho U k)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V k)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W k)}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right] + G - C_D \rho \varepsilon + S_p^k + 2k S_p^m \end{aligned} \quad (28)$$

где је продукција турбулентне кинетичке енергије дата као

$$\begin{aligned} G = \mu_t \left\{ 2 \left[ \left( \frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial V}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial U}{\partial y} \right) \left( \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \left( \frac{\partial U}{\partial z} \right) \left( \frac{\partial W}{\partial x} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \left( \frac{\partial V}{\partial z} \right) \left( \frac{\partial W}{\partial y} \right) \right] + \left( \frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial U}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial V}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial V}{\partial z} \right)^2 \right. \\ \left. + \left( \frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (29)$$

док се једначина дисипације турбулентне једначине у развијеном облику записује:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho U \varepsilon)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V \varepsilon)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W \varepsilon)}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} G - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_p^\varepsilon + 2\varepsilon S_p^m \end{aligned} \quad (30)$$

У посматраним једначинама изворни члан турбулентне кинетичке енергије услед флукуација силе отпора (при релативном кретању), уз претпоставку изотропности турбуленције моделиран је према:

$$S_p^k = \sum_i \sum_j 2\pi \mu d_{p,ij} k \left[ (\tau_t^{0,5} - (\tau_t - \tau_{p,ij})^{0,5}) / (\tau_t - \tau_{p,ij})^{0,5} \right] N_p \Delta \tau \quad (31)$$

Веза између је дата према  $S_p^\varepsilon$  и  $S_p^k$ :

$$S_p^\varepsilon = C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} S_p^k \quad (32)$$

## Моделирање двофазног тока и међусобног утицаја фаза

Двофазни ток подразумева, да поред основног флуида постоји још једна фаза, која може представљати мехурове паре при моделирању кључања, капљице, или пак честице, што је код нас случај. Код моделирања двофазног тока, поред једначина које важе за једнофазни ток, а проширене су допунским изворним члановима, потребно је моделирати и једначине које описују кретање дисперзне фазе у струји флуида. Основна једначина је *Basset*-ова једначина за кретање честица у *Lagrange*-евом пољу, а коју је формулисао *Hinze* [87] за турбулентни ток. Ова једначина се у моделу користи у упрошћеном облику (33), са занемаривањем чланова који описују мање значајне ефекте:



$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{d\tau} = \frac{1}{2} C_D \rho A_p |\vec{u} - \vec{u}_p| (\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{d_p^3 \pi}{6} (\rho_p - \rho) \vec{g} \quad (33)$$

У овој једначини коефицијент  $C_D$  [7], [8], [88] се односи на отпор релативном кретању честице и одређује се помоћу једначине (34), која важи за вредности *Reynolds*-овог броја  $Re_p \leq 1000$ , док за веће вредности има константну вредност  $C_D = 0.44$ .

$$C_D = (24/Re_p)(1 + 0,15Re_p^{0,67}) \quad (34)$$

Посматрани *Reynolds*-ов број се односи на честице, односно њихову релативну брзину кретања унутар флуида:  $Re_p = d_p |\vec{u} - \vec{u}_p| / \nu$ . У једначини (33) се употребљава тренутна брзина честице. С друге стране, усваја се да резултујућа брзина честице, осредњена по времену, представља векторски збир конвективне брзине  $\vec{U}_{pc}$  и дифузионе брзине  $\vec{U}_{pd}$ . Конвективни део брзине се лако решава, решавањем осредњене једначине кретања честице [8]:

$$m_p \frac{d\vec{U}_{pc}}{d\tau} = \frac{1}{2} C_D \rho A_p |\vec{U} - \vec{U}_{pc}| (\vec{U} - \vec{U}_{pc}) + \frac{d_p^3 \pi}{6} (\rho_p - \rho) \vec{g} \quad (35)$$

Коефицијент отпора у датој једначини се одређује на основу једначине [8], [88]:

$$C_D = (24/Re_p)(1 + 0,15Re_p^{0,67}) \quad (36)$$

Одређивање дифузионог дела брзине је нешто сложеније, и приступ проблему је емпиријски. За одређивање дифузионе брзине користи се концентрација честица – густина броја честица  $N_p$  у свакој контролној запремини, константна дуж посматране трајекторије. Дифузиона брзина се одређује према обрасцу:

$$\vec{U}_{pd} = -\frac{1}{N_p} \Gamma_p \nabla N_p \quad (37)$$

У овом феноменолошком моделу, турбулентна дисперзија честица описује се преко дифузионе брзине у функцији коефицијента турбулентне дифузије  $\Gamma_p$ .

Једначине турбулентне дисперзије које се користе у једначини (37) су:

$$\Gamma_p = \frac{v_p^t}{\sigma_p}, v_p^t = v_t \left(1 + \frac{\tau_p}{\tau_t}\right)^{-1}, \tau_p = \frac{m_p}{3\pi\mu d_p}, \tau_t = \frac{v_t}{u'^2} \quad (38)$$

Густина броја честица је скаларна величина која се може одредити на више начина у *Lagrange*-евом или *Euler*-овом пољу. У конкретном случају усвојен је приступ моделирању у оквиру *Euler*-овог поља, с обзиром на интеракцију са другим пољима и сличност са решавањем транспортних једначина гасне фазе. Стога, једначина континуитета за густину броја честица се даје у облику:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (U_j N_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_p \frac{\partial N_j}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (39)$$

Ради решавања једначине (39) потребно је познавати *Euler*-ово поље брзина честица, али с обзиром да је реч о малим *Reynolds*-овим бројевима релативног кретања честица у односу на гас, могуће је увести апроксимацију и употребити поље брзине гаса уместо поља брзина честица [8]. Овом претпоставком су брзине гаса и честица изједначене, али само приликом решавања једначине (39), док се код решавања других једначина посматрају одвојено, односно посматрају се стварне брзине честица добијене интеграцијом одговарајуће једначине кретања честице (33), односно (35) дуж њене трајекторије.

Приметна је потреба за познавањем броја честица које улазе у посматрану контролну запремину у оквиру једначине (37). У условима квази-стационарног струјања може се сматрати без уношења грешке у прорачун да је проток честица које улазе у контролну запремину једнак броју честица које је напуштају, те се може апроксимирати помоћу броја честица које улазе у посматрану запремину [89]. Према тој претпоставци формирани израз који се употребљава гласи:

$$N_p = \sum_i \sum_j \frac{\dot{N}_{ij}}{A_{inl} U_{p,ij}} \quad (40)$$

Услед кретања честица у гасу долази до промена у струјању флуида. Узајамно повезивање две фазе се врши помоћу PSI-Cell [90] приступа, којим се у једначине гасне фазе уводе додатни изворни чланови услед присуства честица. Изворни чланови се рачунају као сума по пречницима „j“ и трајекторијама, односно улазним локацијама „i“, честица које секу посматрану контролну запремину. Кретање флуида, односно његова брзина унутар сваке контролне запремине, узима се у обзир при прорачуну кретања честица. Међусобни судари честица су занемарени, а претпоставка је заснована на познавању густине броја честица. Судари честица са зидовима се сматрају потпуно еластичним (без губитка енергије).

Укупна брзина честица, састоји се из конвективне и дифузионе брзине:

$$\vec{U}_p = \vec{U}_{pc} + \vec{U}_{pd} \quad (41)$$

Моделирана једначина количине кретања гасне фазе у двофазном у *Descartes*-овом координатном систему је дата у развијеном облику једначинама (21),(22) и (23), са додатним изворним чланом услед присуства честица у гасној фази према једначинама [8]:

$$\begin{aligned} S_p^u &= \frac{1}{V} \frac{\pi}{6} \sum_i \sum_j \sum_k d_{p,ijk}^3 [(U_{p,ijk})_{in} - (U_{p,ijk})_{out}] \dot{N}_{ijk} \\ S_p^v &= \frac{1}{V} \frac{\pi}{6} \sum_i \sum_j \sum_k d_{p,ijk}^3 [(V_{p,ijk})_{in} - (V_{p,ijk})_{out}] \dot{N}_{ijk} \\ S_p^w &= \frac{1}{V} \frac{\pi}{6} \sum_i \sum_j \sum_k d_{p,ijk}^3 [(W_{p,ijk})_{in} - (W_{p,ijk})_{out}] \dot{N}_{ijk} \end{aligned} \quad (42)$$

Утицај честица на турбуленцију – модулација турбуленције, моделира се додатним изворним члановима у једначинама турбулентне кинетичке енергије и њене дисипације. Овај утицај је претходно испитиван при условима сагоревања честица

угља у лету [9], где је примећено да, као што се очекује, мале честице (малом честицом се сматра она која има однос пречника честице и дужинског размера турбуленције у одређеном опсегу вредности) пригушују турбуленцију.

Транспортне једначине гасне фазе за кинетичку енергију (43) и њену дисипацију (44) су моделиране у следећем облику, са придодатим члановима за модулацију турбуленције услед постојања честица у гасној фази:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + 2k S_p^m + S_p^k \quad (43)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\mu_t}{k} \varepsilon \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + 2\varepsilon S_p^m + S_p^\varepsilon \quad (44)$$

Извор кинетичке енергије услед флукуација у сили отпора (45) приликом релативног кретања честица у односу на флуид се моделира као [8]:

$$S_p^k = \sum_i \sum_j 2\pi \mu d_{p,ij} k \left[ \frac{\tau_t^{0,5} - (\tau_t + \tau_{p,ij})^{0,5}}{(\tau_t + \tau_{p,ij})^{0,5}} \right] N_p \Delta \tau \quad (45)$$

где је  $\Delta \tau$  временски корак праћења честице дуж трајекторије. Концентрација честица се у овој једначини добија на основу једначине (39). Изворни члан који описује дисипацију турбулентне кинетичке енергије (46), и члан који описује утицај промене масе честице (47) се моделирају и користе у облику [8]:

$$S_p^\varepsilon = C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} S_p^k \quad (46)$$

$$S_p^m = \Delta \dot{m}_p = \frac{1}{V} \frac{\pi}{6} \rho_p \sum_i \sum_j [(d_{p,ij}^3)_{in} - (d_{p,ij}^3)_{out}] \dot{N}_{ij} \quad (47)$$

## Једначине одржања топлотне енергије и масе

Скаларне величине попут температуре и концентрације појединачних компоненти у вишекомпонентним гасним смешама су значајне при решавању проблема у турбулентним токовима. Ово је нарочито битно за одређивање величина попут густине смеше, вискозности и њеног топлотног капацитета. Једначине које описују транспорт скаларних компоненти су обликом сличне једначинама за транспорт количине кретања и имају исти облик заснован на принципу одржања поља [8], за стационарни ток:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\rho \chi_m) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \chi_m) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (J_{m,j}) + S_m \quad (48)$$

*Fick*-ов закон [91], једначина (49), се користи за одређивање дифузионог флукса компоненти по задатим правцима [8]. Последњи члан у једначини представља извор компоненте „*m*“ вишекомпонентне гасне смеше у посматраној контролној запремини.

$$J_{m,j} = -\rho D_m \frac{\partial \chi_m}{\partial x_j} \quad (49)$$

Правило је да се, ради упрошћења проблема, где год је могуће и оправдано, примене поједностављења разматране појаве. У том смислу, приликом разматрања једначина (48), које се разматрају за сваку компоненту смеше појединачно, потребно је да укупан збир масених удела појединачних једињења буде једнак јединици:

$$\sum_{m=1}^M \chi_m = 1 \quad (50)$$

С обзиром да су разматрани токови турбулентни, у једначини (48) ће бити доминантна турбулентна дифузија, или ће и молекуларна и турбулентна дифузија бити од једнаког значаја. У првом случају, облик једначине остаје исти, с тим да се употребљава турбулентна дифузија, док у другом случају се уводи ефективни

дифузиони коефицијент који представља суму ламинарног и турбулентног дифузионог коефицијента [8]:

$$\Gamma_{x,eff} = \frac{\mu}{\sigma_x} + \frac{\mu_t}{\sigma_{x,t}} \quad (51)$$

Тако да једначина (48) добија облик [8]:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \chi_m) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_{x,eff} \frac{\partial \chi_m}{\partial x_j} \right) + S_m \quad (52)$$

По сличној аналогiji се дефинише и једначина очувања енергије, за реактивне токове са малим вредностима *Mach*-овог броја, може се разматрати у функцији статичке енталпије, која представља функцију осетне енталпије и топлоте хемијске реакције  $H = C_p T + \chi_p \aleph_r$  [8], која у тензорској нотацији гласи [7], са придодатим изворним члановима размене топлоте између фаза и топлоте хемијских реакција:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j H) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{h,eff}} \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) + U_j \frac{\partial P}{\partial x_j} + q_{rg} + S_p^h + \aleph_r S_p^m \quad (53)$$

У овој једначини је занемарен рад аеродинамичких сила честица, запреминских сила и сила услед топлотних дилатација честица, као и вискозна дисипација [7].

Овде се придодати изворни члан услед размене топлоте између фаза описује према једначини (54) [7] и обухвата промену енергије честица које пролазе кроз посматрану контролну запремину:

$$S_p^h = \frac{1}{V} \sum_i \sum_j \dot{N}_{ij} \left[ (h_{p,ij} m_{p,ij} - \Delta \tau Q_{pr})_{in} - (h_{p,ij} m_{p,ij} - \Delta \tau Q_{pr})_{out} \right] \quad (54)$$

Уколико се посматра чврста фаза – честица, у *Lagrange*-овом пољу, за њу се може написати билансна једначина за одржање топлотне енергије [7]:

$$\frac{d}{d\tau}(m_p h_p) = Q_{kp} + Q_{rp} - r_p h_{pg} \quad (55)$$

Битно је напоменути да ова једначина важи уз претпоставке да се сва топлота хемијске реакције предаје гасној фази и да постоји униформан распоред топлотне енергије по попречном пресеку честице. Ову једначину је могуће записати и у облику у ком фигурише температура честице. Овај облик једначине се решава у нумеричком коду:

$$\frac{d}{d\tau}(m_p C_{pp} T_p) = \frac{Nu \lambda A_p}{d_p} (T - T_p) + \frac{q_{rp}}{N_p} + C_{pp} T_p \frac{dm_p}{d\tau} \quad (56)$$

где је *Nusselt*-ов број одређен према једначини:

$$Nu = 2 + 0,6Re^{0,5}Pr^{0,33} \quad (57)$$

### Основне једначине радијационе размене топлоте

О механизмима размене топлоте радијацијом може се пронаћи довољно извода из теорије у књигама [8], [92] и дисертацијама [7], [93], које дају детаљно разматрање неколико модела радијације и даље упућују читаоца на значајне радове из области који су претходили развоју разматраних теорија и модела. Теорије које се баве преносом енергије зрачењем појаву посматрају са становишта квантне механике и електромагнетне теорије, а у инжењерској пракси се чешће користи друга, због практичности разматрања. Као што је поменуто, радијациона размена топлоте у ложишту веома је значајна и моделира се у нашем случају помоћу модела шест флуkseва [8]. Модел прати простирање енергије зрачења дуж шест координатних полуоса. Основне овог модела поставили су *Chu* и *Churchill* [94], за теорију електромагнетног зрачења. Основна једначина која се решава за све тачке унутар посматране запремине је интегро-диференцијална једначина, аналогна *Boltzmann*-овој једначини у кинетичкој теорији гасова и има облик [8], [92]:

$$(\vec{S} \cdot \nabla)I_v = -(K_{a,v} + K_{s,v})I_v + K_{a,v}I_{b,v} + \int_{4\pi} P_v(\vec{S}' \rightarrow \vec{S})I_v(S')d\Omega \quad (58)$$

Једначина (58) у овом облику је проблематична за решавање на рачунару у смислу хардверске захтевности, нарочито када се ради о великим мрежама, те се поједностављује увођењем одређених претпоставки: интеграљење се врши само по доминантним линијама спектра, последњи члан једначине се своди на диференцијални облик [8]. Добијање диференцијалних једначина се остварује дељењем просторног угла  $4\pi$  стерадијана на одређен број сегмената и формира се систем једначина који се упоредно решава.

Изводи се енергетски биланс по шест праваца који леже на позитивним и негативним смеровима координатних оса. Расипање зрачења у једначини (58) се третира као анизотропно, и дефинишу се компоненте расипања, једначина (60), унапред ( $f$ ), уназад ( $b$ ) и бочно ( $s$ ), у односу на правац упадног зрачења, што је приказано у једначини (60). Тотални флуксеви у правцу оса *Descartes*-овог координатног система су описани једначинама (59) [8].

$$F_x = I_x^+ + I_x^- \quad F_y = I_y^+ + I_y^- \quad F_z = I_z^+ + I_z^- \quad (59)$$

$$\begin{aligned} f &= 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} P(\theta) \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \\ b &= 2\pi \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} P(\theta) \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \\ s &= \frac{(1 - f - b)}{4} \end{aligned} \quad (60)$$

Једначине за тоталне радијационе флуксеви, дате у *Descartes*-овом координатном систему, за све три координатне осе гласе [7], [92]:



$$\begin{aligned} \frac{1}{K_t} \frac{d}{dx} \left( \Gamma_{rd} \frac{dF_x}{dx} \right) &= -(1 - \Omega_0 f - \Omega_0 b) F_x + 2\Omega_0 s (F_y + F_z) + (1 - \Omega_0) \frac{I_b}{3} \\ \frac{1}{K_t} \frac{d}{dy} \left( \Gamma_{rd} \frac{dF_y}{dy} \right) &= -(1 - \Omega_0 f - \Omega_0 b) F_y + 2\Omega_0 s (F_x + F_z) + (1 - \Omega_0) \frac{I_b}{3} \\ \frac{1}{K_t} \frac{d}{dz} \left( \Gamma_{rd} \frac{dF_z}{dz} \right) &= -(1 - \Omega_0 f - \Omega_0 b) F_z + 2\Omega_0 s (F_x + F_y) + (1 - \Omega_0) \frac{I_b}{3} \end{aligned} \quad (61)$$

које се решавају на нумерички сличан начин као и транспортне једначине за гасну фазу. Радијациона размена топлоте улази у транспортну једначину за топлотну енергију гасовите (53) и дисперзне (55) фазе као посебан извор односно понор топлотне енергије. Нето запремински радијациони флуks је одређен према једначини [8]:

$$q_r = K_a (F_x + F_y + F_z - I_b) \quad (62)$$

и састоји се од два дела који апсорбују односно емитују топлотну енергију: гасна фаза  $q_{rp} = K_{ag} (F_x + F_y + F_z - I_b)$  и дисперзна фаза  $Q_{rp} = \dot{N}_{ij} q_{rp} = \dot{N}_{ij} K_{ap} (F_x + F_y + F_z - I_b)$ .

Детаљи извођења и уградње модела шест флуksева у комплексни нумерички код могу се пронаћи у [7], [8], док се упоредна анализа више модела, изведена на симулираној реалној геометрији котловског ложишта може пронаћи у [93].

## Гранични и почетни услови неизотермног турбулентног тока

Почетни услови представљају почетне задате, односно претпостављене вредности у рачунском домену, од којих почиње прорачун, као и задате вредности променљивих на улазним површинама у рачунски домен. Њих условљава природа проблема, а у коначном исходу прорачуна не би требало да утичу на добијени резултат. Њихов утицај је најизраженији у погледу брзине конвергенције прорачуна.

С обзиром на елиптички облик парцијалних диференцијалних једначина које описују гасну фазу потребно је дефинисати граничне услове на свим границама

прорачунске области, за све разматране једначине. На улазним пресецима [7], [8] задају се профили брзине, према условима струјања; профили турбулентне кинетичке енергије и дисипације, на основу процене интензитета турбуленције као и формулације дужине дисипације  $k_{in} = 1,5u^{*2}$   $\varepsilon_{in} = (C_{\mu}^{0,75} k_{in}^{1,5})/\ell_{\varepsilon}$ . На излазним пресецима [7], [8] аксијална брзина мора задовољити укупни континуитет тока – очување масе; остале променљиве се добијају екстраполацијом из прорачунских ћелија у близини излаза. Услови на границама непокретних зидних површина се описују помоћу зидних функција, помоћу којих се одређује вредност променљиве непосредно уз зид [7], [8]. Гранични услови за једначину топлотне енергије гасне фазе који описују конвективни флуks на зиду примењују се слично као и претходне зидне функције [7], [8], уз претпостављену температуру зида. Са друге стране, гранични услови за радијациону размену топлоте код шестофлуksног модела дефинишу интензитет зрачења као збир сопственог зрачења и зрачења рефлектованог од медија гаса уз зид [7], са усвојеном вредношћу емисивности зида према литератури [95], [96].

Гранични услови за честице подразумевају механизам интеракције честица и зида: судари честица са зидовима су апсолутно еластични, тј. честице се приликом кретања одбијају еластично од зидних површина [7], док се приликом проласка кроз излазне површине завршава прорачун посматране трајекторије и сматра се да је трајекторија напустила прорачунски домен. Почетни услови честице су дефинисани решењем претходног временског корака, а утицај околине, на основу параметара контролне запремине гасовите фазе [7].

## **Размена масе у двофазном току**

Унутар ложишта парног котла имамо честице угљеног праха које сагоревају. Процес сагоревања прате процеси испаравања влаге, деволатилизације и сагоревања волатила и коксног остатка. У овом конкретном случају имамо и честице сорбента које апсорбују гасове из своје околине у току процеса сулфатизације. Промена масе честица је њихов одговор на физичке особине средине у којој се налазе. Топлота, концентрације једињења значајних за реакцију као и физичке особине флуида условљавају одређено понашање честица.

Познавање историје кретања честице омогућава познавање особина средине кроз коју се та појединачна честица кретала током времена и представља предуслов за свако дубље разматрање понашања честице у датој средини. За сваку појединачну честицу промена масе услед дифузионог трансфера између фаза се може описати следећом релацијом, под претпоставком сферичног облика честица [8], [97]:

$$\frac{dm_p}{d\tau} = -\mathfrak{R}_p = -Sh\rho\mathcal{D}\pi d_p(\chi_p - \chi_g) = -k_d\rho\pi d_p^2(\chi_p - \chi_g) \quad (63)$$

где је  $k_d = \frac{Sh\mathcal{D}}{d_p}$ , а *Sherwood*-ов број и коефицијент дифузије се одређују емпиријским релацијама у зависности од интензитета трансфера масе [8], а према једначинама (64).

$$Sh = 2 + 0,65Re^{0,5}Sc^{0,33} \quad \mathcal{D} = 9,8 \cdot 10^{-10}T^{1,75} \quad (64)$$

Извор масе у контролној запремини  $\ell$  се може приказати помоћу једначине и као што се може приметити зависи од броја честица које пролазе кроз посматрану контролну запремину:

$$[S_p^m]_{\ell} = \left[ \frac{1}{V} \sum_i \sum_j \dot{N}_{ij} (m_{p,ij}^{in} - m_{p,ij}^{out}) \right]_{\ell} \quad (65)$$

## Моделирање хемијских реакција честица угљеног праха

У оквиру модела разматрају се хемијске реакције сагоревања честица угљеног праха (уз издвајање одговарајућих једињења), као и реакције једињења која учествују у настајању и трансформацијама оксида азота и реакције честица сорбента са оксидима сумпора. Овде је посвећена пажња највише последњим – реакцијама честица спрашеног сорбента са оксидима сумпора који се налазе у ложишним гасовима и о моделирању тих реакција се највише говори у наредним поглављима и битне су за разматрање могућности смањења емисије оксида сумпора из ложишта и оптимизацију процеса, те стога ће овде пажња бити

посвећена осталим значајним реакцијама које постоје у моделу, а значајне су за разматрање целокупног моделираног проблема.

Хемијске реакције угљеног праха, којима подлежу честице током свог боравка у котловским ложиштима су још увек недовољно проучене, и свакодневно се осмишљавају нови приступи моделирању проблема [7]. У овој докторској дисертацији, моделирају се хетерогене хемијске реакције између честица угљеног праха и гасовите фазе. Хемијске реакције унутар гасне фазе везане за оксиде азота су хомогене и као такве се разматрају. Реакције честица сорбента са гасном фазом су такође хетерогене, али је примењени модел знатно сложенији и хардверски захтевнији у поређењу са моделом реакција угљеног праха.

### Моделирање сагоревања спрашеног угља

Сложеност хемијских реакција угљеног праха у току процеса сагоревања и пратећих процеса утицала је на настанак различитих приступа њиховом моделирању [8], [98]. Употребљен је глобални модел сагоревања угљеног праха [7], који користи хемијску кинетику засновану на *Arrhenius*-овој једначини (66), са коефицијентима добијеним у ранијим истраживањима у оквиру Лабораторије за термотехнику и енергетику Института за нуклеарне науке „Винча“ [99], примењени при моделирању процеса сагоревања унутар котловског ложишта у [7].

$$k_r = k_{r,0} e^{-\frac{E}{RT}} \left[ \frac{\text{mol}}{\text{m}^2\text{s}} \right] \quad (66)$$

Табела 2 садржи кинетичке параметре, за једначину (66), неколико карактеристичних угљева са домаћих копова.

Основу модела чини модел сагоревања коксног остатка с обзиром да је сагоревање коксног остатка најспорији процес [7]. С обзиром на сложеност услова при сагоревању и хетерогеност процеса сагоревања коксног остатка у котловском ложишту брзина реакције честице угљеног праха је моделирана у комбинованом,

Табела 2. Кинетички параметри сагоревања домаћих угљева [7], [8], [99]

Угаљ	Предекспоненцијални фактор	Енергија активације	
		$A$ [ $\frac{m}{s}$ ]	$E_a$ [ $\frac{kJ}{kmol}$ ]
Колубара (Тамнава)		$9,03 \cdot 10^3$	$9,71 \cdot 10^4$
Колубара (Поље Д)		$8,90 \cdot 10^3$	$9,54 \cdot 10^4$
Костолац (Ћирковац)		$7,00 \cdot 10^3$	$9,82 \cdot 10^4$
Костолац (Дрмно)		$5,50 \cdot 10^3$	$9,95 \cdot 10^4$

Подаци из наведене литературе за фину мељаву угљеног праха

кинетичко-дифузионом режиму [7] – брзину реакције одређује најспорији од ступњева механизма који описују реакцију гаса, тј. оксиданта са честицом [7]: дифузиони трансфер реагенса ка чврстој површини, адсорпција реагенса на чврстој површини, хемијске реакције на површини, десорпција гасних продуката реакције са чврсте површине, и дифузиони транспорт масе продуката са чврсте површине. Брзина реакције се у овом режиму може описати помоћу једначине (67) [7], [8]:

$$\mathfrak{R}_p = \frac{A_p M_p \chi_{O_2}}{\frac{1}{k_r} + \frac{1}{k_d}} \quad (67)$$

Промена масе честице угљеног праха током времена у моделу сагоревања се одређује према једначини (68) [7], [8]:

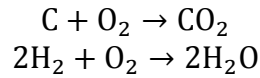
$$\frac{dm_p}{d\tau} = \frac{dm_{p,C}}{d\tau} + \frac{dm_{p,H_2}}{d\tau} + \frac{dm_{p,W}}{d\tau} + \frac{dm_{p,O_2,gor}}{d\tau} + \frac{dm_{p,HCN}}{d\tau} + \frac{dm_{p,Ssag}}{d\tau} \quad (68)$$

А брзине реакција, односно промена масе појединачних компоненти према једначинама, под бројем (69), приказаним за угљеник и водоник. Једначине за остале компоненте се моделирају аналогно.

У односу на основни модел, придодате су реакције настајања и нестајања оксида азота и сумпора, а ради анализе еколошких аспеката рада котловског ложишта.

Моделирање настајања оксида сумпора током сагоревања угља је везано за модел честица угља и њихове реакције, и једначина која га описује је аналогна

једначини која описује настајање других једињења чији је извор везан за честицу угља.



$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_{P,C} &= \frac{1,5M_C A_p \rho \chi_{\text{O}_2}}{M_{\text{O}_2} \left( \frac{1}{k_r} + \frac{1}{k_d} \right)} = - \frac{dm_{P,C}}{d\tau} \\ \mathfrak{R}_{P,\text{H}_2} &= \frac{1,5(2M_{\text{H}_2}) A_p \rho \chi_{\text{O}_2}}{M_{\text{O}_2} \left( \frac{1}{k_r} + \frac{1}{k_d} \right)} = - \frac{dm_{P,\text{H}_2}}{d\tau} \end{aligned} \quad (69)$$

*Smoot* у књизи [100] напомиње да сумпор у угљу постоји у три облика – органски сумпор (тиофен, сулфиди и тиоли), пиритни и сулфати попут соли калцијума или гвожђа, те да се највеће хемијске трансформације догађају током деволатилизације угља. У даљем разматрању помиње да су загађивачи настали сагоревањем фосилних горива, који у свом саставу имају сумпор у различитим облицима –  $\text{SO}_2$ ,  $\text{SO}_3$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{COS}$  и  $\text{CS}_2$ , али и да се при нормалном раду котловског постројења, са благим вишком кисеоника сва једињења сумпора која доспеју у гасове трансформишу у  $\text{SO}_2$  и у веома малим количинама  $\text{SO}_3$ . Од укупног сумпора који улази у састав горива, сагорљив је само део. Пиритни сумпор и сумпор у оквиру органских једињења сагоревају [101], услед чега настаје  $\text{SO}_2$ , као коначни производ и при том се ослобађа топлота. Ова једињења се заједно се називају сагорљивим сумпором [101]. У развијеном моделу занемарујемо међукораке у реакцијама и посматрамо цео процес поједностављено, пратећи механизам по коме директно, као последица сагоревања, настаје крајњи продукт процеса:  $\text{SO}_2$ , што је у складу са поједностављеном хемијском кинетиком која се употребљава у развијеном моделу [8] и за коју постоје доступни експериментални подаци испитивања добијени за домаће угљеве који се користе у нашим котловима.

Реакције сумпора у моделу обухватају реакцију настајања  $\text{SO}_2$  који настаје услед сагоревања угљеног праха и с обзиром на употребу поједностављене хемијске кинетике сагоревања у моделу везан је за сагоревање честице, а сама брзина

настајања је пропорционална брзини сагоревања честица. Детаљи о овом приступу моделирању могу се пронаћи у [7], [8]. Реакције сумпора са сорбентом су објашњене у посебном поглављу.

### **Моделирање реакција формирања и деструкције азотних оксида**

Реакције азота немају велики утицај на структуру пламена унутар котловског ложишта, па се као такве решавају у постпроцесору, када су сва друга поља већ конвергирала према решењу [11].

Азот из ваздуха унетог у ложиште, као и азот из горива претварају се током процеса сагоревања у једињења азота која су загађивачи - NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, HCN[15]. С обзиром да је NO најдоминантнији оксид који настаје током процеса сагоревања он се третира моделом у процесу сагоревања као репрезентативно једињење [102] и њему се прикључују, тј. заједно са њим се моделирају утицаји осталих оксида која се емитују у занемаривим количинама. По доспећу у атмосферу NO постаје NO<sub>2</sub>, али с обзиром да је овде реч о котловском ложишту, та трансформација се још није догодила, те модел третира NO као репрезентативно једињење [103]. Настајање и деструкција NO се објашњава помоћу три основна механизма: термички NO, промтни NO и горивни NO. Већина аутора при моделирању занемарује промтни NO и његове утицаје додаје једном од преостала два. Најдоминантнији је горивни NO и неки аутори користе модел у коме само њега моделирају [104]. Док већина при моделирању поред горивог моделира и термички NO [105]–[110]. Термички NO се формира услед оксидације атмосферског азота при повишеним температурама и механизми његове реакције значајно зависе од температуре. Промтни NO се формира реакцијама са слободним радикалима угљоводоника ослобођених током процеса деволатилизације. Последњи, горивни NO је продукт оксидације азота везаног у гориву, и за разлику од термичког, горивни је знатно мање осетљив на промене температуре. Бољи преглед механизма по којима се одвијају реакције NO се може пронаћи у извештају [103] и раду [11].

Подмодел процеса настајања и деструкције NO предвиђа термички NO помоћу поједностављеног *Zeldovich*-евог модела [102], уз претпоставку да су почетне

концентрације NO и OH довољно ниске, тако да се реакција одвија у само једном смеру [11]. Тако укупну брзину по овом механизму можемо представити као:

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = 2k[\text{O}][\text{N}_2], k = 1,8 \cdot 10^8 e^{\frac{-38370}{T}} \quad (70)$$

У зонама сиромашним горивом сматра се да постоји равнотежа O<sub>2</sub> и [O], и одређује се из парцијалне равнотеже раздвајања кисеоника [111]: 0,5O<sub>2</sub> ⇌ [O].

Поред термалног, моделира се и горивни NO. Код њега постоје и реакције настајања и деструкције, које се у највећој мери одвијају помоћу интермедијана HCN. Једињења азота из горива постају интермедијани, попут цијано и амонијачних једињења која након тога оксидирају или се редукују у једињења која садрже азот [11]. Користи се *De Soete*-ов модел [112], заједно са глобалном кинетиком реакција за настајање NO у гасној фази [112], [113]. Овај модел, у основном облику не мора нужно дати добре резултате у зонама богатим горивом. Једначина којом се описује модел стварања оксида азота је:

$$\frac{d\chi_{\text{NO}}}{dt} = r_1 = A_1 10^{10} \chi_{\text{HCN}} \chi_{\text{O}_2}^\alpha e^{\frac{-33732,5}{T}} \quad (71)$$

Као што је изнад поменуто, посматрана једначина у моделу како ју је формулисао *De Soete* ради добро само у зонама сиромашним горивом. *Romo-Millares* корекција коефицијента A<sub>1</sub> [114] се користи ради постизања добрих резултата у зонама богатим горивом. Ова корекција подразумева да коефицијент A<sub>1</sub> узима вредности A<sub>1</sub> = 1,0 када је зона у којој се одвија реакција сиромашна горивом (што одговара основном, неизмењеном *De Soete*-овом моделу), односно A<sub>1</sub> = 3,5 у случају зона богатих горивом. *Romo-Millares* и *Lockwood* су у истом раду даље појаснили важност увођења модификације предекспоненцијалног фактора. С обзиром да доступне вредности фактора из литературе [112], [115] не дају задовољавајуће решење, вршено је варирање параметара у оквиру анализе осетљивости [114], ради утврђивања најбољих вредности поменутог параметра за употребу у склопу симулација [11]. Зависност коефицијента α је узета по *De Soete*-у и тај



коэффицијент у зависности од локалне вредности за концентрацију кисеоника у посматраној запремини узима следеће вредности [112]:

$$\begin{aligned}
 \chi_{O_2} &\leq 4,10 \cdot 10^{-3} & \alpha &= 1 \\
 4,10 \cdot 10^{-3} < \chi_{O_2} &\leq 1,11 \cdot 10^{-2} & \alpha &= -3,95 - 0,9 \ln \chi_{O_2} \\
 1,11 \cdot 10^{-2} < \chi_{O_2} &\leq 0,03 & \alpha &= -0,35 - 0,1 \ln \chi_{O_2} \\
 0,03 < \chi_{O_2} && \alpha &= 0
 \end{aligned} \tag{72}$$

Са друге стране, за деструкцију оксида азота користи се модел *Solomon*-а [116] према следећој једначини:

$$\frac{d\chi_{NO}}{dt} = r_2 = -3,0 \cdot 10^{12} \chi_{HCN} \chi_{NO} e^{\frac{-30208,2}{T}} \tag{73}$$

Битно је напоменути да извор за HCN представља деволатилизација честица, док се његов понор налази унутар гасне фазе.

### Једначине масених концентрација гасовитих компоненти

*Азот*

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial(\rho U \chi_{N_2})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V \chi_{N_2})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W \chi_{N_2})}{\partial z} \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{N_2}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{N_2}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{N_2}}{\partial z} \right]
 \end{aligned} \tag{74}$$

*Кисеоник*

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial(\rho U \chi_{O_2})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V \chi_{O_2})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W \chi_{O_2})}{\partial z} \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{O_2}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{O_2}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{O_2}}{\partial z} \right] \\
 &+ S_{p,O_2}^m + S_{p,O_2}^{sorb}
 \end{aligned} \tag{75}$$

Кисеоник, као оксидант учествује у реакцијама сагоревања једињења која се налазе у гориву. Потрошња кисеоника услед сагоревања честица угљеног праха се

моделира кроз изворни члан  $S_{p,O_2}^m$ . Такође, кисеоник се троши и у реакцијама сулфатизације, за шта је придодат члан  $S_{p,O_2}^{sorb}$ .

#### Угљен-диоксид

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho U \chi_{CO_2})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V \chi_{CO_2})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W \chi_{CO_2})}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{CO_2}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{CO_2}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{CO_2}}{\partial z} \right] \quad (76) \\ &+ S_{p,CO_2}^m + S_{p,CO_2}^{sorb} \end{aligned}$$

Изворни члан  $S_{p,CO_2}^{sorb}$  се односи на издвајање угљен-диоксида из честице сорбента и постоји када се као сорбент користи  $CaCO_3$ . Тада се при процесу калцинације издваја угљен-диоксид.

#### Водена пара

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho U \chi_{H_2O})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V \chi_{H_2O})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W \chi_{H_2O})}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{H_2O}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{H_2O}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\chi} \frac{\partial \chi_{H_2O}}{\partial z} \right] \quad (77) \\ &+ S_{p,H_2O}^m + S_{p,H_2O}^{sorb} \end{aligned}$$

Изворни члан  $S_{p,H_2O}^{sorb}$  моделира процес издвајања водене паре из честице сорбента, услед дехидратације калцијум-хидроксида, а постоји када се као сорбент користи  $Ca(OH)_2$  и тада се при процесу калцинације издваја водена пара.

#### Цијановодоник

Цијановодоник је донекле значајно једињење приликом сагоревања угљева. Он је интермедијан – једињење које настаје услед сагоревања угља, што је моделирано изворним чланом  $S_{p,HCN}^m$ , али убрзо већим делом нестаје, односно прелази у  $NO$ . Ова реакција је повратна, тако да изворни члан  $S_{p,HCN}^{NO_x}$  садржи два дела који се

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(\rho U \chi_{\text{HCN}})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V \chi_{\text{HCN}})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W \chi_{\text{HCN}})}{\partial z} \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{HCN}}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{HCN}}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{HCN}}}{\partial z} \right] \quad (78) \\
 &+ S_{p,\text{HCN}}^m + S_{p,\text{HCN}}^{\text{NO}_x}
 \end{aligned}$$

односе на претварање HCN у NO и обратно. Од услова у ложишту – локалних температура на којима се одвија реакција, и концентрација реактаната зависи у ком ће смеру тећи реакција и који процес ће бити доминантан.

*Оксиди азота (NO<sub>x</sub>)*

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(\rho U \chi_{\text{NO}_x})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V \chi_{\text{NO}_x})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W \chi_{\text{NO}_x})}{\partial z} \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{NO}_x}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{NO}_x}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{NO}_x}}{\partial z} \right] \quad (79) \\
 &+ S_{p,\text{NO}_x}^{\text{gorivi (preko HCN)}} + S_{p,\text{NO}_x}^{\text{termalni}}
 \end{aligned}$$

Изворни члан  $S_{p,\text{NO}_x}^{\text{gorivi (preko HCN)}}$  подразумева процесе настајања и деструкције, с обзиром да је реакција претварања HCN у NO повратна, те се одвија у оба смера, а њена брзина зависи од температуре смеше гасова. Овај члан представља допринос горивог NO у укупним оксидима азота, док изворни члан  $S_{p,\text{NO}_x}^{\text{termalni}}$  моделира допринос термалног NO у укупној продукцији оксида азота.

*Оксиди сумпора (SO<sub>2</sub>)*

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(\rho U \chi_{\text{SO}_2})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V \chi_{\text{SO}_2})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W \chi_{\text{SO}_2})}{\partial z} \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{SO}_2}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{SO}_2}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\chi}} \frac{\partial \chi_{\text{SO}_2}}{\partial z} \right] \quad (80) \\
 &+ S_{p,\text{SO}_2}^m + S_{p,\text{SO}_2}^{\text{sorb}}
 \end{aligned}$$

Оксиди сумпора имају изворни члан  $S_{p,SO_2}^m$  услед сагоревања угљеног праха, односно изворни члан  $S_{p,SO_2}^{sorb}$  који представља понор, односно везивање сумпора помоћу честица сорбента.

*Општи облик изворног члана у једначинама гасне фазе услед реакција унутар чврсте фазе*

$$S_p^\Phi = \frac{1}{V} \sum_i \sum_j N_{ij} [(m_{p,ij} \Phi_{p,ij})_{in} - (m_{p,ij} \Phi_{p,ij})_{out}] \quad (81)$$

Изворни члан дефинисан у оваквом општем облику представља и извор и понор материје, а у зависности од конкретног једињења и врсте честице на коју се односи, одређени делови члана ће постојати или ће бити занемарени.

### **Термодинамичка и транспортна својства**

Физичка својства гаса и честица у транспортним једначинама модела се сматрају константним у оквиру једне контролне запремине, али се разликују у осталим контролним запреминама. Пример овога су вискозност ( $\mu$ ), густина ( $\rho$ ), топлотни капацитет ( $C_p$ ), коефицијент дифузије ( $D$ ), и др. Термодинамичка и транспортна својства флуида се одређују на основу термодинамичких релација, односно једначина стања, полуемпиријских и емпиријских релација, апроксимација и аналогија за транспорт количине кретања, топлоте и масе [7].

Битно је напоменути да се у обзир узимају промене осредњених вредности поменутих величина, попут промене густине услед промене састава смеше и температуре, али не и утицаји попут турбулентне флукуације густине и компресибилности флуида [7].

Једначина стања идеалног гаса (82) се употребљава за поједине компоненте у вишеккомпонентној смеси, док се утицај компоненти које се не понашају као идеалан гас узима у обзир преко полуемпиријских релација.

$$\rho_i = \frac{M_i P}{RT} \quad (82)$$

а укупна густина представља збир густина појединачних компоненти:

$$\rho = \sum \rho_i \quad (83)$$

слична релација важи и за остале величине. Са друге стране, специфична топлота честица се одређује апроксимацијом, помоћу емпиријских релација у функцији апсолутне температуре гасне фазе [7]:

$$C_{pp} = 832,2 + 0,489(T - 130) \quad (84)$$

### Нумеричке методе и аспекти проблема

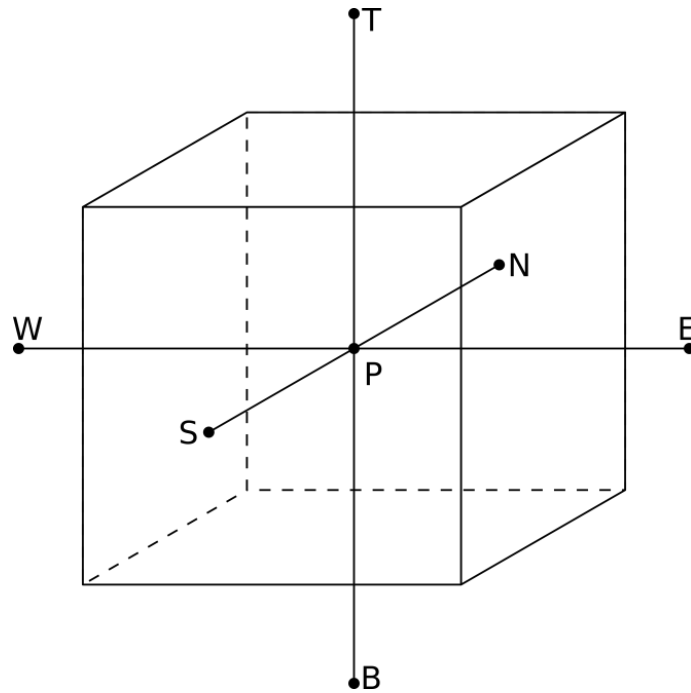
Основу кода за решавање представља TEACH програм, развијен на *Imperial College*-у [117].

Нумеричко решавање једначина које сачињавају модел, а разматране су у претходном делу је могуће уколико се континуално (непрекидно) решење једначина замени дискретним вредностима. У том погледу, систем парцијалних диференцијалних једначина, задатих у диференцијалном облику преводимо у систем алгебарских једначина које су погодне за решавање нумеричким методама [118]. Диферентни облик једначине се добија дискретизацијом опште диференцијалне једначине за унапред дефинисане тачке простора, дате у општем облику [7], [118]:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \Phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) + S_\Phi \quad (85)$$

Прорачунски домен делимо на коначан број контролних запремина којима описујемо струјно поље, односно облик прорачунске области. Слика 3 приказује облик једне контролне запремине, који је у нашем конкретном случају квадар. Ознаке на слици представљају: P – центар ћелије, N, S, W, E, T, B – центре суседних ћелија (north, south, west, east, top, bottom). Закривљене и површине под

нагибом се описују помоћу ректификације, тј. апроксимације геометрије одговарајућом расподелом контролних запремина [8].



Слика 3 Контролна запремина прорачунског домена са суседним чворовима

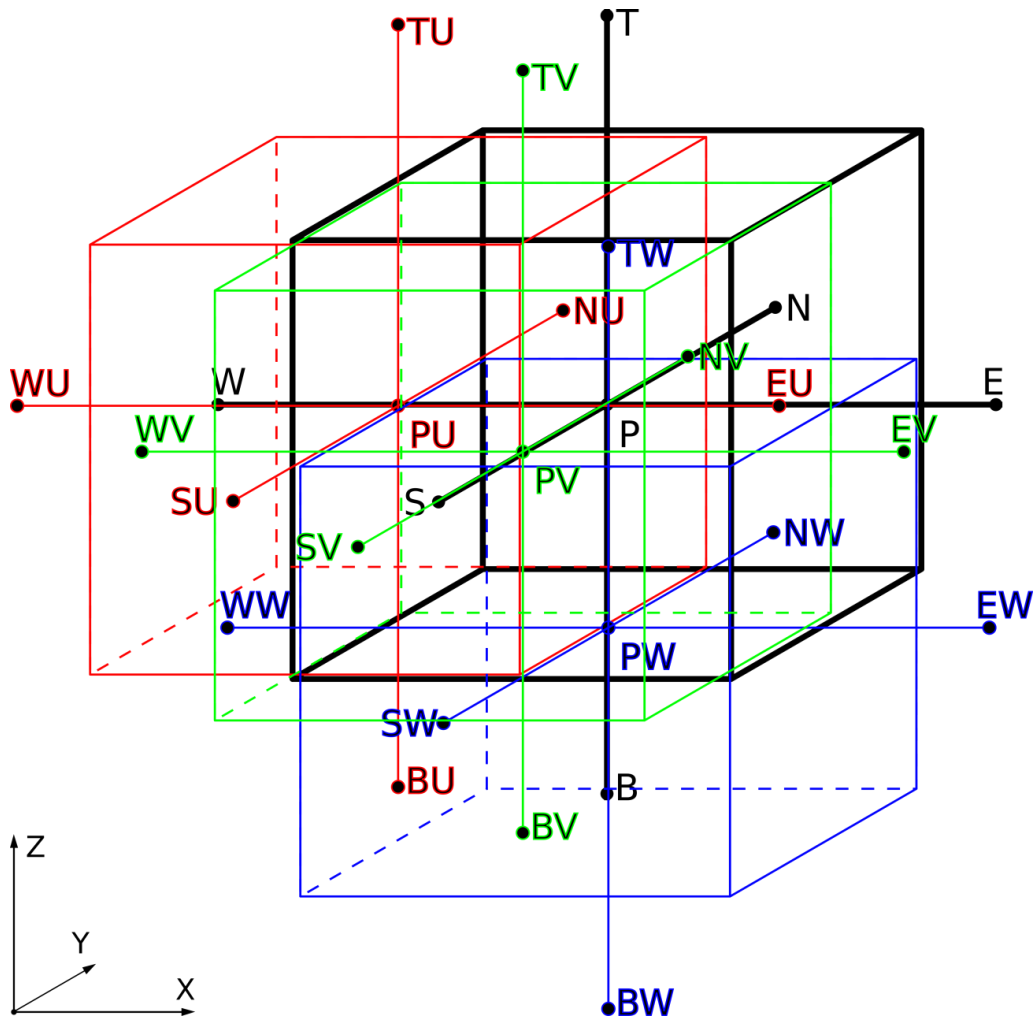
Разматра се очување променљиве  $\Phi$  у оквиру једне контролне запремине, односно мора постојати баланс између улазних и излазних флуксава и запреминских извора и понора у свакој контролној запремини. То се у тродимензионалном случају може записати у облику [7]:

$$J_w A_w - J_e A_e + J_s A_s - J_n A_n + J_b A_b - J_t A_t + \int_V S_\Phi dV = 0 \quad (86)$$

где  $J_i, i = w, e, s, n, b, t$  представља конвективно – дифузиони флуks према једначини  $J_i = \rho U \Phi - \Gamma_\Phi \frac{d\Phi}{dx}$  [7]. Када се уврсте изрази за флуksеве и изворни члан, једначина (86) постаје [7]:

$$(a_p - S_p) \Phi_p = \sum_{\substack{i=w,e,s,n,b,t \\ I=W,E,S,N,B,T}} a_i \Phi_I + S_u \quad (87)$$

Овде је  $a_p = \sum_i a_i$ , а изворни члан у линеаризованом облику  $S = S_p \Phi_p + S_u$ . Приликом решавања диферентних једначина користи се хибридна шема у којој се вредности коефицијената на границама контролне запремине добијају као комбинација конвективног и дифузног коефицијента. Уколико имамо вредности флуксава кроз поједине површине одређене према [7]:  $C = \rho U A$   $D = \Gamma A / \Delta y$ , тада у хибридној шеми можемо одредити вредност коефицијента, за дату границу у опадајућем смеру координате као:  $a = \max\left(\frac{1}{2}C, D\right) + \frac{1}{2}C$  односно у растућем смеру:  $a = \max\left(\frac{1}{2}C, D\right) - \frac{1}{2}C$ . Поменуте једначине важе за скаларне променљиве, док се три компоненте брзине одређују на одговарајућим помереним мрежама – тзв. *staggered grid* [7], [8] – Слика 4.



Слика 4 Положај контролних запремина померених мрежа за прорачун  $U$ ,  $V$  и  $W$  компоненти брзина у односу на основну мрежу са означеним одговарајућим суседним чворовима за сваку мрежу

Једначине за компоненте брзине у помереној мрежи гласе [7]:

$$(a_p^U - S_p^U)U_p^U = \sum_{i=w,e,s,n,b,t} a_i^U U_i^U + A_{ew}(P_W - P_P) + S_u^U \quad (88)$$

$$(a_p^V - S_p^V)V_p^V = \sum_{i=w,e,s,n,b,t} a_i^V V_i^V + A_{ns}(P_S - P_P) + S_u^V \quad (89)$$

$$(a_p^W - S_p^W)W_p^W = \sum_{i=w,e,s,n,b,t} a_i^W W_i^W + A_{tb}(P_B - P_P) + S_u^W \quad (90)$$

За решавање градијента притиска у приказаним једначинама ((88), (89) и (90)) користи се SIMPLE<sup>11</sup> алгоритам [7], [8], [117]. Алгоритам подразумева спрезање једначина континуитета и количине кретања уз помоћ једначине корекције притиска. Приказ корака у решавању алгоритма дат је у [7], [119] где се могу пронаћи детаљне шеме употребе алгоритма. Овде је дат само кратак опис корака прорачуна: Претпоставља се поље притиска  $P^*$  у првој итерацији, док се у осталим користе подаци из претходне итерације; решавају се коефицијенти диферентне једначине ради одређивања корекција компоненти брзине; На основу коригованих брзина одређују се коефицијенти и решава се диферентна једначина корекције притиска; Формира се поље коригованог притиска на основу рачунатих корекција и рачунају се брзине на основу корекција притиска и корекција брзина. Уколико постоје, након овог процеса се рачунају све остале скаларне променљиве и проверава се задовољеност услова конвергенције.

Решавање система једначина се обавља решавањем тродијагоналне матрице – TDMA<sup>12</sup>, које се може извести на више начина. За потребе прорачуна употребљава се Stone-ов SIP<sup>13</sup> алгоритам [120], [121], с обзиром да даје поузданији рад програма и бољу конвергенцију решења.

Процена конвергенције решења зависи од природе решаваног проблема и потребне тачности прорачуна. Као критеријум конвергенције користи се

<sup>11</sup> SIMPLE – Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations

<sup>12</sup> TDMA – TriDiagonal Matrix Algorithm

<sup>13</sup> SIP (SIM) – Strongly Implicit Procedure (Strongly Implicit Method)



„заостали“ извор, тј. резидуал посматране променљиве у свакој појединачној посматраној контролној запремини [7]:

$$R_{\Phi} = (a_p - S_p)\Phi_p - \sum_{\substack{i=w,e,s,n,b,t \\ I=W,E,S,N,B,T}} a_i \Phi_I - S_u \quad (91)$$

Сам критеријум конвергенције подразумева да укупан збир свих резидуала у контролним запреминама, нормализован са масеним протоком на улазу у струјни простор, задовољи критеријум који одговара или је тачнији од задате референтне вредности (93).

$$R_{\Phi,tot} = \frac{\sum_{i,j,k} |R_{\Phi,i,j,k}|}{M_{in}} \quad (92)$$

$$R_{ref} \geq \max \left( \sum_{\Phi=u,v,w,M,H,\chi_A} R_{\Phi,tot} \right) \quad (93)$$

Ради обезбеђивања стабилности итеративног поступка користи се подрелаксација изворних чланова посматраних променљивих [8].

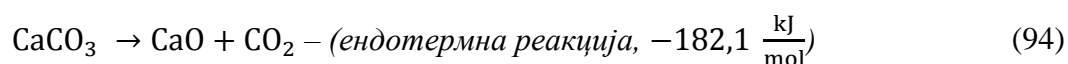
### **Математички опис и физичка позадина одабраних модела реакција честица сорбента при одсумповању у ложишту**

Приликом уношења сорбента у ложиште парног котла долази до хетерогених хемијских реакција између  $SO_2$  и сорбента. Сама реакција сулфатизације може бити директна [122]–[125] и индиректна [48]–[50], [55], [63], [74]. По дефиницији директна сулфатизација се дефинише као реакција између  $SO_2$  и кречњака ( $CaCO_3$ ) у некалцинисаном стању [122]. Насупрот њој, реакција индиректне сулфатизације одвија се у два корака – калцинација и синтеровање као први корак у коме од кречњака ( $CaCO_3$ ) настаје калцијум-оксид ( $CaO$ ), и сулфатизација као други корак при коме долази до реакције између  $CaO$  и  $SO_2$ . Сулфатизација се одвија по механизму директне сулфатизације уколико је парцијални притисак  $CO_2$  у околини честице сорбента већи од парцијалног притиска унутар честице

сорбента. Ово је карактеристично за сагоревање у флуидизованом слоју при повишеном притиску. У разматраном случају услови који владају у ложишту при сагоревању у лету су у довољној мери слични атмосферским, што подразумева да је парцијални притисак  $\text{CO}_2$  мањи од парцијалног притиска  $\text{CO}_2$  у честици сорбента. Овакав однос парцијалних притисака одређује да се сулфатизација одвија по механизму индиректне сулфатизације.

Калцинација и синтеровање су нераздвојни процеси и као такви се моделирају увек заједно. У зависности од примењеног модела и његове сложености ови процеси могу бити занемарени под претпоставком да се одвијају знатно брже од реакције сулфатизације и код таквих модела узети су у обзир само кроз корекционе факторе за брзину реакције уз одређене корекционе факторе и претпоставке [48]. Код кратког времена боравка честица, као што је случај при уношењу сорбента у ложиште котла на спрашени угљени прах, уколико су и пречници честица довољно мали, калцинација и синтеровање добијају значајну улогу у одређивању укупно редуковане количине  $\text{SO}_2$  и битно је познавати што је могуће детаљније развој унутрашње површине сорбента. Ова два процеса постају толико значајна при кратким временима боравка честица у ложишту котла, да се процесу моделирања унутрашње површине честице мора посветити посебна пажња [49], [50], [55], [74], с обзиром да се у том временском периоду унутар честице догађају значајне промене у структури пора услед чега се унутрашња површина вишеструко повећава услед калцинације, али истовремено и губи услед синтеровања. У том, краткотрајном временском интервалу, долази до вишеструког повећања реактивности сорбента, и та појава се користи да би се омогућило везивање значајних количина  $\text{SO}_2$  унутар самог ложишта котла.

$\text{CaCO}_3$  приликом калцинације се претвара у  $\text{CaO}$  и при томе се испушта у околну средину гас  $\text{CO}_2$ . Механизам реакције код аутора који су га посебно разматрали, одвија се према једначини (94) [49], [50], [63]:



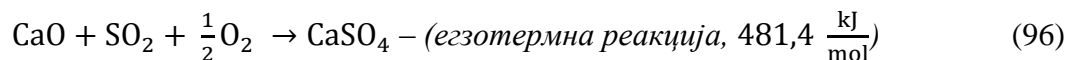
Уколико је реч о  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  као сорбенту, разлика у односу на карбонат је да се уместо угљен-диоксида у околну атмосферу испушта водена пара током реакције калцинације. А  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  постаје  $\text{CaO}$ . Овим механизмом долази до интензивнијег иницијалног унутрашњег развоја површине честице, али услед синтеровања долази истовремено и до значајног губитка исте. *Fan* [46] је приказао да  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , при нижим температурама реакције може имати већу реактивност од  $\text{CaCO}_3$ , што је у вези и пропорционално са развојем унутрашње површине честице. Механизам по коме се одвија ова реакција је приказан помоћу једначине (95) [46]:



Уколико модел не занемарује процес калцинације [46], [50], [59], тада се калцинација моделира ради одређивања степена развијености унутрашњих површина честице, или порозности честице. Приступ је најчешће заснован на формули *German*-а и *Munir*-а [70], са одређеним проширењима делова модела [50], [63] према претпоставкама или доступности експерименталних података.

Сулфатизација се моделира паралелно са калцинацијом и синтеровањем, с обзиром да укупна брзина реакције зависи од порозности честице сорбента која је директно повезана са развојем унутрашње површине честице. С обзиром да у састав кречњака и доломита, који су у симулацијама коришћени као сорбент, поред  $\text{CaO}$  улази и  $\text{MgO}$  као и мањи део других једињења, поред реакције сулфатизације  $\text{CaO}$  долази и до реакције сулфатизације  $\text{MgO}$ . Али с обзиром да  $\text{MgO}$  знатно мање реагује са  $\text{SO}_2$  [48] његов допринос апсорпцији уколико постоји моделира се у оквиру једне заједничке брзине реакције заједно са доприносом  $\text{CaO}$  која се добија експерименталним мерењем за одређени кречњак. Ово је оправдано нарочито код кречњака високе чистоће, који се претежно састоје од  $\text{CaO}$ .

Механизам по коме се одвија процес сулфатизације  $\text{CaO}$  се може приказати помоћу следеће једначине (96) [46], [48]–[50], [57], [58], [63], [64] (96):



Да би реакција сулфатизације могла да отпочне, потребно је да  $\text{SO}_2$  и  $\text{O}_2$  доспеју на порозну површину честице. По доспећу на површину реагују са  $\text{CaO}$  и формира се калцијум-сулфатни омотач [48]–[50], [63], [122]–[125]. Након формирања омотач се шири и ствара отпор даљем продирању реактаната кроз омотач честице, што доводи до успорења реакције, а што се у зависности од модела и његове сложености третира на различите начине, што ће у даљем тексту бити описано.

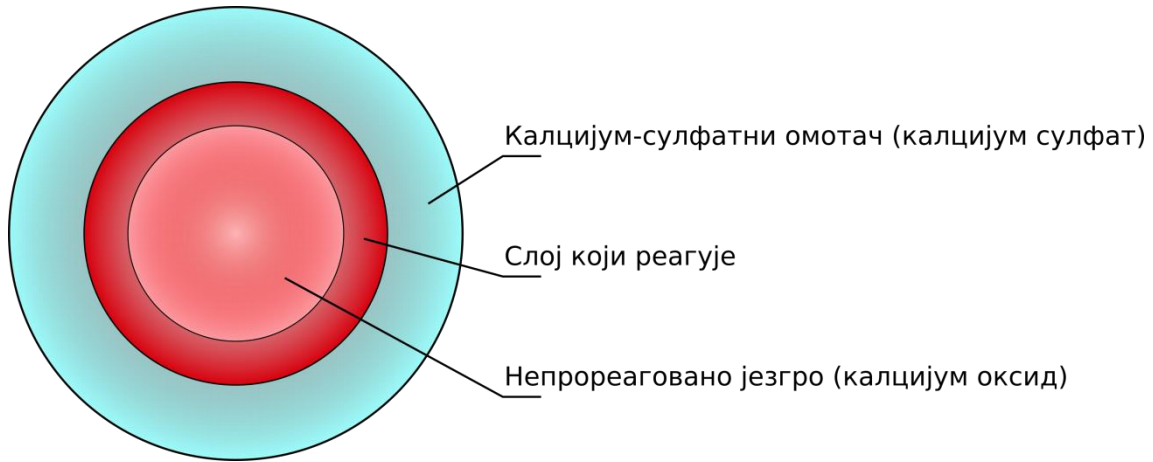
### **Емпиријски *Borgwardt*-ов модел непрореагованог језгра – употребљен за крупније честице калцијум карбоната**

Да би боље разумели потребу и оправданост употребе ситних честица сорбента, потребно је размотрити проблеме приликом уношења крупнијих честица сорбента у ложиште. Иако је постизање крупнијих гранулација приликом мљења сорбента енергетски повољније у односу на ситније фракције и захтева краћи рад млинског постројења, брзине реакције које такав сорбент може да постигне су значајно мање од брзина реакције које постижу ситније мељаве честица. То може довести до мање искоришћености честица сорбента, и мање количине везаног  $\text{SO}_2$ , а самим тим и малог смањења емисије на крају ложишта парног котла. Мало искоришћене честице сорбента, за последицу има потребу за већом количином сорбента убаченог у ложиште да би се остварили приметни резултати. Веће количине сорбента за последицу имају веће транспортне трошкове и убрзано пуњење депоније недовољно искоришћеним сорбентом, што све заједно може узроковати значајне економске трошкове.

У циљу анализе процеса уношења крупнијих честица сорбента на бази калцијума, имплементира се *Borgwardt*-ов модел у комплексни рачунарски код за нумеричку симулацију струјно-термичких процеса који се одвијају у ложиштима парних котлова.

У овом моделу *Borgwardt* је претпоставио да је сорбент претходно у потпуности калцинисан, у одвојеном поступку, и да се реакција калцинације не одвија у

ложишту [48]. Реакција сулфатизације се одвија у ложишту и њој је придодат модел синтеровање честица – Слика 5.



Слика 5 Процес сулфатизације честице сорбента

Брзина реакције, према *Borgwardt*-овом раду [48] је дефинисана као број молова  $\text{SO}_2$  који се апсорбује по 1 g честице  $\text{CaO}$  у јединици времена, и описана је једначином (97):

$$R_a = \frac{1}{w} \frac{dn}{dt} = \frac{\eta}{\rho} k_a c_{\text{SO}_2}^m \left[ \frac{\text{mol}}{\text{gs}} \right] \quad (97)$$

Коефицијент брзине реакције  $k_a$  се одређује из једначине која има *Arrhenius*-ов облик:

$$k_a = A e^{-\frac{E}{RT}} \left[ \frac{1}{\text{s}} \right] \quad (98)$$

Кинетичке параметре за честице просечног пречника  $d_{p,avg} = 96 \mu\text{m}$  при температури у реактору  $980 \text{ }^\circ\text{C}$  *Borgwardt* је дао за доломите, али се кинетички параметри доломита са великим делом  $\text{CaO}$  у укупном саставу могу користити и за симулације кречњака. Оваква претпоставка одговара случајевима са уношењем кречњака са нечистоћама и довољно је блиска стварности [126].

Са примењеним кинетички параметрима за доломит 1343 [48], приказан у претходном тексту (Табела 3), добија се израз за брзину реакције са одговарајућим коефицијентима (99).

Табела 3. Састав доломита које је испитивао Borgwardt из рада [48]

Доломит	CaO	MgO	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>	Специфична густина честице*	Порозност честице*
	[%]	[%]	[%]	[%]	$\left[\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}\right]$	[-]
1337	55,0	43,0	0,33	0,92	1,41	0,58
1351	54,0	28,5	7,00	8,20	1,59	0,56
1343	94	0,8	0,66	2,98	1,88	0,45
1360	81	13,0	1,25	3,65	1,51	0,56

\* за честице средњег пречника  $d_{p,avg} = 96 \mu\text{m}$ .

С обзиром да у току реакције долази до губитка унутрашње површине честице – синтеровања, а да једначина (97) важи за калцинисан сорбент у коме још није дошло до синтеровања, потребно је применити корекцију која узима у обзир синтеровање и његов утицај на честицу.

$$k_a = 1,1 \cdot 10^6 \cdot e^{-\frac{59452,56}{8,314462 \cdot T}} \left[\frac{1}{\text{s}}\right] \quad (99)$$

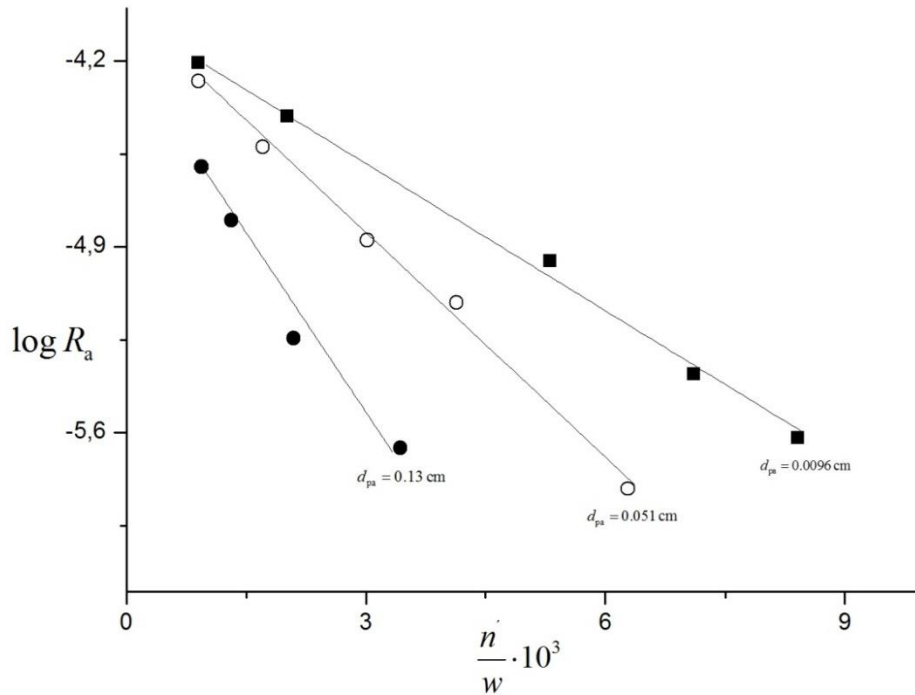
Ова корекција се узима преко фактора ефективности  $\eta_{ef}$ . Фактор ефективности дефинише однос између стварне брзине реакције  $R_a$  и брзине реакције при нултој сулфатизацији  $R_{a,0}$ :

$$R_a = \eta_{ef} R_{a,0} \left[\frac{\text{mol}}{\text{gs}}\right] \quad (100)$$

Фактор ефективности на једноставан начин обухвата сложене процесе који се одвијају унутар саме честице, и приказује њихов утицај на реакцију, без уласка у детаље процеса. Једначина за одређивање фактора ефективности (101) има карактер експоненцијалне функције у односу на апсорбовану количину SO<sub>2</sub>, синтеровање, величину честице и друге параметре реакције:

$$\eta_{ef} = e^{-\frac{\beta \dot{n}}{w}} [-] \quad (101)$$

Коефицијент  $\beta$  се може добити са дијаграма [48] (Слика 6) и представља функцију величине честице и њеног сулфатног оптерећења. Табела 4 садржи вредности за брзину реакције при нултој сулфатизацији, као и вредности коефицијента  $\beta$  за доломите испитиване у [48], добијене фитовањем од стране аутора [6].



Слика 6 Однос брзине реакције и коефицијента  $\beta$  за доломит 1337 [48]

Табела 4. Брзина реакције при нултој сулфатизацији и вредност коэф.  $\beta$ , добијене фитовањем податак из рада [48]

	Доломит	$\log R_{a,0}$	$\beta$ [ $\frac{g}{mol}$ ]			
			$d_{p,avg} = 96 \mu m$	250 $\mu m$	510 $\mu m$	1300 $\mu m$
Подаци из рада [6]	1337	-4,013	420	550	-	970
	1351	-3,896	690	900	-	1140
	1343	-4,208	540	740	-	1090
	1360	-4,412	220	385	-	630
Рачунати подаци	1337	-4,057	425	-	650	1037

Почетна маса честице  $w$  [g] може се одредити према једначини :

$$w = \rho_{CaO} \cdot V \text{ [g]} \quad (102)$$

Густина честице кречњака се овде узима за чист непорозан СаО и може се пронаћи у [95]. Док се запремина честице прорачунава као запремина идеалне сфере  $V = \frac{4}{3}\pi \cdot r_{p,avg}^3$  [m<sup>3</sup>]. Количина сумпора у чврстој честици  $\dot{n}$  је промењива током процеса. На самом почетку процеса једнака је нули, с обзиром да у честици нема SO<sub>2</sub>. На основу тога, и на основу једначине (101) се може закључити да је у почетном тренутку реакције фактор ефективности  $\eta_{ef,0} = 1$ . Током процеса сулфатизације фактор ефективности  $\eta_{ef}$  се смањује услед пораста вредности док количина апсорбованог SO<sub>2</sub> у честици  $\dot{n}$  расте.

Процес сулфатизације честице не може да се одвија до потпуне сулфатизације честице, услед зачепљења пора, већ се одвија док фактор ефективности не достигне граничну вредност [6], [48], [126], а која зависи од величине честице сорбента и може се прочитати са одговарајућег дијаграма (Слика 6). Табела 5 садржи граничне вредности фактора ефективности за неколико пречника честица, добијених на основу података из рада [48]. Услед недостатка експерименталних података за остале доломите (1351, 1343 и 1360) могу се користити познате граничне вредности фактора ефективности за доломит 1337 [126], а без остваривања значајне грешке у прорачуну.

Табела 5. Граничне вредности фактора ефективности  $\eta$  за доломит 1337, на основу података из рада [48]

Средњи пречник честице сорбента	Сулфатно оптерећење честице	Гранична вредност фактора ефективности
	$\frac{\dot{n}}{w}$ [ $\frac{\text{mol}}{\text{g}}$ ]	$\eta_{ef,fin}$ [-]
$d_{p,avg} = 96 \mu\text{m}$	$8,47674 \cdot 10^{-3}$	0,0273
$d_{p,avg} = 510 \mu\text{m}$	$6,37470 \cdot 10^{-3}$	0,0159
$d_{p,avg} = 1300 \mu\text{m}$	$3,33872 \cdot 10^{-3}$	0,0314

*Punbusayakul* [6] је предложио побољшање *Borgwardt*-овог модела сулфатизације [48] увођењем корекције која узима у обзир утицај температуре при нултој сулфатизацији и при повећању сулфатног оптерећења. Измену су унели у једначину за израчунавање фактора ефективности (101) и добили проширену једначину (103) којом се узимају у обзир поменути ефекти:



$$\eta_{ef} = e^{-\frac{\beta \dot{n}}{w}} e^{\left(-\frac{E}{RT}\right) + \left(\frac{E}{RT_{ref}}\right)} \cdot \frac{c^m}{c_{ref}^m} [-] \quad (103)$$

Модел у приказаном облику потребно је прилагодити и уградити у постојећи нумерички код за симулацију сложених струјно термичких процеса.

Приказане једначине, које описују процес сулфатизације и синтеровања, (97)–(103) потребно је довести у облик погодан за уградњу у постојећи нумерички код. Настајање и апсорпција SO<sub>2</sub> у једначинама које описују садржај једињења сумпора у скаларном пољу флуида представљају изворне чланове – извор или понор посматраног једињења, и у транспортним једначинама представљају део изворног члана. Транспортна једначина за SO<sub>2</sub> гласи:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}(\rho U \chi_{SO_2}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V \chi_{SO_2}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho W \chi_{SO_2}) = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \cdot \frac{\partial \chi_{SO_2}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \cdot \frac{\partial \chi_{SO_2}}{\partial y} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \cdot \frac{\partial \chi_{SO_2}}{\partial z} \right) + S_{p,SO_2}^m + S_{p,SO_2}^{CaO} \end{aligned} \quad (104)$$

Чланови са леве стране у једначини (104) представљају конвективни транспорт променљиве  $\chi_{SO_2}$  у струјном пољу. Прва три члана са десне стране представљају дифузиони транспорт променљиве  $\chi_{SO_2}$ . Члан  $S_{p,SO_2}^m$  представља изворни члан SO<sub>2</sub> услед сагоревања сумпора из угљеног праха, док је  $S_{p,SO_2}^{CaO}$  изворни члан услед апсорпције SO<sub>2</sub> помоћу честица CaO.

За моделирање изворног члана  $S_{p,SO_2}^{CaO}$  користи се брзина реакције добијена у једначини (97) сведена димензионо на  $\left[\frac{kg}{s}\right]$ . Изворни члан онда може да се запише у облику погодном за уградњу у нумерички код:

$$S_{p,SO_2}^{CaO} = \dot{m}_{CaO} \cdot R_{a,D} \left[\frac{kg}{s}\right] \quad (105)$$

А масени проток, и брзина реакције су одређени према следећим једначинама:

$$\dot{m}_{\text{CaO}} = \frac{\dot{m}_{\text{CaO,uk}} \cdot f_{\text{CaO}}}{w} \left[ \frac{1}{\text{s}} \right] \quad (106)$$

Односно:

$$R_{a,D} = w \cdot \frac{\eta}{\rho} \cdot k_a \cdot \chi_{\text{SO}_2} \cdot \rho_{\text{cell}} \cdot t \text{ [kg]} \quad (107)$$

Уношење сорбента не утиче само на поље  $\text{SO}_2$  већ и на поље  $\text{O}_2$ , те је потребно додати одговарајући изворни члан и у транспортну једначину за  $\text{O}_2$ . Ова транспортна једначина, са додатим новим изворним чланом гласи:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} (\rho U \chi_{\text{O}_2}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho V \chi_{\text{O}_2}) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho W \chi_{\text{O}_2}) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_z} \cdot \frac{\partial \chi_{\text{O}_2}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_z} \cdot \frac{\partial \chi_{\text{O}_2}}{\partial y} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_z} \cdot \frac{\partial \chi_{\text{O}_2}}{\partial z} \right) + S_{p,\text{O}_2}^m + S_{p,\text{O}_2}^{\text{CaO}} \end{aligned} \quad (108)$$

Изворни члан  $S_{p,\text{O}_2}^{\text{CaO}}$  представља додатну потрошњу кисеоника услед реакције између  $\text{CaO}$  и  $\text{SO}_2$ , а моделира се према једначини (109):

$$S_{p,\text{O}_2}^{\text{CaO}} = \dot{m}_{\text{CaO}} \cdot R_{a,D} \cdot \frac{M_{\text{O}_2}}{2M_{\text{SO}_2}} \left[ \frac{\text{kg}}{\text{s}} \right] \quad (109)$$

Приликом дефинисања овог изворног члана у обзир су узети стехиометријски коефицијенти из једначине (96).

### **PSS Модел (*Alvfors, Lindner*) из групе модела зрна – примењен за ситније честице калцијум карбоната**

За симулацију уношења ситних честица  $\text{CaCO}_3$  сорбента у ложиште котла употребљен је модел који је у коначном облику, са придодатим моделом калцинације и синтеровања, развио *Alvfors*. Модел се састоји из два дела и конципирао га је *Alvfors* [49], [50] на основу модела сулфатизације преузетог од

*Lindner*-а [55]. У њиховим радовима се може пронаћи математички опис и потребне вредности коефицијената за посматрани модел. Сам модел је у првом раду *Alvfors* [49] конципирао као модел сулфатизације који узима фиксирани вредности унутрашњих површина честице и на основу њих и других задатих параметара попут температуре околног гаса, концентрације  $\text{SO}_2$  у околном гасу и др. прорачунава брзине реакције и степен сулфатизације честице. Као основу модела користи изразе за структурне промене и развој структуре честице које су дали *Lindner* и *Simonsson* [55]. У следећем раду [50] *Alvfors* је моделу сулфатизације придодео моделе калцинације и синтеровања. Ове моделе је засновао на радовима *Borgwardt*-а [48], [56], и *German*-а и *Munir*-а [70]. *Alvfors* је предложио корекцију *Borgwardt*-ових коефицијената за калцинацију и синтеровање.

Модел је најбоље приказати од реакција калцинације и синтеровања, а затим прећи на опис реакције сулфатизације. За разлику од претходног модела, овај модел претпоставља да се некалцинисане честице  $\text{CaCO}_3$  са неразвијеном унутрашњом површином убацују директно у поље високих температура и да, услед изложености високим температурама, калцинишу и синтерују у паралелним процесима. Сам модел је благо упрошћен, те уместо прорачуна по слојевима честице, целокупан прорачун се одвија као за један слој, а претходно се прорачунава средња концентрација реактанта унутар честице сорбента. Овај приступ је, како ће бити показано, оправдан и не ствара додатну грешку при кратким временима боравка честица, што је овде случај.

Брзина калцинација је описана помоћу *Borgwardt*-ове [47] једначине за ситне дисперзне честице  $\text{CaCO}_3$  (9). Решавањем једначине (110) коју је поставио *Beruto* [127] добија се израз из ког је могуће одредити степен калцинације (111):

$$\ln(1 - X_c(t)) = -k_c M_{M, \text{CaCO}_3} S_{\text{CaCO}_3} t \quad (110)$$

Односно:

$$X_c(t) = 1 - e^{-k_c M_{M, CaCO_3} S_{CaCO_3} t} \quad (111)$$

Овде  $k_c$  представља фактор брзине реакције и одређује се према једначини *Arrhenius*-овог типа:

$$k_c = k_{c,0} e^{-\frac{E_{k_c}}{RT}} \quad (112)$$

Уз ове једначине, надовезан је модел за прорачун губитка унутрашње површине честице према моделу *German*-а и *Munir*-а [70]. Укупна унутрашња површина представља суму свих једињења која реагују са  $SO_2$  – калцијума и магнезијума, у датом временском тренутку  $t_n$ , и дата је у једначини (113). У овом случају, доминантан је садржај калцијума, због претпоставке да је реч о кречњаку велике чистоће, те се површина једињења магнезијума може придодати површини једињења калцијума.

$$S_0^n = V_{R,Ca} S_{0,Ca}^n + V_{R,Mg} S_{0,Mg}^n \quad (113)$$

Укупна површина дела који се односи на калцијум састоји се од дела који припада  $CaCO_3$  и дела  $CaO$ . Садржај сваког од дела зависи директно од степена калцинације честице, а укупна површина дела калцијума се одређује према:

$$S_{0,Ca}^n = \frac{X_c(t_n) S_{CaO}^n M_{M,CaO} + (1 - X_c(t_n)) S_{CaCO_3} M_{M,CaCO_3}}{X_c(t_n) V_{M,CaO} + (1 - X_c(t_n)) V_{M,CaCO_3}} (1 - \epsilon_{Ca}) \quad (114)$$

Унутрашња површина дела  $CaCO_3$  је позната, док се површина дела  $CaO$  одређује на нешто сложенији начин, с обзиром на паралелни развој површине и њено синтеровање. Тако се у временском тренутку  $n$  одређује површина која је синтеровала по изотерми према једначини :

$$S^{n,k} = S_{0,CaO} \left( 1 - (K_s(T_k) t_n)^{\frac{1}{r(t_k)}} \right) \quad (115)$$

А на основу ове површине и промене степена калцинације, добија се површина CaO у датом временском тренутку, која се користи у оквиру једначине (101) за прорачун укупне доступне површине за реакцију:

$$S_{CaO}^n = \sum_{k=1}^n S^{n,k} (X_c(t_k) - X_c(t_{k-1})) \quad (116)$$

Док се порозност у том временском тренутку одређује у функцији почетне порозности, степена калцинације и односа моларних запремина CaCO<sub>3</sub> и CaO:

$$\varepsilon_{Ca} = \varepsilon_0 + X_c(t_n) \left( \frac{V_{M,CaCO_3} - V_{M,CaO}}{V_{M,CaCO_3}} \right) [-] \quad (117)$$

Параметре који се користе за одређивање коефицијената синтеровања, а које користи *Alvfors* одредио је *Borgwardt* у свом раду [63]. Решавањем горе наведених једначина добија се тренутна унутрашња површина честице у сваком временском тренутку.

Са познатом унутрашњом површином честице прелази се на одређивање степена сулфатизације честице у том временском тренутку.

Први корак за прорачун сулфатизације је одређивање концентрације реактаната. Обе концентрације се изражавају у  $\left[ \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right]$ . Концентрација CaO се одређује на основу односа густине CaO и моларне масе, док се концентрација SO<sub>2</sub>  $\left[ \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right]$  добија на основу познате концентрације SO<sub>2</sub>  $\left[ \frac{\text{kg}}{\text{kg}} \right]$ , према следећој једначини:

$$c_{SO_2} = \frac{X_{SO_2} \rho_{gas}}{M_{M,SO_2}} \left[ \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right] \quad (118)$$

Број додирних тачака унутар зрна се одређује на основу максималног полупречника у потпуности сулфатизованог зрна и фактора геометрије:

$$n_{cp} = \frac{2g_{1,fin}}{g_{1,fin} - \lambda} [-] \quad (119)$$

Кад је број зрна у додиру познат, могуће је, на основу порозности честице и унутрашње површине, под претпоставком сферичности свих појединачних зрна и постојања одређеног преклапања између њих одредити почетни полупречник појединачног зрна тако што се једначина за одређивање бездимензионих специфичних површина [55] реши по  $r_0$ :

$$r_0 = \frac{3(1 - \varepsilon) (2 - n_{cp}(1 - \lambda))}{S_0 (2 - n_{cp} (1 + \frac{1}{2}\lambda) (1 - \lambda)^2)} [m] \quad (120)$$

Време трајања реакције се своди на бездимензионо време, и повезује се са стварним временом реакције помоћу једначине (121) [49], [50]:

$$t^* = \frac{kvc_{SO_2}bt}{r_0vc_{CaO}} [-] \quad (121)$$

Бездимензионе специфичне површине се одређују на основу бездимензионих полупречника продуката реакције и непрореагованог језгра. У првом временском кораку ови полупречници су једнаки, а у свим осталим корацима се одређују рачунски и зависе од степена сулфатизације честице и дужине трајања реакције до тренутка у времену за који се одређују.

Специфична бездимензиона површина  $S_0$  се одређује према обрасцу (122) [55], [74], уколико за тим има потребе (када је као почетни податак познат  $r_0$  уместо  $S_0$ ), с обзиром да је одређена као излазна величина из процеса калцинације.

$$S_0 = \frac{3(1 - \varepsilon) (2 - n_{cp}(1 - \lambda))}{r_0 (2 - n_{cp} (1 + \frac{1}{2}\lambda) (1 - \lambda)^2)} [-] \quad (122)$$

Бездимензиона површина сулфатног омотача зрна  $S_1$  се одређује према једначини (123)[55], и њена вредност зависи од промене бездимензионог полупречника сулфатног омотача  $g_1$ :

$$S_1 = \frac{3(1 - \varepsilon) \left( 2g_1^2 - n_{cp} g_1 (g_1 - \lambda) \right)}{r_0 \left( 2 - n_{cp} \left( 1 + \frac{1}{2} \lambda \right) (1 - \lambda)^2 \right)} [-] \quad (123)$$

Бездимензиона површина непрореагованог језгра зрна  $S_2$  се одређује у зависности од вредности бездимензионог полупречника непрореагованог језгра  $g_2$ , али такође зависи и од односа вредности тог полупречника и структурног параметра  $\lambda$  [55]:

$$S_2 = \frac{3(1 - \varepsilon) \left( 2g_2^2 - n_{cp} f(g_2, \lambda) \right)}{r_0 \left( 2 - n_{cp} \left( 1 + \frac{1}{2} \lambda \right) (1 - \lambda)^2 \right)} [-] \quad (124)$$

Где је, према поменутом односу бездимензионог полупречника  $g_2$  и структурног параметра  $\lambda$  дата вредност  $f$  према:

$$f(g_2, \lambda) = \begin{cases} 0 & | \quad g_2 < \lambda, \\ g_2(g_2 - \lambda) & | \quad \lambda \leq g_2 < 1 \end{cases} \quad (125)$$

Када су познати подаци из горњих једначина (119)–(125), може се одредити бездимензиони полупречник непрореагованог језгра  $g_2$  у новом кораку – једначина (126) [49], [50]:

$$\frac{dg_2}{dt^*} = \frac{S_0}{S_2} \bar{r} \quad (126)$$

Односно, када се преведе у облик погодан за уградњу у рачунарски програм:

$$\begin{aligned} g_2^n &= g_2^{n-1} - \Delta g_2, \\ \Delta g_2 &= \frac{S_0}{S_2} \bar{r} \Delta t^* \end{aligned} \quad (127)$$

Степен сулфатизације  $X_s$  се може изразити помоћу једначине (128) [49], [50], [55]:

$$X_s = 1 - \frac{g_2^3 - \frac{n_{cp}}{4} F(g_2, \lambda)}{1 - \frac{n_{cp}}{4} (1 - \lambda)^2 (2 + \lambda)} \quad (128)$$

Након што су бездимензиони полупречник непрореагованог језгра  $g_2$  и степен сулфатизације одређени, може се одредити и бездимензиони полупречник сулфатног омотача  $g_1$  решавањем кубне једначине (129) [49], [50]:

$$\begin{aligned} g_1^3 - g_2^3 - \frac{n_{cp}}{4} ((g_1 - \lambda)^2 (2g_1 + \lambda) - F(g_2, \lambda)) \\ = \alpha X_s \left( 1 - \frac{n_{cp}}{4} (1 - \lambda)^2 (2 + \lambda) \right) \end{aligned} \quad (129)$$

У једначинама (128) и (129) вредност  $F(g_2, \lambda)$  се одређује такође у зависности од односа  $g_2$  и  $\lambda$ :

$$F(g_2, \lambda) = \begin{cases} 0 & | \quad g_2 < \lambda, \\ (g_2 - \lambda)^2 (2g_2 + \lambda) & | \quad \lambda \leq g_2 < 1 \end{cases} \quad (130)$$

Приликом решавања кубне једначине (129) добијају се три корена, од којих само један представља прави бездимензиони полупречник  $g_1$ , док друга два решења својим вредностима не одговарају. Услови које решење мора да задовољи, и које само једно решење у сваком тренутку задовољава је:  $1 \leq g_1 < g_{1,fin} \wedge g_1 \in \mathbb{R}$ .

За одређивање брзине сулфатизације користи се образац (131) [49], [50], [55], [74], за који се користе подаци добијени прорачуном у посматраном временском кораку, а сама брзина реакције која се добије на основу обрасца се користи при одређивању изворних чланова, и као улазна вредност у наредном временском кораку прорачуна.



$$-\bar{r} = \frac{-r_A}{k_{\text{SO}_2} S_0} = \frac{C}{\frac{S_0}{S_2} + \frac{Da \cdot L \cdot S_0}{l_0 S_{\text{avg}}}} \quad (131)$$

У овој једначини  $Da$  представља *Damköhler*-ов број који се одређује према једначини (132) [49]:

$$Da = \frac{kl_0 v}{D_s} [-] \quad (132)$$

Карактеристично растојање је дефинисано у једначини (133) [49], [55]

$$l_0 = \frac{3(1 - \varepsilon)}{S_0} [\text{m}] \quad (133)$$

Дебљина слоја продуката – једначина (134) [55] одређена према:

$$L = (g_1 - g_2) \cdot r_0 [\text{m}] \quad (134)$$

Средња специфична површина – једначина (135) [49], [55] се одређује као:

$$S_{\text{avg}} = \sqrt{v S_1 S_2} \quad (135)$$

Профил концентрације  $\text{SO}_2$  унутар честице се може добити решавањем диференцијалне једначине (136) [49], [50], [55], [74], а чије се решавање може обавити помоћу програма датог у [128].

$$\frac{1}{z^2} \frac{d}{dz} \left( z^2 \delta \frac{dC}{dz} \right) = -\Phi^2 \frac{C}{\frac{S_0}{S_2} + \frac{Da \cdot L \cdot S_0}{l_0 S_{\text{avg}}}} \quad (136)$$

С обзиром на мала одступања, услед кратких времена реакције (очекивано време боравка честице унутар котла је  $\sim 5\text{s}$ ) модел је модификован, ради значајних уштеда у времену прорачуна и смањења потребних рачунарских ресурса, тако

што је редукован на једно репрезентативно зрно унутар честице, које за потребе прорачуна користи средњу вредност концентрације реактанта  $SO_2$  унутар честице. Ово упрошћење за испитивана кратка времена боравка честице не доноси видљиве губитке у погледу тачности резултата прорачуна, што ће касније и бити показано, али су остварене битне уштеде у трајању прорачуна.

На основу података из модела – брзине реакције, степена сулфатизације, временског корака, и запремине честице, могу се моделирати изворни чланови у једначинама (104) и (108), који у случају овог модела имају следећи облик – изворни члан за транспортну једначину  $SO_2$ :

$$S_{p,SO_2}^{CaO} = \dot{n}_{p,CaO} \cdot Ra \cdot \varepsilon \cdot M_{M,SO_2} \cdot V_{p,CaO} \cdot \Delta t \quad (137)$$

Где је  $\dot{n}_{p,CaO}$  број честица које прате дату трајекторију (облак честица) и одређује се из односа масеног протока честица кроз посматрану трајекторију и масе једне честице  $\dot{n}_{p,CaO} = \frac{\dot{m}_{sorb}}{m_{p,CaO}} \left[ \frac{1}{s} \right]$ . Изворни члан за транспортну једначину  $O_2$ :

$$S_{p,O_2}^{CaO} = \frac{V_{M,O_2}}{2V_{M,SO_2}} S_{p,SO_2}^{CaO} \quad (138)$$

Промена масе честице сорбента може се посматрати кроз промену садржаја одређених једињења у честици, и може се приказати једначином (139):

$$\frac{dm_{p,sorb}}{d\tau} = \frac{dm_{p,CO_2}}{d\tau} + \frac{dm_{p,SO_2}}{d\tau} + \frac{dm_{p,O_2}}{d\tau} \quad (139)$$

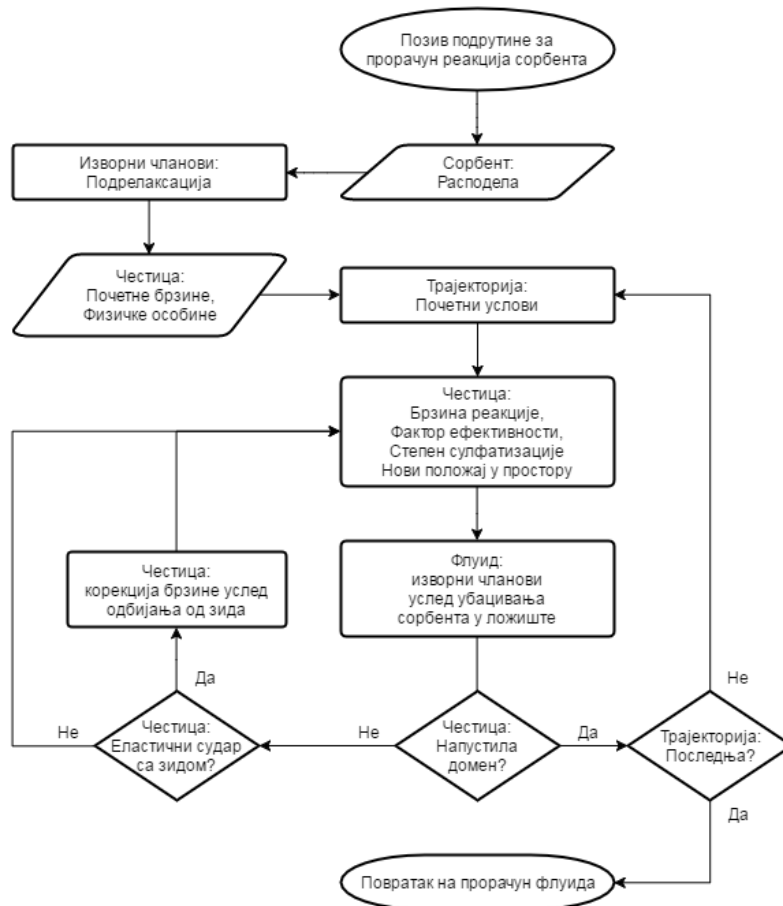
Ова једначина садржи доприносе промени масе услед калцинације и сулфатизације честице сорбента. Приликом калцинације долази до губитка масе услед издвајања  $CO_2$  док у току сулфатизације  $SO_2$  и  $O_2$  се везују унутар честице.

Сам модел је делом поједностављен у односу на полазни, увођењем осредњених вредности за степене калцинације и сулфатизације, и одговарајућих пратећих величина попут бездимензионих пречника и др. по дубини честице, што при краћим временима боравка честица у ложишту парног котла не утиче на тачност

прорачуна. Поређење резултата поједностављеног модела са резултатима код *Alyfors*-а је приказано у раду [86]. Ово поједностављење је у каснијем току симулација значајно умањило потребно време за прорачун на симулираним котловским постројењима.

### Шематски приказ подрутине за прорачун реакција честица сорбента

Подрутина је уграђена у рачунарски код и позива се након сваких  $n$  итерација прорачуна поља флуида, где је  $n$  одређено на основу искуства, тако да омогући довољно итерација између два позива да поље флуида у довољној мери конвергира са новим изворним члановима и да смањи потребно време прорачуна, без губитка тачности рачунатих података. Слика 7 приказује алгоритам по коме подрутина прати кретање и реакције честице, као и њихов утицај на флуид и обратно.



Слика 7 Алгоритам по коме је направљена подрутина за праћење кретања и реакција честица сорбента

## Валидација модела реакција честица сорбента у лабораторијским условима

---

У литератури је могуће пронаћи више експерименталних радова који се односе на испитивања CaO као сорбента који се користи за смањење емисије SO<sub>2</sub> из ложишта, односно из целог котловског постројења. У зависности од жељеног места и начина уношења сорбента, сорбент је у тим радовима испитиван у различитим температурним опсезима и аутори су често уз експерименталне резултате предлагали и модел који користи те резултате и омогућава прорачун процеса у току времена [46], [48]–[50], [63], [64], [69], [86], [129]–[134].

### Валидација модела непрореаговановог језгра уграђеног у нумерички код за симулацију процеса сулфатизације у реактору

За први уграђени модел, према *Borgwardt*-у, коришћени су подаци из његовог рада добијени са мерења на цевном реактору. Да би било могуће симулирати процес, у симулираном гасном каналу је фиксиран узорак сорбента, и преко њега је пуштана смеша гасова истог састава као у *Borgwardt*-овом експерименту [48].

Табела 6 садржи фреквентне факторе и енергије активације које је дао *Borgwardt*, а које се користе у оквиру симулација гасног канала ради валидације модела и касније у симулацијама котловског ложишта са поменутиим моделом.

*Borgwardt*-ова експериментална поставка је детаљно описана у његовом раду [48] и састоји се, у делу који се односи на сулфатизацију честица, и који је симулиран, од цевне деонице унутрашњег пречника 3,42 cm дужине приближно 73 cm.

Брзина струјања гасова на улазу у симулацијама је задата и износи  $0,24 \frac{m}{s}$ , а запремински удео појединачних гасова у укупном саставу смеше гасова одговара саставу који је *Borgwardt* задавао при његовим експерименталним мерењима [48]: 10,5% CO<sub>2</sub>, 3,4% O<sub>2</sub>, 9,9% H<sub>2</sub>O, 0,003% SO<sub>2</sub>, и додат N<sub>2</sub> до попуњености смеше 100% – услови који одговарају сагоревању у зонама богатим горивом, и преовлађују у ложиштима парних котлова.

Табела 6. Преглед кинетичких параметара реакције апсорпције из рада [48]

Доломит	Енергија активације*	Фреквентни фактор	Фреквентни фактор при нултој сулфатизацији
	$E$	$A$	$A_0$
	$\left[ \frac{kcal}{mol} \right]$	$\left[ \frac{1}{s} \right]$	$\left[ \frac{1}{s} \right]$
1337	10,0	$2,4 \cdot 10^5$	$3,653 \cdot 10^5$
1351	18,1	$9,0 \cdot 10^6$	$1,794 \cdot 10^7$
1343	14,2	$1,1 \cdot 10^6$	$1,888 \cdot 10^6$
1360	8,1	$5,5 \cdot 10^4$	$6,853 \cdot 10^4$

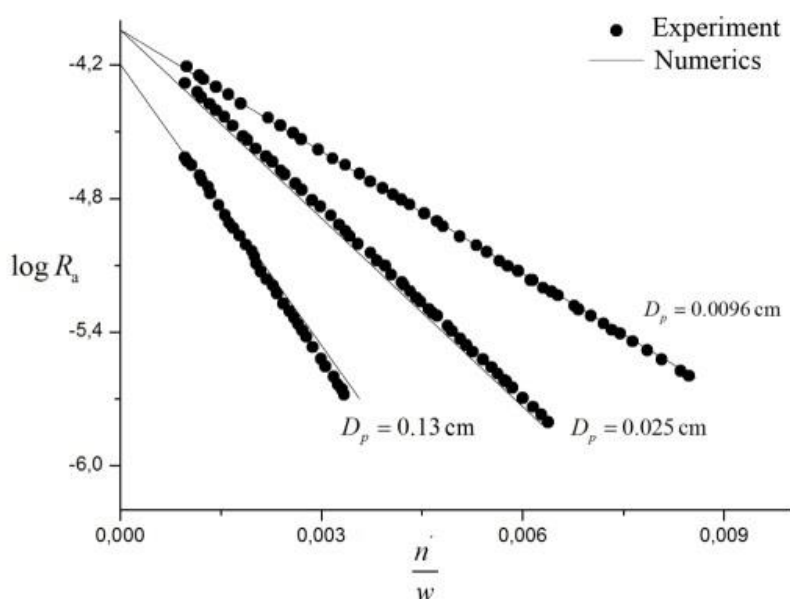
\* резултујуће вредности за сулфатно оптерећење  $0,001 \frac{g}{mol}$ , на температури 980 °C за честице сорбента средњег пречника  $d_{p,avg} = 96 \mu m$ .

Симулације реактора су извршене у дводимензионалном каналу. Примењен је  $k - \varepsilon$  модел турбуленције, уз третман услова у близини зида помоћу зидних функција. Дискретизација парцијалних диференцијалних једначина је обављена методом коначних запремина и хибридном диференцијалном шемом. Све једначине су решаване применом SIPSOL солвера [135], заснованог на Stone-овом SIP алгоритму [120], [121]. Повезивање једначине континуитета и једначина кретања је изведено помоћу SIMPLE алгоритма [136]. Употребљена је умерена дводимензионална структурирана мрежа. Зависност тачности решења од структуре мреже је проверена и утврђено је да тачност решења не зависи од примењене мреже (600 × 30 контролних запремина). Сам рачунарски код је заснован на унапређеној верзији познатог рачунарског кода TEACH-T посебно прилагођеној решавању комплексног двофазног тока са сагоревањем честица угљеног праха, реакцијама сорбента и осталим појавама и процесима који су битни при моделирању.

У наставку су дати резултати симулација на горе поменутом каналу. У симулацијама је моделиран реактор који је користио *Borgwardt*, а добијени

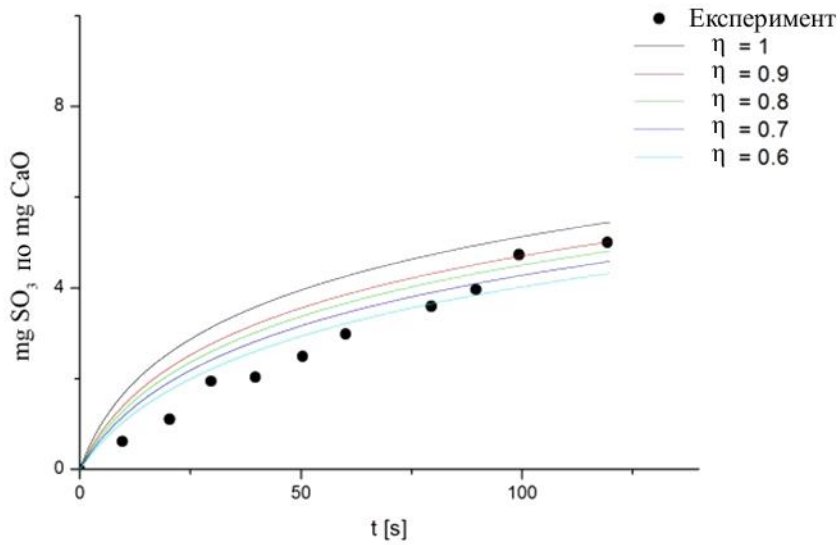
резултати симулација су поређени са *Borgwardt*-овим експерименталним подацима[48].

Слика 8 приказује однос брзине реакције и тренутног сулфатног оптерећења честице за више симулираних полупречника. Поклапање резултата симулација добијених помоћу имплементираних модела у дводимензионалном симулираном реактору је веома добро.



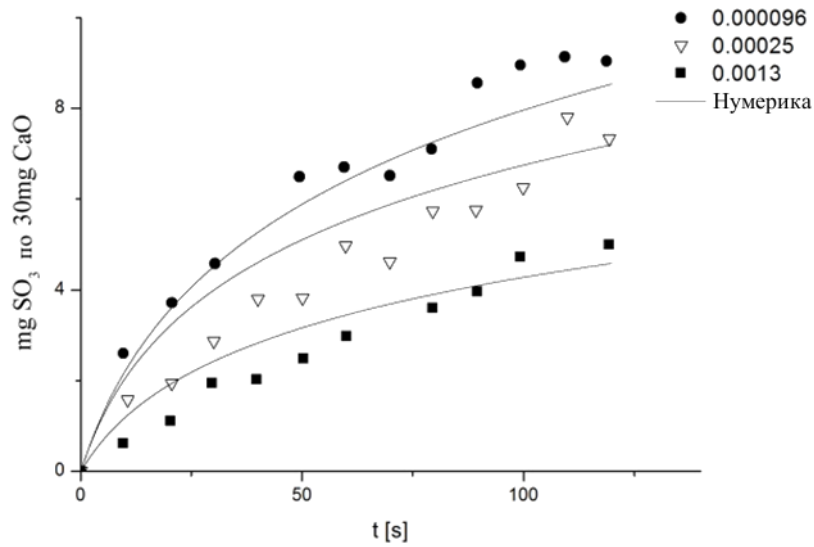
Слика 8 Однос брзине реакције и сулфатног оптерећења за доломит 1337 на  $870^\circ\text{C}$  – поређење резултата симулација са доступним експерименталним подацима

Следеће је поређена количина везаног сумпор-диоксида по јединици масе сорбента (Слика 9) за различите факторе ефективности са експерименталним резултатима. Приметно је мање одступање нумерички добијених резултата у односу на експерименталне. На каналу су извршене симулације за више фракција честица сорбента (Слика 10), као и за вариране температуре (Слика 11). Поклапања резултата симулација при варијацији фракција добро прате резултате *Borgwardt*-ових експерименталних мерења, док при варијацији температура тренд доброг праћења резултата постоји до  $870^\circ\text{C}$ , након чега резултати нумеричких симулација предвиђају мању адсорпцију у односу на експерименталне вредности.

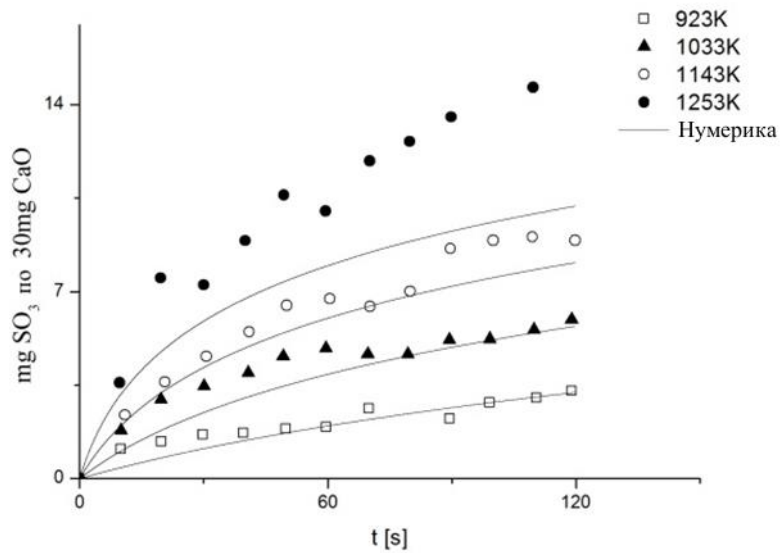


Слика 9 Поређење адсорпције сумпор-диоксида за различите факторе ефективности – поређење резултата симулација са доступним експерименталним подацима

Почетни фактор ефективности за честице сорбента фракције 96  $\mu\text{m}$  и 250  $\mu\text{m}$  има вредност  $\eta_{ef,0} = 1$  и са том вредношћу резултати имају задовољавајуће поклапање са експерименталним подацима. За честице сорбента фракције 1300  $\mu\text{m}$  употреба почетне вредности фактора ефективности  $\eta_{ef,0} = 0,7$  даје боље поклапање са експерименталним резултатима у временском периоду до 140 s и стога се користи као такав у симулацијама. Посматрајући брзину реакције наспрам пречника честице (Слика 12) и *Arrhenius*-ов дијаграм за брзину реакције (Слика 13) може се приметити добро поклапање нумеричких резултата модела примењеног на симулације у реактору и *Borgwardt*-ових експерименталних мерења. Након изведених симулација за посматрани модел, може се закључити да је модел добро имплементиран, те да резултати нумеричких симулација са посматраним моделом добро прате стварне мерене вредности посматраних параметара. Овако валидиран модел се може даље применити у симулацијама сложених процеса у ложишту парног котла.

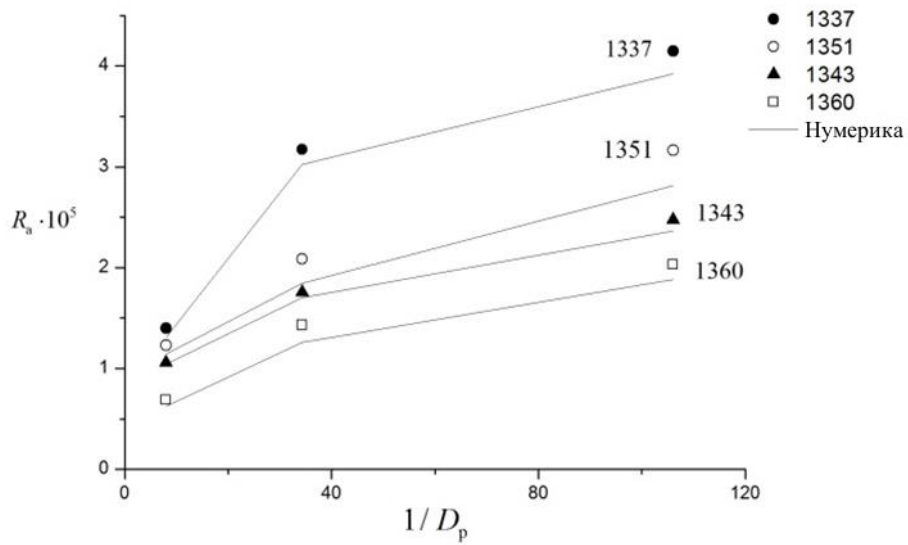


Слика 10 Адсорпција сумпор-диоксида честицама сорбента различитих полупречника за доломит 1351 на  $870^\circ\text{C}$  – поређење резултата симулација са доступним експерименталним подацима

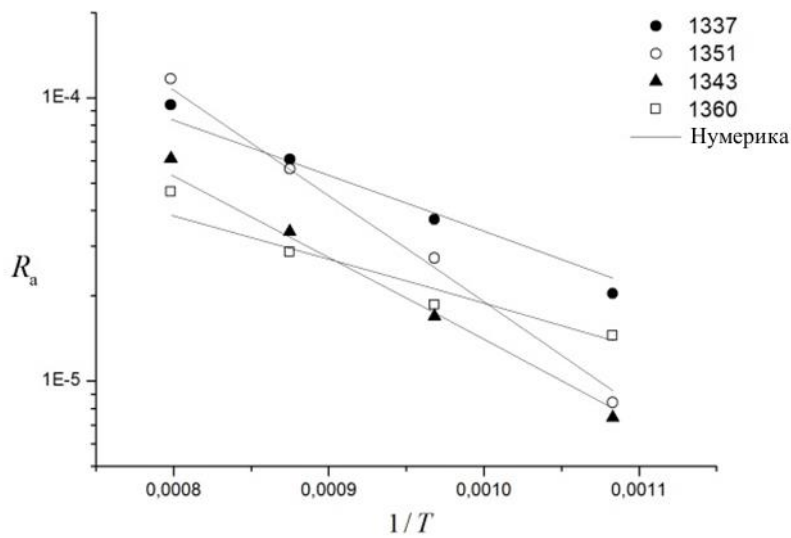


Слика 11 Адсорпција сумпор-диоксида честицама сорбента средњег пречника  $d_{p,avg} = 96 \mu\text{m}$  за доломит 1351 – поређење резултата симулација са доступним експерименталним подацима





Слика 12 Брзина реакције наспрам реципрочне вредности средњег пречника честица – поређење резултата симулација са доступним експерименталним подацима



Слика 13 Arrhenius-ов дијаграм за брзине реакције сумпор-диоксида са кречњаком – поређење резултата симулација са доступним експерименталним подацима

## Валидација модела делимично синтерованих сфера примењеног на цевном реактору

Следећи примењен модел у симулацијама је *Alyfors*-ов модел за ситне честице сорбента [49], [50]. Ситним честицама се сматрају фракције сорбента средње величине честице мање од 30  $\mu\text{m}$ . Овај модел је *Alyfors* формирао за средњу величину честице од 10  $\mu\text{m}$  и са том величином честице модел даје најбоља поклапања са експерименталним подацима. У случају мањих пречника, долази до већег повећања брзина реакције, у односу на оне које модел предвиђа [50]. Ово је могуће кориговати модификацијом једначине за брзину реакције, увођењем корекционих коефицијената у функцији од пречника честица, уколико би се јавила потреба за употребом ситнијих честица од ових.

За разлику од претходног реактора, овде се због кратких времена боравка и саме брзине којом се процес одвија користе цевни реактори (Dropdown tube или Plug flow реактори). Они омогућавају прецизну контролу времена боравка честице трајања реакције у смеси гасова, што је битно код краткотрајних реакција. С тога је и нумерички код за симулацију прилагођен, и сада уместо стационарних честица сорбента („замрзнутих“ у простору) моделира се њихово кретање заједно са гасном фазом, уз претпоставку да је брзина честица једнака брзини гаса у који су уроњене [46]. Моделиран је експеримент на *IFRF*<sup>14</sup>-овим реакторима који је са групом истраживача извео *Flament* [129]. Податке са истог експеримента користио је и *Alyfors* приликом развоја модела [49], [50].

Моделиран је један од реактора коришћених у *Flament*-овим експериментима [129] и у наставку су приказани резултати добијени нумеричким симулацијама цевног реактора, уз примену *Alyfors*-овог модела [49], [50] за ситне честице сорбента. Моделирани реактор је поједностављен у том смислу да се моделира само цев реактора унутар које се одвија калцинација, синтеровање и сулфатизација, док се ток пре и по изласку из цеви не моделира. Моделиран је реактор укупне дужине 4 m и унутрашњег пречника цеви у којој се одвија реакција 0,6 m. Време боравка честице на реактору се може варирати од 0,25 s, па

---

<sup>14</sup> IFRF – International Flame Research Foundation

до 2,5 s. Запремински удео појединачних једињења у смеси гасова која се уводи у реактор одговара осредњеном стварном саставу ложишних гасова и сличан је као код *Borgwardt*-а: 10,5% CO<sub>2</sub>, 3,4% O<sub>2</sub>, 9,9% H<sub>2</sub>O, 0,003% SO<sub>2</sub>, и додат N<sub>2</sub> до попуњености смеше 100% – услови који одговарају сагоревању у зонама богатим горивом, и преовлађују у ложиштима парних котлова.

Поред моделираног цевног реактора из *Flament*-ових експеримената [129], моделиран је и реактор из *Fan*-ових експеримената [46], [64], у коме су симулиране реакције Ca(OH)<sub>2</sub> и за ове реакције су одређени нови коефицијенти у једначинама које описују модел, а одговарају реакцијама Ca(OH)<sub>2</sub>. Коефицијенти за калцијум-хидроксид су одређени фитовањем кривих за калцинацију и развој површине датих као резултат *Fan*-ових експеримената [46] у температурном домену у коме се одвијају посматране реакције. Табела 7 садржи преглед употребљених коефицијената.

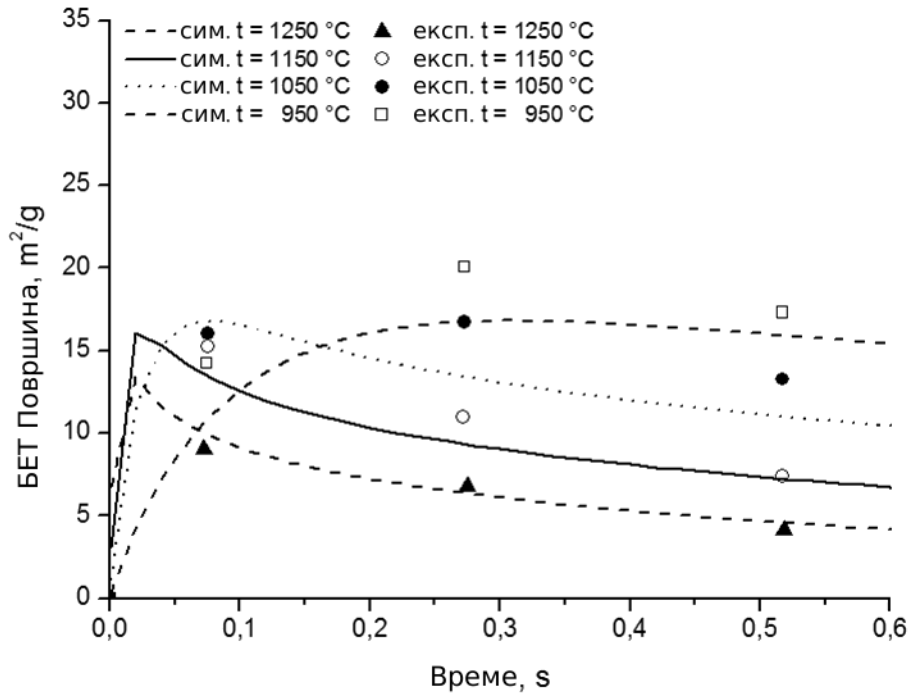
Табела 7. Коефицијенти употребљени за прорачун калцинације и синтеровања честице сорбента и порозности честице

Сорбент		CaCO <sub>3</sub> *	Ca(OH) <sub>2</sub> **
$k_c$	$\left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^2\text{s}}\right]$	$3,405 \cdot 10^7 \cdot e^{-\frac{201}{RT_p}}$	$2,2 \cdot 10^6 \cdot e^{-\frac{141}{RT_p}}$
$K_s$	$\left[\frac{1}{\text{s}}\right]$	$e^{6,735 - \frac{11660}{T_p}}$	$e^{-1,4 - \frac{2000}{T_p}}$
$\gamma$	$[-]$	$e^{0,0018T_p - 0,8154}$	$e^{0,002T_p - 0,89694}$

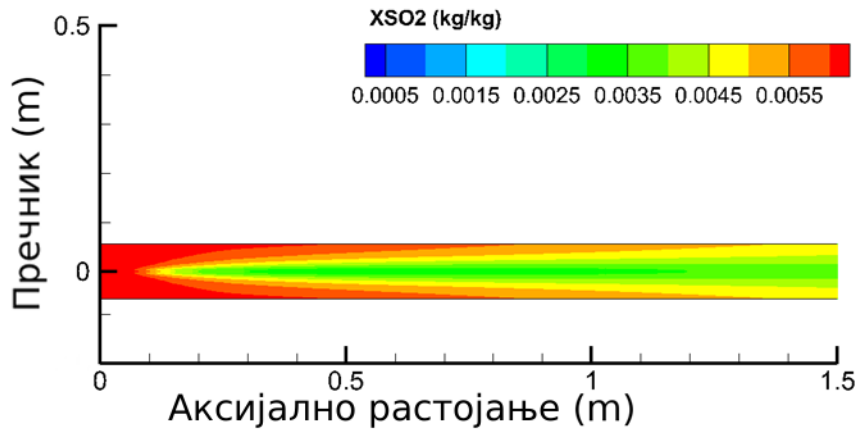
\* подаци из *Borgwardt*-овог рада[71] за калцијум-карбонат,

\*\* прорачунати коефицијенти добијени фитовањем експерименталних података за калцијум-хидроксид од *Fan*-а [46], доступна мерења за честице пречника 1 μm.

Може се приметити да су употребљавани подаци добијени од *Borgwardt*-а при симулацијама CaCO<sub>3</sub> (Табела 7), с обзиром да дају боље коначне резултате при симулацијама, у односу на коефицијенте одређене од стране *Alvfors*-а [50]. Ово је тачно за температуре изнад 950°C, док се за ниже температуре употребљавају *Alvfors*-ови коефицијенти који се могу пронаћи у [49], [50]. Слика 14 приказује развој унутрашње површине честице приликом њеног кретања кроз симулирани канал (Слика 15). Разлике у количини везаних оксида сумпора у центру канала и уз бочне ивице узроковане су задатим профилем расподеле честица сорбента на улазу у канал.



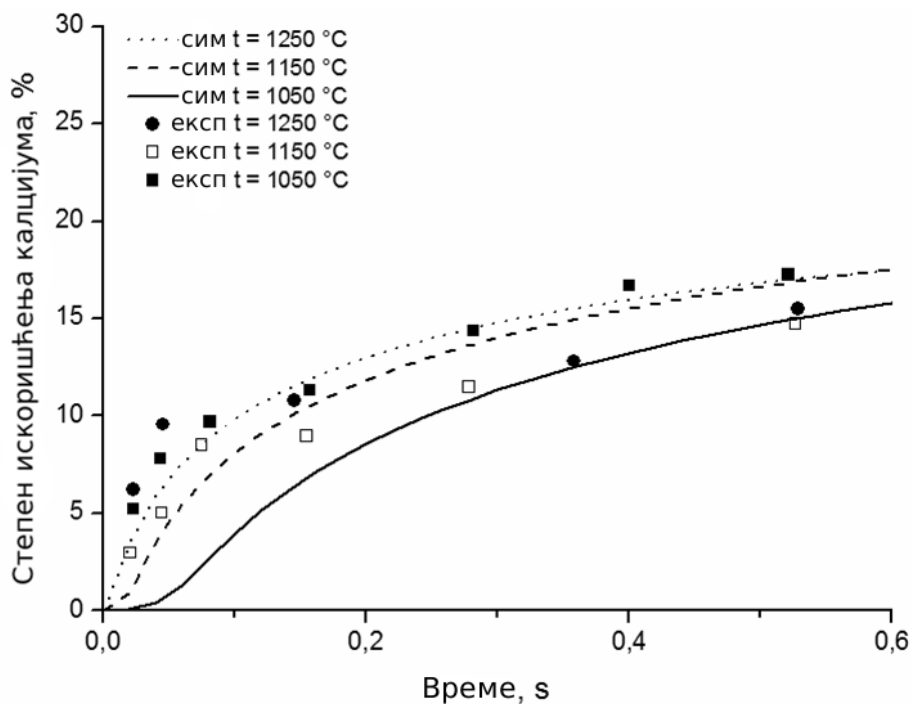
Слика 14 Развој БЕТ површине честице сорбента  $\text{CaCO}_3$  у симулираном моделу канала применом коефицијената од Borgwardt-a [71] и поређењем са експерименталним подацима од Flament-a [129]



Слика 15 Приказ дела симулираног канала моделираног према експерименталном постројењу Flament-a [129]

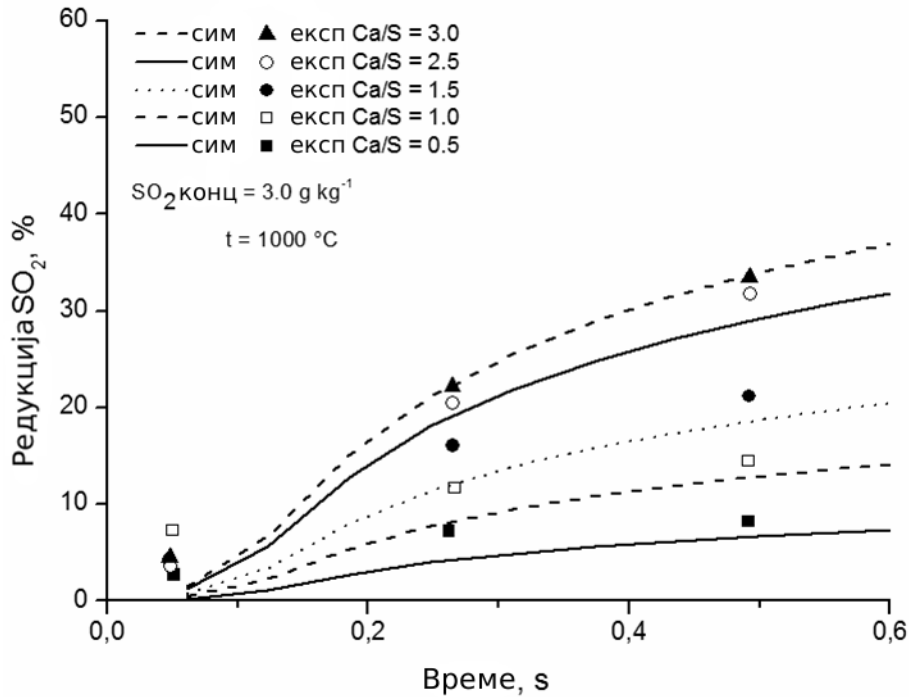
За посматрани сорбент, могу се издвојити подаци за степен искоришћења честица (Слика 16) и њих упоредити са доступним експерименталним подацима. Из

симулација се уочава да модел за кратка времена боравка честица (испод 0,2 s) благо подбацује у односу на експерименталне податке, али се, за дужи боравак честице тренд поправља и до краја канала (време око 0,2 s) слагање симулираних нумеричких и експерименталних података има значајно смањена одступања.



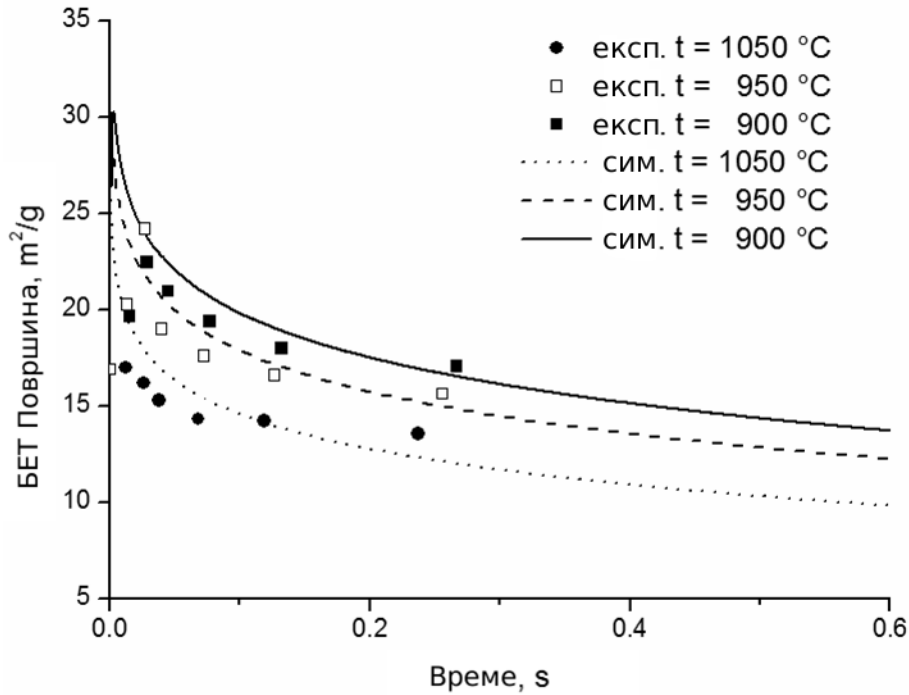
Слика 16 Степен калцинације честица сорбента  $\text{CaCO}_3$  добијен у симулираном моделу канала применом коефицијената од Borgwardt-a [71] и поређењем са експерименталним подацима од Flament-a [129]

Ради провере да имплементирани модел ради ваљано у спрези са комплексним нумеричким кодом за симулације процеса у парним котловима, потребно је упоредити излазне емисије, односно степене смањења емисије оксида сумпора. Ово поређење је изведено такође на посматраном каналу, а резултати приказују добро слагање података (Слика 17). Поред симулација са  $\text{CaCO}_3$  као сорбентом, постојала је потреба за провером могућности уграђеног модела за примену при симулацијама са  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  као сорбентом. У ту сврху, као што је речено, одређени су коефицијенти (Табела 7) према доступним мерењима (Fan [46]). Са применом ових коефицијената, добијена је, помоћу нумеричких симулација канала, серија кривих за развој површине која се добро подударају са експерименталним подацима.



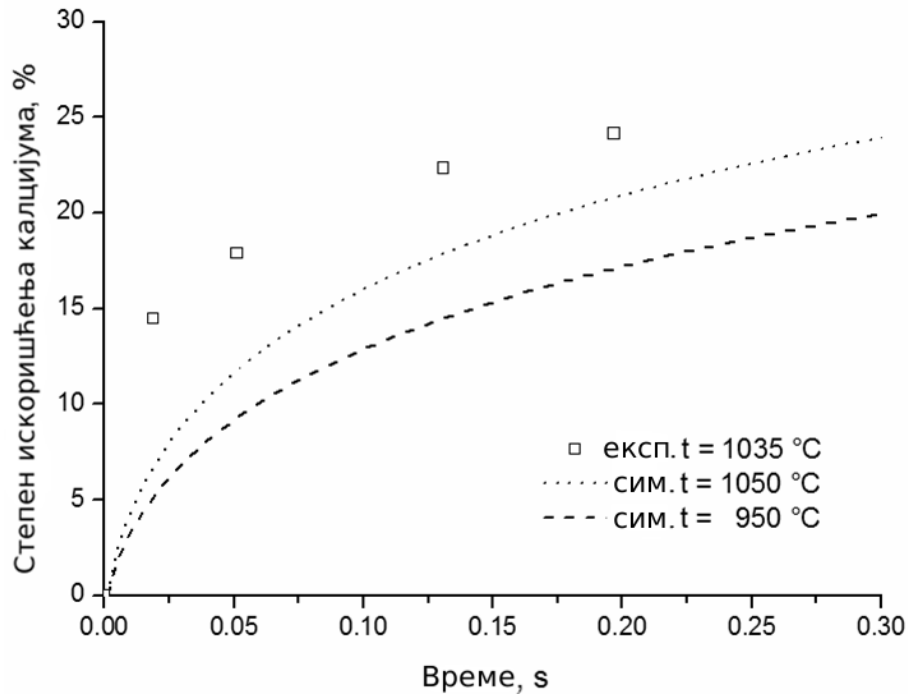
Слика 17 Поређење резултата нумеричких симулација гасног канала и експерименталних података [129] за смањење емисије SO<sub>2</sub> по дужини гасног канала

Fan је приметио постојање наглих скокова при почетном развоју површине, а које модел не може да ухвати појединачно, већ их узима у обзир осредњене у току развоја површине. Нагле скокове површине је приметио и Borgwardt [71], али их није посебно третирао, већ је поставио модел тако да, полазећи од теоријске максималне површине, честица услед синтеровања само губи површину и тај губитак је најинтензивнији на самом почетку процеса. На тој претпоставци је засновао модел, који је Alvfors [50] користио као основу за свој донекле проширен модел, који се и овде употребљава. Слика 18 приказује резултате примене овог модела. Можемо уочити полазни скок у површини честице који се у симулацијама наслања на саму осу, док код доступних резултата мерења тај скок има одређено време кашњења у односу на почетак процеса. Ово кашњење може бити узроковано брзим узгревањем честице, отпуштањем влаге, или неким другим утицајем који модел не обухвата. У наставку реакције, резултати нумеричких симулација се добро подударају са резултатима доступних експерименталних мерења.

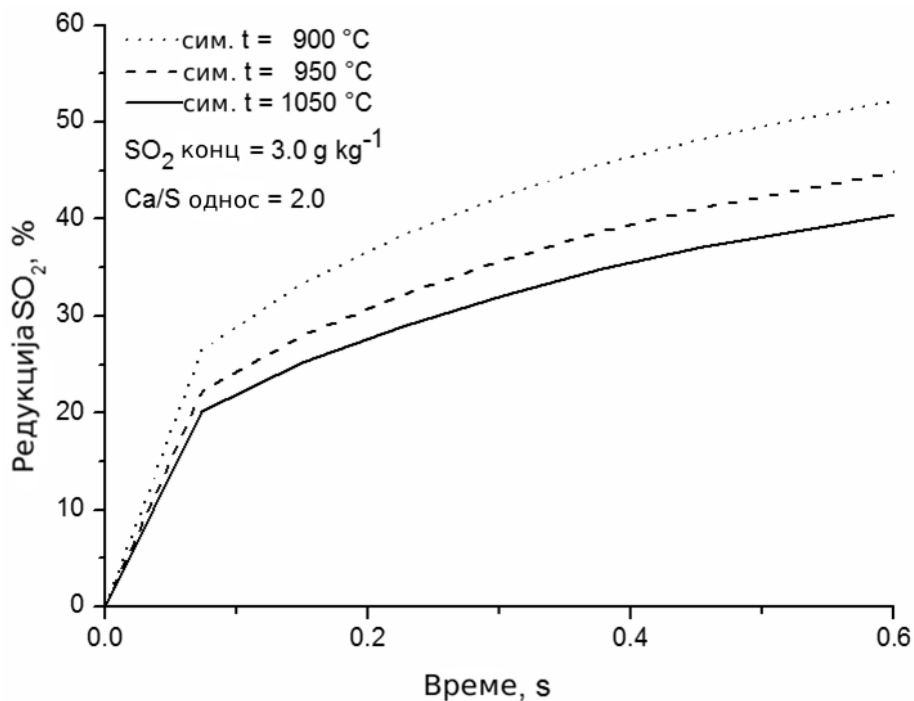


Слика 18 Развој БЕТ површине честице сорбента  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  у симулираном моделу канала применом израчунатих коефицијената и поређењем са експерименталним подацима од *Fan-a* [46]

Приметно је да, услед недостатка краткотрајних наглих скокова површина долази до предвиђања мањег степена искоришћења сорбента (Слика 19). Овај тренд се наставља дуж целог канала, са тенденцијом смањења разлике између нумеричких и експерименталних резултата. Слика 20 приказује предвиђање смањења емисије  $\text{SO}_2$  на излазу из реактора у *Fan*-овим експериментима. Не постоје доступни подаци о смањењу емисије код *Fan-a*, али поређењем дате криве са доступним подацима код *Flament-a* за  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  као сорбент [129] може се приметити велика сличност у добијеним резултатима, што наводи на закључак да је понашање два сорбента коришћена у експериментима *Fan-a* и *Flament-a* слично због сличног садржаја калцијума у њима.



Слика 19 Степен калцинације честица сорбента  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  добијен у симулираном моделу канала применом израчунатих коефицијената и поређењем са експерименталним подацима од Fan-a [46]



Слика 20 Смањење емисије  $\text{SO}_2$  по дужини гасног канала за реактор из Fan-ових [46] експеримената (без доступних експерименталних података)



## Нумеричке симулације комплексних процеса у ложишту и оптимизација предметног поступка одсумповања

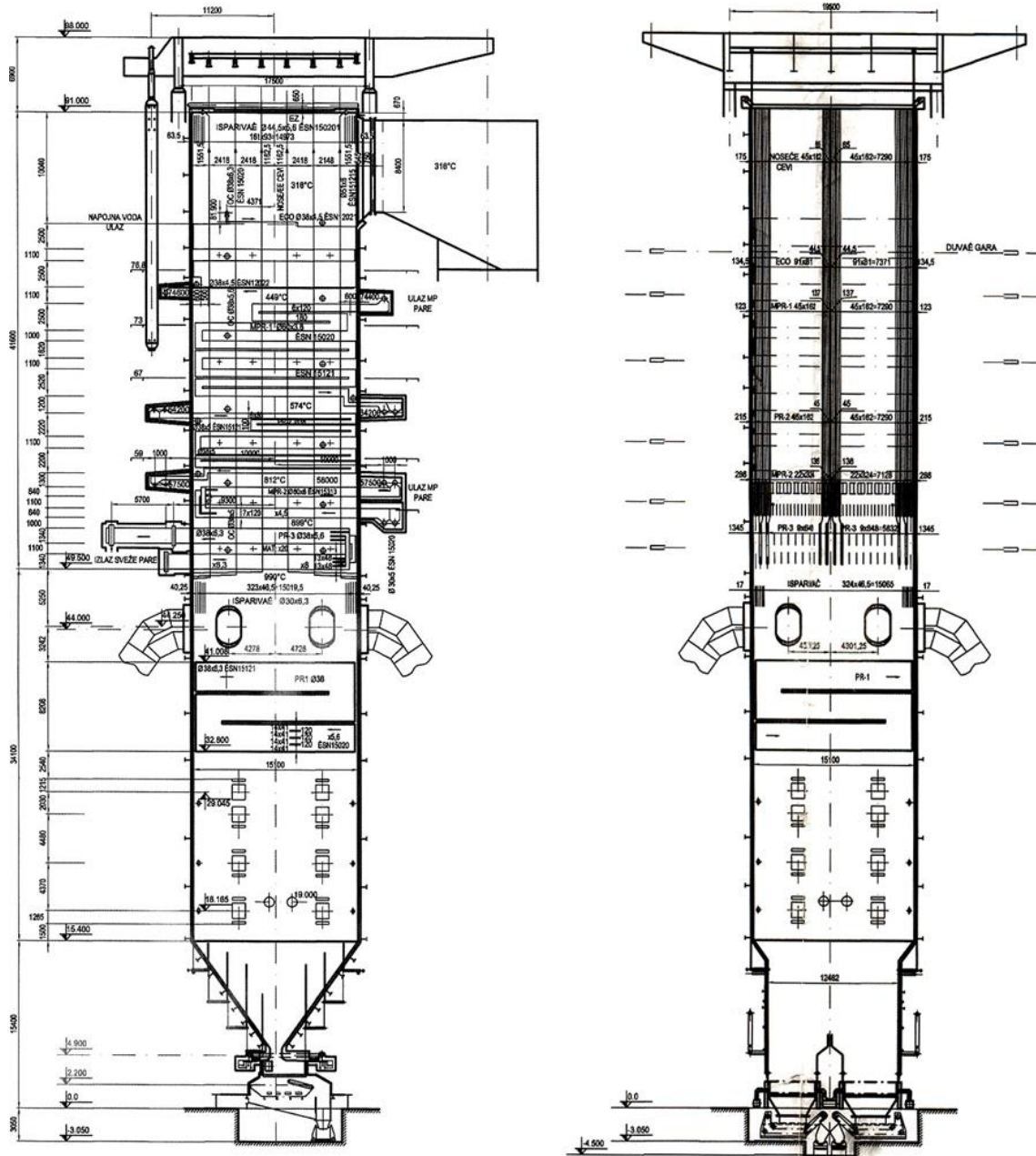
---

Модел предметног ложишта који се анализира у докторату је израђен у ранијим истраживањима [9], [10] и одговара ложишту парног котла блока ТЕ Костолац Б2, а обухвата и подмодел реакција формирања и деструкције азотних оксида [11]. Значајно је надограђен са додатним моделом реакција честица сорбента (односно кречњака) са оксидима сумпора [51], [132], и примењен за анализу струјнотермичких процеса у ложишту уз нагласак на могућност редукације садржаја оксида сумпора и азота током процеса сагоревања честица угљеног праха [51], [137], [138].

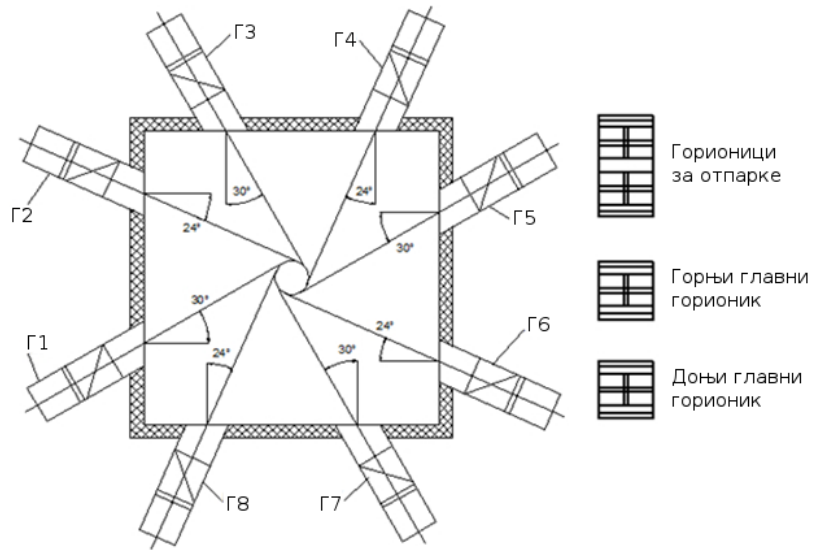
Парни котао је торањског типа. Ложиште парног котла, са одвођењем шљаке у чврстом стању, има основу димензија 15,1 m x 15,1 m и високо је 43 m (Слика 21). Има осам тангенцијално постављених горионичких пакета (Слика 22) са по четири етаже – две главне етаже и две етаже за отпарке. При пуном радном оптерећењу овај котао остварује 350 MW<sub>e</sub> и номинални проток паре 1000 t/h. У ложишту се сагорева спрашени угаљ (лигнит) у лету.

Изнад горионичких пакета, крећући се по висини ложишта, налази се област зидног прегрејача паре (Слика 23), а изнад ове зоне, пре излаза из ложишта и осам рецикулационих отвора.

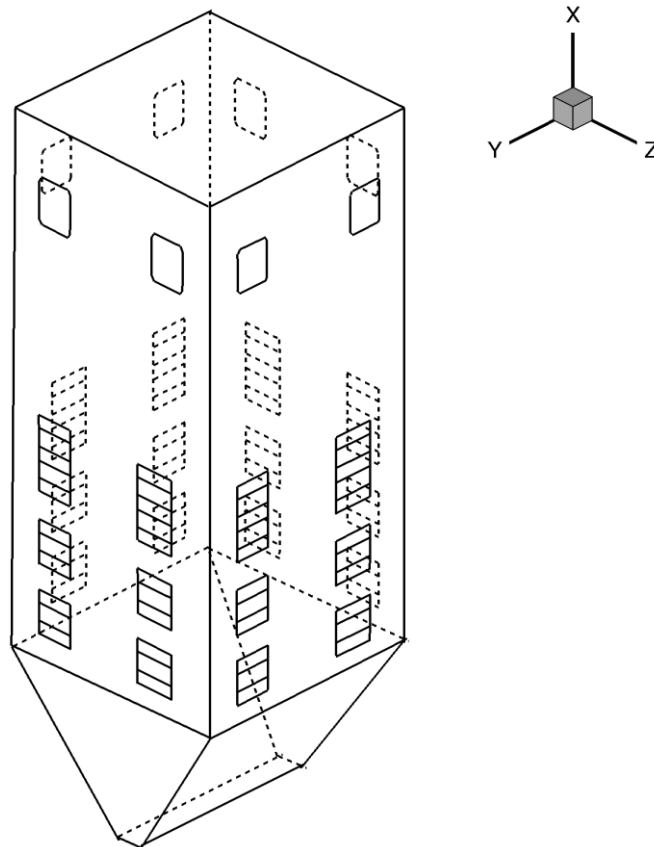
Нумеричка мрежа на којој се одвијају симулације састоји се од 140 x 65 x 65 контролних запремина, што укупно чини 591 500 контролних запремина. Употребљава се 3D неуниформна ортогонална структурирана нумеричка мрежа. Слика 24 и Слика 25 приказују попречне пресеке мреже у равнима XY, XZ и YZ.



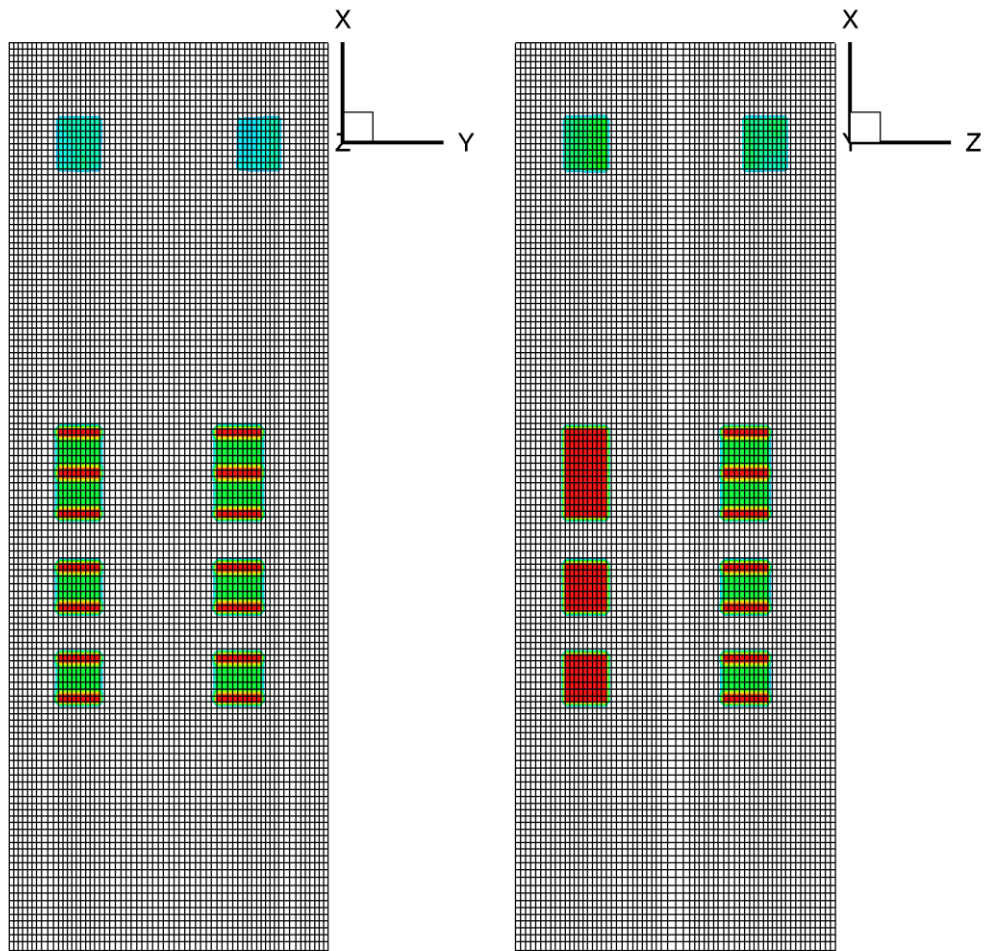
Слика 21 Попречни пресек парног котла ТЕ Костолац Б2



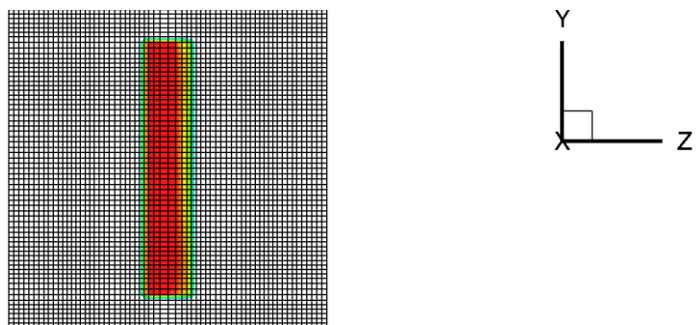
Слика 22 Тангенцијална расподела горњоничких пакета по зидовима ложњишта парног котла ТЕ Костолац Б2



Слика 23 Приказ 3D модела геометрије ложњишта котла блокова ТЕ Костолац Б2



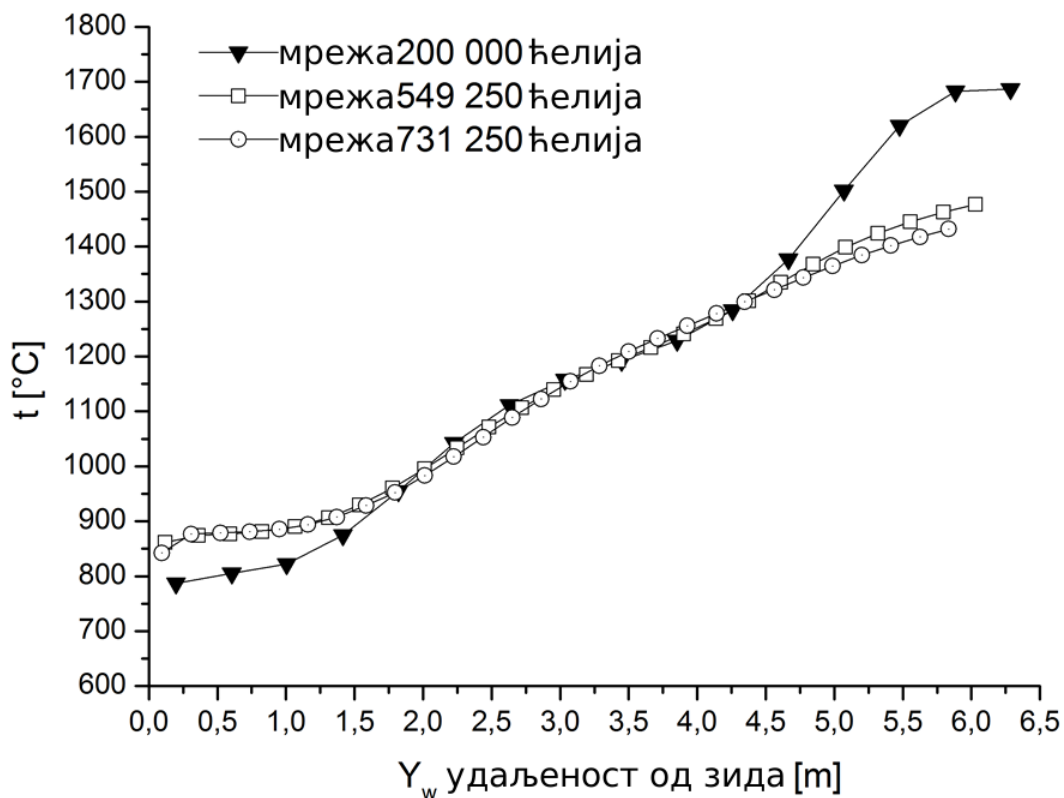
Слика 24 Нумеричка мрежа за прорачун парног котла у  $XY$  равни (улазне и излазне површине су обојене ради илустративног приказа)



Слика 25 Нумеричка мрежа за прорачун парног котла у  $YZ$  равни (улазне и излазне површине су обојене ради илустративног приказа)

## Провера утицаја мреже на резултате прорачуна

Утицај мреже на крајње резултате симулација, односно одабир оптималне мреже за симулације на овој геометрији ложишта парног котла проверен је [9], а овде је приказан део провере густине мреже и њен утицај на температуру струје гасова у близини зида. Слика 26 приказује резултат за три различите мреже, без уношења сорбента. Мрежа која се користи у прорачунима је довољно густа да обезбеди решење које не зависи од броја ћелија у мрежи. У погледу додатног дела програма који се односи на одређивање поља сумпора пре и након уношења честица сорбента битно је и одредити временско трајање корака при нумеричком праћењу честица сорбента,



Слика 26 Студија утицаја мреже на температуру у близини зида

такво да честица довољан број временских корака борави у једној контролној запремини. Трајање временског корака се прорачунава на основу података о кретању честице, у функцији брзине кретања честице, да би се обезбедио довољан број временских корака унутар сваке контролне запремине и да не би дошло до

прескакања појединих запремина. Слично као и код избора броја трајекторија праћених честица угљеног праха [10], и овде је битан баланс између тачности прорачуна и прорачунске ефикасности. У овом случају то је 200 трајекторија по сваком отвору кроз који се уноси сорбент.

### Валидација модела процеса у ложишту

Претходно верификовани нумерички код за прорачун ложишта је проширен додатним моделима и реакцијама. Из тог разлога је потребно извршити додатну проверу рада кода. Поред претходно наведене валидације на дводимензионалним каналима, као и валидације температурног поља у ложишту, изведен је сет симулација за поређење са доступним подацима о емисијама сумпора, добијеним на реалним котловским постројењима. Улазни подаци за ложиште котла су задати тако да одговарају стварним условима који су владали за време испитивања парног котла, а потом су поређени добијени излазни подаци симулација и експерименталних мерења [11].

Поређења су вршена за тест-случајеве В-2-2009 и В-1-2010, при максималној продукцији котла, са шест млинова у раду, за које су подаци за састав горива (Табела 8), масене протоке угљеног праха и ваздуха (Табела 9), и расподелу горива и ваздуха по етажама горионика у масеним процентима (Табела 10). У посматраним тест-случајевима, за које су били доступни експериментални подаци за емисије сумпор-диоксида, добијено је одлично слагање садржаја оксида сумпора на излазу из ложишта код мерених и симулираних режима.

Табела 8. Састав горива – угљеног праха у симулираним тест-случајевима коришћеним за валидацију нумеричког кода

Тест-случај	Садржај влаге	Садржај пепела	Доња топлотна моћ	Угљеник	Водоник	Кисеоник	Азот	Сумпор
	$W$	$A$	$LHV$	$C$	$H$	$O$	$N$	$S_{saq}$
	[%]	[%]	$\frac{[kJ]}{[kg]}$	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]
<b>В-2-2009</b>	9,18	29,98	14997	40,65	3,65	14,09	1,57	0,88
<b>В-1-2010</b>	9,56	33,00	14243	37,96	3,52	13,59	1,52	0,85

Гориво у симулацијама има доњу топлотну моћ  $LHV = 8607$  kJ/kg, на доставно стање

Табела 9. Масени протоци радног горива и ваздуха у посматраним радним режимима [11]

Тест-случај	Укупан проток горива	По горионику у раду			Проток загрејаног ваздуха кроз уређаје за догоривање	Присис штетног ваздуха**
		Проток угљеног праха	Проток аеросмеше	Проток секундарног ваздуха*		
		$\dot{m}_{up}$ [ $\frac{kg}{s}$ ]	$\dot{m}_{up,gor}$ [ $\frac{kg}{s}$ ]	$\dot{m}_{as}$ [ $\frac{kg}{s}$ ]		
<b>В-2-2009</b>	92,9	9,8	54,0	33,2	11,7	55,9
<b>В-1-2010</b>	92,8	10,2	50,6	32,1	11,8	54,3

\* укључује и језгрени ваздух који се уноси кроз средишње делове горионика,

\*\* присис штетног ваздуха обухвата присис ваздуха у млинском постројењу и ложишту.

Табела 10. Расподела угљеног праха и ваздуха по етажама горионика

Тест-случај	Расподела горива по етажама горионика		Расподела протока аеросмеше кроз главне горионике		Расподела протока секундарног ваздуха кроз главне горионике	
	Главни горионици		Горионици за отпарке		[%]	[%]
	Доњи	Горњи	Доњи	Горњи		
<b>В-2-2009</b>	39	21	26	14	57	65
<b>В-1-2010</b>	45,5	24,5	19,5	10,5	55	65

Табела 11 садржи поређења резултата и може се приметити да су одступања стварних и вредности добијених симулацијом испод 2%.

Табела 11. Преглед резултата добијених симулацијама и мерењем за емисију  $SO_2$  у поређеним тест-случајевима[137]

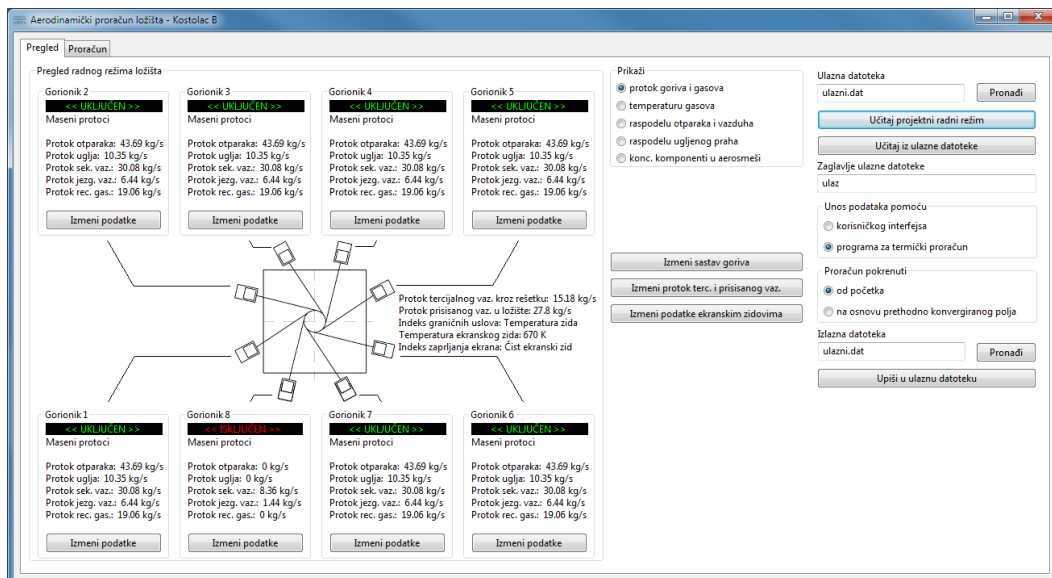
Тест-случај	Однос садржаја укупног и сагоривог сумпора у гориву	Садржај сумпор-диоксида у ложишним гасовима добијен симулацијама	Садржај сумпор-диоксида у гасовима добијен мерењима	Процентуално одступање
	$S_{tot}/S_{sag}$ [%]	[ $\frac{mg}{Nm^3}$ ]	[ $\frac{mg}{Nm^3}$ ]	[%]
<b>В-2-2009</b>	1,39 / 0,88	5520,8	5597,3	1,37
<b>В-1-2010</b>	1,30 / 0,85	5434,1	5533,0	1,79

За употребљени модел настајања и деструкције оксида азота валидација је обављена у претходним истраживањима и резултати валидације заједно са резултатима модела су објављени у раду [11].

## Кориснички интерфејс развијеног софтвера

С обзиром да је програм осмишљен тако да омогући и корисницима – инжењерима који се баве анализом процеса и вођењем реалних постројења могућност управљана симулацијама и задавања почетних услова, развијен је одговарајући кориснички интерфејс, са циљем лаког визуалног уноса радних параметара, као и праћења рада програма у току симулација.

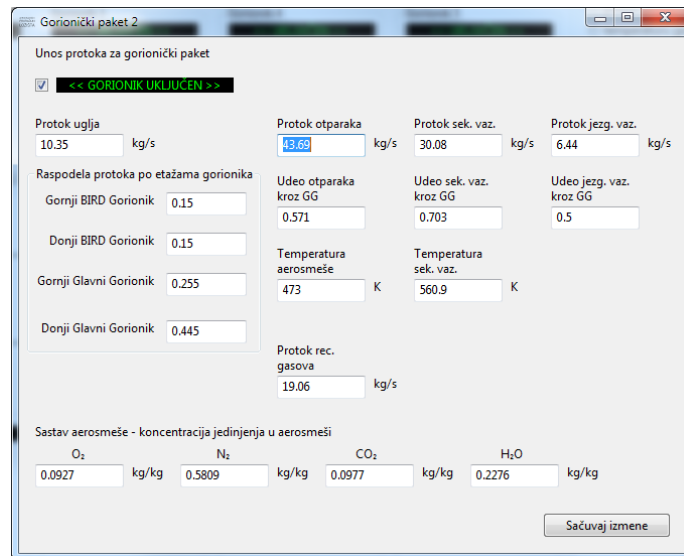
Кориснички интерфејс се састоји од главног екрана са прегледом свих радних параметара ложишта. Централни део сачињава скица ложишта око које су распоређени подаци о улазним вредностима појединих величина кроз одговарајући горионик. Одабиром одговарајућег тастера мења се група величина која се приказује. Тако корисник може одабрати да прегледа масене протоке горива и гасова кроз горионике, температуре гасова, расподелу отпарака и ваздуха по етажама горионика, расподелу угљеног праха, као и састав аеросмеше. Слика 27 приказује изглед главног екрана корисничког интерфејса. На левој страни се налази поменути део интерфејса за преглед и унос података о радним параметрима котла, док се са десне стране налази део којим се управља радом са улазним датотекама за прорачун.



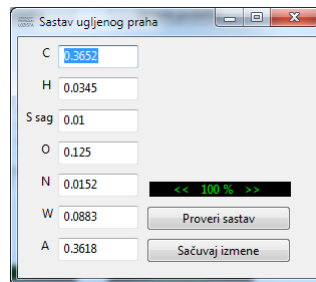
Слика 27 Главни екран корисничког интерфејса са одабраним приказом масених протока кроз појединачне горионике



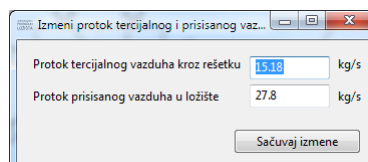
Измене података се врше одабиром одговарајућег тастера поред горионика уз помоћ којег се отвара одговарајући прозор (Слика 28) где се мењају подаци за тај конкретан горионик или тастера за измену општих група података попут састава горива (Слика 29), података о протоцима терцијарног и штетног ваздуха (Слика 30) и граничних услова на екранским зидовима (Слика 31).



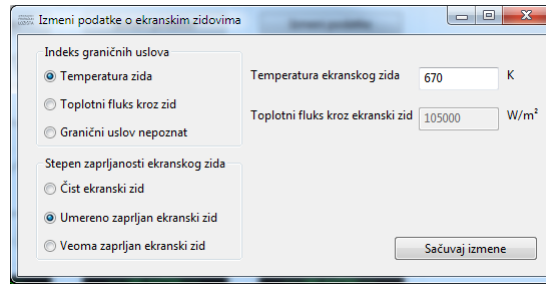
Слика 28 Прозор за измену улазних података за одабрани горионички пакет



Слика 29 Прозор за измену састава угљеног праха

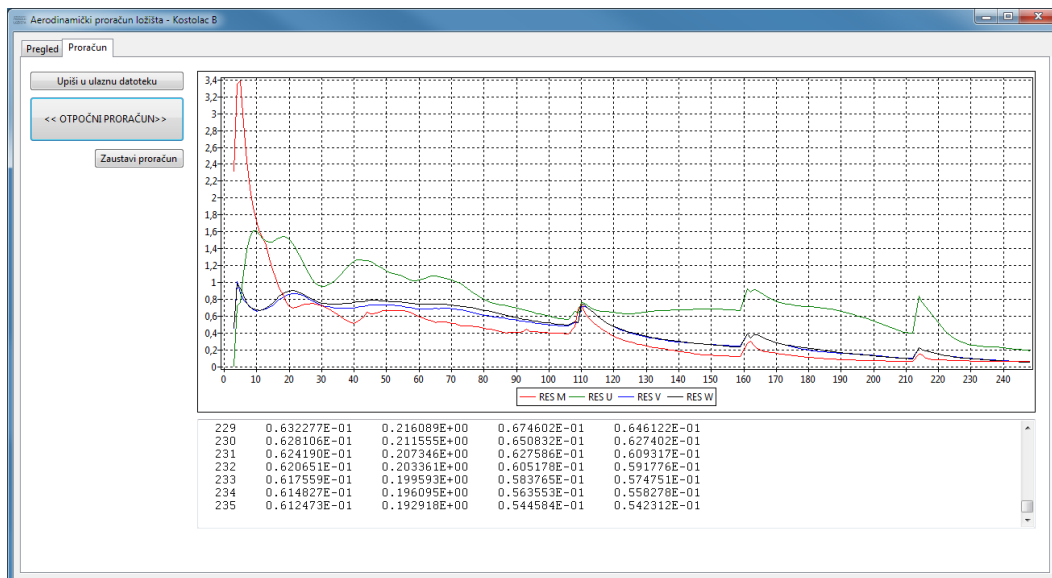


Слика 30 Прозор за задавање протока терцијарног и штетног ваздуха



Слика 31 Прозор за дефинисање граничних услова на зидовима ложњишта

На десном делу екрана (Слика 27), као што је поменуто налази се део за управљање корисничким улазним датотекама. У овом делу корисник има могућност да учита пројектни радни режим котла, или дефинише неки други конкретни радни режим, као и да одабере начин уноса података – директно преко маске или повезивањем са одговарајућом улазном датотеком. Поред тога има опције да настави прорачун на основу постојеће датотеке са претходно конвергираним пољима, или да отпочне нов прорачун. Последња опција је снимање података из програма у нову или постојећу улазну датотеку која се користи приликом покретања прорачуна.



Слика 32 Прозор за управљање програмом за прорачун ложњишта и надгледање конвергенције

У следећем делу програма, насловљеном „Прорачун“ (Слика 32) се налазе основне команде за покретање прорачуна и превремено заустављање, као и дијаграм на коме се у реалном времену приказује конвергенција решења, односно вредности резидуала масе и три компоненте брзине, у свакој итерацији, док се испод њега налазе бројчане вредности на основу којих је дијаграм конструисан. Ово кориснику пружа увид у стање прорачуна и омогућује правовремену реакцију и прекид прорачуна у случају погрешно задатог улаза, те враћање на улазне податке и корекцију погрешно задатих вредности.

Преко овог интерфејса је могуће задати улазне параметре и за случајеве у којима се симулирају посебни отвори изнад горионика за смањење емисије азота, односно уношење сорбента кроз поменуте отворе, или етаже горионика (Слика 33).

### **Битни параметри предметног процеса одсумповања**

На посматране процесе при одсумповању директним уношењем спрашеног сорбента на бази калцијума ( $\text{CaCO}_3$ ) у ложиште, у највећој мери утичу следећи параметри:

1. Однос садржаја калцијума и сумпора – говори о количини унетог калцијума у котловско ложиште, у односу на садржај сагорљивог сумпора у гориву;
2. Величина честице сорбента – утиче директно на механизам којим се реакција одвија, односно на развој доступне реактивне површине током времена, и профил концентрације реактанта унутар честице, што одређује доминантни механизам одвијања реакције;
3. Локална температура – температурно поље директно утиче на развој унутрашње реактивне површине честице, као и на брзине самих реакција;
4. Локални садржај кисеоника – с обзиром да реакција сулфатизације троши доступан кисеоник, њена брзина директно зависи од садржаја кисеоника у смеши гасова;

5. Место уношења сорбента – одредити правилно место уношења сорбента представља сложен проблем, с обзиром да је потребно обезбедити да сорбент доспе у зоне богате оксидима сумпора, и у исто време се задржати у области оптималних температура, ради обезбеђивања повољних услова за реакције сорбента, односно спречавања интензивног синтеровања, или смањених брзина реакција сорбента услед ниских температура.

### Употреба честица сорбента реда величине 100 $\mu\text{m}$

Једно од полазних разматрања представљало је употребу релативно крупних честица сорбента, реда величине просечног пречника 92  $\mu\text{m}$ , применом поменутог модела *Borgwardt*-а [133].

У оквиру ове групе тест-случајева варирана је гранулација честица сорбента у распону од 50  $\mu\text{m}$  до 1300  $\mu\text{m}$ . Урађене су симулације неколико тест-случајева са оваквим крупним честицама, ради процене утицаја на емисију сумпор-диоксида при неколико различитих начина уношења сорбента [134].

У овим симулацијама је сорбент уношен кроз отворе постављене изнад горионичких пакета. Симулирани су хоризонтални положаји отвора директно изнад сваког горионичког пакета, као и на средини екранског зида (Слика 33).



Слика 33 Положај отвора за убацавање сорбента изнад горионика (лево) и на средини екранског зида (десно)

Након ових симулација, у даљем раду се одустало од отвора на средини екранског зида услед неефикасног мешања сорбента са ложишним гасовима, то је за последицу имало додатно смањење ефикасности процеса, односно редукције садржаја оксида сумпора.

### Резултати симулација

Резултати ових симулација су дати табеларно (Табела 12). Поред тога што крупне честице нису могле да постигну довољно добру редукцију при разумним вредностима односа калцијума и сумпора, уочена је и изразито мала искоришћеност честица током процеса, односно, степен искоришћења сорбента који се кретао око 3% при најпогоднијим условима.

Табела 12. Резултати нумеричких симулација при употреби Borgwardt-овог модела за крупне честице сорбента (радни режим 8607)

Тест-случај	Ca/S моларни однос	Вертикални положај отвора за уношење сорбента	Хоризонтални положај отвора за уношење сорбента	Температура на излазу из ложишта	Смањење садржаја SO <sub>2</sub> на излазу из ложишта
	$\frac{\text{mol}}{\text{mol}}$	[m]	[-]	[°C]	[%]
1	-	-	-	1023	-
2	1,0	0,36	СРЕДИНА ЗИДА	1021	2,30
3	2,5	0,36	СРЕДИНА ЗИДА	1013	6,17
4	3,0	0,36	СРЕДИНА ЗИДА	1011	7,78
5	3,5	0,36	СРЕДИНА ЗИДА	1009	9,43
6	4,0	0,36	СРЕДИНА ЗИДА	1008	10,86
7	4,5	0,36	СРЕДИНА ЗИДА	1008	12,19
8	5,0	0,36	СРЕДИНА ЗИДА	1007	13,19
9	1,0	0,36	ИЗНАД ГОРИОНИКА	1019	4,16
10	2,5	0,36	ИЗНАД ГОРИОНИКА	1013	9,97
11	3,0	0,36	ИЗНАД ГОРИОНИКА	1012	11,63
12	3,5	0,36	ИЗНАД ГОРИОНИКА	1010	13,43
13	4,0	0,36	ИЗНАД ГОРИОНИКА	1008	14,67
14	4,5	0,36	ИЗНАД ГОРИОНИКА	1005	15,88
15	5,0	0,36	ИЗНАД ГОРИОНИКА	1003	16,94

На основу ове табеле постаје јасно да крупне честице не могу у довољној мери обезбедити добре излазне емисије при сагоревању у лету, с обзиром на кратка времена боравка ~3 s која остварују у котловском ложишту. Јасно је да је једино разумно решење употреба ситних честица за које је потребно уложити већу енергију приликом процеса мљења, али које имају веће брзине реакције, и

значајно боље степене искоришћења, што води и ка стварању мање отпада и смањењу других трошкова везаних за набавку и транспорт сорбента.

Из тог разлога, у даљем истраживању, пажња је посвећена симулацијама значајно сложенијег модела одсумповања применом ситних честица сорбента, реда величине пречника честице 10  $\mu\text{m}$ . Код ових честица ред величине честице има мање утицаја на сам процес, у односу на остале битне параметре, а веома значајан параметар за моделирање процеса постаје унутрашња реактивна површина честице.

### Употреба честица сорбента реда величине 10 $\mu\text{m}$

На основу претходно приказаног проблема са ниским степенима искоришћења честица сорбента, и релативно малим смањењем емисије на излазу из ложишта, приступило се моделирању процеса са фино млевеним честицама сорбента.

### Основни радни режими – горива и радни параметри

Табела 13. Извод из техничке и елементарне анализе угљеног праха потребан за моделирање и разматрање процеса унутар ложишта

Гориво	Техничка анализа			Елементарна анализа			
	Садржај минералних материја	Садржај влаге	Доња топлотна моћ	Садржај угљеника	Садржај водоника	Садржај кисеоника	Садржај сагорљивог сумпора
	$A_{up}$ [%]	$w_{up}$ [%]	$LHV_{up}$ [ $\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$ ]	$C_{up}$ [%]	$H_{up}$ [%]	$O_{up}$ [%]	$S_{sag,up}$ [%]
<b>6489</b>	40,7687	8,8000	6489,5	31,9534	3,3730	12,4653	1,1406
<b>7327</b>	36,5196	8,8310	7326,9	36,5196	3,4471	12,5201	1,0406
<b>8226</b>	33,3010	9,4071	8226,0	37,5329	3,5702	13,7882	0,8618
<b>8374</b>	29,5997	8,9500	8373,6	40,8061	3,7301	14,4059	0,9004
<b>8463</b>	31,5105	9,2491	8463,0	39,1811	3,6244	13,9977	0,8749
<b>8607</b>	33,0036	9,5586	8607,0	37,9632	3,5188	13,5897	0,8494
<b>8812</b>	30,2321	9,5468	8812,0	40,7245	3,5228	13,6052	0,8503
<b>8837</b>	31,5457	9,3870	8837,0	39,2703	3,5770	13,8147	0,8634
<b>9483</b>	27,5746	9,3668	9483,0	43,2234	3,5839	13,8414	0,8651

Табела садржи податке добијене у сарадњи Лабораторије за термотехнику и енергетику Института за нуклеарне науке „Винча“ са Машинским факултетом Универзитета у Београду, и јавним предузећем Електропривреда Србије.

Симулације су обављене за неколико горива различитог састава и топлотне моћи и неколико радних режима заснованих на стварним радним параметрима котловског постројења, са одговарајућим горивом. Састав употребљених горива и радни параметри одговарајућих режима рада котла дати су табеларно (Табела 13, односно Табела 19 – Табела 27, у Прилогу). Параметри одговарајућих радних режима котла добијени су на основу прорачуна млинског постројења у оквиру пројекта ТР-33018, у сарадњи са Машинским факултетом у Београду.

У табелама где је приказан преглед протока угљеног праха, отпарака, секундарног и језгреног ваздуха кроз појединачне горионике као и расподеле тих протока по етажама горионика (Табела 19 – Табела 27, у Прилогу) коришћене су следеће скраћенице које означавају:

- за протоке секундарног ваздуха (по висини горионика од врха горионика):
  - БР-Г – отвор изнад горњег брид горионика,
  - БР-С – отвор између горњег и доњег брид горионика,
  - БР-Д – отвор испод доњег брид горионика,
  - ГГ-Г – отвор изнад горњег главног горионика,
  - ГГ-ГД – отвор испод горњег главног горионика,
  - ГГ-ДГ – отвор изнад доњег главног горионика,
  - ГГ-Д – отвор испод доњег главног горионика,
- за протоке угљеног праха (по висини горионика од врха горионика):
  - БР-Г – горњи брид горионик,
  - БР-Д – доњи брид горионик,
  - ГГ-Г горњи главни горионик,
  - ГГ-Д доњи главни горионик.

### **Поставке тест-случајева за симулације директног уношења ситних честица спрашеног сорбента у ложиште**

Тест-случајеви у којима се симулира директно уношење спрашеног сорбента у ложиште заснивају се на претходно дефинисаним и у табелама описаним основним тест-случајевима (Табела 19 – Табела 27, у Прилогу), а у односу на основне случајеве разликују се по томе што постоји уношење сорбента и врши се

нумеричко праћење честица сорбента, док се остали улазни параметри процеса одржавају константним (осим у случају уношења сорбента кроз посебне отворе изнад горионика, када се кроз њих мањи део секундарног ваздуха одваја и преусмерава ради транспорта и уношења сорбента у ложиште). Тест-случајеви су формулисани тако да у широком опсегу обухвате све најбитније параметре процеса, претходно набројане и да омогуће детаљну параметарску, појединачно и комбиновано. С обзиром на комплексну природу сложених процеса који се одвијају у ложишту постоји истовремено дејство више параметара, те их није могуће у потпуности изоловати, као што је то случај у контролисаним условима код цевних реактора, већ се посматрају сложени утицаји које доносе промене одређеног параметра, како на концентрације оксида сумпора, азота, и других гасова, тако и на средње температуре гасне смеше на крају ложишта.

### Резултати симулација и параметарска анализа

Резултати симулација добијени за тест-случајеве применом PSS модела, са претходно приказаним горивима и засновани на одговарајућим основним радним режимима приказани су табеларно (Табела 14 – Табела 18). Табеле приказују вредности осредњених температура, садржаја оксида сумпора, оксида азота, концентрација кисеоника, угљен диоксида и водене паре у ложишним гасовима на излазу из ложишта парног котла. Такође су, ради поређења дате ове вредности и за основне тест-случајеве, ради лакшег поређења добијених садржаја у ложишним гасовима.

Табела 14. Резултати симулација основних радних режима и случајева са уношењем сорбента кроз горионике или посебне отворе изнад њих

Тест-случај	Расподела сорбента по висини горионика				Температура $t_l$ °C	Садржај SO <sub>2</sub> $em_{SO_2}$ $\frac{mg}{Nm^3}$	Садржај NO <sub>x</sub> $em_{NO_x}$ $\frac{mg}{Nm^3}$	Концентрација O <sub>2</sub> $\chi_{O_2}$ $\frac{kg}{kg}$	Концентрација CO <sub>2</sub> $\chi_{CO_2}$ $\frac{kg}{kg}$	Концентрација H <sub>2</sub> O $\chi_{H_2O}$ $\frac{kg}{kg}$
	ГГ-Д	ГГ-Г	БР-Д	БР-Г						
	%	%	%	%						
<b>Основни радни режими</b>										
<b>6489-0</b>	-				937,34	8127,22	327,14	0,082	0,139	0,121
<b>7327-0</b>	-				1028,76	6815,63	427,86	0,071	0,151	0,122
<b>8226-0</b>	-				1041,95	5761,52	558,47	0,080	0,145	0,102



Тест-случај	Расподела сорбента по висини горјоника				Температура $t_l$ °C	Садржај SO <sub>2</sub> $em_{SO_2}$ $\frac{mg}{Nm^3}$	Садржај NO <sub>x</sub> $em_{NO_x}$ $\frac{mg}{Nm^3}$	Концентрација O <sub>2</sub> $\chi_{O_2}$ $\frac{kg}{kg}$	Концентрација CO <sub>2</sub> $\chi_{CO_2}$ $\frac{kg}{kg}$	Концентрација H <sub>2</sub> O $\chi_{H_2O}$ $\frac{kg}{kg}$
	ГГ-Д	ГГ-Г	БР-Д	БР-Г						
	%	%	%	%						
8374-0			-		1112,95	5480,91	483,71	0,061	0,162	0,124
8463-0			-		1051,34	5605,18	561,04	0,079	0,146	0,102
8607-0 <sup>mes</sup>			-		1023,41	5622,12	541,74	0,084	0,142	0,096
8812-0 <sup>mes</sup>			-		971,23	5192,15	415,34	0,091	0,137	0,091
8837-0 <sup>mes</sup>			-		993,39	5450,90	479,85	0,087	0,139	0,096
9483-0 <sup>mes</sup>			-		998,20	4992,53	619,27	0,095	0,133	0,083
<b>Ca/S = 1,00</b>										
6489-1	0	0	0	100	930,98	6980,15	323,65	0,082	0,138	0,123
6489-2	0	0	100	0	943,76	6670,96	347,81	0,081	0,139	0,122
6489-3	0	100	0	0	940,31	6298,10	343,29	0,081	0,139	0,121
6489-4	100	0	0	0	938,00	5136,49	279,94	0,082	0,138	0,122
6489-5	0	33	33	33	939,48	6420,66	335,56	0,081	0,139	0,122
6489-6	25	25	25	25	929,25	5358,19	315,04	0,083	0,137	0,122
6489-7*			*		936,23	7151,83	325,41	0,082	0,138	0,121
7327-1	0	0	0	100	1025,26	5848,36	426,45	0,071	0,151	0,124
7327-2	0	0	100	0	1039,23	5231,80	445,58	0,070	0,152	0,123
7327-3	0	100	0	0	1034,56	4830,57	431,28	0,070	0,151	0,122
7327-4	100	0	0	0	1027,48	4320,85	395,68	0,072	0,150	0,123
7327-5	0	33	33	33	1030,89	4962,44	431,74	0,070	0,151	0,123
7327-6	25	25	25	25	1022,18	4143,39	416,10	0,072	0,150	0,123
7327-7*			*		1025,84	5946,00	426,92	0,072	0,150	0,122
8374-1	0	0	0	100	1113,13	4573,48	485,46	0,060	0,162	0,126
8374-2	0	0	100	0	1124,63	3975,97	481,31	0,060	0,163	0,124
8374-3	0	100	0	0	1118,56	3677,08	482,27	0,060	0,163	0,124
8374-4	100	0	0	0	1110,25	3509,37	447,24	0,062	0,161	0,125
8374-5	0	33	33	33	1118,60	3663,70	481,03	0,060	0,163	0,125
8374-6	25	25	25	25	1111,67	3093,73	475,80	0,062	0,161	0,124
8374-7*			*		1108,35	4814,96	479,96	0,062	0,161	0,124
<b>Ca/S = 2,00</b>										
6489-8	0	0	0	100	927,57	6688,63	329,47	0,082	0,138	0,122
6489-9	0	0	100	0	943,50	5961,33	354,82	0,081	0,139	0,122
6489-10	0	100	0	0	946,29	5251,44	350,16	0,081	0,139	0,122
6489-11	100	0	0	0	944,02	4563,94	279,26	0,081	0,138	0,123
6489-12	0	33	33	33	939,26	5285,34	344,72	0,081	0,139	0,123
6489-13	25	25	25	25	937,50	3834,63	318,02	0,082	0,138	0,122
6489-14*			*		926,01	6671,83	332,50	0,085	0,136	0,118
7327-8	0	0	0	100	1022,02	5566,54	428,43	0,071	0,150	0,124
7327-9	0	0	100	0	1039,60	4657,53	449,62	0,070	0,152	0,123
7327-10	0	100	0	0	1041,00	4049,02	438,47	0,070	0,152	0,122
7327-11	100	0	0	0	1033,90	3758,52	364,95	0,071	0,150	0,124
7327-12	0	0	30	70	1033,60	4756,01	438,21	0,069	0,152	0,125
7327-13	0	0	50	50	1039,23	4553,06	446,37	0,069	0,153	0,124
7327-14	0	0	70	30	1040,68	4526,78	447,05	0,069	0,152	0,124
7327-15	0	20	20	60	1033,98	4295,72	435,61	0,069	0,152	0,125
7327-16	0	20	33	47	1036,94	4090,33	436,69	0,069	0,152	0,124
7327-17	0	33	33	33	1037,33	3865,79	438,46	0,069	0,152	0,124
7327-18	0	47	33	20	1038,19	3828,91	440,36	0,069	0,152	0,123

Тест-случај	Расподела сорбента по висини горионика				Температура $t_l$ °C	Садржај SO <sub>2</sub> $em_{SO_2}$ $\frac{mg}{Nm^3}$	Садржај NO <sub>x</sub> $em_{NO_x}$ $\frac{mg}{Nm^3}$	Концентрација O <sub>2</sub> $\chi_{O_2}$ $\frac{kg}{kg}$	Концентрација CO <sub>2</sub> $\chi_{CO_2}$ $\frac{kg}{kg}$	Концентрација H <sub>2</sub> O $\chi_{H_2O}$ $\frac{kg}{kg}$
	ГГ-Д	ГГ-Г	БР-Д	БР-Г						
	%	%	%	%						
<b>7327-19</b>	0	60	20	20	1036,14	3860,86	437,73	0,070	0,152	0,123
<b>7327-20</b>	10	20	30	40	1028,96	3297,41	432,52	0,071	0,151	0,124
<b>7327-21</b>	15	15	35	35	1030,07	3092,62	428,23	0,071	0,151	0,124
<b>7327-22</b>	25	25	25	25	1029,70	2713,88	430,51	0,071	0,150	0,124
<b>7327-23</b>	35	35	15	15	1032,70	2544,43	425,15	0,071	0,150	0,123
<b>7327-24</b>	40	30	20	10	1035,90	2596,67	424,68	0,071	0,150	0,123
<b>7327-25*</b>			*		1016,86	5416,33	430,93	0,074	0,148	0,120
<b>Ca/S = 2,50</b>										
<b>8226-1</b>	0	0	0	100	1032,40	4038,50	474,42	0,071	0,150	0,124
<b>8226-2</b>	0	0	100	0	1046,45	3073,39	470,74	0,070	0,151	0,123
<b>8226-3</b>	0	100	0	0	1030,93	3191,68	484,74	0,073	0,148	0,122
<b>8226-4</b>	100	0	0	0	1039,80	3390,17	431,20	0,072	0,149	0,124
<b>8226-5</b>	0	33	33	33	1041,32	2664,34	477,22	0,070	0,150	0,124
<b>8226-6</b>	25	25	25	25	1036,74	2013,74	461,54	0,071	0,149	0,123
<b>8226-7*</b>			*		1030,52	4451,54	539,58	0,082	0,143	0,101
<b>8463-1</b>	0	0	0	100	1033,85	3912,51	475,26	0,071	0,149	0,124
<b>8463-2</b>	0	0	100	0	1047,50	2979,87	471,87	0,070	0,150	0,123
<b>8463-3</b>	0	100	0	0	1034,19	3187,15	485,37	0,073	0,148	0,122
<b>8463-4</b>	100	0	0	0	1048,76	3328,31	445,68	0,071	0,150	0,124
<b>8463-5</b>	0	33	33	33	1043,47	2590,02	476,39	0,070	0,150	0,124
<b>8463-6</b>	25	25	25	25	1037,58	1975,73	462,96	0,072	0,149	0,123
<b>8463-7*</b>			*		1041,93	4278,16	540,10	0,081	0,145	0,100
<b>8607-1</b>	0	33	33	33	966,04	2282,76	414,21	0,079	0,141	0,124
<b>8812-1</b>	0	33	33	33	904,86	2899,33	357,18	0,088	0,133	0,120
<b>8837-1</b>	0	33	33	33	930,48	2767,68	392,53	0,084	0,136	0,122
<b>9483-1</b>	0	33	33	33	933,13	2242,92	405,06	0,085	0,134	0,122
<b>Ca/S = 3,00</b>										
<b>7327-26</b>	0	0	0	100	1016,38	5380,48	428,44	0,071	0,150	0,123
<b>7327-27</b>	0	0	100	0	1037,15	4470,91	458,45	0,070	0,152	0,123
<b>7327-28</b>	0	100	0	0	1045,37	3569,06	447,41	0,069	0,152	0,122
<b>7327-29</b>	100	0	0	0	1022,47	3335,20	364,26	0,074	0,148	0,122
<b>7327-30</b>	0	33	33	33	1038,31	3158,18	439,49	0,069	0,152	0,124
<b>7327-31</b>	25	25	25	25	1034,86	1902,92	419,58	0,071	0,150	0,124
<b>7327-32*</b>			*		-	-	-	-	-	-
<b>Ca/S = 4,00</b>										
<b>7327-33</b>	0	0	0	100	1019,50	5185,78	426,93	0,071	0,151	0,123
<b>7327-34</b>	0	0	100	0	1038,03	4299,64	463,97	0,070	0,152	0,123
<b>7327-35</b>	0	100	0	0	1045,34	3554,12	453,69	0,070	0,151	0,122
<b>7327-36</b>	100	0	0	0	1046,28	3040,34	374,71	0,070	0,152	0,124
<b>7327-37</b>	0	33	33	33	1041,13	2722,71	446,36	0,069	0,152	0,125
<b>7327-38</b>	25	25	25	25	1037,28	1492,37	421,38	0,070	0,151	0,124
<b>7327-39*</b>			*		1011,32	5597,13	429,25	0,075	0,148	0,119

\* Радни режими означени са звездом имају уношење целокупне количине сорбента изнад горионичких пакета кроз посебно дефинисане отворе за ту намену. Део секундарног ваздуха се том приликом преусмерава ради транспорта сорбента и одузима се од главног тока секундарног ваздуха, при чему се остали протоци пропорционално умањују.

<sup>mes</sup> означава основне радне режиге који су добијени мерењима на котловском.

Ради бољег увида у разматране параметре, из табела ће у наставку бити издвојени упоредиви подаци, и приказани табеларно са допунским анализама као и графички на дијаграмима.

### Утицај моларног односа калцијума из сорбента и сумпора из горива

Моларни однос између количине калцијума који у процес улази у виду сорбента и количине сагорљивог сумпора у гориву директно утиче на ефикасност процеса.

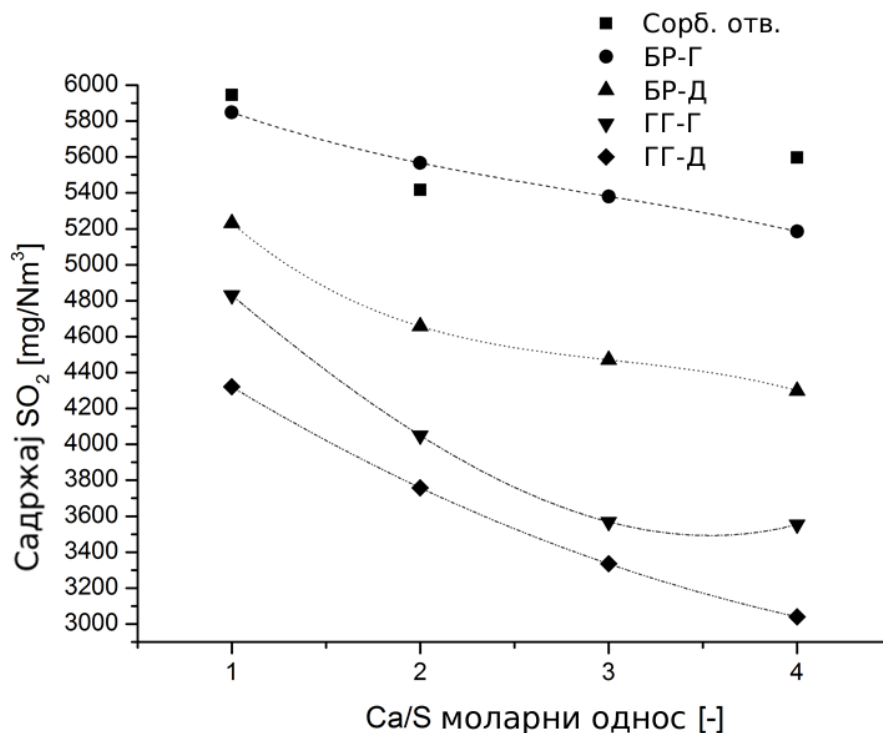
Табела 15 садржи сажете податке о утицају моларног односа калцијума и сумпора приликом уношења сорбента у ложиште кроз посебне отворе, као и појединачне етаже горионика за гориво 7327.

Може се приметити да при уношењу сорбента кроз посебне отворе (С-О) долази до благог смањења постигнуте редукције, а услед мањих разлика у струјној слици унутар ложишта с обзиром на повезаност количине сорбента која се убацује са количином ваздуха који се користи за транспорт, што утиче у одређеној мери на коначан исход и ефикасност процеса. Такође, у нашем конкретном случају је приметно да је пораст учинка процеса са повећањем количине унетог сорбента највећи до моларног односа  $Ca/S = 2,00$ , док након те вредности успорава раст услед утицаја носећег ваздуха и новонастале струјне слике.

Табела 15. Утицај моларног калцијум – сумпор односа на излазни садржај и редукцију оксида сумпора у односу на основни случај 7327

Место уношења сорбента	Моларни однос							
	Ca/S = 1,00		Ca/S = 2,00		Ca/S = 3,00		Ca/S = 4,00	
	Садржај	Редук.	Садржај	Редук.	Садржај	Редук.	Садржај	Редук.
	$em_{SO_2}$ mg Nm <sup>3</sup>	%	$em_{SO_2}$ mg Nm <sup>3</sup>	%	$em_{SO_2}$ mg Nm <sup>3</sup>	%	$em_{SO_2}$ mg Nm <sup>3</sup>	%
С-О	5946,00	12,76	5416,33	20,53	-	-	5597,13	17,88
БР-Г	5848,36	14,19	5566,54	18,33	5380,48	21,06	5185,78	23,91
БР-Д	5231,80	23,24	4657,53	31,66	4470,91	34,40	4299,64	36,92
ГГ-Г	4830,57	29,13	4049,02	40,59	3569,06	47,63	3554,12	47,85
ГГ-Д	4320,85	36,60	3758,52	44,85	3335,20	51,07	3040,34	55,39

Слика 34 пружа увид у тренд смањења емисије са повећањем моларног односа калцијума и сумпора, уз напомену да су бројчане вредности за односе изнад 2,00 узете само у оквиру теоријског разматрања, док се у пракси ретко срећу.



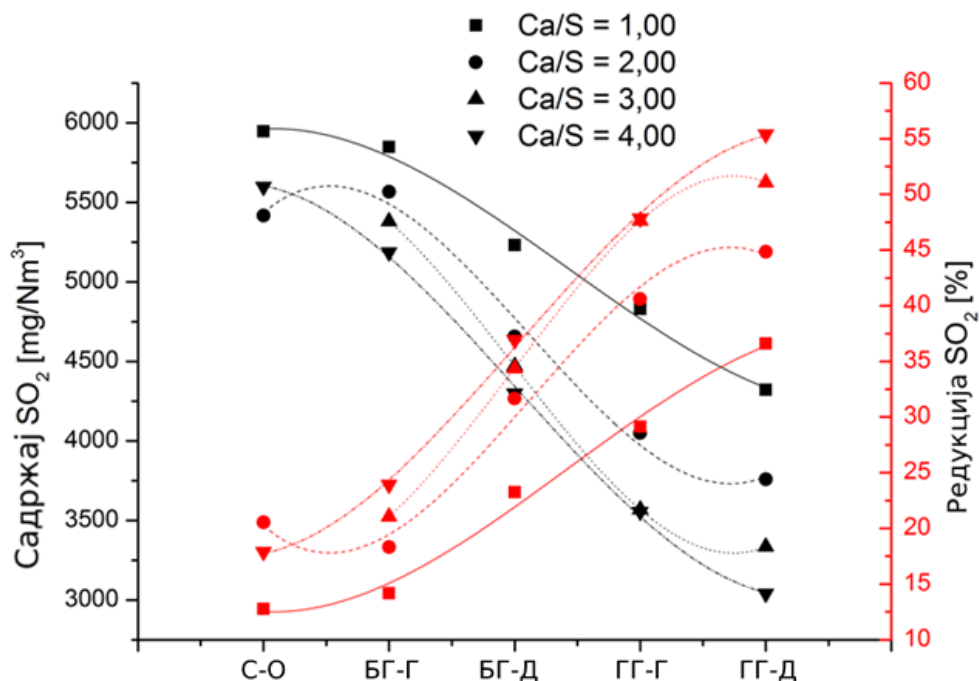
Слика 34 Садржај оксида сумпора у зависности од моларног односа калцијум – сумпор при уношењу сорбента кроз посебне отворе или појединачне етаже горионика (за гориво 7327)

### Утицај места уношења сорбента

На основу података (Табела 15) могу се пратити промене у ефикасности процеса при уношењу сорбента кроз различите етаже горионика, или посебне отворе изнад њих, за различите моларне односе калцијума и сумпора, Слика 35 и Слика 36. У овом случају целокупна количина сорбента се уноси кроз једну етажу горионика или отвора за уношење сорбента. Приметимо да разлика у ефикасности процеса између тест-случајева са моларним односом калцијума и сумпора 3,00 и 4,00 и сумпора је практично неприметна при одређеним радним режимима (ГГ-Г), док је у осталим та разлика значајно мања у поређењу са разликом у ефикасности између случајева са 1,00 и 2,00. Повећање искоришћења сорбента се може

постићи оптималном дистрибуцијом сорбента по попречном пресеку, избегавајући настанак зона са великом локалном концентрацијом сорбента, а малом концентрацијом оксида сумпора.

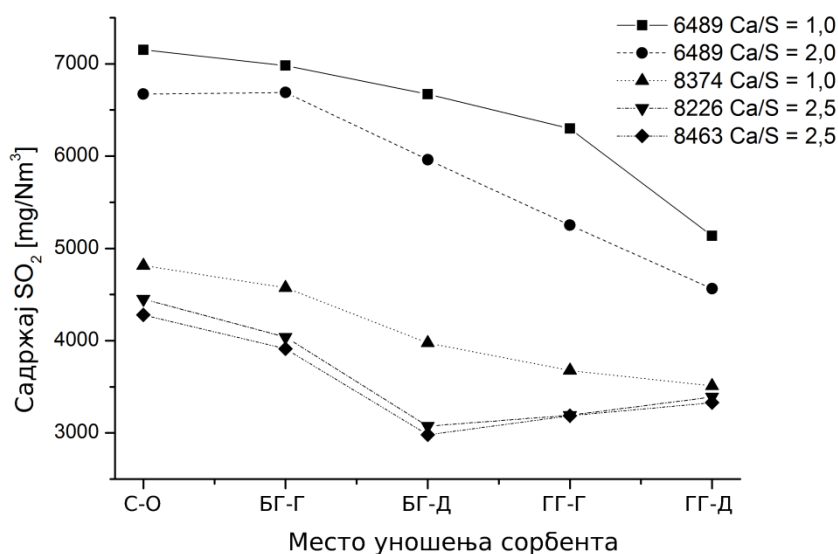
Уколико се упореде добијени садржаји сумпор-диоксида за неколико горива са различитим топлотним моћима (Слика 36), може се приметити директан утицај



Слика 35 Садржај оксида сумпора и ефикасност процеса одсумповања при уношењу сорбента кроз посебне отворе или појединачне етаже горионика (за гориво 7327)

температуре гаса у зони уношења сорбента (па тако и вертикалног положаја пламена) на ефикасност процеса (у функцији отвора кроз који се сорбент уноси). Тако је у случајевима са мањом топлотном моћи горива садржај сумпор-диоксида опао, односно ефикасност процеса одсумповања расла како се место уношења спуштало према главним горионцима, док се код горива са већом топлотном моћи примети застој у повећању ефикасности (8374) или чак појава да је ефикасност виша при убацивању сорбента кроз доње етаже горионика за отпарке (за горива 8226 и 8463). Ова појава илуструје сву сложеност и међузависност разматраних процеса и параметара, а може се објаснити праћењем температура

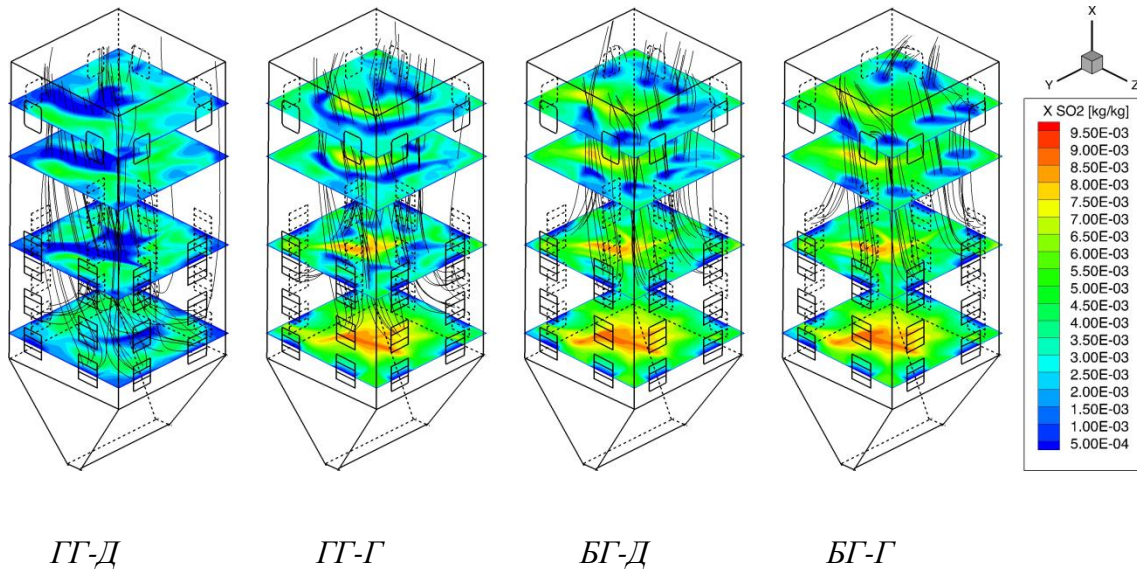
којима су честице изложене, те је могуће приметити интензивно синтеровање и губитак реактивне површине честице сорбента на повишеним температурама који надмашују повољне ефекте дужег времена боравка честице у ложишту и веће брзине сулфатизације. При сагоревању квалитетнијег горива, у нижим зонама односно на месту главних горионика постижу се веома високе температуре које синтеровањем блокирају честице сорбента, па је стога њихова искоришћеност већа ако се уносе кроз етаже за отпарке, смештене изнад главних горионика.



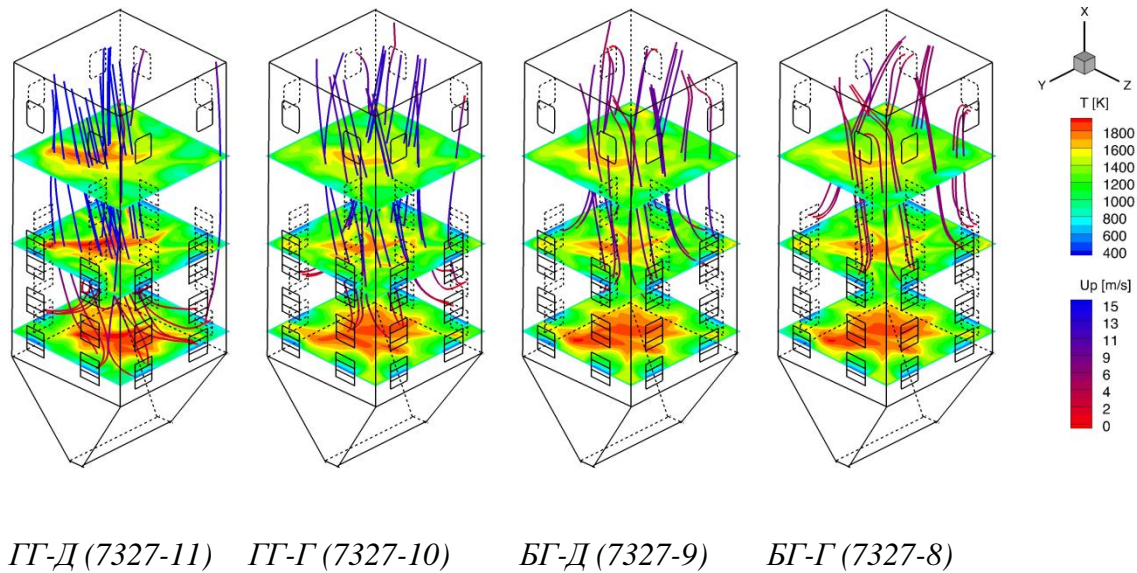
Слика 36 Садржај оксида сумпора при уношењу сорбента кроз посебне отворе или појединачне етаже горионика за различита горива

Уколико се графички прикаже поље концентрације оксида сумпора у попречним пресецима ложишта и упореди са трајекторијама сорбента, може се приметити да при уношењу сорбента кроз посебне отворе не долази у довољној мери до равномерне дистрибуције по попречном пресеку ложишта, услед чега је приметно да у одређеним зонама, у зависности од отвора кроз који се сорбент убацује, не долази до интеракције између оксида сумпора и сорбента, Слика 37. Последица таквог уношења сорбента је недовољно локално присуство сорбента у областима са високим концентрацијама сумпор-диоксида у одређеним случајевима, односно

превелика количина сорбента у одређеним областима где је редукција већ у довољној мери извршена, те услед ниске локалне концентрације



Слика 37 Поље концентрације сумпора у тест-случајевима 7327-8 – 7327-11 са трајекторијама сорбента



Слика 38 Поље температура тест-случајевима 7327-8 – 7327-11 са трајекторијама сорбента обојеним  $U_p$  компонентом брзине честице сорбента

сумпор-диоксида реакција успорава и сорбент даље не реагује односно споро реагује. Ово се најбоље огледа у излазним концентрацијама датим (Табела 14,

Табела 15, и Слика 35) које се разликују и до три пута, у зависности од места уношења сорбента које директно утиче на даље трајекторије сорбента у току кретања кроз ложиште котла.

Да би се овај проблем избегао, испитивано је неколико конфигурација уношења сорбента кроз више етажа горионика одједном, као и различита прерасподела протока сорбента кроз поједине етаже.

Уколико се посматра услов да сорбент не сме бити изложен превисоким температурама које значајно одступају од оптималне температуре за посматрану врсту сорбента, а да би се избегло сувише интензивно синтеровање честица сорбента – што значајно умањује њихову употребљивост у наредним корацима, потребно је испитати локалне температуре у температурном пољу. Слика 38 приказује температурна поља која одговарају претходно приказаним тест-случајевима (Слика 37).

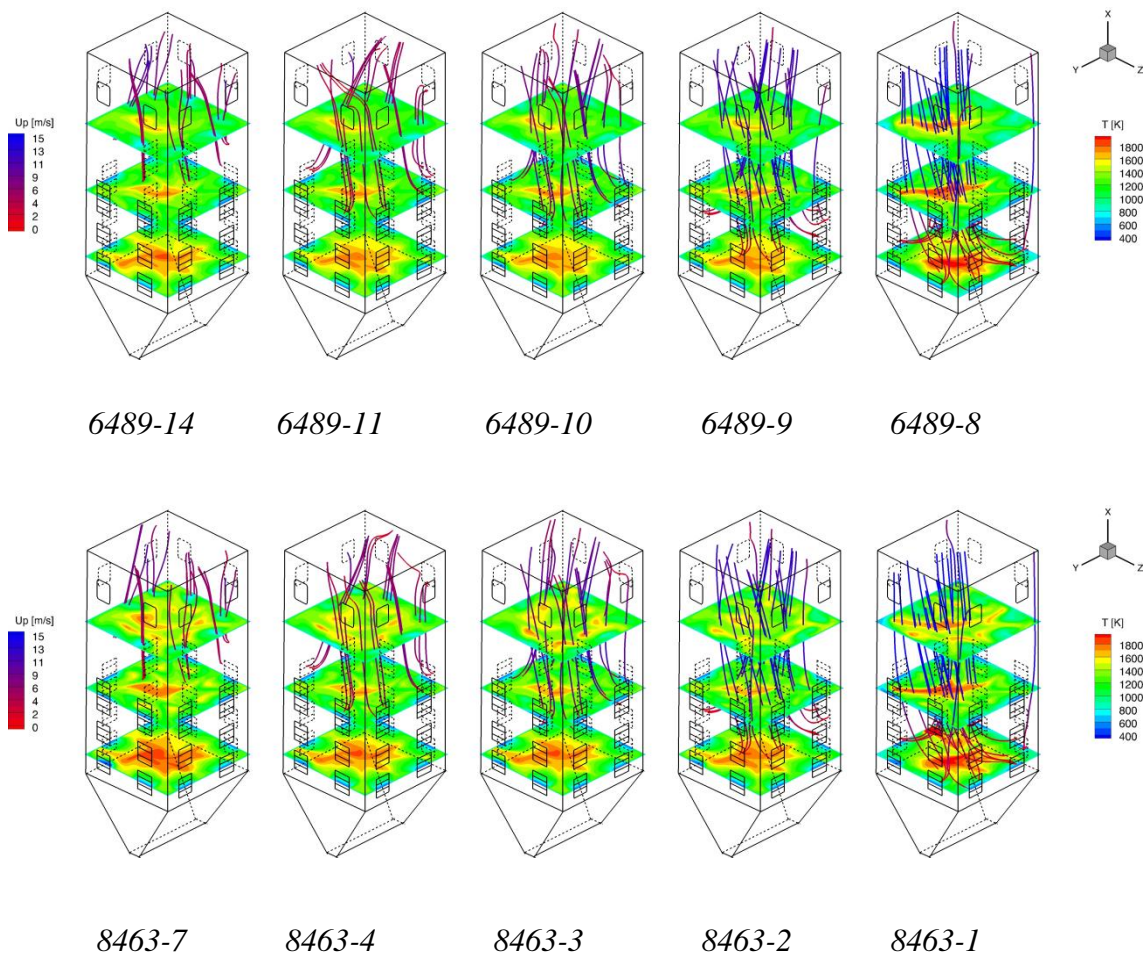
Приметно је да у случају 7327-8 (ГГ-Д) највећи део честица сорбента пролази кроз језгро пламена, те је у том случају и синтеровање честице интензивно. Овде је процентуално висок степен смањења емисије сумпора последица краткотрајне и брзе реакције између калцијум-оксида и сумпор-диоксида која се одвија непосредно по доспећу честице у језгро, али осим почетне брзе реакције, честица постаје неупотребљива током даљег боравка у ложишту, као и за потенцијалну даљу употребу у скруберима или реакторима. Због тога се прати кретање честице кроз ложиште и посматра њена температурска историја, те се тражи оптимално место уношења, које ће задовољити услов да честица никад не буде изложена превисоким температурама, а такође омогућити добру дистрибуцију честица по попречном пресеку ложишта, као и што је могуће дуже излагање честице оптималним температурама дуж што је могуће дужег дела путање честице.

Поред утицаја на емисију сорбента, приметно је да је, нарочито у случају 7327-11 дошло и до промене структуре пламена – услед локалног смањења концентрације кисеоника изазваног реакцијом сулфатизације сорбента, дошло је до успоравања процеса сагоревања и његовог делимичног одлагања, што је узроковало незнатно



издужење језгра пламена, али је средња температура на излазу из ложишта задржала приближно исту вредност.

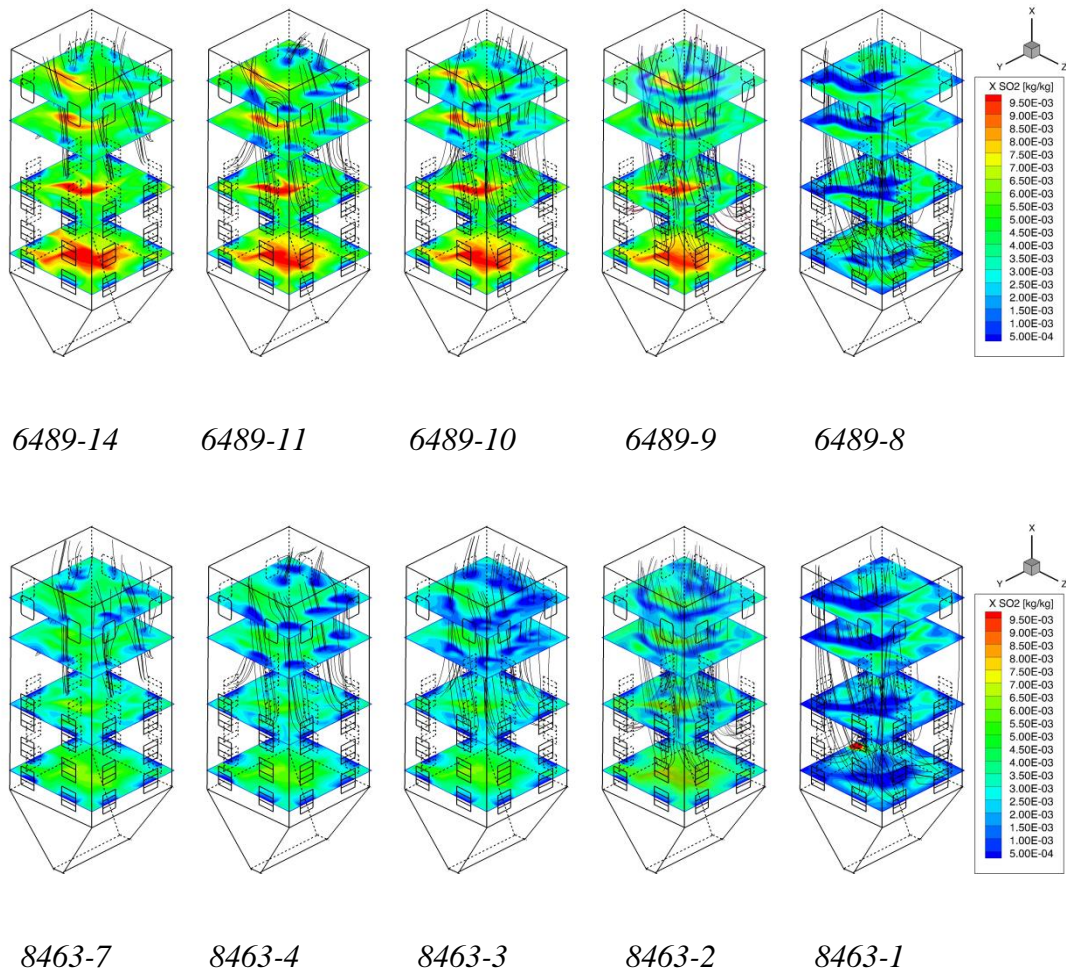
Такође, уколико се користе горива са различитом топлотном моћи и различите конфигурације рада горионика долази до промена у температурном пољу унутар ложишта, поред другачијег поља концентрације оксида сумпора. Ове промене подразумевају другачији температурни профил унутар ложишта и очекивано је да ће доћи до промене оптималног места уношења сорбента у ложиште котла.



*Слика 39 Поља температура приликом промене места уношења сорбента у тест-случајевима заснованим на горивима 6489 и 8463*

Приказано је неколико пресека ложишта на којима се пореде промене у профилима температурског поља при уношењу сорбента у тест-случајевима

заснованим на горивима 6489 и 8463 (Слика 39) и одговарајуће промене које настају у пољима оксида сумпора (Слика 40).



Слика 40 Поља оксида сумпора приликом промене места уношења сорбента у тест-случајевима заснованим на горивима 6489 и 8463

### Уношење сорбента кроз етаже горионика и уношење кроз отворе изнад горионичких пакета

При уношењу кроз појединачне етаже горионика или кроз посебне отворе расподела сорбента је често таква да значајан део сорбента не улази у делове попречног пресека ложишта и поједине зоне са повећаном концентрацијом сумпор-диоксида остају нетакнуте, у зависности од места на коме се сорбент

убацује. Да би побољшали расподелу сорбента по попречном пресеку ложишта, симулирано је уношење сорбента кроз више етажа горионика одједном, као и комбиновано кроз етаже горионика и отворе изнад горионика. Табела 16 садржи

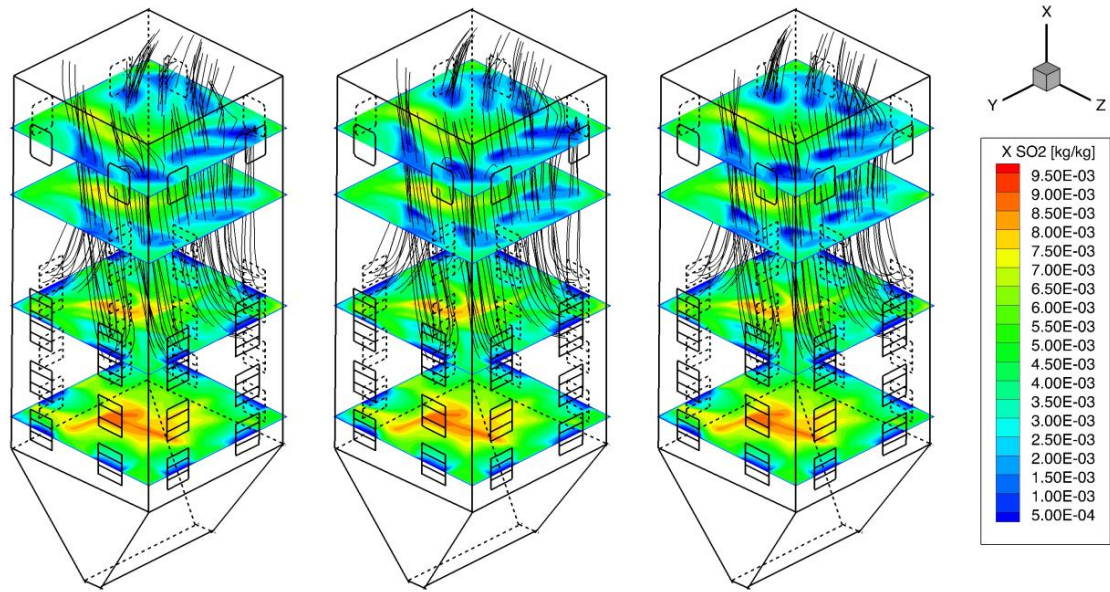
*Табела 16. Утицај прерасподеле масеног протока сорбента приликом уношења кроз две или више етажа горионика на излазне садржаје на крају ложишта*

Тест-случај	Расподела сорбента по висини горионика				Температура	Садржај SO <sub>2</sub>	Садржај NO <sub>x</sub>	Редукција SO <sub>2</sub>
	ГГ-Д	ГГ-Г	БР-Д	БР-Г	$t_l$	$em_{SO_2}$	$em_{NO_x}$	
	%	%	%	%	°C	$\frac{mg}{Nm^3}$	$\frac{mg}{Nm^3}$	%
<b>Ca/S = 2,00</b>								
7327-12	0	0	30	70	1033,60	4756,01	438,21	30,22
7327-13	0	0	50	50	1039,23	4553,06	446,37	33,20
7327-14	0	0	70	30	1040,68	4526,78	447,05	33,58
7327-15	0	20	20	60	1033,98	4295,72	435,61	36,97
7327-16	0	20	33	47	1036,94	4090,33	436,69	39,99
7327-17	0	33	33	33	1037,33	3865,79	438,46	43,28
7327-18	0	47	33	20	1038,19	3828,91	440,36	43,82
7327-19	0	60	20	20	1036,14	3860,86	437,73	43,35
7327-20	10	20	30	40	1028,96	3297,41	432,52	51,62
7327-21	15	15	35	35	1030,07	3092,62	428,23	54,62
7327-22	25	25	25	25	1029,70	2713,88	430,51	60,18
7327-23	35	35	15	15	1032,70	2544,43	425,15	62,67
7327-24	40	30	20	10	1035,90	2596,67	424,68	61,90

извод из резултата симулација за гориво 7327 где су побројани резултати симулација и дате процентуално ефикасности редукције садржаја сумпордиоксида у случајевима у којима је проток сорбента дељен између две или више етажа горионика.

Побољшања добијена бољом расподелом сорбента по попречном пресеку ложишта и боља покривеност зона богатих оксидима сумпора трајекторијама сорбента у одређеним случајевима су показала и до 17% бољи учинак при смањењу емисије у односу на најбоље остварено смањење при уношењу кроз једну етажу горионика на приближно истој висини, уз исти утрошак сорбента. Слика 41 приказује утицај уношења сорбента кроз више етажа горионика са различитим прерасподелама сорбента по етажама горионика.

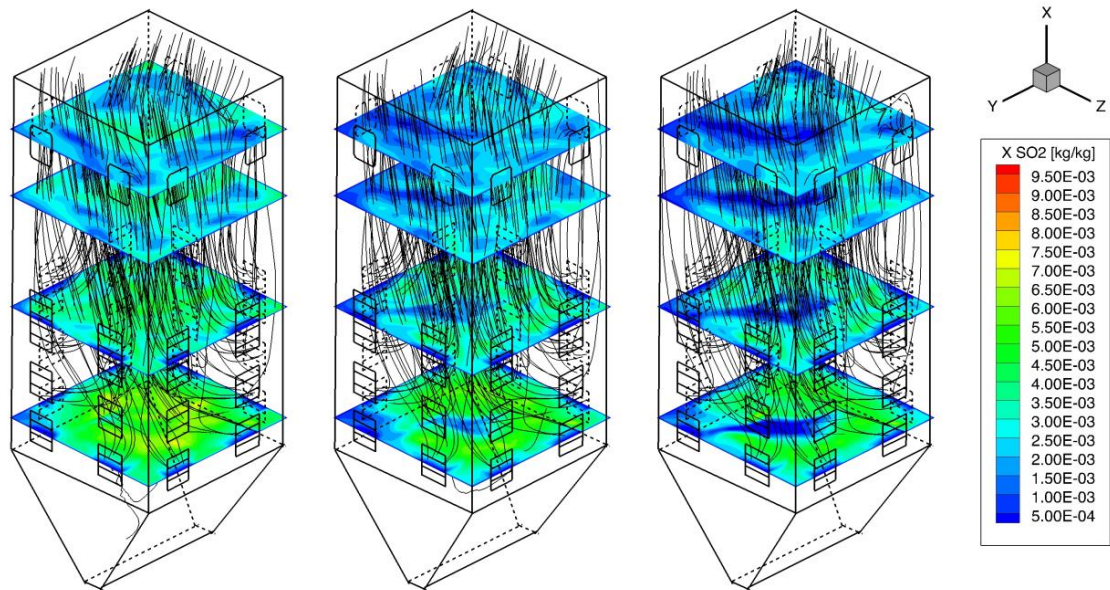




7327-12

7327-13

7327-14



7327-20

7327-22

7327-24

Слика 41 Поља оксида сумпора приликом варирања протока сорбента у тест-случајевима са уношењем сорбента кроз више етажа горјоника.

## Комбиновано истовремено уношење сорбента кроз етаже горионика и отворе изнад горионичких пакета

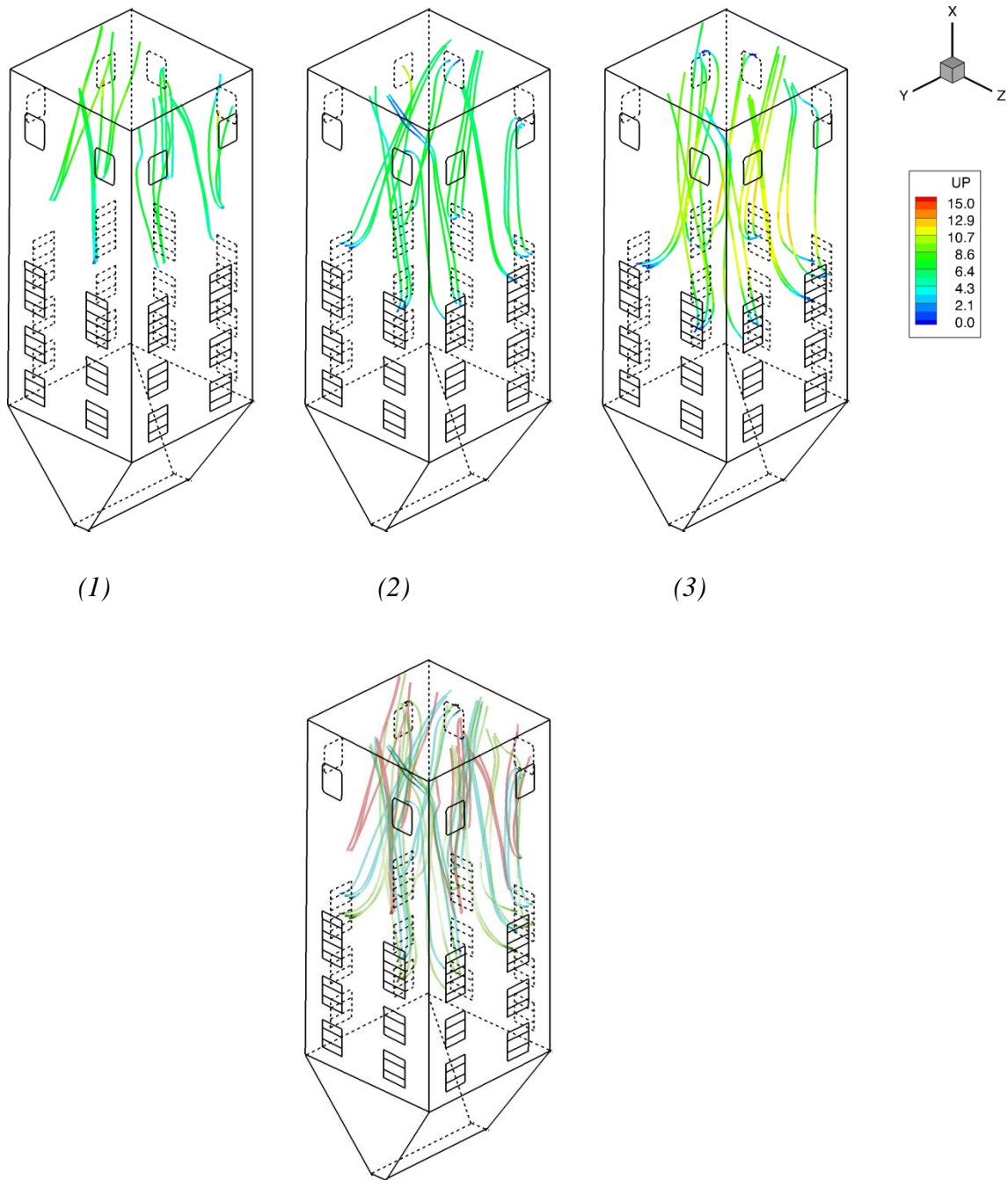
Додатна група симулација је изведена са придодатим отворима за сорбент изнад горионичких пакета уз истовремено уношење сорбента кроз етаже горионика (Табела 17). Приметно је да, уколико се сорбент убацује кроз све етаже, додатни отвори немају значајну улогу у процесу, те да се најбоља редукција постиже у случајевима када је проток сорбента кроз њих минималан или га нема. У ранијим анализама, где је испитивано уношење кроз само једну етажу и отворе, добри резултати су постизани при једнакој расподели сорбента између те етаже и отвора [51], што је било условљено чињеницом да је тада постизана најповољнија дистрибуција сорбента по попречном пресеку ложишта у датим условима.

Табела 17. Резултати симулација за комбиновано уношење кроз горионичке пакете и отворе изнад горионичких пакета

Тест-случај	Расподела сорбента по висини горионика					Температура $t_l$ °C	Садржај SO <sub>2</sub> $em_{SO_2}$ $\frac{mg}{Nm^3}$	Садржај NO <sub>x</sub> $em_{NO_x}$ $\frac{mg}{Nm^3}$	Концентрација O <sub>2</sub> $\chi_{O_2}$ $\frac{kg}{kg}$	Концентрација CO <sub>2</sub> $\chi_{CO_2}$ $\frac{kg}{kg}$	Концентрација H <sub>2</sub> O $\chi_{H_2O}$ $\frac{kg}{kg}$
	ГГ-Д	ГГ-Г	БР-Д	БР-Г	С-О						
	%	%	%	%	%						
<b>Ca/S = 2,00</b>											
<b>КО-1</b>	25	25	25	25	0	1028,0	2783,5	425,2	0,072	0,149	0,123
<b>КО-2</b>	20	20	20	20	20	1031,6	2993,2	427,4	0,070	0,151	0,124
<b>КО-3</b>	15	15	15	15	40	1032,5	3653,2	423,2	0,070	0,151	0,124
<b>КО-4</b>	10	10	10	10	60	1031,9	4416,2	420,1	0,070	0,151	0,124
<b>КО-5</b>	5	5	5	5	80						
<b>КО-6</b>	0	0	0	0	100	1035,7	6450,6	432,3	0,070	0,152	0,123

Радни режими са уношењем дела сорбента изнад горионичких пакета, док се остатак убацује кроз горионичке пакете. У табели је назначена количина сорбента која се убацује кроз појединачне етаже горионика, док се преостали део (допуна до 100%) убацује кроз отворе изнад горионичких пакета, Сви испитивани режими са комбинованим уношењем су засновани на случају са основним горивом 7327 (Табела 14 – основни радни режими).

У условима уношење сорбента кроз све четири етаже горионика и додатне отворе долазимо до нешто нижих ефеката смањења садржаја оксида сумпора у одређеним случајевима, што се може објаснити нагомилавањем сорбента у зонама са нижим температурама и мањим садржајем оксида сумпора. Приметно је (Слика 42) да уношење сорбента кроз отворе, кроз горње, односно доње брид горионике погађа сличну област, и стога већина трајекторија сорбента пролази кроз исте



Слика 42 Трајекторије честица сорбента при уношењу кроз додатне отворе (1), горње брид горионике (2) или доње брид горионике (3) и приказ преклапања трајекторија (црвено – 1, плаво – 2, и зелено – 3.)

области где има смањену реактивност услед поменутих услова. Ово је битан податак приликом анализе, јер даје увид у расподелу сорбента у односу на поље концентрација сумпора на основу које се може закључити да уношењем сорбента кроз горње брид горионике и отворе за сорбент утиче на нагомилавање честица у

истим областима, те је у складу с тим потребно посветити пажњу приликом расподеле протока, да би се избегло нагомилавање сорбента у зонама са малом концентрацијом оксида сумпора, те да би се обезбедило присуство сорбента у зонама са повећаним садржајем.

### **Време боравка честице сорбента унутар ложишта**

Као утицајан фактор на исход реакције мора се узети у обзир и време боравка честица у котловском ложишту, с обзиром да је тим податком условљено време трајања реакције. Само време боравка није могуће задати директно, већ на њега утиче трајекторија дуж које се креће честица, односно место уношења сорбента, као и брзинско поље, што су главни утицајни параметри који одређују колико дуго ће се честица задржати у ложишту. Време боравка је могуће прецизно контролисати у експерименталним условима, док на котловском постројењу треба тежити што је могуће дужем времену боравка честица, а да при томе други услови, попут температурног услова за спречавање интензивног синтеровања и губитка реактивне површине честице, повољна дистрибуција честица у зависности од поља оксида сумпора буду задовољени. У циљу процене времена боравка честица у ложишту, посматране су вертикалне компоненте брзине честица, и трајекторије су обојене интензитетима компонената (пример: Слика 38, Слика 39 и Слика 42). Приметно је да трајекторије ближе центру ложишта, захваћене у централном вртлогу имају веће вертикалне брзине у односу на трајекторије у близини зидова ложишта. Са друге стране, трајекторије ближе центру су знатно дуже, с обзиром да полазе из доњих главних горионика, су знатно дуже. У том погледу би се могло проценити оптимално место уношења сорбента као компромис између дужине трајекторије и брзине честице, али та два параметра сама по себи нису довољна. Према резултатима изведених симулација просечна времена боравка честица, уколико се сорбент уноси кроз отворе изнад горионика су приближно 2 s, док при уношењу кроз горионике то време, зависно од етажне кроз коју се уноси и трајекторије честице износи 3,5 s до 5 s [51].

Једини меродавни показатељи квалитета процеса су излазни садржај оксида сумпора из ложишта и степени сулфатизације честица сорбента, а на које утичу сви претходно поменути параметри.

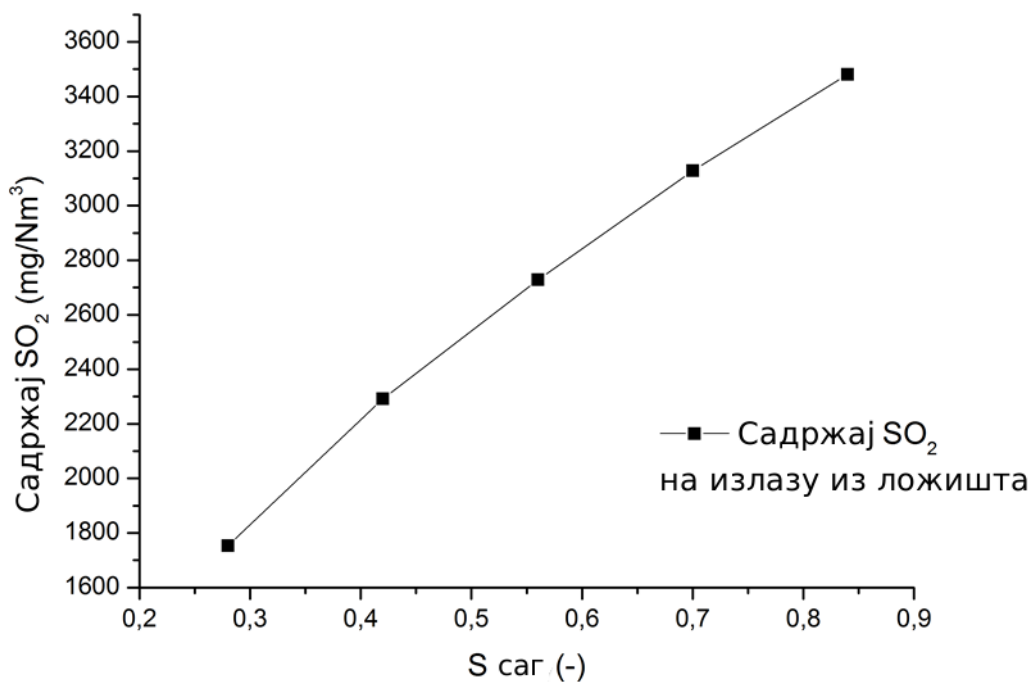
## Параметарска анализа утицаја садржаја сумпора у гориву

Табела 18. Резултати симулација за параметарску анализу - вариран садржај сумпора у радном режиму са горивом 8374

Тест-случај	Масени удео сагорљивог сумпора у гориву (варирано у односу на основни тест-случај)	Температура	Садржај SO <sub>2</sub>	Садржај NO <sub>x</sub>	Концентрација O <sub>2</sub>	Концентрација CO <sub>2</sub>	Концентрација H <sub>2</sub> O
	$r_{g,SO_2}$	$t_l$	$em_{SO_2}$	$em_{NO_x}$	$\chi_{O_2}$	$\chi_{CO_2}$	$\chi_{H_2O}$
	–	°C	$\frac{mg}{Nm^3}$	$\frac{mg}{Nm^3}$	$\frac{kg}{kg}$	$\frac{kg}{kg}$	$\frac{kg}{kg}$
<b>8374-0,50</b>	0,28	1111,24	1752,83	479,19	0,061	0,162	0,124
<b>8374-0,75</b>	0,42	1119,49	2291,26	481,12	0,060	0,163	0,125
<b>8374-1,00*</b>	0,56	1126,56	2728,53	487,65	0,059	0,164	0,125
<b>8374-1,25</b>	0,70	1133,74	3127,92	486,35	0,058	0,165	0,126
<b>8374-1,50</b>	0,84	1139,43	3480,31	487,30	0,057	0,165	0,126

С циљем процене утицаја почетног садржаја сумпора у гориву на сам процес, формирана је група тест-случајева у којој је садржај сумпора у гориву вариран, док су сви други параметри задржали исте вредности. Табела 18 садржи резултате ових симулација. Приметно је да зависност излазне емисије има приближно линеаран карактер. Очекивано, тест-случај са најмање унетог сагорљивог сумпора кроз гориво има и најмању емисију, као и најмањи утрошак сорбента (с обзиром да количина убаченог сорбента зависи од моларног односа калцијума и сумпора и сразмерно се мења у зависности од садржаја сумпора у гориву и масеног протока горива). Слика 43 даје графички приказ промене садржаја оксида сумпора на излазу из ложишта у функцији улазног садржаја сагорљивог сумпора у угљеном праху. Приметна је пропорционална зависност између посматраних променљивих.



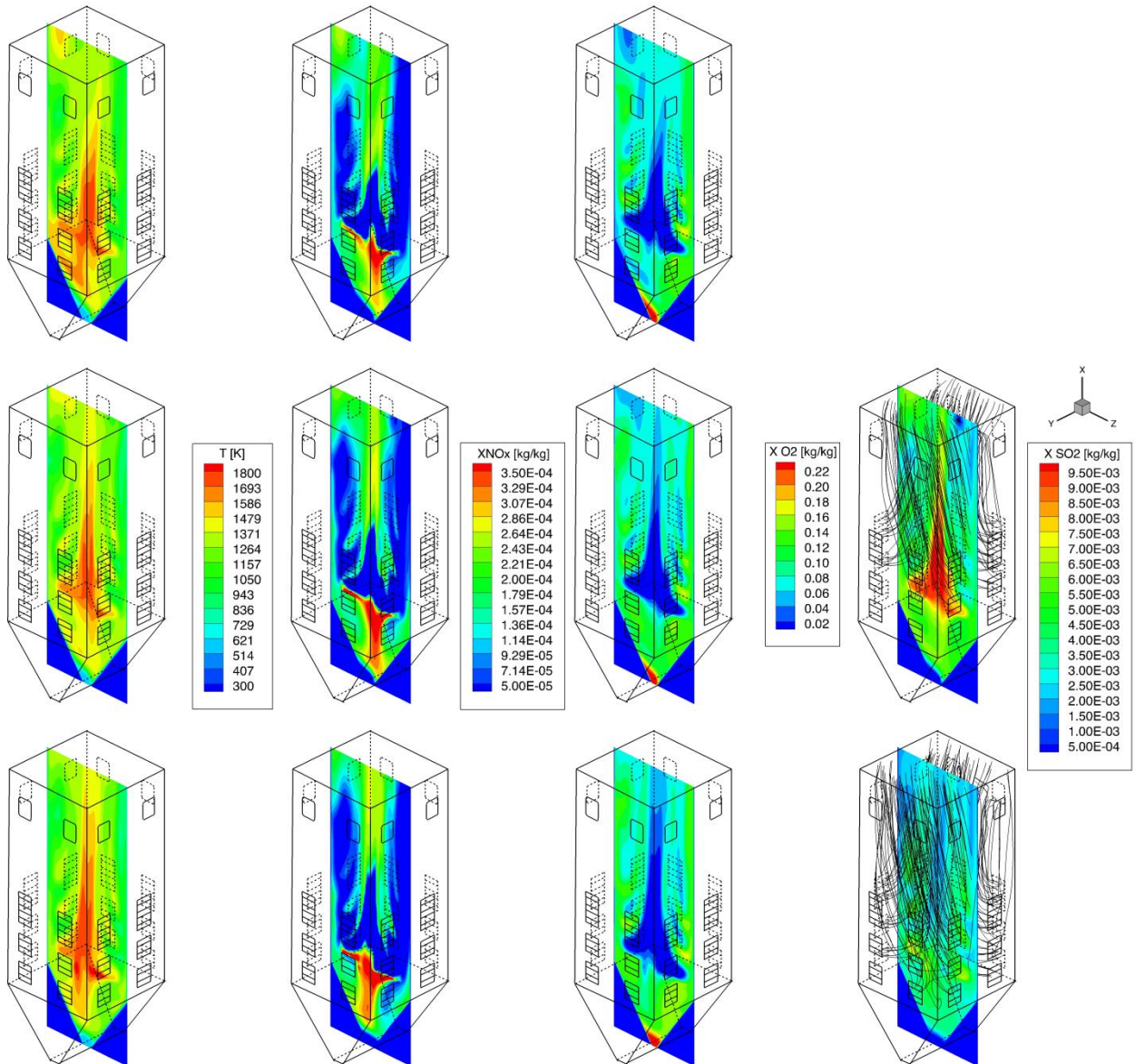


Слика 43 Утицај садржаја сагорљивог сумпора у гориву на емисију оксида сумпора на крају ложишта при константном моларном односу калцијума и сумпора за вариран садржај сумпора у основном гориву 8374

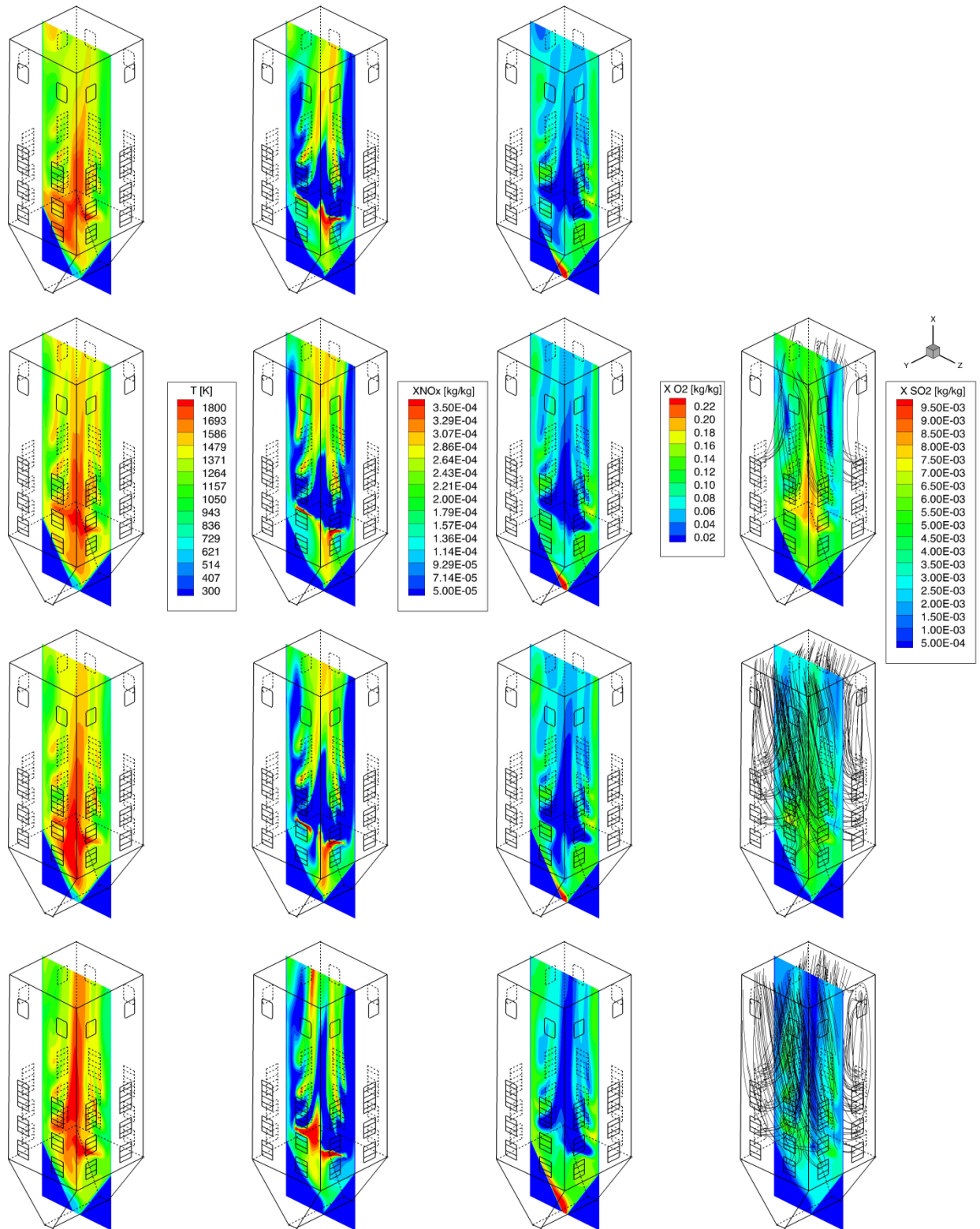
### Утицај предметног поступка одсумповања на температуру ложишних гасова и емисију оксида азота

Посматрањем добијених средњих вредности за излазне температуре не може се извести конкретан закључак о постојању било какве егзактне зависности излазне температуре и уношења сорбента у ложиште. Утицај сорбента се у највећој мери огледа у локалним променама концентрације кисеоника изазване реакцијама сулфатизације што утиче на процес сагоревања на тај начин што умањује доступну количину кисеоника за сагоревање и одлаже односно успорава реакцију док се не стекну одговарајући услови. Утицај реакција сулфатизације честице сорбента на промене локалних концентрација кисеоника, условљава промене у стехиометрији сагоревања, услед чега долази до промена у пољу температуре унутар ложишта. Изазване промене, у зависности од тест-случаја мењају излазну температуру и до 20 °C, а поред тога утичу, у одређеној мери и на механизме

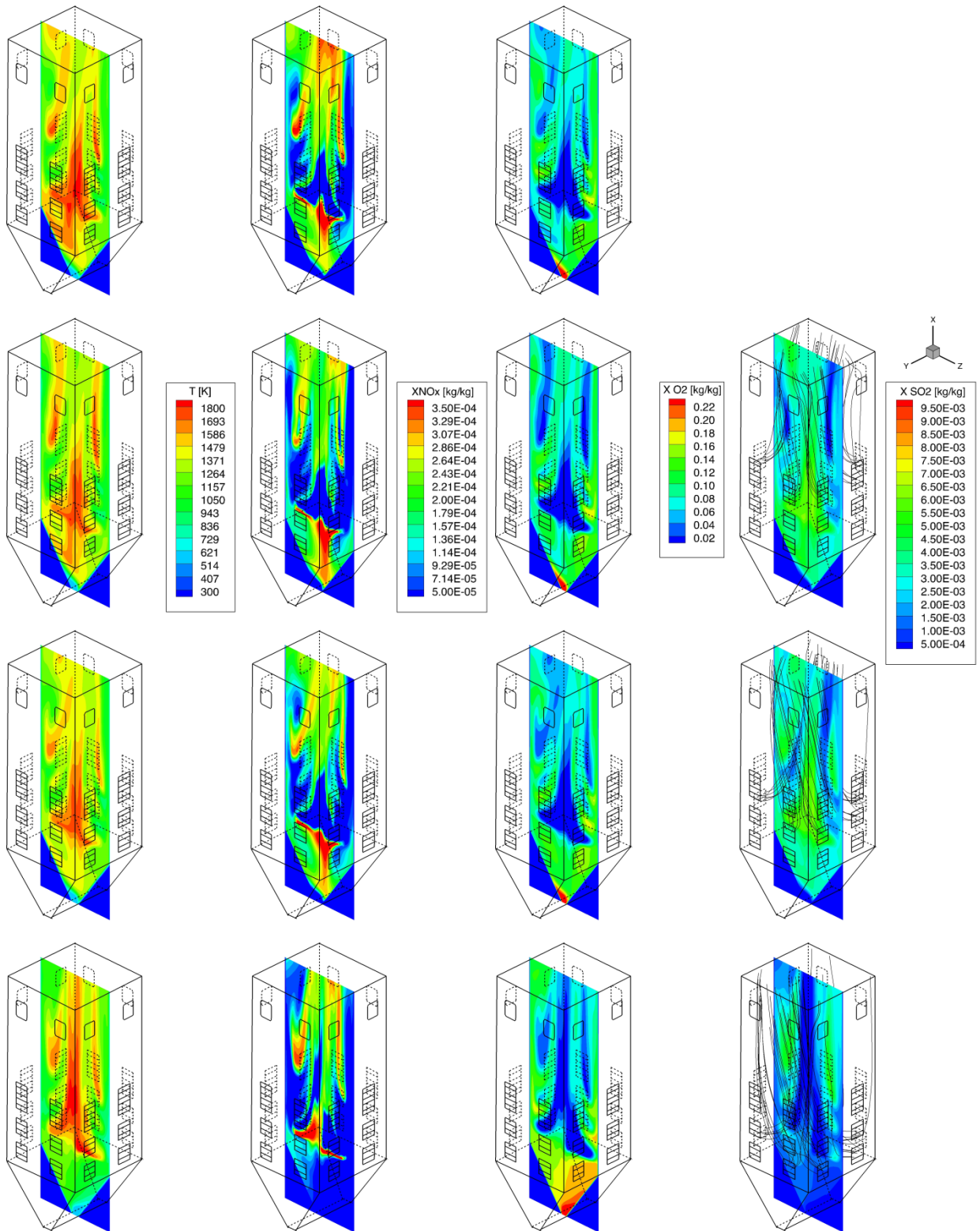
настајања и деградације оксида азота. Такође, промене у организацији сагоревања услед увођења дела секундарног ваздуха кроз отворе за унос сорбента, утичу у извесној мери и на сам процес сагоревања, односно локалне температуре гаса и концентрације производа.



Слика 44 Промене у пољима температуре, концентрације једињења азота, кисеоника и оксида сумпора пре и након уношења сорбента у одабраним тест случајевима (6489-0, 6489-12, 6489-13)



Слика 45 Промене у пољима температуре, концентрације једињења азота, кисеоника и оксида сумпора пре и након уношења сорбента у одабраним тест случајевима (7327-0, 7327-9, 7327-20, 7327-24)



Слика 46 Промене у пољима температуре, концентрације једињења азота, кисеоника и оксида сумпора пре и након уношења сорбента у одабраним тест случајевима (8226-0, 8226-2, 8226-3, 8226-4)

Пратећи излазне концентрације оксида азота које могу имати и мање и веће вредности од полазних, рачунатих у основном тест-случају, не постоји јасно правило по коме уношење сорбента утиче на излазне емисије оксида азота, те је због сложености процеса, потребна нумеричка анализа. Приметно је да постоје случајеви уношења сорбента код којих је дошло до значајног смањења емисије оксида азота, али нису примећени случајеви код којих би постојало прекомерно повећање емисије. Слика 44, Слика 45 и Слика 46 приказују неколико примера промена температурних поља, и поља концентрација једињења азота, кисеоника и оксида сумпора без и приликом уношења сорбента у одабраним тест-случајевима. На овим сликама се може приметити, поредећи поља оксида сумпора и кисеоника, на који начин присуство сорбента мења целокупну слику унутар ложишта и докле сеже утицај таквих промена, односно, колико утицаја уношење сорбента има на друге разматране процесе унутар ложишта (посматрано кроз промене унутар поља температуре и једињења азота).



## Утицај на енергетску ефикасност котла

---

Да би осигурали поуздан и сигуран рад котла потребно је осигурати да температура гасова на излазу из ложишта парног котла буде у одређеним границама. Положај пламена утиче на температуру гасова на излазу, али даје и друге ефекте, те превисок пламен може негативно утицати на грејне површине у конвективном тракту изнад ложишта, док пренизак положај пламена, поред осталог, може значити недовољно прегревање водене паре. Процену енергетске ефикасности парног котла након примењених мера за смањење оксида сумпора могуће је извести термичким прорачуном парног котла.

Поред степена ефикасности котла, увек је неопходно размотрити и могућност да се при примени одређених мера у ложишту, као што је предметни поступак одсумповања, постигну и пројектовани параметри свеже и накнадно прегрејане паре. Овај аспект разматране проблематике није предмет тезе, али га је веома важно нагласити јер употпуњује анализу. Више детаља о термичком прорачуну парних котлова и утицају излазних температура на крају ложишта на енергетску ефикасност парног котла могуће је пронаћи у референцама: [12], [140]. Резултати термичких прорачуна на конкретном предметном ложишту могу се пронаћи у референцама: [11], [51], [137], [141], [142].

## Закључак

---

У оквиру дисертације приказан је развој програма који омогућује симулације комплексних процеса током одсумповања димних гасова директним уношењем спрашеног сорбента на бази калцијума у ложиште парног котла, као и спрегу поменутог процеса са сложеним процесима сагоревања угљеног праха.

Развоју програма је претходило разматрање и одабир постојећих модела одсумповања, као и прилагођавање одабраних модела постојећем коду. Одабрани су модел непрореагованог језгра и модел делимично синтерованих сфера, због доброг компромиса између тачности резултата и прорачунске ефикасности (односно трајања симулација на доступној рачунарској опреми). У том погледу су сви модели прилагођени тродимензионалном кретању честица у струјном простору и моделирани су одговарајући изворни чланови којима се описује интеракција између честица и гасне фазе.

У првом делу симулације су обављене на дводимензионалном гасном каналу који одговара димензијама и обликом одговарајућим експерименталним реакторима. Резултати добијени симулацијама на том каналу су поређени са експерименталним подацима и показано је добро слагање резултата у временским интервалима значајним за процесе одсумповања.

На симулираном котловском ложишту је додат модел реакција честица сорбента и обављене су симулације за различите вариране параметре процеса.

Целокупан програм за моделирање процеса у котловском ложишту и пратећи модели су писани у програмском језику *FORTRAN*. Док је додатни кориснички интерфејс урађен у *Free Pascal Lazarus IDE*<sup>15</sup> окружењу.

Резултати симулација показују значајан потенцијал и могућности примене уношења спрашеног сорбента директно у ложиште енергетског котла ради смањења емисије оксида сумпора. Могућности и важност оптимизације предметног процеса су наглашене кроз постојеће резултате симулација на основу који се јасно може приметити утицај различитих конфигурација уношења сорбента и битност проналажења оптималних параметара процеса за сваки радни режим котла. Анализа је показала да оптимално решење проблема зависи од садржаја сагорљивог сумпора у угљеном праху, од ког зависи количина унетог сорбента, а који се дефинише преко моларног односа калцијума и сумпора, локалне температуре и облик пламена, који диктирају место уношења сорбента у смислу оптималног температурног прозора – места где треба уносити сорбент, као и остали утицајни параметри који су у зависној вези са поменутиим, попут времена боравка честица, њихове температурне историје, локалних концентрација оксида сумпора и сличног.

На основу табела са резултатима, просечно смањење емисије сорбента износи око 38%, док је у најнеповољнијим случајевима тај износ око 11%. Најповољнији случајеви предвиђају смањења емисије преко 55%, и то је само резултат у делу до изласка честица из ложишта. У мањој или већој мери сорбент реагује и на нижим температурама у конвективном гасном каналу, те је до изласка из котла могуће додатно смањење емисије оксида сумпора.

Оптимизацију процеса уношења сорбента у ложиште, ради смањења емисије оксида сумпора могуће је постићи правилним вођењем процеса. Под правилним вођењем подразумева се контрола великог броја утицајних параметара попут локалних температура унутар ложишта и поља концентрација оксида сумпора, и постизање добре дистрибуција честица сорбента у зависности од њих. Као што је показано, примена нумеричких симулација може у овоме значајно да помогне. Усмеравање честица сорбента према местима где је приметно, односно очекивано,

---

<sup>15</sup> IDE – Integrated Development Environment



највеће присуство оксида сумпора, веома је важно. Истовремено је потребно посебно обратити пажњу да том приликом не дође до интензивног синтеровања честица сорбента услед излагања превисоким температурама. Процес је потребно водити на тај начин да сорбент увек прати положај пламена, односно, да се увек уноси у повољном температурном опсегу и да продире до централног дела ложишта где се очекују и највеће концентрације оксида сумпора. При управљању процесом је пожељно посебно обратити пажњу на најниже етаже горионика, нарочито при употреби горива са великом доњом топлотном моћи, због потенцијалне опасност од интензивног синтеровања. Иако је реакција најбржа при убацивању честица кроз доње главне горионике, тада је и синтеровање најинтензивније, те сорбент лако постаје неупотребљив у наставку кретања кроз ложиште. Такође, пожељно је уносити сорбент кроз више етажа горионика истовремено, ради постизања боље покривености попречног пресека ложишта. Конкретна прерасподела по етажама зависи и од геометрије пламена у ложишту, али је начелно показано да више сорбента усмереног кроз главне горионике има повољније ефекте.

Симулацијама је показано да уношење спрашеног сорбента у ложиште за сагоревање угљеног праха може бити оправдано само у случају употребе ситних честица, док употреба крупних честица за последицу има малу искоришћеност сорбента и лошу ефикасност процеса. Поред тога, моларни однос калцијума и сумпора је препоручљиво да буде приближно 2,0, највише из експлоатационих разлога, али и зато што при већим односима пораст ефикасности процеса не прати пораст унете количине сорбента.

Показано је да постоји одређен утицај уношења сорбента на температуру унутар ложишта, те да се у највећој мери огледа кроз утицај реакција сулфатизације на поље кисеоника, од кога зависе реакције сагоревања. Такође је приметан и мањи утицај и на садржај оксида азота у излазним гасовима, настао услед утицаја на поља концентрације кисеоника и температура унутар ложишта.

Промене које настају у излазним температурама су значајне у погледу енергетске ефикасности и оптималног рада котловског постројења, потребно их је свакако

узети у обзир, али је од значаја напоменути и да њихов утицај није превелик те да износи свега пар процената у најекстремнијим случајевима.

У овој дисертацији је приказан један од могућих приступа решавању проблема емисије оксида сумпора из котловског ложишта и разматране су његове могућности на стварном постројењу. Значај оваквог приступа разматрању проблема се огледа у томе што пружа одређен увид у потенцијалну примену технологије на постојећем постројењу, и у каснијим фазама може умањити број потребних експерименталних мерења уколико се одлучи о уградњи ове технологије на котловском постројењу. Експериментална мерења су потребна, али и скупа. Применом рачунара и стратешким планирањем експеримената, могуће је уз значајно смањен број експеримената предвидети понашање постројења у разматраним радним условима.

Поред овога је направљен и нови кориснички интерфејс за развијени софтвер, с циљем да инжењерском особљу које се бави анализом и оптимизацијом процеса на реалним котловским постројењима омогући рад са програмом и допусти самостално покретање програма, где могу варирати параметре који су од интереса за њихове анализе.

Даљи правци истраживања и развоја у овој области су вишеструки, како у примени и развоју других математичких модела и побољшању компонената постојећих посебно са аспекта ефикасности прорачуна, тако и у експерименталним истраживањима на реалним постројењима, као и анализи и употреби других потенцијалних сорбената, али и алтернативних концепција примене предметне методе одсумповања у ложишту и у комбинацији са посебним реакторима на котлу. Такође, постају интересантна и истраживања доступности коришћених сорбената на територији Републике Србије, с обзиром да је један од предуслова употребе технологије лака доступност и транспорт погодног сорбента.

## Номенклатура

$A_1$	$[-]$	- коефицијент (са корекцијом <i>Romo-Millares</i> )
$A_i$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- коефицијент диферентне једначине $i = w, e, s, n, b, t$
$A_p$	$[\text{m}^2]$	- површина попречног пресека честице
$a_i$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- коефицијент диферентне једначине $i = w, e, s, n, b, t$
$a_p$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- коефицијент диферентне једначине
$b$	$[-]$	- коефицијент расипања зрачења уназад
$b$	$[-]$	- број молова
$C$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- конвективни коеф. диферентне једначине
$C$	$[-]$	- бездимензиона концентрација реактанта
$C_D$	$[-]$	- коефицијент отпора кретању честица
$C^m$	$[\text{g cm}^{-3}]$	- моларна концентрација сумпор- диоксида у гасу
$C_p$	$[\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}]$	- специфични топлотни капацитет
$C_{pp}$	$[\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}]$	- специфична топлота честице (у функцији апсолутне температуре гасне фазе)
$C_{\text{SO}_2}$	$[\text{kmol m}^{-3}]$	- концентрација $\text{SO}_2$ унутар пора честице
$C_\mu, C_D, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, C_{\varepsilon 3}$	$[-]$	- константа $k - \varepsilon$ модела турбуленције
$c$	$[-]$	- корекциона константа
$c_{\text{CaO}}$	$[\text{kmol m}^{-3}]$	- концентрација $\text{CaO}$ на површини честице
$c_{ref}^m$	$[\text{g cm}^{-3}]$	- референтна концентрација $\text{SO}_2$
$c_{\text{SO}_2}$	$[\text{kmol m}^{-3}]$	- концентрација $\text{SO}_2$ на површини честице
$c_{\text{SO}_2}^m$	$[\text{mol m}^{-3}]$	- моларна концентрација $\text{SO}_2$
$coef$	$[-]$	- корекциони коефицијент
$D$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- дифузиони коеф. диферентне једначине
$Da$	$[-]$	- <i>Damköhler</i> -ов број
$D_s$	$[\text{m}^2\text{s}^{-1}]$	- коефицијент дифузије кроз чврсти омотач продуката сулфатизације
$d_o$	$[\text{m}]$	- почетни пречник честице
$d_p, d_{p,ij}, d_{p,ijk}$	$[\text{m}]$	- пречник честице
$d_{p,avg}$	$[\text{m}^3]$	- средњи пречник честице
$\mathcal{D}$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- дифузиони коефицијент

$D_m$	$[m s^{-1}]$	- коефицијент дифузије за компоненту $m$
$E_a, E$	$[J mol^{-1}]$	- енергија активације
$E_{kc}$	$[kJ mol^{-1}]$	- енергија активације у једначини калцинације
$F_x$	$[W m^{-2}]$	- тотални флуks топл. радијације у $x$ правцу
$F_y$	$[W m^{-2}]$	- тотални флуks топл. радијације у $y$ правцу
$F_z$	$[W m^{-2}]$	- тотални флуks топл. радијације у $z$ правцу
$f$	$[-]$	- коефицијент расипања зрачења унапред
$f_{CaO}$	$[-]$	- удео фракције (уколико се убацују теоријске честице само једног пречника тада је $f_{CaO} = 1$ )
$f_i$	$[N m^{-3}]$	- запреминске силе које делују на флуидни делић
$\vec{g}$	$[m s^{-2}]$	- гравитационо убрзање
$g_1$	$[-]$	- бездимензиони полупречник слоја продуката реакције сулфатизације
$g_{1,fin}$	$[-]$	- максимални бездимензиони пречник слоја продуката при потпуној сулфатизацији
$g_2$	$[-]$	- бездимензиони полупречник непрореагованог језгра зрна
$H$	$[J]$	- статичка енталпија
$h_{p,ij}$	$[J kg^{-1}]$	- енталпија честице
$h_{pg}$	$[J kg^{-1}]$	- енталпија гаса који напушта честицу
$I_{b,v}, I_b$	$[W m^{-2}]$	- интензитет топлотне радијације црног тела
$I_v$	$[W m^{-2}]$	- интензитет топлотне радијације
$I_x^+, I_x^-$	$[W m^{-2}]$	- интензитет топлотне радијације дуж $x$ правца, смер унапред и уназад
$I_y^+, I_y^-$	$[W m^{-2}]$	- интензитет топлотне радијације дуж $y$ правца, смер унапред и уназад
$I_z^+, I_z^-$	$[W m^{-2}]$	- интензитет топлотне радијације дуж $z$ правца, смер унапред и уназад
$\mathfrak{S}_i$		- флуks посматране величине кроз граничну површ посматране запремине
$J_i$	$[-]$	- конвективно – дифузиони флуks $i = w, e, s, n, b, t$
$J_{m,j}$	$[kg m^{-2} s^{-1}]$	- дифузиони флуks
$K_{ag}$	$[-]$	- апсорпциони коефицијент гасне фазе
$K_{a,v}$	$[m^{-1}]$	- апсорпциони коефицијент

$K_s, k_s$	$[s^{-1}]$	- константа брзине за синтеровање CaO у формули <i>German-Munir</i> -а
$K_{s,v}$	$[m^{-1}]$	- коефицијент расипања зрачења
$K_t$	$[-]$	- тотални коефицијент топлотне радијације
$k$	$[m^{-2}s^{-2}]$	- турбулентна кинетичка енергија
$k$	$[m^{0,6}s^{-1}]$	- константа брзина реакције калцинације
$k$	$[m s^{-1}]$	- константа брзине реакције
$k_a$	$[s^{-1}]$	- коефицијент брзине реакције
$k_c$	$[mol m^{-2}s^{-1}]$	- константа брзине реакције за калцинацију
$k_{c,0}$	$[mol m^{-2}s^{-1}]$	- предекспоненцијални фактор у <i>Arrhenius</i> -овој једначини за калцинацију
$k_D$	$[mol m^{-2}s^{-1}Pa^{-1}]$	- коефицијент брзине реакције калцинације
$k_d$	$[m^4g^2Pa^{0,64}]$	- константа дифузије кроз слој продуката сулфатизације
$k_d$	$[m s^{-1}]$	- константа дифузионе брзина реакције
$k_r$	$[m s^{-1}]$	- константа кинетичке брзина реакције
$k_r$	$[mol m^{-2}s^{-1}]$	- константа брзине сагоревања
$k_{r,0}$	$[mol m^{-2}s^{-1}]$	- почетна брзина сагоревања
$k_s, k_a$	$[kg m^{-2}s^{-1}]$	- константа брзине сулфатизације
$L$	$[m]$	- дебљина слоја продуката сулфатизације
$l_0$	$[m]$	- карактеристично растојање
$\mathcal{L}$		- вредност посматране величине по јединици масе
$M_C$	$[kg mol^{-1}]$	- моларна маса C
$\dot{m}_{CaO}$	$[s^{-1}]$	- специфични масени проток CaO
$M_{H_2}$	$[kg mol^{-1}]$	- моларна маса H <sub>2</sub>
$M_i$	$[kg mol^{-1}]$	- моларна маса компоненте смеше <i>i</i>
$M_{M,CaCO_3}$	$[kg mol^{-1}]$	- моларна маса CaCO <sub>3</sub>
$M_{M,CaO}$	$[kg mol^{-1}]$	- моларна маса CaO
$M_{M,SO_2}, M_{SO_2}$	$[kg mol^{-1}]$	- моларна маса SO <sub>2</sub>
$M_{O_2}$	$[kg mol^{-1}]$	- моларна маса O <sub>2</sub>
$M_p$	$[kg mol^{-1}]$	- моларна маса честице
$m_p, m_{p,ij}$	$[kg]$	- маса честице
$m_{p,C}$	$[kg]$	- маса угљеника у честици
$m_{p,H_2}$	$[kg]$	- маса водоника у честици
$m_{p,HCN}$	$[kg]$	- маса цијановодоника у честици
$m_{p,O_2,gor}$	$[kg]$	- маса везаног кисеоника у честици
$m_{p,Ssag}$	$[kg]$	- маса сагорљивог сумпора у честици
$m_{p,W}$	$[kg]$	- маса влаге у честици

$N_{CaCO_3}$	[mol]	- број молова $CaCO_3$
$\dot{N}_{ij}, \dot{N}_{ijk}$	[s <sup>-1</sup> ]	- проток броја честица кроз контролну запремину
$N_j$	[m <sup>-3</sup> ]	- густина броја честица у <i>Euler</i> -овом пољу
$N_p$	[m <sup>-3</sup> ]	- концентрација честица
$Nu$	[-]	- <i>Nusselt</i> -ов број
$n$	[mol]	- број молова $SO_2$
$n'$	[mol]	- сулфатно оптерећење сорбента (количина апсорбованог сумпора)
$\dot{n}$	[mol s <sup>-1</sup> ]	- број молова $SO_2$ дат по јединици времена трајања реакције
$n_{cp}$	[-]	- број зрна у међусобном додиру унутар честице
$\dot{n}_{p,CaO}$	[s <sup>-1</sup> ]	- број честица које прате дату трајекторију
$P$	[Pa]	- укупан притисак
$\bar{P}$	[N m <sup>-2</sup> ]	- осредњена вредност статичког притиска
$P_{eq}$	[Pa]	- равнотежни притисак разлагања компоненте
$P_i$	[Pa]	- парцијални притисак $CO_2$ у смеси
$P_{SO_2}$	[Pa]	- парцијални притисак $SO_2$ изнад равнотежног парцијалног притиска у димном гасу
$p$	[N m <sup>-2</sup> ]	- тренутна вредност статичког притиска
$Pr$	[-]	- <i>Prandtl</i> -ов број
$P_v$	[-]	- фазна функција расипања зрачења
$Q_{kp}$	[W]	- конвективни топлотни флуks
$Q_{rp}$	[W]	- радијациони топлотни флуks
$q_r$	[W m <sup>-2</sup> ]	- нето запремински радијациони флуks
$q_{rg}$	[W m <sup>-2</sup> ]	- радијациони топлотни флуks за гасовиту фазу
$R$	[J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	- универзална гасна константа
$R_a$	[mol g <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	- стварна брзина реакције сулфатизације према <i>Borgwardt</i> -овом моделу
$R_{a,0}$	[mol g <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	- брзина реакције при нултој сулфатизацији
$R_{a,D}$	[kg s <sup>-1</sup> ]	- брзина реакције сулфатизације у изворном члану за $CaO$
$R_c$	[mol m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> ]	- брзина калцинације
$R_{c,0}$	[mol m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> ]	- почетна вредност брзине калцинације
$Re$	[-]	- <i>Reynolds</i> -ов број
$Re_p$	[-]	- <i>Reynolds</i> -ов број честице

$R_{ref}$		- критеријум за оцену конвергенције
$R_{\Phi}$		- заостали извор (резидуал)
$R_{\Phi,tot}$		- укупан збир свих резидуала у контролним запреминама, нормализован са масеним протоком на улазу у струјни простор
$r$	$\text{mol g}^{-1} \text{s}^{-1}$	- брзина настајања $\text{SO}_3$ унутар честице
$\bar{r}$	$[-]$	- бездимензиона брзина реакције (сведена на бездимензиони интервал времена)
$r_0$	$[m]$	- почетни полупречник зрна
$r_A$	$[\text{kmol m}^{-3}\text{s}^{-1}]$	- запреминска брзина реакције $\text{SO}_2$
$r_p$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- проток гаса који напушта честицу
$r_{p,avg}$	$[m]$	- средњи полупречник честице
$r_{\text{SO}_2}$	$[\text{kmol m}^{-3}\text{s}^{-1}]$	- запреминска брзина реакције $\text{SO}_2$ са сорбентом
$\mathfrak{R}$		- продукција посматране величине
$\mathfrak{R}_p$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- брзина хетерогене хемијске реакције, односно брзина размене масе
$\mathfrak{R}_{P,C}$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- хетерогена брзина реакције сагоревања C
$\mathfrak{R}_{P,H_2}$	$[\text{kg s}^{-1}]$	- хетерогена брзина реакције сагоревања $\text{H}_2$
$S$	$[\text{m}^2\text{g}]$	- специфична површина у посматраном временском тренутку
$S$	$[\text{m}^2\text{m}^{-3}]$	- специфична површина по $\text{m}^3$ честице
$S$		- изворни члан
$\vec{S}$	$[m]$	- координата у правцу радијационог зрака
$S^{n,k}$	$[\text{m}^2\text{g}^{-1}]$	- површина која је синтеровала у временском тренутку $n$ сорбента доступна за реакцију
$S_0^n$	$[\text{m}^2\text{m}^{-3}]$	- специфична површина
$S_{0,Ca}^n$	$[\text{m}^2\text{m}^{-3}]$	- специфична површина дела честице који се састоји од једињења калцијума
$S_{0,CaO}$	$[\text{m}^2\text{g}^{-1}]$	-Теоријска, маскимална површина $\text{CaO}$ добијена у идеалним условима, без утицаја синтеровања
$S_{0,Mg}^n$	$[\text{m}^2\text{m}^{-3}]$	- специфична површина дела честице који се састоји од једињења магнезијума
$S_0$	$[\text{m}^2\text{m}^{-3}]$	- почетна специфична површина по $\text{m}^3$
$S_1$	$[\text{m}^2\text{m}^{-3}]$	- специфична површина слоја продуката по $\text{m}^3$ честице

$S_2$	$[m^2 m^{-3}]$	- специфична површина непрореагованог језгра зрна по $m^3$ честице
$S_{avg}$	$[m^{-2} m^{-3}]$	- осредњена специфична површина
$S_{as}$	$[m^2 g^{-1}]$	- асимптотска вредност БЕТ површине (теоријска максимална развијена површина у идеалним условима калцинације)
$S_{CaO}^n$	$[m^2 g^{-1}]$	- површина CaO доступна за реакцију у $n$ -том временском кораку
$S_{CaCO_3}$	$[m^2 g^{-1}]$	- специфична унутрашња површина некалцинисаног сорбента ( $CaCO_3$ )
Sc	$[-]$	- <i>Schmidt</i> -ов број
Sh	$[-]$	- <i>Sherwood</i> -ов број
$S_m$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- извор масе у једначини транспорта скаларних компоненти за компоненту $m$
$S_p$		- део изворног члана
$S_p^h$	$[W m^{-3}]$	- изворни члан услед размене топлоте између фаза
$S_p^k$	$[kg m^{-1} s^{-3}]$	- извор турбулентне кинетичке енергије услед присуства честица
$S_p^m$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- изворни члан услед реакција између фаза
$S_{p,CO_2}^m$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за угљен-диоксид услед сагоревања угљеног праха
$S_{p,H_2O}^m$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за водену пару услед сагоревања угљеног праха
$S_{p,H_2CN}^m$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за цијановодоник услед сагоревања угљеног праха
$S_{p,O_2}^m$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за кисеоник услед сагоревања угљеног праха
$S_{p,SO_2}^m$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за оксиде сумпора услед сагоревања угљеног праха
$S_{p,CO_2}^{sorb}$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за угљен-диоксид услед реакција честица сорбента
$S_{p,H_2O}^{sorb}$	$[kg m^{-3} s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за водену пару услед реакција честица сорбента



$S_{p,O_2}^{sorb}$	$[kg\ m^{-3}s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за кисеоник услед реакција честица сорбента
$S_{p,SO_2}^{sorb}, S_{p,SO_2}^{CaO}$	$[kg\ m^{-3}s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за оксиде сумпора услед реакција честица сорбента
$S_{p,HCN}^{NO_x}$	$[kg\ m^{-3}s^{-1}]$	- изворни члан у једначини за цијановодоник услед реакција оксида азота
$S_{p,NO_x}^{gorivi\ (preko\ HCN)}$	$[kg\ m^{-3}s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за оксиде азота услед сагоревања угљеног праха
$S_{p,NO_x}^{termalni}$	$[kg\ m^{-3}s^{-1}]$	- изворни члан масе у једначини за оксиде азота услед реакција честица сорбента
$S_p^u, S_p^v, S_p^w$	$[N\ m^{-3}]$	- изворни члан количине кретања услед међудејства фаза
$S_p^\varepsilon$	$[kg\ m^{-1}s^{-4}]$	- извор у једначини дисипације турбулентне кинетичке енергије услед присуства честица
$S_u$		- део изворног члана
$S_\Phi$		- изворни члан за променљиву $\Phi$
$s$	$[-]$	- коефицијент расипања зрачења бочно
$T$	$[K]$	- температура
$T_p$	$[K]$	- температура честице
$T_{ref}$	$[K]$	- референтна температура
$t$	$[^\circ C]$	- температура
$t$	$[s]$	- време
$t^*$	$[-]$	- бездимензионо време
$\vec{U}$	$[m\ s^{-1}]$	- вектор брзине осредњен по времену
$\vec{U}_p$	$[m\ s^{-1}]$	- вектор укупне осредњене брзине честице
$U_{p,ijk}, V_{p,ijk}, W_{p,ijk}$	$[m\ s^{-1}]$	- компонента брзине честице која се налази у контролној запремини $ijk$
$\vec{U}_{pc}$	$[m\ s^{-1}]$	- конвентивни део вектора брзине честице осредњен по времену
$\vec{U}_{pd}$	$[m\ s^{-1}]$	- дифузиони део вектора брзине честице осредњен по времену
$U, V, W$	$[m\ s^{-1}]$	- осредњена компонента брзине
$U_i, U_j, U_k$	$[m\ s^{-1}]$	- осредњена компонента брзине у индексној нотацији
$\vec{u}$	$[m^{-2}s^{-1}]$	- вектор брзине
$\vec{u}_p$	$[m^{-2}s^{-1}]$	- вектор брзине честице
$u'_i u'_j$	$[m^{-2}s^{-2}]$	- компоненте <i>Reynolds</i> -ових напона

$u_i, u_j, u_k$	$[m s^{-1}]$	- компонента брзине у правцу координате
$u, v, w$	$[m s^{-1}]$	- тренутна вредност компоненте брзине
$u', v', w'$	$[m s^{-1}]$	- флукуационе компоненте брзине
$V$	$[m^3]$	- запремина
$V_{M,CaCO_3}$	$[m^3 mol^{-1}]$	- моларна запремина $CaCO_3$
$V_{M,CaO}$	$[m^3 mol^{-1}]$	- моларна запремина $CaO$
$V_{R,Ca}$	$[-]$	- запремински удео калцијума у некалцинисаној честици сорбента
$V_{R,Mg}$	$[-]$	- запремински удео магнезијума у некалцинисаној честици сорбента
$W$	$[g]$	- маса чврстог сорбента
$w$	$[g]$	- почетна маса честице
$X$	$[-]$	- степен калцинације честице
$X_c$	$[-]$	- степен калцинације сорбента
$X_s$	$[-]$	- степен сулфатизације сорбента
$X_{SO_2}$	$[kg kg^{-1}]$	- масена концентрација $SO_2$
$x_i, x_j, x_k$	$[m]$	- координата
$x, y, z$	$[m]$	- координата
$z$	$[-]$	- бездимензионо радијално растојање унутар честице сорбента
 Грчка слова		
$\alpha$	$[-]$	- експонент (у функцији од $\chi_{O_2}$ )
$\alpha$	$[-]$	- запремински однос чврстих продуката реакције и реактанта
$\beta$	$[g mol^{-1}]$	- коефицијент
$\Gamma_p$	$[m^{-2}s^{-1}]$	- коефицијент дифузије честица
$\Gamma_{rd}$	$[m^2]$	- транспортни коефицијент за радијациону размену топлоте
$\Gamma_{x,eff}$	$[kg m^{-2}s^{-1}]$	- ефективни дифузиони коефицијент
$\Gamma_\Phi$		- транспортни коеф. за променљиву $\Phi$
$\gamma$	$[-]$	- експонент у формули <i>German-Munir</i> -а
$\delta$	$[-]$	- однос ефективне дифузије и ефективне дифузије при нултој сулфатизацији
$\varepsilon$	$[m^{-2}s^{-3}]$	- дисипација турбулентне кинетичке енергије
$\varepsilon$	$[-]$	- локална, тренутна порозност
$\varepsilon_{Ca}$	$[-]$	- порозност делимично калцинисаног $CaCO_3$
$\varepsilon_0$	$[-]$	- почетна порозност честице сорбента
$\eta$	$[-]$	- коефицијент ефективности, дефинисан као однос стварне брзине

		реакције и тероријске максималне брзине реакције
$\eta_{ef}$	[–]	- фактор ефективности
$\eta_{ef,0}$	[–]	- фактор ефективности при нулој сулфатизацији
$\eta_{ef,fin}$	[–]	- гранична вредност фактора ефективности након које реакција сулфатизације престаје
$\theta$	rad	- угао, координата
$\lambda$	[–]	- структурни параметар
$\mu$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	- динамичка вискозност
$\mu_{eff}$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	- ефективна динамичка вискозност
$\mu_t$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	- турбулентна динамичка вискозност
$\rho$	[kg m <sup>-3</sup> ]	- густина
$\rho_{CaO}$	[kg m <sup>-3</sup> ]	- густина честице CaO
$\rho_{cell}$	[kg m <sup>-3</sup> ]	- густина флуида у контролној запремини услед апсорпције SO <sub>2</sub> помоћу честица CaO
$\rho_{gas}$	[kg m <sup>-3</sup> ]	- густина гаса
$\rho_i$	[kg m <sup>-3</sup> ]	- густина компоненте смеше $i$
$\rho_p$	[kg m <sup>-3</sup> ]	- густина честице
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	[–]	- константа $k - \varepsilon$ модела турбуленције
$\tau$	[s]	- време
$\tau_0$	[s]	- почетно време
$\tau_E$	[s]	- временски интервал
$v$	[–]	- удео CaO унутар зрна на запреминској или површинској основи
$\chi_{CO_2}$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- конц. угљен-диоксида у гасној смеси
$\chi_g$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- концентрација гаса
$\chi_{H_2O}$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- конц. водене паре у гасној смеси
$\chi_{HCN}$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- конц. цијановодоника у гасној смеси
$\chi_m$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- концентрација компоненте $m$
$\chi_{N_2}$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- конц. азота у гасној смеси
$\chi_{NO}$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- концентрација оксида азота у гасној смеси приказана преко концентрације NO)
$\chi_{NO_x}$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- конц. оксида азота у гасној смеси
$\chi_{O_2}$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- концентрација кисеоника у гасној смеси
$\chi_p$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- концентрација честица
$\chi_p \mathcal{N}_r$	[J kg <sup>-1</sup> ]	- топлота хемијске реакције честица
$\chi_{SO_2}$	[kg kg <sup>-1</sup> ]	- конц. оксида сумпора у гасној смеси
$\Phi$	[–]	- <i>Thiele</i> -ов модулус
$\Phi$		- општа променљива
$\Phi_I$		- променљива $I = W, E, S, N, B, T$
$\Omega_0$	[–]	- алbedo расипање зрачења

### Називи хемијских елемената и једињења

C	[mol]	- угљеник
CaCO <sub>3</sub>	[mol]	- калцијум-карбонат
CaO	[mol]	- калцијум-оксид
Ca(OH) <sub>2</sub>	[mol]	- калцијум-хидроксид
CaSO <sub>4</sub>	[mol]	- калцијум-сулфат
CO <sub>2</sub>	[mol]	- угљен-диоксид
COS	[mol]	- карбонил-сулфид
CS <sub>2</sub>	[mol]	- угљен-дисулфид
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	[mol]	- фери-оксид
H <sub>2</sub>	[mol]	- водоник
HCN	[mol]	- цијановодоник
H <sub>2</sub> O	[mol]	- водена пара
H <sub>2</sub> S	[mol]	- водоник-сулфид
MgO	[mol]	- магнезијум-оксид
NH <sub>3</sub>	[mol]	- амонијак
NO	[mol]	- азот-моноксид
NO <sub>2</sub>	[mol]	- азот-диоксид
N <sub>2</sub> O	[mol]	- азот-субоксид
O <sub>2</sub>	[mol]	- кисеоник
SiO <sub>2</sub>	[mol]	- силицијум-диоксид
SO <sub>2</sub>	[mol]	- сумпор-диоксид
SO <sub>3</sub>	[mol]	- сумпор-триоксид

## Литература

---

- [1] *Key World Energy Statistics 2015*. Paris, France: International Energy Agency - Chirat, 2015.
- [2] P. J. Reddy, *Clean coal technologies for power generation*. Hyderabad: A Balkema Book, 2013.
- [3] B. Dou, W. Pan, Q. Jin, W. Wang, and Y. Li, "Prediction of SO<sub>2</sub> removal efficiency for wet Flue Gas Desulfurization," *Energy Convers. Manag.*, vol. 50, no. 10, pp. 2547–2553, 2009.
- [4] R. K. Srivastava and W. Jozewicz, "Flue Gas Desulfurization: The State of the Art," *J. Air Waste Manage. Assoc.*, vol. 51, no. 12, pp. 1676–1688, Dec. 2001.
- [5] A. M. Carpenter, "Low water FGD technologies," 2012.
- [6] N. Punbusayakul, J. Charoensuk, and B. Fungtammasan, "Modified sulfation model for simulation of pulverized coal combustion," *Energy Convers. Manag.*, vol. 47, no. 3, pp. 253–272, 2006.
- [7] S. Belošević, "Prilog modeliranju procesa u ložištu kotla za sagorevanje ugljenog praha," University of Belgrade, 2003.
- [8] M. Sijerčić, *Matematičko modeliranje kompleksnih turbulentnih transportnih procesa*. Beograd: Jugoslovensko društvo termičara i Institut za nuklearne nauke "Vinča," 1998.
- [9] S. Belosevic, M. Sijercic, D. Tucakovic, and N. Crnomarkovic, "A numerical study of a utility boiler tangentially-fired furnace under different operating conditions," *Fuel*, vol. 87, no. 15, pp. 3331–3338, 2008.
- [10] S. Belosevic, M. Sijercic, N. Crnomarkovic, B. Stankovic, and D. Tucakovic, "Numerical Prediction of Pulverized Coal Flame in Utility Boiler Furnaces," *Energy & Fuels*, vol. 23, no. 11, pp. 5401–5412, Nov. 2009.
- [11] S. Belošević, V. Beljanski, I. Tomanović, N. Crnomarković, D. Tucaković, and T. Živanović, "Numerical Analysis of NO<sub>x</sub> Control by Combustion Modifications in Pulverized Coal Utility Boiler," *Energy & Fuels*, vol. 26, no. 1, pp. 425–442, Jan. 2012.
- [12] D. Tucaković, T. Živanović, G. Stupar, M. Banjac, S. Belošević, N. Crnomarković, I. Tomanović, and V. Beljanski, "A computer code for the utility boiler thermal calculation," in *CD-ROM Proceedings (ISBN 978-86-7877-021-0), International Conference Power Plants 2012*, 2012, pp. 948–960.
- [13] "Directive 2010/75/EU of the European Parliament and of the Council of 24 November 2010 on industrial emissions (integrated pollution prevention and control) Text with EEA relevance," *Off. J. Eur. Union*, no. L 334, pp. 17–119, 2010.

- [14] М. Гаврић, А. Влајчић, and Б. Чеперковић, *Зелена књига електропривреде Србије*. Београд: ЈП Електропривреда Србије, Сектор за односе с јавношћу, 2009.
- [15] Ј. Ђуковић and В. Војанић, *Aerozagađenje : pojam, stanje, izvori, kontrola i tehnološka rješenja / Jovan Đuković, Vaso Bojanić*. Mrlješ, 2000 (Beograd : Mrlješ): Banja Luka : Institut zaštite i ekologije, 2000.
- [16] J. S. Dennis and A. N. Hayhurst, "Mechanism of the sulphation of calcined limestone particles in combustion gases," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 45, no. 5, pp. 1175–1187, 1990.
- [17] J. Cheng, J. Zhou, J. Liu, Z. Zhou, Z. Huang, X. Cao, X. Zhao, and K. Cen, "Sulfur removal at high temperature during coal combustion in furnaces: a review," *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 29, no. 5, pp. 381–405, Jan. 2003.
- [18] F.-G. Ostrop, "Coal Quality Control for the Consumers Along the North-South Railway Line," *Bulk Solids Handl.*, vol. 14, p. 87, 1994.
- [19] J. Cheng, J. Liu, X. Wu, L. Tang, N. Li, Q. Yao, X. Cao, M. Fang, Z. Luo, and K. Cen, "The characteristics of fluorine and sulfur release during coal combustion," 1999.
- [20] F. Kargi and J. M. Robinson, "Removal of Sulfur Compounds from Coal by the Thermophilic Organism *Sulfolobus acidocaldarius*," *Appl. Environ. Microbiol.*, vol. 44, no. 4, pp. 878–883, 1982.
- [21] F. Kargi and J. M. Robinson, "Biological removal of pyritic sulfur from coal by the thermophilic organism *Sulfolobus acidocaldarius*," *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 27, no. 1, pp. 41–49, Jan. 1985.
- [22] B. Toole-O'Neil, "Furnace Sorbent Injection," *J. Air Waste Manage. Assoc.*, vol. 40, no. 12, pp. 1716–1718, Dec. 1990.
- [23] B. K. Gullett and K. Raghunathan, "Reduction of Coal-Based Metal Emissions by Furnace Sorbent Injection," *Energy & Fuels*, vol. 8, no. 5, pp. 1068–1076, Sep. 1994.
- [24] L. J. Muzio and G. R. Often, "Assessment of Dry Sorbent Emission Control Technologies Part I. Fundamental Processes," *JAPCA*, vol. 37, no. 5, pp. 642–654, May 1987.
- [25] B. K. Gullett, K. R. Bruce, W. F. Hansen, and J. E. Hofmann, "Sorbent/Urea slurry injection for simultaneous SO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub> removal," *Environ. Prog.*, vol. 11, no. 2, pp. 155–162, May 1992.
- [26] P. W. Sage and N. W. J. Ford, "Review of sorbent injection processes for low-cost sulphur dioxide control," *Arch. Proc. Inst. Mech. Eng. Part A J. Power Energy 1990-1996 (vols 204-210)*, vol. 210, no. 31, pp. 183–190, Jun. 1996.
- [27] F. R. Steward, M. Couturier, and K. Morris, "Firing coal and limestone in a low-NO<sub>x</sub> burner, to reduce SO<sub>2</sub> emissions.," *J. Inst. Energy*, vol. 65, no.

- 465, pp. 177–184, 1992.
- [28] B. Grubor, V. Manovic, and S. Oka, “An experimental and modeling study of the contribution of coal ash to SO<sub>2</sub> capture in fluidized bed combustion,” *Chem. Eng. J.*, vol. 96, no. 1–3, pp. 157–169, Dec. 2003.
- [29] V. Manovic, B. Grubor, and D. Loncarevic, “Modeling of inherent SO<sub>2</sub> capture in coal particles during combustion in fluidized bed,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 61, no. 5, pp. 1676–1685, 2006.
- [30] R. K. Srivastava, W. Jozewicz, and C. Singer, “SO<sub>2</sub> scrubbing technologies: A review,” *Environ. Prog.*, vol. 20, no. 4, pp. 219–228, Dec. 2001.
- [31] S. Olausson, M. Wallin, and I. Bjerle, “A model for the absorption of sulphur dioxide into a limestone slurry,” *Chem. Eng. J.*, vol. 51, no. 2, pp. 99–108, 1993.
- [32] W. Jozewicz and G. T. Rochelle, “Fly ash recycle in dry scrubbing,” *Environ. Prog.*, vol. 5, no. 4, pp. 219–224, Nov. 1986.
- [33] R. W. Rice and G. A. Bond, “Flue gas desulfurization by in-duct dry scrubbing using calcium hydroxide,” *AIChE J.*, vol. 36, no. 3, pp. 473–477, Mar. 1990.
- [34] M. R. Stouffer, H. Yoon, and F. P. Burke, “Mechanism of CaO sulfation in boiler limestone injection,” *Prepr. Pap., Am. Chem. Soc., Div. Fuel Chem.; (United States)*, vol. 32:4, 1987.
- [35] A. Gómez, N. Fueyo, and A. Tomás, “Detailed modelling of a flue-gas desulfurisation plant,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 31, no. 11, pp. 1419–1431, 2007.
- [36] P. ICF Kaiser Engineers, Pittsburg and G. Tampella Power Corp., Marietta, “LIFAC demonstration at Richmond power and light Whitewater valley unit No. 2 Final report volume 1: Public design,” 1998.
- [37] P. ICF Kaiser Engineers, Pittsburgh and G. Tampella Power Corp., Marietta, “LIFAC demonstration at Richmond power and light Whitewater valley unit No. 2 Final report volume 2: Project performance and economics,” 1998.
- [38] J. Ando and B. A. Laseke, “SO<sub>2</sub> abatement for stationary sources in Japan,” Cincinnati, Ohio, 1997.
- [39] J. Kaminski, “Technologies and costs of SO<sub>2</sub>-emissions reduction for the energy sector,” *Appl. Energy*, vol. 75, no. 3, pp. 165–172, 2003.
- [40] P. Case, M. Heap, J. Lee, C. McKinnon, R. Payne, and D. W. Pershing, “Use of sorbents to reduce SO<sub>2</sub> emissions from pulverized-coal flames under low-NO<sub>x</sub> conditions (Progress report),” Cincinnati, Ohio, 1983.
- [41] G. R. Often, M. W. McElroy, and L. J. Muzio, “Assessment of Dry Sorbenf Emission Control Technologies Part II. Applications,” *JAPCA*, vol. 37, no. 8, pp. 968–980, Aug. 1987.

- [42] W. Zhou, P. Maly, J. Brooks, S. Nareddy, L. Swanson, and D. Moyeda, “Design and Test Furnace Sorbent Injection for SO<sub>2</sub> Removal in a Tangentially Fired Boiler,” *Environ. Eng. Sci.*, vol. 27, no. 4, pp. 337–345, Apr. 2010.
- [43] “LIFAC SORBENT INJECTION DESULFURIZATION DEMONSTRATION PROJECT PROJECT PERFORMANCE SUMMARY CLEAN COAL TECHNOLOGY DEMONSTRATION PROGRAM.” 2004.
- [44] J. Hervol, C. Keating, and J. Viiala, “LIFAC SORBENT INJECTION: AN ALTERNATIVE SO<sub>2</sub> CONTROL STRATEGY.” pp. 386–390.
- [45] L. Shi, G. Liu, B. S. Higgins, and L. Benson, “Computational modeling of furnace sorbent injection for SO<sub>2</sub> removal from coal-fired utility boilers,” *Fuel Process. Technol.*, vol. 92, no. 3, pp. 372–378, 2011.
- [46] L.-S. Fan, A. Ghosh-Dastidar, S. Mahuli, and R. Agnihotri, “High Temperature Desulfurization of Flue Gas Using Calcium-Based Sorbents,” in *Dry Scrubbing Technologies for Flue Gas Desulfurization*, Boston, MA: Springer US, 1998, pp. 421–527.
- [47] R. H. Borgwardt, “Calcination kinetics and surface area of dispersed limestone particles,” *AIChE J.*, vol. 31, no. 1, pp. 103–111, Jan. 1985.
- [48] R. H. Borgwardt, “Kinetics of the reaction of sulfur dioxide with calcined limestone,” *Environ. Sci. Technol.*, vol. 4, no. 1, pp. 59–63, Jan. 1970.
- [49] P. Alvfors and G. Svedberg, “Modelling of the sulphation of calcined limestone and dolomite—a gas-solid reaction with structural changes in the presence of inert solids,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 43, no. 5, pp. 1183–1193, 1988.
- [50] P. Alvfors and G. Svedberg, “Modelling of the simultaneous calcination, sintering and sulphation of limestone and dolomite,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 47, no. 8, pp. 1903–1912, 1992.
- [51] S. Belošević, I. Tomanović, N. Crnomarković, A. Milićević, and D. Tucaković, “Numerical study of pulverized coal-fired utility boiler over a wide range of operating conditions for in-furnace SO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub> reduction,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 94, pp. 657–669, 2016.
- [52] M. R. Stouffer, H. Yoon, and F. P. Burke, “An investigation of the mechanisms of flue gas desulfurization by in-duct dry sorbent injection,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 28, no. 1, pp. 20–27, Jan. 1989.
- [53] F. J. Gutiérrez Ortiz and P. Ollero, “Modeling of the in-duct sorbent injection process for flue gas desulfurization,” *Sep. Purif. Technol.*, vol. 62, no. 3, pp. 571–581, 2008.
- [54] S. V. Makarytchev, K. F. Cen, and Z. Y. Luo, “Staged desulphurization by direct sorbent injection in pulverized-coal boilers,” *Energy*, vol. 19, no. 9, pp. 947–956, 1994.
- [55] B. Lindner and D. Simonsson, “Comparison of structural models for gas-solid



- reactions in porous solids undergoing structural changes,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 36, no. 9, pp. 1519–1527, Jan. 1981.
- [56] R. H. Borgwardt and R. D. Harvey, “Properties of carbonate rocks related to sulfur dioxide reactivity,” *Environ. Sci. Technol.*, vol. 6, no. 4, pp. 350–360, Apr. 1972.
- [57] C. R. Milne, G. D. Silcox, D. W. Pershing, and D. A. Kirchgessner, “High-temperature, short-time sulfation of calcium-based sorbents. 1. Theoretical sulfation model,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 29, no. 11, pp. 2192–2201, Nov. 1990.
- [58] C. R. Milne, G. D. Silcox, D. W. Pershing, and D. A. Kirchgessner, “High-temperature, short-time sulfation of calcium-based sorbents. 2. Experimental data and theoretical model predictions,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 29, no. 11, pp. 2201–2214, Nov. 1990.
- [59] C. R. Milne, G. D. Silcox, D. W. Pershing, and D. A. Kirchgessner, “Calcination and sintering models for application to high-temperature, short-time sulfation of calcium-based sorbents,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 29, no. 2, pp. 139–149, Feb. 1990.
- [60] S. Li, T. Xu, P. Sun, Q. Zhou, H. Tan, and S. Hui, “NO<sub>x</sub> and SO<sub>x</sub> emissions of a high sulfur self-retention coal during air-staged combustion,” *Fuel*, vol. 87, no. 6, pp. 723–731, 2008.
- [61] G. D. Silcox, J. C. Kramlich, and D. W. Pershing, “A mathematical model for the flash calcination of dispersed calcium carbonate and calcium hydroxide particles,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 28, no. 2, pp. 155–160, Feb. 1989.
- [62] A. S. Damle, “Modeling a Furnace Sorbent Slurry Injection Process,” *Air Waste*, vol. 44, no. 1, pp. 21–30, Jan. 1994.
- [63] R. H. Borgwardt, “Calcium Oxide Sintering in Atmospheres Containing Water and Carbon Dioxide,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 28, no. 4, pp. 493–500, Apr. 1989.
- [64] S. K. Mahuli, R. Agnihotr, R. Jadhav, S. Chauk, and L.-S. Fan, “Combined calcination, sintering and sulfation model for CaCO<sub>3</sub>-SO<sub>2</sub> reaction,” *AIChE J.*, vol. 45, no. 2, pp. 367–382, Feb. 1999.
- [65] B. R. Stanmore and P. Gilot, “Review—calcination and carbonation of limestone during thermal cycling for CO<sub>2</sub> sequestration,” *Fuel Process. Technol.*, vol. 86, no. 16, pp. 1707–1743, 2005.
- [66] N. Hu and A. W. Scaroni, “Calcination of pulverized limestone particles under furnace injection conditions,” *Fuel*, vol. 75, no. 2, pp. 177–186, 1996.
- [67] E. H. Baker, “87. The calcium oxide–carbon dioxide system in the pressure range 1–300 atmospheres,” *J. Chem. Soc.*, vol. 0, no. 0, pp. 464–470, 1962.
- [68] J. Khinast, G. F. Krammer, C. Brunner, and G. Staudinger, “Decomposition of

- limestone: The influence of CO<sub>2</sub> and particle size on the reaction rate,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 51, no. 4, pp. 623–634, 1996.
- [69] F. García-Labiano, A. Abad, L. F. de Diego, P. Gayán, and J. Adánez, “Calcination of calcium-based sorbents at pressure in a broad range of CO<sub>2</sub> concentrations,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 57, no. 13, pp. 2381–2393, 2002.
- [70] R. M. GERMAN and Z. A. MUNIR, “Surface Area Reduction During Isothermal Sintering,” *J. Am. Ceram. Soc.*, vol. 59, no. 9–10, pp. 379–383, Sep. 1976.
- [71] R. H. Borgwardt, “Sintering of nascent calcium oxide,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 44, no. 1, pp. 53–60, 1989.
- [72] D. Nicholson, “Variation of surface area during the thermal decomposition of solids,” *Trans. Faraday Soc.*, vol. 61, p. 990, 1965.
- [73] R. H. Borgwardt, N. F. Roache, and K. R. Bruce, “Method for variation of grain size in studies of gas-solid reactions involving calcium oxide,” *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, vol. 25, no. 1, pp. 165–169, Feb. 1986.
- [74] D. Kocaefe, D. Karman, and F. R. Steward, “Interpretation of the sulfation rate of CaO, MgO, and ZnO with SO<sub>2</sub> and SO<sub>3</sub>,” *AIChE J.*, vol. 33, no. 11, pp. 1835–1843, Nov. 1987.
- [75] P. A. Ramachandran and J. M. Smith, “A single-pore model for gas-solid noncatalytic reactions,” *AIChE J.*, vol. 23, no. 3, pp. 353–361, May 1977.
- [76] P. A. Ramachandran and J. M. Smith, “Effect of sintering and porosity changes on rates of gas—solid reactions,” *Chem. Eng. J.*, vol. 14, no. 2, pp. 137–146, 1977.
- [77] P. A. Ramachandran and L. K. Doraiswamy, “Modeling of noncatalytic gas-solid reactions,” *AIChE J.*, vol. 28, no. 6, pp. 881–900, Nov. 1982.
- [78] W. Wang and I. Bjerle, “Modeling of high-temperature desulfurization by Ca-based sorbents,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 53, no. 11, pp. 1973–1989, 1998.
- [79] O. Levenspiel, *Chemical Reaction Engineering*, 3rd ed. New York: Wiley, 1998.
- [80] J. Szekely and J. W. Evans, “A structural model for gas—solid reactions with a moving boundary,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 25, no. 6, pp. 1091–1107, 1970.
- [81] R. L. Pigford and G. Sliger, “Rate of Diffusion-Controlled Reaction Between a Gas and a Porous Solid Sphere - Reaction of SO<sub>2</sub> with CaCO<sub>3</sub>,” *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, vol. 12, no. 1, pp. 85–91, Jan. 1973.
- [82] M. Hartman and R. W. Coughlin, “Reaction of sulfur dioxide with limestone and the grain model,” *AIChE J.*, vol. 22, no. 3, pp. 490–498, May 1976.
- [83] P. G. Christman and T. F. Edgar, “Distributed pore-size model for sulfation of limestone,” *AIChE J.*, vol. 29, no. 3, pp. 388–395, May 1983.
- [84] G. A. Simons and A. R. Garman, “Small pore closure and the deactivation of the

- limestone sulfation reaction,” *AIChE J.*, vol. 32, no. 9, pp. 1491–1499, Sep. 1986.
- [85] G. A. Simons, A. R. Garman, and A. A. Boni, “The kinetic rate of SO<sub>2</sub> sorption by CaO,” *AIChE J.*, vol. 33, no. 2, pp. 211–217, Feb. 1987.
- [86] I. Tomanović, S. Belošević, A. Stojanović, D. Tucaković, and T. Živanović, “Alternative modeling approaches to sulfation reactions of calcium based sorbents injected in the pulverized coal furnace,” in *Proceedings (ISBN 978-86-6055-043-1), 16th Symposium on Thermal Science and Engineering of Serbia, SIMTERM 2013*, 2013, pp. 65–72.
- [87] J. O. Hinze, *Turbulence*. McGraw-Hill, 1975.
- [88] X. Q. Chen and J. C. F. Pereira, “Computational modeling of a dilute turbulent liquid-solid flow using a Eulerian-Lagrangian approach,” *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow*, vol. 10, no. 4, pp. 409–432, Jun. 2000.
- [89] M. Sijercic, G. Zivkovic, and S. Oka, “The comparison of stochastic and diffusion models of dispersed phase in two phase turbulent flow,” *Two-phase flow Model. Exp. 1995*, pp. 375–382, 1995.
- [90] C. T. Crowe, M. P. Sharma, and D. E. Stock, “The Particle-Source-In Cell (PSI-CELL) Model for Gas-Droplet Flows,” *J. Fluids Eng.*, vol. 99, no. 2, p. 325, 1977.
- [91] A. Fick, “Ueber Diffusion,” *Ann. der Phys. und Chemie*, vol. 170, no. 1, pp. 59–86, 1855.
- [92] H. C. Hottel and A. F. Sarofim, *Radiative Transfer (McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering)*, 1st Editio. New York: McGraw-Hill, 1967.
- [93] N. Crnomarković, “Prilog modeliranju prostorne distribucije zračenja u ložištu kotla za sagorevanje ugljenog praha,” University of Belgrade, Faculty of mechanical engineering, 2012.
- [94] C.-M. Chu and S. W. Churchill, “Numerical Solution of Problems in Multiple Scattering of Electromagnetic Radiation,” *J. Phys. Chem.*, vol. 59, no. 9, pp. 855–863, Sep. 1955.
- [95] K. Ražnjević, *Termodinamičke tablice i dijagrami*, 2nd ed. Zagreb: Školska knjiga, 1975.
- [96] M. Bogner, *Termotehničar, Priručnik za termotehniku, termoenergetiku i procesnu tehniku*. Beograd: Naučna knjiga, 1987.
- [97] R. B. (Robert B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport phenomena*. J. Wiley, 2007.
- [98] L. D. Smoot and P. J. Smith, *Coal Combustion and Gasification*. New York: Plenum Press, 1985.
- [99] A. Saljnikov and B. Repić, “Eksperimentalno određivanje karakteristika

- sagorevanja ugljenog praha domaćih lignita - I deo, IBK-ITE-815,” Belgrade, 1990.
- [100] D. L. Smoot, *Fundamentals of coal combustion for clean and efficient use*. Amsterdam: Elsevier, 1993.
- [101] L. Brkić and T. Živanović, *Parni kotlovi*, 3rd editio. Belgrade: Mašinski Fakultet, Univerzitet u Beogradu, 2002.
- [102] S. . Hill and L. Douglas Smoot, “Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems,” *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 26, no. 4–6, pp. 417–458, Aug. 2000.
- [103] V. Beljanski, I. Tomanović, A. Stojanović, B. Stanković, N. Crnomarković, and S. Belošević, “Primarne metode za smanjenje emisije azotnih oksida iz ložišta energetskih kotlova za sagorevanje ugljenog praha,” Belgrade, 2011.
- [104] R. He, T. Suda, M. Takafuji, T. Hirata, and J. Sato, “Analysis of low NO emission in high temperature air combustion for pulverized coal,” *Fuel*, vol. 83, no. 9, pp. 1133–1141, 2004.
- [105] L. Zeng, Z. Li, G. Zhao, S. Shen, and F. Zhang, “Numerical Simulation of Combustion Characteristics and NO<sub>x</sub> Emissions in a 300 MW e Utility Boiler with Different Outer Secondary-Air Vane Angles,” *Energy & Fuels*, vol. 24, no. 10, pp. 5349–5358, Oct. 2010.
- [106] L. M. . Coelho, J. L. . Azevedo, and M. . Carvalho, “Application of a Global NO<sub>x</sub> Formation Model to a Pulverized Coal Fired Boiler with Gas Reburning,” in *Proceedings of the Fourth International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment*, 1997.
- [107] M. Xu, J. L. . Azevedo, and M. . Carvalho, “Modelling of the combustion process and NO<sub>x</sub> emission in a utility boiler,” *Fuel*, vol. 79, no. 13, pp. 1611–1619, 2000.
- [108] L. I. Díez, C. Cortés, and J. Pallarés, “Numerical investigation of NO<sub>x</sub> emissions from a tangentially-fired utility boiler under conventional and overfire air operation,” *Fuel*, vol. 87, no. 7, pp. 1259–1269, 2008.
- [109] N. Hashimoto, R. Kurose, H. Tsuji, and H. Shirai, “A Numerical Analysis of Pulverized Coal Combustion in a Multiburner Furnace,” *Energy & Fuels*, vol. 21, no. 4, pp. 1950–1958, Jul. 2007.
- [110] R. Straka and M. Benes, “Numerical Simulation of NO Production in Air-Staged Pulverized Coal Fired Furnace,” *Open Thermodyn. J.*, vol. 4, no. 1, pp. 27–35, Jan. 2010.
- [111] K. Li, S. Thompson, and J. Peng, “Modelling and prediction of NO<sub>x</sub> emission in a coal-fired power generation plant,” *Control Eng. Pract.*, vol. 12, no. 6, pp. 707–723, 2004.
- [112] G. G. De Soete, “Overall reaction rates of NO and N<sub>2</sub> formation from fuel nitrogen,” *Symp. Combust.*, vol. 15, no. 1, pp. 1093–1102, Jan. 1975.

- [113] G. G. De Soete, "Heterogeneous N<sub>2</sub>O and NO formation from bound nitrogen atoms during coal char combustion," *Symp. Combust.*, vol. 23, no. 1, pp. 1257–1264, Jan. 1991.
- [114] F. C. Lockwood and C. A. Romo-Millares, "Mathematical modelling of fuel-NO emissions from PF burners.," *J. Inst. Energy*, vol. 65, no. 464, pp. 144–152, 1992.
- [115] P. J. Smith, S. C. Hill, and L. Douglas Smoot, "Theory for no formation in turbulent coal flames," *Symp. Combust.*, vol. 19, no. 1, pp. 1263–1270, Jan. 1982.
- [116] P. R. Solomon and M. B. Colket, "Evolution of fuel nitrogen in coal devolatilization," *Fuel*, vol. 57, no. 12, pp. 749–755, Dec. 1978.
- [117] S. V Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. CRC Press, 1980.
- [118] Ž. M. Stevanović, *Numerički aspekti turbulentnog prenošenja impulsa i toplote*. Niš: Grafika Galeb, 2008.
- [119] M. Sijerčić, S. Oka, G. Živković, Ž. M. Stevanović, and S. Nemoda, "Numerička simulacija turbulentnih transportnih procesa - osnovni kurs," Vinča, 2000.
- [120] H. L. Stone, "Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations," *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 5, no. 3, pp. 530–558, Sep. 1968.
- [121] H. G. Weinstein, H. L. Stone, and T. V. Kwan, "Iterative Procedure for Solution of Systems of Parabolic and Elliptic Equations in Three Dimensions," *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, vol. 8, no. 2, pp. 281–287, May 1969.
- [122] G. Hu, K. Dam-Johansen, S. Wedel, and J. Peter Hansen, "Review of the direct sulfation reaction of limestone," *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 32, no. 4, pp. 386–407, 2006.
- [123] T. Shimizu, M. Peglow, K. Yamagiwa, M. Tanaka, S. Sakuno, N. Misawa, N. Suzuki, H. Ueda, H. Sasatsu, and H. Gotou, "A simplified model of SO<sub>2</sub> capture by limestone in 71 MWe pressurized fluidized bed combustor," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 57, no. 19, pp. 4117–4128, 2002.
- [124] A. B. Fuertes, G. Velasco, M. J. Fernandez, and T. Alvarez, "Analysis of the direct sulfation of calcium carbonate," *Thermochim. Acta*, vol. 242, pp. 161–172, 1994.
- [125] Q. Zhong, "Direct sulfation reaction of SO<sub>2</sub> with calcium carbonate," *Thermochim. Acta*, vol. 260, pp. 125–136, 1995.
- [126] W. Zhou, C. S. Zhao, L. B. Duan, X. P. Chen, and C. Liang, "Two-dimensional computational fluid dynamics simulation of nitrogen and sulfur oxides emissions in a circulating fluidized bed combustor," *Chem. Eng. J.*, vol. 173, no. 2, pp. 564–573, 2011.
- [127] D. Beruto and A. W. Searcy, "Use of the Langmuir method for kinetic studies of

- decomposition reactions: calcite ( $\text{CaCO}_3$ ),” *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1 Phys. Chem. Condens. Phases*, vol. 70, no. 0, p. 2145, 1974.
- [128] J. Villadsen and M. L. Michelsen, *Solution of differential equation models by polynomial approximation*, vol. 7. Prentice-Hall Englewood Cliffs, NJ, 1978.
- [129] F. Flament and M. Morgan, “Fundamental and technical aspects of  $\text{SO}_2$  capture by Ca based sorbents in pulverized coal combustion.” Report on the S, 1987.
- [130] K. Dam-Johansen, P. F. B. Hansen, and K. Østergaard, “High-temperature reaction between sulphur dioxide and limestone—III. A grain-micrograin model and its verification,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 46, no. 3, pp. 847–853, 1991.
- [131] J. Adánez, F. García-Labiano, and V. Fierro, “Modelling for the high-temperature sulphation of calcium-based sorbents with cylindrical and plate-like pore geometries,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, no. 18, pp. 3665–3683, 2000.
- [132] I. Tomanović, S. Belošević, A. Milićević, and D. Tucaković, “Modeling of the reactions of calcium-based sorbent with sulfur dioxide,” *J. Serbian Chem. Soc.*, vol. 80, no. 4, pp. 549–562, 2015.
- [133] V. Beljanski, I. Tomanović, S. Belošević, M. Sijerčić, B. Stanković, N. Crnomarković, and A. Stojanović, “Sulfation reaction modeling of Ca-based sorbent,” in *CD-ROM Proceedings (ISBN 978-86-7877-021-0), International Conference Power Plants 2012*, 2012, pp. 1001–1012.
- [134] I. Tomanović, V. Beljanski, S. Belošević, M. Sijerčić, B. Stanković, N. Crnomarković, and A. Stojanović, “Modelling and optimisation of desulphurisation process by direct sorbent injection in furnace of pulverised coal utility boiler,” in *CD-ROM Proceedings (ISBN 978-86-7877-021-0), International Conference Power Plants 2012*, 2012, pp. 1013–1024.
- [135] C. R. Jesshope, “SIPSOL — A suite of subprograms for the solution of the linear equations arising from elliptic partial differential equations,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 17, no. 4, pp. 383–391, 1979.
- [136] L. S. Caretto, A. D. Gosman, S. V. Patankar, and D. B. Spalding, “Two calculation procedures for steady, three-dimensional flows with recirculation,” in *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1973, pp. 60–68.
- [137] S. Belošević, I. Tomanović, V. Beljanski, M. Sijerčić, D. Tucaković, and T. Živanović, “Numerical prediction of processes for clean and efficient combustion of pulverized coal in power plants,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 74, pp. 102–110, Jan. 2015.
- [138] S. Belosevic, I. Tomanovic, N. Crnomarkovic, A. Milicevic, and D. Tucakovic, “Modeling and optimization of processes for clean and efficient pulverized coal combustion in utility boilers,” *Therm. Sci.*, vol. 20, no. suppl. 1, pp. 183–196, 2016.

- [139] D. Tucakovic, T. Zivanovic, V. Stevanovic, S. Belosevic, and R. Galic, "A computer code for the prediction of mill gases and hot air distribution between burners' sections at the utility boiler," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 28, no. 17, pp. 2178–2186, 2008.
- [140] Љ. Бркић, Т. Живановић, and Д. Туцаковић, *Термички прорачун парних котлова*, Треће, Доп. Београд: Машински факултет Универзитета у Београду, 2006.
- [141] G. Stupar, D. Tucaković, T. Živanović, M. Banjac, S. Belošević, V. Beljanski, I. Tomanović, N. Crnomarković, and M. Sijerčić, "The influence of primary measures for reducing NOx emissions on energy steam boiler efficiency," in *CD-ROM Proceedings (ISBN 978-88-6655-322-9), 25th International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems - ECOS 2012*, 2012, pp. 125-1-125–13.
- [142] D. Tucaković, G. Stupar, T. Živanović, M. Banjac, S. Belošević, N. Crnomarković, I. Tomanović, and V. Beljanski, "Impacts of certain parameters on work efficiency of utility boiler in block 2 TPP Kostolac B," in *CD-ROM Proceedings (ISBN 978-86-7877-021-0), International Conference Power Plants 2012*, 2012, pp. 961–971.

## Прилог

---

1. Табела 19. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 6489 добијени претходним прорачуном млинских постројења [139]
2. Табела 20. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 7327 добијени претходним прорачуном млинских постројења
3. Табела 21. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8226 добијени претходним прорачуном млинских постројења
4. Табела 22. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8374 добијени претходним прорачуном млинских постројења
5. Табела 23. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8463 добијени претходним прорачуном млинских постројења
6. Табела 24. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8607 добијени претходним прорачуном млинских постројења
7. Табела 25. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8812 добијени претходним прорачуном млинских постројења
8. Табела 26. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8837 добијени претходним прорачуном млинских постројења
9. Табела 27. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 9483 добијени претходним прорачуном млинских постројења



Табела 19. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 6489 добијени претходним прорачуном млинских постројења [139]

Јединица мере	Горионик 7	Горионик 8	Горионик 1	Горионик 2	Горионик 3	Горионик 4	Горионик 5	Горионик 6
<b>Горионик у раду</b>	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Не
<b>Улазни протоци</b>								
<b>Отпарци</b> [kg/s]	43,726	43,726	43,726	43,726	43,726	43,726	43,726	0,000
<b>Угљени прах</b> [kg/s]	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	0,000
<b>Секундарни в.</b> [kg/s]	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	8,356
<b>Језгрени в.</b> [kg/s]	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	1,439
<b>Састав аеросмеше</b>								
<b>Кисеоник</b> [%]	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	0,000
<b>Азот</b> [%]	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	0,000
<b>Угљен-диоксид</b> [%]	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	0,000
<b>Водена пара</b> [%]	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	0,000
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	8,876
<b>БР-С</b> [%]	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	5,247
<b>БР-Д</b> [%]	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	9,052
<b>ГГ-Г</b> [%]	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	14,201
<b>ГГ-ГД</b> [%]	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	14,348
<b>ГГ-ДГ</b> [%]	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	14,485
<b>ГГ-Д</b> [%]	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	14,642
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,715
<b>БР-Д</b> [%]	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,715
<b>ГГ-Г</b> [%]	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,569
<b>Расподела аеросмеше по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	0,000
<b>БР-Д</b> [%]	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	0,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	0,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	0,000
<b>Расподела угљеног праха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	0,000
<b>БР-Д</b> [%]	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	0,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	0,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	0,000

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.

Табела 20. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 7327 добијени претходним прорачуном млинских постројења

Јединица мере	Горионик 7	Горионик 8	Горионик 1	Горионик 2	Горионик 3	Горионик 4	Горионик 5	Горионик 6
<b>Горионик у раду</b>	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Не
<b>Улазни протоци</b>								
Отпарци [kg/s]	43,726	43,726	43,726	43,726	43,726	43,726	43,726	0,000
Угљени прах [kg/s]	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	0,000
Секундарни в. [kg/s]	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	8,356
Језгрени в. [kg/s]	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	1,439
<b>Састав аеросмеше</b>								
Кисеоник [%]	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	0,000
Азот [%]	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	0,000
Угљен-диоксид [%]	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	0,000
Водена пара [%]	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	0,000
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горионика</b>								
БР-Г [%]	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	8,876
БР-С [%]	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	5,247
БР-Д [%]	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	9,052
ГГ-Г [%]	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	14,201
ГГ-ГД [%]	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	14,348
ГГ-ДГ [%]	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	14,485
ГГ-Д [%]	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	14,642
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горионика</b>								
БР-Г [%]	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,715
БР-Д [%]	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,715
ГГ-Г [%]	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,000
ГГ-Д [%]	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,569
<b>Расподела аеросмеше по етажама горионика</b>								
БР-Г [%]	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	0,000
БР-Д [%]	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	0,000
ГГ-Г [%]	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	0,000
ГГ-Д [%]	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	0,000
<b>Расподела угљеног праха по етажама горионика</b>								
БР-Г [%]	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	0,000
БР-Д [%]	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	0,000
ГГ-Г [%]	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	0,000
ГГ-Д [%]	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	0,000

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.

Табела 21. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8226 добијени претходним прорачуном млинских постројења

Јединица мере	Горњоник 7	Горњоник 8	Горњоник 1	Горњоник 2	Горњоник 3	Горњоник 4	Горњоник 5	Горњоник 6
<b>Горњоник у раду</b>	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Не
<b>Улазни протоци</b>								
<b>Отпарци</b> [kg/s]	43,286	43,286	43,286	43,286	43,286	43,286	43,286	0,000
<b>Угљени прах</b> [kg/s]	9,695	9,695	9,695	9,695	9,695	9,695	9,695	0,000
<b>Секундарни в.</b> [kg/s]	25,923	25,923	25,923	25,923	25,923	25,923	25,923	8,356
<b>Језгрени в.</b> [kg/s]	5,142	5,142	5,142	5,142	5,142	5,142	5,142	1,439
<b>Састав аеросмеше</b>								
<b>Кисеоник</b> [%]	11,353	11,353	11,353	11,353	11,353	11,353	11,353	0,000
<b>Азот</b> [%]	61,625	61,625	61,625	61,625	61,625	61,625	61,625	0,000
<b>Угљен-диоксид</b> [%]	8,542	8,542	8,542	8,542	8,542	8,542	8,542	0,000
<b>Водена пара</b> [%]	18,371	18,371	18,371	18,371	18,371	18,371	18,371	0,000
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горњоника</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	9,989	9,989	9,989	9,989	9,989	9,989	9,989	8,876
<b>БР-С</b> [%]	5,955	5,955	5,955	5,955	5,955	5,955	5,955	5,247
<b>БР-Д</b> [%]	10,367	10,367	10,367	10,367	10,367	10,367	10,367	9,052
<b>ГГ-Г</b> [%]	16,450	16,450	16,450	16,450	16,450	16,450	16,450	14,201
<b>ГГ-ГД</b> [%]	16,702	16,702	16,702	16,702	16,702	16,702	16,702	14,348
<b>ГГ-ДГ</b> [%]	17,012	17,012	17,012	17,012	17,012	17,012	17,012	14,485
<b>ГГ-Д</b> [%]	17,354	17,354	17,354	17,354	17,354	17,354	17,354	14,642
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горњоника</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	24,251	24,251	24,251	24,251	24,251	24,251	24,251	24,715
<b>БР-Д</b> [%]	24,251	24,251	24,251	24,251	24,251	24,251	24,251	24,715
<b>ГГ-Г</b> [%]	25,247	25,247	25,247	25,247	25,247	25,247	25,247	25,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	25,250	25,250	25,250	25,250	25,250	25,250	25,250	25,569
<b>Расподела аеросмеше по етажама горњоника</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	20,720	20,720	20,720	20,720	20,720	20,720	20,720	0,000
<b>БР-Д</b> [%]	19,911	19,911	19,911	19,911	19,911	19,911	19,911	0,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	27,620	27,620	27,620	27,620	27,620	27,620	27,620	0,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	31,749	31,749	31,749	31,749	31,749	31,749	31,749	0,000
<b>Расподела угљеног праха по етажама горњоника</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	14,000	14,000	14,000	14,000	14,000	14,000	14,000	0,000
<b>БР-Д</b> [%]	26,000	26,000	26,000	26,000	26,000	26,000	26,000	0,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	21,000	21,000	21,000	21,000	21,000	21,000	21,000	0,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	39,000	39,000	39,000	39,000	39,000	39,000	39,000	0,000

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.

Табела 22. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8374 добијени претходним прорачуном млинских постројења

Јединица мере	Горионик 7	Горионик 8	Горионик 1	Горионик 2	Горионик 3	Горионик 4	Горионик 5	Горионик 6
<b>Горионик у раду</b>	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Не
<b>Улазни протоци</b>								
<b>Отпарци</b> [kg/s]	40,746	40,746	40,746	40,746	40,746	40,746	40,746	0,000
<b>Угљени прах</b> [kg/s]	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	10,385	0,000
<b>Секундарни в.</b> [kg/s]	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	31,793	8,356
<b>Језгрени в.</b> [kg/s]	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	6,432	1,439
<b>Састав аеросмеше</b>								
<b>Кисеоник</b> [%]	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	9,220	0,000
<b>Азот</b> [%]	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	58,095	0,000
<b>Угљен-диоксид</b> [%]	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	9,772	0,000
<b>Водена пара</b> [%]	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	22,758	0,000
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	10,366	8,876
<b>БР-С</b> [%]	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	6,121	5,247
<b>БР-Д</b> [%]	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	10,648	9,052
<b>ГГ-Г</b> [%]	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	16,642	14,201
<b>ГГ-ГД</b> [%]	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	16,848	14,348
<b>ГГ-ДГ</b> [%]	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	17,048	14,485
<b>ГГ-Д</b> [%]	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	17,294	14,642
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,715
<b>БР-Д</b> [%]	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,570	24,715
<b>ГГ-Г</b> [%]	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,115	25,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,745	25,569
<b>Расподела аеросмеше по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	22,014	0,000
<b>БР-Д</b> [%]	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	20,930	0,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	26,795	0,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	30,261	0,000
<b>Расподела угљеног праха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	10,500	0,000
<b>БР-Д</b> [%]	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	0,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	24,500	0,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	45,500	0,000

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.

Табела 23. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8463 добијени претходним прорачуном млинских постројења

Јединица мере	Горионик 7	Горионик 8	Горионик 1	Горионик 2	Горионик 3	Горионик 4	Горионик 5	Горионик 6
<b>Горионик у раду</b>	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Не
<b>Улазни протоци</b>								
Отпарци [kg/s]	44,038	44,038	44,038	44,038	44,038	44,038	44,038	0,000
Угљени прах [kg/s]	9,146	9,146	9,146	9,146	9,146	9,146	9,146	0,000
Секундарни в. [kg/s]	24,798	24,798	24,798	24,798	24,798	24,798	24,798	8,356
Језгрени в. [kg/s]	4,920	4,920	4,920	4,920	4,920	4,920	4,920	1,439
<b>Састав аеросмеше</b>								
Кисеоник [%]	11,655	11,655	11,655	11,655	11,655	11,655	11,655	0,000
Азот [%]	62,095	62,095	62,095	62,095	62,095	62,095	62,095	0,000
Угљен-диоксид [%]	8,378	8,378	8,378	8,378	8,378	8,378	8,378	0,000
Водена пара [%]	17,768	17,768	17,768	17,768	17,768	17,768	17,768	0,000
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горионика</b>								
БР-Г [%]	9,861	9,861	9,861	9,861	9,861	9,861	9,861	8,876
БР-С [%]	5,869	5,869	5,869	5,869	5,869	5,869	5,869	5,247
БР-Д [%]	10,322	10,322	10,322	10,322	10,322	10,322	10,322	9,052
ГГ-Г [%]	16,361	16,361	16,361	16,361	16,361	16,361	16,361	14,201
ГГ-ГД [%]	16,756	16,756	16,756	16,756	16,756	16,756	16,756	14,348
ГГ-ДГ [%]	17,003	17,003	17,003	17,003	17,003	17,003	17,003	14,485
ГГ-Д [%]	17,376	17,376	17,376	17,376	17,376	17,376	17,376	14,642
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горионика</b>								
БР-Г [%]	24,181	24,181	24,181	24,181	24,181	24,181	24,181	24,715
БР-Д [%]	24,181	24,181	24,181	24,181	24,181	24,181	24,181	24,715
ГГ-Г [%]	25,371	25,371	25,371	25,371	25,371	25,371	25,371	25,000
ГГ-Д [%]	26,267	26,267	26,267	26,267	26,267	26,267	26,267	25,569
<b>Расподела аеросмеше по етажама горионика</b>								
БР-Г [%]	20,867	20,867	20,867	20,867	20,867	20,867	20,867	0,000
БР-Д [%]	20,044	20,044	20,044	20,044	20,044	20,044	20,044	0,000
ГГ-Г [%]	27,373	27,373	27,373	27,373	27,373	27,373	27,373	0,000
ГГ-Д [%]	31,716	31,716	31,716	31,716	31,716	31,716	31,716	0,000
<b>Расподела угљеног праха по етажама горионика</b>								
БР-Г [%]	14,000	14,000	14,000	14,000	14,000	14,000	14,000	0,000
БР-Д [%]	26,000	26,000	26,000	26,000	26,000	26,000	26,000	0,000
ГГ-Г [%]	21,000	21,000	21,000	21,000	21,000	21,000	21,000	0,000
ГГ-Д [%]	39,000	39,000	39,000	39,000	39,000	39,000	39,000	0,000

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.

Табела 24. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8607 добијени претходним прорачуном млинских постројења

Јединица мере	Горионик 7	Горионик 8	Горионик 1	Горионик 2	Горионик 3	Горионик 4	Горионик 5	Горионик 6
<b>Горионик у раду</b>	Не	Да	Да	Да	Не	Да	Да	Да
<b>Улазни протоци</b>								
<b>Отпарци</b> [kg/s]	0,000	50,645	50,645	50,645	0,000	50,645	50,645	50,645
<b>Угљени прах</b> [kg/s]	0,000	10,203	10,203	10,203	0,000	10,203	10,203	10,203
<b>Секундарни в.</b> [kg/s]	8,356	26,788	26,788	26,788	8,356	26,788	26,788	26,788
<b>Језгрени в.</b> [kg/s]	1,439	5,333	5,333	5,333	1,439	5,333	5,333	5,333
<b>Састав аеросмеше</b>								
<b>Кисеоник</b> [%]	0,000	12,534	12,534	12,534	0,000	12,534	12,534	12,534
<b>Азот</b> [%]	0,000	63,533	63,533	63,533	0,000	63,533	63,533	63,533
<b>Угљен-диоксид</b> [%]	0,000	7,829	7,829	7,829	0,000	7,829	7,829	7,829
<b>Водена пара</b> [%]	0,000	16,006	16,006	16,006	0,000	16,006	16,006	16,006
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	8,876	10,060	10,060	10,060	8,876	10,060	10,060	10,060
<b>БР-С</b> [%]	5,247	5,976	5,976	5,976	5,247	5,976	5,976	5,976
<b>БР-Д</b> [%]	9,052	10,426	10,426	10,426	9,052	10,426	10,426	10,426
<b>ГГ-Г</b> [%]	14,201	16,385	16,385	16,385	14,201	16,385	16,385	16,385
<b>ГГ-ГД</b> [%]	14,348	16,751	16,751	16,751	14,348	16,751	16,751	16,751
<b>ГГ-ДГ</b> [%]	14,485	17,105	17,105	17,105	14,485	17,105	17,105	17,105
<b>ГГ-Д</b> [%]	14,642	17,324	17,324	17,324	14,642	17,324	17,324	17,324
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	24,715	24,316	24,316	24,316	24,715	24,316	24,316	24,316
<b>БР-Д</b> [%]	24,715	24,316	24,316	24,316	24,715	24,316	24,316	24,316
<b>ГГ-Г</b> [%]	25,000	25,249	25,249	25,249	25,000	25,249	25,249	25,249
<b>ГГ-Д</b> [%]	25,569	26,118	26,118	26,118	25,569	26,118	26,118	26,118
<b>Расподела аеросмеше по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	0,000	22,139	22,139	22,139	0,000	22,139	22,139	22,139
<b>БР-Д</b> [%]	0,000	20,715	20,715	20,715	0,000	20,715	20,715	20,715
<b>ГГ-Г</b> [%]	0,000	26,906	26,906	26,906	0,000	26,906	26,906	26,906
<b>ГГ-Д</b> [%]	0,000	30,240	30,240	30,240	0,000	30,240	30,240	30,240
<b>Расподела угљеног праха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	0,000	14,000	14,000	14,000	0,000	14,000	14,000	14,000
<b>БР-Д</b> [%]	0,000	26,000	26,000	26,000	0,000	26,000	26,000	26,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	0,000	21,000	21,000	21,000	0,000	21,000	21,000	21,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	0,000	39,000	39,000	39,000	0,000	39,000	39,000	39,000

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.

Табела 25. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8812 добијени претходним прорачуном млинских постројења

Јединица мере	Горионик 7	Горионик 8	Горионик 1	Горионик 2	Горионик 3	Горионик 4	Горионик 5	Горионик 6
<b>Горионик у раду</b>	Не	Да	Да	Да	Не	Да	Да	Да
<b>Улазни протоци</b>								
<b>Отпарци</b> [kg/s]	0,000	52,983	52,983	52,983	0,000	52,983	52,983	52,983
<b>Угљени прах</b> [kg/s]	0,000	9,950	9,950	9,950	0,000	9,950	9,950	9,950
<b>Секундарни в.</b> [kg/s]	8,411	28,126	28,126	28,126	8,411	28,126	28,126	28,126
<b>Језгрени в.</b> [kg/s]	1,379	5,347	5,347	5,347	1,379	5,347	5,347	5,347
<b>Састав аеросмеше</b>								
<b>Кисеоник</b> [%]	0,000	12,701	12,701	12,701	0,000	12,701	12,701	12,701
<b>Азот</b> [%]	0,000	64,202	64,202	64,202	0,000	64,202	64,202	64,202
<b>Угљен-диоксид</b> [%]	0,000	7,941	7,941	7,941	0,000	7,941	7,941	7,941
<b>Водена пара</b> [%]	0,000	15,064	15,064	15,064	0,000	15,064	15,064	15,064
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	7,371	8,383	8,383	8,383	7,371	8,383	8,383	8,383
<b>БР-С</b> [%]	4,358	4,971	4,971	4,971	4,358	4,971	4,971	4,971
<b>БР-Д</b> [%]	7,518	8,650	8,650	8,650	7,518	8,650	8,650	8,650
<b>ГГ-Г</b> [%]	15,199	17,673	17,673	17,673	15,199	17,673	17,673	17,673
<b>ГГ-ГД</b> [%]	15,356	17,985	17,985	17,985	15,356	17,985	17,985	17,985
<b>ГГ-ДГ</b> [%]	15,503	18,160	18,160	18,160	15,503	18,160	18,160	18,160
<b>ГГ-Д</b> [%]	15,671	18,490	18,490	18,490	15,671	18,490	18,490	18,490
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	21,567	21,177	21,177	21,177	21,567	21,177	21,177	21,177
<b>БР-Д</b> [%]	21,567	21,177	21,177	21,177	21,567	21,177	21,177	21,177
<b>ГГ-Г</b> [%]	28,113	28,400	28,400	28,400	28,113	28,400	28,400	28,400
<b>ГГ-Д</b> [%]	28,754	29,245	29,245	29,245	28,754	29,245	29,245	29,245
<b>Расподела аеросмеше по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	0,000	22,844	22,844	22,844	0,000	22,844	22,844	22,844
<b>БР-Д</b> [%]	0,000	21,446	21,446	21,446	0,000	21,446	21,446	21,446
<b>ГГ-Г</b> [%]	0,000	26,253	26,253	26,253	0,000	26,253	26,253	26,253
<b>ГГ-Д</b> [%]	0,000	29,458	29,458	29,458	0,000	29,458	29,458	29,458
<b>Расподела угљеног праха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	0,000	7,000	7,000	7,000	0,000	7,000	7,000	7,000
<b>БР-Д</b> [%]	0,000	13,000	13,000	13,000	0,000	13,000	13,000	13,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	0,000	28,000	28,000	28,000	0,000	28,000	28,000	28,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	0,000	52,000	52,000	52,000	0,000	52,000	52,000	52,000

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.

Табела 26. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 8837 добијени претходним прорачуном млинских постројења

Јединица мере	Горионик 7	Горионик 8	Горионик 1	Горионик 2	Горионик 3	Горионик 4	Горионик 5	Горионик 6
<b>Горионик у раду</b>	Не	Да	Да	Да	Не	Да	Да	Да
<b>Улазни протоци</b>								
<b>Отпарци</b> [kg/s]	0,000	52,178	52,178	52,178	0,000	52,178	52,178	52,178
<b>Угљени прах</b> [kg/s]	0,000	9,971	9,971	9,971	0,000	9,971	9,971	9,971
<b>Секундарни в.</b> [kg/s]	8,356	27,067	27,067	27,067	8,356	27,067	27,067	27,067
<b>Језгрени в.</b> [kg/s]	1,439	5,405	5,405	5,405	1,439	5,405	5,405	5,405
<b>Састав аеросмеше</b>								
<b>Кисеоник</b> [%]	0,000	12,468	12,468	12,468	0,000	12,468	12,468	12,468
<b>Азот</b> [%]	0,000	63,516	63,516	63,516	0,000	63,516	63,516	63,516
<b>Угљен-диоксид</b> [%]	0,000	7,922	7,922	7,922	0,000	7,922	7,922	7,922
<b>Водена пара</b> [%]	0,000	15,997	15,997	15,997	0,000	15,997	15,997	15,997
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	8,876	10,042	10,042	10,042	8,876	10,042	10,042	10,042
<b>БР-С</b> [%]	5,247	5,968	5,968	5,968	5,247	5,968	5,968	5,968
<b>БР-Д</b> [%]	9,052	10,434	10,434	10,434	9,052	10,434	10,434	10,434
<b>ГГ-Г</b> [%]	14,201	16,414	16,414	16,414	14,201	16,414	16,414	16,414
<b>ГГ-ГД</b> [%]	14,348	16,776	16,776	16,776	14,348	16,776	16,776	16,776
<b>ГГ-ДГ</b> [%]	14,485	17,485	17,485	17,485	14,485	17,485	17,485	17,485
<b>ГГ-Д</b> [%]	14,642	17,351	17,351	17,351	14,642	17,351	17,351	17,351
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	24,715	24,324	24,324	24,324	24,715	24,324	24,324	24,324
<b>БР-Д</b> [%]	24,715	24,324	24,324	24,324	24,715	24,324	24,324	24,324
<b>ГГ-Г</b> [%]	25,000	25,270	25,270	25,270	25,000	25,270	25,270	25,270
<b>ГГ-Д</b> [%]	25,569	26,082	26,082	26,082	25,569	26,082	26,082	26,082
<b>Расподела аеросмеше по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	0,000	22,839	22,839	22,839	0,000	22,839	22,839	22,839
<b>БР-Д</b> [%]	0,000	21,559	21,559	21,559	0,000	21,559	21,559	21,559
<b>ГГ-Г</b> [%]	0,000	26,183	26,183	26,183	0,000	26,183	26,183	26,183
<b>ГГ-Д</b> [%]	0,000	29,419	29,419	29,419	0,000	29,419	29,419	29,419
<b>Расподела угљеног праха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	0,000	10,500	10,500	10,500	0,000	10,500	10,500	10,500
<b>БР-Д</b> [%]	0,000	19,500	19,500	19,500	0,000	19,500	19,500	19,500
<b>ГГ-Г</b> [%]	0,000	24,500	24,500	24,500	0,000	24,500	24,500	24,500
<b>ГГ-Д</b> [%]	0,000	45,500	45,500	45,500	0,000	45,500	45,500	45,500

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.



Табела 27. Улазни подаци за радне режиме засноване у којима се употребљава гориво 9483 добијени претходним прорачуном млинских постројења

Јединица мере	Горионик 7	Горионик 8	Горионик 1	Горионик 2	Горионик 3	Горионик 4	Горионик 5	Горионик 6
<b>Горионик у раду</b>	Не	Да	Да	Да	Не	Да	Да	Да
<b>Улазни протоци</b>								
<b>Отпарци</b> [kg/s]	0,000	49,659	49,659	49,659	0,000	49,659	49,659	49,659
<b>Угљени прах</b> [kg/s]	0,000	8,097	8,097	8,097	0,000	8,097	8,097	8,097
<b>Секундарни в.</b> [kg/s]	10,027	28,522	28,522	28,522	10,027	28,522	28,522	28,522
<b>Језгрени в.</b> [kg/s]	1,727	5,616	5,616	5,616	1,727	5,616	5,616	5,616
<b>Састав аеросмеше</b>								
<b>Кисеоник</b> [%]	0,000	13,103	13,103	13,103	0,000	13,103	13,103	13,103
<b>Азот</b> [%]	0,000	65,034	65,034	65,034	0,000	65,034	65,034	65,034
<b>Угљен-диоксид</b> [%]	0,000	7,794	7,794	7,794	0,000	7,794	7,794	7,794
<b>Водена пара</b> [%]	0,000	13,982	13,982	13,982	0,000	13,982	13,982	13,982
<b>Расподела секундарног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	8,876	9,744	9,744	9,744	8,876	9,744	9,744	9,744
<b>БР-С</b> [%]	5,247	5,864	5,864	5,864	5,247	5,864	5,864	5,864
<b>БР-Д</b> [%]	9,052	10,224	10,224	10,224	9,052	10,224	10,224	10,224
<b>ГГ-Г</b> [%]	14,201	16,213	16,213	16,213	14,201	16,213	16,213	16,213
<b>ГГ-ГД</b> [%]	14,348	16,693	16,693	16,693	14,348	16,693	16,693	16,693
<b>ГГ-ДГ</b> [%]	14,485	17,082	17,082	17,082	14,485	17,082	17,082	17,082
<b>ГГ-Д</b> [%]	14,642	17,455	17,455	17,455	14,642	17,455	17,455	17,455
<b>Расподела језгреног ваздуха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	24,715	24,093	24,093	24,093	24,715	24,093	24,093	24,093
<b>БР-Д</b> [%]	24,715	24,093	24,093	24,093	24,715	24,093	24,093	24,093
<b>ГГ-Г</b> [%]	25,000	25,334	25,334	25,334	25,000	25,334	25,334	25,334
<b>ГГ-Д</b> [%]	25,569	26,481	26,481	26,481	25,569	26,481	26,481	26,481
<b>Расподела аеросмеше по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	0,000	21,844	21,844	21,844	0,000	21,844	21,844	21,844
<b>БР-Д</b> [%]	0,000	20,811	20,811	20,811	0,000	20,811	20,811	20,811
<b>ГГ-Г</b> [%]	0,000	26,707	26,707	26,707	0,000	26,707	26,707	26,707
<b>ГГ-Д</b> [%]	0,000	30,638	30,638	30,638	0,000	30,638	30,638	30,638
<b>Расподела угљеног праха по етажама горионика</b>								
<b>БР-Г</b> [%]	0,000	14,000	14,000	14,000	0,000	14,000	14,000	14,000
<b>БР-Д</b> [%]	0,000	26,000	26,000	26,000	0,000	26,000	26,000	26,000
<b>ГГ-Г</b> [%]	0,000	21,000	21,000	21,000	0,000	21,000	21,000	21,000
<b>ГГ-Д</b> [%]	0,000	39,000	39,000	39,000	0,000	39,000	39,000	39,000

Опис и значење скраћеница које се употребљавају у табели дат је на страници 111, у зависности од тога да ли се односе на отворе за аеросмешу или секундарни ваздух.

## Биографија

---

Иван Д. Томановић, дипл. инж. маш., рођен је 16. марта 1986. године у Београду, Република Србија. Основну школу похађао је у Земуну. Матурирао је на природно-математичком смеру Земунске Гимназије. Практични део матурског рада је урадио на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду. Машински факултет Универзитета у Београду уписао је школске 2005/2006. године. Основне академске студије (ОАС) је завршио школске 2007/2008. Године. Мастер академске студије (МАС) на истом факултету је завршио 2009/2010. године одбраном дипломског рада из уже области термотехника. Докторске студије (ДС) на Машинском факултету Универзитета у Београду је уписао школске 2010/2011. године.

Од 01.10.2010. године је запослен у Лабораторији за термотехнику и енергетику (ЛТЕ140) Института за нуклеарне науке „Винча“ Универзитета у Београду, на пројекту ТР-33018 „Повећање енергетске и еколошке ефикасности процеса у ложишту за угљени прах и оптимизација излазне грејне површине енергетског парног котла применом сопствених софтверских алата“ реализованог у оквиру Института за нуклеарне науке „Винча“, под покровитељством Министарства просвете, науке и технолошког развоја.

Течно говори енглески и служи се немачким језиком на основном нивоу. У свакодневном раду користи програмски језик FORTRAN и Lazarus FreePascal IDE, а употребљава и програмске пакете за обраду текста (MS Office, LibreOffice), графике (AutoCAD, Gimp, InkScape), поред тога, познаје основе програмских и скриптинг језика C, Pascal, Java и Google Script, као и основе web орјентисаних језика (html5, css3, javascript, php) и база података (MySQL).

Прилог 1.

## Изјава о ауторству

Потписани-а Иван Д. Томановић

број индекса Д 12/10

### Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

МОДЕЛИРАЊЕ ПРОЦЕСА ОДСУМПОВАЊА ГАСОВА УНОШЕЊЕМ СПРАШЕНОГ

СОРБЕНТА У ЛОЖИШТЕ ЕНЕРГЕТСКОГ КОТЛА НА УГЉЕНИ ПРАХ

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

**Потпис докторанда**

У Београду, \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Прилог 2.

## Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Иван Д. Томановић

Број индекса Д 12/10

Студијски програм Докторске студије

Наслов рада МОДЕЛИРАЊЕ ПРОЦЕСА ОДСУМПОВАЊА ГАСОВА  
УНОШЕЊЕМ СПРАШЕНОГ СОРБЕНТА У ЛОЖИШТЕ ЕНЕРГЕТСКОГ КОТЛА НА  
УГЉЕНИ ПРАХ

Ментор проф. др Драган Туцаковић, редовни професор, Машински факултет,  
Универзитет у Београду

Потписани/а Иван Д. Томановић

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу **Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

**Потпис докторанда**

У Београду, \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

### Прилог 3.

## Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

МОДЕЛИРАЊЕ ПРОЦЕСА ОДСУМПОВАЊА ГАСОВА УНОШЕЊЕМ СПРАШЕНОГ  
СОРБЕНТА У ЛОЖИШТЕ ЕНЕРГЕТСКОГ КОТЛА НА УГЉЕНИ ПРАХ

---

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство
2. Ауторство - некомерцијално
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима
5. Ауторство – без прераде
6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

**Потпис докторанда**

У Београду, \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

1. Ауторство - Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
3. Ауторство - некомерцијално – без прераде. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. Ауторство - некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. Ауторство – без прераде. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.