

Numerička simulacija sustava za selektivnu katalitičku redukciju

Martinjak, Matija

Master's thesis / Diplomski rad

2016

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:235:450885>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2025-02-01**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Matija Martinjak

Zagreb, 2016.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Mentor:
Doc. dr. sc. Milan Vujanović, dipl. ing.

Student:
Matija Martinjak

Zagreb, 2016.

Izjavljujem da sam ovaj rad izradio samostalno koristeći stečena znanja tijekom studija i navedenu literaturu.

Zahvaljujem mentoru doc. dr. sc. Milanu Vujanoviću na smjernicama i sugestijama koje su pridonijele izradi ovog završnog rada.

Posebna zahvala ide Jakovu Baleti, mag. ing. mech. na strpljenju, smirenosti i znanju koje mi je prenio, te na velikoj susretljivosti koju je nesebično iskazao tijekom izrade rada.

Također se zahvaljujem svojoj obitelji i djevojci na neizmjerne podršci i razumijevanju te kolegama iz Powerlaba na korisnim informacijama i tehničkoj podršci.

Matija Martinjak



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE



Središnje povjerenstvo za završne i diplomske ispite
Povjerenstvo za diplomske ispite studija strojarstva za smjerove:
procesno-energetski, konstrukcijski, brodstrojarski i inženjersko modeliranje i računalne simulacije

Sveučilište u Zagrebu Fakultet strojarstva i brodogradnje	
Datum	Prilog
Klasa:	
Ur.broj:	

DIPLOMSKI ZADATAK

Student: **Matija Martinjak**

Mat. br.: 0035171997

Naslov rada na
hrvatskom jeziku:

Numerička simulacija sustava za selektivnu katalitičku redukciju

Naslov rada na
engleskom jeziku:

Numerical simulation of Selective Catalytic Reduction (SCR) system

Opis zadatka:

Selektivna katalitička redukcija bazirana na vodenoj otopini uree predstavlja perspektivnu metodu za ispunjavanje strogih zahtjeva trenutne Euro 6 norme na NO_x emisije iz dizel motora cestovnih vozila. Nakon što se vodena otopina uree u obliku spreja ubrizga u struju vrućih dimnih plinova prije katalizatora, dolazi do isparavanja vode iz otopine i stvaranja amonijaka termalnom dekompozicijom uree i hidrolizom izocijanske kiseline. Nastali amonijak sudjeluje u različitim deNO_x reakcijama kao reducirajuće sredstvo prolaskom kroz katalizator, pri čemu materijal katalizatora snižava aktivacijsku energiju deNO_x reakcija. U svrhu ispunjavanja sve strožih okolišnih normi proizvođači opreme u području sustava izgaranja moraju razvijati energetske efikasne proizvode koji su u isto vrijeme benigni prema okolišu. Ovaj proces razvoja postaje sve kompliciraniji i skuplji, a jedan od načina za smanjivanje troškova proizvodnje zajedno uz održavanje jednakog nivoa kompetitivnosti, predstavlja korištenje računalne dinamike fluida (RDF). Uzevši sve navedeno u obzir, zadatak ovog diplomskog rada je simulacija realne geometrije industrijskog katalizatora pri različitim radnim uvjetima.

U okviru diplomskog zadatka potrebno je:

1. Upoznati se s programskim paketom „Fire Workflow Manager“ i Lagrangeovom višefaznom metodom, Eulerovim modelom filma kapljevine na stjenci te 1 D modelima kemijskih reakcija na površini katalizatora.
2. Izvršiti preliminarne simulacije ubrizgavanja vodene otopine uree na jednostavnoj geometriji cijevi u svrhu validacije najvažnijih matematičkih modela u području selektivne katalitičke redukcije uz pomoć dostupnih eksperimentalnih podataka.
3. Korištenjem komercijalnog programskog paketa „Fire Workflow Manager“ napraviti detaljnu 3D numeričku simulaciju na domeni realnog sustava za katalitičku redukciju.
4. Provesti analizu rezultata.

U diplomskom radu potrebno je navesti svu korištenu literaturu i eventualnu pomoć pri izradi rada.

Zadatak zadan:

5. svibnja 2016.

Rok predaje rada:

7. srpnja 2016.

Predviđeni datumi obrane:

13., 14. i 15. srpnja 2016.

Zadatak zadao:


Doc. dr. sc. Milan Vujanović

Predsjednica Povjerenstva:


Prof. dr. sc. Tanja Jurčević Lulić

SADRŽAJ

SADRŽAJ	I
POPIS SLIKA	III
POPIS TABLICA.....	V
POPIS OZNAKA	VI
SAŽETAK.....	XI
SUMMARY	XII
1. UVOD.....	1
1.1. Utjecaj NO _x -a na okoliš.....	3
2. MATEMATIČKI MODELI	8
2.1. Zakon očuvanja mase.....	8
2.2. Zakon očuvanja količine gibanja	8
2.3. Zakon očuvanja energije	9
2.4. Zakon očuvanja kemijske vrste.....	9
2.5. Standardna transportna jednadžba	10
2.6. Metoda kontrolnih volumena	10
2.6.1. Diskretizacija standardne transportne jednadžbe.....	10
2.6.1.1. Vremenska diskretizacija	11
2.6.1.2. Eulerova eksplicitna shema.....	11
2.6.1.3. Eulerova implicitna shema.....	12
2.6.2. Sheme diferencije.....	12
2.6.2.1. Shema centralnih razlika (Central Differencing Sheme- CDS).....	13
2.6.2.2. Uzvodna shema (Upwind Differencing Sheme- UDS).....	14
2.6.2.3. Kombinirana shema (Blending scheme).....	15
2.7. Turbulencija	15
2.7.1. Statističko opisivanje turbulencije	16
2.7.2. Modeli turbulencije	18
2.7.2.1. k-ε model turbulencije	18
2.7.2.2. k- ζ- f model turbulencije.....	19
2.7.2.3. Zidne funkcije	20
2.8. Matematički model spreja.....	22
2.8.1. Jednadžba količine gibanja	23
2.8.2. Isparavanje kapljica.....	24
2.8.3. Podmodeli za stvaranje novih kapljica.....	25
2.8.3.1. Standardni Wave model razdvajanja kapljica.....	26
2.8.3.2. TAB model razdvajanja kapljica	27
2.9. Flm kapljevine na stjenci	27
2.9.1. Matematički model	28
2.9.2. Model interakcije spreja i stjenke	30
2.10. Selektivna katalitička redukcija	31
3. NUMERIČKA SIMULACIJA PROCESA UBRIZGAVANJA UREE	34
3.1. Eksperimentalne postavke.....	34
3.2. Postavke numeričke simulacije.....	36
3.3. Generiranje mreže kontrolnih volumena.....	38
3.4. Dekompozicija uree u cijevi	42

4. NUMERIČKA SIMULACIJA REALNOG SUSTAVA ZA KATALITIČKU REDUKCIJU	53
4.1. Utjecaj veličine kapljica na stvaranje reducensa.....	55
4.2. Utjecaj smjera ubrizgavanja na stvaranje reducensa.....	63
4.3. Prikaz rezultata po poprečnom presjeku	65
4.4. 2d rezultati.....	69
5. ZAKLJUČAK.....	73
LITERATURA.....	74

POPIS SLIKA

Slika 1.	Udjeli svjetske potrošnje goriva za 2013. godinu [1].....	1
Slika 2.	Procjena svjetske potrošnje energije po sektorima prema “New Politics Scenario“ za 2040. godinu [1].....	2
Slika 3.	Prikaz udjela NO _x -a po sektorima [3].....	4
Slika 4.	Prikaz dopuštenih emisija prema EURO normama [4].....	5
Slika 5.	Prikaz SCR sustava [6].....	6
Slika 6.	Grafički prikaz proračunskog čvora [10].....	13
Slika 7.	Prijelaz iz laminarnog u turbulentno strujanje pri opstrujavanju ravne ploče [11].....	15
Slika 8.	Grafički prikaz definiranja usrednjenih vrijednosti [12].....	17
Slika 9.	Režimi interakcije sprej-stjenka [15].....	31
Slika 10.	Reakcijska shema uree [16].....	33
Slika 11.	Prikaz postavki eksperimentalnog mjerenja.....	34
Slika 12.	Prikaz mreže sa rubnim uvjetima.....	36
Slika 13.	Prikaz položaja sapnice unutar mreže.....	38
Slika 14.	Raspored ćelija na prednjoj (zadnjoj) strani cilindra.....	39
Slika 15.	Raspored ćelija uzduž cilindra.....	39
Slika 16.	Polje disipacije kinetičke energije.....	40
Slika 17.	Turbulentna kinetička energija.....	41
Slika 18.	Turbulentna brzina.....	41
Slika 19.	Srednja brzina.....	42
Slika 20.	Maseni udio NH ₃	43
Slika 21.	Maseni udio HNCO.....	43
Slika 22.	Maseni udio H ₂ O.....	44
Slika 23.	Maseni udio vode u spreju.....	44
Slika 24.	Temperatura uzduž cijevi.....	45
Slika 25.	Maseni udio NH ₃	45
Slika 26.	Maseni udio HNCO.....	46
Slika 27.	Maseni udio H ₂ O.....	46
Slika 28.	Maseni udio vode u spreju.....	47
Slika 29.	Temperatura uzduž cijevi.....	47
Slika 30.	Prikaz pojedinih masenih udjela plinova pri T=350°C; v=9.08m/s.....	48
Slika 31.	Maseni udio HNCO.....	49
Slika 32.	Maseni udio NH ₃	49
Slika 33.	Usporedba rezultata simulacije i rezultata dobivenih eksperimentalnim mjerenjem pri temperaturi ispušnih plinova od 300 °C.....	50
Slika 34.	Usporedba rezultata simulacije i rezultata dobivenih eksperimentalnim mjerenjem pri temperaturi ispušnih plinova od 350 °C.....	51
Slika 35.	Usporedba rezultata simulacije i rezultata dobivenih eksperimentalnim mjerenjem pri temperaturi ispušnih plinova od 400 °C.....	51
Slika 36.	Geometrija katalizatora.....	53
Slika 37.	Maseni udio NH ₃ pri 0.15 sekundi.....	56
Slika 38.	Maseni udio NH ₃ pri 0.4 sekundi.....	56
Slika 39.	Maseni udio HNCO pri 0.15 sekundi.....	57
Slika 40.	Maseni udio HNCO pri 0.4 sekundi.....	57
Slika 41.	Maseni udio NO pri 0.15 sekundi.....	58
Slika 42.	Maseni udio NO pri 0.4 sekundi.....	58
Slika 43.	Maseni udio NO ₂ pri 0.15 sekundi.....	59
Slika 44.	Maseni udio NO ₂ pri 0.4 sekundi.....	59

Slika 45.	Maseni udio H ₂ O pri 0.15sekundi	60
Slika 46.	Maseni udio H ₂ O pri 0.4 sekundi	60
Slika 47.	Maseni udio vode u spreju pri 0.15 sekundi	61
Slika 48.	Maseni udio vode u spreju pri 0.4 sekundi	61
Slika 49.	Temperatura pri 0.4 sekundi.....	62
Slika 50.	Brzina pri 0.4 sekundi.....	62
Slika 51.	Maseni udio vode u spreju pri 0.11 sekundi	63
Slika 52.	Maseni udio vode u spreju pri 0.15 sekundi	64
Slika 53.	Maseni udio vode u spreju pri 0.4sekundi	64
Slika 54.	Prikaz masenog udjela NH ₃ i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_1 pri 0.4 sekundi.....	65
Slika 55.	Prikaz masenog udjela NH ₃ i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_2 pri 0.4 sekundi.....	66
Slika 56.	Prikaz masenog udjela NH ₃ i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_3 pri 0.4 sekundi.....	67
Slika 57.	Prikaz masenog udjela NH ₃ i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_4 pri 0.4 sekundi.....	67
Slika 58.	Prikaz masenog udjela NH ₃ i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_5 pri 0.4 sekundi.....	68
Slika 59.	Prikaz masenog udjela NH ₃ i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_6 pri 0.4 sekundi.....	68
Slika 60.	Koncentracija NH ₃ uzduž katalizatora pri 0.11 sekundi	69
Slika 61.	Koncentracija NH ₃ uzduž katalizatora pri 0.15 sekundi	70
Slika 62.	Koncentracija NH ₃ uzduž katalizatora pri 0.4 sekundi	71
Slika 63.	Koncentracija HNCO uzduž katalizatora pri 0.4 sekundi	72
Slika 64.	Ammonia slip (pobjeg NH ₃).....	72

POPIS TABLICA

Tablica 1. Koeficijenti k- ξ -f modela turbulencije	20
Tablica 2. Parametri izgaranja plinova iz LNG ložišta	35
Tablica 3. Sastav dimnih plinova na ulazu u cijev	35
Tablica 4. Eksperimentalni podaci ubrizgavanja otopine uree.....	36
Tablica 5. Prikaz Cilinder Hexahedron mreža koje se razmatraju	38
Tablica 6. Postavke simulacije-vremenski korak	53
Tablica 7. Postavke simulacije-maseni udio kemijskih vrsta.....	54
Tablica 8. Postavke simulacije-smjer ubrizgavanja i veličina kapljica	54
Tablica 9. Prikaz simulacija po grupama	55

POPIS OZNAKA

Latinska slova

Oznaka	Jedinica	Opis
v_λ	m/s	Brzina pulzacija
Re_λ	-	Reynoldsov broj turbulentnih pulzacija
u_τ	m/s	Brzina trenja
T^*	-	Bezdimenzijska temperatura
$u_{d,\perp}$	m/s	Normalna komponenta brzine kapljice
k_{fn}, k_{fp}	-	Konstante normalne i povratne reakcije
A_d	m ²	Površina presjeka
A_f	s ⁻¹	Koeficijent brzine reakcije
B	-	Spaldingov broj
B_T	-	Bezdimenzijska značajka prijenosa topline
B_y	-	Bezdimenzijska značajka prijenosa mase
C_D	-	Koeficijent otpora
c_{pF}	J/(kg K)	Specifični toplinski kapacitet smjese
$C_\mu, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, C_1, C_2', C_L, C_\eta, C_\tau$	-	Konstante k - ζ - f modela turbulencije
C_μ, C_1, C_2	-	Konstante k - ε modela turbulencije
d	m	Udaljenost dvaju kontrolnih volumena
D_d	m	Promjer kapljice
E	-	Integracijska konstanta
E_{af}	kJ/mol	Energija aktivacije
f	kg/(m ³ s)	Eliptična funkcija
F	kg/s	Maseni protok
f_i	m/s ²	Komponente vektora specifične masene sile
F_{ib}	N	Suma svih vanjskih sila
F_{idr}	N	Sila otpora
F_{ig}	N	Sila koja uključuje efekte gravitacije i uzgona
F_{ip}	N	Sila tlaka
F_M, F_T	-	Korekcijski faktori za debljinu filma
G	kg/(m s ³)	Generiranje turbulentne kinetičke energije
J_i	-	Difuzijski tok kemijske vrste
k	m ² /s ²	Turbulentna kinetička energija
K	-	Bezdimenzijski parametar
k_g	W/(m K)	Toplinska vodljivost plina

L	m	Turbulentna dužina
Le	-	Lewisov broj
m	kg	Masa
Nu	-	Nusseltov broj
p	Pa	Termodinamički tlak
P	-	Pecletov broj
P_K	kg/(m ³ s ³)	Generacija turbulentne kinetičke energije
Pr	-	Prandtlov broj
Q	W	Toplinski tok
q_f	kg/(m ³ s)	Progresivna varijabla pojedine reakcije
q_i	W/m ²	Komponente vektora površinske gustoće toplinskog toka
r_d	m	Radius kapljice
Re	-	Reynoldsov broj
Re_d	-	Reynolds-ov broj kapljice
R_i	kg/(m ³ s)	Neto produkcija kemijske vrste
S	m ²	Površina
s	m ²	Površina kontrolnih volumena
Sh	-	Sherwoodov broj
S_{mD}	kg/s	Izvorski član filma
S_{mV}	kg/s	Ponorski član filma
S_ϕ	W/m ³	Izvorski član
t	s	Vrijeme
T	s	Turbulentno vrijeme
T_S	K	Temperatura zasićenja kapljice
T_w	K	Temperatura stjenke
u^+	-	Bezdimenzijska brzina
u_1, u_2	m/s	Komponente brzine filma
V	m ³	Volumen
v_f	m/s	Brzina strujanja
v_i, v_j	m/s	Komponente vektora brzine
X_i	-	Molni udio pojedinog sastojka
x_i, x_j	m	Kartezijeve koordinate
y	-	Bezdimenzijsko pomicanje ekvatora kapljice od njezinog ravnotežnog položaja
y	m	Udaljenost od stjenke
y^+	-	Bezdimenzijska udaljenost od stjenke

Y_i - Maseni udio pojedine kemijske vrste

Grčka slova

Oznaka	Jedinica	Opis
λ	m	Valna duljina
σ^ζ	-	Konstanta k - ζ - f modela turbulencije
L	m	Turbulentna duljina
α	W/(m ² K)	Koeficijent konvektivnog prijelaza topline
$\bar{\beta}_g$	m ² /s	Koeficijent binarne difuzije
Γ	m ² /s	Koeficijent difuzije
γ	-	Faktor miješanja
δ	m	Debljina filma
δ_{ij}	-	Kroneckerov delta
δ_m	m	Debljina zamišljenog filma
δ_T	m	Debljina zamišljenog filma
ε	m ² /s ³	Disipacija turbulentne kinetičke energije
ζ	-	Normirana karakteristična brzina
κ	-	Von Karmanova konstanta
ρ	kg/m ³	Gustoća fluida
σ_{ji}	N/m ²	Komponente simetričnog tenzora naprezanja
σ^k	-	Konstanta k - ζ - f i k - ε modela turbulencije
σ^ε	-	Konstanta k - ζ - f i k - ε modela turbulencije
ν	m ² /s	Kinematička viskoznost
ν_t	Pa s	Turbulentna viskoznost
Φ	kg ⁻¹	Masena gustoća promatranog fizikalnog svojstva
φ	-	Generalna varijabla
ϕ	m ⁻³	Volumenska gustoća fizikalne veličine
μ	Pa s	Dinamička viskoznost
τ_w	N/m ²	Smično naprezanje

Indeksi

Oznaka	Jedinica	Opis
d	-	Kapljica
g	-	Plin
P	-	Proračunski čvor

s	-	Para
W, E	-	Susjedni čvorovi
Φ	-	Generalna varijabla

EkspONENTI

Oznaka	Jedinica	Opis
n	-	Vrijednosti u novom vremenskom trenutku
o	-	Vrijednosti u starom vremenskom trenutku

Popis skraćenica

Oznaka	Opis
AUS32	Aqueous urea solution 32.5%
CDS	Central differencing scheme
CPU	Central processing unit
DDM	Discrete Droplet Method
EEA	European environment agency
ENO	Essentially non-oscillatory
ES	Exponential scheme
EU	Europska unija
FTIR	Fourier transform infrared spectroscopy
LNG	Liquefied natural gas
LUDS	Linear Upwind Scheme
QUICK	Quadratic upwind
RDF	Računalna dinamika fluida
SCR	Selective catalytic reduction
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
UDS	Upwind differencing scheme
UWS	Urea-water solution
VDA	Njemačka udruga automobilske industrije
WENO	Weighted essentially non-oscillatory

Kemijske vrste**Oznaka**

(NH₂)₂CO
(NH₂)₂CONHCO
CO
CO₂
H₂O
H₂SO₄
HNCO
N₂
N₂O
NH₃
NO
NO_x
O₂
SO₃
NO₂
(NH₄)₂SO₄
NH₄HSO₄

Opis

Urea
Biuret
Ugljični monoksid
Ugljični dioksid
Voda
Sumporna kiselina
Izocijanska kiselina
Dušik
Dušikov (I) oksid
Amonijak
Dušikov (II) oksid
Dušikovi oksidi
Dvoatomna molekula kisika
Sumpor trioksid
Dušikov (IV) oksid
Amonijev sulfat
Amonijev bisulfat

SAŽETAK

Zbog sve strože ekološke legislative, primarne mjere kontrole ispušnih plinova, poglavito NO_x-a, u velikom broju slučajeva više nisu dovoljne. Rješenje za daljnje smanjenje koncentracija NO_x-a je u naknadnoj obradi ispušnih plinova. Najperspektivnija tehnologija u tom području je selektivna katalitička redukcija. Kod selektivne katalitičke redukcije (eng. *Selective Catalytic Reduction*) vodena otopina uree u obliku spreja ubrizga se u struju vrućih dimnih plinova prije katalizatora, pri čemu dolazi do isparavanja vode iz otopine i stvaranja amonijaka termalnom dekompozicijom uree i hidrolizom izocijanske kiseline. Pri tome rezultirajuća prostorna raspodjela amonijaka prije katalizatora predstavlja ključan faktor učinkovite konverzije NO_x-a. Zbog kompleksnosti reakcija i prostorne raspodjele plinova unutar katalizatora, veliki resursi ulažu se u razvoj matematičkih modela pomoću kojih bi se dovoljno dobro opisao proces selektivne katalitičke redukcije.

U ovome radu izvršena je validacija najvažnijih matematičkih modela za opis SCR procesa integriranih u komercijalni kod za računalnu dinamiku fluida FIRE na bazi rezultata dobivenih simulacijama s postojećim eksperimentalnim podacima, preuzetim iz akademskog članka. Validacijom je dokazano relativno dobro slaganje eksperimentalnih rezultata i rezultata dobivenih simulacijom po kriteriju efikasnosti pretvorbe NH₃. Također je dokazano da simulacije prate trend eksperimentalnih rezultata, te da odstupanja koja su prisutna nisu značajna. Nadalje, izvršena je simulacija realne geometrije industrijskog katalizatora pri različitim radnim uvjetima. Razmatrani su radni uvjeti pri čemu se varirala veličina kapljica ubrizganog spreja, kao i smjer ubrizgavanja spreja. Pokazano je da smjer ubrizgavanja spreja vodene otopine uree u odnosu na strujanje ispušnih plinova (istosmjerno/protusmjerno) nije pokazao neki učinak na konverziju NH₃, dok je kod bočnog ubrizgavanja konverzija uvjerljivo najlošija. Na kraju je dokazano da je pobjeg amonijaka kod protusmjernog ubrizgavanja znatno manji nego kod istosmjernog, pri čemu ova vrsta ubrizgavanja postaje zanimljiva za daljnja istraživanja.

Ključne riječi: obrada dimnih plinova, selektivna katalitička redukcija, vodena otopina uree, redukcija dušikovih oksida, računalna dinamika fluida

SUMMARY

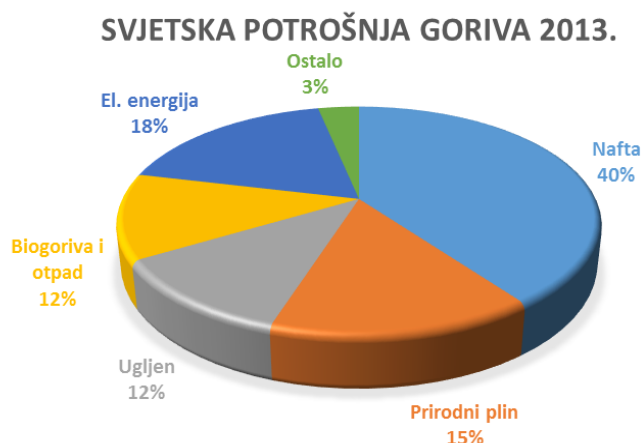
Due to ever stringent ecological legislation, primary measures for exhaust gases control, especially NO_x, in large number of cases are not sufficient any more. The solution for further NO_x concentration decrease lays in exhaust gas aftertreatment. Selective Catalytic Reduction (SCR) represents the most promising technology in that area. In the SCR Urea Water Solution (UWS) spray is injected into the hot exhaust gas stream before SCR catalyst, with simultaneous water evaporation taking place. Afterwards, ammonia is generated through thermal decomposition of urea and hydrolysis of isocyanic acid. The resulting spatial distribution of the ammonia before the catalyst is a crucial factor for the efficient conversion of NO_x. Due to the complexity of the reactions and the spatial distribution of gases within the catalyst, great amount of resources is invested in the development of mathematical models which will prove sufficiently accurate to describe the process of selective catalytic reduction.

In this work validation of the most important mathematical models for SCR process description integrated in the commercial Computational Fluid Dynamics (CFD) code FIRE has been conducted on the basis of existing experimental results taken from the academic paper. Validation proved relatively good agreement of simulation results with experimental data in terms of NH₃ conversion efficiency. Also, it was proved that simulation results follow experimental trend without significant discrepancies. Furthermore, the simulation of real industrial catalyst geometry was conducted for different working conditions, where spray droplet size was varied together with the injection direction. It was shown that UWS spray direction relative to the exhaust gases flow (in the direction of flow and against it) doesn't have significant impact on the NH₃ conversion, whilst during the perpendicular injection, NH₃ conversion is by far the worse. Finally, ammonia slip was significantly lower during counterflow injection direction, making this kind of injection interesting for future investigations.

Key words: flue gas aftertreatment, selective catalytic reduction, urea water solution, nitrogen oxides reduction, computational fluid dynamics

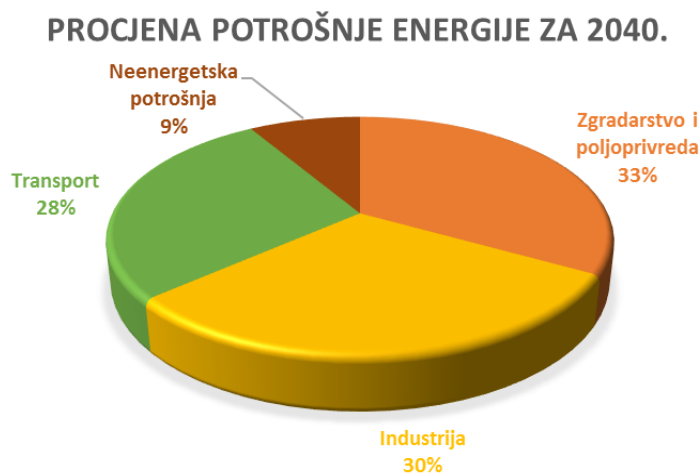
1. UVOD

Zahtjevi za energijom svakim danom značajno rastu, a postoje naznake da će se taj trend nastaviti i u budućnosti. Rastuća svjetska populacija sa sve višim životnim standardima upravo govori u prilog porasta potrošnje energije. Usprkos sve većem korištenju energije iz obnovljivih izvora, najveći dio korištene energije upravo je iz fosilnih goriva. Predikcije za budućnost prema „New politics“ scenariju za 2040. godinu [1] su porast korištenja energije iz obnovljivih izvora, pri čemu bi se smanjio utjecaj korištenja fosilnih goriva. Čak i kod takvog scenarija udio fosilnih goriva bi i dalje prevladavao, ukoliko bi gledali korištenje energije na svjetskoj razini. Uzrok tome je što najveći svjetski potrošači poput Kine, SAD-a, Rusije, i potencijalnih velikih potrošača poput Indije, i dalje svoju energetske politiku temelje i temeljit će isključivo na fosilnim gorivima. Obzirom da fosilna goriva nisu obnovljivi energetske izvor, nužna je njihova racionalna upotreba.



Slika 1. Udjeli svjetske potrošnje goriva za 2013. godinu [1]

Prilikom izgaranja fosilnih goriva nužno dolazi do stvaranja dimnih plinova koji imaju štetan utjecaj na okoliš. Neki od značajnijih produkata izgaranja su: CO_2 , CO , NO_x , i SO_x . Štetan utjecaj CO_2 očituje se u stvaranju efekta staklenika u Zemljinoj atmosferi, utjecaj SO_2 očituje se u stvaranju kiselih kiša, a utjecaj NO_x očituje se u stvaranju fotokemijskog smoga, razaranju stratosferskog ozona i globalnom zagrijavanju. Generalno se može zaključiti da štetni utjecaji emisija izgaranja štetno djeluju kako na zdravlje ljudi, tako i na očuvanje prirode i životinja. Emisije zagađenja u razvijenim zemljama regulirane su zakonom, a ta praksa traje i preko 30 godina. U bliskoj budućnosti očekuju se stroža pravila vezana uz emisije onečišćujućih tvari.



Slika 2. Procjena svjetske potrošnje energije po sektorima prema “New Politics Scenario“ za 2040. godinu [1]

Transport je, uz industriju i zgradarstvo, važan sektor proizvodnje štetnih emisija. Obzirom na količinu proizvedenih štetnih emisija, transportu se daje velika važnost pri sprječavanju stvaranja tih emisija. Stroge zakonske norme vezane za štetne emisije zahtijevaju razvoj tehnologija koja se koristi za njihovo sprečavanje.

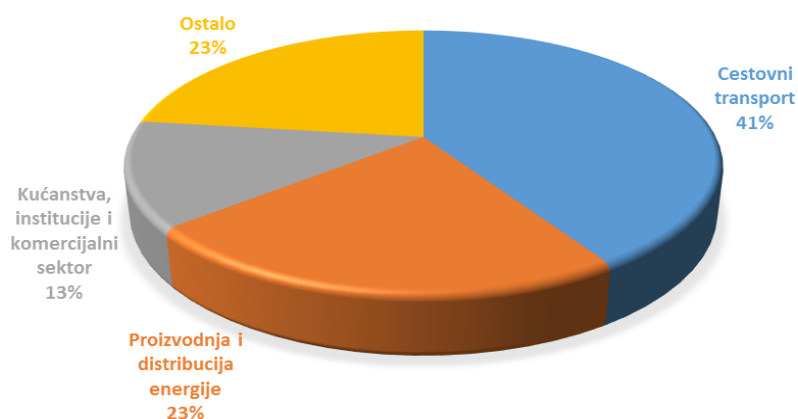
Ozbiljnija onečišćenja okoliša detektirana su 1943. godine u području Los Angelesa. Raniji pokušaji da se smanji iritacija očiju kontrolirajući emisije iz stacionarnih postrojenja (rafinerija, željezara) nisu uspjeli. Ubrzo je postalo jasno da onečišćenje zraka u Los Angelesu ima drugačiju strukturu izvora nego u Londonu i Pittsburghu, gdje su glavni izvori onečišćenja upravo stacionarna postrojenja. S vremenom, utemeljen je istraživački program s ciljem otkrivanja uzroka onečišćenja. Profesor A. J. Haagen-Smit prvi je demonstrirao da spojevi ugljikovodika reagiraju sa oksidima dušika kada su ozračeni Sunčevom svjetlošću na način da iritiraju oči [2]. Nakon toga saznanja krenula je velika kampanja vezana uz smanjenje zagađenja iz mobilnih izvora. Povijesni razvoj emisijskih standarda za motorna vozila počinje u Kaliforniji 1960. godine. Odbor za onečišćenje motornih vozila države Kalifornije uspostavio je specifikacije ispušnih emisija za motorna vozila. Prvi zahtjev vezan za smanjenje emisija u automobilima bio je propuhivanje kartera. Odbor je prihvatio rezoluciju kojom svi novi automobili od 1963. moraju imati ugrađen ventilacijski sustav kartera. Nakon toga slijede brojni zakoni i akti kojima se propisuju sve strože i strože norme

za emisiju ispušnih plinova. Kroz godine su doneseni mnogi zakoni i pravni akti koji su vezani za dopuštenu razinu emisija u okolinu.

Europska unija (EU) 1970-ih uvela je politike i mjere koje se odnose na kvalitetu zraka vezane uz mobilne izvore onečišćenja. Emisije tvari koje onečišćuju zrak iz mnogih značajnih izvora, poput prometa, industrije i proizvodnje električne energije, sada su regulirane i općenito su u opadanju, iako ne uvijek do predviđenih okvira. Jedan od načina pomoću kojih je EU postigla to poboljšanje jest postavljanje pravno obvezujućih i neobvezujućih ograničenja za određene onečišćujuće tvari koje se raspršuju zrakom i to na razini cijele Europske unije. EU je postavila standarde za lebdeće čestice, ozon, sumporni dioksid, dušikove okside, olovo i druge onečišćujuće tvari koje mogu imati štetan učinak na ljudsko zdravlje ili ekosustave. Od zemalja članica se zahtijeva da donesu lokalne ili regionalne planove koji definiraju kako namjeravaju poboljšati kvalitetu zraka. Na primjer, mogli bi uspostaviti tzv. zone niskih emisija s ograničenim pristupom vozilima koja više onečišćuju zrak. Gradovi mogu potaknuti i pomak u načinima prijevoza, potičući hodanje, vožnju bicikla i javni prijevoz koji manje onečišćuju zrak. Također, mogu se pobrinuti da izvori industrijskog i komercijalnog izgaranja budu opremljeni sustavima za naknadnu obradu ispušnih plinova najnovije dostupne tehnologije. Upravo zbog takvih zahtjeva za čistoćom zraka, može se ustanoviti kako je tehnologija vrlo bitna za cjelokupno funkcioniranje, kako zaštite okoliša i smanjenja emisija, tako i samog zakonodavstva.

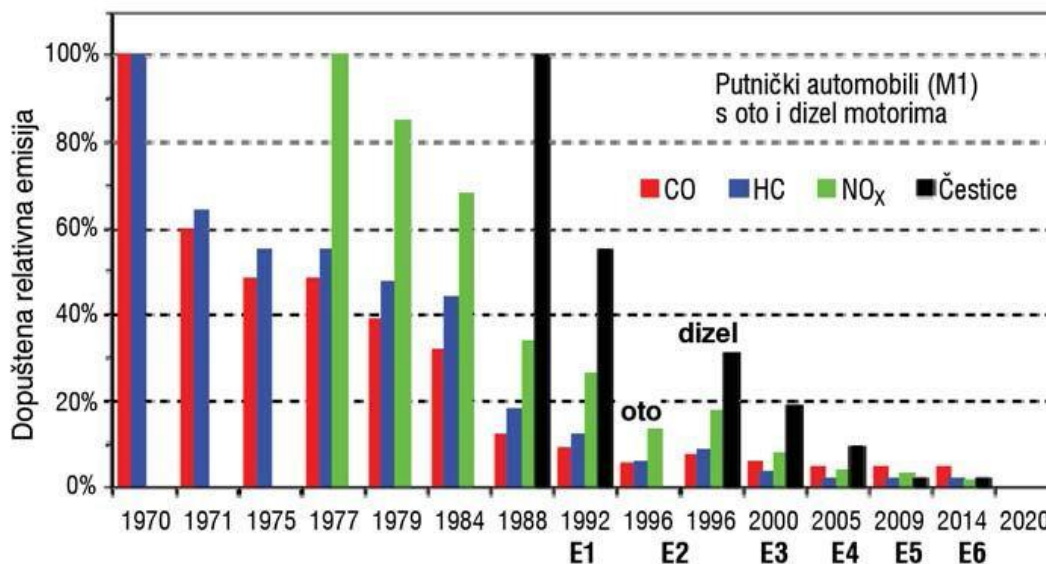
1.1. Utjecaj NO_x-a na okoliš

Kao što je već navedeno, spaljivanje fosilnih goriva koja sadrže dušik u industriji i transportu proizvodi većinu NO_x emisija. Dušikovi oksidi značajno utječu na okoliš, a njihov utjecaj se očituje kroz zakiseljavanje, stvaranje fotokemijskog smoga, razaranje stratosferskog ozona i globalno zagrijavanje te eutrofikaciju tla i vode. Zakiseljavanje može imati značajne posljedice za vodene eko sustave, rijeke jezera, šume i ostalu vegetaciju. Eutrofikacija je prekomjerno obogaćivanje vodenog sustava hranjivim tvarima što može uzrokovati smanjenje bioraznolikosti, dominaciju pojedinih vrsta, pa u nekim slučajevima može imati i otrovni utjecaj. Usprkos činjenici EEA (eng. *European Environment Agency*) agencije da su se emisije NO_x-a smanjile 44% između 1990 i 2011[3], cilj ostaje daljnje smanjenje emisija.

UDJELI NO_x PO SEKTORIMA ZA 2013.Slika 3. Prikaz udjela NO_x-a po sektorima [3]

Faktori koji utječu na stvaranje NO_x-a su: temperatura izgaranja, polje brzine toka u komori za izgaranje, sastav goriva, pretičak zraka te konstrukcija komore za izgaranje i gorionika. Prilikom procesa izgaranja postoje tri različita mehanizma nastajanja NO_x. To su termalni, promptni, i NO_x podrijetlom iz goriva. NO_x podrijetlom iz goriva proizvodi se oksidacijom dušika vezanog na gorivo, dok termalni i promptni NO_x trebaju atmosferski dušik za reakciju. Proizvodnja NO_x-a podrijetlom iz goriva izražena je u slučaju izgaranja ugljena i biomase, jer ta goriva imaju veliki udio dušika. Trostruke veze u molekulama dušika mogu se raskinuti samo sa uvođenjem velike količine energije u reakciju. Stoga se značajnije količine termalnog NO_x-a mogu proizvesti isključivo pri temperaturama iznad 1500 °C. Metode sprječavanja nastajanja NO_x-a mogu se podijeliti na primarne i sekundarne. Primarne metode imaju zadatak spriječiti nastajanje NO_x-a, dok sekundarne trebaju smanjiti koncentraciju već proizvedenog NO_x-a. Jedan od načina na koji primarna metoda nastoji spriječiti nastajanje NO_x-a je kroz regulaciju ulaznog zraka, vodeći pri tome računa da to neposredno ima utjecaj na emisije neizgorenog ugljika. Prilikom stupnjevitog izgaranja stvaraju se zone bogate gorivom i zone siromašne gorivom, koje smanjuju nastajanje termalnog NO_x-a i NO_x-a podrijetlom iz goriva. Recirkulacija ispušnih plinova često je korištena primarna metoda sprječavanja NO_x-a, i koristi se pretežito kod modernih motora sa unutrašnjim izgaranjem. Ova metoda može značajno smanjiti udio termalnog NO_x-a. Navedene primarne metode sprječavanja nastajanja NO_x-a više nisu dovoljne da bi se ispunile sve strože norme koje u velikoj mjeri ograničavaju emisije NO_x-a, kako u industriji tako i u transportu. Konkretno zahtjeve norme Euro 6 vezane za emisije NO_x-a u cestovnom transportu nije moguće

zadovoljiti isključivo poboljšanjem izgaranja u cilindru i recirkulacijom ispušnih plinova, nego je nužno naknadno tretiranje ispušnih plinova. Tehnologija koja navise obećava na tom području je selektivna katalitička redukcija (eng. *Selective Catalytic Reduction - SCR*).

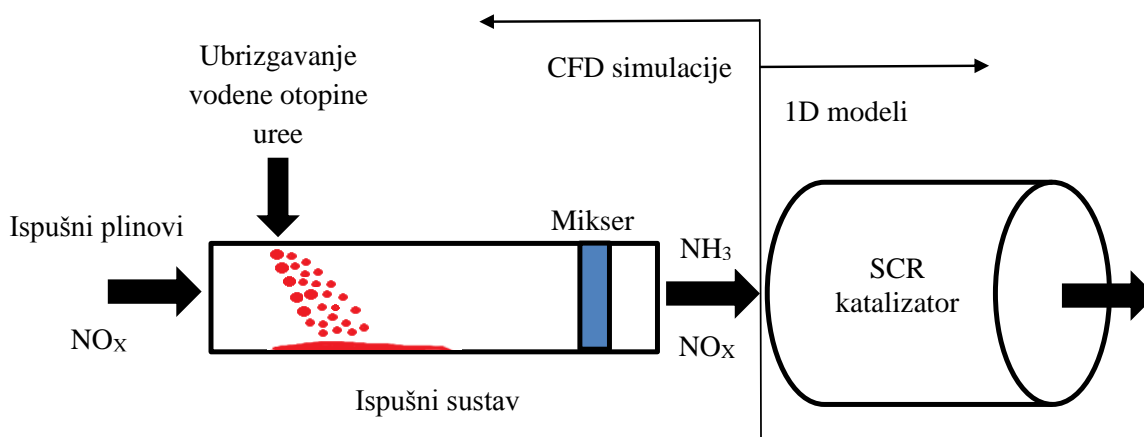


Slika 4. Prikaz dopuštenih emisija prema EURO normama [4]

1.2. Selektivna katalitička redukcija

Selektivna katalitička redukcija je katalitički proces u kojem se smjesa zraka i amonijaka u obliku plina ili vodena otopina uree dodaje smjesi dimnih plinova prolazeći pri tome kroz katalizator. Na stacionarnim postrojenjima SCR je u uporabi od 1980-tih. U dizelskim motorima za komercijalna teretna i putnička vozila to je izrazito ekonomski isplativa, a za okoliš prihvatljiva tehnologija koja smanjuje emisije NO_x-a na zakonom propisanu razinu [5]. SCR tehnologija je dizajnirana da omogućuje reakciju NO_x-a u oksidirajućem okruženju (uz prisustvo O₂ kao neophodnog kemijskog elementa). U selektivnoj katalitičkoj redukciji kao reducensi najviše se koriste: amonijak, urea i vodena otopina uree isključivo zato jer su dostupni na tržištu u većim količinama. Čisti amonijak je toksičan i problematičan za sigurnu pohranu, ali zato ne treba konverziju prije uporabe, pa se kao takav koristi uglavnom u većim stacionarnim postrojenjima. Urea je najsigurnija za skladištenje, ali zahtijeva proces termičke konverzije u amonijak prije ulaska u reakciju. Izvor amonijaka u motorima s unutarnjim izgaranjem cestovnih vozila je obično vodena otopina uree koja je već u primjeni kod kamionskih i autobusnih motora, a poznata pod nazivom “tekućina za ispušne sustave” (engl. *Diesel Exhaust Fluid* ili AdBlue). AdBlue je trgovački naziv za vodenu otopinu uree AUS32

(engl. Aqueous Urea Solution 32.5 %), odnosno mješavina 32.5 % uree visoke čistoće i 67.5 % demineralizirane vode. Ime AdBlue je zaštićeno od strane njemačke udruge automobilske industrije (VDA) i definirana normom DIN 70070. AdBlue otopina, iako neotrovnja, može izazvati koroziju metala, te se stoga pohranjuje u posebnim kontejnerima. Potrošnja ove otopine iznosi 3-5 % potrošnje diesel goriva [7], čime se osigurava veći ciklus trajanja punjenja. Kako bi se vodena otopina uree koristila, čistoća vodene otopine uree koji ulazi u SCR sustav mora biti izrazito visoka. Ioni u otopini uree mogu naštetiti i smanjiti životni vijek samog katalizatora. Kada se vodena otopina uree ubrizga u struju vrućih dimnih plinova, prije SCR-katalizatora, vodeni sadržaj će ispariti iz vodene otopine uree. Zatim će doći do stvaranja amonijaka uslijed termalnog raspada uree i hidrolize izocijanske kiseline. Obzirom da je vodena otopina uree korozivna, elementi poput spremnika, sapnice i sustava za miješanje moraju biti izrađeni od nehrđajućeg čelika i polimera. U tehnologiji smanjenja NO_x-a kod kopnenih vozila rezultati su vrlo dobri - NO_x se smanjuju do 90% [5]. Nedostaci ovog sustava se očituju u potrebi za dodatnim tvarima (reducensima), bez kojih se ne može odvijati redukcija dušikovih oksida. Time se obveza pridržavanja normi o čistoći ispuha prebacuje na vlasnika vozila, na kojemu je zakonska obveza redovitog održavanja AdBlue spremnika punim, kako bi sustav smanjenja dušikovih oksida mogao raditi. Jedan od problema primjene selektivne katalitičke redukcije u automobilima je pobjeg amonijaka u okoliš. Kako bi se to izbjeglo, sustav za katalitičku oksidaciju se postavlja nizvodno od ovog sustava kako bi mogao katalitički oksidirati pobjegli amonijak. Negativna strana ovog sustava je formiranje sumpor trioksida SO₃ ukoliko gorivo sadrži sumpor u sebi. Sumpor trioksid uz prisutnost vodene pare vrlo brzo prelazi u sumpornu kiselinu H₂SO₄.



Slika 5. Prikaz SCR sustava [6]

Iz svega navedenog može se zaključiti da automobilska industrija u vozila ugrađuje sve sofisticiranije i djelotvornije sustave za smanjenje emisija. Također djelotvornost sustava za pročišćavanje ispušnih plinova iz automobilskih motora povećava se smanjenjem određenih spojeva i/ili grupa spojeva u gorivu, poglavito sumpora. Sve stroža ograničenja emisija definirana EURO zahtjevima prisiljavaju rafinerije na uvođenje novih tehnologija, poglavito za hidro obradu goriva (hidrodesulfurizaciju).

U ovom diplomskom radu izvršit će se numerički proračun i validirati najvažniji matematički modeli za opis SCR procesa integriranih u komercijalni kod za računalnu dinamiku fluida (RDF) FIRE. Također će se simulirati ubrizgavanje uree, kako u realnoj geometriji, tako i u eksperimentalnom postavu. Zatim će se napraviti analiza rezultata, gdje će se promatrati koncentracije relevantnih kemijskih vrsta na izlaznom presjeku domene, polja temperature, brzine i tlaka kroz katalizator te ostale fizikalne veličine bitne za procjenu pogonskog stanja. Na kraju rada će se izvesti zaključak uz preporuke za daljnji rad.

2. MATEMATIČKI MODELI

2.1. Zakon očuvanja mase

Zakon očuvanja mase kaže da je masa materijalnog volumena konstantna. Ovaj zakon može se definirati sljedećim izrazom:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \rho dV = 0 \quad (1)$$

U diferencijalnom obliku zakon glasi:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j) = 0 \quad (2)$$

Gdje su v_j komponente vektora brzine strujanja fluida, ρ gustoća fluida, a x_j kartezijeve koordinate.

2.2. Zakon očuvanja količine gibanja

Zakon očuvanja količine gibanja za neki materijalni volumen kaže da je brzina promjene količine gibanja za neki materijalni volumen jednaka sumi vanjskih masenih i površinskih sila koje djeluju na taj volumen. Ovaj zakon može se definirati u diferencijalnom obliku koji glasi:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i) = \rho f_i + \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} \quad (3)$$

Gdje je t vrijeme, f_i komponente vektora specifične masene sile, a σ_{ji} komponente simetričnog tenzora naprezanja.

Newtonov zakon viskoznosti uz zanemarivu volumensku viskoznost glasi:

$$\sum_{ji} = \mu \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ji} = 2\mu D_{ji} - \frac{2}{3} \mu D_{kk} \delta_{ji} \quad (4)$$

Uzevši u obzir termodinamički tlak, tenzor naprezanja može se prikazati u obliku:

$$\sigma_{ji} = -p \delta_{ji} + \sum_{ji} \quad (5)$$

Iz zakona očuvanja količine gibanja i Newtonovog zakona viskoznosti, dolazi se do poznatih Navier-Stokesovih jednažbi koje za nestlačivi fluid glase:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j \partial x_j} + \rho f_i \quad (6)$$

2.3. Zakon očuvanja energije

Zakon očuvanja energije za neki materijalni volumen kaže da je brzina promjene zbroja kinetičke i unutarnje energije nekog materijalnog volumena jednaka sumi snaga vanjskih masenih i površinskih sila koje djeluju na taj materijalni volumen, te brzini izmjene topline materijalnog volumena s okolinom.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j e) = \rho f_i v_i + \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ji} v_i) - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \quad (7)$$

Pri tome je:

$$e = u + \frac{v^2}{2} \quad (8)$$

Gdje je e zbroj specifične unutarnje i kinetičke energije fluida, a q_i komponente vektora površinske gustoće.

2.4. Zakon očuvanja kemijske vrste

Opći oblik zakona očuvanja kemijske vrste glasi:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j Y_i) = -\frac{\partial}{\partial x_j} J_i + R_i \quad (9)$$

Gdje je Y_i maseni udio pojedine kemijske vrste, R_i neto produkcija kemijske vrste, a J_i difuzijski tok kemijske vrste. R_i možemo prikazati kao:

$$R_i = \sum_{f=1}^I \nu_{if} q_f \quad (10)$$

Pri čemu je ν_{if} stehiometrijski koeficijent, a q_f progresivna varijabla pojedine reakcije koja se može prikazati kao:

$$q_f = k_{fn} \prod_{i=1}^K [X_i]^{\nu'_{if}} - k_{fp} \prod_{i=1}^K [X_i]^{\nu''_{if}} \quad (11)$$

k_{fn} i k_{fp} su konstante normalne i povratne reakcije f , a X_i je molni udio pojedine kemijske vrste. Arrheniusova ovisnost o temperaturi se može prikazati kao:

$$k_{fn} = A_f T^\beta \exp\left(\frac{-E_{af}}{R_c T}\right) \quad (12)$$

Pri čemu je A_f koeficijent brzine reakcije, E_{af} energija aktivacije, a član $\exp\left(\frac{-E_{af}}{R_c T}\right)$ predstavlja Boltzmannov faktor koji se kreće između vrijednosti 0 i 1 [35].

2.5. Standardna transportna jednadžba

Svi prethodno nabrojani zakoni mogu se prevesti na standardni oblik. Standardna transportna jednadžba za neko skalarno polje ϕ glasi:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i \phi)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) = S_\phi(\phi) \quad (13)$$

Gdje je ϕ masena gustoća promatranog fizikalnog svojstva, ρ gustoća kontinuuma, t vrijeme, x_i prostorne koordinate, v_i komponente brzine gibanja u smjeru prostornih koordinata x_i , γ_ϕ koeficijent difuzije, a S_ϕ pripadajući izvorski član.

Članovi gornje jednadžbe redom se nazivaju: nestacionarni, konvekcijski, difuzijski i izvorski član. Nestacionarni član označava lokalnu promjenu fizikalnog svojstva. Konvekcijski član označava konvekcijski prijenos fizikalnog svojstva. Difuzijski član označava difuzijski prijenos fizikalnog svojstva uslijed gradijenta fizikalne veličine, dok izvorski član označava volumensku gustoću nastajanja ili nestajanja tog fizikalnog svojstva.

2.6. Metoda kontrolnih volumena

Metoda kontrolnih volumena se najčešće primjenjuje za numeričke simulacije iz polja mehanike fluida. Pri tome se metoda kontrolnih volumena koristi za diskretizaciju jednadžbi koje opisuju strujanje fluida, kako bi ih se moglo riješiti numerički. Način diskretizacije jednadžbi opisat će se u sljedećem poglavlju.

2.6.1. Diskretizacija standardne transportne jednadžbe

Diskretizacija standardne transportne jednadžbe provodi se zbog pretvaranja integralno-diferencijalnih jednadžbi u odgovarajući sustav algebarskih jednadžbi. U metodi kontrolnih volumena, u prvom koraku diskretizacije, na svaki kontrolni volumen geometrijske mreže primjenjuje se integralni oblik opće transportne jednadžbe. Zatim se primjenom neke od shema diferencije, modeliraju konvekcijsko-difuzijski protoci fizikalne veličine kroz stranice kontrolnih volumena. Ovim postupkom, kako je već navedeno, sustav diferencijalnih jednadžbi matematičkih modela postaje sustav algebarskih jednadžbi. Pri tome se pojedini

nelinearni članovi sustava lineariziraju, a rješenje se dobiva u iterativnom postupku, rješavanjem sustava linearnih algebarskih jednadžbi.

Diskretizacija jednadžbe (13) primjenom metode kontrolnih volumena formulirana je integracijom po kontrolnom volumenu V_P i vremenu, i može se zapisati:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int_{V_P} \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot (\rho v_i \phi) dV \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\gamma_\phi \frac{\partial}{\partial x_i} \phi \right) dV + \int_{V_P} S_\phi(\phi) dV \right] dt \quad (14)$$

2.6.1.1. Vremenska diskretizacija

Za slučaj nestacionarnog strujanja diskretizirana transportna jednadžba može se za svaki kontrolni volumen shvatiti kao parcijalna diferencijalna jednadžba prvog reda, koja se može integrirati nekom od prikladnih metoda. Koristeći pojedine članove u diskretiziranom obliku i pod pretpostavkom da se oblici kontrolnih volumena ne mijenjaju s vremenom, jednadžba (14) se može zapisati:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\rho_P \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_P V_P + \sum_f F \phi_{f(F,S)} \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f \gamma_f \left(s \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \Big|_f \right) + S_I V_P \phi_P + S_E V_P \right] dt \quad (15)$$

Pri čemu eksponent n označava vrijednosti u novom vremenskom trenutku, a eksponent o označava vrijednosti u starom vremenskom trenutku. F označava konvekcijski protok, s površinu, S_I je komponenta izvora veličine ϕ koja stoji uz nju, a S_E komponenta izvora veličine ϕ koja stoji samostalno. Indeks p označava kontrolni volumen koji računamo, a indeks f označava veličinu u središtu stranice volumena. Varijacija veličine ϕ_P te njezinih gradijenata, zanemarit će se unutar vremenskog koraka. Također valja naglasiti da je potrebno napraviti izbor između načina na koji će se gore spomenute veličine vrednovati u kontekstu novih i starih vrijednosti. Stoga se mogu koristiti Eulerova eksplicitna shema i Eulerova implicitna shema.

2.6.1.2. Eulerova eksplicitna shema

Eulerova eksplicitna shema koristi eksplicitnu diskretizaciju članova, odnosno koristi stare vrijednosti ϕ^o . Eulerova eksplicitna shema je prvog reda točnosti u vremenu i nestabilna je ukoliko je Courantov broj Co veći od 1.

$$\rho_P \frac{\phi^n - \phi^o}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_{(f,F,S)}^o = \sum_f \gamma_f S \cdot \left. \frac{\partial \phi^o}{\partial x_j} \right|_f + S_l V_P \phi_P^o + S_E V_P \quad (16)$$

Courantov broj je definiran kao:

$$Co = \frac{v_f}{d} \Delta t \quad (17)$$

Pri čemu je v_f brzina strujanja, a d udaljenost dvaju kontrolnih volumena.

2.6.1.3. Eulerova implicitna shema

Eulerova implicitna shema koristi implicitnu diskretizaciju članova, odnosno koristi nove vrijednosti ϕ^n . Ona je prvog reda točnosti u vremenu te garantira ograničenost rješenja i bezuvjetno je stabilna. No, treba napomenuti, kako bi se garantirala ograničenost, neortogonalna korekcija mora se računati eksplicitno [8].

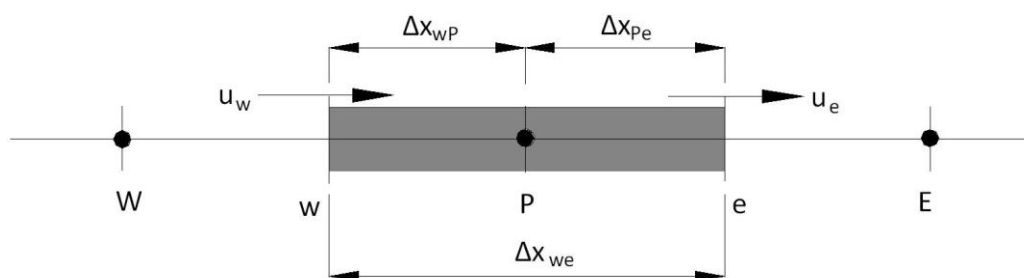
$$\rho_P \frac{\phi^n - \phi^o}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_{(f,F,S)}^n = \sum_f \gamma_f S \cdot \left. \frac{\partial \phi^n}{\partial x_j} \right|_f + S_l V_P \phi_P^n + S_E V_P \quad (18)$$

Za implicitne metode općenito vrijedi da su u većini slučajeva bezuvjetno stabilne. Implicitne metode, u svojoj formulaciji uz poznate, sadrže i nepoznate vrijednosti fizikalnih veličina. Implicitne metode zahtijevaju istodobno rješavanje jednadžbi za sve kontrolne volumene i time zahtijevaju veće računalne resurse u pogledu pohrane podataka i utroška računalnog vremena po koraku integracije. Glavna odlika implicitnih metoda jest njihova bezuvjetna stabilnost, što omogućuje njihovu primjenu pri znatno grubljoj vremenskoj diskretizaciji. Programski paket FIRE koji se upotrebljavao za numeričke simulacije u ovom radu, koristi implicitnu vremensku diskretizaciju članova prvog reda.

2.6.2. Sheme diferencije

Sheme diferencije služe za definiranje vrijednosti fizikalnih veličina na stranicama između kontrolnih volumena. Viši red točnosti ostvaruje se dodatnim uključivanjem vrijednosti fizikalne veličine iz više susjednih čvorova. Neke od osnovnih numeričkih shema su: Eksponecijalna shema (Exponential Scheme - ES), Polinomna Shema, Uzvodna shema (Upwind Differencing Scheme - UDS), Shema centralnih razlika (Central Differencing Scheme - CDS), QUICK (Quadratic upwind) shema, Linearno uzvodna shema (Second Order Upwind or Linear Upwind Scheme - LUDS), Hibridna shema, Kombinirana shema, te ENO

(Essential Non-Oscillatory) i WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) sheme. Navedene sheme karakterizira činjenica da se difuzijski transport modelira kao da nema konvekcijskog, a konvekcijski kao da nema difuzijskog, usprkos tome što analitičko rješenje ukazuje na činjenicu da bi trebalo voditi računa o međudjelovanju ova dva transporta. U ovom radu osvrnut ćemo se na shemu centralnih razlika, uzvodnu shemu te kombiniranu shemu.



Slika 6. Grafički prikaz proračunskog čvora [10]

Postavljajući fokus na opći proračunski čvor P , susjedni čvorovi su indeksirani sa W i E a rubovi kontrolnih volumena s w i e .

2.6.2.1. Shema centralnih razlika (Central Differencing Scheme- CDS)

Ovdje je difuzijski transport definiran izrazom:

$$-D \left. \frac{d\varphi}{dn} \right|_e = -D(\varphi_E - \varphi_P) \quad (19)$$

Konvekcijski transport (za slučaj ravnomjerne mreže) je definiran izrazom:

$$\varphi_e = \frac{\varphi_E + \varphi_P}{2} \quad (20)$$

Pa iz toga proizlazi da je protok onda jednak:

$$\Delta\Phi_e = F\varphi_e - D \left. \frac{d\varphi}{dn} \right|_e = F \frac{\varphi_P + \varphi_E}{2} + D(\varphi_E - \varphi_P) \quad (21)$$

Formalno govoreći ova shema je drugog reda točnosti, nema svojstvo transportivnosti, te uvodi eliptičnost i u situacijama kada su jednačbe paraboličke ili hiperboličke. To za posljedicu ima potrebu zadavanja rubnih uvjeta i na granicama na kojima to, fizikalno

gledajući, nije potrebno. Također valja naglasiti da pojedini autori preferiraju primjenu sheme centralnih razlika zbog jednostavnosti računanja koeficijenta i zbog drugog reda točnosti, ali treba imati na umu da je shema primjenjiva za niske vrijednosti lokalnog Pecletova broja, što se može postići usitnjavanjem geometrijske mreže [9]. Pecletov broj P označuje omjer jačine konvekcije i difuzije na promatranjoj stranici.

$$P = \frac{F}{D} \quad (22)$$

2.6.2.2. Uzvodna shema (Upwind Differencing Scheme- UDS)

Uzvodna shema, kao što joj sam naziv govori, vrijednost fizikalne veličine na granici dvaju kontrolnih volumena definira uzimajući vrijednost u čvoru uzvodnog kontrolnog volumena. Difuzijski transport kod uzvodne sheme je simetričan, i definira se sljedećim izrazom:

$$-D \left. \frac{d\varphi}{dn} \right|_e = -D(\varphi_E - \varphi_P) \quad (23)$$

Ukoliko promotrimo shemu centralnih razlika i uzvodnu shemu možemo uočiti da su difuzijski transporti jednaki. Ove dvije sheme će se razlikovati po konveksijskim transportima, pri čemu će konveksijski član biti definiran na sljedeći način:

$$\varphi_e = \begin{cases} \varphi_P & \text{za } F > 0 \\ \varphi_E & \text{za } F < 0 \end{cases} \quad (24)$$

Protok za uzvodnu shemu jednak je (za slučaj $F > 0$):

$$\Delta\Phi_e = F\varphi_e - D \left. \frac{d\varphi}{dn} \right|_e = F\varphi_P + D(\varphi_E - \varphi_P) \quad (25)$$

Činjenica da je ova shema prvog reda točnosti predstavlja osnovni nedostatak ove sheme, te unosi lažnu difuziju u numeričko rješenje. Nasuprot tome, izuzetno jednostavno računanje koeficijenta predstavlja prednost ove sheme [9]. Ukoliko uzmemo u obzir da su koeficijenti uvijek pozitivni, nikad neće davati nefizikalna oscilatorna rješenja, niti će divergirati. Zbog navedenih prednosti ova shema je ugrađena u većinu komercijalnih CFD (eng. *Computational Fluid Dynamics*) paketa.

2.6.2.3. Kombinirana shema (Blending scheme)

U ovom radu korištena je kombinirana shema (engl. *Blending scheme*) kao linearna kombinacija uzvodne sheme i sheme centralne diferencije. U ovoj shemi je koeficijent φ_e definiran kao:

$$\varphi_e = \gamma \varphi_e^{CDS} + (1-\gamma) \varphi_e^{UDS} \quad (26)$$

Pri čemu je γ faktor miješanja. Za $\gamma=1$ dobije se shema centralnih razlika, a za $\gamma=0$, uzvodna shema.

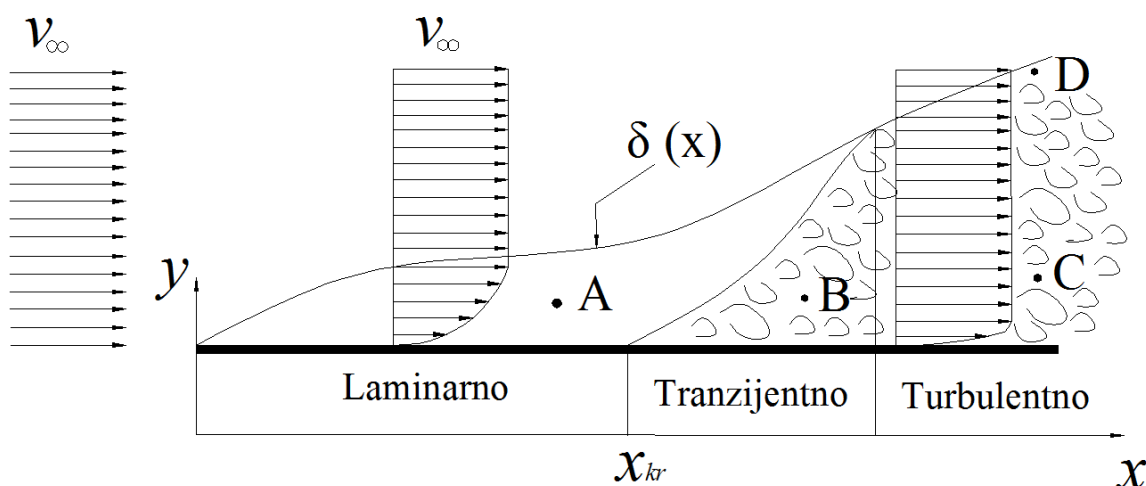
2.7. Turbulencija

Turbulencija označava nepravilno vrtložno gibanje fluida. Turbulencija (lat. turbulentus = nemiran, uzburkan) je prisutna svuda u prirodi; od strujanja zraka, strujanja vode u rijekama i morima, do strujanja krvi u kardiovaskularnom sustavu i zraka u respiratornom sustavu živih bića. Unatoč nabrojanim važnostima i učestaloj pojavi turbulentnog strujanja, ono i danas ostaje bez egzaktnog rješenja. Problem turbulencije proučavan je od strane mnogih fizičara u devetnaestom i dvadesetom stoljeću, ali i dalje egzaktno matematičko rješenje nije poznato.

Općenito, strujanje fluida se može podijeliti u dvije skupine, na laminarno i turbulentno, ovisno o vrijednostima Reynoldsovog broja koji je definiran kako slijedi:

$$\text{Re} = \frac{v \cdot x}{\nu} \quad (27)$$

Gdje je v zadana brzina strujanja, x karakteristična duljina, a ν kinematička viskoznost.



Slika 7. Prijelaz iz laminarnog u turbulentno strujanje pri opstrujavanju ravne ploče [11]

Laminarno strujanje se javlja pri niskim vrijednostima Reynoldsovog broja, pri čemu su viskozne sile dominantne naspram inercijskih. Laminarno strujanje karakterizira uredno gibanje čestica fluida, za razliku od turbulentnog strujanja, koje se javlja pri visokim vrijednostima Reynoldsovog broja, kad su inercijske sile dominantne nad viskoznim. Turbulentno strujanje karakteriziraju slučajne pulzacije brzine i tlaka, te burno komešanje čestica fluida. Također valja naglasiti da je turbulentno strujanje izrazito nestacionarno strujanje. Intenzivno miješanje (na nivou čestica) dat će turbulentnom strujanju izrazit difuzijski karakter, što ima za posljedicu povećanu disipaciju energije. Karakteristika turbulentnog strujanja je da pored srednje brzine cijelog strujanja, svaka čestica fluida ima još i dodatnu brzinu koja može biti djelomično u smjeru glavnog strujanja, a i djelomično poprečna na smjer strujanja.

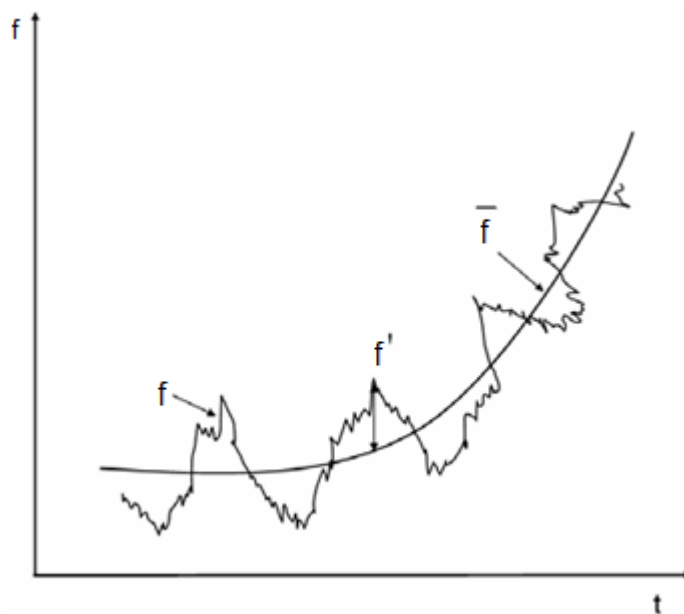
Na gornjoj slici vidljivo je da u laminarnom i turbulentnom strujanju postoji područje u neposrednoj blizini tijela, u kojem se brzina fluida mijenja od nule (na samoj površini tijela zbog viskoznosti fluida koji se lijepi za stjenku), do brzine neporemećenog strujanja. To područje naziva se graničnim slojem. Unutar graničnog sloja se ne mogu zanemariti viskozne sile u turbulentnom strujanju, unatoč tome što su inercijalne sile dominantne nad viskoznim. Zbog izraženije difuzije, koja ima tendenciju ujednačavanja profila u turbulentnom strujanju, profil brzine bit će ujednačeniji, pa će ujedno i smično naprezanje biti veće.

2.7.1. Statističko opisivanje turbulencije

Pri numeričkom rješavanju Navier–Stokesovih jednadžbi za slučaj razvijenog turbulentnog strujanja diskretizacija bi morala biti tako sitna da se obuhvate sve amplitude pulzacija fizikalnih veličina. Također zbog prirode turbulentnog strujanja vremenski korak integracija bi morao biti tako mali da se obuhvate sve frekvencije turbulentnih pulzacija. Rješavanje ovakvog problema i danas bi bilo zahtjevno, ali to nije cilj rješavanja inženjerskih problema turbulentnog strujanja. Danas su za inženjere važne srednje vrijednosti brzine, tlaka, protoka, naprezanja na nekoj površini i sl. Upravo zbog toga se razvila ideja o usrednjavanju Navier–Stokesovih jednadžbi po vremenu. Danas se najčešće koristi Reynoldsovo usrednjavanje. Kod Reynoldsovog usrednjavanja se neka veličina (tlak, brzina) u turbulentnom strujanju može prikazati kao zbroj vremenski usrednjene vrijednosti i pulzirajućeg dijela. Ako uzmemo da je f neka veličina u turbulentnom strujanju, ona se može prikazati zbrojem usrednjene vrijednosti \bar{f} i pulzirajućeg dijela f' . Vremenski usrednjena vrijednost u nekom razdoblju T_0 :

$$\bar{f}(x_i, t) = \frac{1}{T_0} \cdot \int_{-\frac{T_0}{2}}^{\frac{T_0}{2}} f(x_i, t - \tau) \cdot d\tau \quad (28)$$

Gdje T_0 mora biti odabran tako da vrijedi $\overline{\overline{f}} = \bar{f}$, dok je vremenski usrednjena vrijednost pulzirajućeg dijela bilo koje fizikalne veličine jednaka nuli.



Slika 8. Grafički prikaz definiranja usrednjenih vrijednosti [12]

Usrednjivanjem jednadžbi količine gibanja dobije se:

$$\rho \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \overline{v_i v_j}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \overline{v_i' v_j'} \right] \quad (29)$$

Skup vremenski usrednjenih jednadžbi kontinuiteta i količine gibanja naziva se Reynoldsovim jednadžbama. Iz prethodno napisanih usrednjenih jednadžbi količine gibanja vidljivo je da se ne može gledati samo usrednjeno strujanje, a da se pritom ne vodi računa o pulzirajućem strujanju, jer se u jednadžbi pojavljuje član $\overline{\rho v_i' v_j'}$ koji je predstavnik pulzirajućeg strujanja. Taj član označava turbulentnu difuziju količine gibanja i naziva se turbulentnim ili Reynoldsovim naprezanjima. Tenzor Reynoldsovih naprezanja simetričan je tenzor i sadrži šest nepoznanica koje je potrebno riješiti.

2.7.2. Modeli turbulencije

Modeli turbulencije imaju zadatak usklađivanja broja jednadžbi i broja nepoznanica u Navier–Stokesovim jednadžbama. Usklađivanje se vrši modeliranjem člana pulzirajućeg strujanja pomoću poznatih parametara sustava. Zahtjevi koji se nameću modelima turbulencije su točnost, univerzalnost, računalna zahtjevnost i s njome povezana jednostavnost. Upravo zbog te činjenice viši model turbulencije ne mora nužno biti i bolji model, a budući da ima povećan broj članova koje treba modelirati, često nije i najtočniji. Modeli turbulencije temelje se isključivo na eksperimentalnim rezultatima. U ovom radu će se obraditi k-ε model i k-ζ-f model turbulencije te pobliže objasniti uloga zidnih funkcija u tim modelima.

2.7.2.1. k-ε model turbulencije

k-ε model turbulencije se s dvije dodatne transportne jednadžbe koristi za opisivanje turbulentnih svojstava strujanja fluida. Prva transportna varijabla je turbulentna kinetička energija sadržana u pulzacijama turbulentnih strujanja. Budući da se disipacija kinetičke energije vrši putem viskoznih sila, definira se Reynoldsov broj turbulentnih pulzacija:

$$\text{Re}_\lambda = \frac{\rho v_\lambda \lambda}{\mu} \quad (30)$$

Gdje je λ valna duljina, a v_λ brzina pulzacija. Druga transportna varijabla je disipacija turbulentne kinetičke energije i definira se izrazom:

$$\varepsilon = \nu \overline{\frac{\partial v_i'}{\partial x_j} \frac{\partial v_i'}{\partial x_j}} \quad (31)$$

Do disipacije kinetičke energije dolazi kada je Reynoldsov broj pulzacija malen, odnosno kada je utjecaj viskoznih sila značajan. Skup jednadžbi koji opisuje k-ε model turbulencije za nestlačivo strujanje se sastoji od: jednadžbe za kinetičku energiju turbulencije i jednadžbe za disipaciju kinetičke energije turbulencije.

Jednadžba za kinetičku energiju turbulencije:

$$\frac{\partial}{\partial t}(k\rho) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k \bar{v}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G - \rho \varepsilon \quad (32)$$

Pri čemu je izraz za generiranje kinetičke energije G :

$$G = -\overline{\rho v_i' v_j'} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (33)$$

Jednadžba za disipaciju kinetičke energije turbulencije:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\varepsilon\bar{v}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_1 G \frac{\varepsilon}{k} - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (34)$$

Na kraju je moguće definirati turbulentnu viskoznost u obliku:

$$v_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (35)$$

Ovaj model vrijedi za visoke vrijednosti Re_t , koji označava odnos između turbulentne i molekularne viskoznosti, kad su koeficijenti u gornjim jednadžbama konstantni, i glase: $C_\mu=0.09$, $C_1=1.44$; $C_2=1.92$; $\sigma_k=1$; $\sigma_\varepsilon=1.3$.

2.7.2.2. k - ζ - f model turbulencije

k - ζ - f model turbulencije temelji se na modelu turbulentne viskoznosti koji se pak temelji na Durbinovom eliptičnom konceptu. Taj koncept su Hanjalić, Popovac i Hadžiabdić [13] unaprijedili, i razvili upravo k - ζ - f model turbulencije. Pri tome je cilj bio unaprijediti numeričku stabilnost $\overline{v^2} - f$ modela rješavanjem transportne jednadžbe za omjer:

$$\zeta = \frac{\overline{v^2}}{k} \quad (36)$$

Turbulentna viskoznost v_t je prikazana kao:

$$v_t = C_\mu \zeta k T \quad (37)$$

Gdje su članovi k turbulentna kinetička energija, T turbulentno vrijeme, a ζ normirana karakteristična brzina. Pri tome je turbulentna kinetička energija k :

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \rho(P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (38)$$

Disipacija turbulentne kinetičke energije:

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \rho \frac{C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \varepsilon}{T} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (39)$$

Normirana karakteristična brzina:

$$\rho \frac{D\zeta}{Dt} = \rho f - \rho \frac{\zeta}{k} P_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\zeta} \right) \frac{\partial \zeta}{\partial x_j} \right] \quad (40)$$

Gdje je f eliptična funkcija i računa se prema:

$$f - L^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_j} = \left(C_1 + C_2 \frac{P_k}{\varepsilon} \right) \frac{\left(\frac{2}{3} - \zeta \right)}{T} \quad (41)$$

Pri tome je produkcija turbulentne kinetičke energije:

$$P_k = \nu_t S^2 \quad (42)$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (43)$$

Turbulentno vrijeme T :

$$T = \max \left[\min \left(\frac{k}{\varepsilon}, \frac{0.6}{\sqrt{6}C_\mu |S| \zeta} \right), C_T \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (44)$$

Turbulentna dužina L :

$$L = C_L \max \left[\min \left(\frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}, \frac{k^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{6}C_\mu |S| \zeta} \right), C_\eta \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \right] \quad (45)$$

Tablica 1. Koeficijenti k- ξ -f modela turbulencije

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_1	C_2	σ_k	ε_k	σ_ζ	C_T	C_L	C_η
0.22	$1.4(1+0.012/\zeta)$	1.9	0.4	0.65	1	1.3	1.2	6	0.36	85

2.7.2.3. Zidne funkcije

k- ε model turbulencije vrijedi za visoke vrijednosti Re_t , pa zbog toga taj model neće biti primjenjiv u području u kojem turbulentna viskoznost nije dominantna. Problem nastaje u blizini nepropusne stjenke jer se viskozni fluid lijepi uz stjenku. Ako se fluid lijepi uz stjenku, onda je i brzina na stjenci jednaka nuli. Ovaj problem može se riješiti formulacijom posebnog modela turbulencije u području uz stjenku ili definiranjem rubnih uvjeta na stjenci do kojeg još uvijek vrijedi model. Formulacija posebnog modela turbulencije u području uz stjenku se rijetko koristi, ponajviše zbog poteškoća do kojih se nailazi, kao što su zahtjevi za finoćom mreže. Za definiranje rubnih uvjeta potrebno je definirati rješenja primjenjiva na područje uz nepropusnu stjenku, koje nazivamo zidnim funkcijama. U neposrednoj blizini stjenke

strujanje će biti paralelno sa stjenkom, pa su tangencijalna naprezanja od komponente brzine koja je okomita na stjenku jednaka nuli:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right] = \frac{\partial \tau}{\partial y} = 0 \quad (46)$$

Iz gornje jednadžbe se može zaključiti da je ukupno tangencijalno naprezanje konstantno, gledajući u smjeru okomito na stjenku i jednako naprezanju na stjenci.

U linearnom podsloju turbulentna viskoznost se zanemaruje te slijedi da je u tom području profil brzine linearan:

$$\bar{u} = \frac{\tau}{\mu} y \quad (47)$$

Gdje se uvrštavanjem bezdimenzijskih veličina (bezdimenzijske brzine):

$$u^+ = \frac{\bar{u}}{u_\tau} \quad (48)$$

I bezdimenzijske udaljenosti od stjenke:

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau y}{\mu} \quad (49)$$

Pri čemu je u_τ brzina trenja:

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} \quad (50)$$

Dobiva:

$$u^+ = y^+ \quad (51)$$

U viskoznom podsloju molekularna viskoznost je dominantna nad turbulentnom viskoznošću. Nakon toga slijedi prijelazni podsloj ($\mu_t \approx \mu$), unutar kojeg su ove dvije viskoznosti istog reda veličine, pa u njemu neće vrijediti model turbulencije. Zatim dolazi inercijalni podsloj, u kojem dominira turbulentna viskoznost odnosno gdje je $\mu_t \gg \mu$, i u kojem vrijedi k-ε model turbulencije pri čemu je profil brzine logaritmički. Inercijalni podsloj opisan je logaritmičkim profilom brzine:

$$u^+ = \frac{1}{k} \ln(Ey^+) \quad (52)$$

κ -von Karmanova konstanta ($\kappa = 0.4187$)

E -integracijska konstanta ($E = 9.739$)

Na stjecni je iznos kinetičke energije turbulencije k jednak nuli. Taj nam je podatak bitan za zadavanje rubnih uvjeta. Derivacije brzine u izrazu za generaciju kinetičke energije turbulencije računaju se pomoću izraza (52) [9]. Viskozni, prijelazni i inercijalni podsloj čine zajedno unutarnji dio graničnog sloja, koji se proteže do 15% ukupne debljine graničnog sloja.

2.8. Matematički model spreja

Simulacije spreja uključuju fenomen višefaznog strujanja, te traže numeričko rješavanje jednadžbi očuvanja za plinsku i kapljevitu fazu istovremeno. S obzirom na kapljevitu fazu, većina kalkulacija za sprej u inženjerskoj domeni zasnivaju se na statističkoj metodi koja se naziva DDM (eng. *Discrete Droplet Method*). DDM funkcionira na način da rješava diferencijalne jednadžbe za trajektoriju, količinu gibanja i transfer mase pojedine kapljice, od kojih je svaka član grupe identičnih neovisnih kapljica podjednake veličine i fizikalnih svojstava koje nazivamo parcelom (eng. *parcel*). Stoga jedan član grupe predstavlja ponašanje cijele parcele.

Parcele kapljica uvode se u domenu toka s početnim uvjetima pozicije, veličine, brzine, temperature i broja čestica u parceli. Programski paket FIRE podržava unos kapljica u obliku spreja kroz zone ulaza. Izmjena količine gibanja za kapljicu/plin, turbulentno raspršivanje, isparavanje kapljice, sekundarni raspad, sudaranje kapljica i interakcija između kapljice/zida su obuhvaćeni velikim brojem modela koji omogućavaju korištenje sprej modula za realne slučajeve. Masa isparenih kapljica predstavlja izvor za transportne jednadžbe plinske faze. Krute (eng. *solid*) čestice se mogu izračunati s DDM pristupom deaktiviranjem određenih modela, kao što je model isparavanja. Kapljice se prate Lagrangeovim pristupom kroz računalnu mrežu koja se koristi za rješavanje plinske faze parcijalnih diferencijalnih jednadžbi. Potpuna dvosmjerna sprega (eng. *coupling*) između plinske i kapljevite faze se pri tome uzima u obzir. U slučajevima zanemarivog utjecaja raspršene (disperzirane) faze na kontinuiranu, tok plinske faze može se simulirati unaprijed, a simulacija kapljica se može izvršiti poslije.

2.8.1. Jednadžba količine gibanja

Jednadžba količine gibanja nam govori da je promjena količine gibanja kapljice spreja jednaka sumi svih sila koje djeluju na kapljicu.

$$m_d \frac{du_{id}}{dt} = F_{idr} + F_{ig} + F_{ip} + F_{ib} \quad (53)$$

Gdje je F_{idr} sila otpora (eng. *drag*):

$$F_{idr} = D_p \cdot u_{rel} \quad (54)$$

D_p je funkcija otpora definirana:

$$D_p = \frac{1}{2} \rho_g A_d C_D |u_{rel}| \quad (55)$$

C_D je koeficijent otpora koji je obično funkcija Reynoldsovog broja kapljice, a A_d je površina presjeka. Iz različitih formulacija iz literature za koeficijent otpora pojedine sfere, FIRE koristi sljedeće formulacije od strane Schiller-a and Naumann-a.

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} (1 + 0.15 Re_d^{0.687}) & Re_d < 10^3 \\ 0.44 & Re_d \geq 10^3 \end{cases} \quad (56)$$

Pri čemu je Re_d Reynolds-ov broj kapljice, a prikazan je sljedećom jednadžbom, gdje μ_g predstavlja viskoznost plinovite faze, a ρ_g gustoću.

$$Re_d = \frac{\rho_g D_d u_{rel}}{\mu_g} \quad (57)$$

Ostale formulacije za koeficijente otpora su implementirane i mogu biti aktivirane preko grafičkog sučelja, a također je i napravljena pričuva za ubacivanje od strane korisnika. F_{ig} je sila koja uključuje efekte gravitacije i uzgona.

$$F_{ig} = V_p \cdot (\rho_p - \rho_g) g_i \quad (58)$$

Dok je F_{ip} sila tlaka i definirana je kao:

$$F_{ip} = V_p \cdot \nabla p \quad (59)$$

F_{ib} sumira sve ostale vanjske sile kao što su tzv. virtualne sile mase, magnetske ili elektrostatičke sile i sl. Sile koje su standardno uzete u obzir su sila otpora F_{idr} i gravitacijska sila F_{ig} . Uspoređujući relativnu veličinu svih sila, sila otpora je jedina relevantna sila za ubrizgavanje goriva u obliku spreja i računanje izgaranja. Stoga, ubacivanjem gornjih sila i

relacija u jednadžbu (53) i dijeleći je s masom čestice dm , jednadžba za ubrzanje čestice iznosi:

$$\frac{du_{id}}{dt} = \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g}{\rho_d} \frac{1}{D_d} \left| (u_{ig} - u_{id}) \right| + \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_d} \right) g_i \quad (60)$$

Jednadžba se može integrirati da bi se dobila brzina čestice, a iz toga trenutni vektor pozicije čestice se može dobiti nakon integracije:

$$\frac{dx_{id}}{dt} = u_{id} \quad (61)$$

2.8.2. Isparavanje kapljica

Abramzon i Sirignano model isparavanja polazi od teorije klasičnog filma, gdje se otpori prijenosu topline i mase modeliraju na principu zamišljenih filmova konstantne debljine δ_T i δ_M . U slučaju kapljice koja isparava, ove vrijednosti debljine sloja moraju biti ispravljene faktorima [17]. Maseni tok isparavanja se može opisati Sherwood-ovim i Nusseltovim brojem.

$$\dot{m} = 2\pi \bar{\rho}_g \bar{\beta}_g r_d Sh^* \ln(1 + B_y) \quad (62)$$

$$\dot{m} = 2\pi \frac{\bar{k}_g}{c_{pF}} r_d Nu^* \ln(1 + B_T) \quad (63)$$

Gdje su vrijednosti s crticom procijenjene na referentnoj temperaturi i referentnim koncentracijama goriva.

$$\bar{T} = T_S + A_r (T_\infty - T_S) \quad \bar{Y}_S = Y_{V,S} + A_r (Y_{V,\infty} - Y_{V,S}) \quad (64)$$

Pri čemu je A_r konstanta za izračunavanje referentnih uvjeta. B_T je bezdimenzijska značajka prijenosa topline, a parametri Nu^* i Sh^* se računaju s brojevima Nu_0 i Sh_0 neisparavajuće kapljice i odgovarajućim korekcijskim faktorima za debljinu filma F_T i F_M :

$$Nu^* = 2 + \frac{(Nu_0 - 2)}{F_T} \quad (65)$$

$$Sh^* = 2 + \frac{(Sh_0 - 2)}{F_M} \quad (66)$$

Pri čemu je:

$$Nu_0 = 2 + 0.552 Re^{\frac{1}{2}} Pr^{\frac{1}{3}} \quad (67)$$

$$Sh_0 = 2 + 0.552Re^{\frac{1}{2}} Sc^{\frac{1}{3}} \quad (68)$$

A funkcija F je ista za F_T i F_M :

$$F(B) = (1+B)^{0.7} \frac{\ln(1+B)}{B} \quad (69)$$

Konačni algoritam za kalkulaciju prijelaza mase i energije je:

1. procijeniti Y_{VS} na površini kapljice;
2. naći prosječne vrijednosti fizikalnih svojstava $\overline{\rho}, \overline{c_{pF}}, \overline{c_{pg}}, \overline{k_g}, \overline{\mu_g}, \overline{\beta_g}$;
3. izračunati Nu_0 i Sh_0 ;
4. dobiti B_Y, F_M, Sh^* i maseni protok iz jednadžbe (62);
5. pretpostaviti vrijednost B_T koristeći vrijednost iz prijašnjeg vremenskog koraka;
6. izračunati izmijenjeni Nusselt-ov broj Nu^* i promijeniti vrijednost broja prijenosa topline B_T tako da usporedimo dvije promjene toka mase iz jednadžbe (62) i (63)

$$B_T = (1 + B_Y)^\Phi - 1 \quad (70)$$

Gdje je Φ :

$$\Phi = \frac{\overline{c_{pF}} Sh^* 1}{\overline{c_{pg}} Nu^* Le} \quad (71)$$

Ako je korekcija za B_T prevelika, vraćamo se na korak broj 5 algoritma. Zatim izračunamo izmijenjenu toplinu:

$$Q_S = \dot{m} \left(\frac{\overline{c_{pF}} (T_\infty - T_S)}{B_T} - L(T_S) \right) \quad (72)$$

Prednost ovoga modela je da nema ograničenja na vrijednost Lewis-ovog broja, dok je nedostatak iteracijski proces.

2.8.3. Podmodeli za stvaranje novih kapljica

Današnje 3D simulacije za gibanje modela spreja rješavaju jednadžbe za masu, količinu gibanja i promjene uslijed međudjelovanja između kapljica i plina. Simulacije također uzimaju u obzir fenomene sudara i sraščivanja kapljica. Modeli spreja koji se najviše koriste za raspad kapljica baziraju se na analizi nestabilnosti mlaza ubrizgane kapljevine iz otvora sapnice (kod Wave modela), ili po analogiji sustava masa-opruga-prigušnik (za TAB model).

Oba modela traže definiranje određenih empirijskih konstanti. Uzimajući u obzir da mehanizam koji kontrolira atomizaciju još uvijek nije u potpunosti shvaćen, usporedbe kalkulacija i eksperimentalnih podataka duž različitih radnih uvjeta ubrizgavanja pomažu kod shvaćanja utjecaja konstanti modela raspada i njihovo predviđanje.

2.8.3.1. Standardni Wave model razdvajanja kapljica

Rast nestabilnosti na površini kapljice povezan je s valnom duljinom i drugim fizikalnim i dinamičkim parametrima od ubrizganog goriva i domene fluida [13]. Postoje dva režima razdvajanja. Jedan za velike brzine i jedan za male brzine razdvajanja Rayleighovog tipa. Za prvi slučaj veličina nastalih kapljica je postavljena jednaka valnoj duljini najbrže rastućoj ili najvjerojatnijoj nestabilnoj površini vala. Rayleighov tip razdvajanja proizvodi kapljice koje su veće od originalnih roditeljskih kapljica (eng. *parent drops*). Ovaj režim nije važan za sisteme ubrizgavanja visokog tlaka.

Pristup Reitz-Diwakar modela koristi se kod *Wave* modela za smanjenje radijusa roditeljskih kapljica.

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{(r - r_{\text{stable}})}{\tau_{\alpha}} \quad (73)$$

Pri čemu je τ_{α} vrijeme razdvajanja modela, te se računa:

$$\tau_{\alpha} = \frac{3.726 \cdot C_2 \cdot r}{\Lambda \cdot \Omega} \quad (74)$$

Konstanta C_2 ispravlja karakteristično vrijeme razdvajanja i varira od jedne sapsnice do druge. r_{stable} je polumjer proizvedenih kapljica, koji je proporcionalan valnoj duljini Λ najbrže rastućeg vala na površini kapljevine.

$$r_{\text{stable}} = C_1 \cdot \Lambda \quad (75)$$

Vrijednost konstante C_1 koja je preuzeta iz Reitzovog rada, treba ostati na vrijednosti od 0.61.

Valna duljina Λ i faktor rasta Ω definirani su:

$$\Lambda = 9.02 \cdot r \frac{(1 + 0.45 + Oh^{0.5})(1 + 0.4 + T^{0.7})}{(1 + 0.87 + We_g^{1.67})^{0.6}} \quad (76)$$

$$\Omega = \left(\frac{\rho_g r^3}{\sigma} \right)^{-0.5} \frac{0.34 + 0.38 + We_g^{1.5}}{(1 + Oh)(1 + 1.4 + T^{0.6})} \quad (77)$$

Uvodeći pri tome Reynoldsov (Re) i Ohnesorgeov broj (Oh), kao i $T = Oh * We^{0.5}$.

2.8.3.2. TAB model razdvajanja kapljica

Razdvajanje se modelira po analogiji između oscilirajuće kapljice i sustava masa opruga prigušnik. Vanjska sila je pretpostavljena prema analognoj aerodinamičnoj sili, sila opruge je analogna površinskoj napetosti, a prigušne sile su analogne viskoznosti kapljevine.

$$\ddot{y} = \frac{C_F}{C_b} \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{u^2}{r^2} - \frac{C_k \sigma}{\rho_l r^3} y - \frac{C_d \mu_l}{\rho_l r^2} \dot{y} \quad (78)$$

Gdje je y bezdimenzijsko pomicanje ekvatora kapljice od njezinog ravnotežnog položaja, ρ_g i ρ_l su gustoća plina i kapljevine, u je relativna brzina između plina i kapljice, r je polumjer kapljice, σ površinska napetost, μ_l viskoznost tekućine, C_F , C_b , C_k , i C_d su bezdimenzijske konstante određene (utvrđene) matematičkom analizom i eksperimentima.

Početna kapljica oscilira u smjeru normale prema smjeru ubrizgavanja. Ukoliko je $y > 1$, početna kapljica se razdvaja i nastaju manje kapljice. Njihova brzina u smjeru normale je jednaka normalnoj oscilirajućoj brzini početne kapljice u trenutku razdvajanja. Kut spreja se računa samim modelom i nije ga potrebno definirati od strane korisnika. Srednji Sauter polumjer se dobiva iz jednadžbe očuvanja energije:

$$\frac{r}{r_{32}} = 1 + \frac{8 \cdot K}{20} + \frac{\rho_l r^3}{\sigma} y^2 \left(\frac{6 \cdot K - 5}{120} \right) \quad (79)$$

Koristeći taj novi polumjer, *chi-square* razdioba vjerojatnosti se formira i njezinim korištenjem se dobiva raspadnuta (eng. *child*) kapljica. Konstanta K je omjer veličina početnih i raspadnutih kapljica, i može se podesiti. Veća vrijednost znači manje kapljice poslije razdvajanja. Osim toga moguće je izabrati između dva stupnja slobode *chi-square* funkcije.

2.9. Flm kapljevine na stjenci

Nakupljanje kapljevine na stjenci posljedica je nepotpunog isparavanja, i sudara ubrizganih kapljica sa stjenkom. To je negativni fenomen koji između ostaloga utječe i na smanjivanje performansi motora s unutrašnjim izgaranjem (MSUI) te povećava emisiju onečišćujućih tvari. Brzina filma je svega nekoliko posto brzine zraka, a uzrok tome je velika razlika u gustoći kapljevine i zraka (plina). Posljedica toga je nakupljanje kapljevite faze goriva na stjenci.

2.9.1. Matematički model

Osnovne pretpostavke i pojednostavljenja modela za film kapljevine na stjenci su sljedeća:

- strujanje plinske faze i filma tekućine na stjenci tretiraju se kao dvije različite faze: veza između dvije faze postiže se modificiranim setom rubnih uvjeta temeljenih na polu-empirijskim relacijama;
- debljina filma je izrazito mala u odnosu na promjer strujanja plinske faze, nije potrebno prilagođavanje mreže kontrolnih volumena u odnosu na površinu filma;
- zbog tankog filma i male brzine, trenje stjenke i smično naprezanje dominiraju filmom – jednadžba količine gibanja može se izostaviti;
- temperatura stjenke je ispod Leidenfrostove točke;
- valovita površina filma modelirana je srednjom debljinom filma sa superponiranom hrapavošću;
- pretpostavlja se da je srednja površina filma paralelna sa stjenkom.

Relevantni fizički utjecaji koje treba uzeti u obzir su:

- površinska smična sila;
- gradijent tlaka;
- gravitacijsko ubrzanje;
- isparavanje filma;
- prijenos topline između filma, stjenke, i plinske faze;
- interakcija između spreja i stjenke;
- otkidanje filma.

Jednadžba debljine filma je osnovna jednadžba za strujanje filma kapljevine na stjenci. Jednadžba debljine filma predstavlja modificiranu jednadžbu kontinuiteta gdje se umjesto mase nalazi debljina filma. Jednadžba debljine filma u Kartezijском koordinatnom sustavu je:

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} + \frac{\partial \delta u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \delta u_2}{\partial x_2} = \frac{1}{\rho A} (S_{mD} - S_{mV}) \quad (80)$$

Gdje je δ debljina filma, ρ gustoća filma, c su komponente brzine filma, S_{mD} i S_{mV} su izvorski i ponorski članovi, a A je površina filma. Ako pretpostavimo da su izvorski članovi zadani, jednadžba (80) se može riješiti samo ako su poznate komponente brzine. Stoga je nužno odrediti komponente brzine filma.

Da bi riješili jednadžbu debljine filma, potrebno je poznavati prosječnu brzinu filma. Za laminarno strujanje ona glasi:

$$\bar{u}_L = \frac{\delta}{6\mu} \left[2\delta \left(\rho g - \frac{dp}{dx} \right) + 3\tau_l \right] \quad (81)$$

Dok za turbulentno strujanje jednadžba glasi:

$$\bar{u}_T = \frac{49}{594} \left(\frac{\delta}{\nu} \right)^{\frac{4}{7}} \frac{7\delta \left(\rho g - \frac{dp}{dx} \right) + 9\tau_l}{\rho^{\frac{11}{14}} \left(\rho g \delta - \frac{dp}{dx} \delta + \tau_l \right)^{\frac{3}{14}}} \quad (82)$$

Gdje je ν kinematička viskoznost, a $\frac{dp}{dx}$ gradijent tlaka filma. Iz jednadžbi se vidi da je brzina filma ovisna o smičnom naprezanju τ_l . To smično naprezanje je zapravo naprezanje koje uzrokuje otpor trenja τ_w strujanju zraka.

$$\tau_w = \rho u^2 \left[\frac{1}{k} \ln \left(\frac{y}{\nu} \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \right) + C \right]^{-2} \quad (83)$$

Jedandžba (83) mora se riješiti iteracijskim putem pri čemu se koristi najveći dio procesorskog resursa koji je na raspolaganju. Za vrijednosti y^+ manje od 11.06, koristi se linearni profil laminarnog podsloja. Tada se naprezanje može prikazati kao:

$$\tau_w = \mu \frac{u_{||}}{d_{zp}} \quad (84)$$

C je konstanta ovisna o hrapavosti, a definirana je Reynoldsovim brojem za hrapavost:

$$Re_{ks} = \frac{k_s u_\tau}{\nu} \quad (85)$$

Gdje k_s označava pješčanu hrapavost i određuje se:

$$k_s = \psi_T(\tau_w) \cdot 2\delta \quad (86)$$

$$\psi_T = 0.1 \left[\ln(\tau_w + 2) + 0.022\tau_w + 6.57 \right] \quad (87)$$

Koristeći Reynoldsov broj hrapavosti za tri različita područja hrapavosti, konstanta C će iznositi:

- za hidraulički glatko područje $Re_{ks} \leq 5$:

$$C = 5.2 \quad (88)$$

- za prijelazno područje $5 < Re_{ks} \leq 70$:

$$C = 5.4494 + \left(3.0506 - \frac{1}{k} \ln \text{Re}_{ks} \right) \cdot \sin [0.595(\ln \text{Re}_{ks} - 1.61)] \quad (89)$$

- za grubo područje $\text{Re}_{ks} > 70$:

$$C = 8.5 - \frac{1}{k} \ln \text{Re}_{ks} \quad (90)$$

Time su definirani svi potrebni odnosi za definiranje jednadžbe debljine filma. Iterativni postupak započinje sa inicijalnom vrijednosti τ_{w0} i postavlja prvu aproksimaciju za k_s i Re_{ks} . Zatim se odabire vrijednost C , a nova vrijednost τ_w računa se iz jednadžbe (83), pri čemu se stara vrijednost τ_w koristi na desnoj strani jednadžbe. Postupak se ponavlja dok vrijednost τ_w dovoljno ne konvergira. Naposljetku, komponente brzine filma procjenjuju se ovisno o konvergiranoj vrijednosti τ_w , te je onda moguće riješiti jednadžbu debljine filma.

2.9.2. Model interakcije spreja i stjenke

U odnosima sprej-stjenka postoje četiri različita režima koja ovise o bezdimenzijskoj temperaturi stjenke, i bezdimenzijskom parametru K [34]. Bezdimenzijska temperatura definirana je kao:

$$T^* = \frac{T_w}{T_s} \quad (91)$$

Gdje je T_w temperatura stjenke, a T_s temperatura zasićenja kapljice.

Bezdimenzijski parametar K definiran je kao:

$$K = \frac{(\rho_d d_d)^3 u_{d,\perp}^5}{\sigma_d^2 \mu_d^4} \quad (92)$$

Gdje je ρ_d gustoća kapljice, d_d promjer kapljice, $u_{d,\perp}$ normalna komponenta brzine kapljice, σ_d površinsko naprezanje na granici kapljica-plin, i μ_d dinamička viskoznost kapljice.

- Nakupljanje

Pojavljuje se kod malih brzina kapljice, i kada je $T^* < 1.1$;

Sve kapljice koje sudjeluju u udaru se nakupljaju i tvore film kapljevine na stjenici.

- Raspršivanje

Pojavljuje se kod velikih brzina kapljice, i kada je $T^* < 1.1$;

Čestice se raspršuju, i nove (manje) kapljice se stvaraju nakon udara.

Dio mase kapljica prenosi se na film kapljevine na stjenci.

- Odbijanje

Pojavljuje se kod malih udarnih brzina, i kada je $T^* > 1.1$;

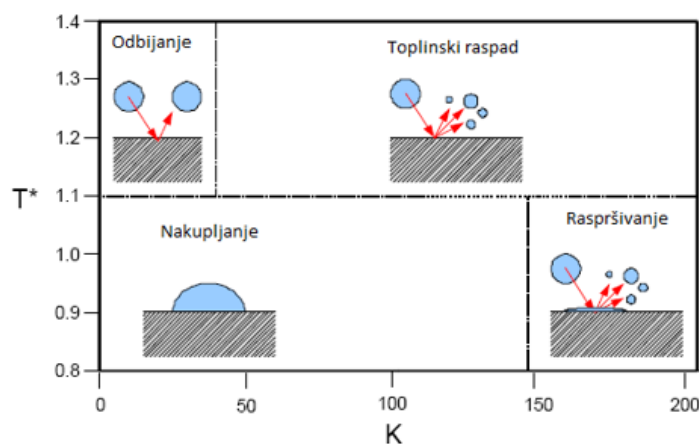
Formira se sloj pare između kapljice i stjenke koji sprječava izravan kontakt kapljice sa stjenkom. Posljedica toga je refleksija udarne kapljice, odnosno odbijanje (Leidenfrostov efekt).

Ne dolazi do formiranja filma kapljevine na stjenci.

- Toplinski raspad

Pojavljuje se kod velikih udarnih brzina, i kada je $T^* > 1.1$;

Kapljice se raspadaju u sekundarne kapljice. Ne dolazi do formiranja filma kapljevine na stjenci.



Slika 9. Režimi interakcije sprej-stjenka [15]

2.10. Selektivna katalitička redukcija

Selektivna katalitička redukcija je katalitički proces u kojem se smjesa zraka i amonijaka u obliku plina ili vodene otopine uree dodaje smjesi dimnih plinova koja pri tome prolazi kroz katalizator. Prolazeći kroz katalizator, amonijak reagira sa NO_x , te nastaje dušik i vodena para. Osnovne kemijske reakcije koja se odvija u reaktoru mogu se opisati sljedećim izrazima [7]:

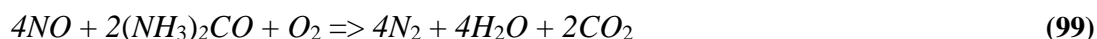
- Ako se u reakciji koristi amonijak ili otopina amonijaka stehiometrijske reakcije su sljedeće:



- Sporedne reakcije koje se odvijaju u slučaju prisutnosti sumpora u gorivu:



- U slučaju korištenja uree umjesto čistog amonijaka ili otopine amonijaka stehiometrijska reakcija je sljedeća:



Kada se vodena otopina uree ubrizga u struju vrućih dimnih plinova, prije SCR-katalizatora, vodeni sadržaj će ispariti iz vodene otopine uree. Zatim će doći do stvaranja amonijaka prilikom termalnog raspada amonijaka, i hidrolize izocijanske kiseline.

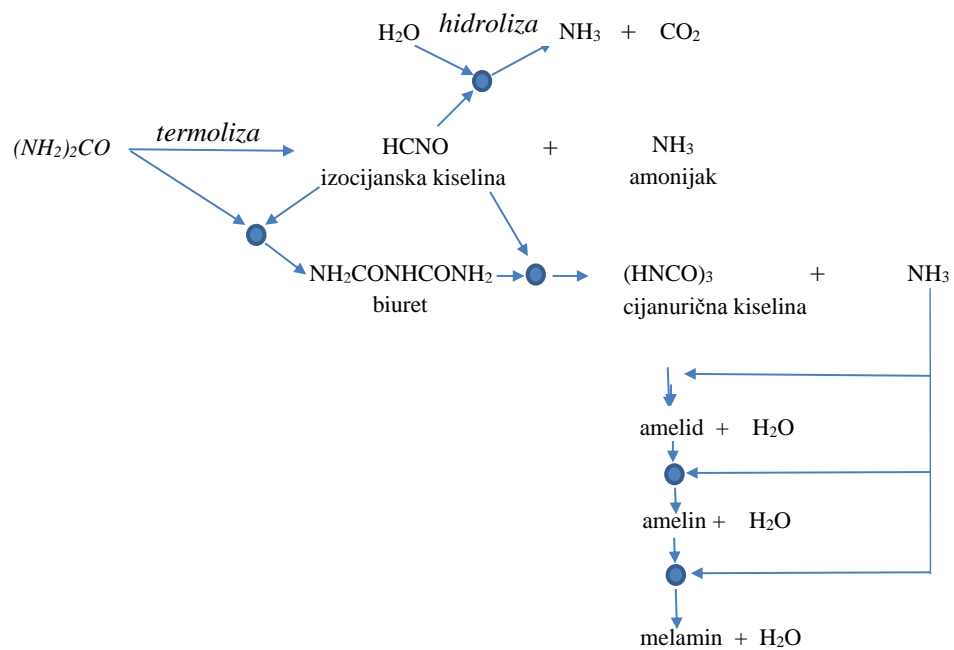
Termalni raspad uree prikazan je sljedećom jednačinom:



Hidroliza izocijanske kiseline glasi:



Proizvedeni amonijak u različitim deNO_x reakcijama sada ima ulogu kao reducens.



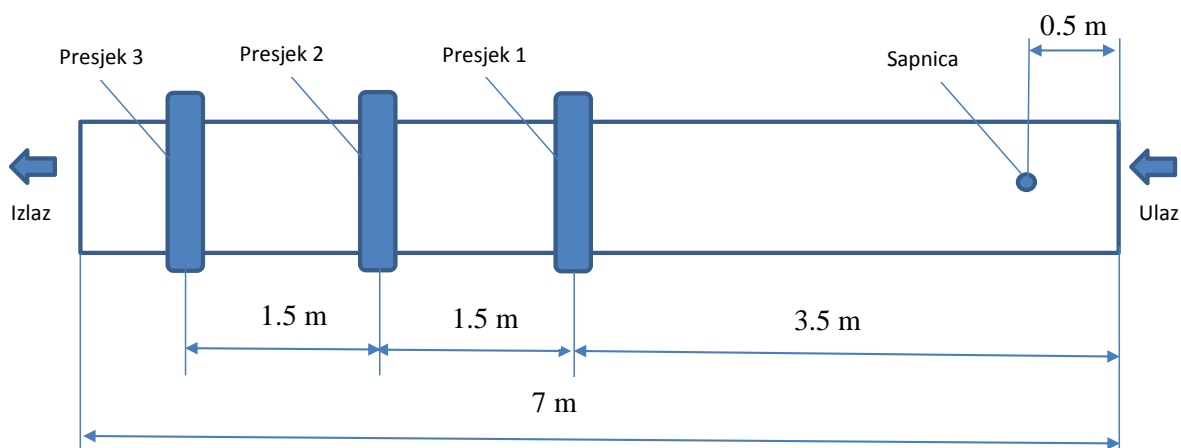
Slika 10. Reakcijska shema uree [16]

3. NUMERIČKA SIMULACIJA PROCESA UBRIZGAVANJA UREE

U ovom poglavlju prikazat će se numerička simulacija procesa ubrizgavanja uree. Pri tome će se prikazati eksperimentalne postavke korištene za ovaj rad, postavke numeričke simulacije i rezultati pomoću kojih će se izvršiti validacija. Također će se prikazati rezultati koji se odnose na realnu geometriju katalizatora, gdje će se sukladno zadatku gledati različiti smjerovi ubrizgavanja, te različita veličina čestica.

3.1. Eksperimentalne postavke

Eksperimentalne postavke preuzete su iz akademskog članka *Numerical prediction on the characteristic spray induced mixing and thermal decomposition of urea solution in SCR system* [18]. Eksperiment se vrši ubrizgavanjem vodene otopine uree unutar cilindrične cijevi duljine 7 metara. Promjer cijevi je 300 mm. Sapnica za ubrizgavanje je postavljena 0.5 m od ulaza u cijev. Kut ubrizgavanja spreja iznosi 70° , pri čemu se sprej ubrizgava paralelno sa strujom dimnih plinova, odnosno paralelno s centralnom osi u cijev. Tri presjeka postavljena su uzduž cijevi u svrhu uzorkovanja dimnih plinova. Prvi presjek je postavljen 3.5 m od ulaza, drugi 5 m od ulaza, a treći 6.5 m od ulaza.



Slika 11. Prikaz postavki eksperimentalnog mjerenja

U generatoru dimnih plinova dolazi do izgaranja LNG-a (eng. *Liquefied natural gas*) pri čemu nastaju dimni plinovi temperature 1200°C . Parametri izgaranja plinova iz LNG ložišta, koji ulaze u cijev, dani su sljedećom tablicom. Vrući dimni plinovi proizvedeni u LNG ložištu

miješaju se sa hladnim zrakom da bi se dobio protok i temperatura dimnih plinova koji odgovaraju onima u realnim motorima s unutarnjim izgaranjem.

Tablica 2. Parametri izgaranja plinova iz LNG ložišta

Temperatura ispušnih plinova [°C]	Prosječna brzina [m/s]	Gustoća ispušnih plinova [kg/m ³]	Volumni protok [m ³ /min]	NH ₃ 100% pretvorba [ppm]
300	6.55	0.616	27.78	454.7
	9.04		38.35	329.5
350	6.39	0.567	27.08	507.2
	9.08		38.49	356.9
	10.77		45.69	300.6
400	6.03	0.524	25.55	580.7
	8.33		35.33	420.0
	10.84		45.97	322.8

Sastav dimnih plinova zadan je sljedećom tablicom:

Tablica 3. Sastav dimnih plinova na ulazu u cijev

Plin	Molni udio [mol/mol]
N ₂	0.81436
O ₂	0.1567
H ₂ O	0.01234
CO ₂	0.0166
NH ₃	0
HNCO	0

Vodena otopina uree ubrizgavana je protokom od 0.018 dm³/min. Ukoliko se sva ubrizgana otopina uree pretvori u amonijak, protok amonijaka će biti 6 dm³/min. Proizvodnja amonijaka je mjerena FTIR spektrometrom (Model No.I1200 MIDAC Co.). Dio za uzorkovanje FTIR uređaja se čistio svakih 5 minuta koristeći dušik, prvenstveno zbog toga da bi se očistile nečistoće i zaostali nusprodukti tijekom termalnog raspada uree. Razdioba veličine čestica

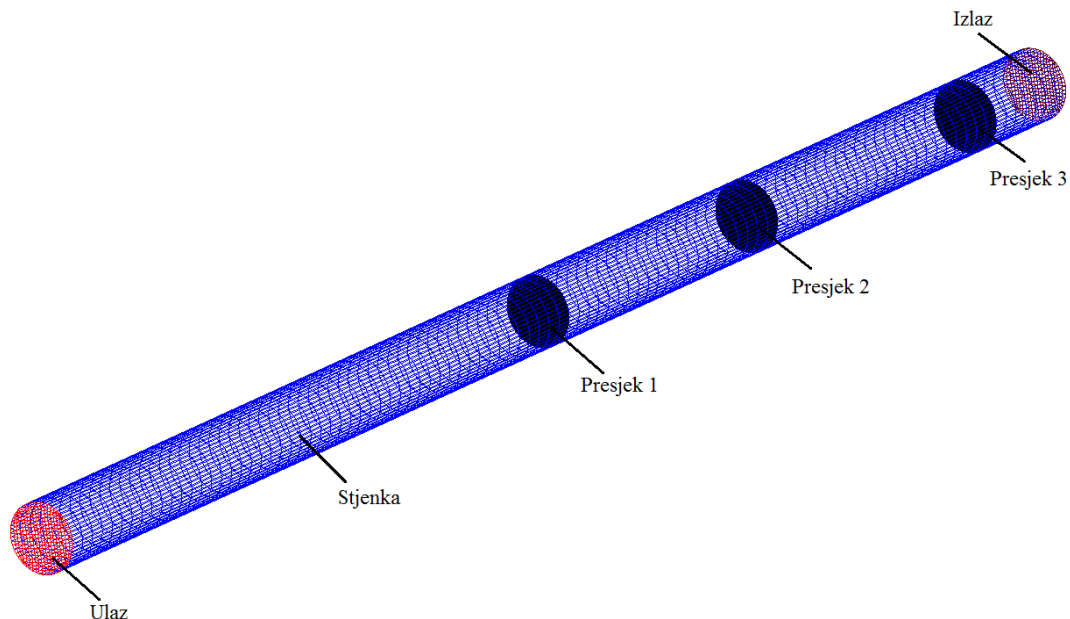
spreja može se aproksimirati Rosin-Rammlerovom distribucijom sa pripadajućim koeficijentima koji su prikazani Tablica 4.

Tablica 4. Eksperimentalni podaci ubrizgavanja otopine uree

	Slučaj 1	Slučaj 2	Slučaj 3
X	62.3	45.6	44
Q	2.5357	2.7491	3.2657
u_d [m/s]	6.7	9.5	10.6

3.2. Postavke numeričke simulacije

Parametri numeričke simulacije postavljeni su sukladno eksperimentu. Tako je vremenski korak postavljen na 10^{-04} sekundu, računajući pri tome da će se obuhvatiti tranzijentne pojave i omogućiti stabilna kalkulacija. Unutar svakog vremenskog koraka još se vrši unutrašnja kalkulacija samog spreja sa njemu svojstvenim (manjim) vremenskim korakom.



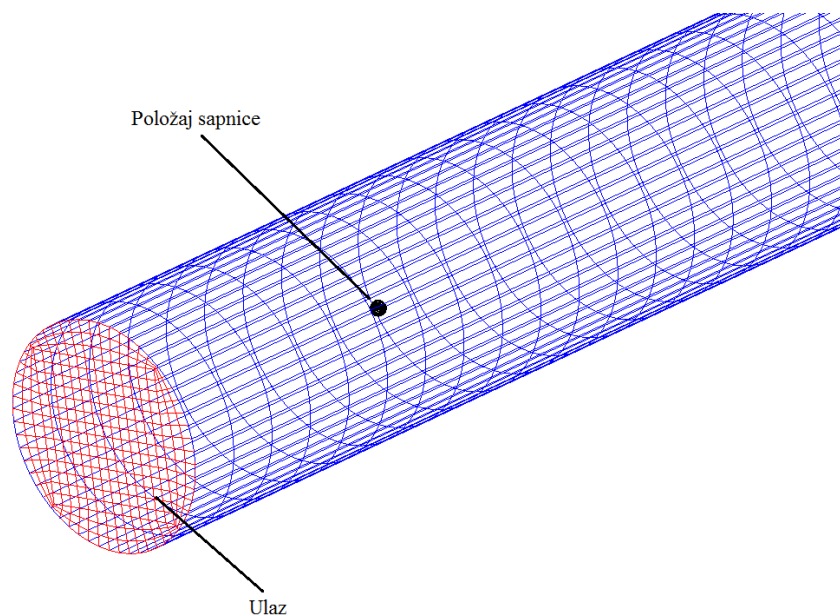
Slika 12. Prikaz mreže sa rubnim uvjetima

Rubni uvjeti na ulazu određeni su temperaturama i brzinama u rasponu 300-450°C odnosno 6.03-10.99 m/s, sukladno eksperimentu. Valja naglasiti da su dotične temperature i brzine

odabrane prvenstveno zbog toga što su bliske temperaturama i brzinama dimnih plinova u ispušnom sustavu motora sa unutrašnjim izgaranjem. Također jedan od ulaznih rubnih uvjeta je i turbulentna kinetička energija za koju je preuzeta preporučena veličina od $0.001 \frac{m^2}{s^2}$, te karakteristična duljina turbulencije čija vrijednost iznosi 0.03 m, odnosno 10% promjera cijevi što je opravdana pretpostavka za razvijeno turbulentno strujanje. Uzimajući u obzir da je u cijevi prisutno razvijeno turbulentno strujanje, dotična pretpostavka se može prihvatiti kao zadovoljavajuća. Sastav dimnih plinova na ulazu u cijev preuzet je iz eksperimentalnog mjerenja izlaznih emisija LNG ložišta, pri čemu je pretpostavljeno potpuno izgaranje sa izlaznim produktima: N_2 , O_2 , H_2O i CO_2 . Izlazni rubni uvjet je definiran statičkim atmosferskim tlakom okoline od 1 bar. Adijabatski rubni uvjet pretpostavljen je s obzirom na vrijeme retencije koje je izrazito kratko (<1sec). Korištenjem početnih uvjeta koji su bliski konačnom rješenju, simulacija će brže konvergirati te će se računalo manje opteretiti.

Primijenjena je zadana implicitna diskretizacija vremenske domene prvoga reda, pri čemu je korišten SIMPLE algoritam sprege polja brzine i tlaka. Za model turbulencije odabran je k- ϵ model. Uzvodna shema diferencije odabrana je za jednadžbe turbulenciju, energetske jednadžbu i skalarnu jednadžbu. Za jednadžbu kontinuiteta je odabrana Shema centralnih razlika, dok se za jednadžbu količine gibanja koristi kombinirana shema između uzvodne i sheme centralnih razlika s faktorom miješanja 0.5. Kao kriterij konvergencije postavljeno je da reziduali moraju pasti četiri reda veličine.

Kao što je u eksperimentalnim postavkama navedeno, distribucija spreja zadana je Rosin-Rammlerovom razdiobom. Sapnica je udaljena 0.5 metara u z-smjeru koordinatnog sustava od ulazne površine. Temperatura ubrizgavane vodene otopine uree kroz sapnicu iznosi 20 °C. Kut ubrizgavanja kapljevine iznosi 70°, prema eksperimentalnim postavkama.



Slika 13. Prikaz položaja sapnice unutar mreže

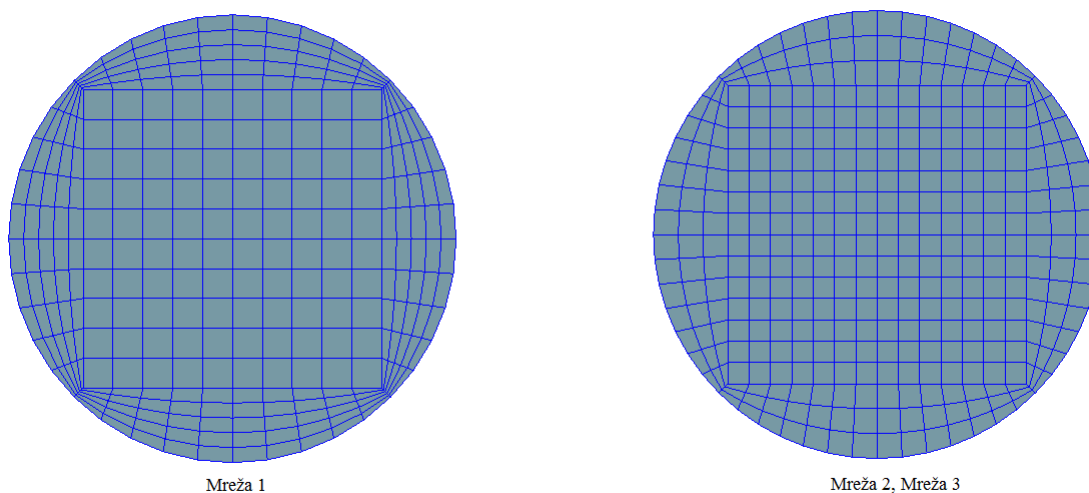
3.3. Generiranje mreže kontrolnih volumena

Mreža kontrolnih volumena generirana je u programskom paketu AVL- FIRE Workflow Manager, pomoću predprocesora FAME. Mreža je cilindričnog oblika, s dimenzijama sukladno eksperimentalnim postavkama [18]. Nadalje, potrebno je definirati kvalitetnu mrežu, odnosno odabrati mrežu koja udovoljava zahtjevima točnosti, a ujedno predstavlja razumne zahtjeve na računalne resurse. Fizikalne veličine prema kojima se validirala kvaliteta mreže su: srednja brzina, polje turbulentne kinetičke energije, polje disipacije kinetičke energije i turbulentna brzina. Valja naglasiti da se nije razmatrao isključivo cilindrični raspored na ulaznoj površini jer je iskustveno dokazano da je takva mreža izrazito nestabilna te sklona divergiranju. Za daljnja razmatranja i odabir mreže uzet je predefinirani tip mreže Cylinder Hexahedron.

Tablica 5. Prikaz Cylinder Hexahedron mreža koje se razmatraju

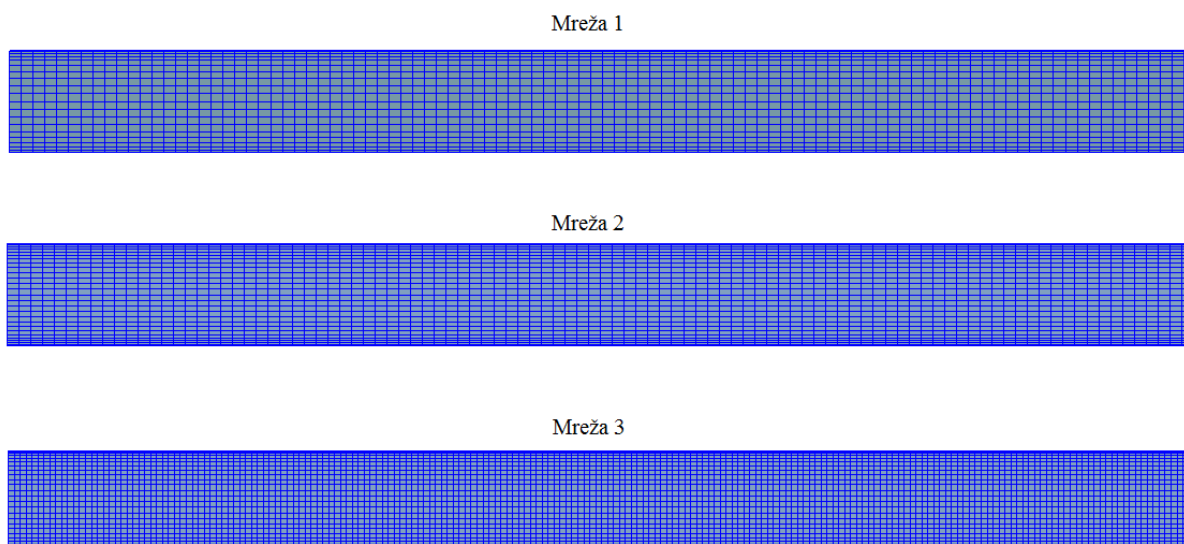
Cylinder Hexahedron			
Naziv mreže	Mreža 1	Mreža 2	Mreža 3
Broj ćelija unutar hexa dijela	10	14	14
Broj ćelija unutar prstena, a izvan hexa dijela	10	6	6
Broj ćelija po duljini	100	100	200
Broj kontrolnih volumena	30 000	36 400	72 800

U Tablica 5 prikazane su tri mreže koje će se razmatrati zajedno s pripadajućim brojem i rasporedom ćelija po mreži. Izgled mreža prikazan je na Slika 14.



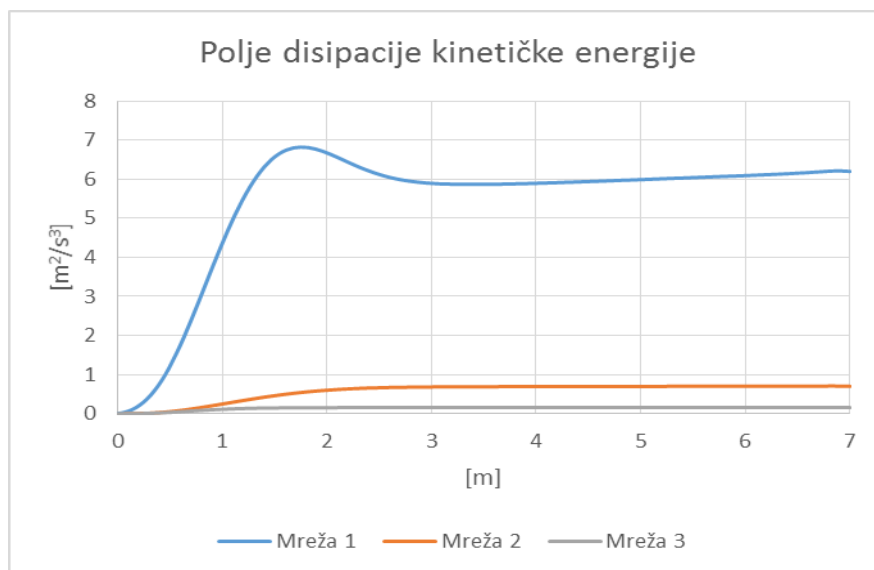
Slika 14. Raspored ćelija na prednjoj (zadnjoj) strani cilindra

Iz Slika 14. vidljivo je „Mreža 2“ i „Mreža 3“ imaju jednaki poprečni presjek. Nešto drugačiji hexa raspored ima „Mreža 1“, što je također vidljivo na Slika 14. Raspored ćelija uzduž cijevi prikazan je na Slika 15.



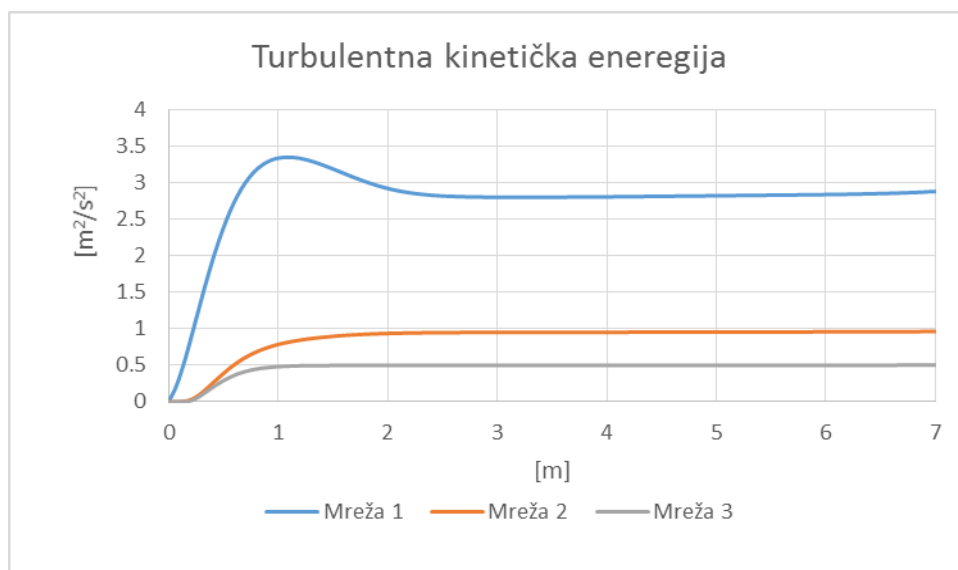
Slika 15. Raspored ćelija uzduž cilindra

Nadalje su prikazani grafovi koji prikazuju: prosječnu disipaciju kinetičke energije, turbulentnu kinetičku energiju, turbulentnu brzinu i srednju brzinu uzduž cijevi.

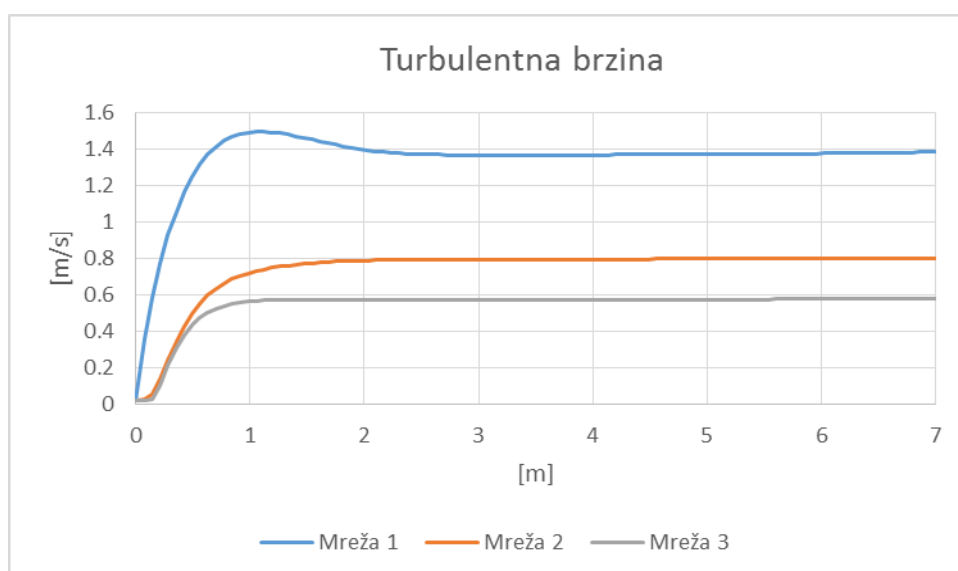


Slika 16. Polje disipacije kinetičke energije

Slika 16. pokazuje da najmanje vrijednosti disipacije kinetičke energije ima „Mreža 3“, dok nešto veće vrijednosti ima „Mreža 2“. Znatno veće vrijednosti ima „Mreža 1“. Sličan trend se ponavlja i kod turbulentne kinetičke energije na Slika 17 te kod turbulentne brzine na Slika 18. Iz vrijednosti navedenih grafova može se generalno zaključiti da sve promatrane mreže teže vrijednostima dobivenima „Mrežom 3“, ali također treba uzeti u obzir činjenicu da „Mreža 2“, daje vrijednosti dovoljno blizu „Mreži 3“.

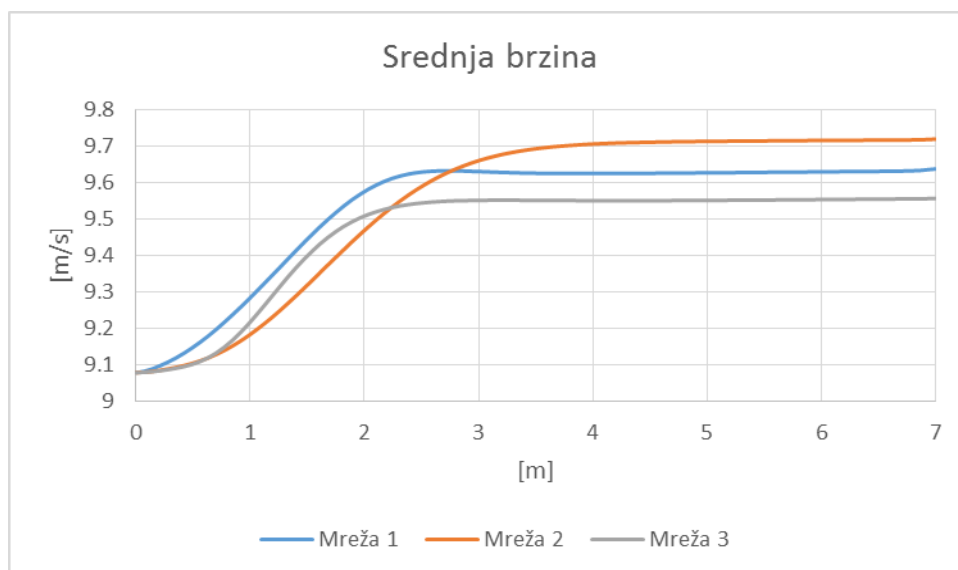


Slika 17. Turbulentna kinetička energija



Slika 18. Turbulentna brzina

Iz Slika 19. vidljivo je da „Mreža 2“ ima najveću srednju brzinu te da je slijede „Mreža 1“ te zatim „Mreža 3“. Razlika između najviše i najniže stabilne brzine iznosi svega 0.2 m/s, što predstavlja relativnu razliku od $\approx 2\%$.

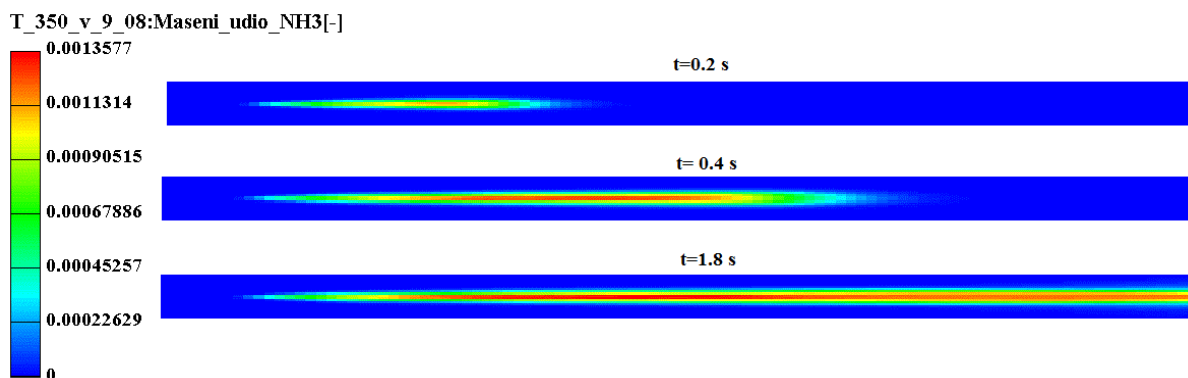


Slika 19. Srednja brzina

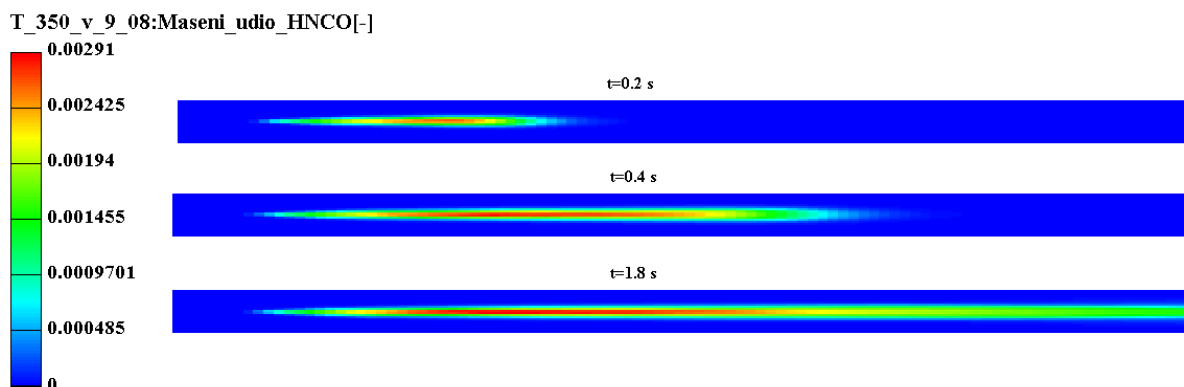
Iz svega navedenog može se generalno zaključiti da „Mreža 3“ daje najbolje vrijednosti za tražene zahtjeve. No usprkos toj činjenici, „Mreža 2“ je odabrana kao referentna mreža na kojoj će se vršiti simulacija. Razlog tome je što „Mreža 3“ zahtjeva znatno više računalnih resursa u usporedbi s „Mrežom 2“ čiji rezultati nisu znatno različiti od rezultata „Mreže 3“. „Mreža 1“ daje najlošije rezultate u usporedbi s ostalim mrežama te na kraju nije izabrana za mrežu na kojoj će se vršiti simulacija. U nastavku sve će se simulacije u „Kimovoj cijevi“ vršiti na „Mreži 2“.

3.4. Dekompozicija uree u cijevi

U ovom djelu rada numerički je riješeno i validirano ponašanje spreja (ubrizgane otopine uree) pri različitim temperaturama i različitim brzinama ispušnih plinova. Vrijednosti dobivene simulacijom će se usporediti s eksperimentalnim mjerenjima „Kimove, cijevi [18]. Za slučaj temperature dimnih plinova 350 °C i brzine od 9.08 m/s razmatrat će se raspodjela temperature, koncentracija H₂O, HNCO, NH₃ te udjela vode u spreju koji se ubrizgava.

Slika 20. Maseni udio NH_3

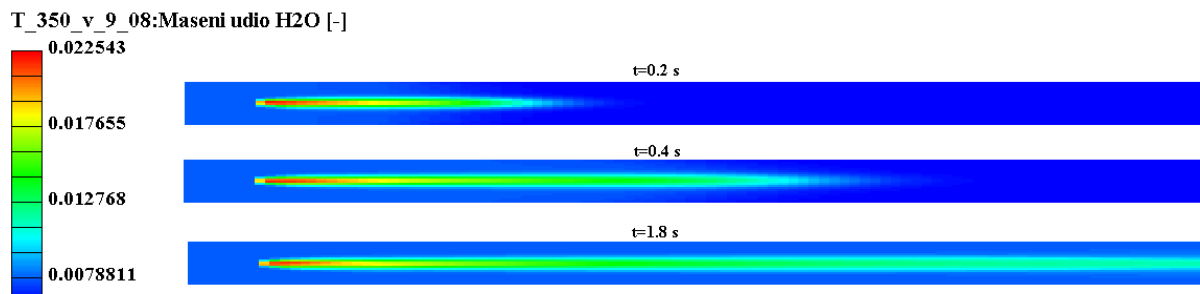
Slika 20. prikazuje koncentraciju NH_3 uzduž središnjeg presjeka cijevi i to za tri vremenska trenutka: za 0.2 sekunde, 0.4 sekunde i za 1.8 sekundi. Ovdje valja naglasiti da će upravo ta tri trenutka biti referentna za promatranje pojava u ovom poglavlju. Iz slike je vidljiv porast ubrizganog mlaza i koncentracije NH_3 , od 0.2 sekunde do 0.4 sekunde. Iako je pri 1.8 sekundi u drugoj polovici cijevi vidljiv lagani pad koncentracije NH_3 , zapravo se radi o relativnom padu. U trenutku kada koncentracija NH_3 prividno pada, povećava se koncentracija ugljičnog dioksida. CO_2 ima veću molarnu masu (44) od amonijaka (17.031). Ako uzmemo u obzir da je koncentracija NH_3 prikazana masenim udjelom, na slikama će biti vidljiv relativan pad, dok će apsolutna koncentracija zapravo ostati jednaka. Važno je za naglasiti da je ovdje uključen maseni udio amonijaka proizveden termolizom uree, ali i hidrolizom izocijanske kiseline.



Slika 21. Maseni udio HNCO

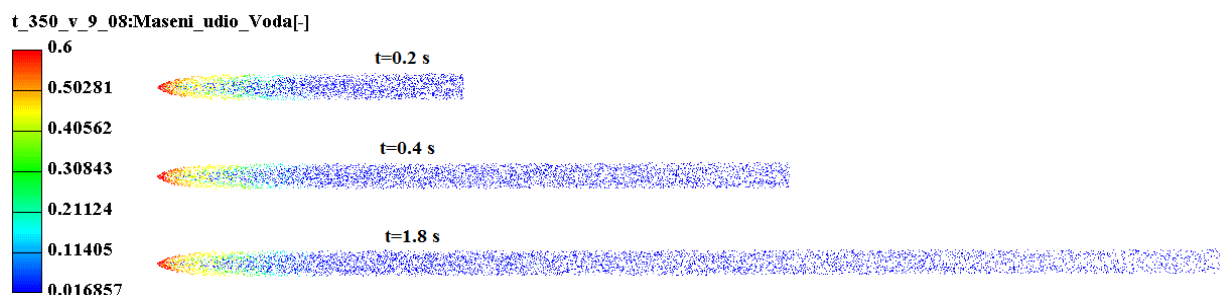
Kao i kod prethodne slike, tri (ista) vremenska trenutka odabrana su za promatranje pojava. Ovdje se promatra promjena koncentracije izocijanske kiseline. Nakon 1.8 sekundi vidljiv je porast koncentracije izocijanske kiseline koja je nastala kao produkt termolize. Porast

koncentracije izocijanske kiseline prisutan je približno sve do polovice cijevi, gdje zatim slijedi blagi pad koncentracije izocijanske kiseline. Pad koncentracije izocijanske kiseline je posljedica hidrolize izocijanske kiseline, pri čemu se proizvodi CO_2 i NH_3 .



Slika 22. Maseni udio H_2O

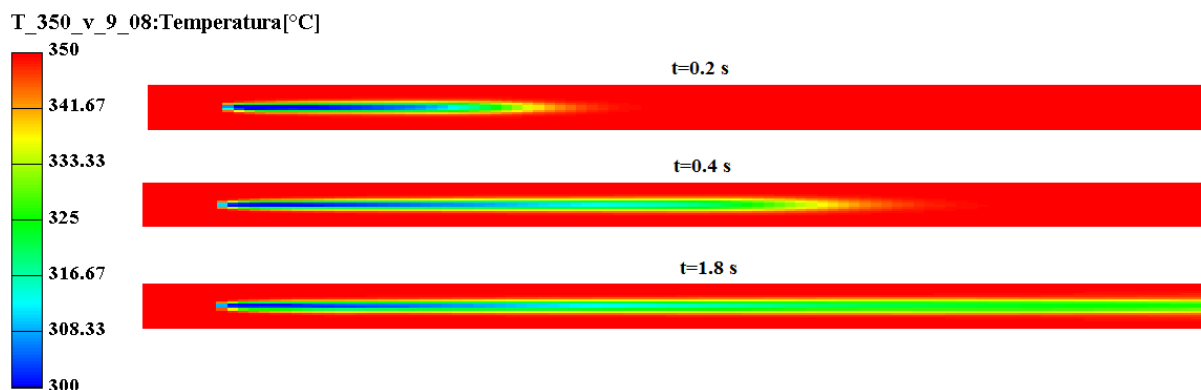
Pad koncentracije H_2O prisutan je uzduž cijevi. Uzrok pada koncentracije je isparavanje, odnosno sudjelovanje u hidrolizi pri čemu se troši H_2O , a proizvodi dodatni CO_2 i NH_3 . Na Slika 23. prikazan je maseni udio vode u spreju, gdje se također vidi nagli pad koncentracije H_2O , što je posljedica velike temperaturne razlike ubrizgane otopine uree i temperature dimnih plinova.



Slika 23. Maseni udio vode u spreju

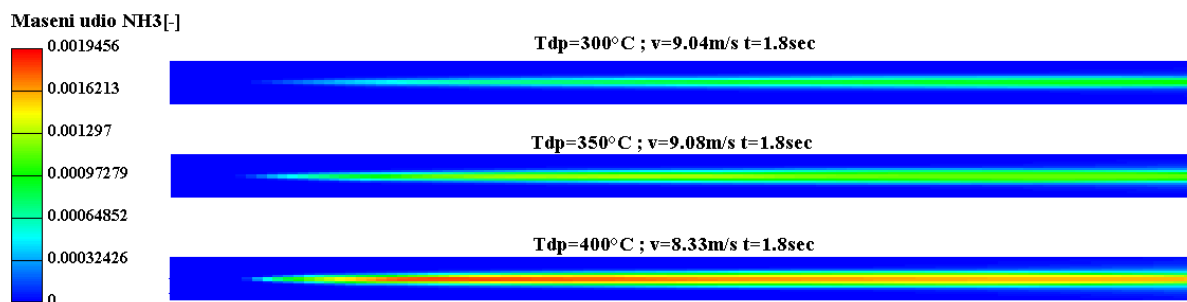
Temperatura unutar cijevi uvjetovana je temperaturom dimnih plinova, koja za ovaj slučaj iznosi $350\text{ }^\circ\text{C}$. Temperatura od približno $350\text{ }^\circ\text{C}$ bit će rasprostranjena unutar cijele duljine cijevi, osim u područjima uzduž horizontalne osi u kojemu je prisutan sprej otopine uree. U tom području temperatura će se mijenjati, i to na način da će relativno hladna otopina uree s temperaturom od $20\text{ }^\circ\text{C}$ biti ubrizgana u cijev pri čemu će to područje imati najmanju temperaturu u cijevi. Kako se ubrizgani sprej kreće prema izlazu, tako se koncentracija vode smanjuje te se temperatura povećava uslijed zagrijavanja kapljica spreja. Stoga, na izlazu

unutar područja spreja imamo nešto veću temperaturu nego na ulazu, dok uzduž cijevi izvan područja spreja imamo konstantnu temperaturu od 350 °C.



Slika 24. Temperatura uzduž cijevi

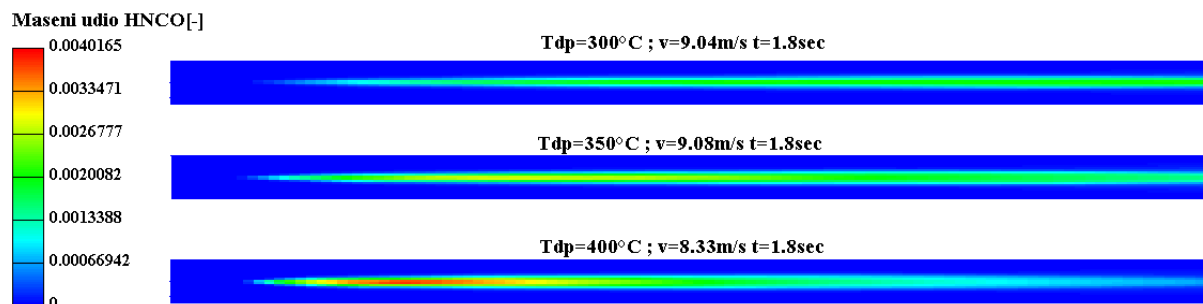
Nadalje će se razmatrati raspodjela temperature, koncentracija H_2O , $HNCO$, NH_3 i udjela vode u spreju koji se ubrizgava za tri slučaja temperature dimnih plinova pri jednoj odabranoj brzini (srednja), sukladno eksperimentu. Brzine za pojedine temperature su približno jednake, pa će se na temelju toga moći izvesti određeni zaključci vezani za utjecaj temperature dimnih plinova. Prvo će se promatrati koncentracija NH_3 uzduž cijevi, koja je prikazana na Slika 25.



Slika 25. Maseni udio NH_3

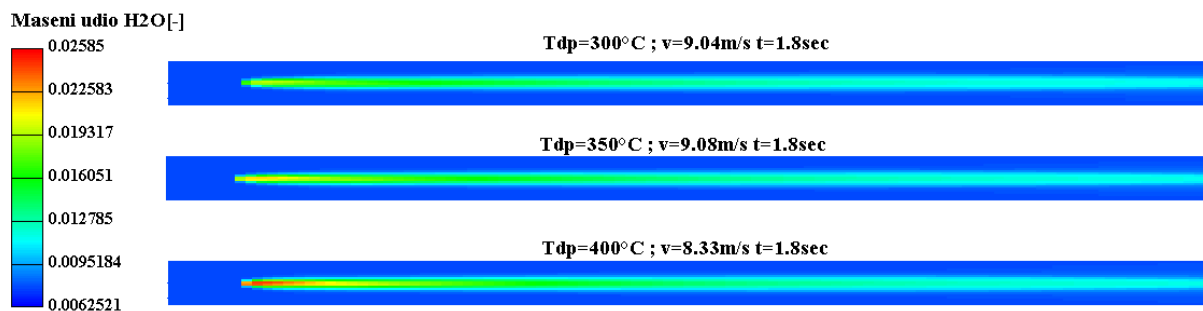
Iz Slika 25. vidljivo je da maseni udio NH_3 raste s temperaturom dimnih plinova. Razlog tome je činjenica da viša temperatura pri istoj brzini ubrizgavanja dimnih plinova i istom protoku vodene otopine uree, doprinosi bržem isparavanju vode iz u vodene otopine uree te pogoduje bržem odvijanju kemijskih reakcija termalne dekompozicije uree i hidrolize izocijanske kiseline koje su inherentno endotermne reakcije. Termalna dekompozicija uree kao posljedicu ima stvaranje izocijanske kiseline i amonijaka, pa je logično zaključiti da će se s povećanjem

brzine dekompozicije uree povećati koncentracija proizvedenih produkata. Također je pri 400 °C vidljiv lagani pad koncentracije NH_3 u drugoj polovici cijevi koji je prisutan kod sva tri slučaja, ali zbog relativno širokog raspona skale je slabije izražen na nižim temperaturama. Treba naglasiti da se radi o relativnom padu koncentracije, što je već prethodno objašnjeno.



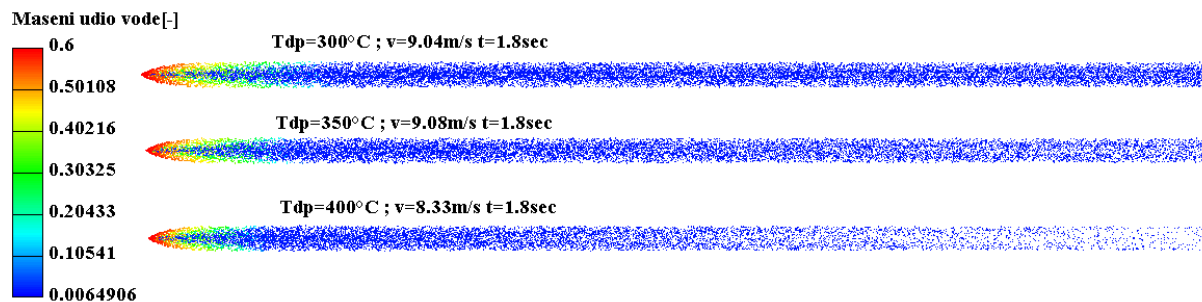
Slika 26. Maseni udio HNCO

Iz Slika 26. vidljivo je da je koncentracija HNCO najveća pri 400°C. Razlog tome je objašnjen u gornjem odlomku. Također se vidi pad koncentracije u drugoj polovici cijevi pri temperaturama 400°C i 350 °C. Pad koncentracije izocijanske kiseline je posljedica dodatne reakcije sa vodom, pri čemu će se proizvesti dodatni CO_2 i NH_3



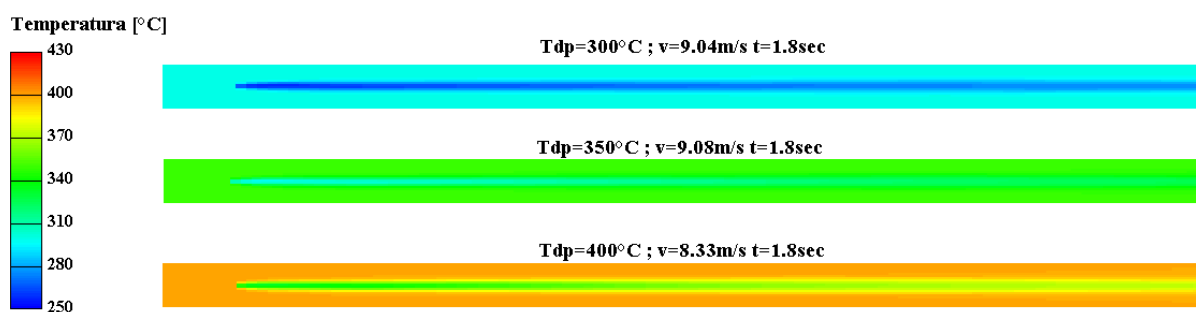
Slika 27. Maseni udio H_2O

Najveća koncentracija H_2O je u okolini sapnice. Udaljavanjem od sapnice koncentracija sve više pada. Malene kapljice će ispariti prije nego veće, stoga će se glavni pad temperature i maksimum koncentracije vodene pare javiti na mjestu početka ubrizgavanja u cijevi. Iz Slika 28. vidi se kako je pri višim temperaturama isparilo znatno više kapljica nego pri nižim temperaturama.



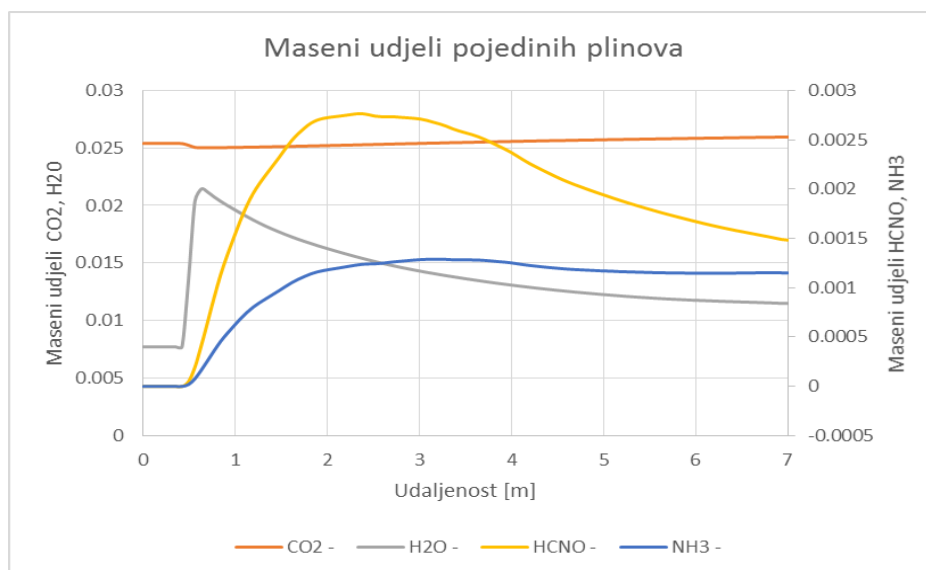
Slika 28. Maseni udio vode u spreju

Temperaturni profil unutar cijevi ovisit će prvenstveno o temperaturama dimnih plinova na ulazu u cijev. Tako ćemo pri 300 °C imati najnižu temperaturu po središnjoj osi cijevi, a pri 400 °C najvišu. Izvan područja spreja imamo temperature dimnih plinova sa ulaznim vrijednostima.



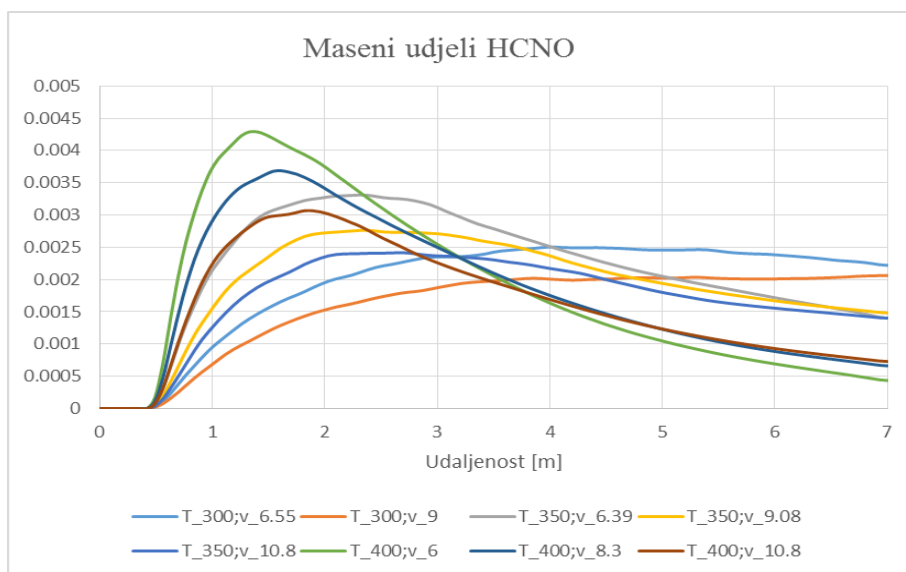
Slika 29. Temperatura uzduž cijevi

Maseni udjeli pojedinih plinova uzduž cijevi prikazani su na Slika 30. koja se odnosi na temperaturu 350 °C i brzinu od 9.08 m/s, u vremenskom trenutku od 1.8 sekunde kada je uspostavljeno kvazistacionarno stanje. Iz slike je vidljivo da maseni udio vode pada (zbog hidrolize), kao i maseni udio H₂CO (zbog sudjelovanja u hidrolizi). Nakon početnog rasta, vrijednost NH₃ je približno konstantna, kao i vrijednost CO₂ kroz cijelu dužinu cijevi.



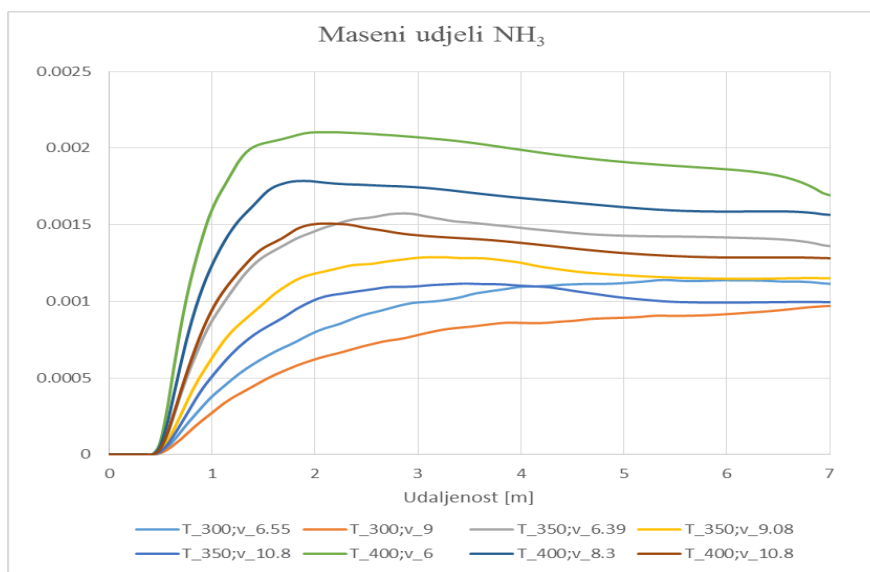
Slika 30. Prikaz pojedinih masenih udjela plinova pri $T=350^{\circ}\text{C}$; $v=9.08\text{m/s}$

Ukoliko usporedimo rezultate svih 8 slučajeva po uzdužnoj osi cijevi, možemo izvući daljnje zaključke. Rezultati na Slika 31. i Slika 32. dani su za vremenski trenutak od 1.8 sekundi. Gledajući masene udjele HNCO možemo zaključiti kakva je bila kvaliteta konverzije. „Dobra“ konverzija s obzirom na HNCO podrazumijeva stvaranje HNCO na početku cijevi, te naknadno trošenje HNCO na kraju cijevi. Slika 31. prikazuje najveće vrijednosti HNCO na početnom djelu cijevi, odnosno najmanje vrijednosti HNCO na izlazu iz cijevi ima slučaj sa temperaturom 400°C i brzinom od 6 m/s . Sličan trend prate i ostale vrijednosti brzina ove temperature. Generalno se može zaključiti da u promatranim slučajevima najveće vrijednosti konverzije daju više temperature i manje brzine što odgovara većem unosu topline i duljim vremenom retencije reaktanata u cijevi/zoni reakcije.

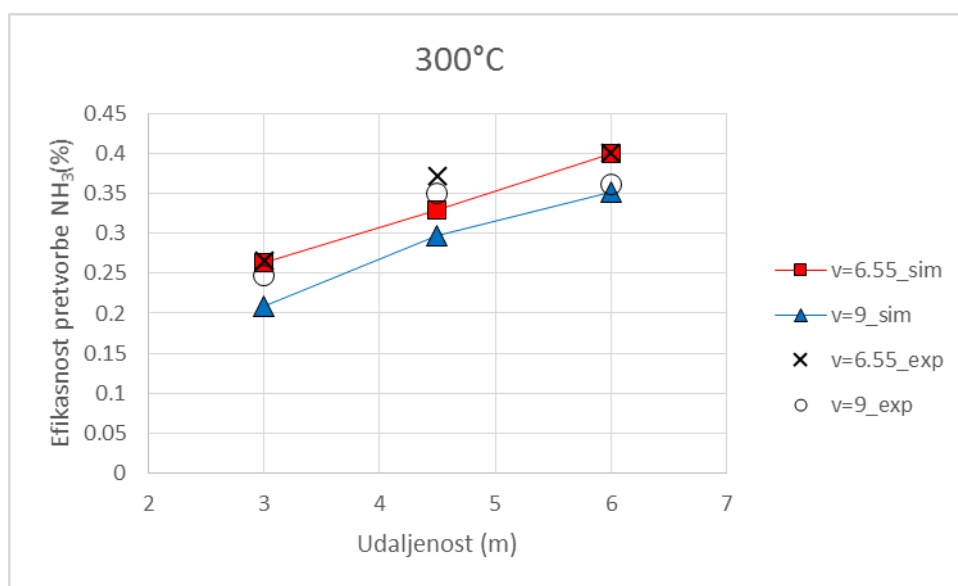


Slika 31. Maseni udio HCNO

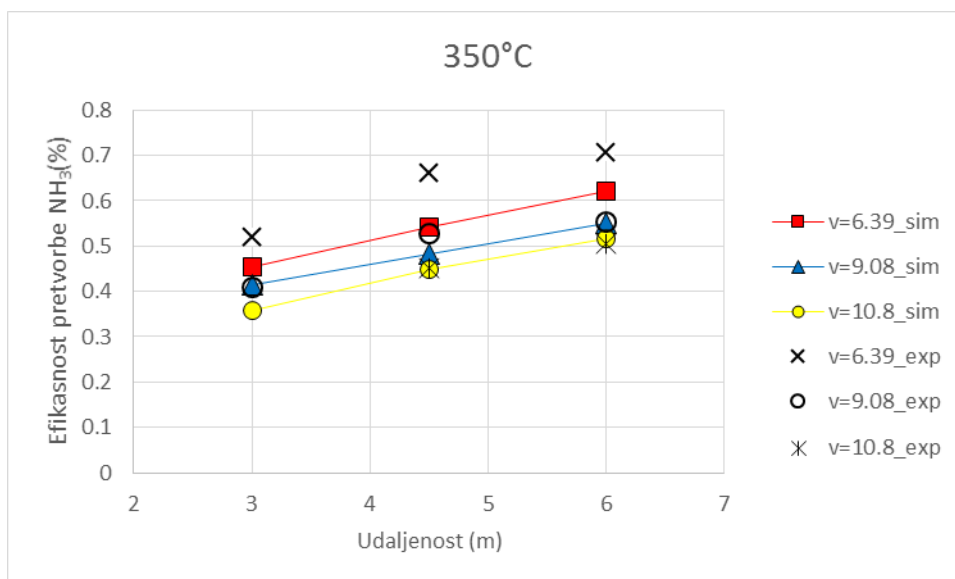
Na slika 32. prikazani su maseni udjeli NH_3 iz kojih se također može ocijeniti kvaliteta konverzije. Obzirom da se NH_3 proizvodi hidrolizom i termolizom, kvalitetniji će biti onaj slučaj koji ima veću vrijednost NH_3 . Iz Slika 32. jasno je vidljivo da najveću vrijednost NH_3 ima slučaj sa temperaturom 400°C i brzinom od 6 m/s . Ovdje je također vidljivo da trend prate i ostale vrijednosti brzina ove temperature. Sukladno prethodno iznesenim činjenicama izvodi se zaključak da će najbolju konverziju u vidu pretvorbe HCNO i NH_3 dati visoka ulazna temperatura i mala brzina dimnih plinova.

Slika 32. Maseni udio NH_3

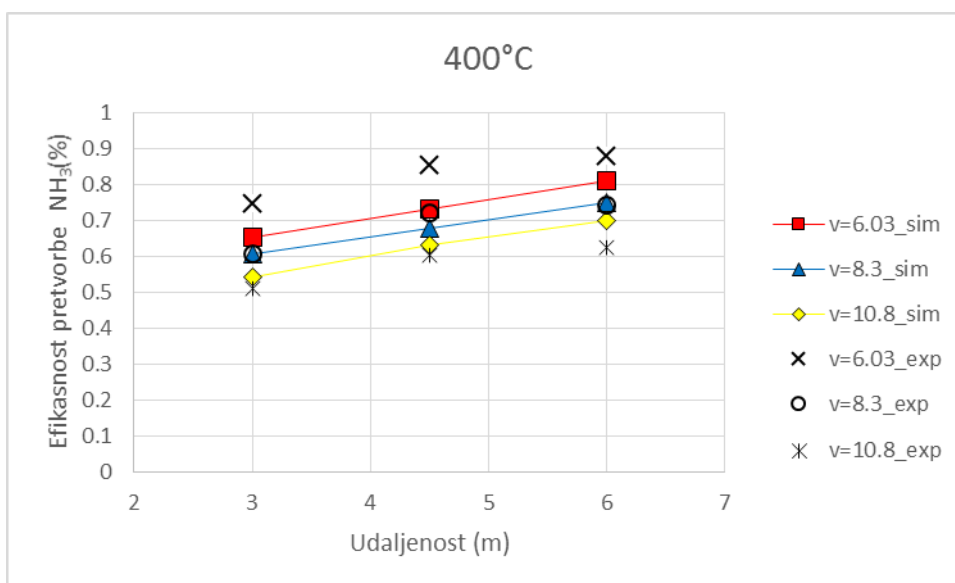
Kako je već naglašeno, eksperimentalna mjerenja i simulacije uspoređivale su se za osam različitih slučajeva, sukladno dobivenim eksperimentalnim rezultatima iz akademskog članka Kima i sur. [18]. Pozicije na kojima se mjerilo su presjeci, čiji su položaji definirani u prethodno opisanim eksperimentalnim postavkama. Kriterij po kojem se vršila usporedba rezultata simulacije i rezultata dobivenih eksperimentalnim mjerenjem je efikasnost pretvorbe NH_3 . Na sljedećim slikama prikazana je usporedba rezultata simulacije i rezultata dobivenih eksperimentalnim mjerenjem.



Slika 33. Usporedba rezultata simulacije i rezultata dobivenih eksperimentalnim mjerenjem pri temperaturi ispušnih plinova od 300 °C



Slika 34. Usporedba rezultata simulacije i rezultata dobivenih eksperimentalnim mjerenjem pri temperaturi ispušnih plinova od 350 °C



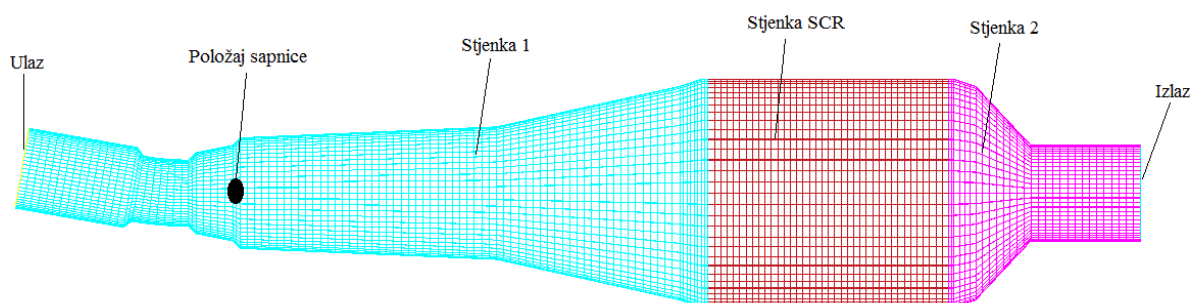
Slika 35. Usporedba rezultata simulacije i rezultata dobivenih eksperimentalnim mjerenjem pri temperaturi ispušnih plinova od 400 °C

Iz prethodno predstavljenih slika može se zaključiti relativno dobro preklapanje eksperimentalnih rezultata i rezultata dobivenih simulacijom, po kriteriju efikasnosti pretvorbe NH_3 . Vidljivo je da se u globalu prati trend eksperimentalnih rezultata, te da odstupanja koja su prisutna nisu značajna (u najekstremnijem slučaju iznosi 21%, dok su u

većini slučajeva odstupanja svega 1-2%). Također treba uočiti da su najveća odstupanja simulacije i eksperimentalnog mjerenja pri malim brzinama od 6 m/s. Generalno se može zaključiti da rezultati efikasnosti pretvorbe NH_3 simulacije relativno dobro prate rezultate eksperimenta. Ovim dijelom rada dokazano je da su opisani matematički modeli implementirani unutar komercijalnog CFD programa FIRE u stanju dovoljno točno obuhvatiti sve relevantne fizikalne pojave koje se javljaju prilikom ubrizgavanja vodene otopine uree u ispušni sustav motora s unutarnjim izgaranjem te se kao takvi mogu koristiti za upotrebu u razvoju realnih industrijskih sustava, od kojih je jedan dan u nastavku.

4. NUMERIČKA SIMULACIJA REALNOG SUSTAVA ZA KATALITIČKU REDUKCIJU

U ovom dijelu rada prikazat će se simulacije vezane na realnu geometriju koja predstavlja katalizator motora s unutrašnjim izgaranjem, te će se kao takva koristiti za analizu rezultata. Simulacija se vrši ubrizgavanjem vodene otopine uree unutar zadane geometrije duljine 1.53 m. Mreža se sastoji od 84672 kontrolnih volumena.



Slika 36. Geometrija katalizatora

Sapnica za ubrizgavanje je postavljena na samom ulazu u cijev. Kut ubrizgavanja spreja iznosi 60° . Vremenski korak definiran je Tablica 6.

Tablica 6. Postavke simulacije-vremenski korak

Vremenski korak			Δt
	do	0.1 s	0.005 s
	do	0.4 s	0.002 s
	do	0.8 s	0.005 s
Završetak simulacije	0.8 s		

Rubni uvjeti na ulazu postavljeni su preko temperature ispušnih plinova koja iznosi 400°C , masenog protoka plinova koji iznosi 0.23575 kg/s , kinetičke energije turbulencije koja iznosi $0.001 \text{ m}^2/\text{s}^2$, i karakteristične duljine turbulencije koja iznosi 0.00304 m . Postavke vezane uz sam katalizator su sljedeće; gustoća aktivnog dijela katalizatora je 1700 kg/m^3 , toplinska provodnost je 0.4 W/(m K) , specifična toplina je 1200 J/(kg K) . Početna temperatura monolita iznosi 400°C , gustoća ćelije 400 1/in^2 , a pad tlaka je računat po modelu „Tube friction“ [15]. Sastav dimnih plinova na ulazu u katalizator zadan je Tablica 7 i odgovara približnom sastavu ispušnih plinova motora s unutrašnjim izgaranjem cestovnih vozila.

Tablica 7. Postavke simulacije-maseni udio kemijskih vrsta

Kemijska vrsta:	Maseni udio:
NO	6.7553e-04
NO ₂	5.1709e-04
NH ₃	1.0e-10
H ₂ O	7.7e-02
O ₂	1.3e-01
CO ₂	9.0e-02
HCNO	1.0e-10
N ₂	0.701807

Rubni uvjet na izlazu postavljen je preko tlaka na izlazu iz katalizatora koji iznosi 100 000 Pa, dok je rubni uvjet na stjenci postavljen preko temperature okoliša koja iznosi 300 K i koeficijenta prijelaza topline na vanjskoj strani stjenke katalizatora koji iznosi 5 W/(m² K). Kod simulacija je primijenjen k-zeta-f model turbulencije. Između 0.1 i 0.4 s ubrizga se 0.4 g spreja vodene otopine uree komercijalnog naziva *AdBlue*. Važno je naglasiti činjenicu da ne postoji model interakcije kapljice s porozitetom, te je zbog toga uključena opcija „Stop droplet at porosity“. U ovom djelu rada promatrat će se šest različitih simulacija u kojima će se varirati smjer ubrizgavanja spreja i veličina kapljica kao što je prikazano u Tablica 8.

Tablica 8. Postavke simulacije–smjer ubrizgavanja i veličina kapljica

Naziv	Smjer ubrizgavanja	Veličina kapljica
Simulacija_1	→ (u smjeru strujanja dimnih plinova)	PSD (160 μm)
Simulacija_2	→ (u smjeru strujanja dimnih plinova)	PSD (105 μm)
Simulacija_3	→ (u smjeru strujanja dimnih plinova)	PSD (90 μm)
Simulacija_4	⊙ (bočno)	100 μm
Simulacija_5	← (protustrujno)	100 μm
Simulacija_6	→ (u smjeru strujanja dimnih plinova)	100 μm

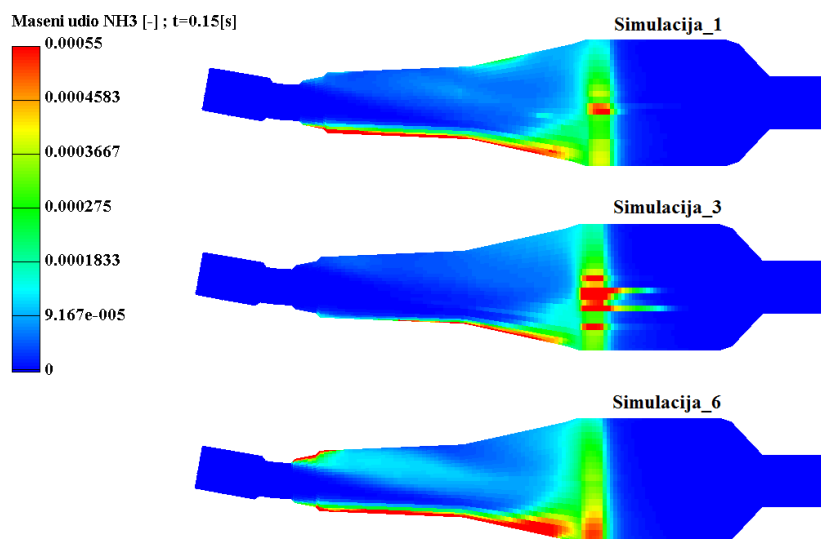
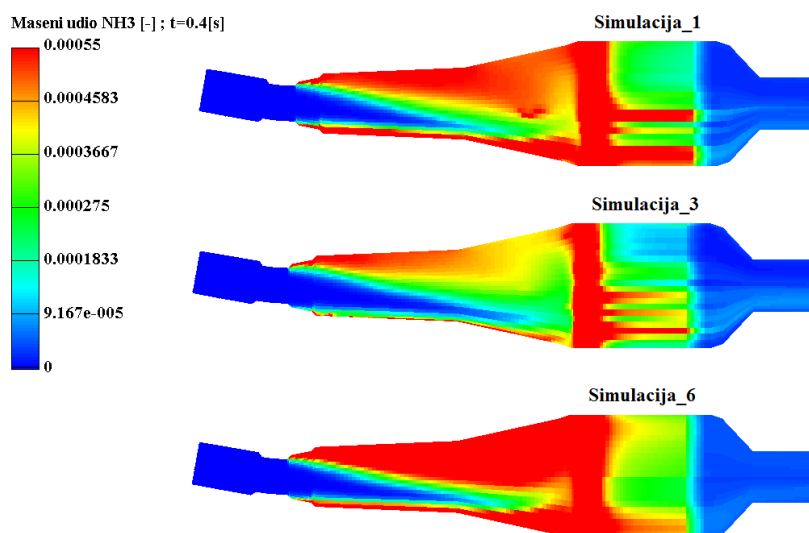
Dobivene vrijednosti iz simulacija promatrat će se za dvije grupe simulacija. Prva grupa prikazivat će utjecaj veličine kapljica, dok će druga grupa prikazivati utjecaj smjera ubrizgavanja. Grupe, odnosno raspored simulacija, prikazani su sljedećom tablicom.

Tablica 9. Prikaz simulacija po grupama

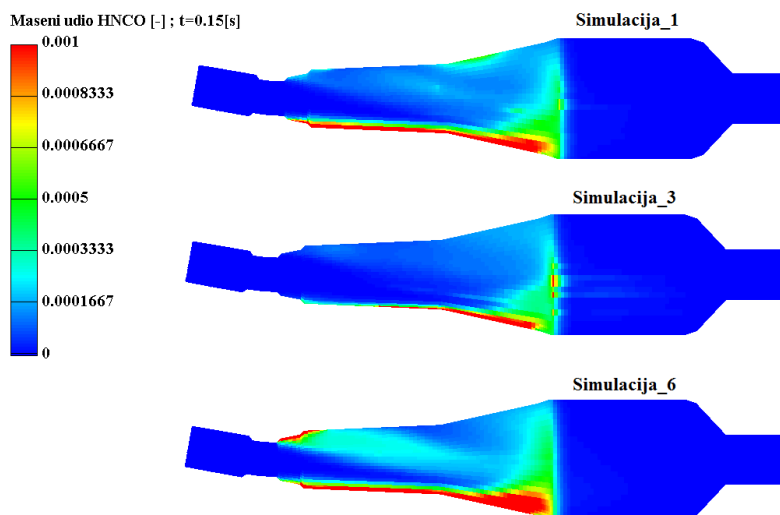
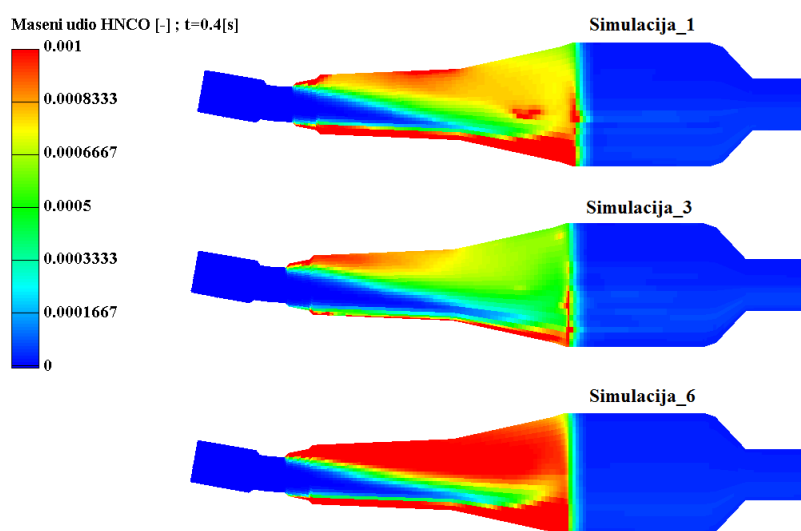
Grupa 1 Utjecaj veličine čestica kapljica			Grupa 2 Utjecaj smjera ubrizgavanja		
Simulacija_1	Simulacija_3	Simulacija_6	Simulacija_4	Simulacija_5	Simulacija_6

4.1. Utjecaj veličine kapljica na stvaranje reducensa

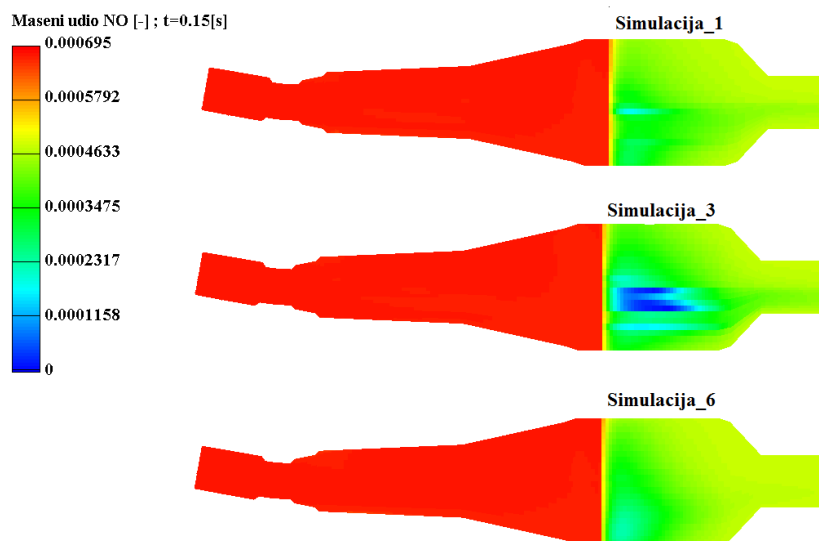
U ovom djelu rada prikazani su rezultati simulacije za grupu 1 sukladno Tablica 9. Dva karakteristična trenutka su odabrana za promatranje rezultata: 0.15 sekundi i 0.4 sekundi. Pri 0.15 sekundi vidljiv je napredak spreja kroz katalizator, dok su pri 0.4 sekunde ostvarene vršne vrijednosti za reducense unutar katalizatora. Ukoliko promatramo distribuciju NH_3 unutar katalizatora, vidljiva je najbrža propagacija NH_3 kod Simulacije_3 pri 0.15 sekundi. Pri 0.4 sekundi može se primijetiti poprilično ravnomjerna distribucija NH_3 kod Simulacije_6 i kod Simulacije_1, dok je kod Simulacije_3 distribucija NH_3 razvedena kao što je prikazano na Slika 38. Također se vidi da je koncentracija NH_3 kod Simulacije_6 i kod Simulacije_1 veća nego kod Simulacije_3, što implicira da Simulacija_6 i Simulacija_1 ostvaruju bolju konverziju uree.

Slika 37. Maseni udio NH₃ pri 0.15 sekundiSlika 38. Maseni udio NH₃ pri 0.4 sekundi

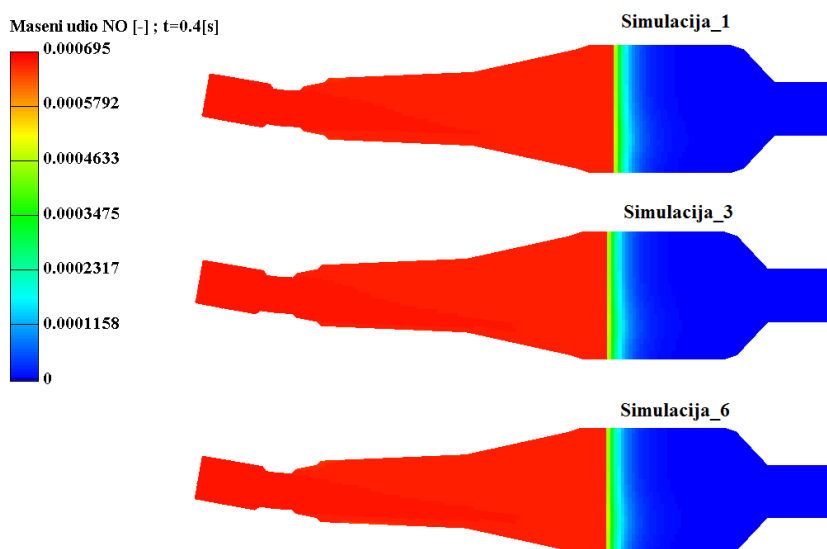
Slika 39. i Slika 40. prikazuju masene udjele HNCO za dva različita trenutka. Iz Slika 39. može se zaključiti da je maseni udio i distribucija HNCO slična za sve tri simulacije pri 0.15 sekundi. Slika 40. prikazuje da je najveći maseni udio i najhomogenija distribucija HNCO prisutna kod Simulacije_6. Simulacija_1 i Simulacija_3 imaju znatno manje ravnomjernu distribuciju od Simulacije_6, s tim da je maseni udio HNCO najmanji kod Simulacije_3.

Slika 39. Maseni udio H₂CO pri 0.15 sekundiSlika 40. Maseni udio H₂CO pri 0.4 sekundi

Ukoliko se promotri Slika 41. vidljivo je da Simulacija_3 pri 0.15 sekundi prva počinje s redukcijom NO. Daljnjim razvojem iz Slika 42. vidi se da su sve tri simulacije spustile vrijednost NO na zanemarivu razinu. Također, ovdje treba uočiti da, i prije same propagacije ubrizganog spreja, vrijednost NO se smanjuje samim prolaskom kroz SCR dio katalizatora.

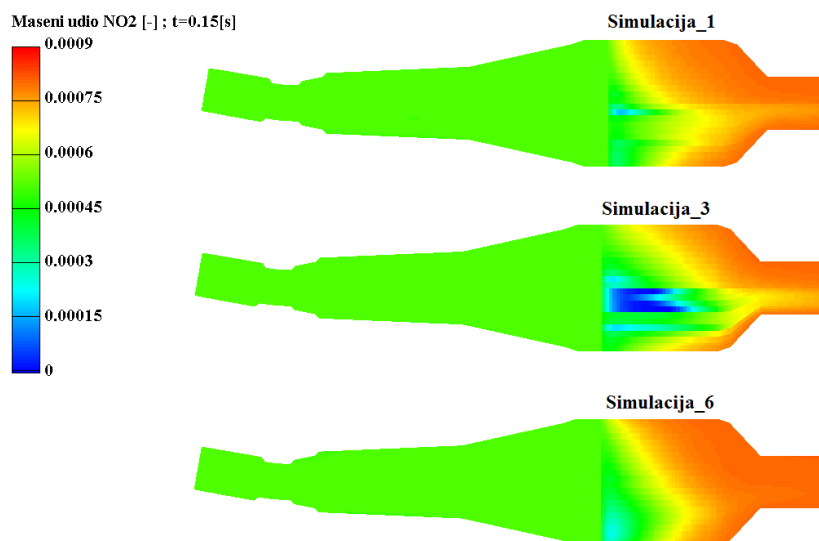
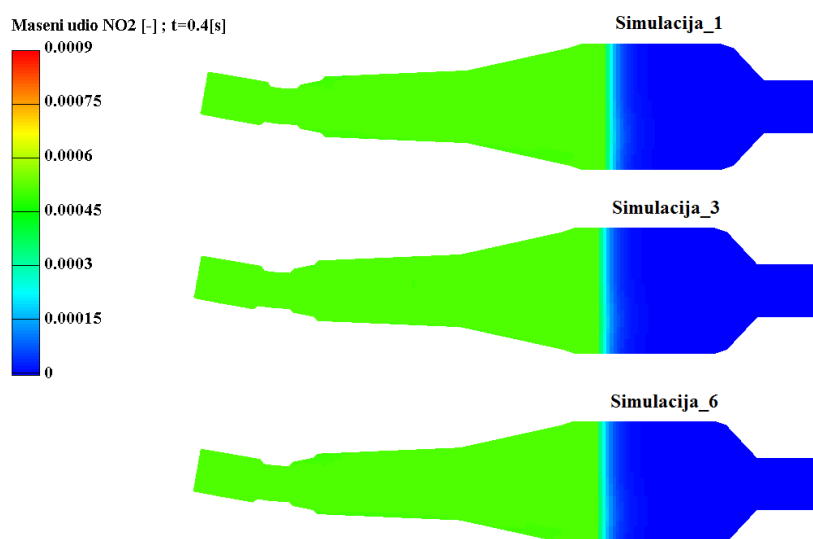


Slika 41. Maseni udio NO pri 0.15 sekundi

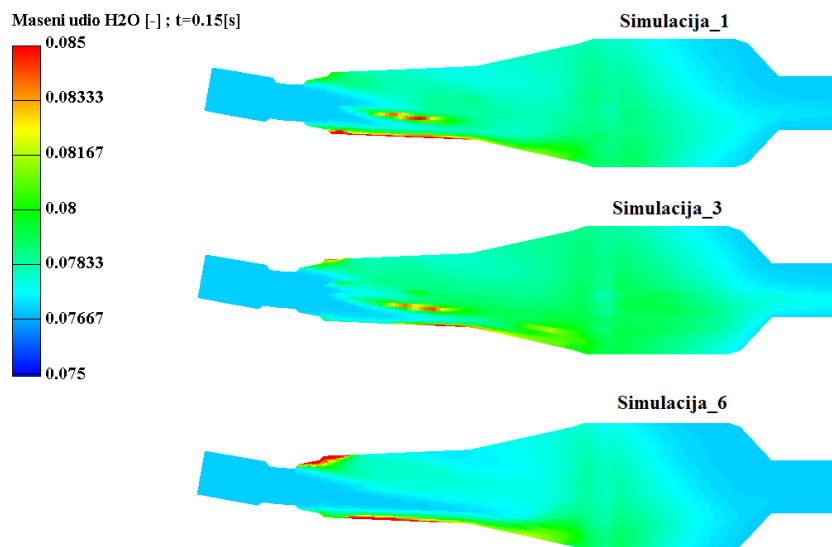


Slika 42. Maseni udio NO pri 0.4 sekundi

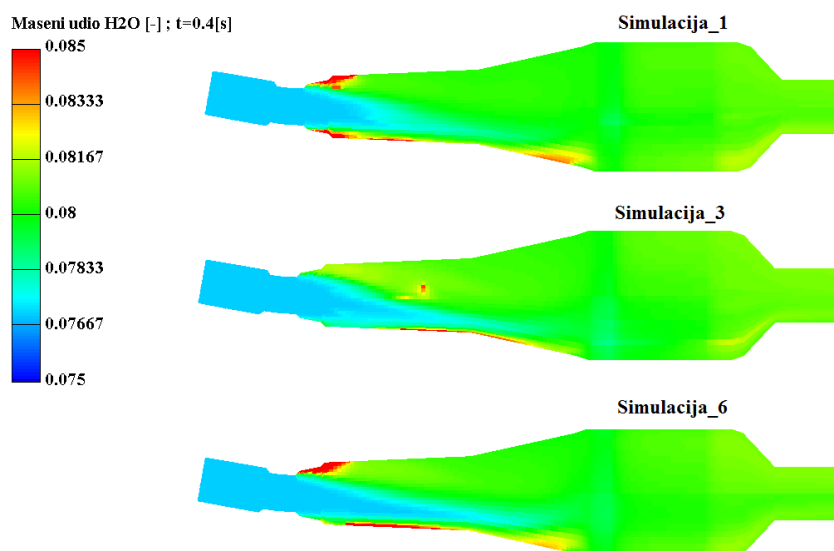
Slično kao i kod vrijednosti NO, vrijednost NO₂ također počinje padati kod Simulacije_3. Simulacija_3 pri 0.15 sekundi prva počinje sa smanjivanjem masenog udjela NO₂. Daljnjim razvojem iz Slika 44. vidi se da su sve tri simulacije spustile vrijednost NO₂ na zanemarivu razinu. I ovdje također treba uočiti da i prije same propagacije ubrizganog spreja vrijednost NO₂ se smanjuje samim prolaskom kroz SCR katalizator.

Slika 43. Maseni udio NO₂ pri 0.15 sekundiSlika 44. Maseni udio NO₂ pri 0.4 sekundi

Slika 45. i Slika 46. prikazuju masene udjele vode pri 0.15 i 0.4 sekunde. Iz Slika 45. je vidljivo da su maseni udjeli vode podjednaki za sve tri simulacije. Obzirom da nam 0.15 sekundi pokazuje tek razvoj masenog udjela vode unutar katalizatora, potrebno je prikazati maseni udio na njegovom vrhuncu. Vrhunac se nalazi na Slika 46., iz koje se vidi da raspodjela masenog udjela vode je također gotovo uniformna i jednaka za sva tri slučaja, gdje se tek na rubu katalizatora pojedinih slučajeva skuplja nešto veći maseni udio vode.



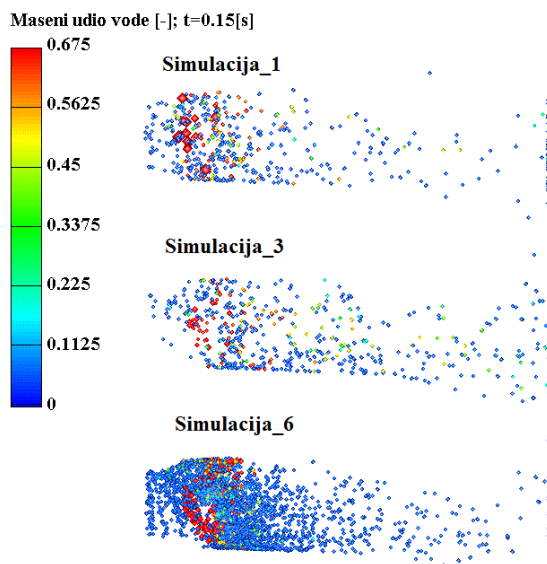
Slika 45. Maseni udio H₂O pri 0.15sekundi



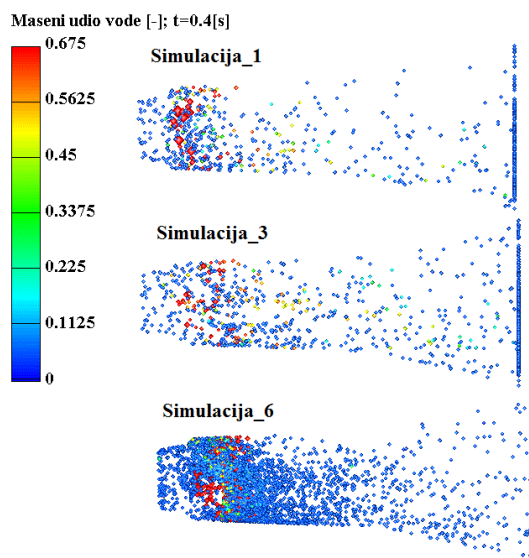
Slika 46. Maseni udio H₂O pri 0.4 sekundi

Iz masenog udjela vode u spreju možemo promatrati proces isparavanja vode. Iz Slika 47., odnosno Slika 48 može se vidjeti da najveći broj kapljica ima Simulacija_6. Kod Simulacije_6 ujedno se najmanje kapljica zaustavlja na SCR granici katalizatora, stoga se maseni udio vode znatno više smanji od same točke ubrizgavanja do kraja putanje kapljica. Simulacija_1 i Simulacija_3 imaju sličnu distribuciju veličine kapljica koja je uzduž putanje spreja znatno rjeđa od Simulacije_6. Također je vidljivo da se najviše kapljica zaustavlja na SCR granici katalizatora upravo za Simulaciju_3 te da joj maseni udio vode u spreju uzduž putanje spreja manje pada nego kod Simulacije_6. Simulacija_1 ima najveći maseni udio

vode u spreju blizu mjesta ubrizgavanja, ali je dinamika isparavanja slična Simulaciji_3. Stoga se uzduž putanje spreja i na samoj granici SCR katalizatora dobivaju slične vrijednosti kao i kod Simulacije_3.



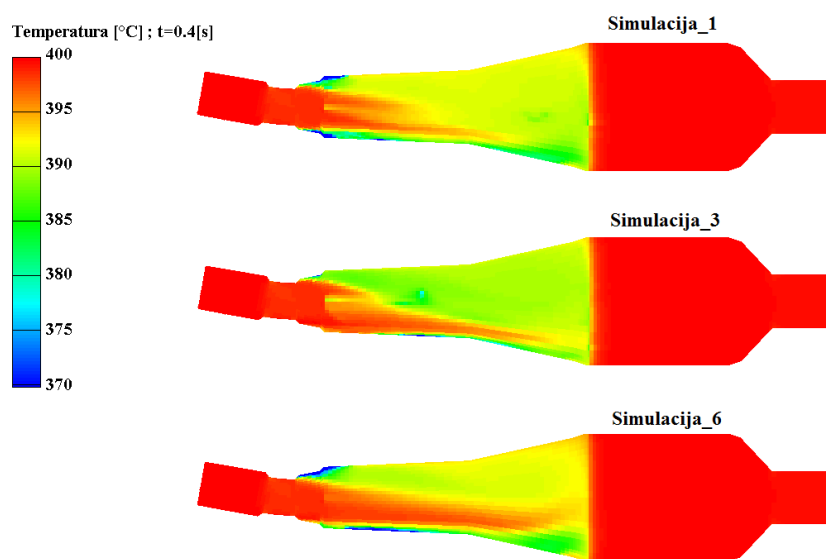
Slika 47. Maseni udio vode u spreju pri 0.15 sekundi



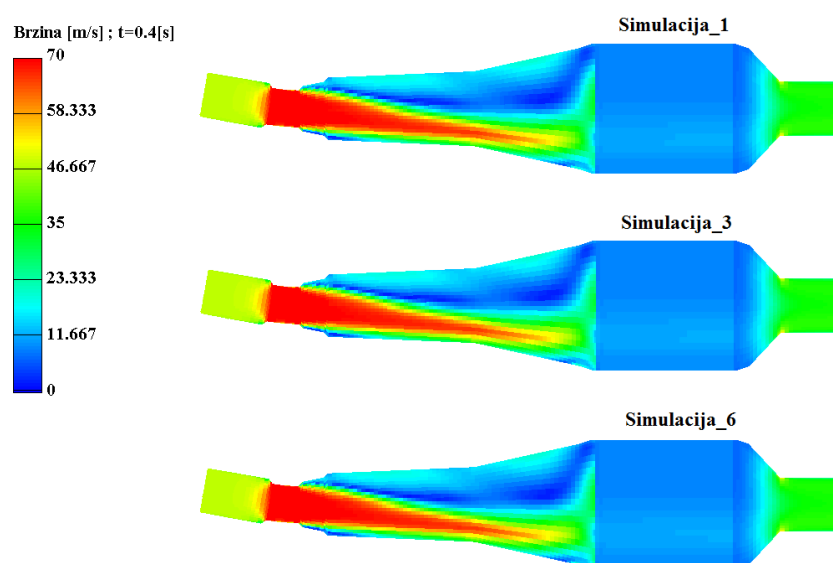
Slika 48. Maseni udio vode u spreju pri 0.4 sekundi

Raspored temperature unutar katalizatora je za sve tri simulacije prilično sličan i prikazan je na Slika 49. za samo jedan vremenski trenutak od 0.4 sekunde. Simulacija_3 ima nešto nižu temperaturu u sredini katalizatora nego preostale dvije simulacije. Pad temperature uzrokovan

je isparavanjem vode iz spreja, stoga niža temperatura unutar katalizatora sugerira da je isparilo više vode.



Slika 49. Temperatura pri 0.4 sekundi

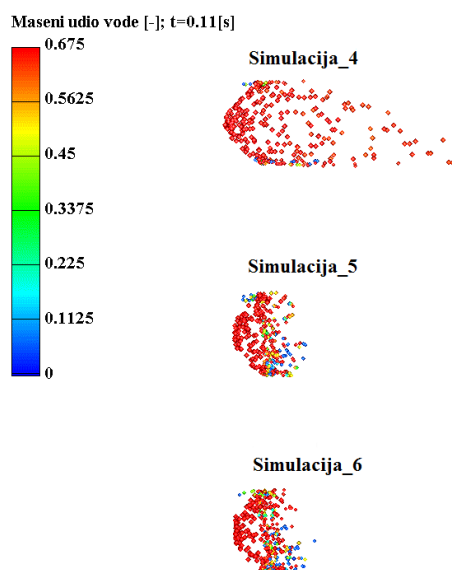


Slika 50. Brzina pri 0.4 sekundi

Raspored brzina unutar katalizatora također je sličan za sve tri simulacije, i prikazan je analogno samo za jedan vremenski trenutak na Slika 50. Sama geometrija katalizatora definira profil brzina, pri čemu se vidi da je najveća brzina na putanji ubrizgavanja spreja. Iznad te putanje brzine su vrlo male.

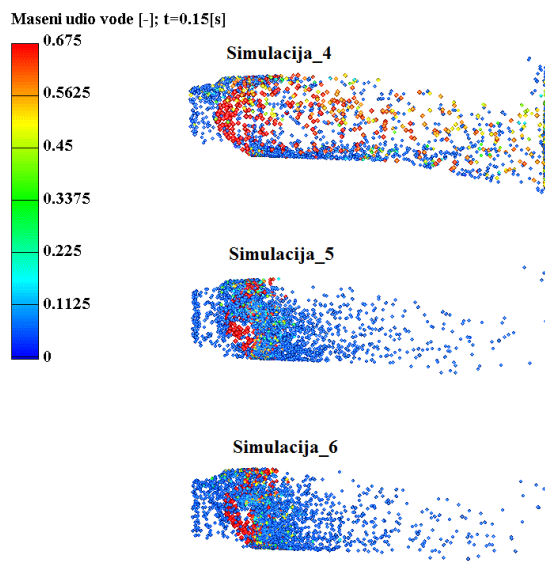
4.2. Utjecaj smjera ubrizgavanja na stvaranje reducensa

Kao što je prethodno naglašeno, u „Grupi 2“ promatra se utjecaj smjera ubrizgavanja spreja vodene otopine uree. Slika 51., Slika 52. i Slika 53. prikazuju masene udjele vode u spreju za različite vremenske trenutke. Slika 51. pokazuje da Simulacija_4 ima najveći maseni udio vode u spreju u trenutku ubrizgavanja, dok preostala dva slučaja imaju sličnu distribuciju kapljica.



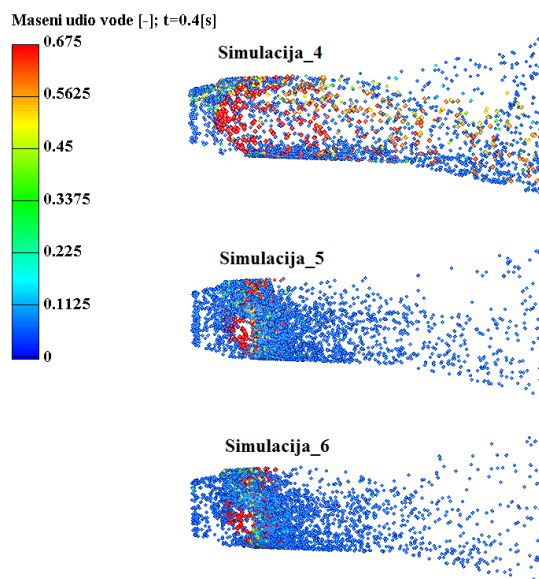
Slika 51. Maseni udio vode u spreju pri 0.11 sekundi

U trenutku 0.15 sekundi vidljivo je da Simulacija_4 ima najveći maseni udio vode u spreju koji je uzduž putanje spreja nejednoliko distribuiran. Također se može uočiti skupljanje kapljica na granici SCR djela katalizatora, što ukazuje na neisparene kapljice vode. Simulacija_5 i Simulacija_6 imaju sličnu distribuciju kapljica, kao i sličan maseni udio vode uzduž putanje spreja.



Slika 52. Maseni udio vode u spreju pri 0.15 sekundi

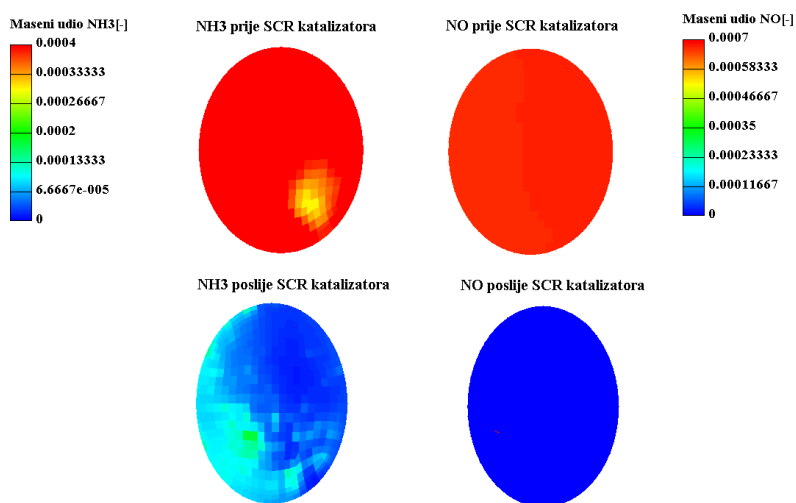
U trenutku 0.4 sekunde Simulacija_4 i dalje ima najveći maseni udio vode u spreju. Također je i tamo prisutan veći udio vode u kapljicama spreja u blizini katalizatora, ali u manjoj mjeri nego što je to bilo pri 0.15 sekundi. Za Simulaciju_5 i Simulaciju_6 se i dalje može reći da imaju sličnu distribuciju kapljica i sličan maseni udio vode uzduž putanje spreja (manji nego kod Simulacije_4).



Slika 53. Maseni udio vode u spreju pri 0.4sekundi

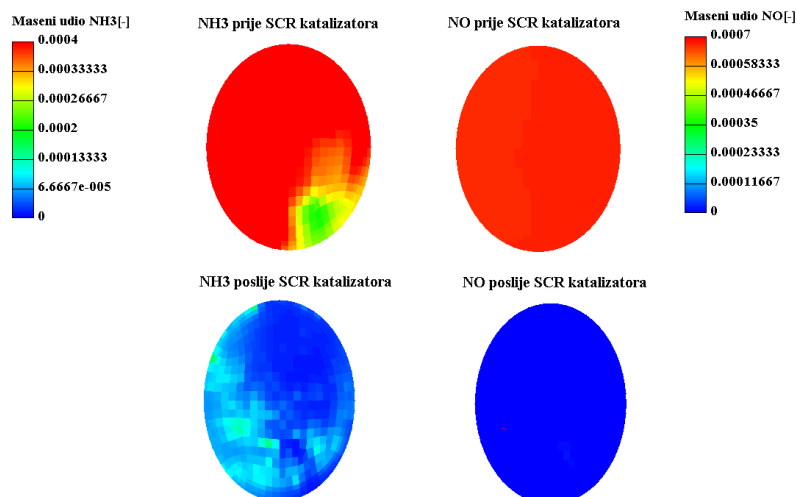
4.3. Prikaz rezultata po poprečnom presjeku

Nadalje će se razmotriti koncentracije NH_3 i NO po poprečnom presjeku za sve simulacije u vremenskom trenutku od 0.4 sekundi. Ovaj trenutak je odabran prvenstveno zato jer se pri 0.4 sekundi javljaju vršne koncentracije većine plinova u katalizatoru. Ovdje treba naglasiti da će se dotične koncentracije razmatrati na poprečnom presjeku neposredno prije i neposredno poslije SCR katalizatora. Ovim prikazom omogućiti će se uvid u distribuciju reducensa po poprečnom presjeku, koja nam također ukazuje na kvalitetu procesa.



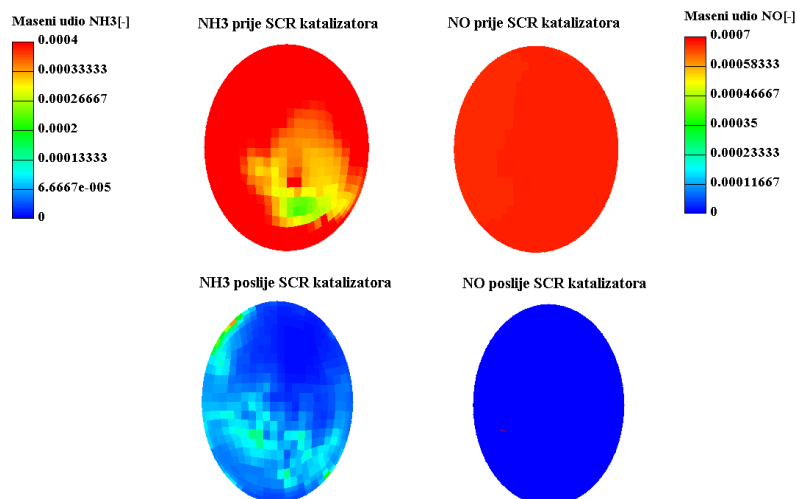
Slika 54. Prikaz masenog udjela NH_3 i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_1 pri 0.4 sekundi

Slika 54. pokazuje da vrijednost NH_3 prije ulaska u SCR dio katalizatora je gotovo uniformna sa maksimalnim vrijednostima po cijelom presjeku. Nakon izlaska iz katalizatora, vrijednosti NH_3 su znatno smanjene pa su čak na jednom dijelu presjeka smanjene gotovo do nulte vrijednosti. Vrijednosti NO su prije ulaska u katalizator maksimalne po cijelom presjeku a nakon izlaska iz SCR djela katalizatora smanjene na nulu.

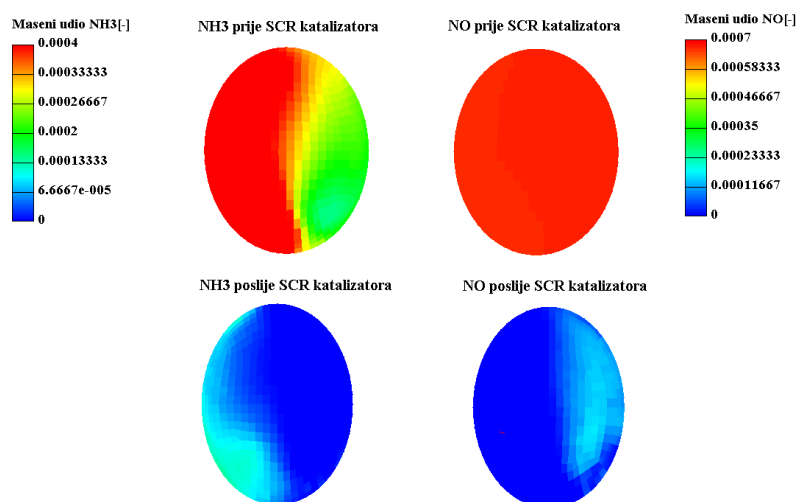


Slika 55. Prikaz masenog udjela NH₃ i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_2 pri 0.4 sekundi

Iz Slika 55. se može vidjeti da se vrijednosti NH₃ za Simulaciju_2 na jednom dijelu presjeka prije ulaska u SCR dio katalizatora razlikuje od ostalih (maksimalnih) vrijednosti. Na izlazu iz SCR djela katalizatora situacija je slična kao i u prethodnom slučaju gdje su vrijednosti NH₃ znatno smanjene, a na nekim dijelovima katalizatora dosiže nulu. Vrijednosti NO su jednake kao i u prethodnom slučaju, gdje su prije ulaska u katalizator maksimalne po cijelom presjeku a nakon izlaska iz SCR djela katalizatora smanjene na nulu. Gotovo isti trend dolaska i pretvorbe ova dva plina prisutan je kod Simulacije_3, što je vidljivo na Slika 56. Variranjem veličinama kapljica dobiti će se slične vrijednosti u sva tri slučaja pri čemu će veće kapljice dati nešto ujednačenije vrijednosti NH₃ na ulazu.



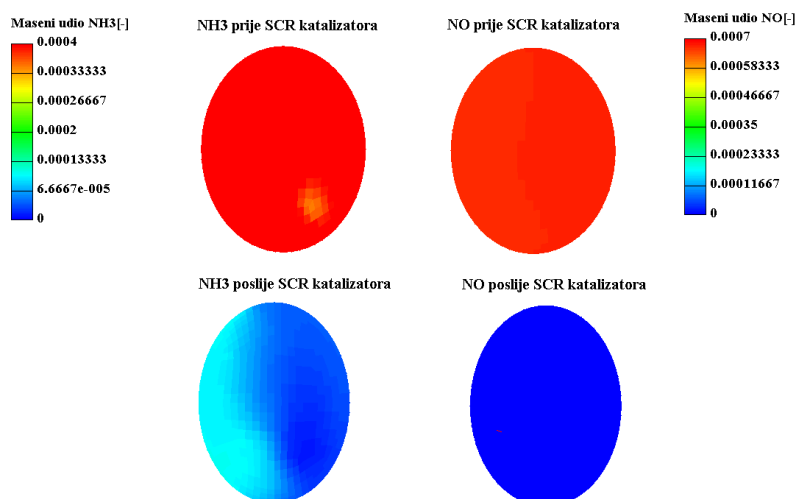
Slika 56. Prikaz masenog udjela NH_3 i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_3 pri 0.4 sekundi



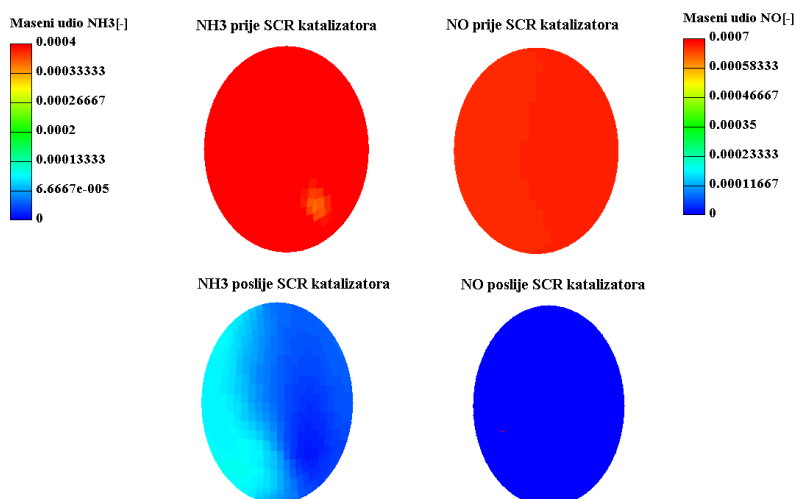
Slika 57. Prikaz masenog udjela NH_3 i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_4 pri 0.4 sekundi

Iz Slika 57. vidljivo da se pri bočnom ubrizgavanju kod Simulacije_4 vrijednosti NH_3 prije ulaska u SCR dio katalizatora razlikuju, gdje je po polovini poprečnog presjeka maseni udio gotovo upola manji od maksimalnog. Nakon izlaska iz SCR djela katalizatora nešto više vrijednosti NH_3 smjestile su se u jednom djelu poprečnog presjeka, dok je po ostatku presjeka vrijednost jednaka nuli. Za razliku od ostalih simulacija, kod Simulacije_4 vrijednost NO poslije SCR dijela katalizatora je na jednom dijelu presjeka različita od nule, što upućuje na neefikasnost pretvorbe, odnosno manjkavost ovakvog smjera ubrizgavanja. Kod Simulacije_5 i Simulacije_6 raspodjela masenog udjela NH_3 prije ulaska u SCR dio katalizatora, po

poprečnom presjeku je jednaka za obje simulacije; maksimalna vrijednost se ostvaruje gotovo po cijelom presjeku. Nakon izlaska iz SCR djela katalizatora vrijednosti NH_3 su također jednake, nešto više vrijednosti su se smjestile u jednom djelu poprečnog presjeka, dok je po ostatku presjeka vrijednost jednaka nuli.



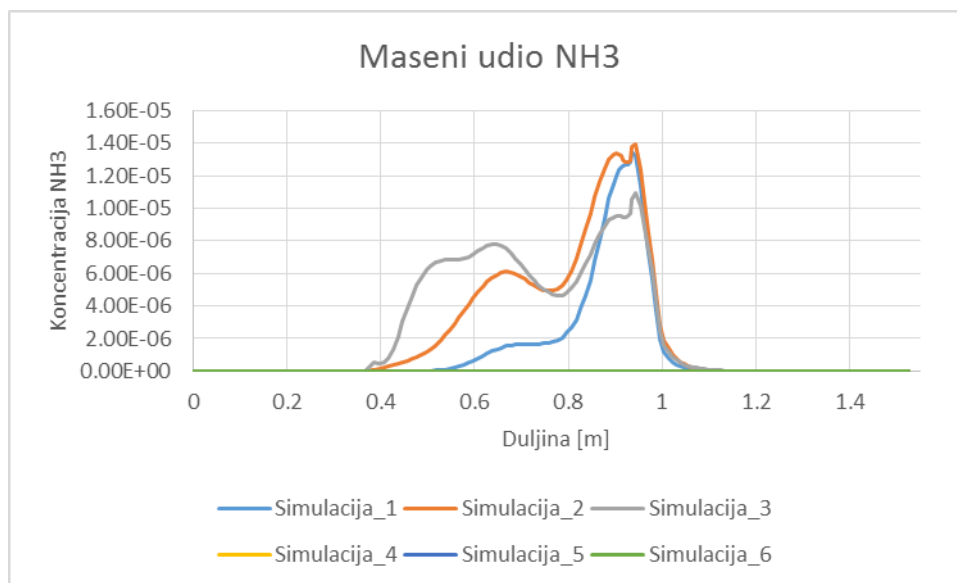
Slika 58. Prikaz masenog udjela NH_3 i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_5 pri 0.4 sekundi



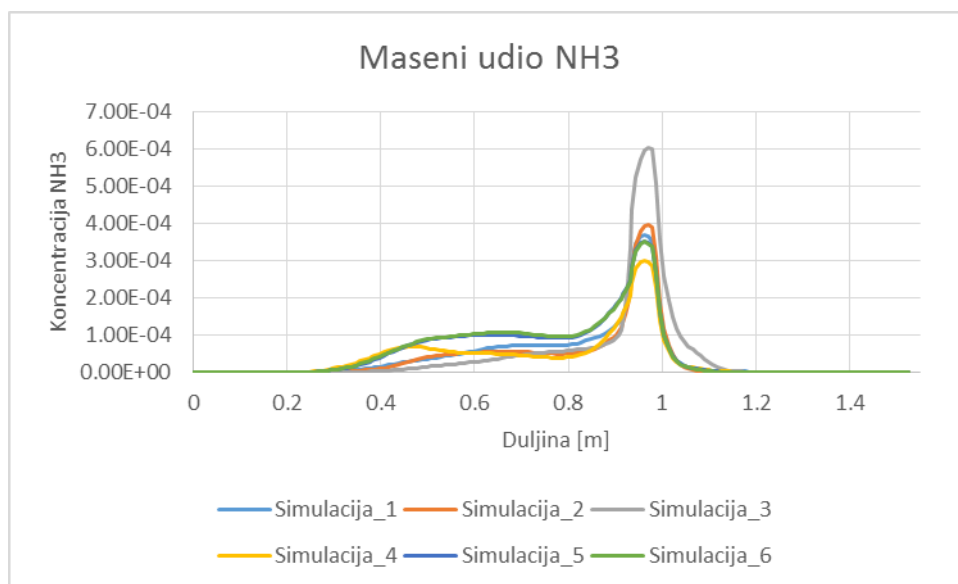
Slika 59. Prikaz masenog udjela NH_3 i NO po poprečnom presjeku za Simulaciju_6 pri 0.4 sekundi

4.4. 2d rezultati

U trenutku ubrizgavanja najvišu vrijednost NH_3 daje Simulacija_2, što je vidljivo na Slika 60. Također se može zamijetiti lagani pad koncentracije kod Simulacije_3 na duljini od 0.8 metara. Razlog tome je isključivo geometrija katalizatora kod koje dolazi do proširenja, pa se rastući maseni udio NH_3 raspoređuje po znatno većem prostoru, pri čemu dolazi do pada na mjestu promjene geometrije. Sličan trend vidljiv je i kod Simulacije_2, dok Simulacija_1 ne prati takav trend. Razlog tome je veličina čestica, odnosno koncentracija NH_3 . Simulacija_3 pri tome ima najmanju veličinu čestica koja najprije isparava, dok Simulacija_1 ima nešto veću veličinu čestica koja će poslije ispariti. Ovdje također valja uočiti da Simulacija_4, Simulacija_5 i Simulacija_6 uopće nemaju isti red veličine kao preostale simulacije u ovoj grupi, te se njihova vrijednost ne može iščitati iz ovog grafa. Na Slika 61. vidljiv je sličan trend porasta koncentracije NH_3 za 0.15, s time da Simulacija_3 ima najvišu koncentraciju NH_3 na određenoj duljini presjeka, dok preostale simulacije imaju približno jednaku raspodjelu koncentracije NH_3 . NO se u ovoj usporedbi nije posebno promatrao iz razloga što njegov maseni udio skokovito padne na nulu u svim simulacijama, što je već prethodno objašnjeno.

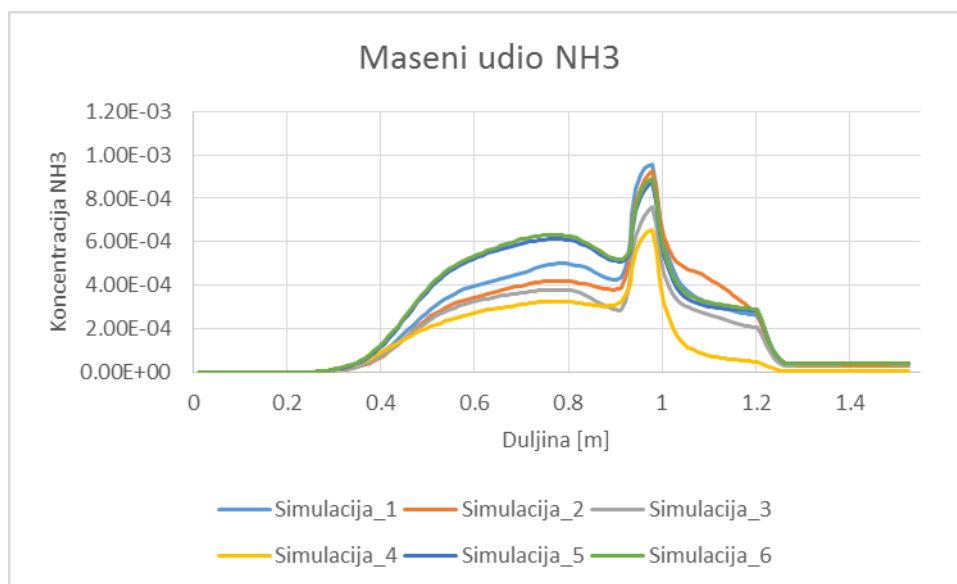


Slika 60. Koncentracija NH_3 uzduž katalizatora pri 0.11 sekundi



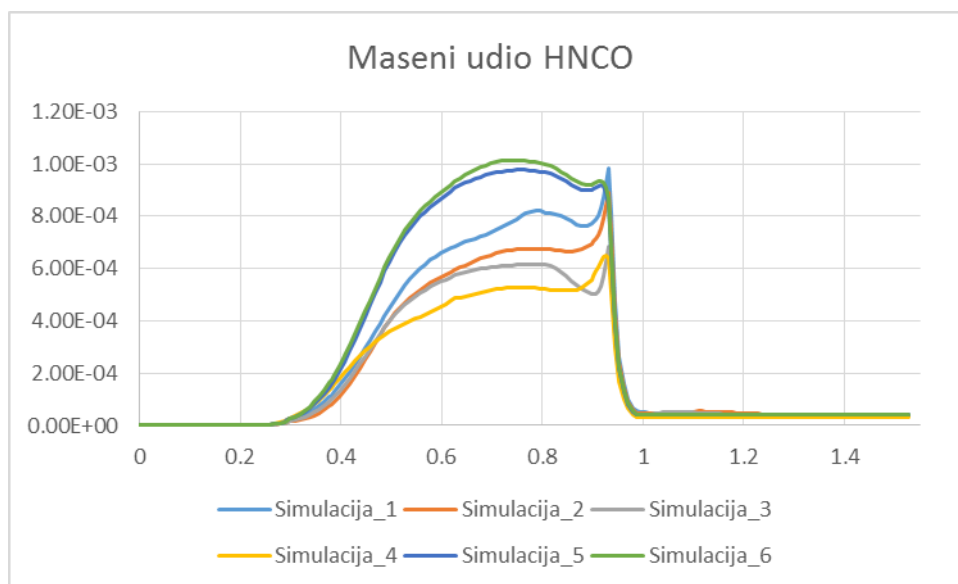
Slika 61. Koncentracija NH₃ uzduž katalizatora pri 0.15 sekundi

Slika 62. pokazuje nam sličan trend porasta koncentracije za sve simulacije, s tim da najvišu koncentraciju NH₃ na određenoj duljini presjeka ima Simulacija_1. Zatim je slijede Simulacija_2, Simulacija_6 (koji ujedno ima i najviše vrijednosti NH₃ od 0.4m do 0.9 m), Simulacija_5, Simulacija_3 pa Simulacija_4. Obzirom da se pri 0.4 sekunde ostvaruju vršne vrijednosti koncentracije NH₃, može se zaključiti da najbolju konverziju ostvaruje Simulacija_1, zatim je slijedi Simulacija_2, Simulacija_6, Simulacija_5, Simulacija_3 pa Simulacija_4. Također treba uočiti da je veličina čestica kod Simulacije_1 najveća, a kod Simulacije_3 najmanja, te je rezultat u bitnoj mjeri ovisio o tim vrijednostima. Za Simulaciju_5 i Simulaciju_6 su dobivene slične vrijednosti, pa se može zaključiti da protustrujno ubrizgavanje nije značajno lošije od ubrizgavanja u smjeru strujanja dimnih plinova.



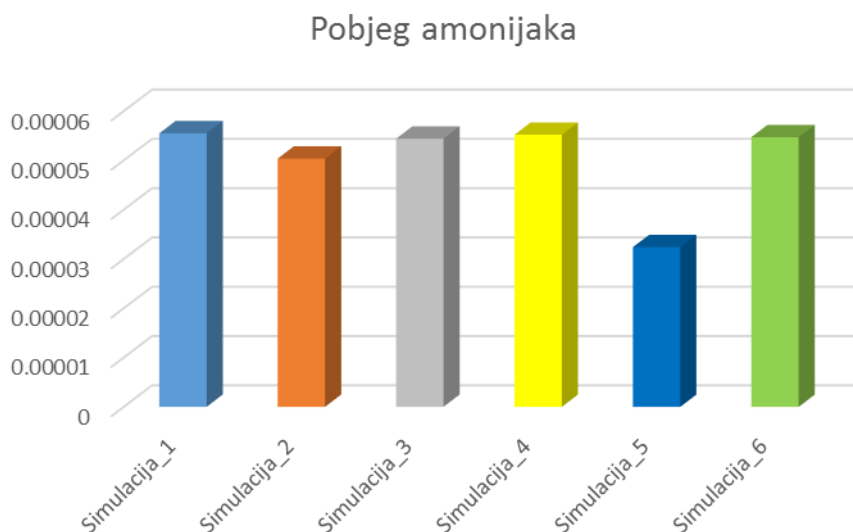
Slika 62. Koncentracija NH₃ uzduž katalizatora pri 0.4 sekundi

Na Slika 63. vidljiv je sličan trend porasta koncentracije HNCO za sve simulacije. Predstavnicima „grupe 2“ Simulacija_6 i Simulacija_5 daju najviše vrijednosti, dok predstavnicima „grupe 1“ Simulacija_1, Simulacija_2 i Simulacija_3 daju nešto niže vršne vrijednosti HNCO. Simulacija_4 daje najnižu vrijednost HNCO, te se već prije ustanovilo da je to najnepovoljniji slučaj za konverziju. Preostali slučajevi iz „grupe 2“ daju slične vrijednosti, te se može zaključiti da smjer ubrizgavanja spreja nije iznimno važan. Razlog sličnim vrijednostima kod Simulacije_5 i Simulacije_6 leži u tome što je kod obadvije simulacije jednaka veličina kapljica, ali i u tome što protustrujni smjer ubrizgavanja nema veliki utjecaj jer sve kapljice koje struje protustrujno, praktički trenutno promjene smjer kretanja i struje gotovo jednako kao i kod Simulacije_6. Kod „grupe 1“ može se reći da najbolju konverziju ostvaruje Simulacija_6 koji ima konstantnu veličinu kapljice. Ukoliko se zanemari slučaj sa konstantnom veličinom kapljice, može se reći da će bolju konverziju ostvarivati ona simulacija koja ima veći srednji promjer distribucije kapljica.



Slika 63. Koncentracija HNCO uzduž katalizatora pri 0.4 sekundi

Slika 64. prikazuje najveći pobjeg amonijaka iz katalizatora za sve simulirane slučajeve. Na toj slici se vidi da sve simulacije osim Simulacije_5 imaju manje-više jednak „ammonia slip“. Ako se uzme u obzir da Simulacija_5 ima protustrujno ubrizgavanje, može se zaključiti da promjena smjera ubrizgavanja ima znatan učinak na količinu amonijaka koja izlazi iz katalizatora, a koji je također limitiran Euro 6 normom.



Slika 64. Ammonia slip (pobjeg NH₃)

5. ZAKLJUČAK

U radu je dan pregled problematike obrade dimnih plinova kao produkta izgaranja goriva za potrebe u transportu i rješavanje s njima povezanih onečišćenja. Uvodno poglavlje pokazalo je relativno dug povijesni razvoj kroz nekoliko desetljeća, od stvaranja kolektivne društvene odgovornosti za emisije iz sektora prometa, do postepenog uređivanja zakonskih i podzakonskih aktova kako bi se industriji nametnulo njihovo smanjenje. Konačno su dani zahtjevi na sve relevantne emisije iz cestovnog prometa definirani tzv. Euro standardima – zaključno s trenutno važećim Euro 6 standardom. Kako upravo taj akt propisuje strogu redukciju dušikovih oksida, prekursora za stvaranje fotokemijskog smoga, dokazanih iritansa dišnog sustava i prekursora za kisele kiše, njihovom smanjenju iz sektora cestovnog prometa posvećen je ovaj rad.

Nadalje je opisana selektivna katalitička redukcija kao jedna od najperspektivnijih metoda za sprječavanje stvaranja dušikovih oksida kao i matematički modeli koji su temeljni alati za funkcioniranje RDF-a. Konačno, srž ovoga rada predstavlja numerička simulacija procesa ubrizgavanja uree gdje su prvo predstavljene i validirani relevantni matematički modeli koji opisuju fizikalno-kemijske procese tijekom ubrizgavanja vodene otopine uree u struju vrućih dimnih plinova. Rezultati dobiveni simulacijom ostvarili su relativno dobro slaganje s eksperimentalnim mjerenjima i potvrdili valjanost matematičkih modela implementiranih unutar komercijalnog RDF programskog paketa FIRE.

Također se istražio utjecaj smjera ubrizgavanja i veličine kapljica na realnoj geometriji industrijskog katalizatora. Pri tome su promatrane dvije grupe simulacija, gdje se u jednoj grupi razmatrala veličina kapljica, a u drugoj grupi utjecaj smjera ubrizgavanja. Generalno se može zaključiti da najbolje vrijednosti konverzije daje Simulacija_6 koji označava smjer ubrizgavanja spreja u smjeru dimnih plinova, i konstantne veličine kapljica od 100 μm . Također je pokazano da uvjerljivo najlošije vrijednosti daje Simulacija_4 koja označava bočni smjer ubrizgavanja spreja i konstantne veličine kapljica od 100 μm . Iznimno važno za naglasiti je da smjer ubrizgavanja istosmjerno/protusmjerno nije pokazao neki učinak na konverziju. Usprkos tome, pobjeg amonijaka kod protusmjernog ubrizgavanja je znatno manji nego kod istosmjernog, pri čemu treba naglasiti da je upravo pobjeg amonijaka reguliran Euro 6 normom. Iako je protusmjerno ubrizgavanje još u fazi istraživanja, svakako bi trebalo pridodati važnost ovoj vrsti ubrizgavanja u budućem radu. Pritom bi se varirala veličina čestica, ispitao bi se utjecaj položaja sapnice na konverziju, kao i utjecaj geometrije na protustrujno ubrizgavanje.

LITERATURA

- [1] Key World Energy Statistics; International Energy Agency; 2015.
- [2] Kenneth Wark, Cecil F. Warner, Wayne T. Davis: Air Pollution Its Origin and Control (THIRD EDITION) ; An imprint of Addison Wesley Longman, Inc.
- [3] European Environment Agency. Nitrogen oxides (NOx) emissions, n.d. <http://www.eea.europa.eu/data-and-maps/indicators/eea-32-nitrogen-oxides-NOx-emissions-1/assessment.2010-08-19.0140149032-3> (pristupljeno stranici 20.4.2016.)
- [4] Marko Mandić: Postupak mjerenja emisije štetnih produkata izgaranja iz motora s unutarnjim izgaranjem; Završni rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje Zagreb, 2014.
- [5] Dr. sc. Dean Bernečić / Ph. D.; Radoslav Radonja, dipl. ing. / B. Sc.: Primjena selektivne katalitičke redukcije na dvotaktne sporookretne br odske dizelske motore; Pomorstvo Scientific Journal of Maritime Research • 25/1(2011) • str./pp. 15-28
- [6] Rana Faltsi and Jayesh Mutyal; Confidence in Modeling SCR Aftertreatment Systems; Automotive simulation, World Congress
- [7] Nebojša Gavrilov; Računalna simulacija cikličke pohrane i redukcije dušikovih oksida iz ispušnih plinova motora s unutarnjim izgaranjem koji rade sa siromašnom smjesom; Diplomski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2008.
- [8] Tomislav Gradinščak; Numeričke simulacije stlačivih strujanja sa slobodnom površinom; Diplomski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2014.
- [9] Ivo Džijan; Računalna dinamika fluida; predavanja; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2010.
- [10] Goran Lončar: Podloge za predavanje iz kolegija modeliranje u hidrotehnici „MUH“ (predavanje br. 6); Građevinski fakultet; Zagreb; 2015.
- [11] Vedrana Markučić; Utjecaj promjene istisnine i uzdužnog nagiba na otpor potopljenog dijela jedrilice; Završni rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2013.
- [12] Milan Vujanović; Numerical modelling of multiphase flow in combustion of liquid fuel; Doktorski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2010.
- [13] K. Hanjalić, M. Popovac, M. Hadžiabdić; A robust near-wall elliptic-relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD; International Journal of Heat and Fluid Flow 25 (2004) 1047–1051
- [14] AVL FIRE v.8, Spray, AVL, Graz, 2005.
- [15] AVL FIRE: Lagrangian Multiphase Module Manual, version 2011.

- [16] Jakov Baleta: Numerical investigation of wallfilm formation for selective catalytic reduction applications; Diplomski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2013.
- [17] Abramzon B., Sirignano W.A., Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations, AIAA 26th Aerospace Sciences Meeting, 1988.
- [18] Joo Youn Kim, Seung Hyup Ryu, Ji Soo Ha; Numerical prediction on the characteristics of spray-induced mixing and thermal decomposition of urea solution in SCR system; Fall Technical Conference of the ASME Internal Combustion Engine Division; 2004.
- [19] Dipl. Ing. Daniele Suzzi; Diesel Nozzle Flow and Spray Formation: Coupled Simulations with Real Engine Validation; Institute of Aerospace Thermodynamics Universität Stuttgart 2009.
- [20] Ivo Džijan; Razvoj metode kontrolnih volumena na nestrukturiranoj mreži; Magistarski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2000.
- [21] Ivan Korade; Izračun otpora krovne kutije montirane na osobni automobil; Diplomski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2009.
- [22] Severino Krizmanić; Novi algoritam za povezivanje polja brzine i tlaka; Doktorski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2011.
- [23] Željko Tuković; Metoda kontrolnih volumena na domenama promjenjivog oblika; ; Doktorski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2005.
- [24] Andrija Buljac; Utjecaj ugradbene visine stražnjeg krila na aerodinamičke sile pri gibanju automobila; Završni rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2013.
- [25] Damir Foschio; Utjecaj modela turbulencije na rezultate numericke simulacije izgaranja ugljene prašine; Diplomski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2012.
- [26] Hrvoje Drašković; Numerička simulacija strujanja vode kroz zasun; Završni rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2008.
- [27] Antun Šikić; Trodimenzionalna računalna simulacija ubrizgavanja goriva u obliku spreja Diplomski rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2009
- [28] Dukowicz J.K., Quasi- steady droplet change in the presence of convection, informal report Los Alamos Scientific Laboratory, LA7997-MS.
- [29] Ranz W.E., Marshall W.R., Evaporation from drops, Chem. Eng. Prog. 48, 141- 146, 173-180, 1952.
- [30] Bose A.K., Pei C.T., Evaporation Rates in Spray Drying, Can. J. Chem., 42, 252, 1964.

-
- [31] Mislav Kirac; Tehno-ekonomska analiza postrojenja za energetske uporabu komunalnog otpada ; Završni rad; Fakultet strojarstva i brodogradnje; Zagreb; 2008.
- [32] Nishioka, A., Sukegawa, Y., Katogi, K., Mamada, H., Kowatari, T. A Study of a New Aftertreatment System (2): Control of Urea Solution Spray for Urea-SCR, SAE 2006-01-0644, 2006.
- [33] Isabella Nova, Enrico Tronconi; Urea-SCR Technology for deNO_x After Treatment of Diesel Exhausts; Springer Science+Business Media New York 2014.
- [34] Mundo, C., Sommerfeld, M., Tropea, C. Droplet-Wall Collisions: Experimental Studies of the Deformation and Breakup Process, Int. J. Multiphase Flow, Vol. 21, No. 2, pp. 151-173, 1995.
- [35] CHEMKIN Software; Theory Manual Release 4.0; June 2004—Revision A
- [36] A. Hamid, M. A. Mehmood, N. Irfan, K. Waheed and M. T. Javed; Effect of process parameters and injector position on the efficiency of NO_x reduction by selective non catalytic reduction technique