

Prilog matematičkom modeliranju izgaranja plinovitog goriva u ložištu generatora pare

Duić, Neven

Doctoral thesis / Disertacija

1998

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:235:159685>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2025-03-04**

Repository / Repozitorij:

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



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

**PRILOG MATEMATIČKOM MODELIRANJU
IZGARANJA PLINOVITOG GORIVA U LOŽIŠTU
GENERATORA PARE**

DOKTORSKA DISERTACIJA

MENTOR:

PROF. DR.SC. ŽELJKO BOGDAN, DIPL.ING.

AUTOR:

MR.SC. NEVEN DUIĆ, DIPL.ING

ZAGREB, 1998

PODACI ZA BIBLIOGRAFSKU KARTICU:

UDK: 621.181:519.976.5:519.632

Ključne riječi: ložište, generator pare, izgaranje, numeričko modeliranje

Znanstveno područje: TEHNIČKE ZNANOSTI

Znanstveno polje: strojarstvo

Institucija u kojoj je rad izrađen: Fakultet strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu

Mentor rada: Dr.sc. Željko Bogdan, red. prof.

Broj stranica: 173 stranica disertacije

Broj slika: 73

Broj tablica: 28

Broj korištenih bibliografskih jedinica: 140

Datum obrane: _____

Povjerenstvo:

Dr.sc. Nikola Šerman, red. prof., Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb

Dr.sc. Željko Bogdan, red. prof., Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb

Dr.sc. Slavko Šneller, red. prof., Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb

Dr.sc. Rajka Budin, red. prof., Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb

Dr.sc. Zdravko Virag, izv. prof., Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb

Institucija u kojoj je rad pohranjen: _____

Postavka XXVIII, 1. dio

Svaka pojedinačna stvar, ili svaka stvar koja je konačna i ima ograničeno postojanje, može da postoji, i da bude određena za delanje, samo ako je za postojanje i za delanje određena od drugoga uzroka, koji je, isto tako, konačan, i ima ograničeno postojanje. A taj uzrok, sa svoje strane, može da postoji, i da bude određen za delanje, samo ako je određen da postoji i da dela od drugoga uzroka, koji je takođe konačan, i ima ograničeno postojanje. I tako u beskonačnost.

Postavka XXXII, 1. dio

Volja ne može da bude nazvana slobodnim, nego samo nužnim uzrokom.

Definicija VI, 2. dio

Pod stvarnošću i savršenstvom razumem jedno isto.

Postavka XXXV, 2. dio

Lažnost se sastoji u oskudici saznanja, koju sadrže u sebi neadekvatne, ili nepotpune i nejasne ideje.

Postavka XLIV, 2. dio

U prirodi razuma ne leži da posmatra stvari kao slučajne nego kao nužne.

Postavka XLVIII, 2. dio

U duhu nema nikakve apsolutne ili slobodne volje, nego je duh opredeljen da hoće ovo ili ono od uzroka, koji je takođe opredeljen od drugoga, a ovaj opet od drugoga, i tako u beskonačnost.

Primedba Postavke II, 3. dio

[...] Sve ovo doista pokazuje da kako odluka duha tako i prohtev i opredeljenje [determinacija] tela od prirode jesu istovremeni, ili, bolje, oni su jedna ista stvar koju mi, kad se ona posmatra pod atributom mišljenja i kad se njime objašnjava, nazivamo odlukom, a kad se posmatra pod atributom prostiranja, i kad se izvodi iz zakona kretanja i mira, nazivamo opredeljenjem; [...] - Dakle, oni koji veruju da govore, ili da čute, ili da rade nešto iz slobodne odluke duha, ti sanjaju otvorenih očiju.

(Baruch de **Spinoza**,

Etika, geometrijskim redom izložena i u pet delova podeljena)

SADRŽAJ

Predgovor	1
Sažetak	2
Summary	3
1. UVOD	4
2. MATEMATIČKI MODEL	11
2.1. UVOD	11
2.1.1. Višekomponentno reaktivno strujanje.....	11
2.1.2. Transportni procesi.....	12
2.2. MODELIRANJE IZGARANJA.....	13
2.2.1. Arrheniusov zakon brzine reakcije.....	14
2.2.2. Globalni model izgaranja	15
2.2.3. Detaljni model izgaranja plina	16
2.2.4. Konstante ravnoteže	17
2.2.5. Temperatura izgaranja.....	19
2.2.6. Izgaranje u sistemu H_2-O_2	20
2.2.7. Nastajanje dušičnih oksida u ložištima	25
2.2.8. Sistem H_2 -zrak	26
2.2.9. Sistem CH_4 -zrak	29
2.2.10. Sistem prirodni plin-zrak.....	37
2.3. MODELIRANJE TRANSPORTNIH PROCESA.....	39
2.3.1. Opća transportna jednačba	39
2.3.2. Difuzivni transport	42
2.4. PRIJENOS TOPLINE ZRAČENJEM.....	46
2.4.3. Model zračenja u slučaju sivih, difuznih stijenki.....	50
2.5. SPREGNUTOST IZGARANJA I TRANSPORTNIH PROCESA.....	53
2.5.1. Brzina produkcije kemijske vrste.....	53
2.5.2. Izvor topline izgaranjem.....	54
2.5.3. Jednačbe modela nakon sprezanja.....	54
2.6. MODELIRANJE TURBULENCIJE.....	55
2.6.1. Usrednjavanje transportnih jednačbi.....	56
2.6.2. Modeliranje Reynoldsovih napreznja (Boussinesqova hipoteza).....	59
2.6.3. Prandtlova teorija duljine puta miješanja.....	61
2.6.4. Usrednjene transportne jednačbe.....	61
2.7. TERMODINAMIČKE KONSTITUTIVNE RELACIJE	62
2.7.1. Specifična entalpija smjese	62
2.7.2. Specifična toplina smjese	63
2.7.3. Koeficijent dinamičke viskoznosti.....	63
2.7.4. Gustoća.....	63
2.7.5. Ostale termodinamičke konstitutivne relacije.....	64
2.8. REKAPITULACIJA MATEMATIČKOG MODELA PROCESA U LOŽIŠTU	64
3. NUMERIČKA PROCEDURA	67

3.1. METODA KONTROLNIH VOLUMENA.....	67
3.1.1. Integracija opće transportne jednačbe	69
3.1.2. Stabilnost.....	72
3.2. INTEGRACIJA JEDNADŽBI STRUJANJA.....	73
3.2.1. Pomaknuta mreža	73
3.2.2. Jednačba količine gibanja kao transportna jednačba.....	73
3.2.3. Jednačba tlaka	80
3.3. PRORAČUN BRZINE IZGARANJA ZA SISTEM REAKCIJA.....	83
3.3.1. Model izgaranja s konačnim brzinama reakcija kao sistem običnih diferencijalnih jednačbi	84
3.3.2. Proračun temperature	85
3.3.3. Vrijeme zadržavanja.....	87
3.3.4. Početne vrijednosti koncentracija i temperature	87
3.3.5. Spregnutost jednačbi transporta i reaktivnog sistema	88
3.3.6. Problemi oko stabilnosti sprege	90
3.4. ZONALNA METODA PRORAČUNA PRIJENOSA TOPLINE ZRAČENJEM.....	92
3.4.1. Zonalna metoda	93
3.4.2. Hottelova zonalna metoda.....	93
3.4.3. Metoda Monte Carlo	96
3.5. INTEGRACIJA SKALARNIH JEDNADŽBI	99
3.5.1. Jednačbe kemijskih vrsta.....	101
3.5.2. Jednačba temperature	101
3.6. RUBNI UVJETI.....	103
3.7. RJEŠAVANJE LINEARNOG SISTEMA ALGEBARSKIH JEDNADŽBI	105
3.7.1. Relaksiranje.....	106
3.8. ALGORITAM ZA RJEŠAVANJE SPREGNUTIH SISTEMA NELINEARNIH ALGEBARSKIH JEDNADŽBI.....	107
4. REZULTATI.....	111
4.1. IZGARANJE U SISTEMU H ₂ -ZRAK.....	112
4.2. HORIZONTALNO LOŽIŠTE.....	114
4.3. VERTIKALNO LOŽIŠTE	126
5. ZAKLJUČAK	142
DODATAK	144
A. INDEKSNA NOTACIJA	144
B. REYNOLDSOV TRANSPORTNI TEOREM	145
C. RAČUNANJE POVRŠINA DIREKTNE IZMJENE.....	146
D. THOMASOV ALGORITAM.....	148
E. VIŠEMREŽNA KOREKTIVNA METODA (MULTIGRID).....	148
F. GEAROVA METODA	152
POPIS OZNAKA	158
LITERATURA	165
Kratka biografija.....	172
Short Biography	173

PREDGOVOR

Ovaj je rad nastao kao daljnji razvoj matematičkog modela procesa u ložištu generatora pare, prethodno postavljenog u magistarskom radu, pokušavajući popraviti upravo jedan od njegovih dijelova koji su najviše zahtijevali poboljšanje: model izgaranja. Potreba za uzimanjem u obzir detaljnih mehanizama izgaranja, radi mogućnosti proračuna nastanka polutanata, te poteškoće pri rješavanju takvih modela na način koji se pružao kao prirodan slijed stvari u numeričkoj dinamici fluida, sve je to dalo impulsa za ideju na kojoj se osniva ovaj rad. Metoda razvijena u radu, bazirana na modeliranju svakog pojedinog kontrolnog volumena kemijskim reaktorom, ima izrazito veliku potrebu za kompjuterskom snagom. Ali eksponencijalni razvoj računala kojeg smo svjedoci zadnje dvije dekade, gotovo da nas drži u uvjerenju da će ono što se prilikom izrade ovoga rada činilo nepraktičnim, za svega koju godinu postati svakodnevna praksa u numeričkoj dinamici fluida.

Ovom bih prilikom želio zahvaliti mentoru profesoru dr.sc. Željku Bogdanu, kao i svima koji su mi pomogli savjetima ili diskusijama u izradi ovoga rada. Osim toga želio bih spomenuti i suprugu Irenu Ladiku, koja je preživjela sve stranice ove disertacije, pojedinačno.

SAŽETAK

Izgrađen je matematički model produkcije NO_x i drugih polutanata prilikom izgaranja prirodnog plina u ložištu generatora pare. Na predmiješanu smjesu prirodnog plina i zraka primijenjen je homogeni model strujanja. Kinetički sistem izgaranja prirodnog plina uključuje dva glavna reaktivna lanca, direktnu oksidaciju metana i indirektnu preko rekombinacije metilnih radikala i oksidacije etana. Sistem produkcije dušičnih oksida obuhvaća neravnotežni Zeldovichev mehanizam te nastanak dušik (II) oksida preko dušik (I) oksida. Izgaranje metana u zraku predstavljeno je sistemom od 143 elementarne reakcije u kojem sudjeluje 31 kemijska vrsta.

Predložen je postupak povezivanja računanja brzina produkcije kemijskih vrsta rješavanjem kinetičkog modela integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi s računanjem prijenosa topline i mase metodom kontrolnih volumena. Postupak pretpostavlja da se kontrolni volumen može predstaviti kemijskim reaktorom u kojem se na ulazu (tj. na početku) nalazi smjesa čije je stanje opisano izlaznim stanjem iz uzvodnih kontrolnih volumena. Iz promjena koncentracija i temperature tijekom zadržavanja u kontrolnom volumenu (kemijskom reaktoru) računaju se brzine produkcije i volumenski toplinski tok izgaranjem. Kinetički sistem, predstavljen sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi, izrazito je krut, te je stoga rješavan Gearovom metodom, a promjene temperatura, koja se mijenja u zavisnosti od koncentracija kemijskih vrsta, računaju se implicitno iz specifičnih molarnih entalpija formacije smjese.

Model prijenosa topline i mase rješavan je metodom kontrolnih volumena, gdje je raspredanje tlaka i brzina načinjeno prema modifikaciji uobičajenih metoda, a za rješavanja matrice sistema primijenjen je linijski Gauss-Seidel postupak, ubrzan metodom višemrežne aditivne korekcije (multigrid). Turbulencija je modelirana pomoću Prandtllove duljine puta miješanja, a utjecaj turbulencije na izgaranje je zanemaren. Duljina puta miješanja propisuje se kao geometrijska značajka u ovisnosti o tipu strujanja. Prijenos topline zračenjem računat je zonalnom metodom, čije dvije varijante su ugrađene u model: Hottelova i Monte Carlo.

Kinetički model testiran je na jednostavnom primjeru izgaranja smjese vodika i kisika za koji se mogu naći rezultati u literaturi. Sprega modela prijenosa topline i mase u ložištu i kinetičkog modela uspoređena je s rezultatima mjerenja dobivenim na eksperimentalnom ložištu u IJmuidenu.

SUMMARY

The mathematical model of NO_x and other pollutants production in the steam generator furnace fueled by natural gas was devised. The premixed flame is considered to be mainly kinetically controlled. The kinetic system of natural gas combustion includes two main reactive chains, direct methane oxidation and indirect, through recombination of methyl radicals and consequent ethane oxidation. Nitrogen oxides production comprises of nonequilibrium Zeldovich, nitrogen dioxide and nitrous oxide mechanisms. The combustion of methane in air is represented by 31 chemical species taking part in 143 elementary reactions.

An algorithm of coupling the calculation of production rates by the integration of the system of ordinary differential equations with the calculation of the heat and mass transfer by the control volume method was advised. The algorithm assumes that the control volume can be represented by the chemical reactor whose initial conditions are set by the state of the upwind control volumes. The production rates and heat source are calculated from the change of chemical species mass fractions and the mixture temperature during the time the mixture spends in the control volume.

Transport phenomena are solved by the control volume method. Modifications of usual methods for decoupling of pressure and velocity equations are applied, and line Gauss-Seidel method accelerated by additive correction multigrid is used as a solver. Prandtl mixing length method is applied to turbulence modeling in transport phenomena, while the influence of turbulence on combustion was neglected. Mixing length is proscribed as geometry flow type dependent. Radiative heat transfer is solved by zone method, either by Hottel or Monte Carlo, both variants being implemented in the model.

Kinetic model was tested on combustion of hydrogen in oxygen, for which the results could be obtained in the literature. The coupling of the heat and mass transfer in the furnace with the combustion model was compared with the results obtained from the experimental furnace in IJmuiden.

1. UVOD

Svrha ovog rada je izgradnja modela produkcije NO_x i drugih polutanata prilikom izgaranja prirodnog plina u ložištu generatora pare. Prirodni plin se sve češće koristi u zadnje vrijeme za dobivanje električne energije zbog mogućnosti povećanja efikasnosti procesa pretvorbe energije kogeneracijom, lakše prilagodbe procesa izgaranja sve strožim ekološkim propisima, te zbog sve veće dostupnosti kao posljedica izgradnje magistralnih panevropskih plinovoda.

Matematičko modeliranje pojava u ložištu generatora pare, koje obuhvaćaju prijenos topline i mase te izgaranje (dakle strujanje smjese goriva, zraka, dimnih plinova te čitavog niza nestabilnih kemijskih vrsta, njihovog međusobnog reagiranja i pretvaranja kemijske energije u toplinsku, te prenošenje te topline konvekcijom, kondukcijom i zračenjem na hladene zidove ložišta), počelo je razvojem modela u kojima su pretpostavljene prosječne vrijednosti fizikalnih veličina po čitavom ložištu te trenutno miješanje kemijskih vrsta [1], npr. normativna metoda [2]. Takvi modeli daju samo grubu sliku procesa u obliku prosječnih iznosa temperature plina i prosječnog toplinskog toka na stijenke, ali ne treba podcjenjivati njihovu vrijednost pri rješavanju važnih inženjerskih problema poput proračuna toplinske bilance ložišta. Kako se temelje na velikoj količini empirijskog znanja njihova je primjena vezana za pojedini objekt. Distribucija temperature dimnih plinova, o kojoj npr. ovisi produkcija NO_x , te distribucija toplinskih tokova ne može se proračunati pomoću ovih modela. Daljnji razvoj matematičkog modeliranja ložišta uvodi vertikalnu podjelu na zone u kojima se podrazumijevaju prosječne vrijednosti fizikalnih veličina [3], što je poboljšalo kvalitetu rezultata. Pregled ovih modela dan je u [4]. Razvojem numeričke dinamike fluida i metoda za rješavanje višedimenzionalnih eliptičnih problema strujanja postalo je moguće izračunati distribucije fizikalnih veličina u ložištu [5-12]. Problem koji se javio je iznalaženje optimalnog matematičkog modela koji bi dovoljno detaljno i dovoljno općenito obuhvatio fizikalne i kemijske procese koji se odvijaju u ložištu u cilju dobivanja željenih rezultata (bilo distribucije toplinskih tokova ili produkcije NO_x), a da bi još uvijek takav model bio rješiv raspoloživim računalima.

Pri izgaranju plinovitog goriva u ložištu generatora pare usporedno se odvija više lanaca reakcija. Svaka pojedina reakcija sastoji se od cijelog niza elementarnih međureakcija. Izgaranje metana odvija se preko dva glavna paralelna lanca. Jedan nastaje postepenim odbacivanjem atoma vodika, a drugi rekombinacijom dvaju metilnih radikala CH_3 u molekulu etana (C_2H_6), te opet postepenim gubitkom atoma vodika. Paralelno s izgaranjem metana nastaju dušični oksidi i to u nekoliko lanaca. Sve elementarne reakcije su dvosmjerne, a pretežitost jednog od dvaju smjerova ovisi o temperaturi i koncentracijama pojedinih ključnih kemijskih vrsta. O temperaturi ovisi i utjecaj koji pojedina elementarna reakcija ima na ostale procese u ložištu. Izgaranje metana u zraku moguće je predstaviti vrlo velikim rasponom modela, kako po broju elementarnih reakcija, tako i po broju kemijskih vrsta koje su uzete u obzir. Tako na primjer Miller [13] navodi sistem od 234 reakcije i 47 kemijskih vrsta. Međutim, većina autora koji modeliraju prijenos topline i mase u ložištu (ili općenito u komori izgaranja) koriste pojednostavljeni model izgaranja koji podrazumijeva jednostepenu reakciju reaktanti \rightarrow produkti [5], tj. globalni model, uz rudimentarno modeliranje nastanka dušičnih oksida. Ponekad se primjenjuje i dvostepeni model izgaranja [14, 5]. Globalni će

model izgaranja dati dobre rezultate kada se promatra generiranje topline i njeno prenošenje na stijenke.

Detaljni modeli izgaranja metana u zraku [13, 15-25] uglavnom se primjenjuju na tzv. model dobro izmiješanog kemijskog reaktora (engl. *well stirred reactor*). U njemu se pretpostavlja prosječna vrijednost svih veličina po čitavoj domeni, te zanemaruje utjecaj strujanja. Pokušaj sprežanja strujanja i kemijske kinetike napravili su Madsen i Sinovec [26] u metodi PDECOL, ali ta metoda je ograničena na jednodimenzionalni slučaj. Oni transformiraju transportne parcijalne diferencijalne jednačbe u sistem običnih diferencijalnih jednačbi tako da svaku parcijalnu diferencijalnu jednačbu za svaki kontrolni volumen zamjenjuju jednom običnom diferencijalnom jednačbom po vremenu.

Prednosti primjene prije spomenutog jednostepenog globalnog modela izgaranja su velike obzirom na njegovu jednostavnu implementaciju. Taj model daje dobre rezultate pretvorbe kemijske energije u toplinsku, te je često korišten i testiran na raznim objektima. Međutim, globalni model izgaranja treba nekako postaviti za svaki pojedini sastav goriva, što se npr. može napraviti eksperimentalnim putem. Osim tog nedostatka, ovaj model ne opisuje produkciju dušičnih oksida i ugljik (II) oksida, najznačajnijih zagađivača koji nastaju prilikom izgaranja plinovitog goriva.

Kao pokušaj otklanjanja potonjeg nedostatka globalnog modela Zeldovich [13] je predložio računanje produkcije NO na temelju ravnotežnih koncentracija radikala O i OH te temperature. Taj pristup obuhvaća najznačajniji lanac nastanka termičkog dušik (II) oksida, ali kod plamena bogatih kisikom daje precijenjene rezultate [13]. Stoga je za proračun produkcije NO neophodno uračunati utjecaj neravnotežnih koncentracija slobodnih radikala. Kako koncentracije slobodnih radikala, O, H, OH, N, zbog svoje vrlo velike reaktivnosti kontroliraju brzinu odvijanja procesa izgaranja, potrebno je pri modeliranju nastanka termičkog NO uključiti čitav kinetički mehanizam izgaranja metana. Kinetiku određenog sistema reakcija je moguće prikazati kao sistem običnih diferencijalnih jednačbi, gdje se za svaku kemijsku vrstu u sistemu postavlja odgovarajuća obična diferencijalna jednačba, čiji pribrojnici odgovaraju reakcijama u sistemu.

Poznavanje koncentracija slobodnih radikala i utjecaja kemijske neravnoteže daje uvid u emisiju štetnih sastojaka prilikom sagorijevanja plinovitog goriva u ložištu generatora pare. Zato je potrebno povezati proračun prijenosa topline i mase s proračunom kinetike izgaranja plina. Računanje prijenosa topline i mase [27] svodi se na podjelu domene na određeni, konačni broj kontrolnih volumena s uprosječenim vrijednostima relevantnih fizikalnih veličina, integraciju transportnih jednačbi modela po svakom od kontrolnih volumena, te rješavanje rezultirajućeg sistema algebarskih bilančnih jednačbi. Tako definiran kontrolni volumen podsjeća na model dobro izmiješanog kemijskog reaktora. Međutim, računanje je kinetike izgaranja primjenom modela kemijskog reaktora na svaki kontrolni volumen vrlo zahtjevan postupak obzirom na kompjutersko vrijeme i na stabilnost postupka. Potrebno je definirati način na koji se taj model spreže s modelom strujanja: početne uvjete, vrijeme integracije, produkciju kemijskih vrsta te volumenski toplinski tok oslobođen izgaranjem.

Kako su iznosi brzine produkcije za pojedine kemijske vrste nekoliko redova veličine veći od konvektivno-difuzivnih prinosa, uklapanje izgaranja na način kako to predlaže Patankar [27] dovodi do globalne nestabilnosti numeričkog postupka [28]. Pokazalo se da, prilikom rješavanja sistema s većim brojem kemijskih vrsta i reakcija, brzina produkcije predstavlja

izvor nestabilnosti cjelokupnog sistema i da je vrlo teško postići konvergenciju iterativnog postupka rješavanja. Kemijska kinetika izgaranja je vrlo brzi proces u kojem je kemijska neravnoteža važan činilac. Zbog svega toga se nametnula potreba pronaći način sprežanja modela kemijskog reaktora i modela prijenosa topline i mase. Primjena modela kemijskog reaktora omogućuje računanje brzine produkcije odjednom za sve kemijske vrste što je značajno za poboljšanje stabilnosti postupka.

U literaturi je problem nestabilnosti zamijećen [27]. Vos [28] je za difuzivni plamen predložio raspredanje proračuna prijenosa topline i mase od proračuna kemijske kinetike na taj način da se prvo riješe transportne jednadžbe kemijskih vrsta uz pretpostavku zanemarenja brzine produkcije, a da se utjecaj izgaranja na distribuciju kemijskih vrsta u sistem unese rješavanjem kinetičkog modela predstavljenog sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi.

Rješenje transportnih jednadžbi kemijskih vrsta uz takvu pretpostavku daje konstantne distribucije masenih udjela jednake ulaznim rubnim uvjetima. Početne vrijednosti masenih udjela u prethodnom izrazu su uvijek iste za sve kontrolne volumene, što nikako ne odgovara stvarnosti u slučaju predmiješanog plamena. Prilikom rješavanja difuzivnog plamena, dakle takvog u kojem gorivo i oksidant nisu predmiješani, izgaranje se odvija u zoni difuzivnog miješanja tih dviju struja te će takav pristup dati zadovoljavajuće rezultate. Međutim, u slučaju rješavanja predmiješanog plamena taj bi pristup dao rezultate sa značajno precijenjenom temperaturom, jer bi jedno te isto gorivo izgaralo uvijek iznova, te bi se rezultati značajno razlikovali obzirom na broj kontrolnih volumena.

Hipoteza

U ovoj se disertaciji predlaže postupak povezivanja računanja brzina produkcije kemijskih vrsta rješavanjem kinetičkog modela integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi s računanjem prijenosa topline i mase metodom kontrolnih volumena. Predloženi postupak pretpostavlja kontrolni volumen kao kemijski reaktor. Na njegovom se ulazu nalazi smjesa stanja opisanog izlaznim stanjem iz uzvodnih kontrolnih volumena. Te ulazne vrijednosti predstavljaju početne uvjete. Iz promjena koncentracija kemijskih vrsta i temperature tijekom zadržavanja u kontrolnom volumenu (kemijskom reaktoru) računaju se brzine produkcije kemijskih vrsta i volumenski toplinski tok koji se oslobađa izgaranjem. Iako postupak trpi od problema sa stabilnošću, ipak je dobiven konzistentan, stabilan i konvergirajući mehanizam rješavanja modela procesa u ložištu generatora pare. On obuhvaća detaljan model izgaranja, te je kompatibilan s metodom kontrolnih volumena. Dobiveni rezultati sadržavaju koncentracije NO_x i CO na izlasku iz ložišta, kao i njihove distribucije po ložištu. Takav matematički model ložišta generatora pare predstavlja jaki alat u proučavanju mehanizama nastanka kemijskih spojeva koji zagađuju okolinu, što omogućuje osmišljavanje postupaka smanjivanja njihove produkcije.

Metodika sprežanja

Prilikom modeliranja procesa u ložištu treba posvetiti pažnju nekolicini značajnih fizikalnih mehanizama. Odabir zadovoljavajućeg modela za svaki od njih može biti od presudne važnosti za kvalitetu rezultata. Kod modeliranja strujanja višekomponentne smjese treba voditi računa da pojedine komponente mogu imati različitu mehaniku gibanja. Ako pojedine komponente imaju značajno različita termodinamička svojstva, kao što je na primjer u slučaju dvofaznog strujanja, tada će za svaku takvu komponentu biti potrebno postaviti zasebne jednadžbe količine gibanja [26]. Postoji čitav niz takvih modela koji se skupnim imenom nazivaju sklizni modeli [5]. Međutim, ako sve komponente imaju slična termodinamička

svojstva (istog reda veličine), kao što je slučaj kod izgaranja plina, ili ako jedna od komponenata sa značajno različitim svojstvima predstavlja samo mali dio smjese, uobičajeno je pretpostaviti da im je mehanika gibanja ista, što znači da su brzine svih komponenata jednake te se računaju samo brzine smjese. Takav se model naziva homogeni model strujanja i primijenjen je u ovom radu.

Pristup modeliranju izgaranja značajno ovisi i o načinu miješanja goriva i oksidanta pri ulasku u ložište [26, 5], prema tome da li je gorivo ušlo u ložište već pomiješano s oksidantom ili je do miješanja došlo tek u ložištu. Razlikuju se dva tipa plamena u zavisnosti od procesa koji najznačajnije djeluje na brzinu izgaranja, da li kemijska kinetika ili difuzija mase. Kinetički plamen [29] ovisi prvenstveno o brzini izgaranja, te se pojavljuje pri izgaranju već predmiješane smjese goriva i oksidanta. Za difuzivni plamen [16, 30-34] se može pretpostaviti da najviše ovisi o procesu miješanja goriva i oksidanta, što je značajnije sporiji proces od kinetike izgaranja. Takav će plamen nastati kada se gorivo i oksidant miješaju tek nakon ulaska u ložište. Većina autora se ograničava samo na jedan od ova dva tipa plamena. Model difuzivnog plamena podrazumijeva da do izgaranja dolazi samo na fronti plamena, te da je u tome području reakcija momentalna odnosno brzina reakcije beskonačna. Time se transportne jednadžbe kemijskih vrsta zamjenjuju samo jednom transportnom jednadžbom udjela smjese (engl. *mixture fraction*). Međutim, model difuzivnog plamena ne može predvidjeti što se događa s predmiješanim plamenom, kod kojeg je smjesa goriva i oksidanta na izlasku iz gorionika relativno hladna. Mjesto fronte plamena ne ovisi o mjestu miješanja struje goriva i oksidanta, već o mjestu gdje dolazi do zapaljenja plamena koje je uvjetovano prijenosom topline i mase.

S druge strane, ako model kinetičkog plamena sadrži model turbulentne difuzije mase, takav model može obuhvatiti i plamen koji je prvenstveno uvjetovan miješanjem goriva i oksidanta. To je značajna prednost kinetičkog modela. Mana mu je u tome što za razliku od modela difuzivnog plamena, gdje je modeliranje međuzavisnosti turbulencije i izgaranja sasvim uobičajena praksa, ili dodavanjem neke od funkcija gustoće vjerojatnosti (engl. *probability density function*, pdf, [26, 35-38]), ili pretpostavljanjem površine plamena (engl. *flamelet model*, [31, 34]), u modelu kinetičkog plamena nema jasnog puta. Najčešće primjenjivan (engl.) *Eddy Break-Up* model [39, 40] uopće ne daje vezu brzine izgaranja s kinetikom nego isključivo s turbulentnim transportnim veličinama, daje sasvim nefizikalne rezultate uz stijenku, te prati samo udio smjese, dakle ograničen je na globalni model izgaranja. Sličan je i statistički model Braya i Mossa [41] koji također podrazumijeva jednostepeno izgaranje bez uzimanja u obzir međureakcija. Oni u [14] doduše model prilagođuju dvostepenom izgaranju propana, prvo u vodik i ugljik (II) oksid, a tek onda u konačne produkte, ali niti s time ne uzimaju u obzir proračun produkcije dušičnih oksida u ovisnosti o neravnotežnoj koncentraciji slobodnih radikala.

Kako se koncentracije kemijskih vrsta mijenjaju značajno različitim brzinama kinetički sistem ima veliki raspon vremenskih konstanti. Matematički je taj sistem predstavljen sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi. Može se dogoditi da numeričko rješenje dominantno zavisi upravo o kemijskim vrstama s najkraćim vremenskim konstantama, čak i onda kad su koncentracije tih vrsta zanemarive. To i jest inherentno lancima reakcija da su najzavisnije od brzine intermedijarnih reakcija, iako u njima nastaju vrste koje su često sasvim zanemarivih koncentracija. Takvi se sistemi nazivaju krutima te se pregled metoda za njihovo rješavanje može naći u [26]. Za rješavanje sistema običnih diferencijalnih jednadžbi

koji predstavlja kinetički sistem izabrana je Gearova metoda [42], primijenjena u [28] također na modelu izgaranja.

Sistem egzotermnih reakcija kakav je izgaranje plina izrazito je neizoterman, te je stoga trebalo razviti postupak računanja temperature paralelno s rješavanjem sistema diferencijalnih jednačbi koji opisuje kemijsku kinetiku. Egzotermni procesi oslobađaju energiju, tj. kemijska energija prelazi u toplinsku. Klasičan inženjerski pristup preko ogrjevnih moći pojedinih kemijskih vrsta [43] nije primjenljiv jer podrazumijeva da se kemija promatra kao globalni model te da se reakcije odvijaju između definirane početne i konačne temperature. Stoga je primijenjen uvriježeni postupak u modeliranju kemijske kinetike [26, 28, 44] prema kojem se temperatura računa implicitno iz specifičnih molarnih entalpija formacije.

Integracija reaktivnog sistema predstavljenog sistemom običnih diferencijalnih jednačbi zahtjeva poznavanje početnih vrijednosti koncentracija kemijskih vrsta i temperature za svaki od kontrolnih volumena. Te je vrijednosti potrebno propisati. Sprezanje sistema reakcija s modelom strujanja u njegovoj diskretiziranoj varijanti, nudi rješenje. Uzeće se da ulazne vrijednosti u jedan kontrolni volumen odgovaraju izlaznim vrijednostima iz prethodnog kontrolnog volumena. Problem je kako to učiniti za trodimenzionalni slučaj, te kako se postaviti prema pojavi bifurkacije uzrokovane determiniranim kaosom. U [28] ovaj se problem zaobilazi tako da se kinetika sasvim raspreže od strujanja, čime se dobiva model primjenljiv jedino na difuzivni plamen, a ne na predmiješani kinetički plamen. Ova disertacija nudi metodu spreznja, primjenljivu na kinetički plamen, koja s jedne strane ima fizikalno opravdanje, a s druge strane, unatoč problemima sa stabilnošću, zadržava mogućnost rješivosti za relativno veliki raspon uvjeta.

Metoda spreznja kinetičkog kemijskog modela predstavljenog sistemom običnih diferencijalnih jednačbi i modela prijenosa topline i mase predstavljenog sistemom parcijalnih diferencijalnih jednačbi neminovno donosi probleme oko stabilnosti. Predloženo je više postupaka stabilizacije da bi se model procesa u ložištu uopće mogao riješiti. Glavni uzrok nestabilnosti postupka spreznja su bifurkacione pojave. Sprezanje ide preko početnih uvjeta kinetičkog sistema, koji je izrazito o njima ovisan, te pri malim promjenama značajno mijenja ponašanje. Ova disertacija navodi tehničke zahvate koji će smanjiti utjecaj bifurkacije, ali ih ne objašnjava.

Numerička procedura rješavanja transportnih procesa

Parcijalne diferencijalne jednačbe koje opisuju model prijenosa topline i mase rješavaju se u praksi numeričke dinamike fluida [45] (engl. *computational fluid dynamics*, CFD) uglavnom metodom konačnih elemenata [46] te metodom kontrolnih volumena. Metoda kontrolnih volumena je za sada prikladnija za simulaciju procesa izgaranja [47]. Osim toga značajno je jednostavnija za primjenu od metode konačnih elemenata. Kako metoda numeričkog rješavanja prijenosa topline i mase nije predmet ove disertacije, nego samo sredstvo rješavanja modela, iz prije je navedenih razloga primijenjena metoda koja se pokazala prikladnijom za jednostavniju implementaciju modela kinetike izgaranja. To je metoda kontrolnih volumena. Primjena iznesenog postupka spreznja modela kemijske kinetike s modelom prijenosa topline i mase moguća je i za metodu konačnih elemenata. Metoda kontrolnih volumena koju su razvili Spalding i njegovi suradnici [48] temelji se na integraciji relevantnih transportnih jednačbi po kontrolnom volumenu, što je opisano u [27].

Zbog spregnutosti parcijalnih diferencijalnih jednadžbi koje predstavljaju model strujanja (brzina i tlak) razvijani su posebni algoritmi koji omogućavaju rješavanje ovog sistema. Među poznatije spadaju algoritam razvijen za metodu SIMPLE [48] te od istih autora kasnije ponuđen postupak SIMPLER [49]. Značajan je i algoritam PISO [50] čija se usporedba s prethodnim za razne situacije može naći u [51]. U ovoj je disertaciji primijenjena kombinacija navedenih metoda što je detaljno objašnjeno u [52].

Numerički postupci za rješavanje sustava linearnih algebarskih jednadžbi, koji je rezultat integriranja diferencijalnih jednadžbi po konačnom broju kontrolnih volumena, vrlo su brojni. U ovoj disertaciji je za rješavanje matrice sistema primijenjen iterativni linijski Gauss-Seidel postupak [27] ubrzan metodom višemrežne aditivne korekcije (multigrid, [53-55]).

Modeliranje turbulencije

Strujanje fluida je inherentno trodimenzionalno i nestacionarno, neovisno o rubnim uvjetima, zbog nestabilnosti do koje dolazi kada utjecaj viskoznih naprezanja postane mali. Iako je moguće analitički opisati i numerički rješavati takvo nestabilno strujanje primjenom direktne numeričke simulacije [56-58], takav bi pristup bio sasvim neracionalan kada su predmet interesa pojave čija su karakteristična vremena i duljine značajno veća od onih najmanjih turbulentnih vrtloga. Utjecaj turbulencije se ne smije zanemariti, ali ga se može modelirati. U modelima koji se koriste u praksi fizikalne se veličine usrednjavaju, te se zatim računaju obzirom na relevantna karakteristična vremena i duljine, a utjecaj se vrtloga čija su karakteristična vremena i duljine manje, modelira, uglavnom prema Boussinesqovoj hipotezi. Postoji u literaturi veliki broj načina na koji se dobivene korelacije modeliraju, čiji se pregled može naći u [59, 5, 60], a ovdje se mogu spomenuti samo najčešće: model Prandtlove duljine puta miješanja [61], $k-\varepsilon$ model [62] i model Reynoldsovih naprezanja. U zadnje vrijeme uzimaju maha i modeli bazirani na računanju velikih vrtloga (engl. *Large Eddy Simulation*) [63-65] a modeliranju manjih vrtloga nekim od modela.

Za potrebe proračuna najinteresantnijih veličina u ložištu za tehničku upotrebu, toplinskih tokova i temperatura, bila bi sasvim neracionalna primjena zahtjevnog pristupa turbulenciji poput direktne numeričke simulacije, simulacije velikih vrtloga ili modela Reynoldsovih naprezanja. Međutim, obzirom na kinetiku izgaranja, zbog njene izrazito lokalne prirode, upravo bi direktna numerička simulacija bila idealna. Takav je pristup za sada neostvariv, ali treba predvidjeti, obzirom na rast kompjuterske moći, njegov potencijalan razvoj. Kako su sa stajališta kemijske kinetike svi ostali pristupi podjednako neprikladni, primijenjen je najjednostavniji model koji barem daje dobre rezultate obzirom na toplinske tokove i temperature. Model Prandtlove duljine puta miješanja pokazao se s te strane zadovoljavajući, a kako s druge strane nema gotovo nikakve dodatne zahtjeve za procesorskim vremenom i memorijom, primijenjen je u ovoj disertaciji. Duljina puta miješanja mora se međutim propisivati i to je jedan od najznačajnijih nedostataka ovoga modela. Prednosti su modela, za onoga koga strujanje ne zanima detaljno, međutim velike. Ne računa se nikakva dodatna jednadžba što značajno štedi procesorsko vrijeme i memoriju, a ako je jedan smjer strujanja prevladavajući nad drugima, što je djelomično slučaj u ložištu, ova metoda daje dobre rezultate. Duljina puta miješanja propisuje se kao geometrijska značajka u ovisnosti o tipu strujanja.

Prijenos topline zračenjem

Iako prijenos topline zračenjem nije u uskoj vezi s modeliranjem detaljnog kinetičkog reaktivnog sistema izgaranja plina u ložištu, zbog svoje se važnosti za distribuciju

temperature u ložištu njegovo modeliranje u ovoj disertaciji ne može izbjeći. Kako je izgaranje izrazito neizotermalna pojava, prijenos topline (tj. njeno odvođenje iz područja plamena) je od presudnog značaja za sam proces.

Razvijen je niz različitih metoda za proračun izmjene topline zračenjem koje se mogu svrstati u nekoliko grupa i čiji je pregled dan u [5]. Fluksne metode [66] prilagođavaju računanje prijenosa topline zračenjem prirodi transportnih jednadžbi, uz cijenu gubitka dijela informacije. Hottelova zonalna metoda [67, 1] je analitička, deterministička metoda koja za razliku od fluksnih metoda ne zanemaruje dio zračenja, ali je vrlo zahtjevna obzirom na kompjutersko vrijeme, te postavlja ograničenja u generiranju mreže i izrazito se komplicira prilikom uzimanja u obzir sivih zidova. Nekoliko je autora [68-69] umjesto integriranja Hottelovih površina direktne izmjene predložilo statistički pristup Monte Carlo metodom. Metoda se bazira na praćenju zraka što ju čini prirodnom u računanju prijenosa topline zračenjem jer time zahvaća samu prirodu zračenja. Ugradnja sive stijenke ili komplicirane geometrije gotovo da ne utječe na kompjutersko vrijeme, iako je metoda za mali broj kontrolnih volumena relativno neefikasna. Lockwood i Shah [70] razvili su metodu diskretnog transfera, kombinaciju između zonalnog i fluks pristupa primijenivši fluks metodu za proračun izmjene topline zračenjem između bliskih zona, a zonalnu metodu za proračun izmjene između dalekih zona. Treba još navesti i metodu diskretnih ordinata koja je predložena [71] s namjerom da se maksimalno prilagodi metodi kontrolnih volumena.

Usporedbom rezultata iz [72] i [73] može se zaključiti da je zonalna metoda osjetljivija na koncentraciju apsorbirajućih plinova od fluks metode za čitav red veličine. Smatralo se da je visoka točnost proračuna prijenosa topline zračenjem prilikom modeliranja procesa u ložištu generatora pare ključna, te da je stoga zonalni pristup optimalan. U model su ugrađeni i Hottelov i Monte Carlo pristup računanja površina direktne izmjene među zonama, s time da je prethodni ograničen na crne površine i aproksimaciju realnog plina jednim sivim plinom, dok potonji uključuje i sive površine te aproksimaciju realnog plina modelom tri siva plina.

Rezultati

Kinetički model je testiran na jednostavnom primjeru izgaranja smjese vodika i zraka za koji postoje rezultati objavljeni u literaturi. Takav je model (model kemijskog reaktora) zatim primijenjen i na izgaranje prirodnog plina i zraka.

Kako je model prijenosa topline i mase u ložištu već testiran u prethodnom radu [52] ovdje će se smatrati da taj dio modela daje sam za sebe zadovoljavajuće rezultate. Testirana je međutim sprega između kinetičkog modela i modela prijenosa topline i mase s rezultatima mjerenja dobivenim na eksperimentalnom ložištu u IJmuidenu [3].

2. MATEMATIČKI MODEL

U ovom se poglavlju postavlja matematički model procesa u ložištu generatora pare koji je kasnije u radu testiran. Matematički model obuhvaća nekoliko raznorodnih procesa: izgaranje, konvektivni i difuzivni prijenos topline i mase, te prijenos topline zračenjem, čijem se modeliranju stoga i prilazi iz različitih pravaca. Povrh njihovog međutjecaja treba uzeti u obzir i to što se ti procesi odvijaju u uvjetima turbulentnog strujanja. Za svaki od pojedinih procesa u ložištu već postoji više razina (prema složenosti) objavljenih modela i metoda rješavanja. Prilikom odabira i sprege pojedinih modela potrebno je stoga voditi računa o dostupnoj kompjuterskoj moći. Navedeni problem dovodi do toga da se pri modeliranju objekata koji obuhvaćaju gore navedene procese koriste uglavnom vrlo pojednostavljeni modeli, naročito izgaranja i zračenja. U ovoj se disertaciji, međutim, primjenjuje detaljni model izgaranja, uz precizni model zračenja, ali zato rudimentarni model turbulencije.

2.1. UVOD

Model je prikazan jednadžbama koje se zasnivaju na Eulerovom pristupu materijalnoj čestici i realizirane su u Kartezijevom koordinatnom sustavu. Razvijane su za stacionarno turbulentno strujanje slabo stlačive, newtonske, kemijski reaktivne, homogene smjese fluida. Pretpostavljeno je da se, kako kemijske vrste tako i smjesa, ponašaju po zakonu idealnog plina.

Jednadžbe transportnih procesa pisane su formalno za stlačivo strujanje, tj. uzeta je obzir zavisnost fizikalnih veličina o gradijentu gustoće, ali kako je gradijent tlaka sasvim zanemariv, te je i Machov broj nizak, mogla bi se sa zadovoljavajućom točnošću usvojiti pretpostavka nestlačivosti. Potrebno je međutim zadržati formalnu zavisnost fizikalnih veličina o gustoći u jednadžbama zbog značajnog utjecaja velikih gradijenata temperature koji su nužna pojava u ložištu.

2.1.1. Višekomponentno reaktivno strujanje

Strujanje fluida u ložištu je strujanje višekomponentne kemijski reaktivne smjese. Prilikom modeliranja takvog strujanja mogu se primijeniti dva pristupa: sklizni ili homogeni model. Sklizni model [5] dozvoljava da komponente čija se svojstva značajno razlikuju imaju i različite brzine. Za svaku je takvu komponentu potrebno postaviti zasebno jednadžbe količine gibanja [26].

Homogeni model pretpostavlja da su brzine svih komponenata unutar jednog kontrolnog volumena jednake te se računaju samo brzine smjese. Ovaj model je dobar za smjesu komponenata sličnih termodinamičkih svojstava. Naročito je važno za točnost rezultata da su sve komponente u istom agregatnom stanju. Ti su uvjeti sasvim zadovoljeni kod izgaranja plina što je i predmet ovoga rada, dok kod izgaranja mazuta i ugljena postoji po jedna tekuća odnosno kruta komponenta. U tom će slučaju homogeni model dati nešto slabije rezultate. Ako međutim neplinovita faza predstavlja samo mali dio smjese, homogeni model može dati zadovoljavajuće rezultate.

Gledano sa strane utjecaja na odvijanje procesa izgaranja pristup modeliranju sistema reakcija zavisi o načinu miješanja goriva i oksidanta pri ulasku u ložište [26, 5], prema tome koji proces najznačajnije djeluje na brzinu izgaranja, da li kemijska kinetika ili difuzija mase, plamen koji nastaje izgaranjem već predmiješane smjese goriva i oksidanta zove se kinetički plamen [29], a onaj kod kojeg se gorivo miješa tek u ložištu se zove difuzivni plamen [16, 30-34]. Kako se modeliranje tih dvaju pristupa značajno razlikuje većina se autora ograničava samo na jedan od dva tipa plamena.

Model difuzivnog plamena [30] pretpostavlja beskonačnu brzinu reakcija na fronti plamena, tj. da se u tome području izgaranje odvija momentalno, a da u preostaloj domeni ne dolazi do kemijskih reakcija. Fronta plamena se nalazi na mjestu gdje se dvije struje (goriva i oksidanta) miješaju i njena pozicija je direktna posljedica procesa prijenosa mase. Na taj se način transportne jednačbe kemijskih vrsta mogu zamijeniti samo jednom, tzv. transportnom jednačbom udjela smjese (engl. *mixture fraction*).

Takav model plamena, međutim, ni na koji način ne može predvidjeti što će se dogoditi s izgaranjem predmiješane smjese goriva i oksidanta koja relativno hladna izlazi iz gorionika, te čija pozicija fronte plamena ne ovisi o mjestu miješanja, već o mjestu gdje dolazi do zapaljenja plamena, tj. o prijenosu topline i mase.

Model kinetičkog plamena, ako sadrži model turbulentne difuzije mase, može obuhvatiti i difuzivni plamen, što bi se dakle moglo uzeti kao značajna prednost kinetičkog modela. S druge strane, model difuzivnog plamena sadrži modeliranje utjecaja turbulencije na izgaranje kao sastavni dio većine ponuđenih modela, ili dodavanjem neke od funkcija gustoće vjerojatnosti (engl. *probability density function*, pdf, [26, 35-38]), ili pretpostavljanjem površine plamena (engl. *flamelet model*, [31, 34]). Za model kinetičkog plamena, za razliku od modela difuzivnog plamena, u literaturi nema ponuđenog pristupa modeliranju turbulenciju pri korištenju detaljnog modela izgaranja. Najčešće se u praksi primjenjuje (engl.) *Eddy Break-Up* model [39-40] koji međutim uopće ne daje vezu brzine izgaranja s kinetikom nego isključivo s turbulentnim transportnim veličinama, uz to daje sasvim nefizikalne rezultate uz stijenku, te je praćenjem samo udjela smjese ograničen samo na globalni model izgaranja. Na sličan način postavljen je i statistički model Braya i Mossa [41] koji također podrazumijeva jednostepeno izgaranje bez uzimanja u obzir međureakcija. Isti autori u [14] doduše model prilagođuju dvostepenom izgaranju propana, prvo u vodik i ugljik (II) oksid, a tek onda u konačne produkte, ali niti s time ne omogućuju proračun dušičnih oksida čija produkcija ovisi o neravnotežnim koncentracijama slobodnih radikala.

2.1.2. Transportni procesi

Materija posjeduje diskretnu strukturu sastavljenu od elementarnih čestica: atoma, molekula i slobodnih iona, koje su nosioci nekih fizikalnih svojstava (količine gibanja, unutrašnje energije), npr. svojstva φ . Elementarne se čestice međusobno sudaraju i tada dolazi do bitne promjene iznosa njihovih fizikalnih svojstava. Srednji put između dva sudara zove se srednji slobodni put molekule λ , a srednje vrijeme između dva sudara srednje slobodno vrijeme τ . Usrednji li se fizikalno svojstvo φ na velikom broju elementarnih čestica dobije se prosječna vrijednost fizikalnog svojstva φ za makroskopsku česticu, koja se značajno mijenja nakon karakterističnog puta $\mathcal{L} \gg \lambda$ i vremena $\mathcal{T} \gg \tau$. Ako se sa dx i dt označe prostorni i vremenski korak u makrosvijetu, pri čemu je zadovoljen uvjet $dx \approx \mathcal{L}$ i $dt \approx \mathcal{T}$, tada

infinitesimalnom koraku dx_p , dt odgovara infinitesimalna promjena makroskopskog fizikalnog svojstva φ , koje tada postaje neprekidna funkcija vremensko-prostornih koordinata:

$$\varphi = \varphi(x_p, t) \quad (2.1)$$

Infinitesimalni volumen fluida može biti predstavljen materijalnom česticom, dakle skupom uvijek istih elementarnih čestica, ili omeđenim prostorom kroz koji prolaze materijalne čestice. Materijalni volumen je infinitesimalni volumen koji obuhvaća uvijek iste elementarne čestice, dakle prati materijalnu česticu, dok je prostorni volumen zadan u koordinatnom sistemu koji miruje u odnosu na promatrača. Lagrangov pristup strujanju fluida se sastoji upravo u tome da se pojedina materijalna čestica prati, dok je Eulerov pristup da se promatra prolaz materijalnih čestica kroz volumen definiran prostornim koordinatama. Ovaj se rad u potpunosti bazira na Eulerovom pristupu infinitesimalnom volumenu.

2.2. MODELIRANJE IZGARANJA

Kao što je već rečeno u uvodu modeliranje reaktivnog sistema ovisi o načinu miješanja goriva i oksidanta pri ulasku u ložište, tj. da li je za proces izgaranja najznačajnija kemijska kinetika (kinetički plamen) ili difuzija mase (difuzivni plamen). U radu se prišlo prvenstveno modeliranju kinetičkog plamena, iako će u diskusiji rezultata (poglavlje 4.2) biti više riječi o tome u kojoj se mjeri takav model može primijeniti i na difuzivni plamen.

Kinetički model izgaranja obuhvaća dakle ne samo spojeve koji ulaze u ložište, gorivo, kisik i dušik (te ostale komponente zraka), i one koji iz ložišta na kraju izlaze, produkte izgaranja, nego i čitav niz međuspojeva, koji nastaju i nestaju tijekom procesa izgaranja. Ti međuspojevi mogu biti vrlo nestabilni i izrazito reaktivni slobodni radikali, poput OH skupine ili elementarne kemijske tvari poput O, H i N atoma. Kao zajednički naziv za sve stabilne i nestabilne spojeve, za slobodne radikale te elementarne kemijske tvari koristit će se naziv kemijske vrste, preuzet iz anglosaksonske literature.

Sastav smjese, dakle zbira kemijskih vrsta, može se izraziti [44, 74-75] na više različitih načina. U ovoj se disertaciji to čini masenim udjelima, molarnim udjelima, koncentracijama i parcijalnim tlakovima. Ako je stanje smjese zadano temperaturom T , tlakom p , gustoćom ρ i brojem molova svake kemijske vrste n_i , ukupni se broj molova u smjesi može dobiti zbrojem molova pojedinačnih kemijskih vrsta:

$$n_T = \sum_{i=1}^{n_\alpha} n_i \quad (2.2)$$

gdje je n_α ukupni broj kemijskih vrsta u smjesi. Molarni su udjeli tada dani sa:

$$X_i = \frac{n_i}{n_T} \quad (2.3)$$

Moguće je postaviti jednadžbu stanja, uz pretpostavku da se radi o idealnom plinu, za svaku pojedinu kemijsku vrstu, te za čitavu smjesu:

$$p_i V = n_i R T \quad (2.4)$$

$$pV = n_T RT \quad (2.5)$$

gdje je R opća plinska konstanta a p_i parcijalni tlak kemijske vrste i , te očito vrijedi da je suma parcijalnih tlakova svih kemijskih vrsta u smjesi jednaka ukupnom tlaku smjese:

$$p = \sum_{i=1}^{n_a} p_i \quad (2.6)$$

Usporedbom jednadžbe stanja smjese (2.5) i jednadžbe stanja za pojedinu kemijsku vrstu (2.4) dobije se odnos parcijalnih tlakova i molarnih udjela:

$$X_i = \frac{p_i}{p} = \frac{n_i}{n_T} \quad (2.7)$$

Iz jednadžbe stanja za pojedinu kemijsku vrstu (2.4) također se može dobiti i izraz za koncentraciju kemijske vrste. Koncentracija je po definiciji broj molova kemijske vrste u jediničnom volumenu:

$$C_i = \frac{n_i}{V} = \frac{p_i}{RT} = X_i \frac{p}{RT} \quad (2.8)$$

Maseni udio je prema definiciji udio mase kemijske vrste i u jediničnoj masi smjese, ili kako se obje mase nalaze unutar istog volumena, maseni udio je odnos parcijalne gustoće i gustoće smjese:

$$Y_i = \frac{\rho_i}{\rho} = \frac{W_i C_i}{\rho} = \frac{W_i p_i}{\rho RT} = \frac{W_i X_i p}{\rho RT} = \frac{W_i n_i p}{n_T \rho RT} \quad (2.9)$$

gdje je W_i molekularna masa kemijske vrste i . Treba napomenuti da za prethodne izraze ne vrijede pravila indeksne notacije.

2.2.1. Arrheniusov zakon brzine reakcije

Brzina kojom pojedina elementarna kemijska reakcija utječe na promjenu koncentracija kemijskih vrsta koje u njoj sudjeluju, ovisi o koncentracijama tih kemijskih vrsta (reaktanata), o lokalnoj temperaturi i tlaku. Kako je u modelu koji se opisuje gradijent tlaka zanemariv, može se smatrati da brzina reakcije ne ovisi o njemu. Prema Arrheniusovom zakonu brzina reakcije k je funkcija lokalne temperature T u obliku [75, 26, 44]:

$$k = k_0 T^\alpha e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (2.10)$$

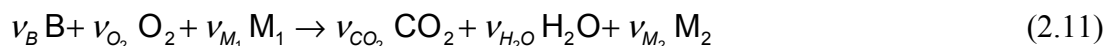
gdje je $k_0 T^\alpha$ koeficijent brzine reakcije, a predstavlja učestalost sudara molekula, E_a energija aktivacije, a R opća plinska konstanta. Boltzmannov faktor

$$e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

je udio molekula koje su stekle potrebnu energiju za reakciju. Pojedine veličine u Arrheniusovom izrazu, energija aktivacije E_a , koeficijent frekvencije sudara k_0 i temperaturni eksponent α uglavnom se ustanovljuju eksperimentalnim putem za svaku pojedinu reakciju, te se za veliki broj reakcija mogu naći u literaturi.

2.2.2. Globalni model izgaranja

U ložištu generatora pare paralelno se odvija više lanaca reakcija, svaki od kojih se sastoji od cijelog niza međureakcija. Tako se izgaranje metana odvija preko dva glavna paralelna lanca, jedan postepenim odbacivanjem jednog po jednog atoma vodika, a drugi preko etana. Paralelno s izgaranjem metana nastaju dušični oksidi. Sve se reakcije odvijaju u dva smjera, iako se to očituje većinom kod viših temperatura, tj. dolazi do disocijacije. Međutim nemaju sve te reakcije podjednaki utjecaj na ostale procese u ložištu. Kada je težište interesa pri modeliranju procesa u ložištu stavljeno na generaciju i prijenos topline, moguće je sistem izgaranja predstaviti jednostepenom globalnom reakcijom oksidacije goriva pri čemu nastaju dimni plinovi:



gdje su:

B - plinovito gorivo (mješavina vodika i ugljikovodika CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 i C_4H_{10})

M_1 , M_2 - zbir ostalih kemijskih vrsta

ν - stehiometrijski koeficijent, broj molova koji sudjeluje u reakciji, bilo kao reaktant, ili kao produkt reakcije

Globalni se model može predočiti brzinom promjene masenog udjela kemijske vrste α koji prema [75-76, 52] iznosi:

$$\frac{\partial Y_\alpha}{\partial t} = \nu_\alpha k Y_B \quad (2.12)$$

gdje je k brzina reakcije ili brzina izgaranja koja se propisuje Arrheniusovim zakonom brzine reakcije (2.10). Na taj se način mogu izraziti brzine promjene svih onih masenih udjela koji sudjeluju u reakciji, ili koje nastaju reakcijom (2.11). Međutim, s globalnim se modelom ne mogu izračunati koncentracije onih kemijskih vrsta koje nastaju kao međuprodukti (npr. CO), ili one koje nastaju kao posljedica nekih međureakcija (npr. NO_x).

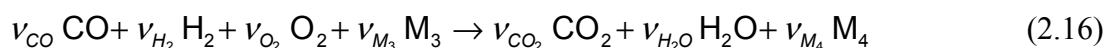
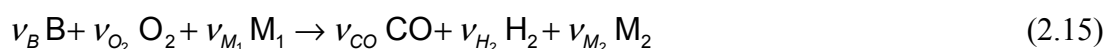
Globalni model izgaranja plina koji je prethodno bio ugrađen u model ložišta [52] razvijen je u [76] prema podacima iz [77]. Primjer brzine izgaranja prirodnog plina za jedan određeni sastav prema tome modelu iznosi:

$$k = 1.62344 \cdot 10^{11} e^{-\frac{251220}{RT}} \quad (2.13)$$

Ako je poznata donja ogrjevna vrijednost goriva H_d (donja zato što se u ložištima radi o temperaturama značajno višim od temperature kondenzacije vodene pare) moguće je izračunati toplinu koja se oslobađa izgaranjem goriva u jediničnom volumenu:

$$q_C''' = \rho H_d \frac{\partial Y_B}{\partial t} = \rho H_d \nu_B k Y_B \quad (2.14)$$

Postoje pokušaji [14, 5] da se mehanizam izgaranja modelira dvostepenom reakcijom:



Takav pristup međutim ništa ne govori o proračunavanju onih kemijskih vrsta koje su nam važne zbog svoje toksičnosti, poput dušičnih oksida, ozona itd. Da bi se dobila informacija o njihovoj produkciji potrebno je primijeniti detaljni model izgaranja.

2.2.3. Detaljni model izgaranja plina

Umjesto da se izgaranje opisuje pomoću jedne globalne reakcije, može se prići tako da se prate pojedini lanci reakcija. Lanac reakcija sastoji se iz čitavog niza elementarnih reakcija koji počinje inicirajućom reakcijom, u kojoj se najčešće radi o oslobađanju slobodnih radikala. Ti radikali, zbog velike reaktivnosti lagano ulaze u reakciju s još nedirnutim molekulama, te oslobađaju veći broj novih slobodnih radikala. Takve reakcije do kojih dolazi samo kad već postoji određena koncentracija slobodnih radikala, a koje ponovno oslobađaju iste ili različite slobodne radikale, zovu se propagacijske reakcije i vrlo su brze. Ukoliko ima više takvih reakcija lanac se razilazi na nekoliko grana. One pak reakcije u kojima slobodni radikali nestaju (čiji su rezultat stabilne molekule) zovu se terminirajuće reakcije jer njima završavaju lanci.

Brzina odvijanja lanca reakcija ovisi o brzini stvaranja slobodnih radikala, kao ključnog mehanizma, iako koncentracije slobodnih radikala mogu biti vrlo male. Osim toga pojedini slobodni radikali (npr. H, O, OH, N itd.) sudjeluju u više lanaca, te o njihovim koncentracijama ovisi koja će se od grana reakcija biti značajnije zastupljena.

Svakoj se reakciji u kojoj sudjeluje određeni skup kemijskih vrsta i koja se odvija brzinom reakcije k_f , suprostavlja jedna s identičnim skupom vrsta čija je brzina reakcije k_b . Kada se jedan sistem nađe u ravnoteži to znači da se više niti jedna koncentracija iz skupa ne mijenja.

Opći sistem od n_r parova suprostavljenih reakcija s ukupno n_α kemijskih vrsta se može predstaviti sljedećim izrazom:



gdje su i i j indeksi koji se ne ponašaju prema pravilima indeksne notacije. Promjena koncentracije C_i kemijske vrste M_i kao posljedica n_r reakcija s n_α kemijskih vrsta dana je za sistem reakcija (2.17) sa:

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{ij} - v'_{ij}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} + \sum_{j=1}^{n_r} (v'_{ij} - v''_{ij}) k_{b,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v''_{kj}} \quad (2.18)$$

U trenutku ravnoteže parovi suprostavljenih reakcija daju jednaki doprinos promjeni koncentracije, ali suprotnog predznaka. Stoga je i ukupna promjena koncentracije pri ravnotežnom stanju:

$$\frac{dC_i}{dt} = 0 \quad (2.19)$$

Iz toga slijedi da za bilo koju reakciju j odnos brzina suprostavljenih reakcija iznosi:

$$\frac{k_{f,j}}{k_{b,j}} = \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_{i,e}^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \equiv K_{C,j} \quad (2.20)$$

Vrijednost konstante ravnoteže za pojedinu reakciju ovisi samo o termodinamičkom stanju smjese, te se vrijednosti za pojedine kemijske vrste mogu naći u termodinamičkim tablicama [78] ili računati pomoću interpolacionih polinoma. Uz pomoć konstante ravnoteže izraz za promjenu koncentracije (2.18) može se zapisati kao:

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{ij} - v'_{ij}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) \quad (2.21)$$

Vrijednost brzine reakcije se računa pomoću Arrheniusovog zakona (2.10) gdje se veličine triju konstanti $k_{0,j}$, α_j , $E_{a,j}$ određuju za svaku elementarnu reakciju eksperimentalno, a vrijednosti im se mogu naći u literaturi:

$$k_{f,j} = k_{0,j} T^{\alpha_j} e^{-\frac{E_{a,j}}{RT}} \quad (2.22)$$

2.2.4. Konstante ravnoteže

Suprostavljene kemijske reakcije odvijaju se uvijek u smjeru ravnoteže, tj. uspostavljanja takvog odnosa koncentracija sudionika u kojem je brzina promjene koncentracija svih sudionika jednaka nuli. Za svaku reakciju danu izrazom (2.17), uz uvjet kinetičke ravnoteže reakcije prema (2.18):

$$\sum_{i=1}^{n_\alpha} (v''_i - v'_i) k_f \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_k} + \sum_{i=1}^{n_\alpha} (v'_i - v''_i) k_b \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v''_k} = 0 \quad (2.23)$$

dobije se izraz za konstantu ravnoteže prema definiciji konstante ravnoteže kao odnosa brzina suprostavljenih reakcija (2.20):

$$K_C = \frac{k_f}{k_b} = \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_{k,e}^{(v''_k - v'_k)} \quad (2.24)$$

gdje indeks **e** označava ravnotežno stanje (ekvilibrijum). Moguće je definirati više konstanti ravnoteže pomoću različitih veličina koje opisuju sastav smjese, preko parcijalnih tlakova, broja molova, molarnih udjela i masenih udjela:

$$K_p = \prod_{k=1}^{n_\alpha} p_{k,e}^{(v''_k - v'_k)} \quad (2.25)$$

$$K_n = \prod_{k=1}^{n_\alpha} n_{k,e}^{(v''_k - v'_k)} \quad (2.26)$$

$$K_X = \prod_{k=1}^{n_\alpha} X_{k,e}^{(v''_k - v'_k)} \quad (2.27)$$

$$K_Y = \prod_{k=1}^{n_\alpha} Y_{k,e}^{(v''_k - v'_k)} \quad (2.28)$$

Ako definiramo da je:

$$\Delta n = \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} (v_k'' - v_k') \quad (2.29)$$

pomoću izraza za preračunavanje različitih veličina koje opisuju sustav (2.9) moguće je [26] sve te konstante ravnoteže međusobno dovesti u sljedeći odnos:

$$K_p = K_C (RT)^{\Delta n} = K_n \left(\frac{p}{n_T} \right)^{\Delta n} = K_x (p)^{\Delta n} = K_Y (\rho RT)^{\Delta n} \prod_{k=1}^{n_{\alpha}} W_k^{(v_k'' - v_k')} \quad (2.30)$$

Osim za slučaj kad je $\Delta n = 0$ jedino je vrijednost konstante K_p , za razliku od ostalih konstanti ravnoteže, funkcija samo temperature, te se može naći u termodinamičkim tablicama. Također je moguće izračunati konstantu ravnoteže iz promjene standardne Gibbsove slobodne energije prema relaciji kemijske termodinamike danoj u [26]:

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_p \quad (2.31)$$

iz čega se dobiva izraz za konstantu ravnoteže:

$$K_p = e^{-\frac{\Delta G^0}{RT}} \quad (2.32)$$

U izrazu za brzinu promjene koncentracije kemijske vrste (2.21) potrebno je znati vrijednost recipročne konstante ravnoteže izražene koncentracijama K_C . Odnos između konstante ravnoteže dane parcijalnim tlakovima i one dane koncentracijama je dan izrazom (2.30):

$$K_p = K_C (RT)^{\sum_{k=1}^{n_{\alpha}} (v_k'' - v_k')} \quad (2.33)$$

Promjena standardne Gibbsove slobodne energije reakcije računa se iz standardnih molarnih specifičnih Gibbsovih slobodnih energija formacija koje su dane za svaku kemijsku vrstu u tablicama kao funkcija temperature:

$$\Delta G^0 = \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} (v_k'' - v_k') \Delta g_{f,k}^0 \quad (2.34)$$

Molarna specifična Gibbsova slobodna energija formacije za kemijsku vrstu k računa se iz molarne specifične entalpije formacije kemijske vrste k i molarne specifične entropije kemijske vrste k :

$$\Delta g_{f,k} = \Delta H_{f,k} - T \Delta S_{f,k} \quad (2.35)$$

Pomoću koeficijenata polinoma koji interpoliraju standardne molarne specifične entalpije formacije kemijske vrste i standardne molarne specifične entropije formacije kemijske vrste k , i koji se mogu naći u raznim [26, 78] kemijskim termodinamičkim bazama podataka, moguće je izračunati te dvije veličine:

$$\frac{\Delta H_{f,k}^0}{RT} = a_{1,k} + \frac{a_{2,k}}{2} T + \frac{a_{3,k}}{3} T^2 + \frac{a_{4,k}}{4} T^3 + \frac{a_{5,k}}{5} T^4 + \frac{a_{6,k}}{T} \quad (2.36)$$

$$\frac{\Delta S_{f,k}^0}{R} = a_{1,k} \ln T + a_{2,k} T + \frac{a_{3,k}}{2} T^2 + \frac{a_{4,k}}{3} T^3 + \frac{a_{5,k}}{4} T^4 + a_{7,k} \quad (2.37)$$

Uvrštavanjem prethodna dva izraza u izraz za standardnu molarnu specifičnu Gibbsovu slobodnu energiju formacije kemijske vrste (2.35) dobije se:

$$\frac{\Delta g_{f,k}^0}{RT} = a_{1,k}(1 - \ln T) - \frac{a_{2,k}}{2}T - \frac{a_{3,k}}{6}T^2 - \frac{a_{4,k}}{12}T^3 - \frac{a_{5,k}}{20}T^4 + \frac{a_{6,k}}{T} - a_{k,i} \quad (2.38)$$

Kako su stehiometrijski koeficijenti poznati za pojedinu reakciju, mogu se izračunati koeficijenti polinoma za računanje promjene standardne Gibbsove slobodne energije reakcije (obratiti pažnju na sumaciju po svim kemijskim vrstama koje sudjeluju u reakciji):

$$\frac{\Delta G^0}{RT} = \sum_{k=1}^{n_\alpha} (v_k'' - v_k') \left[a_{1,k}(1 - \ln T) - \frac{a_{2,k}}{2}T - \frac{a_{3,k}}{6}T^2 - \frac{a_{4,k}}{12}T^3 - \frac{a_{5,k}}{20}T^4 + \frac{a_{6,k}}{T} - a_{7,k} \right] \quad (2.39)$$

koji iznose:

$$a_l^r = \sum_{k=1}^{n_\alpha} (v_k'' - v_k') a_{l,k} \quad (2.40)$$

Konačni izraz za promjenu standardne Gibbsove slobodne energije reakcije je:

$$\frac{\Delta G^0}{RT} = a_1^r(1 - \ln T) - \frac{a_2^r}{2}T - \frac{a_3^r}{6}T^2 - \frac{a_4^r}{12}T^3 - \frac{a_5^r}{20}T^4 + \frac{a_6^r}{T} - a_7^r \quad (2.41)$$

Uvrstimo li taj izraz u jednadžbu (2.32) uz njeno prethodno uvrštenje u jednadžbu (2.33) dobivamo konačni izraz za računanje vrijednosti konstante ravnoteže dane koncentracijama:

$$K_C = (RT)^{-\sum_{k=1}^{n_\alpha} (v_k'' - v_k')} e^{-\left[a_1^r(1 - \ln T) - \frac{a_2^r}{2}T - \frac{a_3^r}{6}T^2 - \frac{a_4^r}{12}T^3 - \frac{a_5^r}{20}T^4 + \frac{a_6^r}{T} - a_7^r \right]} \quad (2.42)$$

Konstanta ravnoteže u ovom je poglavlju izvedena za slučaj jedne reakcije. Prijelaz na sistem reakcija, kakav obuhvaća jednadžba promjene koncentracije kemijske vrste i (2.21) je izravan. Treba imati na umu da se mora naći takvo ravnotežno stanje u kojem će ravnotežne koncentracije zadovoljavati istovremeno sve reakcije sistema. Za reakciju j vrijedi da je vrijednost konstante ravnoteže dana sa:

$$K_{C,j} = (RT)^{-\sum_{k=1}^{n_\alpha} (v_{k,j}'' - v_{k,j}')} e^{-\left[a_{1,j}^r(1 - \ln T) - \frac{a_{2,j}^r}{2}T - \frac{a_{3,j}^r}{6}T^2 - \frac{a_{4,j}^r}{12}T^3 - \frac{a_{5,j}^r}{20}T^4 + \frac{a_{6,j}^r}{T} - a_{7,j}^r \right]} \quad (2.43)$$

2.2.5. Temperatura izgaranja

U jednadžbi promjene koncentracije kemijske vrste (2.21) dvije veličine zavise o temperaturi, brzina reakcije $k_{f,j}$ (2.22) i konstanta ravnoteže $K_{C,j}$ (2.43). Da bi se sistem običnih diferencijalnih jednadžbi (2.21) mogao integrirati potrebno je poznavati trenutnu temperaturu T . Kako je proces izgaranja izrazito neizoterman, te su stoga vrijednosti temperature i koncentracija kemijskih vrsta izrazito spregnute, neophodno je temperaturu računati.

Ako je poznata početna temperatura T_0 , te ako je temperatura u nekom trenutku T , moguće je, uz dani izraz za računanje standardnih molarnih specifičnih entalpija formacije kemijske vrste k (2.36), postaviti sljedeću relaciju:

$$\Delta H = \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} v_k'' (\Delta H_{f,k}^0)_T - \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} v_k' (\Delta H_{f,k}^0)_{T_0} \quad (2.44)$$

gdje je ΔH toplina privedena sistemu, koja je u slučaju adijabatskog plamena jednaka nuli, a ako se toplina dovodi (odvodi) sistemu može se propisati njena zavisnost o vremenu t . U slučaju sistema reakcija danog sustavom običnih diferencijalnih jednažbi (2.21), umjesto cjelobrojnih stehiometrijskih koeficijenata treba uvrstiti brojeve molova na početku $n_{0,k}$, te u nekom trenutku n_k :

$$\Delta H = \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} \left[n_k (\Delta H_{f,k}^0)_T - n_{0,k} (\Delta H_{f,k}^0)_{T_0} \right] \quad (2.45)$$

ili je moguće preći na masene udjele prema jednažbi (2.9) pa dobiti specifičnu entalpiju privedenu sistemu:

$$\Delta h = \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} \left[\frac{Y_k}{W_k} (\Delta H_{f,k}^0)_T - \frac{Y_{0,k}}{W_k} (\Delta H_{f,k}^0)_{T_0} \right] \quad (2.46)$$

Zamjenom masenih udjela koncentracijama dobije se:

$$\Delta h = \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} \left[\frac{C_k}{\rho} (\Delta H_{f,k}^0)_T - \frac{C_{0,k}}{\rho} (\Delta H_{f,k}^0)_{T_0} \right] \quad (2.47)$$

Iz jednog od tih izraza moguće je izračunati temperaturu T . Nadalje, ako se derivira po vremenu dobije se brzina promjene specifične entalpije unesene u sistem:

$$\frac{d}{dt} (\Delta h) = \frac{d}{dt} \left[\sum_{k=1}^{n_{\alpha}} \frac{C_k}{\rho} (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] \quad (2.48)$$

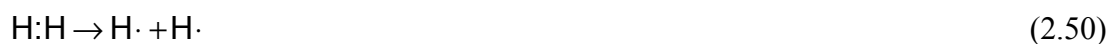
Uz prethodno usvojenu pretpostavku da se proces izgaranja odvija uz konstantni volumen dobije se volumenski toplinski tok između reaktivnog sistema i okoline:

$$\rho \frac{d}{dt} (\Delta h) = \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} \frac{d}{dt} \left[C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] \quad (2.49)$$

2.2.6. Izgaranje u sistemu H_2-O_2

Kako je izgaranje plinovitog goriva kompleksan mehanizam koji se sastoji iz niza lanaca reakcija, ovdje će se mehanizam rastaviti na nekoliko logičkih cjelina, s ciljem lakšeg prikazivanja. Posebno su dani sistemi vodik-kisik, vodik-zrak i metan-zrak, te konačno prirodni plin-zrak. Takav je postupak sistematizacije fizikalno opravdan jer izgaranje prirodnog plina sadrži u sebi i nastajanje i nestajanje molekularnog vodika, iako ga prirodni plin ne mora u sebi sadržavati. Do pojave vodika pri izgaranju prirodnog plina dolazi zbog već prije spomenute višestepenosti procesa izgaranja koji sadrži veliki broj elementarnih reakcija.

U procesu izgaranja opisanom sistemom reakcija najaktivnije kemijske vrste su slobodni radikali. Prema kemijskoj terminologiji [26] slobodni su radikali karakterizirani nesparenim elektronima. Atomarni vodik je primjer slobodnog radikala:



gdje su s točkama označeni elektroni. Na lijevoj strani nalazi se molekularni vodik, kojemu elektronski par daje stabilnost spoju. Međutim dva atoma vodika, svaki s jednim elektronom, su vrlo nestabilni, izrazito reaktivni (spremni na ulazak u reakciju), te su vrlo kratkog trajanja. Iako može biti zbunjujuće, uobičajeno je u kemijskoj kinetici ne označavati slobodne radikale s nesparenim elektronima kao u prethodnom izrazu, nego samo kao H.

Brzina kojom se odvija prijelaz iz jednih stabilnih kemijskih vrsta, tj. reaktanata (u sistemu vodik-kisik H_2 i O_2), u druge, produkte (u ovom slučaju H_2O), ovisi upravo o tim najaktivnijim vrstama, dakle slobodnim radikalima (u ovom slučaju O, H, OH i HO_2). Osim navedenih kemijskih vrsta pojavljuju se i neke stabilne kemijske vrste kao međustepenice u izgaranju. Molekularni vodik je primjer takve vrste kod izgaranja metana, a u prethodnom se primjeru pojavljuje vodikov peroksid (H_2O_2). Pregled kemijskih vrsta koje se pojavljuju pri izgaranju vodika u kisiku dan je u tablici 2.1. Prethodno definirani prijelaz iz reaktanata u produkte zove se lanac reakcija i tipično se sastoji od tri vrste elementarnih reakcija. Lanac započinju inicirajuće reakcije (engl. *chain-initiating*), koje oslobađaju slobodne radikale, npr.:



Slijede propagirajuće reakcije (engl. *chain-propagating*), koje konzumiraju slobodne radikale te generiraju nove, npr.:



Kao podgrupa propagirajućih reakcija mogu se navesti reakcije (engl. *chain-branching*) koje generiraju više slobodnih radikala nego što ih konzumiraju, te su na neki način kombinacija inicirajućih i propagirajućih, ali kako one ne mogu početi odvijanje lanca reakcija (nego ga samo ubrzavaju), imaju ista svojstva kao i propagirajuće reakcije. Te su reakcije kao i propagirajuće obično izrazito brze, te kao primjer u sistemu vodik-kisik mogu se navesti sljedeće:



Na kraju lanaca nalaze se terminirajuće reakcije (engl. *chain-terminating*) koje konzumiraju slobodne radikale, ali kao rezultat daju samo stabilne kemijske vrste, npr.:



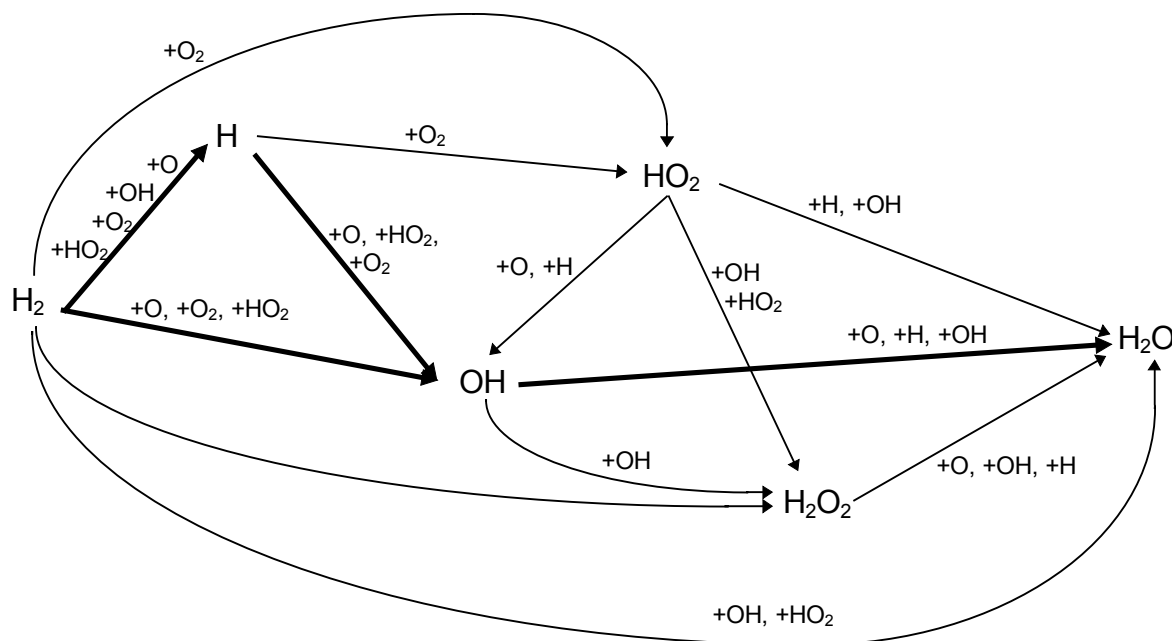
Može se primijetiti da su terminirajuće reakcije suprotne po smjeru od inicirajućih. Sve reakcije su u stvari dvostrane, te se parovi suprotstavljenih reakcija (engl. *opposing reactions*) uvijek bilježe zajedno:



Koji će od dva smjera prevladati kao dominantni, ovisi o koncentracijama sudionika i o temperaturi na kojoj se smjesa nalazi. Tako će isti par suprotstavljenih reakcija pri niskim temperaturama imati ulogu inicirajućih reakcija, a pri visokim terminirajućih.

Tablica 2.1. Kemijske vrste u sistemu reakcija vodik-kisik

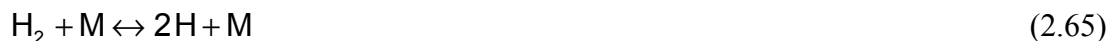
oznaka	radikali	naziv
H ₂		molekularni vodik
O ₂		molekularni kisik
H ₂ O		voda
H ₂ O ₂		vodikov peroksid
H	·H	atomarni vodik, radikal vodika
O	·O	atomarni kisik, radikal kisika
OH	·OH	radikal hidroksida (hidroksil)
HO ₂	HO· ₂	radikal peroksida



Slika 2.1. Sistem reakcija vodik-kisik

Par suprotstavljenih reakcija (2.64) koji sadrži u sebi raspadanje molekularnog vodika na atomarni, bio bi sam po sebi vrlo slab (spor) kao inicijator lanca reakcija, jer je dominantan povratni smjer već kod vrlo niskih koncentracija atomarnog vodika. Tek kod visokih temperatura razbijanje vodika postaje značajno, ali u procesu izgaranja su interesantne one

inicirajuće reakcije koje su značajne kod niskih temperatura. Razbijanje vodika uvelike se ubrzava sudaranjem molekule vodika s trećim tijelima (engl. *third body*), koja ne sudjeluju u samoj reakciji, ali ju pospješuju. Treća tijela mogu biti molekule stabilnih kemijskih vrsta, inertne kemijske vrste (poput argona) te stijenke komore u kojoj se izgaranje odvija i u reakcijama se označavaju s M. Tako će par suprostavljenih reakcija (2.64) biti predstavljen sa:



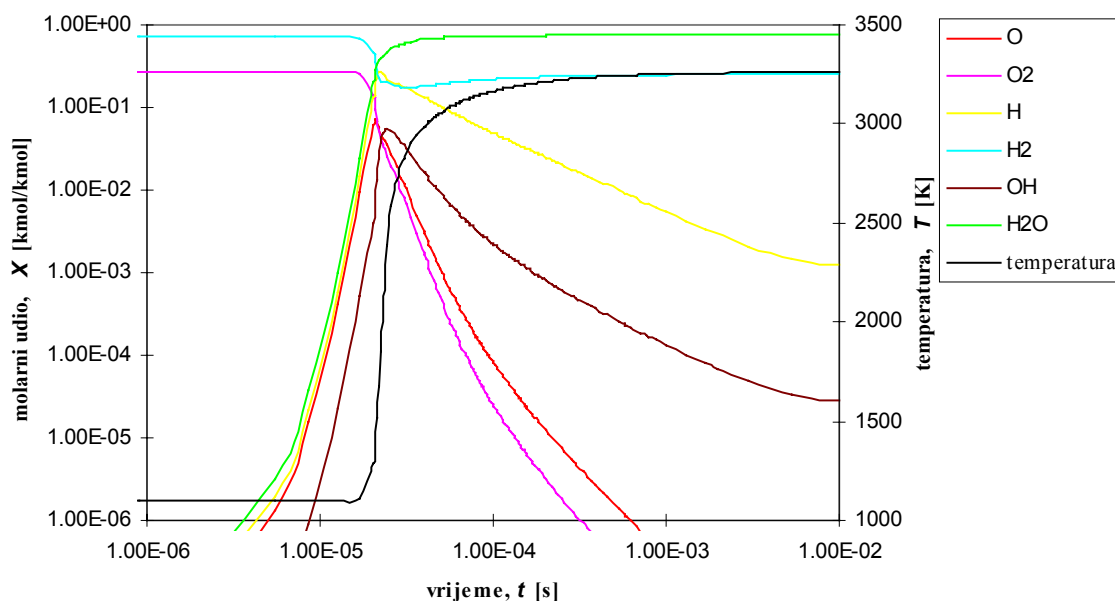
Koncentracija te nesudjelujuće, katalizatorske kemijske vrste se dobije ponderiranim zbrajanjem koncentracija stabilnih i inertnih kemijskih vrsta. Težinski faktori nazivaju se efikasnosti trećih tijela (engl. *third body efficiency*).

Sistemi reakcija obično se prikazuju dijagramima poput onog danog na slici 2.1. U tom je dijagramu shematski prikazana oksidacija vodika te on ne sadrži sve kemijske reakcije sistema, npr. ne prikazuje nastajanje atomarnog kisika. Deblje linije označuju prevladavajuće lance reakcija pri uvjetima izgaranja.

Tablica 2.2. Osnovne reakcije sistema vodik-kisik prema [15] i [21]

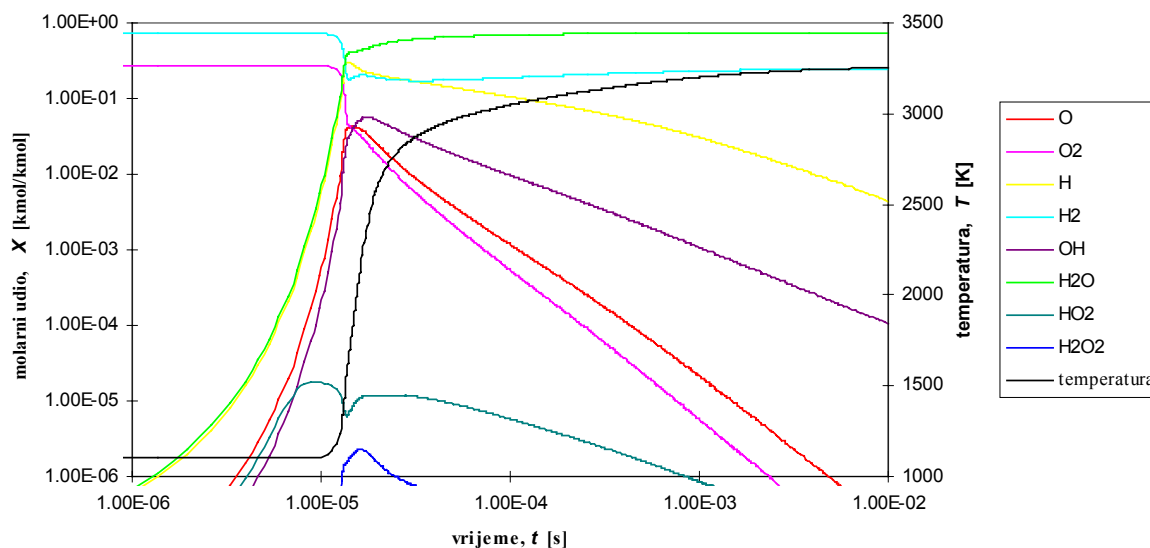
<i>j</i>	Reakcija	k_0	E_a/R	α
1.	$\text{O}_2 + \text{H} \leftrightarrow \text{O} + \text{OH}$	1.7000E+13	9.1145E+03	-0.3700
2.	$\text{H}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{H} + \text{OH}$	2.5000E+09	3.8774E+03	0.0000
3.	$\text{H}_2 + \text{OH} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	6.3000E+10	2.9710E+03	0.0000
4.	$\text{OH} + \text{OH} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	7.6000E+09	5.0356E+02	0.0000
5.	$\text{H}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{OH} + \text{OH}$	1.7000E+10	2.4060E+04	0.0000
6.	$\text{H} + \text{H} + \text{M} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{M}$	7.0000E+10	0.0000E+00	-0.5000
7.	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	3.0000E+13	0.0000E+00	-1.0000
8.	$\text{O} + \text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{O}_2 + \text{M}$	2.0000E+13	0.0000E+00	-1.5000

U traženju optimalnog sistema reakcija koji će predstaviti izgaranje vodika u kisiku može se krenuti od reakcija u kojima sudjeluju samo H_2 , O_2 , H_2O , O , H i OH , kakav je predložen u [15]. Vrijednosti parametara iz jednadžbe (2.22) za svaku od reakcija sistema dani su u tablici 2.2. Sistemu iz [15] dodana je reakcija broj 5 prema [21] jer se pokazalo da je to važna inicirajuća reakcija i da se njenim uključivanjem rezultati simulacije bolje poklapaju s eksperimentalnim podacima.



Slika 2.2. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta u sistemu reakcija vodik-kisik prema tablici 2.2

Računanjem promjena koncentracija kemijskih vrsta u vremenu prema sistemu diferencijalnih jednadžbi (2.21) pomoću Gearove metode (dodatak F, [42]) dobiveni su rezultati prikazani na slici 2.2. Pokazalo se međutim da se točniji rezultati dobivaju upotrebom detaljnijeg modela koji osim spomenutih kemijskih vrsta sadrži i HO_2 i H_2O_2 . Usporedbom većeg broja radova iz područja kemijske kinetike [13-25, 79] došlo se do sistema reakcija danih pod rednim brojevima 1-21 u tablici 2.6. Prilikom odabira uglavnom se slijedio princip uzimanja u obzir novijih podataka, ali tamo gdje oni ili nisu bili dostupni ili je većina autora imala drugačije koeficijente uzeti su stariji podaci. Rezultati dobiveni integracijom tog sistema reakcija, uz iste početne uvjete, prikazana je na slici 2.3. Može se primijetiti da je reakcija opisana složenijim mehanizmom počela nešto ranije, ali da je izgaranje u stvari usporeno. Obradeno je sveukupno oko 400 elementarnih reakcija (pri izgaranju prirodnog plina u zraku) preuzetih od više autora, tako da je ukupan broj slogova u bazi koja je pripremljena za potrebe ovoga rada iznosio oko 2000.



Slika 2.3. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta u sistemu reakcija vodik-kisik prema tablici 2.6, reakcije 1-21

2.2.7. Nastajanje dušičnih oksida u ložištima

U drugoj polovici dvadesetog stoljeća je postalo očito da su dušični oksidi NO , NO_2 i N_2O , pod zajedničkom oznakom NO_x , glavni uzročnici nastanka smoga i ozona u urbanim sredinama [80]. Osim toga, NO_x sudjeluje u lančanoj reakciji koja dovodi do smanjivanja ozona u stratosferi što povećava količinu ultraljubičastih zraka koje stižu do Zemlje [81]. Kao rezultat tih saznanja smanjivanje nastajanja dušičnih oksida je postala značajna tema u području izgaranja.

Četiri su osnovna mehanizma nastajanja dušičnih oksida za sada identificirana [82]. To su termički, promptni, preko N_2O , te iz goriva. Termički NO ili tzv. Zeldovichev NO , nastaje pri određenim višim temperaturama, te će biti detaljnije opisan u sljedećem poglavlju. Promptni NO nastaje prilikom izgaranja ugljikovodika na samoj fronti plamena rekombinacijom radikala CH i molekularnog dušika u HCN :



Atomarni dušik dalje oksidira u NO . Ovaj se mehanizam odvija kod nižih temperatura (1000 K) nego termički, te postaje vrlo značajan kod podstehiometrijskih plamenova [83]. Kako je međutim u ložištima generatora pare plamen uglavnom (osim lokalno, npr. u zoni primara) nadstehiometrijski, ovaj je mehanizam zanemaren u ovome radu.

Treći mehanizam nastanka NO ide preko dušik (I) oksida, N_2O . Ovaj je mehanizam značajan pri nižim temperaturama i pri nadstehiometrijskom plamenu [83], te će biti detaljnije opisan u sljedećem poglavlju. Mehanizam nastajanja NO_x iz goriva se uglavnom pojavljuje pri izgaranju ugljena, brzim pretvaranjem dušika vezanog u gorivu u amonijak, NH_3 , ili u HCN . U nadstehiometrijskom će plamenu do dvije trećine dušika vezanog u gorivu prijeći u NO , dok se kod podstehiometrijskog plamena taj udio smanjuje, da bi dostigao minimum za $\lambda = 0.7$ [83]. Kako je ovaj rad posvećen plinovitom gorivu u kojem nema dušika vezanog u gorivu, tako je taj mehanizam zanemaren.

Koristeći matematički model izgaranja plinovitog goriva opisan u ovome radu moguće je projektirati takva ložišta koja će smanjiti produkciju NO_x . Takve se modifikacije izgaranja nazivaju primarnim metodama. Kod već postojećih objekata primjena primarnih metoda, koje su uglavnom vezane za geometriju objekta, bila bi ili preskupa ili nemoguća. Na te je objekte moguće primijeniti sekundarne metode za smanjivanje produkcije NO_x , koje uglavnom obuhvaćaju dodavanje aditiva u gorivo.

Smanjivanje maksimalne temperature u ložištu doprinosi slabljenju termičkog mehanizma nastajanja NO . Temperatura se može smanjiti povećanjem pretička zraka, recirkulacijom dimnih plinova, dodavanjem vodene pare ili nekog drugog inertnog plina te postavljenjem gorionika u više nivoa. Izgaranjem u više nivoa može se postići i smanjenje produkcije dušičnih oksida koji nastaju ostalim mehanizmima. Prvi nivo je podstehiometrijski, $\lambda = 0.7$, da bi se smanjilo nastajanje NO_x iz goriva i preko N_2O , te je zbog nižih temperatura neizgorene smjese smanjeno djelovanje termičkog mehanizma. Zbog djelovanja zračenja smjesa se dalje hladi prije ulaska u zonu drugog nivoa plamenika, gdje ulazi zrak da bi u cjelini bila dobivena nadstehiometrijska smjesa. Zbog nižih temperatura značajno je smanjeno djelovanje termičkog mehanizma. U trećem nivou ponovo se dodaje gorivo, te se ponovnim izgaranjem reducira NO .

Jedna od sekundarnih metoda smanjivanja produkcije NO_x u ložištimu je dodavanje amonijaka, NH_3 , uz postojanje katalizatora. Ovaj je mehanizam aktivan u širokom rasponu temperatura, ali je osjetljiv na taloženje sumpora na katalizatoru.

Dodavanje amonijaka na izlazu iz ložišta bez postojanja katalizatora efikasno je samo u uskom pojasu temperatura, negdje oko 1300 K. Pri višim temperaturama još bi se povećala produkcija NO_x , a pri nižim je temperaturama metoda neefikasna. Moguće je smanjenje optimalne temperature do 1000 K uz dodavanje vodika. Reagiranjem amonijaka s OH stvara se NH_2 :



koji će zatim reducirati NO :



Da ne bi došlo do značajnog izlaska amonijaka iz ložišta broj molova amonijaka ne smije biti više od 50% veći od broja molova dušik (II) oksida [83]. U tom je slučaju potrebno dobro miješanje, što se postiže ubrizgavanjem vodene pare pod visokim pritiskom, zajedno s amonijakom.

Druga mogućnost je dogrijavanje dimnih plinova ubrizgavanjem dodatnog goriva, da bi se postigla potrebna temperatura DeNOX procesa. Moguće je i komprimiranje dimnih plinova, čime se postiže potrebna temperatura, ubrizgavanje amonijaka, te se nakon redukcije NO , plinovi ekspanziraju u turbini, čime se vraća energija uložena za komprimiranje.

2.2.8. Sistem H_2 -zrak

Uz kemijske vrste koje sudjeluju ili nastaju pri izgaranju vodika u kisiku (tab. 2.1) prilikom izgaranja vodika u zraku treba još uzeti u obzir i molekularni i atomarni dušik te tri dušična oksida prema tablici 2.3.

Tablica 2.3. Dušični spojevi u sistemu reakcija vodik-zrak

oznaka	radikali	naziv
N ₂		molekularni dušik
N	·N	atomarni dušik, radikal dušika
NO		dušik (II) oksid
N ₂ O		dušik (I) oksid
NO ₂		dušik (IV) oksid

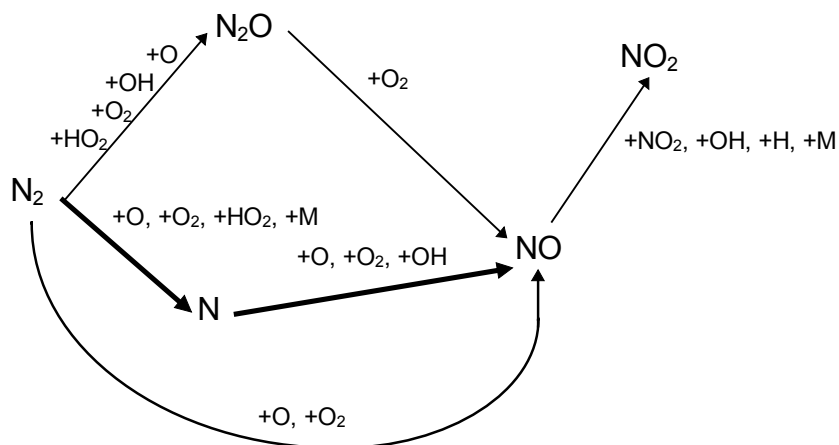
Mehanizmi nastajanja dušičnih oksida, te njihove redukcije, u različitim postrojenjima [82-90], uključujući kemijske lance produkcije NO_x prilikom izgaranja [18, 20, 25], su intenzivno proučavani tijekom posljednjih 50 godina. Za goriva koja ne sadrže dušične spojeve mogu se opisati četiri mehanizma produkcije NO, od kojih se samo tri pojavljuju kada je vodik gorivo. Zeldovichev ili termički mehanizam pri ravnotežnim koncentracijama slobodnih radikala je svakako najjednostavniji od njih. Pod pretpostavkom ravnotežnih koncentracija jedino je atomarni N dodatna prijelazna kemijska vrsta, a kako njena koncentracija ne ovisi o kemijskoj kinetici izgaranja smjese nije potrebno detaljno pratiti oksidaciju goriva, nego samo sljedeće tri reakcije:



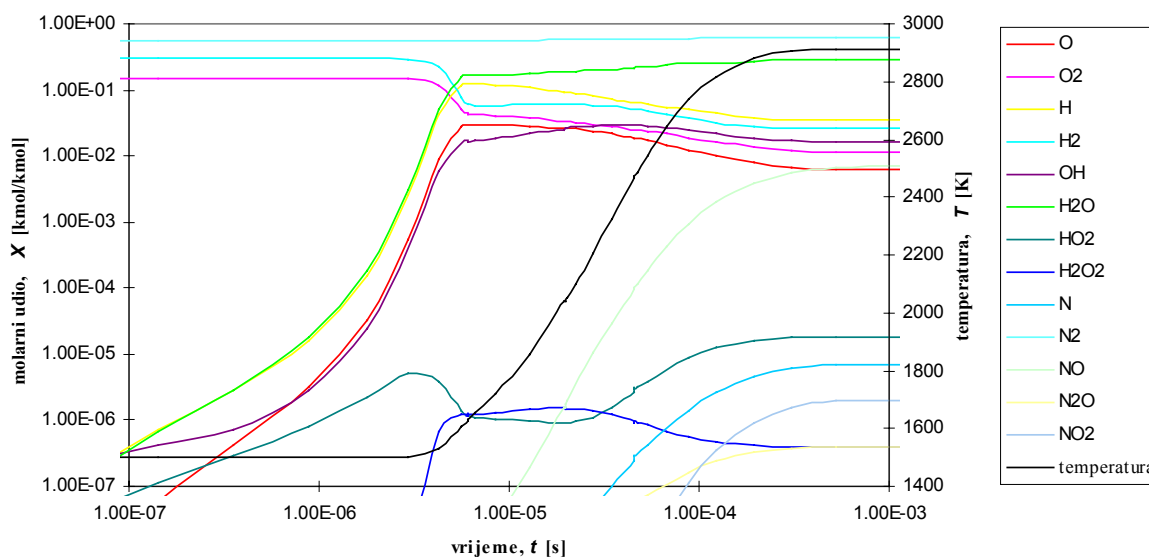
Pretpostavka o ravnotežnoj koncentraciji slobodnih radikala je međutim uglavnom zadovoljena samo u području dogorijevanja izvan plamena, ali nikako na samoj fronti plamena, gdje brza produkcija slobodnih radikala i relativno spor proces rekombinacije istih dovodi do visoko nadravnotežnih koncentracija radikala O te time gore navedeni Zeldovichev mehanizam (2.70-2.72) zahtjeva detaljni proračun procesa oksidacije goriva.

Treći mehanizam produkcije NO je preko dušik (I) oksida (N₂O), koji se prema [20] sastoji od sljedećih reakcija:



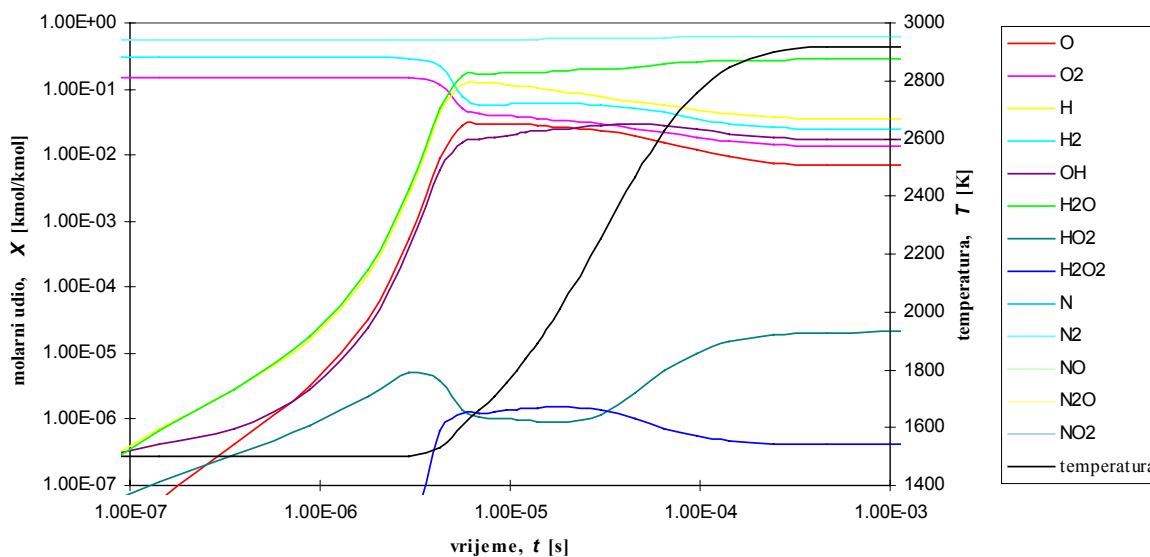


Slika 2.4. Mehanizmi nastajanja dušičnih oksida u sistemu vodik-zrak



Slika 2.5. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta u sistemu reakcija vodik-zrak prema tablici 2.6, reakcije 1-37

Zanemarene su kemijske vrste u kojima dolazi do rekombinacije atomarnog dušika i vodika (NH, NNH, N₂H₂, HNO, NH₃, NH₂) zbog razloga navedenih u prošlom poglavlju. Osim toga je dodan mehanizam nastajanja dušik (IV) oksida, te još nekoliko manje važnih reakcija Zeldovichevog i N₂O mehanizma, te su svi uključeni mehanizmi nastajanja dušičnih oksida prilikom izgaranja vodika u zraku prikazani na slici 2.4, a pripadni su koeficijenti za reakcije pod rednim brojevima 22-37 dani u tablici 2.6.



Slika 2.6. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta u sistemu reakcija vodik-zrak prema tablici 2.6, reakcije 1-21

Rezultat simulacije sistema vodik-zrak, kakav je prethodno opisan i dan prema tablici 2.6, reakcije 1-37, prikazan je na slici 2.5. Razlog zašto proces izgaranja počinje ranije leži u znatno višoj početnoj temperaturi (1500 K), za razliku od prethodnog primjera gdje je smjesa vodika i kisika imala početnu temperaturu od 1100 K. Također se može primijetiti i znatno manji nagib temperature, tj. sporije oslobađanje topline. To se objašnjava činjenicom da je smjesa goriva (vodika) i oksidanta (kisika) razrijeđena značajno uglavnom neutralnim plinom (dušikom). Iako dušik sudjeluje u reakciji, stvaranje dušičnih oksida je interesantno samo po sebi, a ne kao značajni činilac procesa oksidacije vodika i oslobađanja topline. Potvrda da je to tako može se vidjeti usporedbom slike 2.5 sa slikom 2.6. Očito je da su razlike sasvim zanemarive, te da dušikova kemija nema utjecaja na izgaranje vodika.

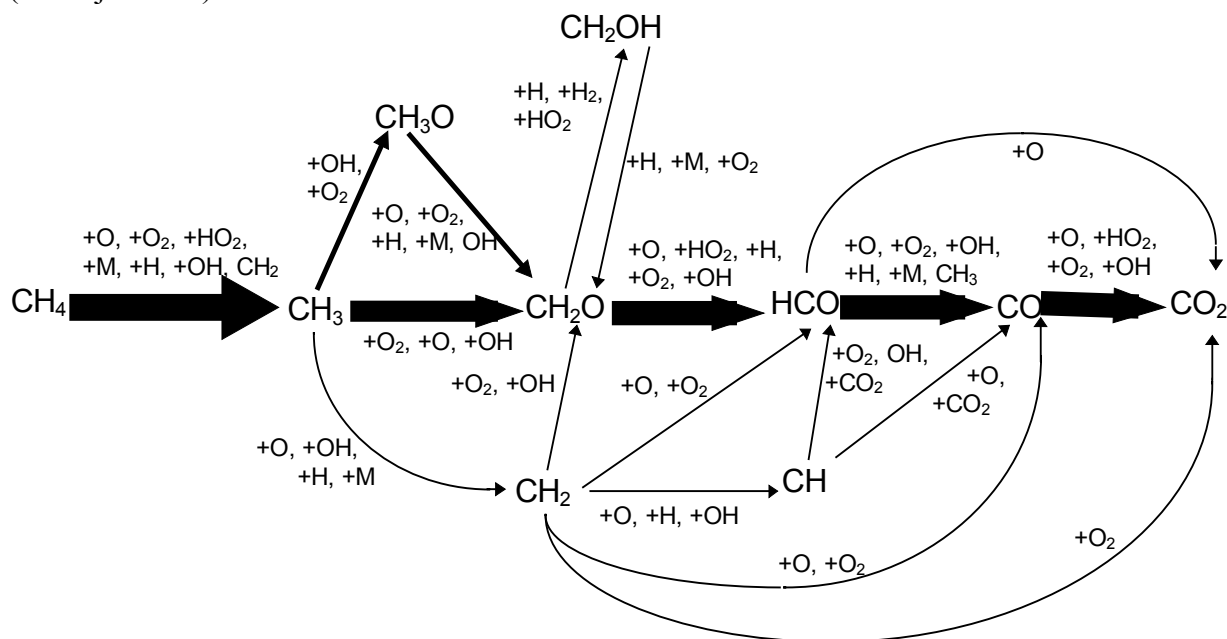
Tablica 2.4. Spojevi u sistemu reakcija metan-zrak, tzv. C lanac oksidacije

oznaka	radikali	naziv
CH ₄		metan
CH ₃	·CH ₃	metilni radikal
CH ₂	:CH ₂	metilni radikal
CH	:ĊH	metilni radikal
CH ₂ O		
CH ₃ O	CH ₃ O·	
CH ₂ OH	·CH ₂ OH	
HCO	HĊO	
CO		ugljik (II) oksid
CO ₂		dušik (IV) oksid

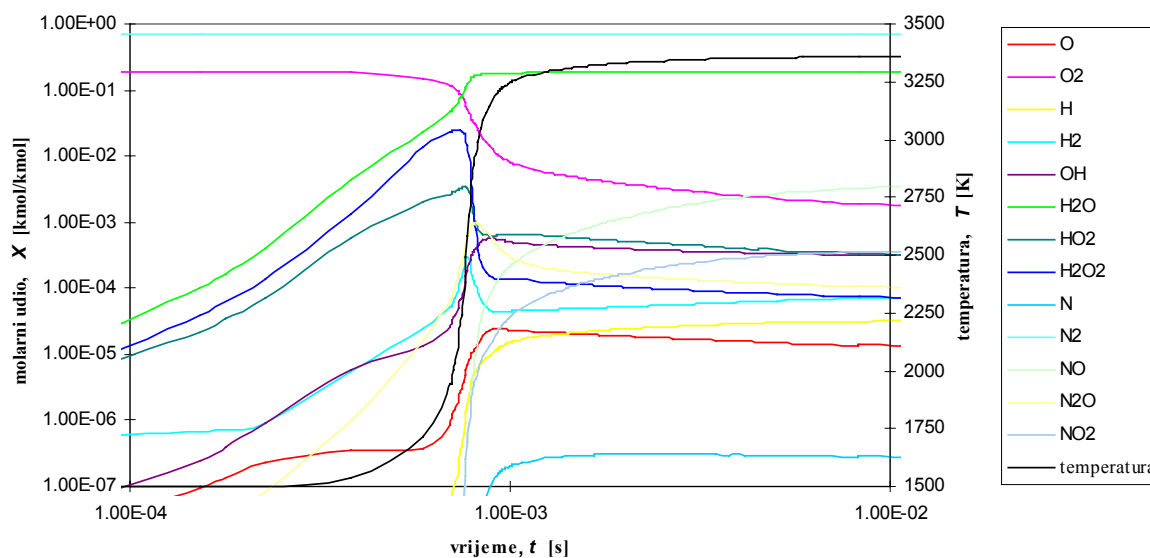
2.2.9. Sistem CH₄-zrak

Prema [5, 13, 20] oksidacija metana odvija se u dva glavna lanca. Oba lanca kreću tako da metan (CH₄) izgubi jedan H atom i tako nastane metilni radikal (CH₃), što je opisano

reakcijama 43-50 u tablici 2.6. Prvi (tzv. C lanac) se nastavlja oksidacijom metilnog radikala pri čemu nastaje CH_2O (reakcije 51-53). Taj dalje postepeno gubi vodikove atome te je rezultat ugljik (II) oksid (reakcije 86-99), te nakon daljnje oksidacije ugljik (IV) oksid (reakcije 39-42).



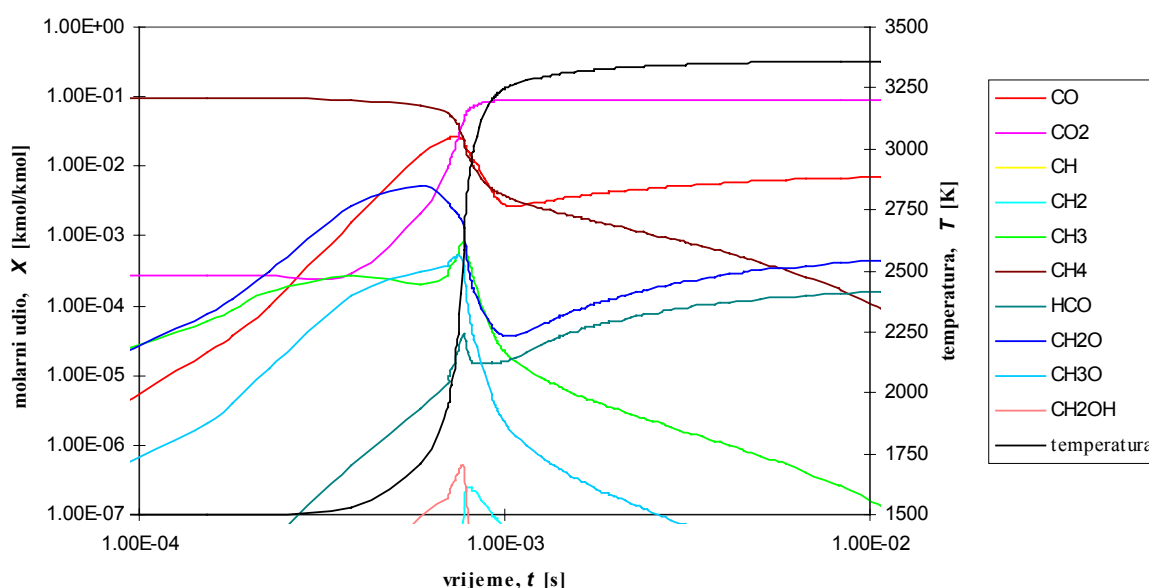
Slika 2.7. Mehanizam oksidacije metana, C lanac



Slika 2.8a. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta (I dio) u sistemu reakcija metan-zrak prema tablici 2.6, reakcije 1-99

Tok C lanca oksidacije metana prikazan je na slici 2.7. Osim prethodno opisane glavne linije lanca postoje i nekoliko manje važnih laterala koje većina autora navode. Najznačajnija je prema sl. 2.8b oksidacija metilnog radikala CH_3 u CH_3O (reakcije 58-60), koji zatim gubi vodikov atom (reakcije 78-82). Osim toga, može se uočiti krak od metilnog radikala (CH_3) nastavljaajući postepenim gubitkom vodikovih atoma (reakcije 61-77) i konačnom oksidacijom, međutim taj se krak lanca pokazao u ovom slučaju zanemarivim. Ukupno, C

lanac oksidacije metana obuhvaća kemijske vrste dane u tablici 2.4 i reakcije 39-99 u tablici 2.6.

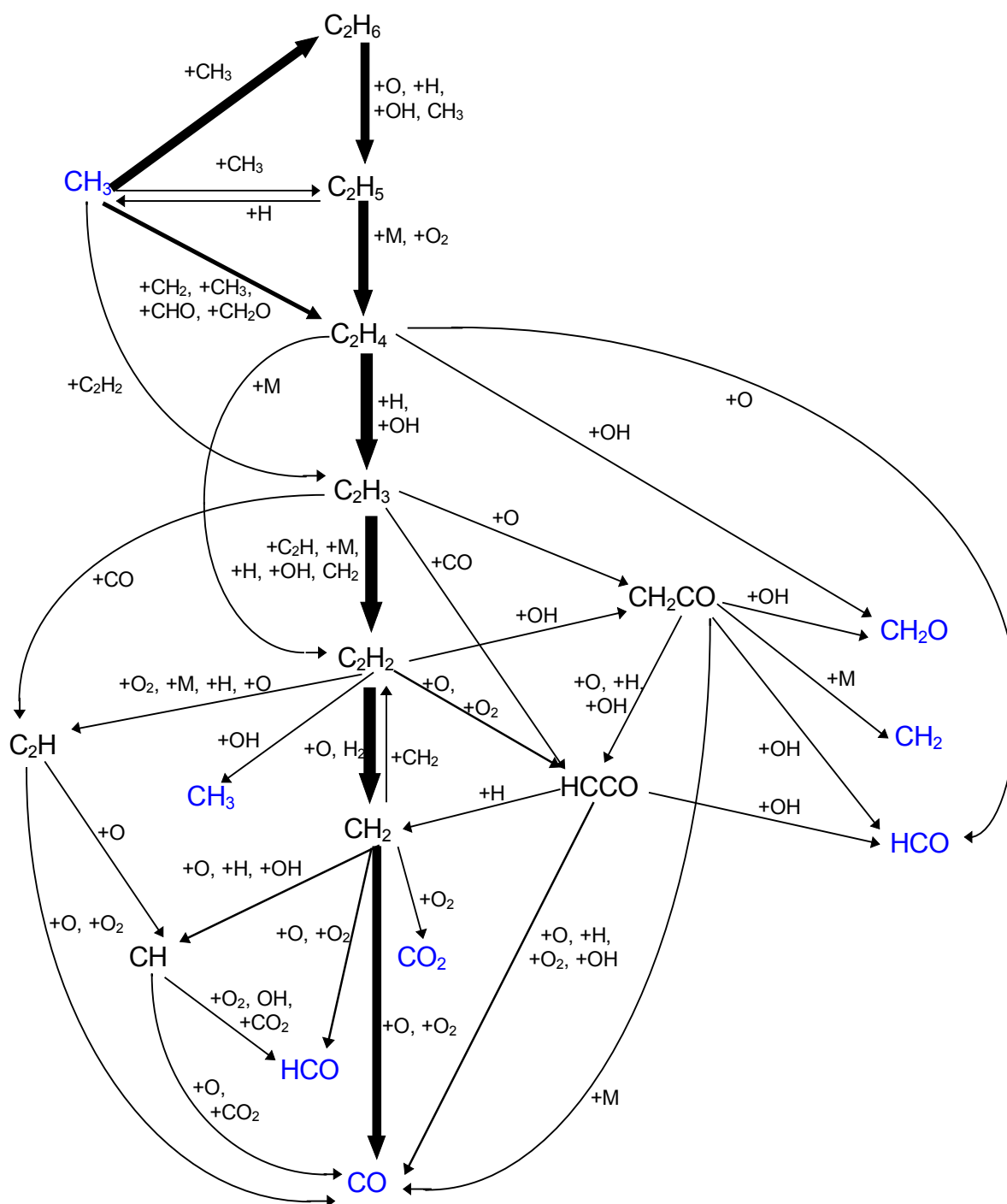


Slika 2.8b. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta (II dio) u sistemu reakcija metan-zrak prema tablici 2.6, reakcije 1-99

Izgaranjem stehiometrijske smjese metana i zraka pri atmosferskom tlaku i s početnom temperaturom od 1500 K dobiveni su rezultati prikazani na slikama 2.8a-b. Treba primijetiti da je izgaranje metana značajno sporije nego izgaranje vodika što potvrđuje intuitivno znanje. Tek sada dolazi do izražaja značaj uključivanja radikala HO_2 i H_2O_2 u model izgaranja vodika, jer su prilikom oksidacije metana ti radikali značajno prisutniji nego H , O i OH . To je posljedica sporijeg procesa i time više vremena za rekombinaciju izrazito aktivnih radikala, čije su koncentracije dakle niže. Kako je njihova reaktivnost međutim značajno veća, tako je praćenje njihovih koncentracija neophodno. Zamjetan je i utjecaj N_2O na nastanak dušik (II) oksida, što je također najvjerojatnije posljedica niže brzine odvijanja procesa oslobađanja topline.

Tablica 2.5. Spojevi u sistemu reakcija metan-zrak, tzv. C_2 lanac oksidacije

oznaka	radikali	naziv
C_2H_6		etan
C_2H_5	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{H}_2$	etilni radikal
C_2H_4	$\dot{\text{C}}\text{H}_2\dot{\text{C}}\text{H}_2$	etilni radikal
C_2H_3	$\dot{\text{C}}\text{H}_2\dot{\text{C}}\text{H}$	etilni radikal
C_2H_2	$\dot{\text{C}}\text{H}\dot{\text{C}}\text{H}$	etilni radikal
C_2H	$:\dot{\text{C}}\text{H}$	etilni radikal
CH_2CO	$\dot{\text{C}}\text{H}_2\dot{\text{C}}\text{O}$	
HCCO	$\text{H}\dot{\text{C}}\dot{\text{C}}\text{O}$	

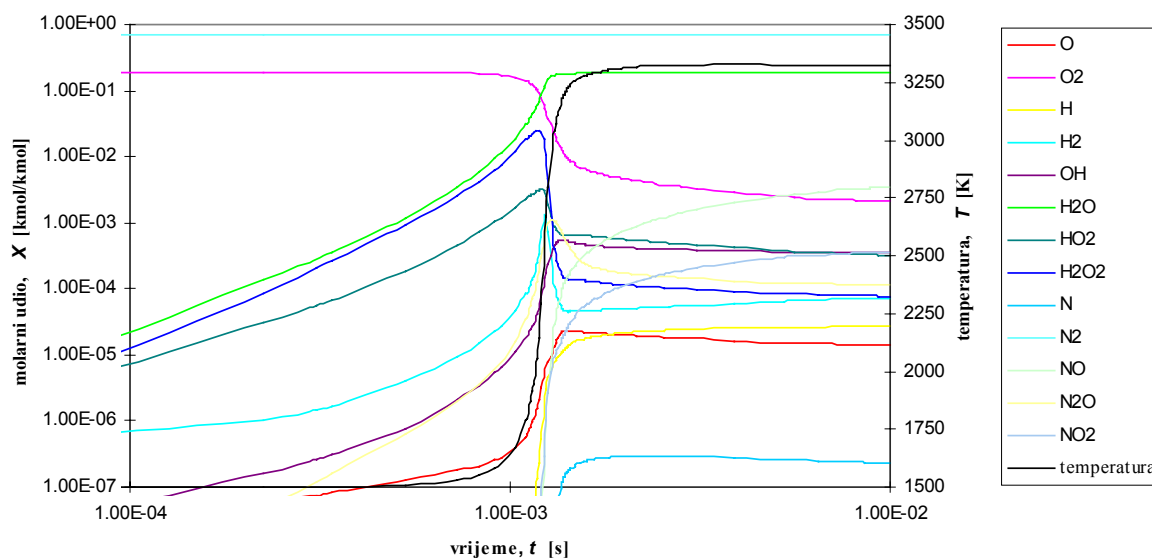


Slika 2.9. Mehanizam oksidacije metana, C_2 lanac. Daljnja oksidacija kemijskih vrsta označenih plavom bojom prikazana je slici 2.7

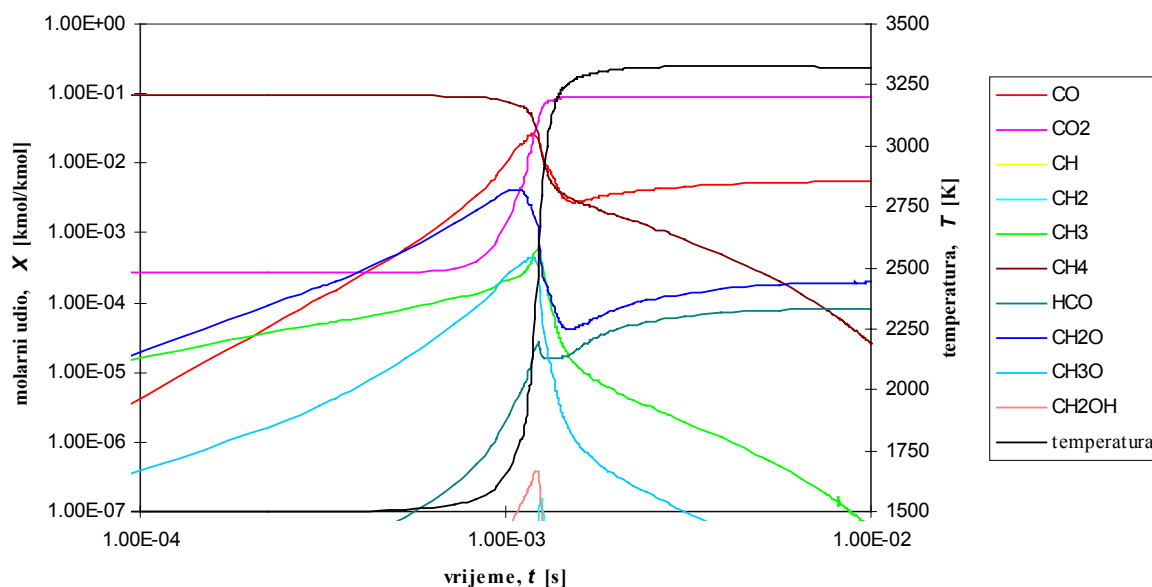
U drugom lancu oksidacije metana (tzv. C_2 lanac) dolazi do rekombinacije (reakcija 100 prema tablici 2.6) dvaju metilnih radikala (CH_3) u molekulu etana (C_2H_6), koja zatim postepeno gubi vodikove atome. Većina autora izostavlja C_2 lanac [15, 18, 21-22], ali ga neki autori uzimaju u obzir [20, 13], tvrdeći da je zanemarenje značajno.

Na slici 2.9. prikazan je tzv. C_2 lanac oksidacije metana. Rekombinacijom dvaju metilnih radikala uglavnom nastaje molekula etana te u manjoj mjeri etilni radikali (C_2H_x) (reakcije 100-105 u tablici 2.6). Molekula etana zatim postepeno gubi vodikove atome sve do C_2H_2

(reakcije 106-119), zatim gubi atom ugljika (reakcije 120-121), te konačno prelazi u ugljik (II) oksid (reakcije 61-64). Osim te glavne linije postoji i više lateralnih, danih reakcijama 122-143. Daljnja oksidacija kemijskih vrsta označenih plavom bojom prikazana je slici 2.7. Da bi se modelirao C_2 lanac oksidacije metana potrebno je već uvedenim reakcijama dodati reakcije 100-143 iz tablice 2.6, te kemijske vrste dane u tablici 2.5.



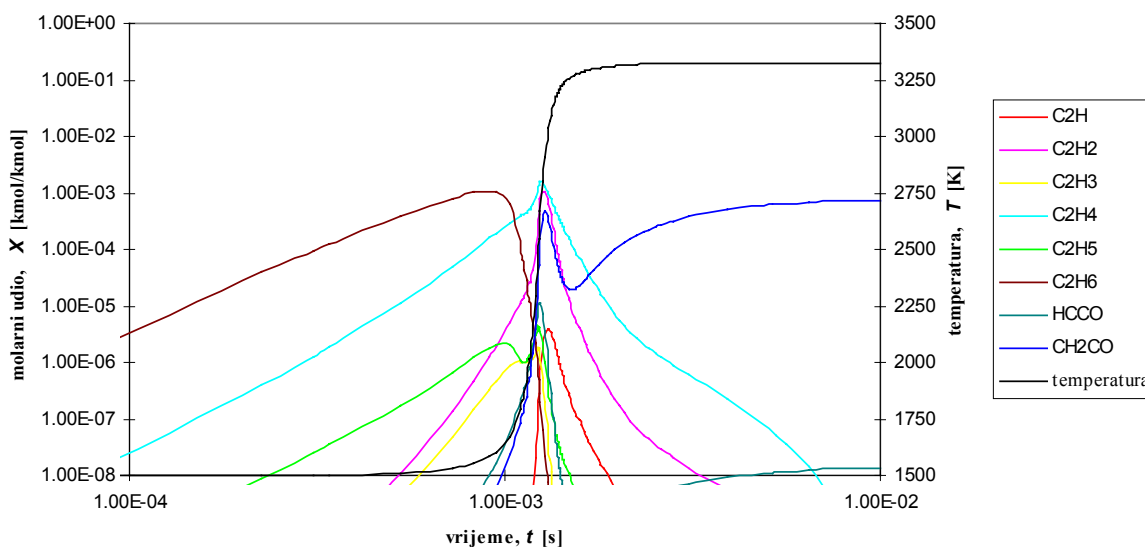
Slika 2.10a. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta (I dio) u sistemu reakcija metan-zrak prema tablici 2.6, reakcije 1-143



Slika 2.10b. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta (II dio) u sistemu reakcija metan-zrak prema tablici 2.6, reakcije 1-143

Simulacija izgaranja je ponovljena na istom primjeru, dakle oksidacija stehiometrijske smjese metana i zraka pri atmosferskom tlaku i s početnom temperaturom od 1500 K (sl. 2.10a-c). Razlika između dva modela je očita usporedbom slika 2.10 i 2.8, dakle rezultati modeliranja

procesa oksidacije metana sa i bez uzimanja u obzir tzv. C₂ lanca. U prethodnom slučaju dolazi do značajnog usporenja procesa (2-3 puta), te prema tome nije moguće zanemariti proces oksidacije metana rekombinacijom metilnog radikala u etan, te njegovim daljnjim izgaranjem.



Slika 2.10c. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta (III dio) u sistemu reakcija metan-zrak prema tablici 2.6, reakcije 1-143

Prema slici 2.10c može se zaključiti da se metilni radikal rekombinira u etan i pri nižim temperaturama, ali do daljnje oksidacije dolazi tek značajnim povišenjem temperature, kada etan vrlo naglo prelazi u C₂H₅, a ovaj gotovo momentalno u C₂H₄. Daljnja se oksidacija uglavnom odvija tek kod visokih temperatura, i to prelaskom (preko C₂H₃) bilo u C₂H₂ ili u CH₂CO, te daljnjim izgaranjem preko CH₂, HCCO i C₂H.

Tablica 2.6. Reakcije sistema metan-zrak

No	reakcija	k_0	E_a	α	referenca
1.	$H+H+M \leftrightarrow H_2+M$	1.00E+12	0.00E+00	-1.00	[21]
2.	$H+HO_2 \leftrightarrow H_2+O_2$	2.50E+10	2.93E+06	0.00	[25]
3.	$H+HO_2 \leftrightarrow H_2O+O$	1.00E+10	4.49E+06	0.00	[19]
4.	$H+HO_2 \leftrightarrow OH+OH$	2.50E+11	7.95E+06	0.00	[25]
5.	$H+O+M \leftrightarrow OH+M$	6.20E+10	0.00E+00	-0.60	[13]
6.	$H+O_2+M \leftrightarrow HO_2+M$	2.10E+12	0.00E+00	-1.00	[20]
7.	$H+OH+M \leftrightarrow H_2O+M$	1.60E+16	0.00E+00	-2.00	[13]
8.	$H_2+O \leftrightarrow H+OH$	1.80E+07	3.73E+07	1.00	[19]
9.	$H_2+O_2 \leftrightarrow OH+OH$	1.70E+10	2.00E+08	0.00	[20]
10.	$H_2+OH \leftrightarrow H_2O+H$	2.63E+10	2.16E+07	0.00	[22]
11.	$H_2O_2+M \leftrightarrow OH+OH+M$	1.20E+14	1.90E+08	0.00	[20]
12.	$H_2O_2+H \leftrightarrow H_2+HO_2$	1.70E+09	1.57E+07	0.00	[17]
13.	$H_2O_2+H \leftrightarrow H_2O+OH$	1.00E+10	1.50E+07	0.00	[17]
14.	$H_2O_2+O \leftrightarrow HO_2+OH$	2.80E+10	2.68E+07	0.00	[17]
15.	$H_2O_2+OH \leftrightarrow HO_2+H_2O$	1.00E+10	7.54E+06	0.00	[21]
16.	$HO_2+HO_2 \leftrightarrow H_2O_2+O_2$	2.00E+09	0.00E+00	0.00	[19]
17.	$HO_2+OH \leftrightarrow H_2O+O_2$	5.00E+10	4.19E+06	0.00	[21]
18.	$O+HO_2 \leftrightarrow O_2+OH$	4.80E+10	4.19E+06	0.00	[21]
19.	$O+O+M \leftrightarrow O_2+M$	1.89E+07	-7.49E+06	0.00	[13]

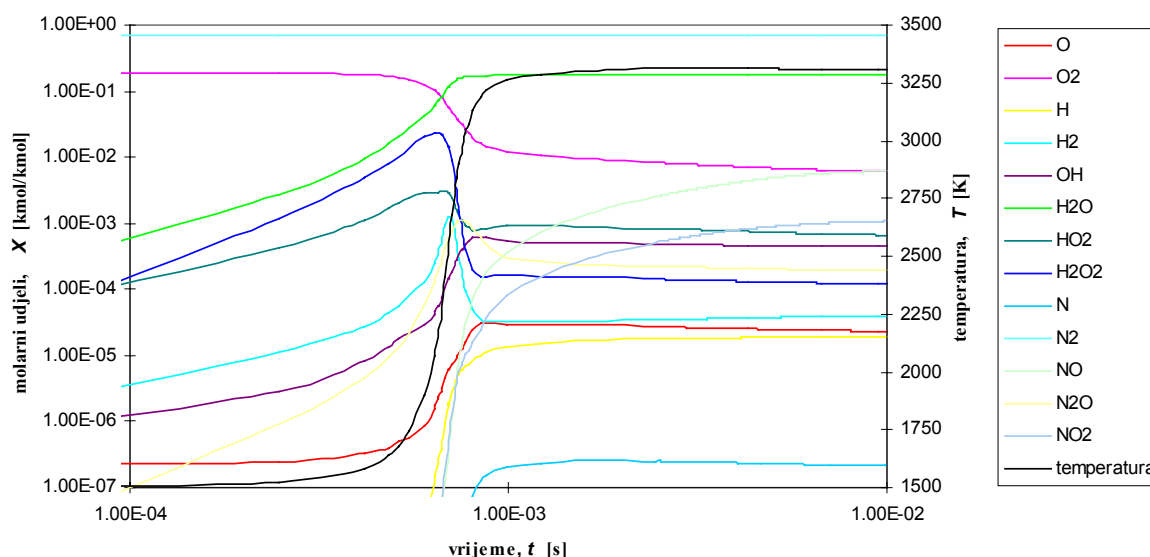
No	reakcija	k_0	E_a	α	referenca
20.	$O_2+H\leftrightarrow O+OH$	2.00E+11	7.03E+07	0.00	[17]
21.	$OH+OH\leftrightarrow H_2O+O$	7.60E+09	4.19E+06	0.00	[15]
22.	$N+O_2\leftrightarrow NO+O$	6.40E+06	2.63E+07	1.00	[25]
23.	$N+OH\leftrightarrow NO+H$	4.20E+10	0.00E+00	0.00	[22]
24.	$N_2+M\leftrightarrow N+N+M$	9.90E+17	5.54E+08	-1.50	[15]
25.	$N_2+O\leftrightarrow NO+N$	6.89E+10	3.14E+08	0.00	[22]
26.	$N_2O+M\leftrightarrow N_2+O+M$	1.60E+11	2.16E+08	0.00	[13]
27.	$N_2O+H\leftrightarrow N_2+OH$	7.60E+10	6.32E+07	0.00	[22]
28.	$N_2O+O\leftrightarrow N_2+O_2$	1.00E+11	1.18E+09	0.00	[20]
29.	$N_2O+O\leftrightarrow NO+NO$	1.00E+11	1.18E+09	0.00	[20]
30.	$N_2O+OH\leftrightarrow N_2+HO_2$	2.00E+09	4.19E+07	0.00	[13]
31.	$NO+M\leftrightarrow N+O+M$	5.20E+18	3.16E+08	-1.50	[15]
32.	$NO+HO_2\leftrightarrow NO_2+OH$	3.02E+09	1.00E+07	0.50	[22]
33.	$NO+NO+O_2\leftrightarrow NO_2+NO_2$	7.95E+03	0.00E+00	0.00	[22]
34.	$NO+NO\leftrightarrow N_2+O_2$	4.80E+20	1.80E+08	-2.50	[15]
35.	$NO+O_2\leftrightarrow NO_2+O$	1.90E+09	1.95E+08	0.00	[22]
36.	$NO_2+M\leftrightarrow NO+O+M$	1.10E+13	2.76E+08	0.00	[13]
37.	$NO_2+H\leftrightarrow NO+OH$	3.50E+11	6.28E+06	0.00	[13]
38.	$N+CO_2\leftrightarrow NO+CO$	1.90E+08	1.42E+07	0.00	[13]
39.	$CO+HO_2\leftrightarrow CO_2+OH$	5.80E+10	9.60E+07	0.00	[20]
40.	$CO+O+M\leftrightarrow CO_2+M$	6.17E+08	1.26E+07	0.00	[13]
41.	$CO+O_2\leftrightarrow CO_2+O$	2.50E+09	2.00E+08	0.00	[20]
42.	$CO+OH\leftrightarrow CO_2+H$	1.51E+04	-3.19E+06	1.30	[22]
43.	$CH_4+M\leftrightarrow CH_3+H+M$	2.10E+14	3.91E+08	0.00	[22]
44.	$CH_4+CH_2\leftrightarrow CH_3+CH_3$	1.30E+10	3.98E+07	0.00	[20]
45.	$CH_4+H\leftrightarrow CH_3+H_2$	2.24E+01	3.64E+07	3.00	[22]
46.	$CH_4+HO_2\leftrightarrow CH_3+H_2O_2$	1.80E+08	7.83E+07	0.00	[13]
47.	$CH_4+O\leftrightarrow CH_3+OH$	1.20E+04	3.19E+07	2.08	[20]
48.	$CH_4+O_2\leftrightarrow CH_3+HO_2$	7.90E+10	2.34E+08	0.00	[13]
49.	$CH_4+OH\leftrightarrow CH_3+H_2O$	3.50E+00	8.37E+06	3.08	[20]
50.	$CH_3+H\leftrightarrow CH_4$	2.63E+25	-1.10E+07	-5.10	[18]
51.	$CH_3+O\leftrightarrow CH_2O+H$	1.30E+11	8.33E+06	0.00	[22]
52.	$CH_3+O_2\leftrightarrow CH_2O+OH$	5.20E+10	1.45E+08	0.00	[20]
53.	$CH_3+OH\leftrightarrow CH_2O+H_2$	4.20E+09	0.00E+00	0.00	[22]
54.	$CH_3+M\leftrightarrow CH_2+H+M$	1.90E+13	3.83E+08	0.00	[20]
55.	$CH_3+H\leftrightarrow CH_2+H_2$	2.00E+08	1.26E+07	0.70	[22]
56.	$CH_3+O\leftrightarrow CH_2+OH$	5.00E+10	5.02E+07	0.00	[20]
57.	$CH_3+OH\leftrightarrow CH_2+H_2O$	6.00E+07	8.37E+06	0.70	[22]
58.	$CH_3+HO_2\leftrightarrow CH_3O+OH$	2.00E+10	0.00E+00	0.00	[13]
59.	$CH_3+O_2\leftrightarrow CH_3O+O$	7.00E+09	1.07E+08	0.00	[20]
60.	$CH_3+OH\leftrightarrow CH_3O+H$	1.70E+07	1.31E+07	0.96	[18]
61.	$CH_2+O\leftrightarrow CO+H+H$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
62.	$CH_2+O\leftrightarrow CO+H_2$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[13]
63.	$CH_2+O_2\leftrightarrow CO+H_2O$	1.90E+07	-4.19E+06	0.00	[13]
64.	$CH_2+O_2\leftrightarrow CO+OH+H$	8.60E+07	-2.09E+06	0.00	[20]
65.	$CH_2+H\leftrightarrow CH+H_2$	7.30E+14	0.00E+00	-1.56	[20]
66.	$CH_2+O\leftrightarrow CH+OH$	5.00E+10	5.02E+07	0.00	[20]
67.	$CH_2+O\leftrightarrow HCO+H$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[22]
68.	$CH_2+O_2\leftrightarrow CH_2O+O$	5.00E+10	3.77E+07	0.00	[13]
69.	$CH_2+O_2\leftrightarrow CO_2+H+H$	1.60E+09	4.19E+06	0.00	[20]
70.	$CH_2+O_2\leftrightarrow CO_2+H_2$	6.90E+08	2.09E+06	0.00	[20]
71.	$CH_2+O_2\leftrightarrow HCO+OH$	4.30E+07	-2.09E+06	0.00	[20]
72.	$CH_2+OH\leftrightarrow CH+H_2O$	1.13E+04	1.26E+07	2.00	[13]
73.	$CH_2+OH\leftrightarrow CH_2O+H$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
74.	$CH+CO_2\leftrightarrow HCO+CO$	3.40E+09	0.00E+00	0.00	[13]
75.	$CH+O\leftrightarrow CO+H$	5.70E+10	0.00E+00	0.00	[20]
76.	$CH+O_2\leftrightarrow HCO+O$	3.30E+10	0.00E+00	0.00	[20]
77.	$CH+OH\leftrightarrow HCO+H$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]

No	reakcija	k_0	E_a	α	referenca
78.	$\text{CH}_3\text{O}+\text{H}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{H}_2$	2.00E+10	0.00E+00	0.00	[13]
79.	$\text{CH}_3\text{O}+\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{OH}$	1.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
80.	$\text{CH}_3\text{O}+\text{O}_2\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2$	6.30E+07	1.09E+07	0.00	[13]
81.	$\text{CH}_3\text{O}+\text{OH}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	1.00E+10	0.00E+00	0.00	[13]
82.	$\text{CH}_3\text{O}+\text{M}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{H}+\text{M}$	1.00E+11	1.05E+08	0.00	[20]
83.	$\text{CH}_2\text{OH}+\text{M}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{H}+\text{M}$	1.00E+11	1.05E+08	0.00	[13]
84.	$\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{H}_2$	2.00E+10	0.00E+00	0.00	[13]
85.	$\text{CH}_2\text{OH}+\text{O}_2\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2$	1.48E+10	6.28E+06	0.00	[13]
86.	$\text{CH}_2\text{O}+\text{M}\leftrightarrow\text{HCO}+\text{H}+\text{M}$	3.31E+13	3.39E+08	0.00	[13]
87.	$\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_3\leftrightarrow\text{HCO}+\text{CH}_4$	1.00E+11	2.34E+07	0.00	[15]
88.	$\text{CH}_2\text{O}+\text{H}\leftrightarrow\text{HCO}+\text{H}_2$	1.00E+11	1.93E+07	0.00	[22]
89.	$\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2\leftrightarrow\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}_2$	1.00E+11	3.56E+07	0.00	[15]
90.	$\text{CH}_2\text{O}+\text{O}\leftrightarrow\text{HCO}+\text{OH}$	1.80E+10	1.29E+07	0.00	[13]
91.	$\text{CH}_2\text{O}+\text{O}_2\leftrightarrow\text{HCO}+\text{HO}_2$	6.00E+10	1.34E+08	0.00	[15]
92.	$\text{CH}_2\text{O}+\text{OH}\leftrightarrow\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}$	2.40E+08	4.19E+06	0.00	[22]
93.	$\text{HCO}+\text{M}\leftrightarrow\text{H}+\text{CO}+\text{M}$	1.60E+11	6.15E+07	0.00	[20]
94.	$\text{HCO}+\text{CH}_3\leftrightarrow\text{CO}+\text{CH}_4$	3.02E+10	0.00E+00	0.00	[18]
95.	$\text{HCO}+\text{H}\leftrightarrow\text{CO}+\text{H}_2$	4.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
96.	$\text{HCO}+\text{O}\leftrightarrow\text{CO}+\text{OH}$	1.00E+11	0.00E+00	0.00	[22]
97.	$\text{HCO}+\text{O}\leftrightarrow\text{CO}_2+\text{H}$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[13]
98.	$\text{HCO}+\text{O}_2\leftrightarrow\text{CO}+\text{HO}_2$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[22]
99.	$\text{HCO}+\text{OH}\leftrightarrow\text{CO}+\text{H}_2\text{O}$	1.00E+11	0.00E+00	0.00	[13]
100.	$\text{CH}_3+\text{CH}_3\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_6$	3.18E+38	1.16E+07	-7.00	[13]
101.	$\text{C}_2\text{H}_5+\text{H}\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{CH}_3$	4.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
102.	$\text{CH}_3+\text{CH}_3\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_4+\text{H}_2$	2.10E+11	8.04E+07	0.00	[20]
103.	$\text{CH}_3+\text{CH}_2\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_4+\text{H}$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[13]
104.	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{HCO}$	1.60E+06	3.12E+06	1.20	[13]
105.	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{OH}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_3$	2.00E+09	4.02E+06	0.00	[20]
106.	$\text{C}_2\text{H}_6+\text{CH}_3\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_5+\text{CH}_4$	5.50E-02	3.47E+07	4.00	[20]
107.	$\text{C}_2\text{H}_6+\text{H}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_5+\text{H}_2$	5.40E-01	2.18E+07	3.50	[20]
108.	$\text{C}_2\text{H}_6+\text{O}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_5+\text{OH}$	2.50E+10	2.66E+07	0.00	[20]
109.	$\text{C}_2\text{H}_6+\text{OH}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_5+\text{H}_2\text{O}$	8.70E+06	7.58E+06	1.05	[13]
110.	$\text{C}_2\text{H}_5+\text{O}_2\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_4+\text{HO}_2$	3.20E+09	2.10E+07	0.00	[20]
111.	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{H}+\text{M}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_5+\text{M}$	6.37E+21	-2.26E+05	-28.00	[13]
112.	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{H}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_3+\text{H}_2$	1.10E+11	3.56E+07	0.00	[20]
113.	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{OH}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_3+\text{H}_2\text{O}$	4.80E+09	5.15E+06	0.00	[20]
114.	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{M}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{H}_2+\text{M}$	2.60E+14	3.32E+08	0.00	[20]
115.	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{M}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{H}+\text{M}$	3.00E+12	1.34E+08	0.00	[20]
116.	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{C}_2\text{H}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}_2$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[13]
117.	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{CH}_2\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{CH}_3$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
118.	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{H}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{H}_2$	4.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
119.	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{OH}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{H}_2\text{O}$	5.00E+09	0.00E+00	0.00	[13]
120.	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_2+\text{CO}$	2.20E+07	1.08E+07	1.00	[20]
121.	$\text{CH}_2+\text{CH}_2\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{H}_2$	3.20E+10	0.00E+00	0.00	[20]
122.	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{M}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}+\text{H}+\text{M}$	4.20E+13	4.48E+08	0.00	[13]
123.	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{O}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}+\text{OH}$	3.16E+12	6.28E+07	-0.60	[13]
124.	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{OH}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}+\text{H}_2\text{O}$	6.00E+09	2.93E+07	0.00	[20]
125.	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{O}\leftrightarrow\text{HCCO}+\text{H}$	3.60E+01	5.82E+06	2.70	[20]
126.	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{O}_2\leftrightarrow\text{HCCO}+\text{OH}$	2.00E+05	1.26E+08	1.50	[13]
127.	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{OH}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{CO}+\text{H}$	3.20E+08	8.37E+05	0.00	[20]
128.	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{OH}\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{CO}$	4.83E-07	-8.37E+03	4.00	[13]
129.	$\text{C}_2\text{H}+\text{H}_2\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{H}$	4.10E+02	3.60E+06	2.39	[20]
130.	$\text{C}_2\text{H}+\text{O}\leftrightarrow\text{CH}+\text{CO}$	5.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
131.	$\text{C}_2\text{H}+\text{O}_2\leftrightarrow\text{HCCO}+\text{O}$	6.00E+08	0.00E+00	0.00	[20]
132.	$\text{C}_2\text{H}+\text{O}_2\leftrightarrow\text{HCO}+\text{CO}$	2.40E+09	0.00E+00	0.00	[20]
133.	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{CO}+\text{H}$	3.30E+10	0.00E+00	0.00	[20]
134.	$\text{CH}_2\text{CO}+\text{M}\leftrightarrow\text{CH}_2+\text{CO}+\text{M}$	3.60E+12	2.48E+08	0.00	[20]
135.	$\text{CH}_2\text{CO}+\text{H}\leftrightarrow\text{HCCO}+\text{H}_2$	7.50E+10	3.35E+07	0.00	[20]

No	reakcija	k_0	E_a	α	referenca
136.	$\text{CH}_2\text{CO} + \text{O} \leftrightarrow \text{HCCO} + \text{OH}$	1.00E+10	3.35E+07	0.00	[13]
137.	$\text{CH}_2\text{CO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HCO}$	2.80E+10	0.00E+00	0.00	[20]
138.	$\text{CH}_2\text{CO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{HCCO} + \text{H}_2\text{O}$	7.50E+09	1.26E+07	0.00	[20]
139.	$\text{HCCO} + \text{CH}_2 \leftrightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CO}$	3.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]
140.	$\text{HCCO} + \text{H} \leftrightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	1.00E+11	0.00E+00	0.00	[13]
141.	$\text{HCCO} + \text{O} \leftrightarrow \text{CO} + \text{CO} + \text{H}$	1.00E+11	0.00E+00	0.00	[13]
142.	$\text{HCCO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CO} + \text{CO} + \text{OH}$	1.50E+09	1.05E+07	0.00	[20]
143.	$\text{HCCO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{HCO} + \text{CO} + \text{H}$	1.00E+10	0.00E+00	0.00	[20]

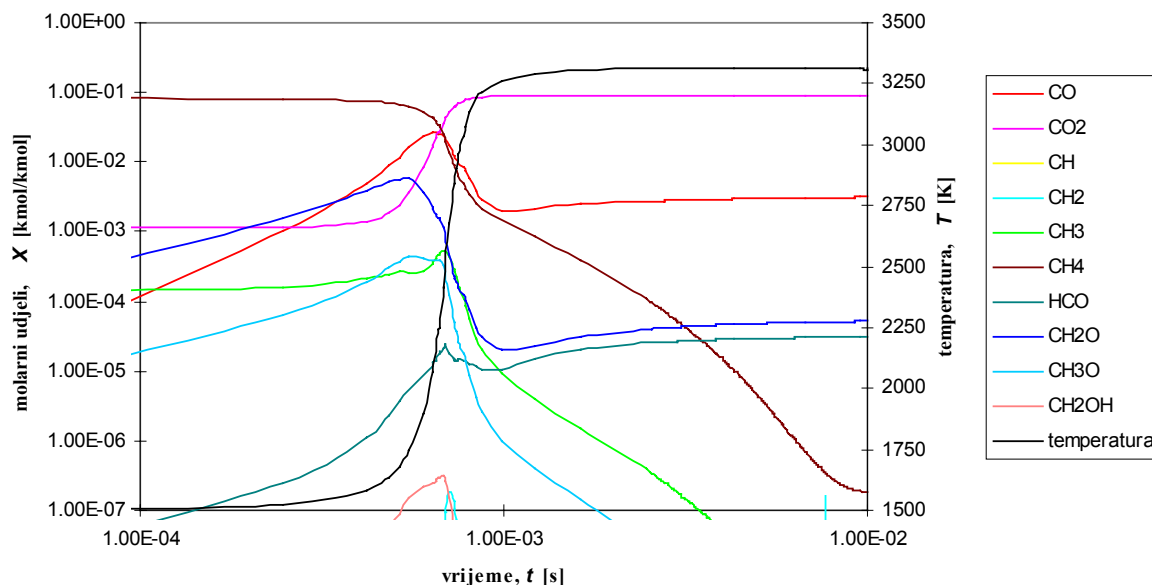
2.2.10. Sistem prirodni plin-zrak

Prirodni se plin sastoji od metana (CH_4), te nešto etana (C_2H_6), propana (C_3H_8), butana (C_4H_{10}), viših ugljikovodika, dušika (N_2), vodika (H_2), kisika (O_2) i sumporovodika (H_2S). Koncentracije propana, butana i viših ugljikovodika su uglavnom tako male da je njihovo zanemarivanje sasvim opravdano s obzirom da bi trebalo dodati još nekoliko stotina elementarnih reakcija koji bi opisivale njihovo izgaranje u zraku.

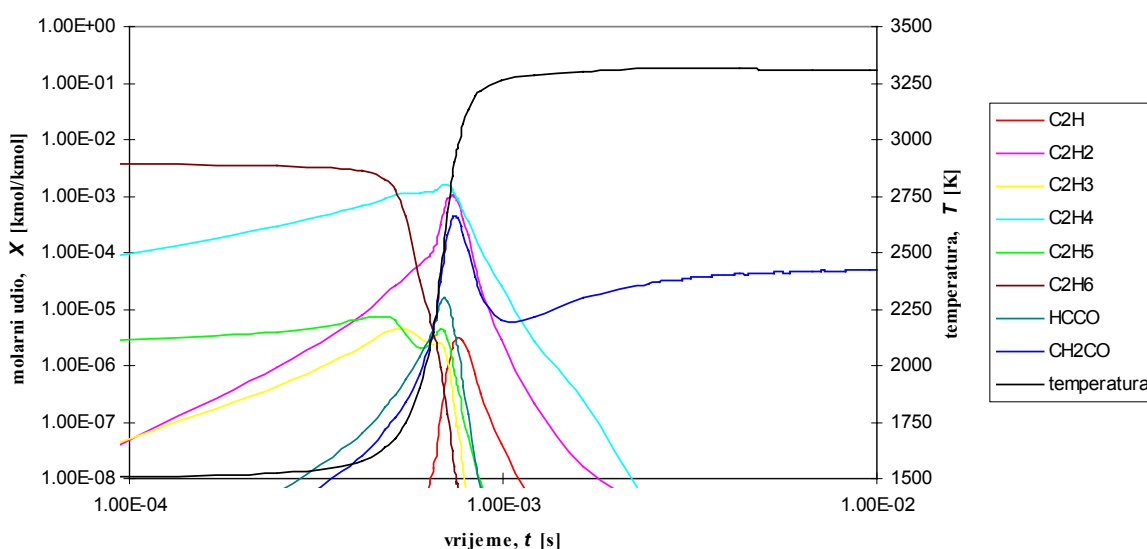


Slika 2.11a. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta (I dio) pri izgaranju prirodnog plina

Pretpostavljeno je da se može zanemariti koncentracija sumporovodika, jer bi njeno uključivanje značilo dodavanje kemijske kinetike spojeva sumpora, a ne bi značajno utjecalo na proces izgaranja goriva, niti na stvaranje dušičnih oksida. Jedino bi interes za proces produkcije sumpornih oksida mogao opravdati takav pristup. Dušik, vodik i kisik su već implicitno uključeni u izgaranje metana u zraku, kao i etan, koji nastaje spajanjem dvaju CH_3 radikala i predstavlja tzv. C_2 lanac izgaranja metana, koji je kako se pokazalo, neophodno uzeti u obzir.



Slika 2.11b. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta (II dio) pri izgaranju prirodnog plina



Slika 2.11c. Promjena molarnih udjela kemijskih vrsta (III dio) pri izgaranju prirodnog plina

Prema tome, ako prirodni plin pojednostavimo kao mješavinu metana i etana, što nije daleko od stvarnosti, sistem elementarnih reakcija dan u tablici 2.6 predstavlja kinetiku izgaranja prirodnog plina u zraku. Sastav prirodnog plina dan je u tablici 2.7.

Rezultati simulacije prethodno navedenim sistemom reakcija (tab. 2.6) primijenjenog na oksidaciju prirodnog plina prema [3] i zraka, uz pretičak zraka od $\lambda = 1.05$, prikazani su na slici 2.11. Najvažnija razlika u odnosu na prethodni primjer (sl. 2.10) je u tome što se izgaranje odvija brže, što se može objasniti pretičkom zraka u ovome primjeru, dok se u prethodnom radilo o stehiometrijskoj smjesi.

Tablica 2.7. Sastav prirodnog plina prema [3]

Sastav goriva	X	Y	Y'
	[kmol/kmol]	[kg/kg]	[kg/kg]
CH ₄	0.8130	0.701	0.701
C ₂ H ₆	0.0285	0.046	0.060
C ₃ H ₈	0.0040	0.010	dodano etanu
C ₄ H ₁₀	0.0014	0.004	dodano etanu
CO ₂	0.0089	0.021	0.021
N ₂	0.1435	0.217	0.218
ostalo	0.0007	0.001	dodano dušiku

2.3. MODELIRANJE TRANSPORTNIH PROCESA

U prethodnom je poglavlju prezentiran model izgaranja plina, ali u njemu nije definirano određivanje početnih uvjeta te što se događa s produktima nakon izgaranja. Takav je model adekvatan procesu koji se odvija u kemijskom reaktoru, gdje za vrijeme odvijanja kemijskih procesa nema pritjecanja reaktanata niti ispuštanja produkata. Međutim, u ložištu je proces izmjene tvari i strujanja iste vrlo važan dio procesa i nikako se ne može zanemariti.

Moguće je materijalni volumen zamisliti kao kemijski reaktor i na njemu primijeniti prethodni kinetički model, ali je jednostavnije pratiti što se odvija u pojedinom prostornom volumenu. Da bi se moglo prezentirati kako strujanje utječe na procese u ložištu, potrebno je iznijeti mehanizam praćenja transportnih procesa sa strane točke u prostoru, ili njenog reprezentanta, infinitezimalnog volumena.

2.3.1. Opća transportna jednadžba

Osnovni zakoni postavljeni su za materijalni volumen V_m , a pomoću Reynoldsovog transportnog teorema [91] mogu se prevesti u formu koja vrijedi za infinitezimalni prostorni volumen (dodatak B). Diferencijalni oblik brzine promjene fizikalne veličine φ dan je sa:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi)}_{\text{akumulacija}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j \varphi)}_{\text{konvekcija}} = \underbrace{S_\varphi}_{\text{izvor / ponor}} + \underbrace{\frac{\partial J_{\varphi,j}}{\partial x_j}}_{\text{difuzija}} \quad (2.77)$$

gdje je $\rho\varphi$ volumenska gustoća neke fizikalne veličine, koja je definirana u prostoru i vremenu funkcijom:

$$\varphi = \varphi(x_i, t) \quad (2.78)$$

v_j brzina strujanja fluida, S_φ volumenski izvor veličine φ , a $J_{\varphi,j}$ difuzijski fluks te veličine kroz površine infinitezimalnog prostornog volumena. Članovi u jednadžbi (2.77) imaju sljedeće fizikalno značenje: prvi član na lijevoj strani jednadžbe je promjena fizikalne veličine φ u vremenu, dok je drugi član izmjena te veličine s okolnim prostorom putem konvekcije. Na desnoj strani prvi član je volumenski izvor ili ponor veličine, a posljednji član predstavlja difuzivnu izmjenu veličine s okolnim prostorom.

Pojedini osnovni zakoni dobivaju se iz izraza (2.77) uvrštavanjem vrijednosti za φ , S_φ i $J_{\varphi,j}$ prema shemi danoj u tablici 2.8.

Zakon održanja mase (jednadžba kontinuiteta):

Masa materijalnog volumena je konstantna.

Primjenom Reynoldsovog transportnog teorema taj zakon u diferencijalnom obliku glasi [5]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j) = 0 \quad (2.79)$$

Zakon brzine promjene količine gibanja (jednadžba količine gibanja, impulsna jednadžba, prvi Cauchyjev zakon):

Brzina promjene količine gibanja materijalnog volumena je jednaka zbroju vanjskih masenih i površinskih sila koje djeluju na materijalni volumen.

Prijelazom pomoću Reynoldsovog transportnog teorema s materijalnog volumena na prostorni dobije se diferencijalni oblik gornjeg zakona za nestacionarno strujanje stlačivog fluida [5]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i) = \rho f_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.80)$$

gdje je f_i vektor masene gustoće vanjskih sila, a σ_{ij} tenzor naprezanja u fluidu. Jednadžba (2.80) je vektorska, dakle sadrži tri skalarne jednadžbe. Tenzor naprezanja je simetričan tenzor, što je moguće dokazati primjenom zakona brzine promjene momenta količine gibanja (jednadžbe momenta količine gibanja, drugog Cauchyjevog zakona):

$$\sigma_{kj} = \sigma_{jk} \quad (2.81)$$

Zakon brzine promjene masenog udjela kemijske vrste u višekomponentnom sistemu (jednadžba transporta kemijske vrste, jednadžba transporta mase):

Brzina promjene masenog udjela kemijske vrste u materijalnom volumenu je jednaka zbroju brzine nastajanja i brzine dovođenja te kemijske vrste u materijalni volumen.

Za nestacionarno strujanje stlačivog fluida primjenom Reynoldsovog transportnog teorema se dobije [5]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j Y_\alpha) = \omega_\alpha - \frac{\partial j_{\alpha,j}}{\partial x_j} \quad (2.82)$$

gdje je Y_α maseni udio kemijske vrste α u infinitezimalnom volumenu, ω_α brzina nastajanja (izvor ili ponor), a $j_{\alpha,j}$ fluks te vrste kroz površine volumena. Dvije potonje veličine je potrebno za svaku komponentu propisati odgovarajućom konstitutivnom relacijom.

Zakon brzine promjene unutrašnje energije:

Brzina promjene unutrašnje energije u materijalnom volumenu je jednaka brzini dovođenja topline materijalnom volumenu te snazi rada koji okolina vrši na materijalnom volumenu.

Kako je brzina promjene unutrašnje energije u ložištu gotovo jednaka brzini promjene entalpije, ova je veličina, uz zanemarenje brzine promjene tlaka te prijelaza mehaničke energije u toplinsku, izabrana kao relevantna. To je sasvim opravdano obzirom na veličine toplinskih tokova u ložištu. Za nestacionarno strujanje stlačivog fluida primjenom se Reynoldsovog transportnog teorema dobije jednadžba transporta entalpije [5] u ložištu (energetska jednadžba):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j h) = q''' - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (2.83)$$

gdje je q_j gustoća toplinskog toka kroz površine infinitezimalnog volumena, q''' izvor/ponor topline, a h specifična entalpija.

U ložištu su značajna dva izvora topline: zbog prevladavanja egzotermnih kemijskih reakcija oslobađa se toplina q_C''' te toplina q_R''' koja se izmjenjuje zračenjem s okolinom volumena:

$$q''' = q_C''' + q_R''' \quad (2.84)$$

Potrebno je dakle propisati konstitutivnim relacijama vrijednosti dvaju izvora i toka.

Tablica 2.8. Pregled osnovnih zakona održanja

Naziv	φ	S_φ	$J_{\varphi,j}$	jednadžba
Jednadžba kontinuiteta	1	0	0	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j) = 0$
Jednadžba količine gibanja	v_i	ρf_i	σ_{ij}	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j v_i) = \rho f_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$
Jednadžba kemijske vrste α	Y_α	ω_α	$-j_{\alpha,j}$	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j Y_\alpha) = \omega_\alpha - \frac{\partial j_{\alpha,j}}{\partial x_j}$
Jednadžba entalpije	h	q'''	$-q_j$	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j h) = q''' - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}$

Predmet ovoga rada je stacionarni model procesa u ložištu generatora pare, te se prvi član lijeve strane u jednadžbama (2.79-2.80, 2.82-2.83) može izostaviti. Procesi na dimnoj strani ložišta su vrlo brzi, te se stoga njihova dinamika može zanemariti. Interes u ovome radu je

prvenstveno na nastanku polutanata prilikom izgaranja prirodnog plina, a na taj proces vremenska promjena rubnih uvjeta ne utječe značajno.

Model procesa u ložištu generatora pare je opisan prema tome sljedećim skupom nelinearnih parcijalnih diferencijalnih jednačbi:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j) = 0 \quad (2.85)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j v_i) = \rho f_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.86)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j Y_\alpha) = \omega_\alpha - \frac{\partial j_{\alpha,j}}{\partial x_j} \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j h) = q_C''' + q_R''' - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (2.88)$$

Ukupni broj skalarnih nepoznatih veličina iznosi $22 + 5n_\alpha$, gdje je n_α broj kemijskih vrsta koje se uzimaju u obzir u modelu. Kako je model dan sa samo $5 + n_\alpha$ parcijalnih diferencijalnih jednačbi, te je s njime obuhvaćeno i toliko nepoznatih veličina:

$$\rho = \rho(x_j) \quad (2.89)$$

$$v_i = v_i(x_j) \quad (2.90)$$

$$Y_\alpha = Y_\alpha(x_j) \quad (2.91)$$

$$h = h(x_j) \quad (2.92)$$

te uz simetričnost tenzora naprezanja (2.81), potrebno je postaviti $14 + 4n_\alpha$ konstitutivnih relacija:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(x_k) \quad (2.93)$$

$$j_{\alpha,i} = j_{\alpha,i}(x_j) \quad (2.94)$$

$$q_i = q_i(x_j) \quad (2.95)$$

$$f_i = f_i(x_j) \quad (2.96)$$

$$\omega_\alpha = \omega_\alpha(x_j) \quad (2.97)$$

$$q_C''' = q_C'''(x_j) \quad (2.98)$$

$$q_R''' = q_R'''(x_j) \quad (2.99)$$

2.3.2. Difuzivni transport

Difuzivni transport pojedinih fizikalnih veličina između infinitezimalnog volumena i okoline uzrokovan je pojavama na molekularnoj razini. Molekule se u svom mikroskopskom gibanju

sudaraju i time prenose pojedina svojstva. Prenošenje impulsa se zove molekularno trenje između čestica ili viskoznost. Newton je primijetio da je iznos viskoznosti proporcionalan iznosu gradijenta brzine. Na sličan je način Fick zamijetio da je molekularna difuzija čestica (difuzija mase) u binarnoj smjesi ovisna o gradijentu koncentracije tih dviju kemijskih vrsta, a Fourier je ustanovio da je molekularno provođenje topline (kondukcija) proporcionalno gradijentu temperature.

Newtonov zakon viskoznosti

Newtonov zakon viskoznosti [92] homogenog i izotropnog fluida uspostavlja linearnu zavisnost između tenzora naprežanja u fluidu i tenzora brzine deformacije. Fluidi koji zadovoljavaju ovu pretpostavku se zovu newtonski fluidi, a pretpostavlja se da zakon vrijedi i za plinove u ložištu generatora pare. Generaliziran za trodimenzionalno stlačivo strujanje zakon glasi:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \Sigma_{ij} \quad (2.100)$$

gdje je Σ_{ij} tenzor viskoznih naprežanja, te iznosi:

$$\Sigma_{ij} = 2\mu D_{ij} - \frac{2}{3}\mu D_{kk}\delta_{ij} \quad (2.101)$$

p termodinamički tlak u fluidu, a μ dinamički koeficijent molekularne viskoznosti. Eksperimentalno utvrđena veza [92] između srednjeg mehaničkog tlaka:

$$p_m = -\frac{1}{3}\sigma_{kk} \quad (2.102)$$

i termodinamičkog tlaka glasi:

$$p = p_m + \mu_v \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \quad (2.103)$$

gdje je μ_v dinamički koeficijent volumenske viskoznosti.

Uz tenzor brzine deformacije strujanja fluida:

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.104)$$

tenzor viskoznih naprežanja Σ_{ij} postaje:

$$\Sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3}\mu - \mu_v \right) \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.105)$$

Uvrstivši Newtonov zakon viskoznosti (2.100 i 2.105) u jednadžbu količine gibanja (2.86) dobije se Navier-Stokesova jednadžba za stacionaran slučaj koja opisuje strujanje stlačivog newtonskog fluida:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i) = \rho f_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3}\mu - \mu_v \right) \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (2.106)$$

Fickov zakon difuzije

Fickov zakon difuzije [93] uspostavlja vezu između fluksa (difuzije) kemijske vrste kroz površinu infinitezimalnog volumena i gradijenta koncentracije te vrste:

$$j_{\alpha,j} = -\Gamma_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_j} \quad (2.107)$$

gdje je Γ_{α} koeficijent difuzije vrste α u smjesu i svojstvo je fluida. Jednadžba transporta kemijske vrste (2.87) dobiva oblik:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j Y_{\alpha}) = \omega_{\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_j} \right) \quad (2.108)$$

Fourierov zakon provođenja

Fourierov zakon provođenja [93] daje vezu između gustoće toplinskog toka i gradijenta temperature:

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (2.109)$$

gdje je T temperatura, a λ koeficijent toplinske vodljivosti i termodinamičko je svojstvo fluida. Jednadžba transporta entalpije za stacionarno strujanje postaje:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j h) = q_C''' + q_R''' + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (2.110)$$

Jedinica temperature u članu koji opisuje kondukciju je irelevantna jer se radi o gradijentu temperature.

Koeficijent toplinske vodljivosti

Prema definiciji Prandtlovog broja Pr postavlja se veza između koeficijenta toplinske vodljivosti λ i dinamičkog koeficijenta molekularne viskoznosti μ :

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} \quad (2.111)$$

Prandtlov broj je termodinamičko svojstvo fluida te se za sastav plina kakav se nalazi u ložištu može reći da je pretpostavka o konstantnom Prandtlovom broju zadovoljavajuća. Kako je specifična entalpija povezana s temperaturom preko specifične topline:

$$dh = c_p dT \quad (2.112)$$

moguće je kondukciju u jednadžbi transporta entalpije izraziti preko gradijenta specifične entalpije:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j h) = q_C''' + q_R''' + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (2.113)$$

Koeficijent difuzije mase kemijske vrste u smjesu

Na isti se način kao s koeficijentom toplinske vodljivosti prema definiciji postavlja i veza između koeficijenta difuzije mase Γ_α kemijske vrste α u smjesu i dinamičkog koeficijenta molekularne viskoznosti μ preko Prandtl-Schmidtovog σ_α :

$$\sigma_\alpha = \frac{\mu}{\Gamma_\alpha} \quad (2.114)$$

gdje je Prandtl-Schmidtov broj također termodinamičko svojstvo fluida koje se za sastav plina kakav se nalazi u ložištu može smatrati konstantnim.

Sistem diferencijalnih jednadžbi za stacionarno, stlačivo, viskozno strujanje reaktivnog višekomponentnog fluida:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j) = 0 \quad (2.115)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j v_i) = \rho f_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_v \right) \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (2.116)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j Y_\alpha) = \omega_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{\sigma_\alpha} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) \quad (2.117)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j h) = q_C''' + q_R''' + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (2.118)$$

Uvođenjem direkcijskih konstitutivnih relacija difuzivnog transporta broj skalarnih nepoznatih veličina smanjen je na $15 + 3n_\alpha$, gdje je n_α broj kemijskih vrsta. Uz gore navedenih $5 + n_\alpha$ parcijalnih diferencijalnih jednadžbi i $5 + n_\alpha$ konstitutivnih relacija danih izrazima (2.96-2.99) potrebno je postaviti još i $5 + n_\alpha$ termodinamičkih konstitutivnih relacija:

$$\rho = \rho(p, T, Y_\alpha) \quad (2.119)$$

$$h = h(p, T, Y_\alpha) \quad (2.120)$$

$$\mu_v = \mu_v(p, T, Y_\alpha) \quad (2.121)$$

$$\mu = \mu(p, T, Y_\alpha) \quad (2.122)$$

$$Pr = Pr(p, T, Y_\alpha) \quad (2.123)$$

$$\sigma_\alpha = \sigma_\alpha(p, T, Y_\alpha) \quad (2.124)$$

2.4. PRIJENOS TOPLINE ZRAČENJEM

Prijenos topline zračenjem ima posebno mjesto u modeliranju ložišta generatora pare, kao prvo po značaju pojave, a kao drugo po kompleksnosti njenog modeliranja. U izmjeni topline između ekranskih cijevi i plinskog volumena, zračenje sudjeluje s preko 90% udjela, te se često prilikom modeliranja ložišta i zanemaruje konvektivni prijenos topline na ložište. U prethodnom je radu na modelu [52] to i bilo tako učinjeno, uz još nekoliko značajnih pojednostavljenja. Stijenka je tretirana kao crna, a plin kao jedan sivi plin, čime je u model unesena manja pogreška. Osim toga su pojednostavljenja onemogućila generaciju neekvidistantne mreže, te modeliranje problema s nepravilnom geometrijom. To je prvenstveno bilo učinjeno zbog štednje na kompjuterskom vremenu. Kako su u međuvremenu računala značajno uznapredovala ti su nedostaci popravljani. Smatralo se međutim da je primjena Hottelove zonalne metode za sivu stijenku prekomplikirana, te je Schneider [94-96] primijenio Monte Carlo metodu koja je vrlo fleksibilna u uvođenju dodatnih modula. O samim metodama bit će više riječi u trećem poglavlju, a ovdje slijedi kratki prikaz modela zračenja za crnu i sivu stijenku.

Planckov zakon

Spektralni intenzitet zračenja crnog tijela ne ovisi o smjeru zračenja nego samo o spektru. Ta se ovisnost zove Planckov zakon [97]:

$$i'_{\lambda,b} = \frac{2C_1}{\lambda^5 (e^{C_2/\lambda T} - 1)} \quad (2.125)$$

gdje su C_1 i C_2 Planckove konstante, T apsolutna temperatura, a λ valna duljina zrake. Totalni intenzitet zračenja crnog tijela se dobije integracijom po čitavom spektru:

$$i'_b = \int_0^{\infty} i'_{\lambda,b} d\lambda = \frac{\sigma}{\pi} T^4 \quad (2.126)$$

gdje je σ Stefan-Boltzmannova konstanta.

Gustoća zračenja površine dA

Za difuzne površine vrijedi Lambertov zakon kosinusa [98], pa se usmjerena spektralna gustoća zračenja računa prema:

$$e'_{\lambda,b} = i'_{\lambda,b} \cos \vartheta_s \quad (2.127)$$

Za crne je površine moguća integracija usmjerene spektralne gustoće zračenja po čitavom spektru da bi se dobila usmjerena totalna gustoća zračenja:

$$e'_b = i'_b \cos \vartheta_s = \frac{\sigma}{\pi} T_s^4 \cos \vartheta_s \quad (2.128)$$

gdje je ϑ_s kut između normale na površinu dA i zrake koja ju napušta. Površina emitira zračenje s jedne svoje strane koje se širi u obliku hemisfere. Integrira li se usmjerena spektralna gustoća zračenja po čitavoj hemisferi dobije se sferna spektralna gustoća zračenja:

$$e_{\lambda,b} = \int_{2\pi} e'_{\lambda,b} d\omega_s \quad (2.129)$$

gdje je $d\omega_s$ infinitezimalni prostorni kut. Prelaskom na sferne koordinate φ i ϑ uz:

$$d\omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \quad (2.130)$$

i uvrštenje zakona kosinusa (2.127) dobije se:

$$e_{\lambda,b} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} i'_{\lambda,b} \cos \vartheta_s \sin \vartheta_s d\vartheta_s d\varphi_s \quad (2.131)$$

Kako spektralni intenzitet zračenja ne ovisi kod crnog tijela o smjeru, izraz se može integrirati:

$$e_{\lambda,b} = \pi i'_{\lambda,b} \quad (2.132)$$

Sferna totalna gustoća zračenja crnog tijela se dobije integracijom po čitavom spektru:

$$e_b = \int_0^{\infty} e_{\lambda,b} d\lambda = \pi \int_0^{\infty} i'_{\lambda,b} d\lambda = \pi i'_b = \sigma T_s^4 \quad (2.133)$$

Prethodni izraz predstavlja Stefan-Boltzmannov zakon. Usmjereni i sferni radijativni toplinski tok s površine dA iznose redom:

$$dQ'_{s,b} = i'_b dA \cos \vartheta_s = \frac{\sigma}{\pi} T_s^4 dA \cos \vartheta_s \quad (2.134)$$

$$dQ^-_{s,b} = e_b dA = \sigma T_s^4 dA \quad (2.135)$$

Slabljenje zračenja prolaskom kroz plin

Dok dvoatomni plinovi uglavnom propuštaju zračenje, troatomni ga djelomično apsorbiraju i to vrlo selektivno obzirom na spektar. Slabljenje spektralnog intenziteta zračenja na putu dr iznosi:

$$\frac{di'_\lambda}{dr} = -\alpha_\lambda i'_\lambda \quad (2.136)$$

gdje je α_λ spektralni koeficijent apsorpcije zračenja. Između točke 1 i točke 2 intenzitet zračenja oslabio je na:

$$i'_{\lambda,2} = i'_{\lambda,1} e^{-\int_1^2 \alpha_\lambda dr} = i'_{\lambda,1} \tau(r) \quad (2.137)$$

Za slučaj konstantnog koeficijenta apsorpcije i sivog plina totalni intenziteti zračenja su proporcionalni onima crnoga tijela:

$$i_2 = i_1 e^{-\alpha r} = i_1 \tau(r) \quad (2.138)$$

gdje je r udaljenost između točaka 1 i 2.

Toplinski tok zračenjem iz infinitezimalnog plinskog volumena dV

Ako je $dV = dA dr$ u infinitezimalnom volumenu dV apsorpira se sljedeći toplinski tok:

$$dQ_g^+ = - \int_0^{\infty} \int_{4\pi} di'_\lambda dA d\omega d\lambda \quad (2.139)$$

Uz pretpostavku da se radi o sivom plinu te uvrštavanjem izraza za slabljenje spektralnog intenziteta zračenja (2.136) dobije se radijativni toplinski tok apsorbiran u infinitezimalnom volumenu dV , a također i emitiran iz istog volumena [98]:

$$dQ_g^- = dQ_g^+ = 4\alpha_g e_b dV = 4\alpha_g \sigma T_g^4 dV \quad (2.140)$$

Zračenje emitirano s crne površine dA_{s_1} i primljeno na površinu dA_{s_2}

Infinitezimalna crna površina dA_{s_2} prima (i apsorbira) s infinitezimalne crne površine dA_{s_1} samo dio zračenja odaslanog u smjeru dA_{s_2} umanjenog za koeficijent oslabljenja $\tau(r)$:

$$dQ_{s_1,b \rightarrow s_2,b} = \underbrace{dQ'_{s_1,b}}_{\text{odaslan}} \underbrace{d\omega_{s_1}}_{\text{u smjeru}} \underbrace{\tau(r)}_{\text{oslabljeno putem}} = \sigma T_{s_1}^4 \frac{dA_{s_1} \cos \vartheta_{s_1} dA_{s_2} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} \quad (2.141)$$

Zračenje emitirano iz plinskog volumena dV_{g_1} i primljeno na površinu dA_{s_2}

Infinitezimalna crna površina dA_{s_2} prima (i apsorbira) iz infinitezimalnog volumena dV_{g_1} samo jedan dio zračenja odaslanog u smjeru dA_{s_2} umanjenog za koeficijent oslabljenja $\tau(r)$:

$$dQ_{g_1 \rightarrow s_2,b} = \underbrace{dQ_{g_1}}_{\text{odaslan}} \underbrace{\frac{d\omega_{g_1}}{4\pi}}_{\text{u smjeru}} \underbrace{\tau(r)}_{\text{oslabljeno putem}} = \sigma T_{g_1}^4 \frac{\alpha_{g_1} dV_{g_1} dA_{s_2} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} \quad (2.142)$$

Zračenje emitirano s crne površine dA_{s_1} i apsorbirano u plinskom volumenu dV_{g_2}

Infinitezimalni plinski volumen dV_{g_2} apsorbira samo onaj udio zračenja odaslanog u smjeru dV_{g_2} s infinitezimalne crne površine dA_{s_1} umanjenog za koeficijent oslabljenja po putu $\tau(r)$ koji je određen koeficijentom apsorpcije i duljinom puta koji zračenje prolazi volumenom dV_{g_2} :

$$dQ_{s_1,b \rightarrow g_2} = \underbrace{dQ'_{s_1,b}}_{\text{odaslan}} \underbrace{d\omega_{s_1}}_{\text{u smjeru}} \underbrace{\tau(r)}_{\text{oslabljeno putem}} \underbrace{\alpha_{g_2} dr}_{\text{apsorbirano}} = \sigma T_{s_1}^4 \frac{dA_{s_1} \cos \vartheta_{s_1} \alpha_{g_2} dV_{g_2} \tau(r)}{\pi r^2} \quad (2.143)$$

Zračenje emitirano iz plinskog volumena dV_{g_1} i apsorbirano u plinskom volumenu dV_{g_2}

Infinitezimalni plinski volumen dV_{g_2} apsorbira samo onaj dio zračenja odaslanog u smjeru dV_{g_2} s infinitezimalnog plinskog volumena dV_{g_1} umanjenog koeficijentom oslabljenja po putu $\tau(r)$ koji je određen koeficijentom apsorpcije i duljinom puta koji zračenje prolazi volumenom dV_{g_2} :

$$dQ_{g_1 \rightarrow g_2} = \underbrace{dQ_{g_1}}_{\text{odaslano}} \underbrace{\frac{d\omega_{g_1}}{4\pi}}_{\text{u smjeru}} \underbrace{\tau(r)}_{\text{oslabljeno}} \underbrace{\alpha_{g_2}}_{\text{apsorbirano putem}} dr = \sigma T_{g_1}^4 \frac{\alpha_{g_1} dV_{g_1} \alpha_{g_2} dV_{g_2} \tau(r)}{\pi r^2} \quad (2.144)$$

Gustoća radijativnog toplinskog toka q_R'' na infinitezimalnoj površini dA

Integracijom po čitavoj domeni radijativnog toplinskog toka na infinitezimalnu crnu površinu dA_{s_1} emitiranog iz svih infinitezimalnih plinskih volumena (2.142) te odaslano sa svih infinitezimalnih crnih površina (2.141) dobije se ukupni dozračeni toplinski tok:

$$dQ_{s,b}^+ = \int_A dQ_{s_1,b \rightarrow s_2,b} + \int_V dQ_{g_1 \rightarrow s_2,b} = \left[\int_A \sigma T_{s_1}^4 \frac{\cos \vartheta_{s_1} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi^2} dA_{s_1} + \int_V \sigma T_{g_1}^4 \frac{\cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi^2} \alpha_{g_1} dV_{g_1} \right] dA_{s_2} \quad (2.145)$$

Uz odzračeni toplinski tok s iste površine prema (2.135) može se izračunati bilanca na infinitezimalnoj crnoj površini dA_s (izostavljeni su indeksi s_1 , s_2 , g_1 i g_2 a indeks s predstavlja infinitezimalnu površinu na kojoj se radi bilanca):

$$dQ_{s,b} = -dQ_{s,b}^- + dQ_{s,b}^+ = -\sigma T_s^4 dA_s + \left[\int_A \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta \cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^2} dA + \int_V \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^2} \alpha dV \right] dA_s \quad (2.146)$$

gdje je ϑ_s kut zrake i normale na apsorbirajuću površinu dA_s . Izvorni član, gustoća toplinskog toka q_R'' na infinitezimalnu površinu dA_s prema tome iznosi:

$$q_R'' = \frac{dQ_{s,b}}{dA_s} = -\sigma T_s^4 + \int_A \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta \cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^2} dA + \int_V \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^2} \alpha dV \quad (2.147)$$

Prelaskom na volumenski integral po čitavom ložištu prema teoremu Gauss-Ostrogradskog dobije se kompaktniji izraz:

$$q_R'' = -\sigma T_s^4 + \int_V \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sigma T^4 \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^3} r_j \right) + \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^2} \alpha \right] dV \quad (2.148)$$

Volumenski toplinski tok prijenosa topline zračenjem q_R'''

Integracijom po čitavoj domeni radijativnog toplinskog toka apsorbiranog u volumenu dV_{g_2} , a emitiranog iz infinitezimalnih plinskih volumena (2.144) te odaslano sa infinitezimalnih crnih površina (2.143) dobije se ukupni apsorbirani toplinski tok u infinitezimalnom plinskom volumenu dV_{g_2} :

$$dQ_g^+ = \int_A dQ_{s_1,b \rightarrow g_2} + \int_V dQ_{g_1 \rightarrow g_2} = \left[\int_A \sigma T_{s_1}^4 \frac{\cos \vartheta_{s_1} \tau(r)}{\pi^2} dA_{s_1} + \int_V \sigma T_{g_1}^4 \frac{\alpha_{g_1} \tau(r)}{\pi^2} dV_{g_1} \right] \alpha_{g_2} dV_{g_2} \quad (2.149)$$

Uz odzračenu toplinski tok iz istog volumena prema (2.140) može se izračunati bilanca u infinitezimalnom volumenu dV_g (izostavljeni su indeksi s_1 , s_2 , g_1 i g_2 a indeks g predstavlja infinitezimalni volumen na kojem se radi bilanca):

$$dQ_g = -dQ_g^- + dQ_g^+ = -4\alpha_g\sigma T_g^4 dV_g + \left[\int_A \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta \tau(r)}{\pi^2} dA + \int_V \sigma T^4 \frac{\alpha \tau(r)}{\pi^2} dV \right] \alpha_g dV_g \quad (2.150)$$

Volumenski toplinski tok q_R''' u energetskej jednadžbi (2.118), uz prelazak na volumenski integral pomoću teorema Gaussa-Ostrogradskog, iznosi:

$$q_R''' = \frac{dQ_g}{dV_g} = -4\alpha_g\sigma T_g^4 + \alpha_g \int_V \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sigma T^4 \frac{\tau(r)}{\pi^3} r_j \right) + \sigma T^4 \frac{\alpha \tau(r)}{\pi^2} \right] dV \quad (2.151)$$

Energetska jednadžba, u slučaju crne stijenke, dobiva time konačan izgled:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j h) = q_c''' + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \alpha_g \int_V \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sigma T^4 \frac{\tau(r)}{\pi^3} r_j \right) + \sigma T^4 \frac{\alpha \tau(r)}{\pi^2} \right] dV - 4\alpha_g\sigma T_g^4 \quad (2.152)$$

Takva integralno-diferencijalna jednadžba vrlo je teško rješiva pomoću današnjih numeričkih metoda. Hottelova zonalna metoda koja nudi jedan put za rješavanje ovog problema objašnjena je u trećem poglavlju.

2.4.3. Model zračenja u slučaju sivih, difuznih stijenki

Površina koja nije crna jedan dio zračenja apsorbira, a drugi dio reflektira (uz pretpostavku neprozirnosti stijenke). Apsorptivnost je omjer toplinskog toka zračenjem apsorbiranog na površini i onoga koji je na nju pao:

$$\alpha_s = \frac{dQ_{s,a}^+}{dQ_s^+} \quad (2.153)$$

Onaj dio toka koji nije na površini apsorbiran, bit će u slučaju ložišta zbog neprozirnih stijenki reflektiran. Prema tome zbroj apsorptivnosti i reflektivnosti mora biti jedan:

$$\alpha_s + \rho_s = 1 \quad (2.154)$$

Emisivnost je omjer toplinskog toka koji površina emitira i toka koji bi ta ista površina emitirala kad bi bila crno tijelo:

$$\varepsilon_s = \frac{dQ_{s,e}^-}{dQ_{s,b}^-} \quad (2.155)$$

Za površine koje su difuzne i sive vrijedi da je apsorptivnost jednaka emisivnosti:

$$\alpha = \varepsilon \quad (2.156)$$

što znači da na difuznoj sivoj površini vrijedi:

$$\varepsilon_s + \rho_s = 1 \quad (2.157)$$

Prema tome je ukupni odlazeći toplinski tok zračenjem s površine jednak onom emitiranom uvećanom za reflektirani toplinski tok:

$$dQ_s^- = dQ_{s,e}^- + dQ_{s,r}^- = \varepsilon_s dQ_{s,b}^- + (1 - \varepsilon_s) dQ_s^+ = \varepsilon_s \sigma T_s^4 + (1 - \varepsilon_s) dQ_s^+ \quad (2.158)$$

Zračenje odaslano sa sive površine dA_{s_1} koje pada na sivu površinu dA_{s_2}

Infinitezimalna difuzna siva površina dA_{s_2} prima s infinitezimalne difuzne sive površine dA_{s_1} samo dio zračenja odaslano u smjeru dA_{s_2} umanjenog za koeficijent oslabljenja $\tau(r)$ zbog prolaska kroz sivi plin:

$$dQ_{s_1 \rightarrow s_2} = \left[\varepsilon_{s_1} \sigma T_{s_1}^4 + (1 - \varepsilon_{s_1}) dQ_{s_1}^+ \right] \frac{dA_{s_1} \cos \vartheta_{s_1} dA_{s_2} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} \quad (2.159)$$

Zračenje odaslano s površine dA_{s_1} i apsorbirano u plinskom volumenu dV_{g_2}

Infinitezimalni plinski volumen dV_{g_2} apsorbira samo dio zračenja odaslano u smjeru dV_{g_2} s infinitezimalne difuzne sive površine dA_{s_1} umanjen za koeficijent oslabljenja po putu $\tau(r)$:

$$dQ_{s_1 \rightarrow g_2} = \left[\varepsilon_{s_1} \sigma T_{s_1}^4 + (1 - \varepsilon_{s_1}) dQ_{s_1}^+ \right] \frac{dA_{s_1} \cos \vartheta_{s_1} \alpha_{g_2} dV_{g_2} \tau(r)}{\pi r^2} \quad (2.160)$$

Zračenje emitirano iz plinskog volumena dV_{g_1} koje pada na površinu dA_{s_2} te zračenje emitirano iz plinskog volumena dV_{g_1} i apsorbirano u plinskom volumenu dV_{g_2} dano je respektivno jednadžbama (2.142) i (2.144).

Gustoća radijativnog toplinskog toka q_r'' na infinitezimalnoj površini dA

Integracijom po čitavoj domeni radijativnog toplinskog toka na infinitezimalnu difuznu sivu površinu dA_{s_1} emitiranog iz svih infinitezimalnih plinskih volumena (2.142) te odaslano sa svih infinitezimalnih difuznih sivih površina (2.159) dobije se ukupni dozračeni toplinski tok:

$$dQ_s^+ = \int_A dQ_{s_1 \rightarrow s_2} + \int_V dQ_{g_1 \rightarrow s_2} = \left\{ \int_A \left[\varepsilon_{s_1} \sigma T_{s_1}^4 + (1 - \varepsilon_{s_1}) dQ_{s_1}^+ \right] \frac{\cos \vartheta_{s_1} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_1} + \int_V \sigma T_{g_1}^4 \frac{\cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} \alpha_{g_1} dV_{g_1} \right\} dA_{s_2} \quad (2.161)$$

Treba primijetiti implicitnost ove jednadžbe zbog člana dQ_s^+ koji se nalazi na obje strane. Toplinski tok apsorbiran na infinitezimalnoj difuznoj sivoj površini iznosi:

$$dQ_{s,a}^+ = \varepsilon_s dQ_s^+ \quad (2.162)$$

Uz emitirani toplinski tok s iste površine prema (2.158) može se izračunati bilanca emitiranog i apsorbiranog toka na infinitezimalnoj difuznoj sivoj površini dA_s (izostavljeni su indeksi s_1 , s_2 , g_1 i g_2 a indeks s predstavlja infinitezimalnu površinu na kojoj se radi bilanca), koja ulazi u toplinsku bilancu na stijenci:

$$dQ_s = -dQ_{s,e}^- + dQ_{s,a}^+ = -\varepsilon_s \sigma T_s^4 dA_s + \varepsilon_s \left\{ \int_A [\varepsilon \sigma T^4 + (1-\varepsilon)dQ_s^+] \frac{\cos \vartheta \cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^2} dA + \int_V \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^2} \alpha dV \right\} dA_s \quad (2.163)$$

gdje je ϑ_s kut zrake i normale na apsorbirajuću površinu dA_s . Izvorni član, gustoća toplinskog toka q_R'' na infinitezimalnu površinu dA_s , uz prelazak na volumenski integral po teoremu Gauss-Ostrogradskog, iznosi:

$$q_R'' = \frac{dQ_s}{dA_s} = -\varepsilon_s \sigma T_s^4 + \varepsilon_s \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[[\varepsilon \sigma T^4 + (1-\varepsilon)dQ_s^+] \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^3} r_j \right] + \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi^2} \alpha \right\} dV \quad (2.164)$$

Ta će gustoća toplinskog toka za slučaj adijabatske stijenke biti nula, što znači da će toplinski tok emitiran zračenjem biti jednak toku apsorbiranom na infinitezimalnoj površini.

Volumenski toplinski tok prijenosa topline zračenjem q_R'''

Integracijom po čitavoj domeni radijativnog toplinskog toka apsorbiranog u volumenu dV_{g_2} , a emitiranog iz svih infinitezimalnih plinskih volumena (2.144) te odaslanog sa svih infinitezimalnih difuznih sivih površina (2.160) dobije se ukupni toplinski tok apsorbiran u infinitezimalnom plinskom volumenu dV_{g_2} :

$$dQ_g^+ = \int_A dQ_{s_1 \rightarrow g_2} + \int_V dQ_{g_1 \rightarrow g_2} = \left\{ \int_A [\varepsilon_{s_1} \sigma T_{s_1}^4 + (1-\varepsilon_{s_1})dQ_{s_1}^+] \frac{\cos \vartheta_{s_1} \tau(r)}{\pi^2} dA_{s_1} + \int_V \sigma T_{g_1}^4 \frac{\alpha_{g_1} \tau(r)}{\pi^2} dV_{g_1} \right\} \alpha_{g_2} dV_{g_2} \quad (2.165)$$

Uz poznati odzračeni toplinski tok (2.140) može se izračunati bilanca u volumenu dV_g (izostavljeni su indeksi s_1 , s_2 , g_1 i g_2 a indeks g predstavlja volumen na kojem se radi bilanca):

$$dQ_g = -dQ_g^- + dQ_g^+ = -4\alpha_g \sigma T_g^4 dV_g + \left\{ \int_A [\varepsilon \sigma T^4 + (1-\varepsilon)dQ_s^+] \frac{\cos \vartheta \tau(r)}{\pi^2} dA + \int_V \sigma T^4 \frac{\alpha \tau(r)}{\pi^2} dV \right\} \alpha_g dV_g \quad (2.166)$$

Izvorni član q_R''' u energetske jednačbi (2.118), uz prelaz s površinskog na volumenski integral pomoću teorema Gaussa-Ostrogradskog, iznosi:

$$q_R''' = \frac{dQ_g}{dV_g} = -4\alpha_g \sigma T_g^4 + \alpha_g \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[[\varepsilon \sigma T^4 + (1-\varepsilon)dQ_s^+] \frac{\tau(r)}{\pi^3} r_j \right] + \sigma T^4 \frac{\alpha \tau(r)}{\pi^2} \right\} dV \quad (2.167)$$

Energetska jednačba, u slučaju kada je stijenska difuzna i siva, dobiva time sljedeći oblik:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j h) = q_c''' + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \alpha_g \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left[\varepsilon \sigma T^4 + (1 - \varepsilon) dQ_s^+ \right] \frac{\tau(r)}{\pi r^3} r_j \right] + \sigma T^4 \frac{\alpha \tau(r)}{\pi r^2} \right\} dV - 4 \alpha_g \sigma T_g^4 \quad (2.168)$$

Potrebno je još definirati na isti način i član dQ_s^+ prema izrazu (2.161) uz prelazak s površinskog na volumenski integral pomoću teorema Gaussa-Ostrogradskog:

$$dQ_s^+ = \varepsilon_s dA \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left[\varepsilon \sigma T^4 + (1 - \varepsilon) dQ_s^+ \right] \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi r^3} r_j \right] + \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi r^2} \alpha \right\} dV \quad (2.169)$$

Rješavanju ove integralno-diferencijalne jednadžbe moglo se prići kao i kod crnih stijenki Hottelovom zonalnom metodom, ali je zbog kompleksnosti takvog pristupa upotrebljena mnogo fleksibilnija Monte Carlo metoda koja je ukratko objašnjena u trećem poglavlju.

Time je definirana konstitutivna relacija (2.99) za prijenos topline zračenjem, ali se pojavila nova termodinamička konstitutivna relacija za koeficijent apsorpcije koju treba postaviti:

$$\alpha_g = \alpha_g(p, T, Y_\alpha) \quad (2.170)$$

2.5. SPREGNUTOST IZGARANJA I TRANSPORTNIH PROCESA

Izgaranje utječe na proces strujanja na taj način što promjenom kemijskog sastava smjese mijenja i njena termodinamička svojstva. Zbog pretežite egzotermnosti reaktivnih procesa oksidacije plina pri pretvorbi energije iz kemijske u toplinsku značajna je promjena distribucije temperature po ložištu a time i gustoće smjese, što će utjecati na distribuciju brzina i pada tlaka. S druge strane transportni procesi u ložištu stalno prinose nove količine reaktanata, te odnose produkte izgaranja i time omogućuju da se proces izgaranja nastavlja. Vrlo snažna spregnutost strujanja i izgaranja je očita i potrebno ih je rješavati zajedno.

Već prije dani sistem diferencijalnih transportnih jednadžbi u tab. 2.8 sadrži izvorni član koji predstavlja brzinu produkcije kemijske vrste kao posljedice izgaranja. U ovom je poglavlju taj član definiran preko već prije određene brzine promjene koncentracije. Osim toga definiran je i volumenski toplinski tok uzrokovan izgaranjem, te je zatim čitav model procesa u ložištu generatora pare rekapituliran.

2.5.1. Brzina produkcije kemijske vrste

Potrebno je odrediti brzinu produkcije (2.97) koja se nalazi u jednadžbi transporta kemijske vrste (2.108):

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j Y_\alpha) = \omega_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) \quad (2.171)$$

Brzina produkcije može se izraziti preko brzine promjene masenog udjela kemijske vrste:

$$\omega_\alpha = \frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) \quad (2.172)$$

Prelaskom na koncentraciju prema (2.9) dobije se:

$$\omega_\alpha = W_\alpha \frac{\partial C_\alpha}{\partial t} \quad (2.173)$$

što je već definirano izrazom za brzinu promjene koncentracije (2.21). Uvrstivši ga dobije se izraz za brzinu produkcije koji opisuje detaljni model izgaranja:

$$\omega_\alpha = W_\alpha \frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = W_\alpha \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) \quad (2.174)$$

2.5.2. Izvor topline izgaranjem

Osim propisivanja brzine produkcije kemijskih vrsta kinetičkim modelom izgaranja potrebno je definirati i volumenski toplinski tok q_C''' (2.98) koji se izgaranjem unosi u struju plina da bi se mogla riješiti jednačba transporta entalpije (2.118). Izrazom (2.49) dan je volumenski toplinski tok koji se iz okoline unosi u reaktivni sistem. Pod okolinom se ovdje smatra struja plina vođena transportnim zakonima. Prema tome struja je plina dobila ono što je reaktivni sistem predao, a to iznosi:

$$q_C''' = - \sum_{k=1}^{n_\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \left[C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] \quad (2.175)$$

Negativan predznak je posljedica toga što je definiran kao pozitivan prinos topline reaktivnom sistemu, a sada je pozicija gledanja sa strane okoline reaktivnog sistema. Međutim kako se kod izgaranja radi uglavnom o snažno egzotermnim reakcijama, ukupan će iznos toga izraza biti svakako pozitivan.

2.5.3. Jednačbe modela nakon sprezanja

Definicijom volumenskog toplinskog toka zračenjem q_R''' , brzine produkcije ω_α kemijske vrste i volumenskog toplinskog toka izgaranjem q_C''' definirane su sve volumenske konstitutivne relacije (2.96-2.99), osim one za masene sile (2.96).

Jedina masena sila koja značajno utječe na procese u ložištu je gravitaciona sila:

$$f_i = -g_i \quad (2.176)$$

za koju vrijedi da je apsolutna vrijednost vektora gravitacije jednaka gravitacijskoj konstanti:

$$|g_i| = \sqrt{g_i g_i} = g \quad (2.177)$$

Sistem diferencijalnih jednačbi za stacionarno, stlačivo, viskozno strujanje reaktivnog višekomponentnog fluida (2.115-2.118), nakon uvrštenja volumenskih konstitutivnih relacija (2.167, 2.174-2.176), poprima sljedeći oblik:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j) = 0 \quad (2.178)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_v \right) \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g_i \quad (2.179)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j Y_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{\sigma_\alpha} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + W_\alpha \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_{M_k}^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_{M_k}^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) \quad (2.180)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - \sum_{k=1}^{n_\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \left[C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] + \alpha_g \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left[\varepsilon \sigma T^4 + (1 - \varepsilon) dQ_s^+ \right] \frac{\tau(r)}{\pi r^3} r_j \right] + \sigma T^4 \frac{\alpha \tau(r)}{\pi r^2} \right\} dV - 4 \alpha_g \sigma T_g^4 \quad (2.181)$$

Da bi se zatvorio model treba prethodnim jednadžbama dodati relacije za odnos masenih udjela i koncentracija (2.9), za brzinu reakcije (2.22), konstantu ravnoteže (2.43) i standardnu molarnu specifičnu toplinu formacije (2.36), te u slučaju sive i difuzne stijenke implicitni izraz (2.169) za ukupni dozračeni radijativni toplinski tok na stijenku. Preostalo je još da se definiraju termodinamičke konstitutivne relacije (2.119-2.124, 2.170), dok će se emisivnost stijenke ložišta davati kao rubni uvjet.

2.6. MODELIRANJE TURBULENCIJE

Turbulentnom strujanju je svojstven trodimenzionalni i nestacionarni karakter čak i kad su rubni uvjeti problema stacionarni. Međutim jednako kao i laminarno strujanje i turbulentno je strujanje potpuno opisano sustavom danim u tablici 2.8. Razlog zašto razlikujemo laminarno i turbulentno strujanje leži u nestabilnosti, prividnoj stohastičnosti, turbulentnog strujanja uzrokovanog time što su karakteristična vremena i duljine fizikalnih pojava koje utječu na strujanje mnogo manje nego što su karakteristična vremena i duljine proizašle iz rubnih uvjeta. Kako je naša potreba za računanjem strujanja vezana za rubne uvjete, i za rezultate s relativno velikim karakterističnim vremenima i duljinama, računanje turbulentnog strujanja sistemom diferencijalnih jednadžbi danim u tablici 2.8 je neekonomično. Pa ipak u zadnje se vrijeme, pojavom računala koja to omogućuju, prišlo i direktnoj numeričkoj simulaciji (DNS [56-58, 60]) turbulentnog strujanja. Međutim, za sada se takav pristup ne koristi za računanje konkretnih problema nego više kao način testiranja različitih modela turbulencije. Za očekivati je da će se primjena DNS-a širiti s povećanjem dostupne kompjuterske moći, ali u početku u onim područjima gdje modeliranje turbulencije nije zadovoljilo postavljene zahtjeve. Kako nas u ložištu daleko više zanimaju toplinski tokovi na ekranske snopove cijevi nego lokalne oscilacije brzina, bilo bi sasvim neracionalno primijeniti DNS pristup.

Kod većine problema prijenosa topline i mase od interesa su jedino usrednjene vrijednosti fizikalnih veličina, ali ipak se mora voditi računa o tome kako lokalne oscilacije veličina utječu na usrednjene veličine. Taj je utjecaj značajan s jedne strane stoga što lokalne oscilacije značajno pojačavaju miješanje fluida (također i miješanje kemijskih vrsta) i time ubrzavaju procese kemijskih reakcija, a s druge zato što kemijski procesi snažno (i izrazito

nelinearno) ovise o lokalnim iznosima fizikalnih veličina, ponajprije temperature i koncentracija, te ih lokalne pulzacije ubrzavaju. Proces miješanja fluida turbulentnim vrtlozima se često naziva turbulentna difuzija, međutim taj je naziv više posljedica modeliranja (i tradicije zasnovane na Boussinesqovoj hipotezi) nego fizikalnosti takve veze. U svakom je slučaju potrebno na neki način modelirati međutjecaj usrednjenih veličina i lokalnih oscilacija trenutačnih vrijednosti tih veličina.

Modeliranju turbulencije prišlo se još davno [61, 99], ali se na tome i dalje vrlo intenzivno radi. Do nedavno svi su se pristupi modeliranju uglavnom zasnivali na usrednjavanju veličina. Iako je predložena već relativno rano [63] kombinacija između direktne numeričke simulacije i modeliranja vrtloga, tj. simulacija velikih vrtloga (engl. *Large Eddy Simulation*, LES [60, 64-65, 100-102]), tek nedavno se češće primjenjuje prilikom rješavanja konkretnih problema u strujanju. U njoj se modeliraju samo veličine na nivou slabo-energetskih, malih karakterističnih vremena i duljina, dok se viši nivoi zahvaćaju direktnom simulacijom. U ložištima, međutim ovdje vrijedi ista napomena kao i za nekorištenje direktne numeričke simulacija.

Ovdje će se dakle prići usrednjavanju osnovnih diferencijalnih jednadžbi koje opisuju procese u ložištu generatora pare na nivou koji obuhvaća sva turbulentna karakteristična vremena i duljine, što je još uglavnom standardni pristup turbulenciji.

Do prijelaza iz laminarnog strujanja u turbulentno dolazi kada Reynoldsov broj:

$$Re = \frac{\rho v L}{\mu} \quad (2.182)$$

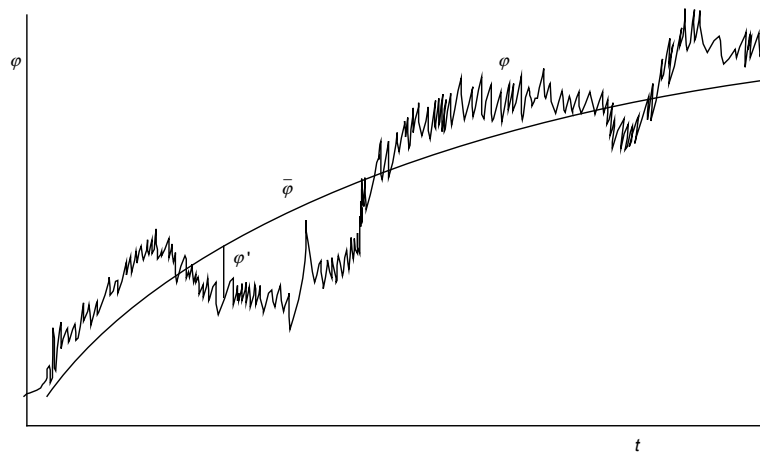
gdje je L karakteristična duljina vezana za geometriju strujanja, pređe određenu kritičnu vrijednost definiranu za pojedinu geometriju. Na temelju tipičnih veličina Reynoldsovog broja u ložištu može se zaključiti da je u njemu strujanje uglavnom turbulentnog karaktera.

2.6.1. Usrednjavanje transportnih jednadžbi

Predmet inženjerskog zanimanja za turbulentno strujanje nisu distribucije fizikalnih veličina u mikrodimezijama vrtloga, već makrodistribucije tih veličina, pa se tome problemu pristupa statistički. Fizikalna veličina φ može se rastaviti na usrednjenu $\bar{\varphi}$ i pulzirajuću komponentu φ' :

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi' \quad (2.183)$$

Na slici 2.12 prikazana je vremenska zavisnost veličine φ u nekoj točki o vremenu t . Njena usrednjena vrijednost je u ovom slučaju također nestacionarna. U slučaju da je srednja vrijednost $\bar{\varphi}$ nezavisna od vremena, strujanje se naziva kvazistacionarnim.



Slika 2.12. Turbulentne pulzacije veličine φ u nekoj točki u zavisnosti od vremena t

U literaturi [60] se mogu naći dvije metode usrednjavanja: Reynoldsovo i Favreovo. U Reynoldsovoj se metodi usrednjavaju fizikalne veličine φ , dok se u Favreovoj metodi usrednjavanje primjenjuje na veličinu pomnoženu s gustoćom. Koja će se metoda primijeniti ovisi o značajnosti pulzacija gustoće, tj. da li se gustoća može smatrati konstantnom, ili ne. U ložištu bi se strujanje svakako moglo predstaviti kao nestlačivo, jer je Machov broj vrlo mali, te je zato zavisnost gustoće o tlaku zanemariva. Međutim prema [60] kada postoji velika razlika između temperature zida i temperature plina, tj. pri velikim toplinskim tokovima, te uz izgaranje, što oboje dovodi do značajnih gradijenata gustoće, Reynoldsova metoda usrednjavanja ne daje zadovoljavajuće rezultate. Stoga se prišlo Favreovoj metodi usrednjavanja.

Veličina $\rho\varphi$ usrednjava se na sljedeći način:

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi} = \frac{1}{\tau_0} \int_{\tau}^{\tau+\tau_0} \rho(x_i, \tau)\varphi(x_i, \tau)d\tau \quad (2.184)$$

Vrijeme integracije τ_0 mora biti duže od vremena trajanja najtrajnijeg turbulentnog vrtloga, a u redu veličine karakterističnog vremena makroprocessa.

Odnos između veličina usrednjenih Reynoldsovom metodom (označenih sa $\bar{}$) i usrednjenih s Favreovom metodom (označenih sa $\tilde{}$) je sljedeći:

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi} = \bar{\rho}\bar{\varphi} + \overline{\rho'\varphi'} \quad (2.185)$$

Svaka pojedina veličina se rastavi na usrednjeni i na pulzacioni dio:

$$\rho = \bar{\rho} + \rho' \quad (2.186)$$

$$p = \bar{p} + p' \quad (2.187)$$

$$T = \tilde{T} + T'' \quad (2.188)$$

$$v_i = \tilde{v}_i + v_i'' \quad (2.189)$$

$$h = \tilde{h} + h'' \quad (2.190)$$

$$Y_\alpha = \tilde{Y}_\alpha + Y_\alpha'' \quad (2.191)$$

Primijenivši Favreovu metodu usrednjavanja na jednadžbu kontinuiteta (2.79) prema integralu (2.184) dobije se:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j) = 0 \quad (2.192)$$

odnosno za stacionarno stanje:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j) = 0 \quad (2.193)$$

Treba napomenuti da Favreova metoda ne predstavlja fizikalnu simplifikaciju, već samo matematičku.

Ako se isti slijed operacija ponovi s Navier-Stokesovom jednadžbom (2.179), uz pretpostavku da dinamički koeficijent viskoznosti ne pulzira [5], dobivaju se Reynoldsove jednadžbe za stlačivi fluid:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{v}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_v \right) \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \bar{\rho} \tilde{v}_i'' \tilde{v}_j'' \right] - \bar{\rho} g_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (2.194)$$

Dio izraza u prvom redu gornje jednadžbe je sličan Navier-Stokesovoj jednadžbi i predstavlja količinu gibanja usrednjenih sila. Zbog nelinearnosti konvektivnog člana jedan dio utjecaja

pulzacija ne isčezava usrednjavanjem. Taj dio, $-\bar{\rho} \tilde{v}_i'' \tilde{v}_j''$ predstavlja Reynoldsova naprezanja.

Postupak se primjenjuje na diferencijalnu jednadžbu transporta kemijske vrste (2.117):

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{Y}_\alpha) = \bar{\omega}_\alpha + \omega'_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{\sigma_\alpha} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{v}_j'' Y_\alpha'' \right) \quad (2.195)$$

te na diferencijalnu jednadžbu transporta entalpije (2.118):

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{h}) = \overline{(q_C''')} + (q_C''')' + \overline{(q_R''')} + (q_R''')' + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{v}_j'' h'' \right) \quad (2.196)$$

Pulzirajuće komponente produkcije kemijske vrste ω'_α , volumenskog toplinskog toka izgaranjem (q_C''') i volumenskog toplinskog toka zračenjem (q_R''') nisu iščezle jer sadrže nelinearne članove, ali će se za potrebe ovoga rada one ipak zanemariti. Time se zanemaruje veza između turbulencije i zračenja, te između turbulencije i izgaranja, što svakako unosi značajnu pogrešku, ali kako težište rada nije na tome, nego na kinetici izgaranja, te kako se za sada u literaturi ne može naći nikakav model mogućeg povezivanja tih procesa, takvo zanemarivanje se može smatrati primjerenim.

Potrebno je dakle na neki način odrediti Reynoldsova naprezanja $-\bar{\rho} v_i'' v_j''$, te slične članove koji su proizašli iz usrednjavanja jednadžbe kemijske vrste, $-\bar{\rho} v_i'' Y_\alpha''$, i entalpije, $-\bar{\rho} v_i'' h''$. Dva su glavna pravca rješavanja ovog problema: postaviti transportne jednadžbe za dvojni korelaciju brzina (tj. Reynoldsova naprezanja), pa modelirati korelacije trećeg reda, ili odmah modelirati dvojni korelaciju brzina. Prethodni se pristup, postavljanje transportnih jednadžbi za Reynoldsova naprezanja (engl. *Reynolds stress model*, RSM) sve češće primjenjuje za slučajeve kada potonji ne daje dobre rezultate. Međutim, taj pristup iziskuje mnogo više kompjuterskog vremena jer treba riješiti devet dodatnih parcijalnih diferencijalnih jednadžbi. Za modeliranje izgaranja plina u ložištu se opet pokazuje sasvim dovoljno pribjeći potonjem pristupu.

2.6.2. Modeliranje Reynoldsovih naprezanja (Boussinesqova hipoteza)

Boussinesq [103] je postavio hipotezu da se efektivno turbulentno tangencijalno naprezanje uzrokovano dvojnou korelacijom pulzirajućih brzina može zamijeniti s produktom gradijenta brzine i veličine koju je nazvao turbulentnom viskoznošću. Generalizirani trodimenzionalni oblik hipoteze glasi:

$$-\bar{\rho} v_i'' v_j'' = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial x_k} + \bar{\rho} \tilde{k} \right) \delta_{ij} \quad (2.197)$$

gdje je μ_t koeficijent turbulentne viskoznosti, a \tilde{k} turbulentna kinetička energija:

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} v_k'' v_k'' \quad (2.198)$$

Uvođenjem koeficijenta efektivne dinamičke viskoznosti μ_{eff} kao zbroja molekularne viskoznosti μ i turbulentne viskoznosti μ_t :

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad (2.199)$$

dobiva se Reynoldsova jednadžba za stacionarno strujanje s modeliranim Reynoldsovim naprezanjima:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{v}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} - \mu_v \right) \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \\ - \bar{\rho} g_i - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{p} + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \right) \end{aligned} \quad (2.200)$$

Kako je za model procesa u ložištu potrebno poznavati samo razliku tlakova, a ne i apsolutne vrijednosti termodinamičkog tlaka, umjesto njega računa se efektivni tlak:

$$\bar{p}_e = \bar{p} + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \quad (2.201)$$

pa Reynoldsova jednadžba poprima sljedeći oblik:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{v}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} - \mu_v \right) \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \bar{\rho} g_i - \frac{\partial \bar{p}_e}{\partial x_i} \quad (2.202)$$

Analogijom s Boussinesqovom hipotezom za Reynoldsova naprezanja, član $-\bar{\rho} v_i'' Y_\alpha''$ iz usrednjene jednadžbe kemijske vrste (2.195), tj. turbulentna difuzija mase, modelira se na sljedeći način [59, 5]:

$$-\bar{\rho} v_j'' Y_\alpha'' = \frac{\mu_t}{\sigma_\alpha} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \quad (2.203)$$

gdje je σ_α turbulencijski Prandtl-Schmidtov broj za kemijsku vrstu α . Taj broj međutim nije fizikalno svojstvo fluida kao što je molekularni Prandtl-Schmidtov broj, nego turbulencije i određuje se eksperimentalno za pojedinu geometriju. Uz pretpostavku visokog turbulentnog Reynoldsovog broja:

$$Re_t = \frac{\mu_t}{\mu} > 100 \quad (2.204)$$

molekularna difuzija postaje mala u odnosu na turbulentnu te se uz zanemarivu grešku usrednjena transportna jednadžba kemijske vrste (2.195) može pisati kao:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{Y}_\alpha) = \bar{\omega}_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\alpha} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \right) \quad (2.205)$$

Na isti se način, analogno Boussinesqovoj hipotezi za Reynoldsova naprezanja, član $-\bar{\rho} v_j'' h''$ usrednjene jednadžbe entalpije (2.196) koji predstavlja turbulentnu difuziju entalpije, modelira se na sljedeći način [59, 5]:

$$-\bar{\rho} v_j'' h'' = \frac{\mu_t}{\sigma_h} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \quad (2.206)$$

gdje je σ_h turbulencijski Prandtl-Schmidtov broj za entalpiju h . Taj broj nije fizikalno svojstvo fluida kao npr. Prandtlov broj, nego turbulencije i određuje se eksperimentalno za pojedinu geometriju. Mjerenja pokazuju da je reda veličine 1 [59] te se prilikom modeliranja turbulencije uzima da je jednak Prandtlovom broju. Kako je Prandtl definiran kao:

$$Pr = \frac{\mu}{\lambda} \quad (2.207)$$

usrednjena jednadžba entalpije (2.196) se može pisati kao:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{h}) = \overline{(q_C''')} + \overline{(q_R''')} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) \quad (2.208)$$

2.6.3. Prandtlova teorija duljine puta miješanja

Da bi se model turbulencije zasnovan na Boussinesqovoj hipotezi mogao zatvoriti potrebno je propisati iznos koeficijenta turbulentne viskoznosti μ_t . Prandtl [61] je krenuo od kinetičke teorije plinova koja glasi:

$$\mu = \frac{1}{3} \rho l v \quad (2.209)$$

gdje je l srednji slobodni put molekule, a v srednja brzina molekule. Prandtl je prema analogiji definirao turbulentnu viskoznost kao:

$$\mu_t = \rho l_m v_t \quad (2.210)$$

gdje je l_m duljina puta miješanja, a v_t je karakteristična turbulentna brzina:

$$v_t = l_m \left| \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right| \quad (2.211)$$

Generalizacijom prethodne hipoteze za trodimenzionalni slučaj dobije se:

$$\mu_t = \rho l_m^2 \left| \max(D_{ij}) \right| \quad (2.212)$$

gdje je D_{ij} tenzor brzine deformacije fluida prema izrazu (2.104). Duljina puta miješanja se mora međutim propisivati i to je jedan od najznačajnijih nedostataka ovog modela. Drugi glavni nedostatak je isčezavanje turbulentne viskoznosti prema ovom modelu kada je brzina deformacije nula, dakle u centru struje gdje to svakako ne može biti.

Prednosti su ovog modela, za onoga koga strujanje ne zanima detaljno, velike. Ne računa se nikakva dodatna jednadžba što značajno štedi procesorsko vrijeme i memoriju, a ako je jedan smjer strujanja prevladavajući nad drugima, što je djelomično slučaj u ložištu, ova metoda daje dobre rezultate.

Duljina puta miješanja kao geometrijska značajka

Duljina puta miješanja propisuje se kao geometrijska značajka u ovisnosti o tipu strujanja. Dva su glavna tipa koje treba u ovom slučaju razlikovati: granični sloj i slobodna struja. Kako je u ložištu brzina u uzdužnom smjeru dominantna, ložište se može aproksimirati s cijevi pravokutnog presjeka. Za cijevi je Nikuradse [104] postavio sljedeću empirijsku relaciju:

$$\frac{l_m}{R_C} = 0.14 - 0.08 \left(1 - \frac{y}{R_C} \right)^2 - 0.06 \left(1 - \frac{y}{R_C} \right)^4 \quad (2.213)$$

gdje je y udaljenost od zida, a R_C udaljenost osi presjeka od zida.

2.6.4. Usrednjene transportne jednadžbe

“Zatvaranjem” modela turbulencije bilo pomoću Prandtlove teorije duljine puta miješanja ili preko k - ε modela turbulencije dobije se sistem transportnih jednadžbi koji opisuje model procesa u ložištu i sastoji se od jednadžbe kontinuiteta, jednadžbe količine gibanja, jednadžbe kemijske vrste i entalpijske jednadžbe:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{v}_j) = 0 \quad (2.214)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{v}_j\tilde{v}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} - \mu_v \right) \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \bar{\rho}g_i - \frac{\partial \bar{p}_e}{\partial x_i} \quad (2.215)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{v}_j\tilde{Y}_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\alpha} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_\alpha \quad (2.216)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{v}_j\tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \overline{(q_C''')} + \overline{(q_R''')} \quad (2.217)$$

2.7. TERMODINAMIČKE KONSTITUTIVNE RELACIJE

Prema pretpostavci o slaboj stlačivosti strujanja u ložištu, te zbog dominantnog utjecaja temperaturnih razlika na termodinamičke relacije u ložištu, može se zanemariti zavisnost specifične entalpije, specifične topline, koeficijenta dinamičke viskoznosti i gustoće o tlaku. Međutim, zbog velikih temperaturnih gradijenata u ložištu nikako se ne može opravdati pretpostavka o konstantnosti gore navedenih veličina, tj. mora se uzeti u obzir njihova ovisnost o temperaturi i sastavu smjese.

2.7.1. Specifična entalpija smjese

Specifična entalpija smjese se računa kao suma specifičnih entalpija kemijskih vrsta ponderirana masenim udjelima tih kemijskih vrsta:

$$h = \sum_{k=1}^{n_\alpha} Y_k h_k \quad (2.218)$$

gdje je specifična entalpija kemijske vrste dobivena iz specifične molarne entalpije formacije kemijske vrste k :

$$h_k = \frac{\Delta H_{f,k}^0}{W_k} \quad (2.219)$$

koja se računa iz interpolacionih polinoma prema (2.36). Pod specifičnom molarnom entalpijom formacije se podrazumijeva standardna specifična molarna entalpija formacije pri standardnoj temperaturi T_0 uvećana za integral umnoška specifične topline i temperature od te temperature do temperature T . Prethodna se veličina može naći tabulirana u termodinamičkim tablicama [78], a potonja je dana preko interpolacionih polinoma.

$$\Delta H_{f,k}^0(T) = \Delta H_{f,k}^0(T_0) + \int_{T_0}^T C_{p,k} dT \quad (2.220)$$

2.7.2. Specifična toplina smjese

Specifična toplina smjese se računa iz specifičnih toplina kemijskih vrsta:

$$c_p = \sum_{k=1}^{n_a} Y_k c_{p,k} \quad (2.221)$$

gdje je specifična toplina kemijske vrste dobivena iz specifične molarne topline kemijske vrste:

$$c_{p,k} = \frac{C_{p,k}}{W_k} \quad (2.222)$$

koja se računa iz specifične molarne entalpije formacije kemijske vrste na sljedeći način:

$$C_{p,k} = \frac{d(\Delta H_{f,k}^0)}{dT} \quad (2.223)$$

Deriviranjem izraza za specifičnu molarnu entalpiju formacije kemijske vrste (2.36) dobije se interpolacioni polinom za molarnu specifičnu toplinu kemijske vrste:

$$C_{p,k} = (a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4)R \quad (2.224)$$

2.7.3. Koeficijent dinamičke viskoznosti

Koeficijent dinamičke viskoznosti μ računa se kao funkcija lokalne temperature aproksimacijom po dijelovima (engl. *piecewise*):

$$\mu = \begin{cases} t_g \leq 100^0 \text{ C} & \rightarrow (0.09149 \cdot t_g + 13.29456) \cdot 10^{-6}; \\ t_g \in (100^0 \text{ C}, 1000^0 \text{ C}] & \rightarrow (0.17273 \cdot t_g + 5.171) \cdot 10^{-6}; \\ t_g > 1000^0 \text{ C} & \rightarrow (0.24817 \cdot t_g - 70.27) \cdot 10^{-6}; \end{cases} \quad (2.225)$$

gdje je t_g lokalna temperatura plina:

$$t_g = T - 273.15 \quad (2.226)$$

2.7.4. Gustoća

Prilikom modeliranja izgaranja plinovitog goriva za smjesu se može pretpostaviti ponašanje po zakonu idealnog plina, tj. gustoća smjese je funkcija lokalne temperature plina i lokalnog termodinamičkog tlaka p :

$$\rho = \rho_0 \frac{p}{p_0} \frac{T_0}{T} \quad (2.227)$$

Zbog vrlo male ovisnosti gustoće o tlaku, koji varira za svega stotinjak Pascala unutar ložišta može se zanemariti razlika između efektivnog i termodinamičkog tlaka:

$$p \approx p_e \quad (2.228)$$

Gustoća ρ_0 je gustoća smjese kod normalnog tlaka p_0 (101325 Pa) i temperature T_0 (273.15 K) te iznosi:

$$\rho_0 = 1.293 \text{ kg/m}^3$$

Gustoća se također može i računati preko jednadžbe idealnog plina:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{k=1}^{n_g} \frac{Y_k}{W_k}} \quad (2.229)$$

2.7.5. Ostale termodinamičke konstitutivne relacije

Već je u glavi 2.3.2 rečeno da se sa zadovoljavajućom točnošću može pretpostaviti, za sastav smjese kakav se nalazi u ložištu, da su turbulentni Prandtlov broj i turbulentni Prandtl-Schmidtov broj neovisni o temperaturi. Za potrebe ovoga modela uzete su sljedeće vrijednosti:

$$Pr = 0.77 \quad (2.230)$$

$$\sigma_\alpha = 0.7 \quad (2.231)$$

što se slaže i s drugim autorima [5].

2.8. REKAPITULACIJA MATEMATIČKOG MODELA PROCESA U LOŽIŠTU

U ovom je poglavlju definiran matematički model procesa u ložištu generatora pare prilikom izgaranja plinovitog goriva. Model opisuje turbulentno, slabo stlačivo, višekomponentno strujanje kemijski reaktivnog fluida. Ovdje će biti iznesena rekapitulacija svih izraza koje taj model uključuje, tj. diferencijalnih jednadžbi, volumenskih i termodinamičkih konstitutivnih relacija. Usrednjene veličine se neće zbog jednostavnosti označavati s – ili s \sim , ali se njihova statistička priroda podrazumijeva.

Diferencijalne jednadžbe

Jednadžba kontinuiteta:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j) = 0 \quad (2.232)$$

Jednadžba količine gibanja:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (2.233)$$

Jednadžba kemijske vrste:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j Y_\alpha) = \omega_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\alpha} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) \quad (2.234)$$

Entalpijska jednadžba:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j h) = q_C''' + q_R''' + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (2.235)$$

Konstitutivne relacije

Brzina produkcije kemijske vrste:

$$\omega_\alpha = W_\alpha \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) \quad (2.236)$$

Volumenski toplinski tok izgaranjem:

$$q_C''' = - \sum_{k=1}^{n_\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \left[C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] \quad (2.237)$$

Volumenski toplinski tok zračenjem:

$$q_R''' = \alpha_g \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left[\varepsilon \sigma T^4 + (1 - \varepsilon) dQ_s^+ \right] \frac{\tau(r)}{\pi r^3} r_j \right] + \sigma T^4 \frac{\alpha \tau(r)}{\pi r^2} \right\} dV - 4 \alpha_g \sigma T_g^4 \quad (2.238)$$

uz izraz za ukupni dozračeni radijativni toplinski tok:

$$dQ_s^+ = \varepsilon_s dA \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left[\varepsilon \sigma T^4 + (1 - \varepsilon) dQ_s^+ \right] \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi r^3} r_j \right] + \sigma T^4 \frac{\cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi r^2} \alpha \right\} dV \quad (2.239)$$

Odnos masenog udjela, molarnog udjela i koncentracije kemijske vrste:

$$C_\alpha = \rho \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} = X_\alpha \frac{p}{RT} \quad (2.240)$$

Brzina reakcije j :

$$k_{f,j} = k_{0,j} T^{\alpha_j} e^{-\frac{E_{a,j}}{RT}} \quad (2.241)$$

Konstanta ravnoteže reakcije j :

$$K_{C,j} = (RT)^{\sum_{k=1}^{n_\alpha} (v''_{k,j} - v'_{k,j})} e^{-\left[a'_{1,k}(1 - \ln T) - \frac{a'_{2,k}}{2} T - \frac{a'_{3,k}}{6} T^2 - \frac{a'_{4,k}}{12} T^3 - \frac{a'_{5,k}}{20} T^4 + \frac{a'_{6,k}}{T} - a'_{7,k} \right]} \quad (2.242)$$

Standardna molarna specifična toplina formacije kemijske vrste:

$$\Delta H_{f,\alpha}^0 = \left(a_{1,\alpha} + \frac{a_{2,\alpha}}{2} T + \frac{a_{3,\alpha}}{3} T^2 + \frac{a_{4,\alpha}}{4} T^3 + \frac{a_{5,\alpha}}{5} T^4 + \frac{a_{6,\alpha}}{T} \right) RT \quad (2.243)$$

Molarna specifična toplina kemijske vrste:

$$C_{p,\alpha} = \left(a_{1,\alpha} + a_{2,\alpha} T + a_{3,\alpha} T^2 + a_{4,\alpha} T^3 + a_{5,\alpha} T^4 \right) R \quad (2.244)$$

Specifična toplina smjese

$$c_p = \sum_{k=1}^{n_\alpha} \frac{Y_k}{W_k} C_{p,k} \quad (2.245)$$

Odnos specifične entalpije i temperature:

$$h = c_p t \quad (2.246)$$

Odnos apsolutne i relativne temperature:

$$t = T - 273.15 \quad (2.247)$$

Jednadžba idealnog plina (za smjesu):

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{k=1}^{n_g} \frac{Y_k}{W_k}} \quad (2.248)$$

Koeficijent efektivne dinamičke viskoznosti:

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad (2.249)$$

Koeficijent molekularne dinamičke viskoznosti:

$$\mu = \begin{cases} t \leq 100^0 \text{ C} & \rightarrow (0.09149 \cdot t + 13.29456) \cdot 10^{-6}; \\ t \in (100^0 \text{ C}, 1000^0 \text{ C}] & \rightarrow (0.17273 \cdot t + 5.171) \cdot 10^{-6}; \\ t > 1000^0 \text{ C} & \rightarrow (0.24817 \cdot t - 70.27) \cdot 10^{-6}; \end{cases} \quad (2.250)$$

Koeficijent turbulentne dinamičke viskoznosti:

$$\mu_t = \rho l_m^2 \left| \frac{1}{2} \max \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right| \quad (2.251)$$

$$\frac{l_m}{R_C} = 0.14 - 0.08 \left(1 - \frac{y}{R_C} \right)^2 - 0.06 \left(1 - \frac{y}{R_C} \right)^4 \quad (2.252)$$

3. NUMERIČKA PROCEDURA

Matematički model procesa izgaranja plinskog goriva u ložištu generatora pare izveden u prethodnom poglavlju, prikazan sistemom parcijalnih diferencijalnih jednačbi i pripadajućim konstitutivnim relacijama nije moguće riješiti analitički. Da bi se dobila distribucija fizikalnih veličina po čitavoj domeni pri rješavanju takvih sistema se uglavnom koriste dva numerička postupka: metoda konačnih elemenata (engl. *finite element method*, FEM) i metoda kontrolnih volumena (engl. *control volume method*, *finite volume method*) [27].

Na taj se način prilazi na prirodan način procesima poput konvekcije i difuzije, procesima u kojima se fizikalne veličine transportiraju direktnim kontaktom pojedinih materijalnih čestica. Međutim dva najznačajnija procesa u ložištu, izgaranje i zračenje, ne mogu se lagano podvesti pod takav pristup jer po svojoj prirodi odudaraju: zračenje je izmjena valne prirode između svih dijelova domene, a izgaranje je proces koji imanentno ovisi o dinamici koja se odvija u samoj materijalnoj čestici.

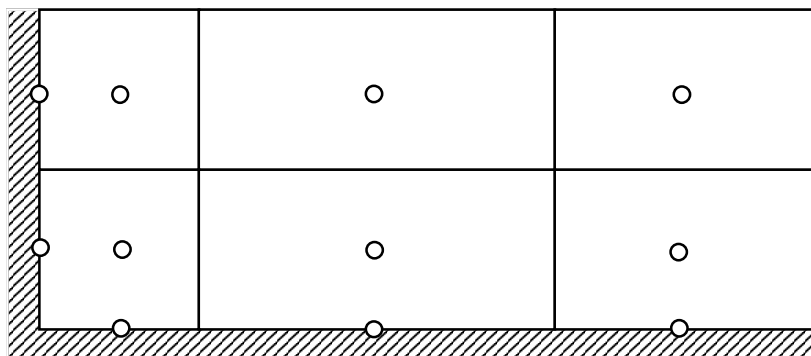
Izgaranje je upravljano lokalnim iznosima masenih udjela sudjelujućih kemijskih vrsta te lokalnom temperaturom. Kemijska kinetika izgaranja je vrlo brzi proces, izrazito osjetljiv na promjenu početnih uvjeta, ali ipak konačne brzine. Kemijska neravnoteža je važan činilac u nastanku spojeva poput dušičnih oksida, te ako se želi dobiti njihova distribucija, mora ju se uzeti u obzir. Osim toga, kako su iznosi brzine produkcije za pojedine kemijske vrste vrlo veliki, nekoliko redova veličine veći od konvektivno-difuzivnih prinosa, uklapanje izgaranja na način kako to opisuje Patankar [27] dovodi do globalne nestabilnosti numeričkog postupka [28]. Zbog ta dva razloga se nametnula potreba artikulirati specifičan pristup računanju kemijske kinetike koji će te probleme prevladati.

U ovom će poglavlju prvo biti iznesen postupak integracije parcijalnih diferencijalnih jednačbi metodom kontrolnih volumena s pomaknutom mrežom, zatim postupak integracije brzina produkcije kemijskih vrsta te sprega izgaranja s konvektivno-difuzivnim dijelom prijenosa topline i mase, i na kraju postupak računanja prijenosa topline zračenjem.

3.1. METODA KONTROLNIH VOLUMENA

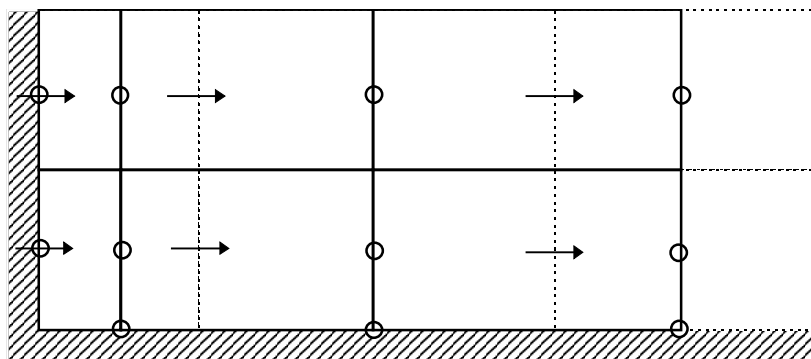
Prema metodi kontrolnih volumena koju su razvili Spalding i Patankar [27] domena se dijeli na konačni broj kontrolnih volumena, od kojih je svaki predstavljen vrijednošću fizikalne veličine u čvoru koji se nalazi unutar kontrolnog volumena. Iznosi fizikalnih veličina uzimaju se konstantnim unutar čitavog kontrolnog volumena, s time da se vrijednosti na površinama koje odjeljuju kontrolne volumene te veličine, definiraju na poseban način i u pravilu su različite nego unutar volumena. Algebarski izraz za proračun vrijednosti fizikalne veličine u čvoru se dobiva integracijom odgovarajuće diferencijalne jednačbe po kontrolnom volumenu. Skup svih algebarskih izraza za sve čvorove u domeni daje sistem algebarskih jednačbi za proračun distribucije fizikalne veličine ϕ po domeni.

U ovome je radu korišten pristup po kojem se čvor nalazi u težištu kontrolnog volumena (centralne mreže). Rubni je čvor u težištu infinitezimalno tankog kontrolnog volumena:



Slika 3.1. Rubni čvorovi za centralni mrežu

Za proračun brzina koristi se mreža pomaknuta za pola koraka u smjeru relevantne brzine. Na taj se način brzine nalaze točno na granicama kontrolnog volumena centralne mreže. Na primjer za brzinu u :



Slika 3.2. Rubni čvorovi za mrežu pomaknutu u smjeru osi x (brzina u)

Označavanje čvorova

U metodi kontrolnih volumena vrijednost veličine φ u čvoru P ovisi, prilikom djelovanja isključivo konvektivnog i difuzivnog transporta, o vrijednostima veličine u susjednim čvorovima. Broj i konfiguracije relevantnih susjednih čvorova zavisi od sheme diferencijacije. Ako se čvorovi u trodimenzionalnom koordinatnom sistemu numeriraju indeksima i, j, k u smjerovima osi x, y, z moguće je relevantne čvorove, za shemu diferencijacije korištenu u ovome radu, označiti na sljedeći način:

$$\varphi_P - \varphi_{i,j,k}$$

$$\varphi_W - \varphi_{i-1,j,k}$$

$$\varphi_E - \varphi_{i+1,j,k}$$

$$\varphi_S - \varphi_{i,j-1,k}$$

$$\varphi_N - \varphi_{i,j+1,k}$$

$$\varphi_D - \varphi_{i,j,k-1}$$

$$\varphi_U - \varphi_{i,j,k+1}$$

gdje su odabrana slova u stvari početna slova engleskih riječi *point, west, east, south, north, down* i *up*. Kombinacija dvaju slova daje dijagonalno susjedni element, npr.:

$$\varphi_{NW} - \varphi_{i-1,j+1,k}$$

Vrijednosti na rubu kontrolnog volumena, tj. na kontrolnoj površini označuju se istim ali malim slovom u odgovarajućem smjeru. Tako će na primjer varijabla φ na granici između kontrolnih volumena u kojima se nalaze čvorovi P i E biti označena sa φ_e .

Tako označeni čvorovi vezani su za centralnu, nepomaknutu mrežu. Kada se varijabla φ želi prikazati u mreži pomaknutoj za pola koraka u smjeru osi x , dakle mreži za proračun brzine u , tada dobiva indeks u : φ_{P_u} . Za veličine prikazane u odnosu na mrežu pomaknutu u y ili z smjeru, oznaka čvora dobiva još indeks v ili w .

U ovoj će se glavi ukratko prikazati integracija opće diferencijalne jednadžbe (2.77) metodom kontrolnih volumena. Iako se ta procedura može naći podrobno objašnjena u literaturi smatralo se da je njeno kratko iznošenje ovdje važno za razumijevanje kasnijih razmatranja.

Pod diskretizacijom se podrazumijeva prelazak integracijom po kontrolnom volumenu s diferencijalnih jednadžbi vezanih na infinitezimalni volumen na jednadžbe bilance vezane na kontrolni (konačni) volumen. Riječ diskretizacija se u literaturi smatra nepravilnom, ali se unatoč toga koristi gotovo univerzalno.

3.1.1. Integracija opće transportne jednadžbe

Prijelaz s bilanciranja volumenske gustoće neke fizikalne veličine φ na infinitezimalnom volumenu dV pomoću diferencijalnih jednadžbi, na bilanciranje na konačnom, kontrolnom volumenu ΔV bit će prikazan na primjeru opće transportne jednadžbe (2.77):

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j \varphi) = S_\varphi + \frac{\partial J_{\varphi,j}}{\partial x_j} \quad (3.1)$$

Za svaku transportnu jednadžbu, kakva je prikazana u matematičkom modelu, može se definirati difuzivni fluks kao gradijent veličine φ plus neki ostatak:

$$J_{\varphi,j} = \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} + \hat{J}_{\varphi,j} \quad (3.2)$$

Ako se taj ostatak fluksa za sada pripoji izvornom članu:

$$\hat{S}_\varphi = S_\varphi + \frac{\partial \hat{J}_{\varphi,j}}{\partial x_j} \quad (3.3)$$

jednadžba (3.1) mijenja se u:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j \varphi) = \hat{S}_\varphi + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) \quad (3.4)$$

Ovdje se zbog kratkoće zapisa može uvesti ukupni fluks (konvektivni i difuzivni) $\hat{J}_{\varphi,j}$ veličine φ kroz kontrolnu površinu:

$$\hat{J}_{\varphi,j} = \rho v_j \varphi - \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \quad (3.5)$$

Tada jednačba (3.4) postaje:

$$\frac{\partial \hat{J}_{\varphi,j}}{\partial x_j} = \hat{S}_{\varphi} \quad (3.6)$$

Integracijom jednačbe preko kontrolnog volumena:

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial \hat{J}_{\varphi,j}}{\partial x_j} dV = \int_{\Delta V} \hat{S}_{\varphi} dV \quad (3.7)$$

te prelaskom na površinski integral pomoću teorema Gaussa-Ostrogradskog dobije se:

$$\int_{\Sigma A_{nb}} n_j \hat{J}_{\varphi,j} dA = \int_{\Delta V} \hat{S}_{\varphi} dV \quad (3.8)$$

gdje je A_{nb} pojedina kontrolna površina na jednoj od strana kontrolnog volumena:

$$\sum A_{nb} = A_w + A_e + A_s + A_n + A_d + A_u \quad (3.9)$$

Pretpostavka na kojoj se temelji usvojena metoda kontrolnih volumena je konstantnost svih fizikalnih veličina na svakoj kontrolnoj površini i po čitavom kontrolnom volumenu, s time da je vrijednost različita na površini od vrijednosti unutar volumena. Uz tu pretpostavku nakon integracije bilanca veličine φ po kontrolnom volumenu postaje algebarska jednačba:

$$\hat{J}_{\varphi,e} A_e - \hat{J}_{\varphi,w} A_w + \hat{J}_{\varphi,n} A_n - \hat{J}_{\varphi,s} A_s + \hat{J}_{\varphi,u} A_u - \hat{J}_{\varphi,d} A_d = \hat{S}_{\varphi} \Delta V \quad (3.10)$$

U algebarskim jednačbama će se umjesto oznaka koordinatnih osi x_1, x_2, x_3 upotrebljavati oznake x, y, z , a umjesto brzina v_1, v_2, v_3 brzine u, v, w . Međutim to je samo posljedica tradicionalnog zapisa. Ukupni fluks veličine φ prema (3.5) iznosi na primjeru površine e :

$$\hat{J}_{\varphi,e} = \rho_e u_e \varphi_e - \Gamma_{\varphi,e} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e \quad (3.11)$$

Zbog kratkoće pisanja uvode se jačina konvekcije F i difuzivna provodnost D :

$$F_e = \rho_e u_e \quad D_e = \frac{\Gamma_{\varphi,e}}{\delta x_e} \quad (3.12)$$

gdje je δx (isto tako i $\delta y, \delta z$ za druge dvije osi) udaljenost između centralnog i susjednog čvora u smjeru indeksa. Ako kažemo da je Δx_P , (kao i $\Delta y_P, \Delta z_P$) dimenzija centralnog kontrolnog volumena, a Δx_E dimenzija susjednog, istočnog, volumena (kao što su i $\Delta x_W, \Delta y_N, \Delta y_S, \Delta z_U, \Delta z_D$ dimenzije susjednih volumena), možemo napisati:

$$\delta x_e = \frac{\Delta x_P + \Delta x_E}{2} \quad (3.13)$$

Fizikalne veličine na kontrolnim površinama kao i derivaciju u jed. (3.11) treba na neki način propisati. Korištena je uzvodna shema (engl. *upwind, upstream* [27, 105-108]) koja propisuje da je veličina φ iz konvektivnog člana na kontrolnoj površini jednaka onoj u uzvodnom čvoru, npr. za kontrolne površine e i w :

$$\varphi_e = \begin{cases} \varphi_P & \rightarrow F_e > 0 \\ \varphi_E & \rightarrow F_e < 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

$$\varphi_w = \begin{cases} \varphi_P & \rightarrow F_w < 0 \\ \varphi_W & \rightarrow F_w > 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

Gustoća ρ i koeficijent difuzije Γ_φ na kontrolnim površinama dobivaju se linearnom interpolacijom:

$$\rho_e = \rho_P \frac{\Delta x_E}{2\delta x_e} + \rho_E \frac{\Delta x_P}{2\delta x_e} \quad (3.16)$$

$$\Gamma_{\varphi,e} = \Gamma_{\varphi,P} \frac{\Delta x_E}{2\delta x_e} + \Gamma_{\varphi,E} \frac{\Delta x_P}{2\delta x_e} \quad (3.17)$$

Brzina u na kontrolnim površinama e i w , dakle u smjeru pomaknutosti, jednaka je računatoj brzini u tim točkama:

$$u_e = u_{P_u} \quad (3.18)$$

$$u_w = u_{W_u} \quad (3.19)$$

Konvektivni dio ukupnog fluksa se uz pomoć funkcije maksimuma može zapisati na sljedeći način:

$$F_e \varphi_e = \|F_e, 0\| \varphi_P - \|-F_e, 0\| \varphi_E \quad (3.20)$$

$$F_w \varphi_w = \|F_w, 0\| \varphi_W - \|-F_w, 0\| \varphi_P \quad (3.21)$$

Derivacija veličine φ u difuzivnom članu se pretpostavi da odgovara linearnoj razdiobi veličine između dvaju susjednih čvorova:

$$D_e \left(\delta x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e = D_e \left(\delta x_e \frac{\varphi_E - \varphi_P}{\delta x_e} \right) = D_e \varphi_E - D_e \varphi_P \quad (3.22)$$

Time se dobiju sljedeći ukupni fluksevi na kontrolnim površinama e i w :

$$\hat{J}_{\varphi,e} = (\|F_e, 0\| + D_e) \varphi_P - (\|-F_e, 0\| + D_e) \varphi_E \quad (3.23)$$

$$\hat{J}_{\varphi,w} = (\|F_w, 0\| + D_w) \varphi_W - (\|-F_w, 0\| + D_w) \varphi_P \quad (3.24)$$

Kada se ti ukupni fluksevi uvrste u jednadžbu bilance veličine φ po kontrolnom volumenu (3.10) dobije se:

$$\mathbf{a}_{\varphi,P} \varphi_P = \mathbf{a}_{\varphi,E} \varphi_E + \mathbf{a}_{\varphi,W} \varphi_W + \mathbf{a}_{\varphi,N} \varphi_N + \mathbf{a}_{\varphi,S} \varphi_S + \mathbf{a}_{\varphi,U} \varphi_U + \mathbf{a}_{\varphi,D} \varphi_D + \mathbf{b}_\varphi \quad (3.25)$$

gdje su koeficijenti definirani kao:

$$\mathbf{a}_{\varphi,E} = (\|-F_e, 0\| + D_e) A_e \quad (3.26)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,W} = (\|F_w, 0\| + D_w) A_w \quad (3.27)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,N} = (\|-F_n, 0\| + D_n) A_n \quad (3.28)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,S} = (\|F_s,0\| + D_s)A_s \quad (3.29)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,U} = (\|-F_u,0\| + D_u)A_u \quad (3.30)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,D} = (\|F_d,0\| + D_d)A_d \quad (3.31)$$

Izvorni član se linearizira, tj. rastavlja se na dva dijela, jedan koji ovisi o veličini φ_P , i drugi koji ne ovisi. Za stabilnost je važno da oba koeficijenta, $S_{\varphi,P}$ i b_φ budu pozitivni:

$$\hat{S}_\varphi \Delta V = -S_{\varphi,P} \Delta V \varphi_P + S_{\varphi,C} \Delta V = -S_{\varphi,P} \Delta V \varphi_P + b_\varphi \quad (3.32)$$

Koeficijent ispred φ_P postaje:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{\varphi,P} = & (\|F_e,0\| + D_e)A_e + (\|-F_w,0\| + D_w)A_w + \\ & (\|F_n,0\| + D_n)A_n + (\|-F_s,0\| + D_s)A_s + \\ & (\|F_u,0\| + D_u)A_u + (\|-F_d,0\| + D_d)A_d + S_{\varphi,P} \Delta V \end{aligned} \quad (3.33)$$

odnosno:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{\varphi,P} = & \mathbf{a}_{\varphi,E} + \mathbf{a}_{\varphi,W} + \mathbf{a}_{\varphi,N} + \mathbf{a}_{\varphi,S} + \mathbf{a}_{\varphi,U} + \mathbf{a}_{\varphi,D} + \\ & F_e A_e - F_w A_w + F_n A_n - F_s A_s + F_u A_u - F_d A_d + S_{\varphi,P} \Delta V \end{aligned} \quad (3.34)$$

Za jednadžbu kontinuiteta, prema tablici 2.8 vrijedi da je $\varphi = 1$, da nema difuzije $D = 0$ i izvora $\hat{S}_\varphi = 0$, te uvrštavanjem u jednadžbu (3.25) tih pretpostavki i iznosa koeficijenta $\mathbf{a}_{\varphi,P}$ iz jednadžbe (3.34) dobije se:

$$F_e A_e - F_w A_w + F_n A_n - F_s A_s + F_u A_u - F_d A_d = 0 \quad (3.35)$$

Kako jednadžba kontinuiteta uvijek mora biti zadovoljena centralni koeficijent $\mathbf{a}_{\varphi,P}$ postaje zbroj svih susjednih i dijela izvornog člana koji je linearno zavisano od varijable φ_P :

$$\mathbf{a}_{\varphi,P} = \mathbf{a}_{\varphi,E} + \mathbf{a}_{\varphi,W} + \mathbf{a}_{\varphi,N} + \mathbf{a}_{\varphi,S} + \mathbf{a}_{\varphi,U} + \mathbf{a}_{\varphi,D} + S_{\varphi,P} \Delta V \quad (3.36)$$

Jednadžba (3.25) s izrazima za koeficijente (3.26-3.31, 3.32, 3.36) predstavlja konačnu algebarsku jednadžbu bilance svojstva φ na kontrolnom volumenu ΔV .

3.1.2. Stabilnost

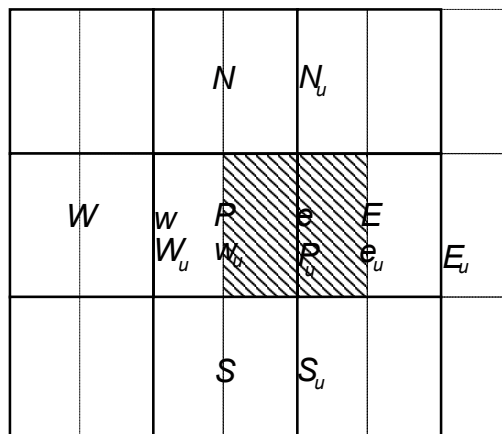
Kako su svi susjedni koeficijenti (3.26-3.31) *per definitionem* pozitivni, pod uvjetom da je $S_{\varphi,P}$ pozitivan, zadovoljen je Scarborough kriterij stabilnosti [27]:

$$\left. \begin{aligned} \sum |a_{nb}| & \leq 1 && \text{za sve kontrolne volumene u domeni} \\ |a_p| & < 1 && \text{barem za jedan volumen u domeni} \end{aligned} \right\} \quad (3.37)$$

Zadovoljenje ovog kriterija je dovoljan (ali ne i nužan) uvjet [27] za konvergirane linijske Gauss-Seidelove metode rješavanja sistema algebarskih jednadžbi.

3.2. INTEGRACIJA JEDNADŽBI STRUJANJA

Jednadžba količine gibanja (2.233) predstavlja bilancu količine gibanja po infinitezimalnom volumenu dV . Jednadžba kontinuiteta (2.232) predstavlja bilancu mase po infinitezimalnom volumenu. Te jednadžbe zajedno opisuju strujanje fluida. Integracijom jednadžbe količine gibanja prema postupku prikazanom u prethodnoj glavi dobije se sistem algebarskih jednadžbi koji bilancira količinu gibanja za svaki kontrolni volumen ΔV .



Slika 3.3. Mreža pomaknuta u smjeru brzine u , tj. osi x

3.2.1. Pomaknuta mreža

Propisivanjem brzina na kontrolnoj površini kod računanja jačine konvekcije F (3.12) kao srednje vrijednosti dvaju susjednih čvorova dovest će do valovitih rješenja prilikom računanja polja tlaka [27]. Zato se za svaku brzinu primjenjuje mreža pomaknuta za pola koraka u smjeru dotične brzine. Odnos centralne mreže i mreže za brzinu u prikazan je na slici 3.3. Usporedne oznake pojedinih relevantnih točaka kontrolnog volumena dane su u tablici 3.1 za sve četiri mreže.

3.2.2. Jednadžba količine gibanja kao transportna jednadžba

Jednadžba količine gibanja za stacionarno strujanje (2.233) može se prilagoditi da odgovara općoj transportnoj jednadžbi (3.4), ako se tenzor naprezanja rastavi na dva dijela jedan od kojih odgovara difuzivnom članu u općoj transportnoj jednadžbi, a drugi postaje dio izvora:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) - \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.38)$$

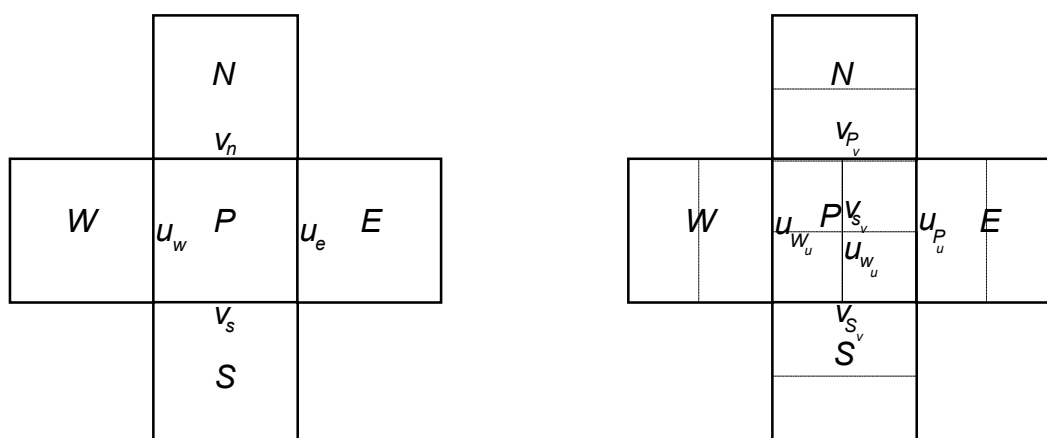
gdje je brzina v_i fizikalna veličina φ koju se transportira, koeficijent difuzije Γ_φ odgovara efektivnom koeficijentu dinamičke viskoznosti μ_{eff} , a izvor je:

$$\hat{S}_{v_i} = -\rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.39)$$

Integracijom jednadžbe (3.38) dobije se sistem algebarskih jednadžbi za svaku od tri skalarne komponente vektora brzine.

Tablica 3.1. Usporedbene vrijednosti indeksa za pojedine mreže

centralna mreža	mreža brzine u	mreža brzine v	mreža brzine w
P	w_u	s_v	d_w
E	e_u		
W			
N		n_v	
S			
U			u_w
D			
e	P_u		
w	W_u		
n		P_v	
s		S_v	
u			P_w
d			D_w



Slika 3.4. Brzine na granici centralnog elementa u nomenklaturi centralne i pomaknutih mreža za dvodimenzionalni slučaj

Algebarski sistem jednadžbi za komponentu u vektora brzine v_i u koordinatnom sistemu vezanom na mrežu pomaknutu u smjeru osi x za pola koraka, dan je prema općem izrazu (3.25) sljedećim zapisom:

$$a_{u,P}u_{P_u} = a_{u,E}u_{E_u} + a_{u,W}u_{W_u} + a_{u,N}u_{N_u} + a_{u,S}u_{S_u} + a_{u,U}u_{U_u} + a_{u,D}u_{D_u} + b_u \quad (3.40)$$

ili kraće:

$$a_{u,P}u_{P_u} = \sum_{np} a_{u,np}u_{np_u} + b_u \quad (3.41)$$

Koeficijent $a_{u,E}$ prema (3.26) iznosi:

$$\mathbf{a}_{u,E} = \left(\left\| -F_{e_u}, 0 \right\| + D_{e_u} \right) \mathbf{A}_{e_u} \quad (3.42)$$

gdje su jačina konvekcije i difuzivna provodnost prema (3.12):

$$F_{e_u} = \rho_{e_u} u_{e_u} \quad (3.43)$$

$$D_{e_u} = \frac{\mu_{eff,e_u}}{\delta x_{e_u}} \quad (3.44)$$

Potrebno je propisati sve ove veličine ili ih dovesti u vezu s veličinama za centralnu mrežu. Prema tablici 3.1 vidi se da je:

$$\mu_{eff,e_u} = \mu_{eff,E} \quad (3.45)$$

$$\delta x_{e_u} = \Delta x_E \quad (3.46)$$

Kako je mreža zadana u Kartezijevom koordinatnom sustavu može se pisati:

$$\mathbf{A}_{e_u} = \mathbf{A}_E = \mathbf{A}_P = \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.47)$$

Jačina konvekcije na granici se linearno interpolira između dva susjedna čvora. Kako se čvor e_u nalazi točno na polovici između čvorova P_u i E_u može se pisati:

$$F_{e_u} = \frac{\rho_{P_u} u_{P_u} + \rho_{E_u} u_{E_u}}{2} \quad (3.48)$$

Koeficijent $\mathbf{a}_{u,E}$ time dobiva svoj konačni izgled:

$$\mathbf{a}_{u,E} = \left(\left\| -\frac{\rho_{P_u} u_{P_u} + \rho_{E_u} u_{E_u}}{2}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,E}}{\Delta x_E} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.49)$$

Na isti način dobije se i koeficijent $\mathbf{a}_{u,W}$ (3.27):

$$\mathbf{a}_{u,W} = \left(\left\| \frac{\rho_{P_u} u_{P_u} + \rho_{W_u} u_{W_u}}{2}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P}}{\Delta x_P} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.50)$$

Koeficijent $\mathbf{a}_{u,N}$ (3.28) ne može se međutim dobiti analogijom. U njemu se nalazi brzina v koju treba izraziti preko brzine v u čvoru mreže pomaknute u smjeru y osi:

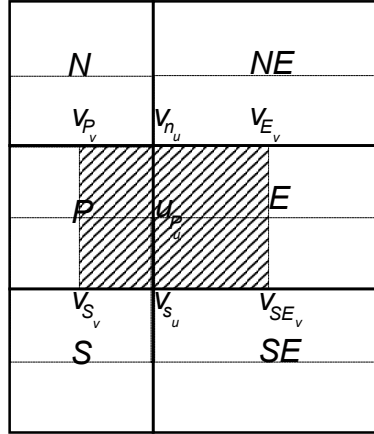
$$\mathbf{a}_{u,N} = \left(\left\| -\rho_{n_u} v_{n_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,n_u}}{\delta y_{n_u}} \right) \mathbf{A}_{n_u} \quad (3.51)$$

Uz pomoć slike 3.5 moguće je jačinu konvekcije izračunati pomoću težinskog faktora (ponderirati) tako da se uzme ξ_E masenog toka predstavljenog s brzinom v_{P_v} te $1 - \xi_E$ toka s brzinom v_{E_v} :

$$\rho_{n_u} v_{n_u} = \xi_E \rho_{P_v} v_{P_v} + (1 - \xi_E) \rho_{E_v} v_{E_v} \quad (3.52)$$

gdje je ξ_E geometrijski težinski faktor:

$$\xi_E = \frac{\Delta x_P}{\Delta x_P + \Delta x_E} \quad (3.53)$$



Slika 3.5. Brzine v na n i s granici elementa mreže pomaknute u smjeru osi x te najbliže vrijednosti brzine v u čvorovima mreže pomaknute u smjeru osi y

Koeficijent dinamičke viskoznosti također treba računati pomoću težinskih faktora, ali su vrijednosti na stranicama na kojima su dane brzine v_{P_v} i v_{E_v} linearno interpolirane vrijednosti dobivene iz vrijednosti koeficijenta u čvorovima:

$$\begin{aligned} \mu_{eff,n_u} &= \xi_E \mu_{eff,P_v} + (1 - \xi_E) \mu_{eff,E_v} = \\ & \xi_E \left[\xi_N \mu_{eff,N} + (1 - \xi_N) \mu_{eff,P} \right] + (1 - \xi_E) \left[\xi_N \mu_{eff,NE} + (1 - \xi_N) \mu_{eff,E} \right] \end{aligned} \quad (3.54)$$

Treba primijetiti razliku između interpoliranja i ponderiranja. Uz:

$$\xi_N = \frac{\Delta y_P}{\Delta y_P + \Delta y_N} \quad (3.55)$$

$$\delta y_{n_u} = \frac{\Delta y_P + \Delta y_N}{2} \quad (3.56)$$

$$A_{n_u} = \frac{\Delta x_P + \Delta x_E}{2} \Delta z_P \quad (3.57)$$

dobije se:

$$a_{u,N} = \left\{ \left\| - \left[\xi_E \rho_{P_v} v_{P_v} + (1 - \xi_E) \rho_{E_v} v_{E_v} \right], 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,n_u}}{\Delta y_P + \Delta y_N} \right\} \frac{\Delta x_P + \Delta x_E}{2} \Delta z_P \quad (3.58)$$

Na sličan način uz pomoć slike 3.5 dobije se i koeficijent $a_{u,S}$ (3.29):

$$a_{u,S} = \left[\left\| \xi_E \rho_{S_v} v_{S_v} + (1 - \xi_E) \rho_{SE_v} v_{SE_v}, 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,s_u}}{\Delta y_P + \Delta y_S} \right] \frac{\Delta x_P + \Delta x_E}{2} \Delta z_P \quad (3.59)$$

Koeficijenti $a_{u,U}$ (3.30) i $a_{u,D}$ (3.31) dobiju se tako da se brzina w na granicama u i d elementa na kojem se radi bilanca količine gibanja u smjeru osi x izrazi preko brzine w u čvorovima mreže pomaknute u smjeru z osi:

$$a_{u,U} = \left\{ \left\| - \left[\xi_E \rho_{P_w} w_{P_w} + (1 - \xi_E) \rho_{U_w} w_{U_w} \right], 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,u_u}}{\Delta z_P + \Delta z_U} \right\} \frac{\Delta x_P + \Delta x_E}{2} \Delta y_P \quad (3.60)$$

$$\mathbf{a}_{u,D} = \left[\left\| \xi_E \rho_{D_w} \mathbf{w}_{D_w} + (1 - \xi_E) \rho_{DE_w} \mathbf{w}_{DE_w}, 0 \right\| + \frac{2\mu_{\text{eff},d_u}}{\Delta \mathbf{z}_P + \Delta \mathbf{z}_D} \right] \frac{\Delta \mathbf{x}_P + \Delta \mathbf{x}_E}{2} \Delta \mathbf{y}_P \quad (3.61)$$

Time su specificirani svi koeficijenti u jednadžbi (3.40) koji izražavaju doprinos susjednih brzina \mathbf{u} kod računanja brzine \mathbf{u}_{P_u} u čvoru P_u mreže pomaknute u smjeru osi x . Slobodni koeficijent \mathbf{b}_u dobiva se prema (3.32) integriranjem izraza (3.39):

$$\int_{\Delta V_{P_u}} \hat{\mathbf{S}}_u dV = \int_{\Delta V_{P_u}} \rho \mathbf{f}_x dV - \int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial \rho}{\partial x} dV + \int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_j}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) dV = \quad (3.62)$$

$$\mathbf{b}_{u,f} + \quad \mathbf{b}_{u,p} + \quad \mathbf{b}_{u,\mu}$$

U gornjem izrazu nije moguće zanemariti divergens brzine, jer gustoća nije konstanta pa divergens ostaje različit od lijeve strane jednadžbe kontinuiteta (2.232). Izvor količine gibanja u smjeru osi x uzrokovan gravitacijom $-\mathbf{g}_x$ (2.176), konstantnom po čitavom volumenu ΔV nakon integracije daje:

$$\mathbf{b}_{u,f} = - \int_{\Delta V_{P_u}} \rho \mathbf{g}_x dV = -\rho_{P_u} \mathbf{g}_x \Delta V_{P_u} = -\rho_{P_u} \mathbf{g}_x \frac{\Delta \mathbf{x}_P + \Delta \mathbf{x}_E}{2} \Delta \mathbf{y}_P \Delta \mathbf{z}_P \quad (3.63)$$

Sila tlaka u smjeru osi x nakon integracije, te uz pomoć tablice 3.1 daje:

$$\mathbf{b}_{u,p} = - \int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial p}{\partial x} dV = -(p_{e_u} A_{e_u} - p_{w_u} A_{w_u}) = (p_P - p_E) \Delta \mathbf{y}_P \Delta \mathbf{z}_P \quad (3.64)$$

Dio tangencijalnih naprezanja u izvornom članu sastoji se u stvari od tri člana:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_{u,\mu} &= \int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_j}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) dV = \\ &\int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu_{\text{eff}}}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} - 2 \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] dV + \\ &\int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial x} \right) dV + \int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial w}{\partial x} \right) dV \end{aligned} \quad (3.65)$$

Nakon integracije dobije se izraz koji u sebi još uvijek sadrži derivacije:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_{u,\mu} &= \left[\frac{\mu_{\text{eff}}}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} - 2 \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right]_{e_u} A_{e_u} - \\ &\left[\frac{\mu_{\text{eff}}}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} - 2 \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right]_{w_u} A_{w_u} + \\ &\left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial x} \right)_{n_u} A_{n_u} - \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial x} \right)_{s_u} A_{s_u} + \\ &\left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial w}{\partial x} \right)_{u_u} A_{u_u} - \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial w}{\partial x} \right)_{d_u} A_{d_u} = \mathbf{b}_{u,\mu_u} + \mathbf{b}_{u,\mu_v} + \mathbf{b}_{u,\mu_w} \end{aligned} \quad (3.66)$$

Tablica 3.2. Sistem algebarskih jednadžbi za proračun brzine u

Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije brzine u

$$a_{u,P}u_{P_u} = a_{u,E}u_{E_u} + a_{u,W}u_{W_u} + a_{u,N}u_{N_u} + a_{u,S}u_{S_u} + a_{u,U}u_{U_u} + a_{u,D}u_{D_u} + b_{u,f} + b_{u,p} + b_{u,\mu_u} + b_{u,\mu_v} + b_{u,\mu_w} \quad (3.67a)$$

gdje su:

$$a_{u,E} = \left(\left\| -\frac{\rho_{P_u}u_{P_u} + \rho_{E_u}u_{E_u}}{2}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,E}}{\Delta X_E} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.67b)$$

$$a_{u,W} = \left(\left\| \frac{\rho_{P_u}u_{P_u} + \rho_{W_u}u_{W_u}}{2}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P}}{\Delta X_P} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.67c)$$

$$a_{u,N} = \left\{ \left\| -\left[\xi_E \rho_{P_v} v_{P_v} + (1 - \xi_E) \rho_{E_v} v_{E_v} \right], 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,n_u}}{\Delta y_P + \Delta y_N} \right\} \frac{\Delta X_P + \Delta X_E}{2} \Delta z_P \quad (3.67d)$$

$$a_{u,S} = \left\{ \left\| \xi_E \rho_{S_v} v_{S_v} + (1 - \xi_E) \rho_{SE_v} v_{SE_v}, 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,s_u}}{\Delta y_P + \Delta y_S} \right\} \frac{\Delta X_P + \Delta X_E}{2} \Delta z_P \quad (3.67e)$$

$$a_{u,U} = \left\{ \left\| -\left[\xi_E \rho_{P_w} w_{P_w} + (1 - \xi_E) \rho_{U_w} w_{U_w} \right], 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,u_u}}{\Delta z_P + \Delta z_U} \right\} \frac{\Delta X_P + \Delta X_E}{2} \Delta y_P \quad (3.67f)$$

$$a_{u,D} = \left\{ \left\| \xi_E \rho_{D_w} w_{D_w} + (1 - \xi_E) \rho_{DE_w} w_{DE_w}, 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,d_u}}{\Delta z_P + \Delta z_D} \right\} \frac{\Delta X_P + \Delta X_E}{2} \Delta y_P \quad (3.67g)$$

$$a_{u,P} = a_{u,E} + a_{u,W} + a_{u,N} + a_{u,S} + a_{u,U} + a_{u,D} \quad (3.67h)$$

$$b_{u,f} = -\rho_{P_u} g_x \frac{\Delta X_P + \Delta X_E}{2} \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.67i)$$

$$b_{u,p} = (p_P - p_E) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.67j)$$

$$b_{u,\mu_u} = \frac{\mu_{eff,E}}{3} \left[(u_{E_u} - u_{P_u}) \frac{\Delta y_P \Delta z_P}{\Delta X_E} - 2(v_{E_v} - v_{SE_v}) \Delta z_P - 2(w_{E_w} - w_{DE_w}) \Delta y_P \right] - \frac{\mu_{eff,P}}{3} \left[(u_{P_u} - u_{W_u}) \frac{\Delta y_P \Delta z_P}{\Delta X_P} - 2(v_{P_v} - v_{S_v}) \Delta z_P - 2(w_{P_w} - w_{D_w}) \Delta y_P \right] \quad (3.67k)$$

$$b_{u,\mu_v} = \mu_{eff,n_u} (v_{E_v} - v_{P_v}) \Delta z_P - \mu_{eff,s_u} (v_{SE_v} - v_{S_v}) \Delta z_P \quad (3.67l)$$

$$b_{u,\mu_w} = \mu_{eff,u_u} (w_{E_w} - w_{P_w}) \Delta y_P - \mu_{eff,d_u} (w_{DE_w} - w_{D_w}) \Delta y_P \quad (3.67m)$$

Prelaskom na diskretnu diferenciju centralnom shemom, kao i uvijek s diferencijalnim članovima difuzivnog tipa, te uz pomoć tablice 3.1 dobije se:

$$b_{u,\mu_u} = \frac{\mu_{eff,E}}{3} \left[(u_{E_u} - u_{P_u}) \frac{\Delta y_P \Delta z_P}{\Delta X_E} - 2(v_{E_v} - v_{SE_v}) \Delta z_P - 2(w_{E_w} - w_{DE_w}) \Delta y_P \right] - \frac{\mu_{eff,P}}{3} \left[(u_{P_u} - u_{W_u}) \frac{\Delta y_P \Delta z_P}{\Delta X_P} - 2(v_{P_v} - v_{S_v}) \Delta z_P - 2(w_{P_w} - w_{D_w}) \Delta y_P \right] \quad (3.68)$$

$$b_{u,\mu_v} = \mu_{eff,n_u} (v_{E_v} - v_{P_v}) \Delta z_P - \mu_{eff,s_u} (v_{SE_v} - v_{S_v}) \Delta z_P \quad (3.69)$$

$$b_{u,\mu_v} = \mu_{eff,u_v} (w_{E_w} - w_{P_w}) \Delta y_P - \mu_{eff,d_u} (w_{D_{E_w}} - w_{D_w}) \Delta y_P \quad (3.70)$$

Time je završen proces integracije diferencijalne jednačbe količine gibanja u smjeru osi x i dobiven je sistem algebarskih jednačbi pomoću kojega se može izračunati distribucija brzine u , uz danu distribuciju tlaka p , brzina v i w , gustoće ρ i dinamičke viskoznosti μ_{eff} . Sistem je definiran skupom izraza u tablici 3.2.

Na analogan način integracijom diferencijalne jednačbe količine gibanja u smjerovima osi y i z dobije se sistem algebarskih jednačbi za proračun distribucija brzina v i w . Sistemi su potpuno definirani skupom izraza danim redom u tablicama 3.3 i 3.4.

Tablica 3.3. Sistem algebarskih jednačbi za proračun brzine v

Sistem algebarskih jednačbi za proračun distribucije brzine v

$$\begin{aligned} a_{v,P} v_{P_v} &= a_{v,E} v_{E_v} + a_{v,W} v_{W_v} + a_{v,N} v_{N_v} + a_{v,S} v_{S_v} + a_{v,U} v_{U_v} + a_{v,D} v_{D_v} + \\ & b_{v,f} + b_{v,p} + b_{v,\mu_u} + b_{v,\mu_v} + b_{v,\mu_w} \end{aligned} \quad (3.71a)$$

gdje su:

$$a_{v,E} = \left\{ \left\| - \left[\xi_N \rho_{P_u} u_{P_u} + (1 - \xi_N) \rho_{N_u} u_{N_u} \right], 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,e_v}}{\Delta x_P + \Delta x_E} \right\} \frac{\Delta y_P + \Delta y_N}{2} \Delta z_P \quad (3.71b)$$

$$a_{v,W} = \left\{ \left\| \xi_N \rho_{W_u} u_{W_u} + (1 - \xi_N) \rho_{N_{W_u}} u_{N_{W_u}}, 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,w_v}}{\Delta x_P + \Delta x_W} \right\} \frac{\Delta y_P + \Delta y_N}{2} \Delta z_P \quad (3.71c)$$

$$a_{v,N} = \left(\left\| - \frac{\rho_{P_v} v_{P_v} + \rho_{N_v} v_{N_v}}{2}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,N}}{\Delta y_N} \right) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.71d)$$

$$a_{v,S} = \left(\left\| \frac{\rho_{P_v} v_{P_v} + \rho_{S_v} v_{S_v}}{2}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P}}{\Delta y_P} \right) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.71e)$$

$$a_{v,U} = \left\{ \left\| - \left[\xi_N \rho_{P_w} w_{P_w} + (1 - \xi_N) \rho_{U_w} w_{U_w} \right], 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,u_v}}{\Delta z_P + \Delta z_U} \right\} \Delta x_P \frac{\Delta y_P + \Delta y_N}{2} \quad (3.71f)$$

$$a_{v,D} = \left\{ \left\| \xi_N \rho_{D_w} w_{D_w} + (1 - \xi_N) \rho_{D_{N_w}} w_{D_{N_w}}, 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,d_v}}{\Delta z_P + \Delta z_D} \right\} \Delta x_P \frac{\Delta y_P + \Delta y_N}{2} \quad (3.71g)$$

$$a_{v,P} = a_{v,E} + a_{v,W} + a_{v,N} + a_{v,S} + a_{v,U} + a_{v,D} \quad (3.71h)$$

$$b_{v,f} = -\rho_{P_v} g_y \Delta x_P \frac{\Delta y_P + \Delta y_N}{2} \Delta z_P \quad (3.71i)$$

$$b_{v,p} = (p_P - p_N) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.71j)$$

$$b_{v,\mu_u} = \mu_{eff,e_v} (u_{N_u} - u_{P_u}) \Delta z_P - \mu_{eff,w_v} (u_{N_{W_u}} - u_{W_u}) \Delta z_P \quad (3.71k)$$

$$\begin{aligned} b_{v,\mu_v} &= \frac{\mu_{eff,N}}{3} \left[(v_{N_v} - v_{P_v}) \frac{\Delta x_P \Delta z_P}{\Delta y_N} - 2(u_{N_u} - u_{N_{W_u}}) \Delta z_P - 2(w_{N_w} - w_{D_{N_w}}) \Delta x_P \right] \\ & - \frac{\mu_{eff,P}}{3} \left[(v_{P_v} - v_{S_v}) \frac{\Delta x_P \Delta z_P}{\Delta y_P} - 2(u_{P_u} - u_{W_u}) \Delta z_P - 2(w_{P_w} - w_{D_w}) \Delta x_P \right] \end{aligned} \quad (3.71l)$$

$$b_{v,\mu_w} = \mu_{eff,u_v} (w_{N_w} - w_{P_w}) \Delta x_P - \mu_{eff,d_v} (w_{D_{N_w}} - w_{D_w}) \Delta x_P \quad (3.71m)$$

Tablica 3.4. Sistem algebarskih jednadžbi za proračun brzine w

Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije brzine w

$$\mathbf{a}_{w,P}W_{P_w} = \mathbf{a}_{w,E}W_{E_w} + \mathbf{a}_{w,W}W_{W_w} + \mathbf{a}_{w,N}W_{N_w} + \mathbf{a}_{w,S}W_{S_w} + \mathbf{a}_{w,U}W_{U_w} + \mathbf{a}_{w,D}W_{D_w} + \mathbf{b}_{w,f} + \mathbf{b}_{w,p} + \mathbf{b}_{w,\mu_u} + \mathbf{b}_{w,\mu_v} + \mathbf{b}_{w,\mu_w} \quad (3.72a)$$

gdje su:

$$\mathbf{a}_{w,E} = \left\{ \left\| -\left[\xi_U \rho_{P_u} u_{P_u} + (1 - \xi_U) \rho_{U_u} u_{U_u} \right], 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,e_w}}{\Delta x_P + \Delta x_E} \right\} \Delta y_P \frac{\Delta z_P + \Delta z_U}{2} \quad (3.72b)$$

$$\mathbf{a}_{w,W} = \left[\left\| \xi_U \rho_{W_u} u_{W_u} + (1 - \xi_U) \rho_{UW_u} u_{UW_u}, 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,w_w}}{\Delta x_P + \Delta x_W} \right] \Delta y_P \frac{\Delta z_P + \Delta z_U}{2} \quad (3.72c)$$

$$\mathbf{a}_{w,N} = \left\{ \left\| -\left[\xi_U \rho_{P_v} v_{P_v} + (1 - \xi_U) \rho_{U_v} v_{U_v} \right], 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,n_w}}{\Delta y_P + \Delta y_N} \right\} \Delta x_P \frac{\Delta z_P + \Delta z_U}{2} \quad (3.72d)$$

$$\mathbf{a}_{w,S} = \left[\left\| \xi_U \rho_{S_v} v_{S_v} + (1 - \xi_U) \rho_{US_v} v_{US_v}, 0 \right\| + \frac{2\mu_{eff,s_w}}{\Delta y_P + \Delta y_S} \right] \Delta x_P \frac{\Delta z_P + \Delta z_U}{2} \quad (3.72e)$$

$$\mathbf{a}_{w,U} = \left(\left\| -\frac{\rho_{P_w} W_{P_w} + \rho_{U_w} W_{U_w}}{2}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,U}}{\Delta z_U} \right) \Delta x_P \Delta y_P \quad (3.72f)$$

$$\mathbf{a}_{w,D} = \left(\left\| \frac{\rho_{P_w} W_{P_w} + \rho_{D_w} W_{D_w}}{2}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P}}{\Delta z_P} \right) \Delta x_P \Delta y_P \quad (3.72g)$$

$$\mathbf{a}_{w,P} = \mathbf{a}_{w,E} + \mathbf{a}_{w,W} + \mathbf{a}_{w,N} + \mathbf{a}_{w,S} + \mathbf{a}_{w,U} + \mathbf{a}_{w,D} \quad (3.72h)$$

$$\mathbf{b}_{w,f} = -\rho_{P_w} \mathbf{g}_z \Delta x_P \Delta y_P \frac{\Delta z_P + \Delta z_U}{2} \quad (3.72i)$$

$$\mathbf{b}_{w,p} = (p_P - p_U) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.72j)$$

$$\mathbf{b}_{w,\mu_u} = \mu_{eff,e_w} (u_{U_u} - u_{P_u}) \Delta y_P - \mu_{eff,w_w} (u_{UW_u} - u_{W_u}) \Delta y_P \quad (3.72k)$$

$$\mathbf{b}_{w,\mu_v} = \mu_{eff,n_w} (v_{U_v} - v_{P_v}) \Delta x_P - \mu_{eff,s_w} (v_{US_v} - v_{S_v}) \Delta x_P \quad (3.72l)$$

$$\mathbf{b}_{w,\mu_w} = \frac{\mu_{eff,U}}{3} \left[(w_{U_w} - w_{P_w}) \frac{\Delta x_P \Delta y_P}{\Delta z_U} - 2(u_{U_u} - u_{UW_u}) \Delta y_P - 2(v_{U_v} - v_{US_v}) \Delta x_P \right] - \frac{\mu_{eff,P}}{3} \left[(w_{P_w} - w_{D_w}) \frac{\Delta x_P \Delta y_P}{\Delta z_P} - 2(u_{P_u} - u_{W_u}) \Delta y_P - 2(v_{P_v} - v_{S_v}) \Delta x_P \right] \quad (3.72m)$$

3.2.3. Jednadžba tlaka

Tri sistema algebarskih jednadžbi (3.67, 3.71, 3.72) omogućavaju proračun distribucija triju komponenti vektora brzine u , v , w , ukoliko je dana distribucija tlaka p , gustoće ρ i dinamičke viskoznosti μ_{eff} . Kako je distribucija tlaka u ložištu nepoznata potrebno ju je proračunati. Jednadžba kontinuiteta je, iako ne sadrži eksplicitno tlak, jedina koja se ne koristi za proračun distribucije neke druge veličine. Diskretizirana jednadžba kontinuiteta (3.35) uz uvrštenje jačina konvekcije (3.12) i sređivanje indeksa obzirom na različite mreže (tabl. 3.1) postaje:

$$\begin{aligned} & (\rho_{P_u} u_{P_u} - \rho_{W_u} u_{W_u}) \Delta y_P \Delta z_P + (\rho_{P_v} v_{P_v} - \rho_{S_v} v_{S_v}) \Delta x_P \Delta z_P + \\ & (\rho_{P_w} w_{P_w} - \rho_{D_w} w_{D_w}) \Delta x_P \Delta y_P = 0 \end{aligned} \quad (3.73)$$

Iz jednadžbe (3.67) može se jednostavnim algebarskim transformacijama dobiti sljedeći izraz:

$$u_{P_u} = \hat{u}_{P_u} + d_{u,P} (p_P - p_E) \quad (3.74)$$

gdje je \hat{u}_{P_u} pseudobrzina koja u sebi sadrži sve članove jednadžbe (3.67) osim dijela izvora u kojem je tlak:

$$\hat{u}_{P_u} = \frac{\sum_{np} a_{u,np} u_{np_u} + b_{u,f} + b_{u,\mu_u} + b_{u,\mu_v} + b_{u,\mu_w}}{a_{u,P}} \quad (3.75)$$

a $d_{u,P}$:

$$d_{u,P} = \frac{\Delta y_P \Delta z_P}{a_{u,P}} \quad (3.76)$$

Identična jednadžba, ali pomaknuta za jedan element prema nižoj vrijednosti osi x , dobije se i za brzinu u_{W_u} u jednadžbi kontinuiteta:

$$u_{W_u} = \hat{u}_{W_u} + d_{u,W} (p_W - p_P) \quad (3.77)$$

Na analogan način iz jednadžbe (3.71) dobije se sljedeći izraz:

$$v_{P_v} = \hat{v}_{P_v} + d_{v,P} (p_P - p_N) \quad (3.78)$$

gdje su:

$$\hat{v}_{P_v} = \frac{\sum_{np} a_{v,np} v_{np_v} + b_{v,f} + b_{v,\mu_u} + b_{v,\mu_v} + b_{v,\mu_w}}{a_{v,P}} \quad (3.79)$$

$$d_{v,P} = \frac{\Delta x_P \Delta z_P}{a_{v,P}} \quad (3.80)$$

Identične jednadžbe, ali pomaknute za jedan element prema nižoj vrijednosti osi y , dobiju se i za brzinu v_{S_v} u jednadžbi kontinuiteta:

$$v_{S_v} = \hat{v}_{S_v} + d_{v,S} (p_S - p_P) \quad (3.81)$$

Iz jednadžbe (3.72) dobije se:

$$w_{P_w} = \hat{w}_{P_w} + d_{w,P} (p_P - p_U) \quad (3.82)$$

gdje su:

$$\hat{w}_{P_w} = \frac{\sum_{np} a_{w,np} w_{np_w} + b_{w,f} + b_{w,\mu_u} + b_{w,\mu_v} + b_{w,\mu_w}}{a_{w,P}} \quad (3.83)$$

$$d_{w,P} = \frac{\Delta x_P \Delta y_P}{a_{w,P}} \quad (3.84)$$

Pomaknute za jedan element prema nižoj vrijednosti osi Z dobije se:

$$w_{D_w} = \hat{w}_{D_w} + d_{w,D}(\rho_D - \rho_P) \quad (3.85)$$

Ako se jednačbe (3.74, 3.77-3.78, 3.81-3.82, 3.85) uvrste u jednačbu (3.73) dobije se jednačba za proračun tlaka prikazana u tablici 3.5.

Četiri sistema algebarskih jednačbi (3.67, 3.71, 3.72, 3.86) omogućavaju proračun distribucija triju komponenti vektora brzine u , v , w , te distribucije tlaka ρ , pod uvjetom da je zadana distribucija gustoće ρ i dinamičke viskoznosti μ_{eff} . Red kojim će se ovi sistemi jednačbi sukcesivno rješavati predmet je diskusije koja je ostavljena za kraj ovoga poglavlja.

Tablica 3.5. Sistem algebarskih jednačbi za proračun tlaka ρ

Sistem algebarskih jednačbi za proračun distribucije tlaka ρ	
$a_{p,P} \rho_P = a_{p,E} \rho_E + a_{p,W} \rho_W + a_{p,N} \rho_N + a_{p,S} \rho_S + a_{p,U} \rho_U + a_{p,D} \rho_D + b_p$	(3.86a)
gdje su:	
$a_{p,E} = \rho_{P_u} d_{u,P} \Delta y_P \Delta z_P$	(3.86b)
$a_{p,W} = \rho_{W_u} d_{u,W} \Delta y_P \Delta z_P$	(3.86c)
$a_{p,N} = \rho_{P_v} d_{v,P} \Delta x_P \Delta z_P$	(3.86d)
$a_{p,S} = \rho_{S_v} d_{v,S} \Delta x_P \Delta z_P$	(3.86e)
$a_{p,U} = \rho_{P_w} d_{w,P} \Delta x_P \Delta y_P$	(3.86f)
$a_{p,D} = \rho_{D_w} d_{w,D} \Delta x_P \Delta y_P$	(3.86g)
$a_{p,P} = a_{p,E} + a_{p,W} + a_{p,N} + a_{p,S} + a_{p,U} + a_{p,D}$	(3.86h)
$d_{u,P} = \frac{\Delta y_P \Delta z_P}{a_{u,P}}$	(3.86i)
$d_{v,P} = \frac{\Delta x_P \Delta z_P}{a_{v,P}}$	(3.86j)
$d_{w,P} = \frac{\Delta x_P \Delta y_P}{a_{w,P}}$	(3.86k)
$b_p = (\rho_{P_u} \hat{u}_{P_u} - \rho_{W_u} \hat{u}_{W_u}) \Delta y_P \Delta z_P + (\rho_{P_v} \hat{v}_{P_v} - \rho_{S_v} \hat{v}_{S_v}) \Delta x_P \Delta z_P +$ $(\rho_{P_w} \hat{w}_{P_w} - \rho_{D_w} \hat{w}_{D_w}) \Delta x_P \Delta y_P$	(3.86l)
$\hat{u}_{P_u} = \frac{\sum_{np} a_{u,np} u_{np_u} + b_{u,f} + b_{u,\mu_u} + b_{u,\mu_v} + b_{u,\mu_w}}{a_{u,P}}$	(3.86m)
$\hat{v}_{P_v} = \frac{\sum_{np} a_{v,np} v_{np_v} + b_{v,f} + b_{v,\mu_u} + b_{v,\mu_v} + b_{v,\mu_w}}{a_{v,P}}$	(3.86n)
$\hat{w}_{P_w} = \frac{\sum_{np} a_{w,np} w_{np_w} + b_{w,f} + b_{w,\mu_u} + b_{w,\mu_v} + b_{w,\mu_w}}{a_{w,P}}$	(3.86o)

3.3. PRORAČUN BRZINE IZGARANJA ZA SISTEM REAKCIJA

Da bi se izračunala distribucija kemijskih vrsta potrebno je riješiti transportnu jednačbu za svaku kemijsku vrstu danu izrazom (2.234). Najveći problem svakako iziskuje određivanje izvornog člana u toj jednačbi, brzinu produkcije kemijske vrste, danog izrazom (2.236). Pokazalo se da prilikom rješavanja sistema s većim brojem kemijskih vrsta i reakcija brzina produkcije predstavlja izvor nestabilnosti cjelokupnog sistema, i da je vrlo teško postići konvergenciju iterativnog postupka. Problem nastaje iz dva razloga, vrlo velike spregnutosti među jednačbama kemijskih vrsta i jednačbe entalpije, te zbog toga što numerički iznos brzine produkcije može biti za nekoliko redova veličine veći nego iznos ulaznog konvektivnog i difuzivnog transporta kemijske vrste.

Problem spregnutosti ukazuje na to da bi se računanju brzina produkcije trebalo prići odjednom za sve kemijske vrste. Pokušalo se prije pristupanja rješavanju transportnih jednačbi kemijskih vrsta prvo izračunati brzine produkcije, ali time se nije načinilo ništa na eliminaciji drugog uzroka nestabilnosti.

Kako je izraz za brzinu produkcije kemijske vrste α izrazito nelinearan, linearizacija kakva se koristi u metodi kontrolnih volumena, može dati realne rezultate samo u vrlo uskoj okolini oko točke na funkciji oko koje se vrši linearizacija. To bi kao posljedicu imalo potrebu za vrlo jakom podrelaksacijom postupka, što se u praksi pokazalo sasvim neupotrebljivim, jer bi se vrijeme rješavanja modela povećalo za nekoliko redova veličine, i time bi problem postao praktično nerješiv. Pokazalo se da je potrebno razviti metodu koja će računati brzinu produkcije na takav način da će se njena nelinearnost svesti na razinu kakva je inherentna ostatku modela, i kakvu metoda kontrolnih volumena i njoj pripadni rješavači mogu podnijeti.

U literaturi je taj problem zamijećen [27] i Vos [28] je predložio da se prvo riješi transportna jednačba za svaku kemijsku vrstu (2.234) uz pretpostavku zanemarenja brzine produkcije, a da se utjecaj izgaranja na distribuciju kemijskih vrsta u sistem unese rješavanjem sistema običnih diferencijalnih jednačbi:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\rho Y_\alpha) = \omega_\alpha \quad (3.87)$$

Međutim taj će pristup dati uvijek nerealne rezultate jer će rješenje jednačbe (2.234) uz takvu pretpostavku uvijek davati konstantne distribucije masenih udjela kemijskih vrsta i jednake ulaznim rubnim uvjetima. Početne će dakle vrijednosti masenih udjela u prethodnom izrazu biti uvijek iste za sve kontrolne volumene, što nikako ne odgovara stvarnosti. Moguće je da takav pristup može zadovoljiti prilikom rješavanja difuzivnog plamena, dakle takvog u kojem gorivo i oksidant nisu predmiješani, te se izgaranje odvija isključivo u zoni difuzivnog miješanja tih dviju struja. Prilikom rješavanja predmiješanog plamena međutim taj bi pristup dao rezultate s jako precijenjenom temperaturom, jer bi jedno te isto gorivo izgaralo uvijek ponovo, te bi se rezultati značajno razlikovali obzirom na broj kontrolnih volumena, što je nedopustivo.

Hipoteza ove disertacije je upravo da je takav pristup računanju brzina produkcije moguće povezati s metodom kontrolnih volumena, te da je moguće dobiti konzistentan, stabilan i

konvergirajući postupak rješavanja modela procesa u ložištu generatora pare koji obuhvaća i detaljan model izgaranja.

Sasvim drugi pristup razvili su Madsen i Sincovec [26] u metodi PDECOL. Oni transformiraju transportne parcijalne diferencijalne jednadžbe reducirajući ih u sistem običnih diferencijalnih jednadžbi te sve zajedno rješavaju pomoću metoda koje se inače primjenjuju za njihovo rješavanje. Metoda PDECOL, međutim, rješava samo jednodimenzionalni problem.

3.3.1. Model izgaranja s konačnim brzinama reakcija kao sistem običnih diferencijalnih jednadžbi

Model izgaranja u kojem u n_r elementarnih suprostavljenih reakcija sudjeluje n_α kemijskih vrsta predstavljen je sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi:

$$\omega_\alpha = \frac{\partial}{\partial \tau}(\rho Y_\alpha) = W_\alpha \frac{\partial C_\alpha}{\partial \tau} = W_\alpha \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) \quad (3.88)$$

tj.:

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) \quad (3.89)$$

Da bismo odabrali metodu rješavanja treba poznavati vremenske konstante sistema. Vremenska konstanta τ_c za jednu kemijsku vrstu i jednu reakciju definirana je [26] kao vrijeme potrebno da koncentracija reaktanta padne na e^{-1} početne koncentracije. Na primjeru reakcije prvog reda:



gdje je promjena koncentracije vrste A dana sa:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = -k C_A \quad (3.91)$$

i čije rješenje je:

$$C_A(\tau) = C_A(0) e^{-k\tau} \quad (3.92)$$

dobije se sljedeća vremenska konstanta:

$$\tau_c = k^{-1} \quad (3.93)$$

Kako brzina reakcije k , koja je eksponencijalna funkcija temperature (2.241), može varirati za veliki broj redova veličine (npr. 10) ovisno o reakciji i temperaturi na kojoj se ta reakcija odvija, tako će varirati i vremenska konstanta. Kako se kinetički sistem sastoji iz niza kemijskih vrsta, svaka od kojih sudjeluje u više reakcija, te čije se koncentracije mijenjaju prema vremenskim konstantama vrlo širokog raspona, može se dogoditi da numeričko rješenje dominantno zavisi upravo o kemijskim vrstama s najkraćim vremenskim konstantama, čak i onda kad su koncentracije tih vrsta zanemarive. Lanci reakcija najviše zavise od brzine intermedijarnih reakcija iako u njima nastaju vrste koje su često sasvim zanemarivih koncentracija, te upravo odgovaraju prethodnom opisu. Kinetički sistem je matematički predstavljen sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi. Sistemi običnih

diferencijalnih jednadžbi koji dominantno zavise od najkraćih vremenskih konstanti nazivaju se krutima [26].

U tablici 3.6 dane su četiri metode koje se koriste prema [26] za rješavanje krutih sistema običnih diferencijalnih jednadžbi, kakav je i kinetički sistem koji opisuje izgaranje. Zbog vremena računanja u interesu je izabrati metodu koja rjeđe računa Jakobijanu i ima fleksibilnost u izboru reda metode, ali metoda mora moći integrirati i najbrže promjene u problemu. Izbor metode je stoga pao na Geara [42], kao kompromisno rješenje koje bi trebalo zadovoljiti što se tiče integracije brzih promjena te zahtjevnosti na vrijeme računanja. Osim toga, ta je metoda u širokoj upotrebi i dobro je opisana. Metoda je ugrađena u komercijalni program Matlab pa je testiranje programa bilo olakšano, a kako je u [28] upotrebljena također za izgaranje smatralo se da će biti zadovoljavajuća. Implementacija metode je dana u dodatku F.

Tablica 3.6. Usporedba različitih metoda za rješavanje krutih sistema običnih diferencijalnih jednadžbi [26]

metoda	red metode q	Jakobijana	tip problema
DIFSUB	1–6	svakih 10 koraka najviše	spori sistemi
Gear	1–5	svakih 10 koraka najviše	brze promjene
EPISODE	1–5	svakih 10 koraka najviše	vrlo brze promjene
K-integrator	3	svaki korak	ekstremno brze promjene

Da bi se riješio sistem običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) potrebno je na neki način odrediti početne vrijednosti koncentracija kemijskih vrsta i temperature, te vrijeme integracije. Osim toga treba još nešto reći i o računanju temperature kao posljedice sistema egzotermnih reakcija.

3.3.2. Proračun temperature

U sistemu reakcija kakvo je izgaranje plina, dakle jednog vrlo egzoternog procesa, temperatura značajno utječe na brzinu procesa. U izrazu za brzinu reakcije (2.241) temperatura se nalazi čak u eksponentu, dok preko utjecaja na konstantu ravnoteže (2.242) određuje da li se reakcija pretežno odvija u jednom ili drugom smjeru. Temperaturu je dakle neophodno računati tijekom integracije sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89).

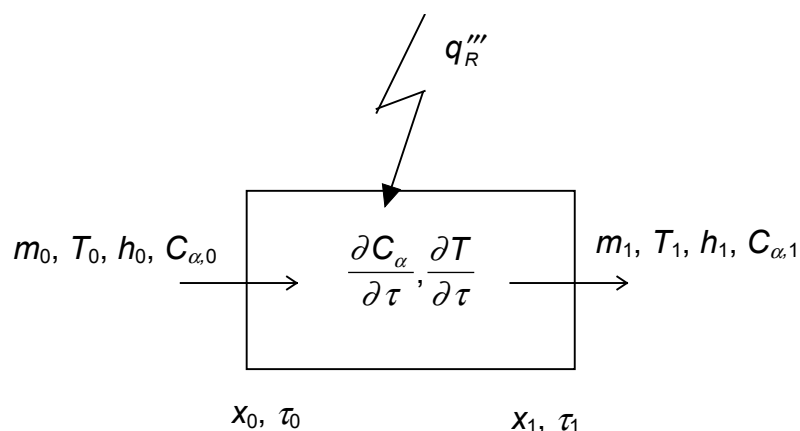
U poglavlju 2.8 gdje je opisan matematički model procesa u ložištu generatora pare rečeno je da je toplina izmijenjena između reaktivnog sistema jednaka (2.237):

$$q_C''' = - \sum_{k=1}^{n_\alpha} \frac{\partial}{\partial \tau} \left[C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] \quad (3.94)$$

Iz toga bi izraza bilo moguće izračunati temperaturu, jer je implicitno sadržana u specifičnim molarnim entalpijama formacije kemijskih vrsta preko interpolacionih polinoma (2.243). Međutim u tom je slučaju potrebno poznavati zavisnost volumenskog toplinskog toka izgaranjem o vremenu:

$$q_C''' = q_C'''(\tau) \quad (3.95)$$

Da bi se propisala ta zavisnost pogledajmo prvo o kojem se tu vremenu radi, odnosno kakva je veza vremena i prostora (s obzirom da se radi o modelu procesa sa stacionarnim rubnim uvjetima) na primjeru jednodimenzionalnog strujanja uz zanemarenje difuzije.



Slika 3.6 Vrijeme integriranja kao prostorna nezavisna varijabla

Iz slike 3.6 se vidi da je dimenzija vremena zavisna od dimenzije prostora (što govori da se radi o dimenziji koja ima samo pseudo-vremenski karakter). Tako je u početnom vremenskom trenutku τ_0 unos topline u reaktivni sistem jednak iznosu entalpije koja ulazi ($m_0 h_0$). Međutim da bi se dobio toplinski tok koji se struji pridružuje dok ona napreduje prema izlazu bilo bi potrebno znati kako rasporediti volumenski toplinski tok zračenjem $q_R'''(\tau)$ u vremenu (odnosno od ulaza do izlaza u kontrolni volumen). To bi bilo iznimno teško, naročito u trodimenzionalnom slučaju, jer se tada pseudo-vremenska dimenzija više ne poklapa s x osi, nego predstavlja imaginarnu os koja prati strujnicu od ulaza do izlaza kontrolnog volumena. Stoga je pretpostavljena sljedeća zavisnost volumenskog toplinskog toka zračenjem o pseudo-vremenu:

$$q_R'''(\tau) = \begin{cases} \tau < \tau_1 & q_R'''(\tau) = 0 \\ \tau = \tau_1 & q_R'''(\tau) = q_R''' \end{cases} \quad (3.96)$$

tj. pretpostavljeno je da se sva toplina dozrači tek na samom izlasku iz kontrolnog volumena, dakle u gornjem limitu integracije. Kako nema drugog mehanizma prijenosa topline unutar kontrolnog volumena to implicira istu zavisnost i za unos topline iz okoline u reaktivni sistem:

$$q_C'''(\tau) = \begin{cases} \tau < \tau_1 & q_C'''(\tau) = 0 \\ \tau = \tau_1 & q_C'''(\tau) = q_C''' \end{cases} \quad (3.97)$$

iz toga slijedi da se promjena temperature po vremenu τ može izračunati iz izraza za volumenski toplinski tok izgaranjem:

$$\int_{\tau_0}^{\tau_1-0} \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial \tau} [C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T] d\tau = 0 \quad (3.98)$$

odnosno nakon integracije po vremenu τ

$$\sum_{k=1}^{n_{\alpha}} [C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T] = \text{const} \quad (3.99)$$

Ako se dakle poznaje početni iznos temperature (iz toga proizlazi specifična molarna entalpija formacije) i koncentracija kemijskih vrsta, moguće je nekom od metoda (npr. Newton-Raphsonovom) izračunati iznos temperature u svakom vremenskom trenutku τ .

Za vrijeme integracije sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) Gearovom metodom (ili nekom drugom) potrebno je riješiti jednadžbu (3.99) u svakom koraku da bi se dobila trenutačna vrijednost temperature.

3.3.3. Vrijeme zadržavanja

Rješavanje sistema reakcija opisanog sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) trebat će napraviti za svaki od kontrolnih volumena. Struja smjese konstantno ulazi u kontrolni volumen (sl. 3.6), u njemu se zadržava neko vrijeme, reagira, te zatim prelazi u susjedne kontrolne volumene. Za jednodimenzionalni problem prilično je jednostavno izračunati koliko se smjesa zadržava unutar kontrolnog volumena (treba napomenuti da se radi o homogenom modelu višekomponentnog strujanja) ako je poznata brzina:

$$\tau_x = \frac{2\Delta X_P}{|u_w + u_e|} = \frac{2\Delta X_P}{|u_{W_u} + u_{P_u}|} \quad (3.100)$$

Prijelaz na trodimenzionalni problem nije sasvim direktan. Moguće je recimo uzeti najmanje od tri vremena u tri smjera:

$$\tau_r = \min \left(\frac{2\Delta x_P}{|u_{W_u} + u_{P_u}|}, \frac{2\Delta y_P}{|v_{S_v} + v_{P_v}|}, \frac{2\Delta z_P}{|w_{D_w} + w_{P_w}|} \right) \quad (3.101)$$

ili se može uzeti da je vrijeme zadržavanja srednja vrijednost tih triju vremena (računata preko recipročnih vrijednosti):

$$\tau_r = \frac{1}{\frac{|u_{W_u} + u_{P_u}|}{2\Delta x_P} + \frac{|v_{S_v} + v_{P_v}|}{2\Delta y_P} + \frac{|w_{D_w} + w_{P_w}|}{2\Delta z_P}} \quad (3.102)$$

međutim razlika je uglavnom mala. Došlo bi u obzir, također, računati srednju vrijednost ponderiranjem masenim tokovima, ali se u tom slučaju javlja problem što su dani tokovi na granicama kontrolnog volumena. Pokazalo se da je sasvim zadovoljavajuće koristiti najjednostavniju varijantu danu izrazom (3.101).

3.3.4. Početne vrijednosti koncentracija i temperature

Integracija sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) zahtjeva poznavanje početnih vrijednosti koncentracija kemijskih vrsta i temperature za svaki od kontrolnih volumena. Prema slici 3.6 lako je moguće propisati iznos koncentracije na ulazu u kontrolni volumen $C_{\alpha,0}$. Ta je koncentracija naprosto jednaka izlaznoj koncentraciji iz prethodnog kontrolnog volumena:

$$C_{\alpha,0} = C_{\alpha,W} \quad (3.103)$$

Međutim, kako propisati iznos početne koncentracije za trodimenzionalni slučaj, kada može postojati nekoliko (do 6 u procesu rješavanja, a u konvergiranom slučaju do 5) ulaznih strana u kontrolni volumen. Slično kao i s vremenom zadržavanja potrebno je na neki način uzeti u

obzir različitu snagu pojedinih struja. Rješenje se javlja pogledom na opću jednadžbu bilance (3.25). Zamjenom općeg transportiranog svojstva φ masenim udjelima dobije se jednadžba bilance kemijske vrste α :

$$a_{Y_{\alpha,P}} Y_{\alpha,P} = a_{Y_{\alpha,E}} Y_{\alpha,E} + a_{Y_{\alpha,W}} Y_{\alpha,W} + a_{Y_{\alpha,N}} Y_{\alpha,N} + a_{Y_{\alpha,S}} Y_{\alpha,S} + a_{Y_{\alpha,U}} Y_{\alpha,U} + a_{Y_{\alpha,D}} Y_{\alpha,D} + b_{Y_{\alpha}} \quad (3.104)$$

gdje se na desnoj strani jednadžbe nalaze ulazni tokovi (konvektivni i difuzivni) u kontrolni volumen (uz član izvora b koji, kao što je pokazano na primjeru temperature u prošloj glavi, ne utiče na način propisivanja ulazne koncentracije), a na lijevoj strani se nalazi izlazni tok. Prema tome se prosječna vrijednost masenog udjela na ulazu u kontrolni volumen može izračunati iz:

$$Y_{\alpha,0} = \frac{\sum_{np} a_{Y_{\alpha,np}} Y_{\alpha,np}^*}{\sum_{np} a_{Y_{\alpha,np}}} \quad (3.105)$$

gdje su sa zvjezdicom označene prethodne vrijednosti masenih udjela (vrijednosti iz prethodne iteracije). Početna vrijednost koncentracije $C_{\alpha,0}$ se propisuje kao koncentracija koja odgovara prosječnom ulaznom masenom udjelu kemijske vrste $Y_{\alpha,0}$:

$$C_{\alpha,0} = \frac{\rho_0 Y_{\alpha,0}}{W_{\alpha}} \quad (3.106)$$

Na sličan se način uvrštavanjem entalpije u jednadžbu bilance za opće transportirano svojstvo φ (3.25) dobije prosječna ulazna specifična entalpija:

$$h_0 = \frac{\sum_{np} a_{h,np} h_{np}^*}{\sum_{np} a_{h,np}} \quad (3.107)$$

Tako se početna vrijednost temperature propisuje kao temperatura koja odgovara prosječnoj ulaznoj specifičnoj entalpiji:

$$T_0 = \frac{h_0}{c_{p,0}} + 273.16 \quad (3.108)$$

3.3.5. Spregnutost jednadžbi transporta i reaktivnog sistema

Integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) koji opisuje sistem reakcija, uz algebarsku petlju (3.99) kojom se računa temperatura u svakom vremenskom trenutku (koraku), te uz početne uvjete za koncentracije kemijskih vrsta $C_{\alpha,0}$ (3.105-3.106) i temperaturu T_0 (3.107-3.108) tijekom vremena zadržavanja smjese u kontrolnom volumenu τ_r (3.101) dobiju se vrijednosti koncentracija i temperature, $C_{\alpha,n}$ i T_n , na izlasku iz kontrolnog volumena.

Promjena koncentracije C_{α} tijekom prolaska kroz kontrolni volumen mogla bi se predočiti kao razlika između koncentracije na kraju i na početku integracije podijeljena s vremenom zadržavanja:

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial \tau} = \frac{\int_0^{\tau_r} \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) d\tau - C_{\alpha,0}}{\tau_r} = \frac{C_{\alpha,n} - C_{\alpha,0}}{\tau_r} \quad (3.109)$$

međutim taj pristup ima za posljedicu unošenje vrlo velike nestabilnosti u transportnu jednažbu kemijske vrste (2.234). Stabilnije se rješenje nameće direktno iz jednažbe bilance kemijske vrste (3.104). Integrira li se i izvorni član, brzina produkcije, dobije se:

$$\hat{S}_{Y_\alpha} \Delta V_P = \int_{\Delta V_P} \omega_\alpha dV = \omega_\alpha \Delta V_P \quad (3.110)$$

Za sada čitav se izvor ostavi na desnoj strani:

$$\sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, P} = \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, np} + \omega_\alpha \Delta V_P \quad (3.111)$$

Član na lijevoj strani je izlazni tok, a prvi član na desnoj strani je ulazni tok kemijske vrste. To isto vrijedi i kad masene udjele u pojedinim kontrolnim volumenima zamijenimo s masenim udjelima na početku i na kraju integracije prema izrazu (3.105):

$$\omega_\alpha \Delta V_P = \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, n} - \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, 0} = \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} \Delta Y_\alpha \quad (3.112)$$

gdje je ΔY_α promjena masenog udjela kemijske vrste kao posljedica prostrujavanja reaktivnog sistema kroz kontrolni volumen i dobije se integracijom izraza za promjenu koncentracije (3.89):

$$\Delta Y_\alpha = Y_{\alpha, n} - Y_{\alpha, 0} = \frac{W_\alpha}{\rho_n} \int_0^{\tau_r} \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) d\tau - Y_{\alpha, 0} \quad (3.113)$$

Uvrštavanjem izraza za brzinu produkcije kemijske vrste (3.112) u jednažbu bilance (3.111) te vrste po kontrolnom volumenu dobije se:

$$\sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, P} = \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, np} + \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} (Y_{\alpha, n} - Y_{\alpha, 0}) \quad (3.114)$$

Izvor se sada može rastaviti na pozitivni i negativni dio (što je potrebno prema kriteriju stabilnosti za slučaj da je produkcija negativna):

$$\hat{S}_{Y_\alpha} \Delta V_P = -S_{Y_\alpha, P} \Delta V_P Y_{\alpha, P} + S_{Y_\alpha, C} \Delta V_P = -S_{Y_\alpha, P} \Delta V_P Y_{\alpha, P} + b_{Y_\alpha} \quad (3.115)$$

te se dobiju, uz uvrštavanje izraza (3.105), sljedeći izrazi:

$$S_{Y_\alpha, P} = \frac{\sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, np}^*}{\Delta V_P Y_{\alpha, P}^*} \quad (3.116)$$

$$b_{Y_\alpha} = \frac{W_\alpha}{\rho_n} \int_0^{\tau_r} \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) d\tau \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} \quad (3.117)$$

Rješavanje jednažbe (3.99) u svakom vremenskom koraku tijekom integracije će na kraju dati temperaturu smjese na izlasku iz kontrolnog volumena T_n . Entalpijska razlika može se

dobiti iz temperaturne (treba primijetiti da je kod razlike svejedno da li se radi o apsolutnim temperaturama ili ne):

$$\Delta h = c_p \Delta T = c_p (T_n - T_0) \quad (3.118)$$

Na sličan se način kao i s masenim udjelima može toplinski tok izgaranjem predstaviti s promjenom entalpije:

$$q_C''' \Delta V_P = \sum_{np} a_{h,np} \Delta h \quad (3.119)$$

Uvrštavanjem entalpije u jednadžbu bilance za opće transportirano svojstvo φ (3.25) dobije jednadžba bilance entalpije po kontrolnom volumenu:

$$a_{h,P} h_P = \sum_{np} a_{h,np} h_{np} + \sum_{np} a_{h,np} \Delta h + b_h \quad (3.120)$$

Rastavljanje nije potrebno jer će zbog egzoternosti izgaranja razlika entalpija biti uglavnom uvijek pozitivna. Prema tome izvorni član u bilanci entalpije izazvan izgaranjem iznosi:

$$b_{h,C} = \sum_{np} a_{h,np} c_p (T_n - 273.16) - \sum_{np} a_{h,np} h_{np}^* \quad (3.121)$$

gdje se T_n dobije rješavanjem jednadžbe (3.99).

3.3.6. Problemi oko stabilnosti sprege

Unatoč svim gore navedenim predostrožnostima ipak se čitava metoda pokazala relativno nestabilna, u proporcionalnoj vezi s brojem reakcija i kemijskih vrsta. Uzrokovano je to vrlo jakim nelinearnošću obzirom na vrijeme (tj. temperaturu) izraza za produkciju mase te njihovoj velikoj osjetljivosti o početnim uvjetima. Kako se početni uvjeti računaju modelom strujanja prvi uzrok nestabilnosti dolazi očito iz načina na koji se računaju konvektivno-difuzivni koeficijenti (3.26-3.31) u jednadžbama (3.105) i (3.107). Iz izraza (3.20) se može zaključiti da iznosi koeficijenta nisu dani kontinuiranom funkcionalnom zavisnošću nego diskretnom (uzvodna shema diferenciranja) te im je stoga prva derivacija nedefinirana u pojedinim točkama. I upravo u jednoj takvoj točki singulariteta je i primijećen vrlo jaki uzrok nestabilnosti, naročito kod izgaranja vodika koje je vrlo burno. Do problema dolazi kada na jednoj kontrolnoj površini kontrolnog volumena brzina prelazi tijekom iterativnog procesa iz pozitivne u negativnu i *vice versa*. Može se ustanoviti slijed događaja po kojem prvo smjesa ustrojava u kontrolni volumen, čime početne uvjete dovodi do točke naglog zapaljenja. Time se povećava temperatura i posljedično dolazi do obrata strujanja na toj kontrolnoj površini, čime se početni uvjeti značajno mijenjaju te se plamen gasi. Posljedično paljenje-gašenje smjese unutar kontrolnog volumena onemogućava konvergiranje iterativnog postupka rješavanja i dobivanje jednoznačnih distribucija fizikalnih veličina po ložištu.

Za početak je potrebno definirati razliku između “zapaljenog” i “ugašenog” kontrolnog volumena. Dovoljna je razlika početnih temperatura od svega nekoliko stupnjeva da bi se konačna temperatura kontrolnog volumena razlikovala za npr. 1500 K. Može se stanje više konačne temperature nazvati zapaljeno, a niže ugašeno.

Kontrolni volumen u kojem će nastati ovakva nestabilnost je takav u koji utiče vrlo jaki “hladni” konvektivni dotok (takav koji sam po sebi daje početne uvjete koji neće zapaliti

smjesu), a ostali su dotoci manji, topliji i dovode do povremenog paljenja. Ovaj se problem naročito javlja u blizini gorionika, i to kada su kontrolni volumeni veći.

Na te je kontrolne volumene primijenjena statistička metoda izbora stanja (upaljeno/ugašeno) tako da im se prvih nekoliko iteracija dopusti intermitirajuće paljenje, a da se nakon toga oni, ukoliko su većinom bili ugašeni, dalje drže prisilno ugašeni, i obrnuto. Takva je procedura za izgaranje vodika dala odlične rezultate. Prilikom proračuna izgaranja metana bilo je dodatnih problema zbog nesimetričnosti distribucija fizikalnih veličina (međurješenja) tijekom iterativnog procesa što je zahtijevalo vođenje statistike tijekom čitavog iterativnog postupka. Takva je statistika zahtijevala rješavanje sistema (3.89) u ugašenim kontrolnim volumenima, ali bi se, ukoliko dođe do zapaljenja, rješenje zanemarilo. Tek ako bi paljenje postalo statistički često (prethodno objašnjeno) prihvatilo bi se novo rješenje i volumen bi se držao prisilno zapaljenim. Da bi se omogućilo i naknadno gašenje, statistika se vodila i na početnim uvjetima, pa ako bi se statistički često događalo da bi početni uvjeti, unatoč prisilnoj zapaljenosti, doveli do gašenja, tada bi se volumen ugasio. Prisilno paljenje se postiže postavljanjem umjetno visoke početne temperature. Najčešće je bilo dovoljno postaviti tu temperatura na 50 K više od temperature zapaljenja goriva.

Osim toga kako su početni uvjeti u funkciji, među ostalim, i izgaranja u svim kontrolnim volumenima kroz koje je struja smjese prethodno prošla, bilo je neophodno podrelaksirati kako inicijalne temperature i koncentracije tako i rezultirajuće razlike (brzinu produkcije i toplinski tok izgaranjem). Za podrelaksaciju početnih vrijednosti korišten je faktor 0.4, a za brzine produkcije 0.8. Međutim podrelaksiranje volumenskog toplinskog toka izgaranjem vezano je na njegovu promjenu u odnosu na prethodnu iteraciju. Kod vrlo velikih promjena (koje odgovaraju intermitirajućem paljenju/ugašenju) korišten je faktor podrelaksacije 0.2, a kod manjih promjena je faktor težio prema 1.0 (dakle bez podrelaksiranja).

Moralo se voditi računa o tome da suma masenih udjela svih kemijskih vrsta bude 1, što nije automatski zadovoljeno tijekom iterativnog postupka, a od velikog je značaja za realnost rezultata integracije sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) koje predstavljaju sistem reakcija. Taj se postupak provodio i na početnim masenim udjelima i na konačnima.

Kako tijekom iterativnog procesa nije općenito zadovoljena jednadžba kontinuiteta, nije zadovoljeno niti očuvanje atomarnih vrsta. Iako bi jednadžba kemijske vrste (2.234) to trebala osigurati na kraju iterativnog postupka, to će se primjenom ovakove sprege transportnih i kinetičkih procesa vrlo sporo i vrlo teško odvijati. Zbog toga je bilo neophodno uvesti korekciju masenih udjela kemijskih vrsta tako da zadovoljavaju, za svaki kontrolni volumen, uvjet održanja atomarnih vrsta. Faktori korekcije s vremenom teže k 1.0 što potvrđuje konzistentnost pristupa.

Da ne bi došlo do naglih eksplozija u modelu, što bi se moglo dogoditi tijekom iterativnog procesa, jer jedan te isti materijal može izgarati na više mjesta istovremeno, bilo je potrebno napraviti korekciju ukupne topline oslobođene u ložištu, tako da ona odgovara ukupnoj toplini oslobođenoj iz goriva između gorionika i izlaza iz ložišta.

Sve ove mehanizme je nažalost trebalo ugadati za svaki pojedini slučaj, iako su se gore navedeni faktori podrelaksacije pokazali umjereno osjetljivi, no to također vrijedi i za metodu kontrolnih volumena samu, gdje treba podesiti faktore podrelaksacija na pojedinim sistemima algebarskih jednadžbi.

Kako je u prvih nekoliko iteracija polje strujanja sasvim nerealno, pokazalo se poželjno prvo donekle stabilizirati isto (cca. 5 iteracija), a tek onda prići paralelnom rješavanju kinetike izgaranja.

Za početnu distribuciju kemijskih vrsta po ložištu, prije početka rješavanja kinetike, uzet je čisti zrak. Kad bi se početna distribucija postavila da odgovara smjesi na gorioniku, tada bi prilikom proračuna kinetike odjednom po čitavom ložištu došlo do snažnog izgaranja, koji bi u stvarnosti odgovaralo situaciji u kojoj je po čitavom ložištu smjesa kao na izlasku iz gorionika, koju se onda trenutačno zapali. Jedan veliki buuuuum. Postupak koji je primijenjen, puštanje smjese goriva i zraka na gorioniku tek nakon nekoliko iteracija, mogao bi se usporediti s nestacionarnim tako što svaka nova iteracija na neki način predstavlja novi vremenski korak. Međutim, kako se rubni uvjeti ne mijenjaju, rješava se stacionarni problem.

3.4. ZONALNA METODA PRORAČUNA PRIJENOSA TOPLINE ZRAČENJEM

Priroda prijenosa topline zračenjem sasvim je različita od druga dva načina: konvekcije i kondukcije. Energija se ne prenosi kretanjem i sudaranjem molekula nego elektromagnetskim zračenjem. Kao posljedica toga svaka točka u prostoru koja je vidljiva iz druge točke s njom i direktno izmjenjuje energiju. Transportni pristup prikazan u prethodnim glavama orijentiran je upravo na konvektivni i kondukcijski prijenos topline i nepodesan je za proračun prijenosa topline zračenjem.

Fluksne metode [66] razvijene su upravo s namjerom da se računanje prijenosa topline zračenjem prilagodi prirodi transportnih jednadžbi, ali s cijenom gubitka dijela informacije. Hottelova zonalna metoda [1, 3, 52, 67, 98, 109] je analitička metoda koja uključuje svu izmjenu topline zračenjem, ali je vrlo zahtjevna obzirom na kompjutersko vrijeme. Osim toga ograničena je na relativno jednostavne geometrije, a za slučaj sivih zidova (što je situacija u svim realnim problemima) potrebno je još riješiti dodatni sistem jednadžbi što značajno usporava proračun. Zonalna metoda se bazira na ideji podjele domene na pojedine zone plina i zidova, unutar kojih su radijativna svojstva i temperatura konstantni, što u osnovi odgovara metodi kontrolnih volumena i s njom je spojiva. Umjesto integriranja Hottelovih površina direktne izmjene nekoliko je autora [68-69, 96] predložilo statistički pristup Monte Carlo metodom. Ono što tu metodu čini posebno atraktivnom u računanju prijenosa topline zračenjem je to što se metoda bazira na praćenju zraka u čemu je upravo i priroda zračenja. Osim toga je metoda, što se tiče kompjuterskog vremena, gotovo neosjetljiva na dodatne zahtjeve poput sivih stijenki i komplicirane geometrije.

Lockwood i Shah [70] razvili su metodu diskretnog transfera (engl. *discrete transfer method*), uz modifikacije u [110] i dr., kombinaciju između zonalnog i fluks pristupa koristeći fluks metodu za proračun izmjene topline zračenjem između bliskih zona, a zonalnu metodu za proračun izmjene između dalekih zona. Treba još navesti i metodu diskretnih ordinata (engl. *discrete ordinates method*) koja je predložena [71] s namjerom da se maksimalno prilagodi metodi kontrolnih volumena.

Može se zaključiti usporedbom rezultata iz [72] i [73] da je zonalna metoda senzitivnija u slučaju računanja utjecaja probijanja vode u ložište (tj. lokalnog povećanja koncentracije

vodene pare) na prijenos topline zračenjem od fluks metode za čitav red veličine. Kako je u ložištima prijenos topline zračenjem daleko najvažniji vid prijenosa topline, a i jedan od najvažnijih fizikalnih procesa koji se odvijaju, potrebno mu je posvetiti veliku pažnju. Zbog toga se od samog početka prišlo primjeni zonalne metode.

U matematički model procesa u ložištu generatora pare ugrađena su oba načina računanja površina direktne izmjene među zonama, s time da je Hottelova zonalna metoda ograničena na modeliranje stijenki kao crnih površina i aproksimaciju realnog plina jednim sivim plinom, dok Monte Carlo metoda obuhvaća i sive površine te standardnu aproksimaciju realnog plina modelom tri siva plina.

3.4.1. Zonalna metoda

Zonalna metoda bazira se na podjeli ložišta na zone (plinske i površinske), uz pretpostavku konstantnih iznosa temperature i radijativnih svojstava po čitavoj zoni. Ako je broj zona dovoljno velik, greška koju ta pretpostavka unosi u sistem postaje zanemariva. Ta pretpostavka omogućuje da se integrali po čitavoj domeni (2.238-2.239) prikažu kao suma svih prinosa energije iz svih zona. Nakon integracije po kontrolnom volumenu jednadžbe transporta entalpije (2.235) član koji opisuje ukupni izvor topline zračenjem u kontrolnom volumenu (2.238) prema tome postaje:

$$\hat{S}_h \Delta V_P = \int_{\Delta V_P} q_R''' dV = -Q_g^- + Q_g^+ = -4\alpha\sigma T_P^4 \Delta V_P + \sum_i Q_{g_i \rightarrow P} + \sum_i Q_{s_i \rightarrow P} \quad (3.122)$$

što se može rastaviti na član koji u sebi sadrži potenciju temperature t (koja je u linearnoj zavisnosti od entalpije, 2.246), te ostatak izvora:

$$\hat{S}_h \Delta V_P = -S_{h,P} \Delta V_P h_P + S_{h,C} \Delta V_P = -S_{h,P} \Delta V_P h_P + b_{h,R} \quad (3.123)$$

Linearizacijom četvrte potencije temperature dobije se:

$$T_P^4 = 4(T_P^3)^* T_P - 3(T_P^4)^* \quad (3.124)$$

gdje zvjezdica (*) označava vrijednost temperature koja je konstantna za vrijeme rješavanja linearnog sistema algebarskih jednadžbi (3.25) primijenjenog na entalpiju, a uzima se iz prethodnog koraka iteracije. Izvorni član postaje:

$$\begin{aligned} -S_{h,P} \Delta V_P h_P + b_{h,R} &= -4\alpha\sigma 4(T_P^3)^* \left(1 + \frac{273.15}{(t_P)^*} \right) \Delta V_P \frac{h_P}{c_p} + \\ &4\alpha_p \sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_i Q_{g_i \rightarrow P} + \sum_i Q_{s_i \rightarrow P} \end{aligned} \quad (3.125)$$

Izvor se sada očigledno može podijeliti na dva dijela, jedan koji postaje dio centralnog koeficijenta, a drugi ostaje na desnoj strani jednadžbe transporta entalpije:

$$S_{h,P} = 4\alpha\sigma 4(T_P^3)^* \left(1 + \frac{273.15}{(t_P)^*} \right) \frac{1}{c_p} \quad (3.126)$$

$$b_{h,R} = 4\alpha\sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_i Q_{g_i \rightarrow P} + \sum_i Q_{s_i \rightarrow P} \quad (3.127)$$

3.4.2. Hottelova zonalna metoda

Dotok energije u kontrolni volumen zračenjem prikazan je integralom u jednadžbi (2.238). Kako se u podintegralnoj funkciji nalazi temperatura, koja je nepoznata, potrebno bi bilo ovaj izraz numerički integrirati prilikom svakog proračuna koeficijenata temperaturne jednadžbe. Hottel i Cohen [67] su pretpostavili da je temperatura po volumenskim i površinskim zonama konstantna, pa uz tu pretpostavku izraz integrirali za svaku kombinaciju volumena i površina. Kako te podintegralne funkcije ne ovise o računatim fizikalnim veličinama, nego samo o geometriji, mogu se numerički integrirati unaprijed. Time je jednadžba (2.235) ponovo vraćena iz integralno-diferencijalnog u diferencijalni oblik, iako je ovisnost temperature u centralnom čvoru proširena sa susjednih čvorova na čitavu zračecu domenu. Takav je pristup potpuno kompatibilan s metodom kontrolnih volumena, koja domenu također dijeli na niz diskretnih volumena s konstantnim svojstvima.

Prema izrazu (2.143) infinitezimalni plinski volumen dV_g prima toplinski tok s infinitezimalne crne površine dA_s . Nakon integracije po kontrolnom volumenu ΔV_p i po površini ΔA_s , se dobije toplinski tok s površine na volumen:

$$Q_{s_i \rightarrow P} = \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta A_{s_i}} \sigma T_{s_i}^4 \frac{\cos \vartheta_{s_i} \alpha \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_i} dV_g \quad (3.128)$$

S obzirom na početnu pretpostavku o konstantnosti temperature stijenke po čitavoj kontrolnoj površini, može se ona izvući ispred integrala:

$$Q_{s_i \rightarrow P} = \sigma T_{s_i}^4 \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta A_{s_i}} \frac{\cos \vartheta_{s_i} \alpha \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_i} dV_g \quad (3.129)$$

Integral se može, uz pretpostavku konstantnog koeficijenta apsorpcije α po čitavoj domeni, izračunati unaprijed, jer ovisi samo o geometrijskim faktorima:

$$\overline{s_i g_P} = \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta A_{s_i}} \frac{\cos \vartheta_{s_i} \alpha \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_i} dV_g \quad (3.130)$$

Na analogan se način iz izraza (2.144) koji definira toplinski tok s infinitezimalnog plinskog volumena dV_{g_1} na infinitezimalni plinski volumen dV_{g_2} integracijom po kontrolnom volumenu koji prima zračenje ΔV_p i kontrolnom volumenu koji zračenje emitira ΔV_{g_1} , uz pretpostavku konstantnosti temperature po kontrolnom volumenu, dobije toplinski tok s emitirajućeg na apsorbirajući kontrolni volumen:

$$Q_{g_1 \rightarrow P} = \sigma T_{g_1}^4 \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta V_{g_1}} \frac{\alpha^2 \tau(r)}{\pi r^2} dV_{g_1} dV_{g_2} \quad (3.131)$$

Površina direktne izmjene volumen-volumen, uz pretpostavku konstantnog koeficijenta apsorpcije po čitavoj domeni, može se proračunati unaprijed i iznosi:

$$\overline{g_i g_P} = \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta V_{g_1}} \frac{\alpha^2 \tau(r)}{\pi r^2} dV_{g_1} dV_{g_2} \quad (3.132)$$

Ukupni toplinski tok zračenjem koji pristiže u kontrolni volumen ΔV_p iz čitave zračee domene dobije se sumiranjem svih prinosa iz svih zona i iznosi:

$$Q_p^+ = \sum_i \overline{g_i g_p} \sigma T_{g_i}^4 + \sum_i \overline{s_i g_p} \sigma T_{s_i}^4 \quad (3.133)$$

Izvor topline zračenjem u kontrolnom volumenu nakon linearizacije četvrte potencije temperature i rastavljanja (3.126-3.127) na član koji u sebi sadrži potenciju temperature t , te ostatak izvora, postaje:

$$S_{h,p} = 4\alpha\sigma 4(T_p^3)^* \left(1 - \frac{273.15}{(t_p)^*} \right) \frac{1}{c_p} \quad (3.134)$$

$$b_{h,R} = 4\alpha_p\sigma 3(T_p^4)^* \Delta V_p + \sum_i \overline{g_i g_p} \sigma T_{g_i}^4 + \sum_i \overline{s_i g_p} \sigma T_{s_i}^4 \quad (3.135)$$

gdje zvjezdica (*) označuje vrijednost temperature koja se ne mijenja za vrijeme rješavanja linearnog sistema algebarskih jednadžbi (3.25) primijenjenog na entalpiju, a uzima se iz prethodnog koraka iteracije.

Toplinska bilanca na kontrolnoj površini stijenke

Toplinska bilanca na infinitezimalnoj površini dA na stijenci može se kao i u volumenu bazirati na jednadžbi transporta entalpije (2.235) za stacionarno strujanje, s tim što nema izvora uzrokovanog izgaranjem, jer se izgaranje odvija samo u plinskom volumenu, te nema konvektivne izmjene topline. Ostala je izmjena topline kondukcijom kroz granični sloj, izmjena topline zračenjem te ponor topline na hladioca:

$$0 = n_j \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j} + q_R'' - q_W'' \quad (3.136)$$

Integracijom po kontrolnoj površini dobije se izraz za toplinski tok koji prelazi na hladioca:

$$\int_{\Delta A} q_W'' dA = \int_{\Delta A} n_j \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j} dA + \int_{\Delta A} q_R'' dA \quad (3.137)$$

$$Q_w = \zeta(\Delta s) \frac{\mu_{eff,g}}{\sigma_h} \frac{c_{p,g} t_g - c_{p,s} t_s}{\Delta s} \Delta A + Q_{s,b} \quad (3.138)$$

gdje je Δs udaljenost stijenke od prvog čvora u plinu, t_g temperatura u tom čvoru, t_s temperatura stijenke, a $\zeta(\Delta s)$ je zidna funkcija za prijenos topline iz struje na zid. Prema iskustvu se pokazalo da za ložišta sasvim zadovoljavajuće koristiti konstantu $\zeta = 0.1$. Iznos konstante ovisi o udjelu prijenosa topline koji se na zid prenosi kroz granični sloj te o veličini kontrolnih volumena uz zid, te se određuje empirijski.

Prema izrazu (2.141) infinitezimalna površina stijenke ložišta dA_{s_2} prima toplinski tok s infinitezimalne površine dA_{s_1} . Nakon integracije po kontrolnoj površini stijenke ΔA_p i po površini ΔA_s se dobije toplinski tok s konačne površine na konačnu površinu, koji je uz pretpostavku zonalne metode o konstantnosti temperature stijenke po kontrolnoj površini:

$$Q_{s_1 \rightarrow s_2} = \sigma T_{s_1}^4 \int_{\Delta A_s} \int_{\Delta A_{s_1}} \frac{\cos \vartheta_{s_1} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_1} dA_{s_2} \quad (3.139)$$

Integral se može, uz pretpostavku konstantne apsorpcije α po čitavoj domeni, izračunati unaprijed, jer ovisi samo o geometrijskim faktorima:

$$\overline{s_i s} = \int_{\Delta A_s} \int_{\Delta A_{s_1}} \frac{\cos \vartheta_{s_1} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_1} dA_{s_2} \quad (3.140)$$

Na analogan način se iz izraza (2.142), koji definira toplinski tok s infinitezimalnog plinskog volumena dV_g na infinitezimalnu površinu stijenske dA_s integracijom po kontrolnoj površini ΔA_p koja prima zračenje i kontrolnom volumenu koji zračenje emitira ΔV_g , dobije, uz pretpostavku konstantnosti temperature po kontrolnom volumenu i apsorpcije po čitavoj domeni, toplinski tok s emitirajućeg na apsorbirajući kontrolni volumen:

$$Q_{g_i \rightarrow s} = \sigma T_{g_i}^4 \int_{\Delta A_s} \int_{\Delta V_{g_i}} \frac{\alpha \cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi r^2} dV_g dA_s \quad (3.141)$$

Direktna površina izmjene topline zračenjem volumen-površina prema tome iznosi:

$$\overline{g_i s} = \int_{\Delta A_s} \int_{\Delta V_{g_i}} \frac{\alpha \cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi r^2} dV_g dA_s \quad (3.142)$$

Ukupni toplinski tok zračenjem koji prima kontrolna površina crne stijenske ΔA_p iz čitave zračee domene se dobije sumiranjem toplinskih tokova sa svih plinskih volumena i svih površina stijenske:

$$Q_{s,b}^+ = \sum_i \overline{g_i s} \sigma T_{g_i}^4 + \sum_i \overline{s_i s} \sigma T_{s_i}^4 \quad (3.143)$$

Infinitezimalna površina crne stijenske dA_s emitira toplinski tok prema izrazu (2.135), te se nakon integracije po kontrolnoj površini ΔA_p , uz konstantnu temperaturu po kontrolnoj površini, dobije toplinski tok kojim površina crne stijenske ΔA_p zrači na domenu:

$$Q_{s,b}^- = \int_{\Delta A_s} \sigma T_s^4 dA_s = \sigma T_p^4 \Delta A_p \quad (3.144)$$

Ukupni izvor topline zračenjem u jednadžbi bilance topline na kontrolnoj površini prema tome iznosi:

$$Q_{s,b} = -Q_{s,b}^- + Q_{s,b}^+ = -\sigma T_p^4 \Delta A_p + \sum_i \overline{g_i s} \sigma T_{g_i}^4 + \sum_i \overline{s_i s} \sigma T_{s_i}^4 \quad (3.145)$$

Ukupni toplinski tok na kontrolnu površinu ΔA_p ekranskog zida ložišta može se proračunati po sljedećem izrazu:

$$Q_w = \zeta(\Delta s) \frac{\mu_{\text{eff},g} c_{p,g} t_g - c_{p,s} t_s}{\sigma_h \Delta s} \Delta A - \sigma T_p^4 \Delta A_p + \sum_{g_1} \overline{g_1 s_2} \sigma T_{g_1}^4 \quad (3.146)$$

3.4.3. Monte Carlo metoda

Hottelova zonalna metoda je analitička metoda koja uzima u obzir sav radijativni prijenos, te postaje kompjuterski vrlo skupa, i to već za sasvim realnu željenu točnost, a broj potrebnih operacija raste s kvadratom broja kontrolnih volumena. Ako se žele u računanje uključiti sivi zidovi potrebno je riješiti dodatni sistem jednadžbi s brojem nepoznanica koji odgovara broju

kontrolnih volumena. Osim toga moguće ju je direktno primijeniti samo za relativno jednostavne geometrije. Svaka eventualna nadogradnja značajno komplicira metodu.

Kao postupak koji otklanja te nedostatke pruža se Monte Carlo metoda [68-69, 96], statistička metoda u kojoj se prati određeni broj energetskih kvantova-zraka (engl. *ray tracing*). Ta je metoda jednostavna za implementaciju za bilo kakvu geometriju i za bilo koji dodatni stupanj slobode u modeliranju zračenja, a broj operacija, iako u početku viši nego u Hottelovoj zonalnoj metodi, raste samo linearno s brojem kontrolnih volumena. U ovoj je disertaciji metoda primijenjena prema prethodnom radu na modelu zračenja iznesenom u [94] uz kasnija poboljšanja prema [96, 73, 111, 95].

Volumenski toplinski tok zračenjem q_R''' (2.238) predstavlja razliku između apsorbirane energije u volumenu (koja je emitirana iz čitave domene) i energije emitirane iz istog volumena. Nakon integracije po kontrolnom volumenu postaje kao što je već ranije pokazano:

$$\hat{S}_{h,R}\Delta V_P = \int_{\Delta V_P} q_R''' dV = -Q_g^- + Q_g^+ = -4K_P\sigma T_P^4\Delta V_P + \sum_i Q_{a,i} \quad (3.147)$$

Za razliku od implementacije Hottelove zonalne metode ovdje se koeficijent apsorpcije računa ovisno o lokalnim uvjetima, te će se zato označiti s K , a ne s α . Također, kako je za Monte Carlo metodu svejedno da li se radi o emitiranju sa stijenke ili iz plina, posljednji član u jednadžbi, $\sum_i Q_{a,i}$, predstavlja energetski prinos iz čitave domene.

Prema Monte Carlo metodi energija emitirana zračenjem iz svakog kontrolnog volumena se raspodjeljuje na određeni broj diskretnih energetskih paketa (kvant, zraka, engl. *bundle*), koji se emitiraju iz slučajne pozicije u kontrolnom volumenu, pod slučajnim kutom. Nakon slučajne duljine puta, paket-zraka biva apsorbiran ili u plinu (može i u originalnom kontrolnom volumenu) ili na stijenci.

Tijekom iterativne procedure distribucija temperatura (pretpostavljena ili izračunata u prethodnoj iteraciji) u načelu ne zadovoljava jednadžbu transporta entalpije, što u pravilu dovodi do spore konvergencije iterativnog postupka k rješenju. Stoga je pretpostavljeno da se zraka apsorbirana u kontrolnom volumenu momentalno reemitira (u slučajnom smjeru pod slučajnim kutom) i na taj se način automatski osigura održanje energije u domeni. Tada je potrebno dodatno emitirati iz svakog kontrolnog volumena samo onu energiju predstavljenu s izvorom topline zračenjem $-\hat{S}_{h,R}\Delta V_P$ u jednadžbi (3.147).

Linearni sistem algebarskih jednadžbi (3.25) primjeni se na entalpiju:

$$a_P h_P = \sum_{np} a_{np} h_{np} + q_C''' \Delta V_P + \hat{S}_{h,R} \Delta V_P \quad (3.148)$$

iz čega se može izračunati broj zraka emitiranih iz kontrolnog volumena, svaka s energijom Q_{bundle} :

$$n_{g,P} = \frac{\sum_{np} a_{np} h_{np} - a_P h_P + q_C''' \Delta V_P}{Q_{bundle}} \quad (3.149)$$

Ako je na stijenci temperatura dana kao rubni uvjet tada je moguće broj zraka izračunati na direktan način (kako se paket apsorbiran na stijenci ne reemitira jer će većina energije biti odnesena hladiocem):

$$n_{s,P} = \frac{\varepsilon \Delta A_P \sigma T_P^4}{Q_{bundle}} \quad (3.150)$$

Ukupni toplinski tok odnesen hladiocem na kontrolnoj površini ΔA_P ekranskog zida ložišta može se proračunati prema prethodno izvedenom izrazu (3.146) za Hottelovu metodu:

$$Q_w = \zeta(\Delta s) \frac{\mu_{eff,g}}{\sigma_h} \frac{c_{p,g} t_g - c_{p,s} t_s}{\Delta s} \Delta A - \varepsilon \sigma T_P^4 \Delta A_P + \sum_i Q_{a,i} \quad (3.151)$$

Energija koju sa sobom nosi zraka Q_{bundle} , dobije se podjelom ukupne energije izmijenjene zračenjem u ložištu sa željenim brojem zraka n . Za tipični slučaj broj zraka za čitavo ložište se kreće oko 10^7 .

$$Q_{bundle} = \frac{H_{kem} + H_u - H_i - Q_{konv} + \sum_i \varepsilon \Delta A_P \sigma T_P^4}{n} \quad (3.152)$$

gdje je H_{kem} kemijska energija koja se oslobađa u ložištu, H_u i H_i su respektivno osjetne topline na ulazu i izlazu iz ložišta a Q_{konv} je prijenos topline konvekcijom na zid.

Zrake se kroz ložište prate upotrebom pseudo-slučajnih brojeva, i to tri za odabir pozicije, dva za kut smjera, i po jedan za svaki kontrolni volumen u koji zraka uđe. Ako je put apsorpcije, izračunat na osnovi lokalnog koeficijenta apsorpcije, duži od geometrijskog puta zrake određenog slučajnim brojem, tada se zraka ne apsorbira u kontrolnom volumenu nego biva proslijeđena u sljedeći. Ako se zraka apsorbira u kontrolnom volumenu ona se momentalno reemitira, iako se u stvari radi o potpuno novom paketu-zraci. Ako pak zraka udari u stijenku tada apsorpcija ovisi o odnosu slučajnog broja i apsorptivnosti površine.

Model tri siva plina

Radijativna svojstva plina ovise pretežno o udjelu troatomnih plinova (i višeatomnih, ali njihov je udio zanemariv) u smjesi (CO_2 , H_2O , SO_2). Model tri siva plina daje korelaciju uz pomoću koje (i konstanti u tablici 3.7) se može izračunati koeficijent apsorpcije za lokalni sastav smjese i temperaturu:

$$\varepsilon_g = \sum_{n=1}^3 (b_{1,n} + b_{2,n} T_P) (1 - e^{-k_n (p_{\text{CO}_2} + p_{\text{H}_2\text{O}} + p_{\text{SO}_2}) L}) \quad (3.153)$$

Tablica 3.7. Konstante modela tri siva plina [112]

n	k_n	$b_{1,n}$	$b_{2,n}$
1	0	0.130	0.000265
2	0.835	0.595	-0.000150
3	26.25	0.275	-0.000115

Pod uvjetom da se ista jednadžba može upotrijebiti i za proračun apsorptivnosti plina α_g , da je T_p srednja temperatura kontrolnog volumena koji apsorbira, $p_{CO_2} + p_{H_2O} + p_{SO_2}$ suma parcijalnih tlakova troatomnih plinova, a L je srednja duljina puta zrake, koeficijent apsorpcije se može izračunati iz:

$$K = -\frac{\ln(1-\alpha_g)}{L} \quad (3.154)$$

3.5. INTEGRACIJA SKALARNIH JEDNADŽBI

Preostaje još ukratko prikazati kako se integriraju skalarnе jednadžbe, tj. jednadžbe kemijskih vrsta i entalpije. Za razliku od impulsnih jednadžbi, ove se jednadžbe integriraju na centralnoj mreži (sl. 3.1).

Opća diferencijalna transportna jednadžba (3.1) za skalarno svojstvo φ nakon integracije po kontrolnom volumenu daje algebarsku jednadžbu (3.25) za svaki kontrolni volumen, gdje su koeficijenti dani u izrazima (3.26-3.32, 3.36). Potrebno je još definirati jačinu konvekcije i difuzije (3.12) u tim izrazima, što se može učiniti na primjeru koeficijenta $a_{\varphi,E}$ (3.26):

$$a_{\varphi,E} = \left(\left\| -F_e, 0 \right\| + D_e \right) A_e = \left(\left\| -\rho_e u_e, 0 \right\| + \frac{\Gamma_{\varphi,e}}{\delta x_e} \right) A_e \quad (3.155)$$

gdje je brzina u_e u stvari brzina u čvoru mreže pomaknute u smjeru osi x (tabl. 3.1). Uz geometrijski izraz (3.13) i zamjenu koeficijenta difuzije koeficijentom viskoznosti, te uz njegovu linearnu interpolaciju, dobije se:

$$a_{\varphi,E} = \left(\left\| -\rho_{P_u} u_{P_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,E}}{\sigma_{\varphi}(\Delta x_P + \Delta x_E)} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.156)$$

Na analogan način dobiju se i ostali koeficijenti:

$$a_{\varphi,W} = \left(\left\| \rho_{W_u} u_{W_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,W}}{\sigma_{\varphi}(\Delta x_P + \Delta x_W)} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.157)$$

$$a_{\varphi,N} = \left(\left\| -\rho_{P_v} v_{P_v}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,N}}{\sigma_{\varphi}(\Delta y_P + \Delta y_N)} \right) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.158)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,S} = \left(\left\| \rho_{S_v} \mathbf{v}_{S_v}, \mathbf{0} \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,S}}{\sigma_{\varphi}(\Delta \mathbf{y}_P + \Delta \mathbf{y}_S)} \right) \Delta \mathbf{x}_P \Delta \mathbf{z}_P \quad (3.159)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,U} = \left(\left\| -\rho_{P_w} \mathbf{w}_{P_w}, \mathbf{0} \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,U}}{\sigma_{\varphi}(\Delta \mathbf{z}_P + \Delta \mathbf{z}_U)} \right) \Delta \mathbf{x}_P \Delta \mathbf{y}_P \quad (3.160)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,D} = \left(\left\| \rho_{D_w} \mathbf{w}_{D_w}, \mathbf{0} \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,D}}{\sigma_{\varphi}(\Delta \mathbf{z}_P + \Delta \mathbf{z}_D)} \right) \Delta \mathbf{x}_P \Delta \mathbf{y}_P \quad (3.161)$$

Uz propisivanje turbulentnog Prandtl-Schmidtovog broja za svako pojedino transportno svojstvo dobiveni su algebarski izrazi koji obuhvaćaju mehanizme konvekcije i difuzije za sve skalarne jednačbe, tj. jednačbe kemijskih vrsta i entalpije. Međutim izvorni se članovi moraju integrirati za svaku skalarnu jednačbu ponaosob, jer su mehanizmi koji su opisani tim izvornim članovima različiti za svaku od diferencijalnih jednačbi. Ti su mehanizmi, kao i procedure njihove diskretizacije, već uglavnom opisani te ovdje slijedi samo njihova rekapitulacija i uklapanje u dani sistem.

Tablica 3.8. Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije masenog udjela kemijske vrste α

Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije masenog udjela kemijske vrste α

$$a_{Y_{\alpha},P} Y_{\alpha,P} = \sum_{np} a_{Y_{\alpha},np} Y_{\alpha,np} + b_{Y_{\alpha}} \quad (3.162a)$$

gdje su:

$$a_{Y_{\alpha},E} = \left(\left\| -\rho_{P_u} u_{P_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,E}}{\sigma_{\alpha}(\Delta X_P + \Delta X_E)} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.162b)$$

$$a_{Y_{\alpha},W} = \left(\left\| \rho_{W_u} u_{W_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,W}}{\sigma_{\alpha}(\Delta X_P + \Delta X_W)} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.162c)$$

$$a_{Y_{\alpha},N} = \left(\left\| -\rho_{P_v} v_{P_v}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,N}}{\sigma_{\alpha}(\Delta y_P + \Delta y_N)} \right) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.162d)$$

$$a_{Y_{\alpha},S} = \left(\left\| \rho_{S_v} v_{S_v}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,S}}{\sigma_{\alpha}(\Delta y_P + \Delta y_S)} \right) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.162e)$$

$$a_{Y_{\alpha},U} = \left(\left\| -\rho_{P_w} w_{P_w}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,U}}{\sigma_{\alpha}(\Delta z_P + \Delta z_U)} \right) \Delta x_P \Delta y_P \quad (3.162f)$$

$$a_{Y_{\alpha},D} = \left(\left\| \rho_{D_w} w_{D_w}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,D}}{\sigma_{\alpha}(\Delta z_P + \Delta z_D)} \right) \Delta x_P \Delta y_P \quad (3.162g)$$

$$a_{Y_{\alpha},P} = \sum_{np} a_{Y_{\alpha},np} + S_{Y_{\alpha},P} \Delta V_P \quad (3.162h)$$

$$S_{Y_{\alpha},P} = \frac{\sum_{np} a_{Y_{\alpha},np} Y_{\alpha,np}^*}{\Delta V_P Y_{\alpha,P}^*} \quad (3.162i)$$

$$b_{Y_{\alpha}} = \frac{W_{\alpha}}{\rho_n} \int_0^{\tau_r} \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_{\alpha}} c_k^{v_{kj}} \left(1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_{\alpha}} c_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) d\tau \sum_{np} a_{Y_{\alpha},np} \quad (3.162j)$$

$$k_{f,j} = k_{0,j} T^{\alpha_j} e^{-\frac{E_{a,j}}{RT}} \quad (3.162k)$$

$$K_{C,j} = (RT)^{-\sum_{k=1}^{n_{\alpha}} (v''_{k,j} - v'_{k,j})} e^{\left[a'_{1,k}(1-\ln T) - \frac{a'_{2,k}}{2} T - \frac{a'_{3,k}}{6} T^2 - \frac{a'_{4,k}}{12} T^3 - \frac{a'_{5,k}}{20} T^4 + \frac{a'_{6,k}}{T} - a'_{7,k} \right]} \quad (3.162l)$$

$$\tau_r = \frac{1}{\frac{|u_{W_u} + u_{P_u}|}{2\Delta x_P} + \frac{|v_{S_v} + v_{P_v}|}{2\Delta y_P} + \frac{|w_{D_w} + w_{P_w}|}{2\Delta z_P}} \quad (3.162m)$$

3.5.1. Jednadžbe kemijskih vrsta

Jednadžba transporta kemijske vrste (2.234) je skalarna jednadžba koja nakon integracije po kontrolnom volumenu daje sistem algebarskih jednadžbi bilance za svaku kemijsku vrstu prema (3.25):

$$\mathbf{a}_{Y_{\alpha},P} Y_{\alpha,P} = \mathbf{a}_{Y_{\alpha},E} Y_{\alpha,E} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},W} Y_{\alpha,W} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},N} Y_{\alpha,N} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},S} Y_{\alpha,S} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},U} Y_{\alpha,U} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},D} Y_{\alpha,D} + \mathbf{b}_{Y_{\alpha}} \quad (3.163)$$

Uz propisani Prandtl-Schmidtov broj σ_{α} (2.231) koeficijenti koji opisuju konvektivni i difuzivni mehanizam dani su u izrazima (3.156-3.161). Potrebno je još prikazati što se događa s izvornim članom, brzinom produkcije (2.236) koji proizlazi iz sprege sa sistemom koji opisuje kinetika izgaranja. Taj se član integrira na način kako je to pokazano u glavi 3.3.5 a kao rezultat dobiju se dva izvorna člana, jedan koji se dodaje centralnom koeficijentu (3.116) i drugi koji ostaje na desnoj strani jednadžbe bilance (3.117).

Sistem algebarskih jednadžbi (3.163) primijenjen na sve kemijske vrste obuhvaćene modelom, dat će uz poznate distribucije triju komponenti vektora brzine \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{w} , distribucije temperature T i gustoće ρ , te uz propisivanje modela izgaranja (brzine izgaranja $K_{f,j}$, konstante ravnoteže $K_{c,j}$ i stehiometrijski koeficijenti $v'_{\alpha,j}$ i $v''_{\alpha,j}$), distribuciju masenih udjela (koncentracija) tih vrsta po ložištu.

3.5.2. Jednadžba temperature

Jednadžba transporta entalpije (2.235) je skalarna jednadžba koja nakon integracije po kontrolnom volumenu daje sistem algebarskih jednadžbi bilance entalpije prema (3.25):

$$\mathbf{a}_{h,P} h_P = \mathbf{a}_{h,E} h_E + \mathbf{a}_{h,W} h_W + \mathbf{a}_{h,N} h_N + \mathbf{a}_{h,S} h_S + \mathbf{a}_{h,U} h_U + \mathbf{a}_{h,D} h_D + \mathbf{b}_h \quad (3.164)$$

Uz dani Prandtl-Schmidtov broj σ_h , tj. turbulencijski Prandtlov broj Pr (2.230), koeficijenti koji opisuju konvektivni i difuzivni mehanizam dani su u izrazima (3.156-3.161). Potrebno bi bilo još prikazati što se događa s izvornim članovima, volumenskim toplinskim tokom izgaranjem (2.237) i zračenjem. Međutim pokazalo se spretnije rješavati jednadžbu temperature, koja se već nalazi u izvornom članu koji opisuje zračenje. Zamjenom entalpije s $\mathbf{c}_p t$ (2.246) dobije se jednadžba temperature:

$$\mathbf{a}_{h,P} \mathbf{c}_{p,P} t_P = \sum_{np} \mathbf{a}_{h,np} \mathbf{c}_{p,np} t_{np} + \mathbf{b}_h \quad (3.165)$$

Radi kraćeg pisanja uvode se posebni koeficijenti temperaturne jednadžbe:

$$\mathbf{a}_{t,P} t_P = \sum_{np} \mathbf{a}_{t,np} t_{np} + \mathbf{b}_t \quad (3.166)$$

Koeficijent $\mathbf{a}_{t,E}$ (a tako i svi ostali susjedni koeficijenti) u odnosu na $\mathbf{a}_{h,E}$ iznosi:

$$\mathbf{a}_{t,E} = \mathbf{a}_{h,E} \mathbf{c}_{p,E} \quad (3.167)$$

Centralni koeficijent temperaturne jednadžbe $\mathbf{a}_{t,P}$ dobije se zbrajanjem koeficijenata za entalpijsku jednadžbu (a ne za temperaturnu jednadžbu) i množenjem čitavog izraza s centralnom specifičnom toplinom:

$$\mathbf{a}_{t,P} = \mathbf{a}_{h,P} \mathbf{c}_{p,P} = \sum_{np} \mathbf{a}_{h,np} \mathbf{c}_{p,P} + \mathbf{S}_{h,P} \mathbf{c}_{p,P} \Delta V \quad (3.168)$$

Tablica 3.9. Sistem algebarskih jednadžbi za proračun temperature t **Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije temperature t**

$$a_{t,P} t_P = \sum_{np} a_{t,np} t_{np} + b_{t,R} + b_{t,C} \quad (3.169a)$$

gdje su:

$$a_{t,E} = a_{h,E} c_{p,E} = \left(\left\| -\rho_{P_u} u_{P_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,E}}{\sigma_h (\Delta X_P + \Delta X_E)} \right) \Delta y_P \Delta z_P c_{p,E} \quad (3.169b)$$

$$a_{t,W} = a_{h,W} c_{p,W} = \left(\left\| \rho_{W_u} u_{W_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,W}}{\sigma_h (\Delta X_P + \Delta X_W)} \right) \Delta y_P \Delta z_P c_{p,W} \quad (3.169c)$$

$$a_{t,N} = a_{h,N} c_{p,N} = \left(\left\| -\rho_{P_v} v_{P_v}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,N}}{\sigma_h (\Delta y_P + \Delta y_N)} \right) \Delta x_P \Delta z_P c_{p,N} \quad (3.169d)$$

$$a_{t,S} = a_{h,S} c_{p,S} = \left(\left\| \rho_{S_v} v_{S_v}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,S}}{\sigma_h (\Delta y_P + \Delta y_S)} \right) \Delta x_P \Delta z_P c_{p,S} \quad (3.169e)$$

$$a_{t,U} = a_{h,U} c_{p,U} = \left(\left\| -\rho_{P_w} w_{P_w}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,U}}{\sigma_h (\Delta z_P + \Delta z_U)} \right) \Delta x_P \Delta y_P c_{p,U} \quad (3.169f)$$

$$a_{t,D} = a_{h,D} c_{p,D} = \left(\left\| \rho_{D_w} w_{D_w}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,D}}{\sigma_h (\Delta z_P + \Delta z_D)} \right) \Delta x_P \Delta y_P c_{p,D} \quad (3.169g)$$

$$a_{t,P} = a_{h,P} c_{p,P} = \sum_{np} a_{h,np} c_{p,P} + S_{t,P} \Delta V \quad (3.169h)$$

$$b_{t,C} = \sum_{np} a_{h,np} c_{p,P} (T_n - 273.16) - \sum_{np} a_{t,np} t_{np}^* \quad (3.169i)$$

$$\sum_{k=1}^{n_\alpha} \left[C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] = \text{const} \longrightarrow T_n \quad (3.169j)$$

$$S_{t,P} = 4\alpha\sigma 4(T_P^3)^* \left(1 + \frac{273.15}{t_P^*} \right) \quad (3.169k)$$

Hottelova zonalna metoda:

$$b_{t,R} = 4\alpha\sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_{g_1} \overline{g_1 g_2} \sigma T_{g_1}^4 + \sum_{s_1} \overline{s_1 g_2} \sigma T_{s_1}^4 \quad (3.169l)$$

$$\overline{s_i g_P} = \int_{\Delta V_P} \int_{\Delta A_{s_i}} \frac{\cos \vartheta_{s_i} \alpha \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_i} dV_g \quad (3.169m)$$

$$\overline{g_i g_P} = \int_{\Delta V_P} \int_{\Delta V_{g_i}} \frac{\alpha^2 \tau(r)}{\pi r^2} dV_{g_1} dV_{g_2} \quad (3.169n)$$

Monte Carlo metoda:

$$b_{t,R} = 4\alpha\sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_i Q_{a,i} \quad (3.169o)$$

Pristup integraciji izvora izgaranjem prikazan je u glavi 3.3.5 a izvora zračenjem u glavi 3.4. Kao rezultat integracije izvora izgaranjem dobije se jedan član (3.121) koji prelaskom s koeficijentata iz entalpijske jednadžbe na koeficijente za jednadžbu temperature postaje:

$$b_{t,C} = \sum_{np} a_{h,np} c_{p,P} (T_n - 273.16) - \sum_{np} a_{t,np} t_{np}^* \quad (3.170)$$

Kao rezultat zračenja javljaju se dva izvorna člana. Za slučaj primjene Hottelove zonalne metode to su izraz (3.126) koji se dodaje centralnom koeficijentu, uz transformaciju s entalpije na temperaturu:

$$S_{t,P} = S_{h,P} c_{p,P} = 4\alpha\sigma 4(T_P^3)^* \left(1 + \frac{273.15}{t_P^*} \right) \quad (3.171)$$

te drugi (3.135) koji ostaje na desnoj strani jednadžbe bilance, uz uvjet $b_{h,R} = b_{t,R}$. U slučaju Monte Carlo metode član koji se dodaje centralnom koeficijentu ostaje isti, a slobodni član iznosi:

$$b_{t,R} = 4\alpha\sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_i Q_{a,i} \quad (3.172)$$

3.6. RUBNI UVJETI

Sistemi algebarskih jednadžbi razvijeni prethodno u ovome poglavlju postavljaju funkcionalnu zavisnost neke fizikalne veličine φ u nekom čvoru o šest susjednih čvorova, po jednim sa svake strane prizmatičnog kontrolnog volumena. Kada je taj čvor posljednji u nizu prije granice domene, potrebno je propisati rubnu vrijednost fizikalne veličine φ_B koja je susjedna čvoru φ_P . Postoje tri različita tipa granice. Na ulaznoj granici moraju biti propisane sve transportirane veličine osim tlaka, te još neke termodinamičke veličine. Na zidu koji je nepropusna granica nema konvekcije, nego je transport veličine isključivo vođen difuzijom. Treći tip granice koji se pojavljuje u ovom modelu ložišta je izlazni presjek. Pregled rubnih uvjeta dan je u tab. 3.10.

Rubni kontrolni volumen, onaj koji sadrži čvor na granici, je volumen infinitezimalne debljine. Tom pretpostavkom se postiže analognost rubnog čvora s onima iz domene. Udaljenost između čvora na granici i njemu najbližeg u domeni je pola koraka mreže u tome smjeru. Međutim, izlazni rubni kontrolni volumen nije infinitezimalno tanak, jer je potrebno računati normalnu brzinu na izlazu.

Na ulaznoj granici moraju biti definirane sve transportirane fizikalne veličine osim tlaka. U protivnom model nije dovoljno opisan. Ulazni rubni kontrolni volumen je infinitezimalno tanak.

Tlačna jednadžba koja iako ima izgled općeg algebarskog sistema jednadžbi za proračun fizikalne veličine φ , dobivena je iz jednadžbe kontinuiteta. Prilikom integracije iste prinos mase sa strane rubnog čvora se ne zamjenjuje impulsnom jednadžbom, nego se ostavlja kakav jest. Kako je poznata brzina u rubnom čvoru, nije potrebno definirati tlak niti na ulazu niti na zidu. Kako je brzina na izlazu nepoznata, tu se tlak mora propisati.

Tablica 3.10. Pregled rubnih uvjeta

veličina	ulaz	izlaz	zid
c_P	kao i u domeni	kao i u domeni	$c_P = c_P(T)$, za zrak
ρ	nije definirano	$\rho = \rho_{ref}$	nije definirano
T	propisati	linearna ekstrapolacija	propisati
u	propisati	nulti gradijent, za normalnu komponentu $u = 0$, za ostale komponente	0
v	propisati	<i>idem.</i>	0
w	propisati	<i>idem.</i>	0
Y	propisati	nulti gradijent	0
ε	propisati, 0.88	propisati, 0.4	propisati, 0.88
ζ	1	1	propisati, 0.1
μ	kao i u domeni	kao i u domeni	kao i u domeni
ρ	kao i u domeni	kao i u domeni	$\rho = \rho(T)$, za zrak

Po čitavom izlaznom presjeku normalna brzina mora stvarno izlaziti iz ložišta. Kako je brzina na rubu nepoznata, recirkulacijom na izlazu došlo bi do nerealističnih rezultata unutar domene ili numerička procedura uopće ne bi konvergirala k rješenju [113-114]. Ako je zadovoljen uvjet o izlaznoj brzini, neće biti konvektivnog transporta s čvora na granici na posljednji čvor u domeni. Problem difuzije se može riješiti na više načina. Difuzija se kompletno može zanemariti, čime se doduše pravi greška. Takvo rješenje predlaže Patankar [27]. Drugo rješenje koje se nudi je nulti gradijent veličine ϕ_B na granici. Treći je način, koji je za difuzivni transport temperature odabran za potrebe ovoga rad, linearna ekstrapolacija temperature u čvoru na izlaznoj granici pomoću vrijednosti u dva zadnja čvora u domeni.

Prilikom proračuna radijativnog prijenosa topline na izlaznu površinu treba uzeti u obzir i činjenicu da je izlaz u stvari šupljina koja prima više energije zračenjem nego što bi se dobilo pomoću gornje pretpostavke o rubnoj temperaturi. Zato je za potrebe radijativnog transporta potrebno propisati nižu temperaturu nego što se izračuna ekstrapolacijom.

Za komponente brzina koje nisu normalne na izlazni presjek uzima se da je vrijednost u rubnom čvoru nula, što odgovara računanju uz zanemarenje difuzije. Međutim brzina normalna na izlaz u čvoru na granici domene se mora računati zbog pomaknute mreže, a tek ona sljedeća predstavlja rubni uvjet. Za propisivanje brzine u rubnom čvoru, susjednom izlaznoj brzini, upotrebljena je pretpostavka o nultom gradijentu.

Tlačna jednadžba je u slučaju konstantne gustoće (u stvari neovisne o tlaku) sasvim linearna. Tako je moguće dobiti samo razlike tlakova. Konstanta C dodana tlaku po čitavoj domeni također je rješenje tlačne jednadžbe. Primjenom iterativnih metoda za rješavanje sistema dobiveno će rješenje ovisiti o početnoj pretpostavci polja tlaka. Ovo je moguće izbjeći fiksiranjem jedne vrijednosti tlaka u domeni ili zadavanjem tlaka na izlazu, koji sudjeluje kako u impulsnoj jednadžbi za brzinu normalnu na izlazni presjek, a tako i u samoj tlačnoj jednadžbi. U ovome radu tlak je usidren dvojako. Propisivanjem tlaka na izlazu te ovisnošću gustoće o tlaku. Međutim kod proračunavanja problema prirodne konvekcije u šupljini, dakle situacije gdje nema izlazne granice, i gdje su razlike tlakova tako male da nema govora o

utjecaju tlaka na gustoću, apsolutni će iznos proračunatog tlaka isključivo ovisiti o njegovoj početno pretpostavljenoj distribuciji.

Brzina normalna na nepropusnu granicu kontrolnog volumena jednaka je nuli, a time nema niti konvektivnog transporta s te strane. Kod jednadžbi kod kojih je difuzivni transport zanemaren, kao kod jednadžbi kemijskih vrsta, od strane zida nema nikakvog transporta, pa i iznos fizikalne veličine φ_B na zidu ne utječe na distribuciju po domeni. U impulsnim jednadžbama za dvije komponente brzine koje nisu normalne na zid postoji difuzivni transport, ali je vrijednost tih brzina zbog lijepljenja fluida na stijenku nula. Za jednadžbu temperature potrebno je međutim propisati temperaturu u svim čvorovima na zidu zbog difuzivnog i radijativnog transporta.

Termodinamičke veličine se mogu izračunati iz propisanih pomoću prethodno definiranih konstitutivnih relacija. Procjena je da je emisivnost ulazne površine slična kao i zida. Kako na ulaznom i izlaznom rubnom elementu postoji konvekcija nije potrebno vršiti korekciju prijelaza topline kondukcijom na zid, dakle $\zeta = 1$. Pokazalo se međutim da rezultati najbolje odgovaraju stvarnosti ako se iznos tog faktora na zidu propiše s $\zeta = 0.1$. Na taj se način uzima u obzir veliki nelinearni gradijent profila temperature uza zid. Kad bi se prilikom generiranja mreže, u viskozni podsloj stavilo veliki broj kontrolnih volumena, potreba za ovom korekcijom bi iščezla.

3.7. RJEŠAVANJE LINEARNOG SISTEMA ALGEBARSKIH JEDNADŽBI

Nakon izračunavanja koeficijenata u jednadžbi (3.25), na temelju pretpostavljenih vrijednosti, ona se privremeno može smatrati linearnim sistemom algebarskih jednadžbi. Taj je sistem moguće riješiti jednom od metoda za rješavanje linearnih sistema jednadžbi i time dobiti distribuciju fizikalne veličine φ po čitavom ložištu obzirom na zadane koeficijente:

$$\mathbf{a}_{\varphi,P} \varphi_P = \mathbf{a}_{\varphi,E} \varphi_E + \mathbf{a}_{\varphi,W} \varphi_W + \mathbf{a}_{\varphi,N} \varphi_N + \mathbf{a}_{\varphi,S} \varphi_S + \mathbf{a}_{\varphi,U} \varphi_U + \mathbf{a}_{\varphi,D} \varphi_D + \mathbf{b}_\varphi \quad (3.173)$$

Kod odabira metode rješavanja treba voditi računa da je matrica sistema izrazito rijetka, dakle da će većina koeficijenata biti nula, te da je popunjeno samo sedam dijagonala. Odabrana je metoda rješavanja sistema koja je najčešće zastupljena u literaturi, iterativna linijska Gauss-Seidelova metoda (engl. *line Gauss-Seidel*, LGS).

Gauss-Seidelova metoda sukcesivno rješava jednadžbu (3.173) za svaki φ_P tako da susjedne vrijednosti veličine φ prethodno pretpostavi. Izračunata vrijednost φ_P postaje nova pretpostavka za taj čvor.

$$\varphi_P = \frac{\sum_{np} \mathbf{a}_{\varphi,np} \varphi_{np} + \mathbf{b}_\varphi}{\mathbf{a}_{\varphi,P}} \quad (3.174)$$

Nakon što su izračunate vrijednosti fizikalne veličine φ u svim čvorovima domene, kreće se iz početka, i tako sve dok razlike između pretpostavljene i izračunate vrijednosti za sve čvorove ne padnu ispod dozvoljenog odstupanja.

Linijska Gauss-Seidel metoda je varijacija Gauss-Seidelove metode u kojoj se ne rješava sukcesivno svaka nepoznanica za sebe, nego se odjednom rješava jednodimenzionalna poddomena Thomasovim algoritmom (dodatak D). Za jednodimenzionalnu poddomenu odabere se dimenzija koja ima najviše kontrolnih volumena u svom smjeru. Recimo da je to u smjeru x -osi. Tada se sljedeća tridijagonalna matrica sustava rješava Thomasovim algoritmom:

$$a_{\varphi,P}\varphi_P = a_{\varphi,E}\varphi_E + a_{\varphi,W}\varphi_W + b'_\varphi \quad (3.175)$$

gdje je:

$$b'_\varphi = a_{\varphi,N}\varphi_N + a_{\varphi,S}\varphi_S + a_{\varphi,U}\varphi_U + a_{\varphi,D}\varphi_D + b_\varphi \quad (3.176)$$

Prijeđe li se međutim na veći broj elemenata, reda veličine 10^3 – 10^5 , dosad opisana iterativna metoda će vrlo sporo konvergirati prema rješenju. Naročito je sporo konvergiranje prilikom rješavanja tlačne jednadžbe. Za ubrzavanje konvergencije primijenjena je višemrežna korektivna metoda (multigrid) razvijena prema [53-55] i opisana u dodatku E.

3.7.1. Relaksiranje

Linijska Gauss-Seidel metoda rješavanja algebarskog sistema jednadžbi može u nekim situacijama divergirati. Tada treba konvergenciju usporiti podrelaksacijom. Konvergencija se može i ubrzati nadrelaksacijom. Privremeno se rješenje (međurješenje) relaksira na sljedeći način:

$$\varphi_P = \iota_\varphi \left(\frac{\sum_{np} a_{\varphi,np} \varphi_{np} + b_\varphi}{a_{\varphi,P}} \right) + (1 - \iota_\varphi) \varphi_P^* \quad (3.177)$$

gdje je ι_φ faktor relaksacije, a φ_P^* prethodna pretpostavka, koja tijekom iterativnog procesa postane jednaka izračunatoj vrijednosti φ_P . Kad je faktor relaksacije manji od jedan konvergencija se usporava (podrelaksira). Međutim kad je faktor veći od 1 konvergencija se ubrzava i to se zove nadrelaksacija.

Drugi način relaksiranja je pomoću inercije. Jednadžba (3.174) konstruira se na sljedeći način:

$$(a_{\varphi,P} + \iota_\varphi) \varphi_P = \sum_{np} a_{\varphi,np} \varphi_{np} + b_\varphi + \iota_\varphi \varphi_P^* \quad (3.178)$$

Pozitivna vrijednost inercije ι_φ usporava konvergenciju, a negativna ju ubrzava.

Osim toga prilikom rješavanja modela vršena je podrelaksacija koeficijentata u impulsnim jednadžbama, temperature, gustoće, koeficijenta viskoznosti, brzine produkcije kemijske vrste, volumenskog toplinskog toka izgaranjem te inicijalnih vrijednosti temperature i masenih udjela kemijskih vrsta, tako da je prilikom izračunavanja istih uzet jedan udio nove vrijednosti, a jedan udio prethodne vrijednosti:

$$\varphi = \iota_\varphi \varphi' + (1 - \iota_\varphi) \varphi^* \quad (3.179)$$

gdje je φ' nova vrijednost izračunata nekim postupkom, a φ^* vrijednost koju je varijabla imala prije postupka proračuna.

Općenito je nemoguće dati upute o upotrebi relaksiranja. Svaki slučaj zahtijeva posebnu pažnju. Ako se javljaju problemi s konvergiranjem pojedinog iterativnog postupka treba uvesti podrelaksaciju.

3.8. ALGORITAM ZA RJEŠAVANJE SPREGNUTIH SISTEMA NELINEARNIH ALGEBARSKIH JEDNADŽBI

Rješavanjem linearnog sistema algebarskih jednadžbi (3.25) za svaku fizikalnu veličinu ne dobije se konačno rješenje. Iako je jednadžba (3.25) prikazana kao linearna, nelinearnost je sadržana u koeficijentima. Neke jednadžbe su međusobno spregnute, tj. rješenja jedne ovise o rješenjima druge i obrnuto. Tako zbog konvektivnog transporta sve ostale fizikalne veličine ovise o brzinama. Brzine pak ovise o tlaku i gustoći, koja je opet funkcija temperature. Temperatura je preko izvora izgaranjem snažno spregnuta s jednadžbama kemijskih vrsta.

U literaturi se mogu naći mnogobrojni algoritmi za rješavanje spregnutih sistema koji opisuju strujanje fluida. Najpoznatiji među njima su svakako SIMPLE, SIMPLER i PISO. Da bi se iznio algoritam koji je korišten u ovome radu prvo će se dati pregled tih algoritama.

SIMPLE

Algoritam SIMPLE predložen u [48] rješava jedan sistem za drugim vraćajući se nakon prolaska kroz sve sisteme opet na početak. Ovaj iterativni algoritam polazi od pretpostavke polja tlaka p^* . Umjesto tlačne jednadžbe rješava jednadžbu korekcije tlaka p' . Ona se od jednadžbe (3.86) razlikuje po tome što se u izrazu za koeficijent b_p ne nalaze pseudobrzine \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} nego posljednje izračunate brzine u^* , v^* , w^* :

$$b_p = (\rho_{P_u} u_{P_u}^* - \rho_{W_u} u_{W_u}^*) \Delta y_P \Delta z_P + (\rho_{P_v} v_{P_v}^* - \rho_{S_v} v_{S_v}^*) \Delta x_P \Delta z_P + (\rho_{P_w} w_{P_w}^* - \rho_{D_w} w_{D_w}^*) \Delta x_P \Delta y_P \quad (3.180)$$

Algoritam se može predstaviti sljedećim nizom koraka:

1. Pretpostavi se polje tlaka p^* .
2. Nađu se rješenja jednadžbe količine gibanja da bi se dobile distribucije u^* (3.67), v^* (3.71), w^* (3.72).
3. Riješi se jednadžba korekcije tlaka p' .
4. Izračuna se polje tlaka zbrajanjem pretpostavke i korekcije $p = p^* + p'$.
5. Brzine u^* , v^* , w^* korigiraju se korekcijom tlaka i dobiju se brzine u (3.74), v (3.78), w (3.82).
6. Riješe se jednadžbe kemijskih vrsta (3.162) i temperature (3.169).
7. Izračunaju se svojstva fluida iz dobivenih brzina, tlaka, temperature i koncentracija.
8. Korigirani tlak p uzme se kao nova pretpostavka p^* te se vrati na točku 2, sve dok se ne dobije konvergirano rješenje.

SIMPLER

Poboljšanje tog postupka ponudili su isti autori pod imenom SIMPLER. Ovaj algoritam za razliku od prethodnog rješava i tlačnu jednadžbu i jednadžbu korekcije tlaka:

1. Pretpostave se brzine.
2. Izračunaju se pseudobrzine \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} (3.86m-o).
3. Riješi se jednadžba tlaka p^* (3.86).
4. Riješe se jednadžbe količine gibanja da bi se dobile distribucije u^* (3.67), v^* (3.71), w^* (3.72).
5. Izračunaju se koeficijenti b_p (3.180) tako da se umjesto pseudobrzina koriste posljednje izračunate vrijednosti brzina u^* , v^* , w^* te se riješi jednadžba korekcije tlaka p' na isti način kao u SIMPLE-u.
6. Brzine u^* , v^* , w^* korigiraju se korekcijom tlaka i dobiju se brzine u (3.74), v (3.78), w (3.82).
7. Riješe se jednadžbe kemijskih vrsta (3.162) i temperature (3.169).
8. Izračunaju se svojstva fluida iz dobivenih brzina, tlaka, temperature i koncentracija.
9. Korigirane brzine u , v , w uzmu se kao nove pretpostavke te se vrati na točku 2, sve dok se ne dobije konvergirano rješenje.

PISO

Algoritam PISO [50] bazira se na rastavljanju jednadžbi na taj način da se dokine utjecaj na točnost rezultata rješavanja tlačne jednadžbe činjenice da brzine izračunate iz jednadžbe količine gibanja ne zadovoljavaju jednadžbu kontinuiteta. Umjesto iterativnog postupka, PISO sadrži predikciju i dvije korekcije za rješavanje jednadžbi koje opisuju strujanje, što daje vrlo dobre rezultate kod nestacionarnog slučaja.

Prilikom rješavanja stacionarnog problema povećanjem vremenskog koraka u beskonačnost dvije korekcije više nisu dostatne, a također pretpostavka o linearnosti nikako nije zadovoljena. Zato se u primjeni PISO algoritma za rješavanje stacionarnog strujanja koristi (engl.) *time-marching* [51] procedura. Stacionarnom se stanju, umjesto iterativnim postupkom, približava u malim vremenskim koracima rješavanjem nestacionarnih transportnih jednadžbi. Takav način rješavanja problema sa stacionarnim rubnim uvjetima odgovara stvarnosti, jer se stacionarni oblik diferencijalnih jednadžbi može shvatiti kao nestacionarni s beskonačno velikim vremenskim korakom. Procesorsko vrijeme rješavanja je istog reda veličine kao i da se računa iterativno. Prema [51] postupak PISO je pokazao superiornost nad algoritmom SIMPLER prilikom rješavanja modela strujanja bez dodatnih skalarnih jednadžbi, dakle bez jednadžbi $k-\varepsilon$ modela turbulencije, transporta kemijskih vrsta ili temperature. Postupak se međutim komplicira dodavanjem tih transportnih jednadžbi, a naročito spregnutih jednadžbi kemijskih vrsta i temperature. U tom slučaju je prema istom radu algoritam SIMPLER superiorniji. Ovdje je algoritam dan samo za jednadžbe strujanja za slučaj beskonačnog vremenskog koraka:

Predikcija:

1. Pretpostavi se polje tlaka p .
2. Riješe se jednadžbe količine gibanja da bi se dobile distribucije u^* (3.67), v^* (3.71), w^* (3.72). Ove brzine generalno ne zadovoljavaju jednadžbu kontinuiteta.

Prva korekcija:

3. Riješi se jednadžba tlaka p^* (3.86).

- Izračunaju se brzine u^{**} , v^{**} , w^{**} iz jednadžbi (3.67, 3.71, 3.72) tako da se na mjestu susjednih brzina uzmu prije izračunate brzine u^* , v^* , w^* te tlak p^* . Ako je korištena shema kontrolnih volumena to u potpunosti odgovara korekciji tlakom p^* prema jednadžbama (3.74), (3.78) i (3.82) pseudobrзина izračunatih iz brzina u^* , v^* , w^* . Ove brzine zadovoljavaju jednadžbu kontinuiteta.

Druga korekcija:

- Riješi se jednadžba tlaka p^{**} (3.86).
- Izračunaju se brzine u^{***} , v^{***} , w^{***} iz jednadžbi (3.67, 3.71, 3.72) tako da se na mjestu susjednih brzina uzmu prije izračunate brzine u^{**} , v^{**} , w^{**} te tlak p^{**} . Kao i u prvoj korekciji ako je korištena shema kontrolnih volumena to u potpunosti odgovara korekciji tlakom p^{**} prema jednadžbama (3.74), (3.78) i (3.82) pseudobrзина izračunatih iz brzina u^{**} , v^{**} , w^{**} . Ove brzine zadovoljavaju i jednadžbu kontinuiteta i jednadžbu količine gibanja.

Modifikacija:

Zbog jake spregnutosti ostalih transportnih jednadžbi s jednadžbama strujanja i velikog broja korekcija koje bi trebale biti upotrebljene, u ovome radu je zadržan iterativni postupak rješavanja. Točnost rješenja brzina i tlaka nakon jednog prolaza krugom prediktor-korektor prestaje biti važna zbog značajne ovisnosti tih veličina o temperaturi i koncentracijama preko gustoće. Jednadžbe količine gibanja u korektivnim koracima PISO postupka identični su korekciji brzina u jednadžbama (3.74), (3.78) i (3.82). Postupak korišten u ovome radu može se smatrati modifikacijom PISO algoritma:

- Pretpostave se sve relevantne fizikalne veličine
- Riješe se jednadžbe količine gibanja da bi se dobile distribucije u (3.67), v (3.71), w (3.72).

Korekcije tlak-brzina

- Izračunaju se pseudobrzone \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} (3.86m-o).
- Riješi se jednadžba tlaka p .
- Pseudobrzone \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} korigiraju se novoizračunatim tlakom i dobiju se brzine u (3.74), v (3.78), w (3.82).
- Vraća se na točku 3. Taj se postupak ponavlja zadani broj puta.
- Riješe se jednadžbe kemijskih vrsta (3.162) i temperature (3.169).
- Izračunaju se svojstva fluida (gustoća, efektivna dinamička viskoznost, specifična toplina) iz dobivenih brzina, tlaka, temperature i koncentracija.
- Izračunate veličine uzmu se kao nove pretpostavke i vraća se na točku 2, sve dok se ne dobije konvergirano rješenje.

Pokazalo se da se optimalni rezultati dobivaju s tri do pet korekcija za model strujanja, uz pretpostavku konstantnih koeficijenata, iako autor PISO algoritma tvrdi da su dvije korekcije dovoljne. To treba pripisati beskonačno velikom vremenskom koraku. Zbog nelinearnosti, tj. zbog ovisnosti koeficijenata u općoj algebarskoj jednadžbi (3.25) o brzinama i gustoći, a time i o tlaku, temperaturi i koncentracijama, mora se s obzirom na beskonačno veliki vremenski korak strujanje računati iterativno. Između dva proračuna strujanja potrebno je riješiti ostale skalarne transportne jednadžbe, te izračunati svojstva fluida.

Postupak se ponavlja dok se ne postigne konvergencija iterativnog postupka na globalnom nivou. Kao uvjet konvergencije koristi se rezidual na jednadžbi kontinuiteta, što se prema

iskustvu uz kontrolu reziduala na ostalim jednadžbama pokazalo dovoljno, koji se za jedan kontrolni volumen računa na sljedeći način:

$$\begin{aligned}
 R_P = & (\rho_w u_{W_u} - \rho_e u_{P_u}) \Delta y_P \Delta z_P + \\
 & (\rho_s v_{S_v} - \rho_n v_{P_v}) \Delta x_P \Delta z_P + \\
 & (\rho_d w_{D_w} - \rho_u w_{P_w}) \Delta x_P \Delta y_P
 \end{aligned} \tag{3.181}$$

Zbroj apsolutnih vrijednosti masenih reziduala po čitavoj domeni:

$$R = \sum_{i=1}^{n_x} \left[\sum_{j=1}^{n_y} \left[\sum_{k=1}^{n_z} |R_P^{i,j,k}| \right] \right] \tag{3.182}$$

mora biti manji od neke dozvoljene greške:

$$R \leq \varepsilon \tag{3.183}$$

4. REZULTATI

U svrhu testiranja matematičkog modela procesa u ložištu generatora pare, postavljenog u ovome i prethodnim radovima [52, 54-55, 73, 76, 94-96, 111, 116-124], izgrađen je programski paket ZONAL. Program je pisan u programskom jeziku C, te obuhvaća 20500 linija koda. Razvijan je za više kompjuterskih platformi. Na PC-u se program može izvoditi kao 16-bitna DOS i konzolna Windows aplikacija, te kao 32-bitna konzolna Windows aplikacija. Na radnim stanicama koje rade pod Unix operacionim sustavom program je izvođen na sljedećim konfiguracijama: Alpha 2000, Sun Ultra, Sun 10, Prime EXL-7030, SGI Indigo. Prilikom programiranja vođeno je računa o automatskoj prenosivosti koda na sve te platforme. Uglavnom se pokazalo da je prilagođavanje koda novoj platformi jednostavno, ukoliko se prilikom pisanja koda vodi računa o korištenju standardnih ANSI C funkcijskih biblioteka. Interaktivni grafički paket je međutim pisan u neprenosivom kodu, tako da radi samo na 16-bitnom DOS platformi. Također, postprocesorska aplikacija DRAW kojom su obrađivani rezultati u ovome radu, napravljena uz programski paket ZONAL, može se koristiti samo pod DOS-om.

Matematički model procesa u ložištu generatora pare rješavan je na različitim mrežama. Bez uvođenja detaljnog kinetičkog modela izgaranja najveće primijenjene mreže su iznosile do 65000 kontrolnih volumena, a s njegovom primjenom do 10000 kontrolnih volumena.

Model prijenosa topline i mase testiran je na različitim problemima. Modeliranje prirodne konvekcije u šupljini, često primjenjivanog testa u numeričkoj dinamici fluida, prikazano je u [120, 52]. Model turbulencije provjeren je u [124]. Model koji obuhvaća zonalnu metodu proračuna izmjene topline zračenjem i globalni model izgaranja mazuta, izgrađen prema [125], uspoređen je s rezultatima mjerenja dobivenim na eksperimentalnom ložištu u Ijmuidenu [3] u radovima [121, 52]. Isti je model uspoređen s normativnim proračunom [2] na realnom objektu, TE Sisak, u [119, 123-124, 52]. Globalni model izgaranja plinskog goriva uspoređen je s rezultatima dobivenim normativnim proračunom na oba objekta u [76]. Model prijenosa topline zračenjem računat metodom Monte Carlo testiran je u [94, 96], a uključivo model ostalih procesa u ložištu u [73, 111, 116, 119]. U ovom se radu pretpostavlja da model prijenosa topline i mase sa svim svojim modulima daje za sebe zadovoljavajuće rezultate.

Detaljni kinetički model izgaranja plina je testiran na jednostavnom primjeru izgaranja smjese vodika i zraka za koji postoje rezultati objavljeni u literaturi [126]. Takav je model (model kemijskog reaktora) osim toga primijenjen i na izgaranje smjese vodika i kisika, metana i zraka, te prirodnog plina i zraka što je prikazano u glavi 2.2.

U sljedeća je dva primjera testirana sprega između kinetičkog modela i modela prijenosa topline i mase s rezultatima normativnog proračuna vertikalnog ložišta TE SISAK i s rezultatima mjerenja dobivenim na eksperimentalnom ložištu u Ijmuidenu [3].

4.1. IZGARANJE U SISTEMU H₂-ZRAK

Radhakrishnan [126] je usporedio različite numeričke metode integracije na primjeru izgaranja vodika u zraku s početnom temperaturom od 1500 K i tlakom od 2 bar. U tablici 4.1 dani su početni molarni udjeli svih kemijskih vrsta koje su uzete u obzir. To je isti primjer obrađen u poglavlju 2.2.8. Osim kemijskih vrsta koje sudjeluju u izgaranju vodika u kisiku (tab. 2.1) uzeti su još u obzir i dušikovi spojevi prema tablici 2.3. Primijenjen je mehanizam reakcija prikazan na slikama 2.1 i 2.4, te s pripadnim koeficijentima reakcija danim pod rednim brojevima 1-37 u tablici 2.6. Rezultat simulacije tog sistema je prikazan na slici 2.5.

Tablica 4.1. Početni molarni udjeli kemijskih vrsta

kemijska vrsta	početna vrijednost [kmol/kmol]
H	0.0000
H ₂	0.2951
O	0.0000
O ₂	0.1480
OH	0.0000
H ₂ O	0.0000
HO ₂	0.0000
H ₂ O ₂	0.0000
N	0.0000
N ₂	0.5501
NO	0.0000
N ₂ O	0.0000
NO ₂	0.0000
CO ₂	0.0002
Ar	0.0066
temperatura	1500 K

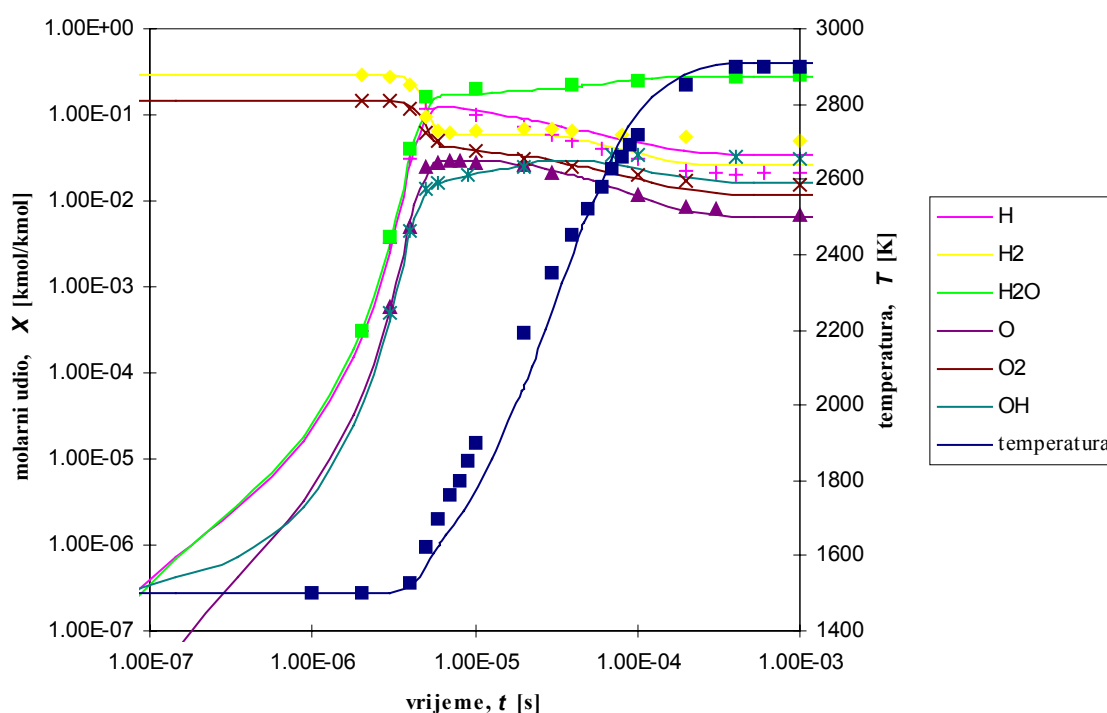
Na slici 4.1 prikazana je usporedba s rezultatima u [126] za temperaturu i za molarne udjele najvažnijih kemijskih vrsta. Primjećuje se uglavnom vrlo dobro slaganje među rezultatima. Kontinuiranom linijom su prikazani rezultati simulacije, a s oznakama (u pripadnoj boji) rezultati prema [126]. Može se smatrati da je nakon vremena od $5 \cdot 10^{-4}$ s postignuto ravnotežno stanje, tj. da nakon toga vremena nema više promjene u molarnim udjelima kemijskih vrsta i temperature.

Tablica 4.2. Ravnotežni molarni udjeli dušikovih spojeva

kemijska vrsta	ovaj model [kmol/kmol]	lit. [126] [kmol/kmol]
N ₂	$6.12 \cdot 10^{-1}$	$6.08 \cdot 10^{-1}$
NO	$6.91 \cdot 10^{-3}$	$9.75 \cdot 10^{-3}$
N ₂ O	$3.88 \cdot 10^{-7}$	$6.35 \cdot 10^{-7}$
NO ₂	$1.98 \cdot 10^{-6}$	$1.97 \cdot 10^{-6}$

Slaganje ravnotežnih vrijednosti je vrlo dobro za temperaturu i za molarne udjele atomarnog i molekularnog kisika, dok je očit mali višak molekularnog, a manjak atomarnog vodika. Što se tiče dušičnih oksida (tabl. 4.2) slaganje za ravnotežne molarne udjele dušik (IV) oksida je odlično, dok su za dušik (II) oksid i dušik (I) oksid vrijednosti proračunate ovim modelom nešto podcijenjene u odnosu na vrijednosti objavljene u [126]. Kao objašnjenje razlika se može navesti da je korišten nešto različit sistem reakcija nego u [126], preuzet iz novije literature.

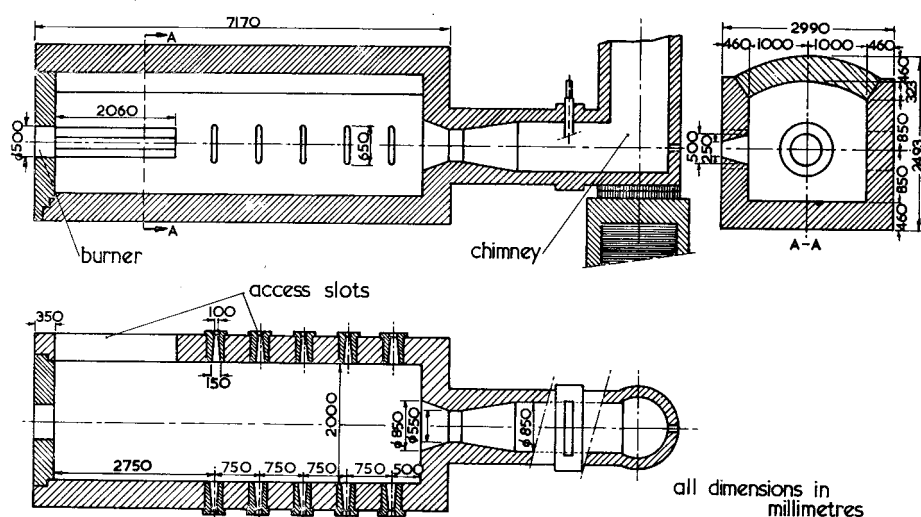
Slaganje rezultata tijekom izgaranja je vrlo dobro, osim što temperaturna krivulja u jednom periodu malo "kasni". Za molarne udjele kemijskih vrsta slaganje je odlično, naročito u području velikih gradijenata, što upućuje na dobar odabir sistema reakcija i postupka integracije.



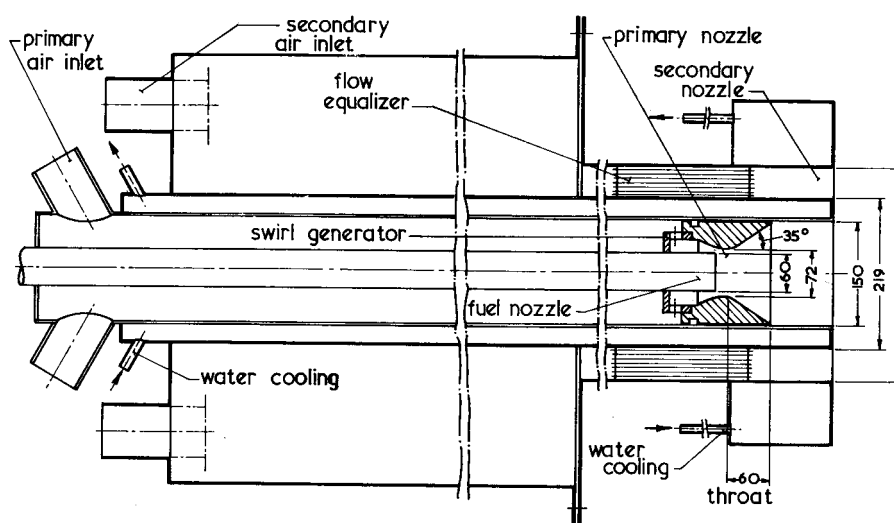
Slika 4.1. Usporedba rezultata dobivenih simulacijom sistema reakcija vodik-zrak prema tablici 2.6, reakcije 1-37, prikazanih kontinuiranom linijom, s podacima prema [126], prikazanih oznakama (u pripadnoj boji)

4.2. HORIZONTALNO LOŽIŠTE

Rezultati mjerenja na horizontalnom eksperimentalnom ložištu u IJmuidenu opširno su prikazani u [3]. Ložište je u obliku horizontalno položenog kvadra, sl. 4.2, s blago zaobljenim stropom, dimenzija $6.25 \times 2.0 \times 2.023 \text{ m}^3$, s vrtložnim plamenikom prema slici 4.3. Uspoređeni su podaci pri izgaranju plinskog goriva, čiji je sastav dan u tablici 4.3. Prilikom modeliranja udio propana i butana u gorivu je pridodan etanu, što je zbog vrlo malog udjela tih ugljikovodika u gorivu zanemariva greška. Gorivo, zajedno s jednim dijelom zraka ulazi na primar vrtložnog gorionika, a ostatak zraka ulazi na sekundar i služi kao stabilizirajuća struja. Podaci su dani u tablici 4.4. Ovakav je gorionik vrlo teško modelirati, ne samo zbog komplicirane geometrije i zbog vrtloga, nego i zbog nekoliko različitih mehanizama izgaranja koje se ovdje pojavljuju. U području primarne struje nalazi se predmiješana smjesa s podstehiometrijskom količinom kisika, dakle kinetički plamen. Na granici primara i sekundara zrak se dovodi difuzijom, pa je prema tome plamen vođen tih mehanizmom.



Slika 4.2. Presjek eksperimentalnog ložišta, IJmuiden [3]



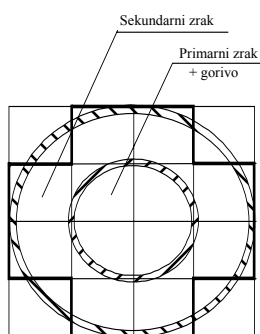
Slika 4.3. Presjek vrtložnog gorionika [3]

Mjerenja temperature te udjela nekih kemijskih vrsta izvršena su u horizontalnoj ravnini u visini plamenika na 113 mjernih mjesta. Da bi se dobila distribucija veličina po čitavom presjeku ložišta, vrijednosti su u ostalim točkama interpolirane, što je moglo utjecati na kvalitetu slike u područjima u kojima je broj mjernih točaka bio značajno manji.

Tablica 4.3. Sastav plinskog goriva

sastav	mjereno [m ³ /m ³]	modelirano [m ³ /m ³]
CH ₄	0.8130	0.8130
C ₂ H ₆	0.0285	0.0339
C ₃ H ₈	0.0040	
C ₄ H ₁₀	0.0014	
N ₂	0.1435	0.1435
CO ₂	0.0089	0.0089

Kako bi se simulirao vrtlog primarne struje goriva i zraka gorionika koji se ispravlja normalno usmjerenom strujom sekundarnog zraka, presjek gorionika je podijeljen na 12 kontrolnih površina (4-primar, 8-sekudar) kao što je prikazano na slici 4.4. Odabrani broj kontrolnih površina je premali da bi se vjerno simulirao vrtložni plamenik (sl. 4.3), ali je zbog ograničenja na snazi računala (po CPU vremenu) taj broj bio uzet kao najbolji kompromis. To će dovesti do filtriranja ekstrema (usrednjavanja) i gubitka jednog dijela informacije u području visokih gradijenata, što može imati značajan utjecaj na model izgaranja koji je vrlo senzitiv u odnosu na mikropojave. Međutim, kako pokazuju rezultati, odabrana je mreža zadovoljavajuća.



Slika 4.4. Podjela presjeka gorionika na kontrolne površine

Mjerenja distribucija temperature u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika prikazana je na slici 4.5. Na prvi se pogled primjećuje nesimetričnost slike. To je posljedica vrtloga u primarnoj struji, koji iako pod utjecajem izravnavajuće sekundarne struje ipak izaziva rotacionu komponentu po čitavom ložištu. Na slici 4.6 prikazana je distribucija temperature izračunata modelom opisanim u ovome radu. Na slici 4.7 uspoređene su mjerena i računata temperatura uzduž osi gorionika. Slaganje je prilično dobro s obzirom na grubost mreže. U području gorionika očituje se veća uprosječenost temperatura, što onda odvođa do kasnijeg zapaljenja smjese, ali i nešto naglijeg hlađenja.

Slike 4.8 i 4.9 prikazuju respektivno mjerenu i računatu distribuciju metana u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika, a slika 4.10 uspoređuje mjereni i računati maseni udio metana uzduž osi gorionika. Slaganje je vrlo dobro, osim što je mjereni maseni udio metana na 0.37 m od gorionika veći od udjela u primarnoj struji gorionika, što je sasvim nevjerojatni podatak i vjerojatno je posljedica greške u mjerenju.

Tablica 4.4. Podaci o gorioniku

ulaz	gorivo			zrak		
	\dot{m} [kg/s]	u [m/s]	t [°C]	\dot{m} [kg/s]	u [m/s]	t [°C]
primar	0.0461	50	15	0.1205	85.0	25
sekundar	-	-	-	0.5125	11.7	47

Slike 4.11 i 4.12 prikazuju respektivno mjerenu i računatu distribuciju kisika u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika, a slika 4.13 uspoređuje mjereni i računati maseni udio kisika uzduž osi gorionika. Iako je vizualni efekt slaganja distribucija dobar, usporedba uzduž osi gorionika prikazuje značajno kasniji pad udjela kisika. To se može kao i kod temperature objasniti kasnijim paljenjem smjese u primaru. Na slici 4.11 očito je vrlo nagli pad masenog udjela kisika u struji primara, gotovo odmah nakon izlaska smjese iz gorionika, dok se taj mehanizam u struji računatog primara pojavljuje tek kasnije.

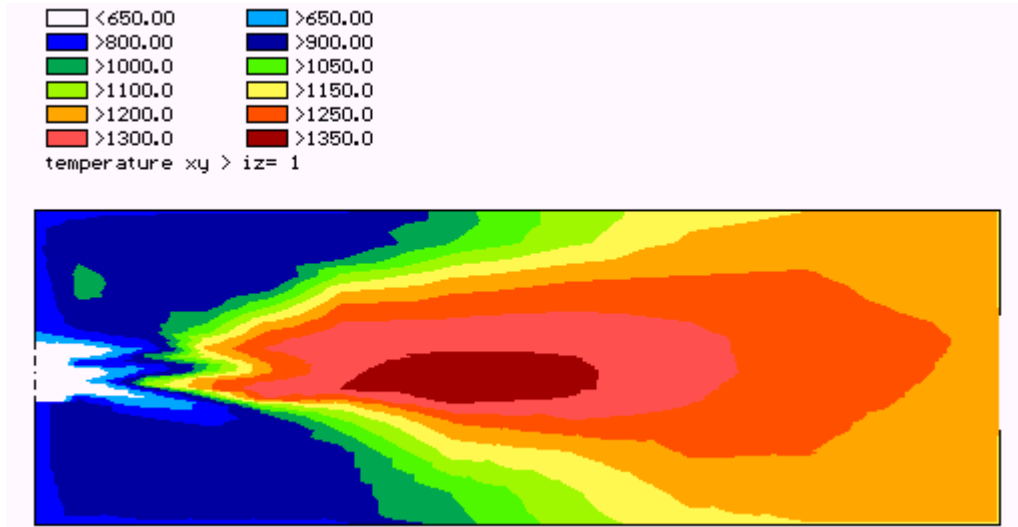
Slike 4.14 i 4.15 prikazuju respektivno mjerenu i računatu distribuciju ugljik (IV) oksida u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika, a slika 4.16 uspoređuje mjereni i računati maseni udio ugljik (IV) oksida uzduž osi gorionika. Prikazane distribucije masenih udjela daju dobar vizualni efekt slaganja.

Slike 4.17 i 4.18 prikazuju respektivno mjerenu i računatu distribuciju ugljik (II) oksida u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika, a slika 4.19 uspoređuje mjereni i računati maseni udio ugljik (II) oksida uzduž osi gorionika. Distribucije se vrlo dobro slažu, osim što u centru plamena model ne može uhvatiti nagli uspon i pad masenog udjela, što se vidi na usporedbenom dijagramu u osi gorionika.

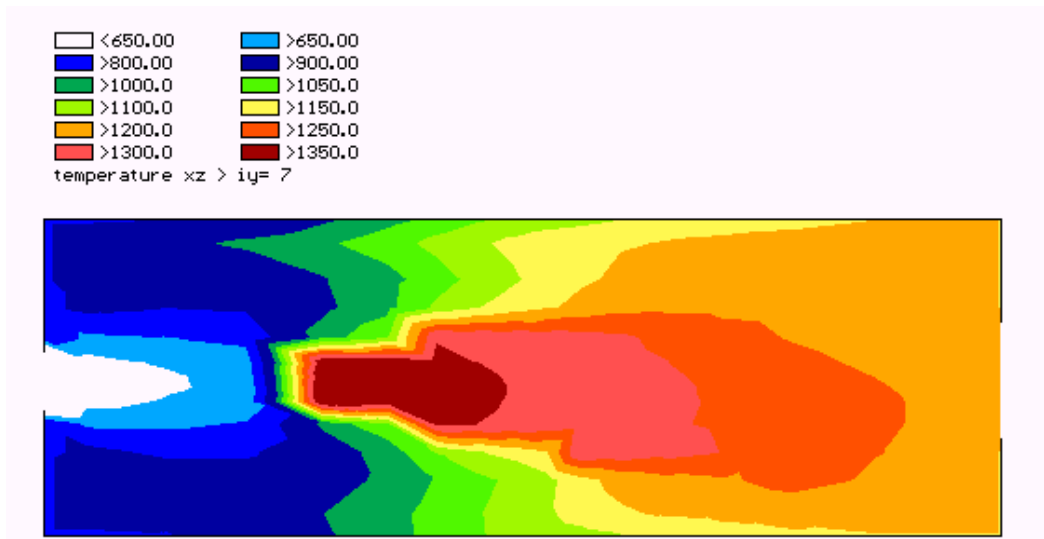
Slike 4.20 i 4.21 prikazuju respektivno mjerenu i računatu distribuciju radikala C_2H_4 u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika, a slika 4.22 uspoređuje mjereni i računati maseni udio tog radikala uzduž osi gorionika. Distribucije se vrlo dobro slažu. Ovaj je radikal značajan za C_2 lanac izgaranja metana, koji je od velike važnosti pri izgaranju smjesa bogatih kisikom, kao što je slučaj u ložištima.

Slika 4.23 prikazuje distribuciju brzina u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika. Uočljiva je zona recirkulacije. Iz te se slike može vidjeti i mreža koja je korištena pri modeliranju. Najgušća mreža je u zoni plamena, koja pri izgaranju plinskog goriva nije uz sam gorionik, nego u središtu ložišta.

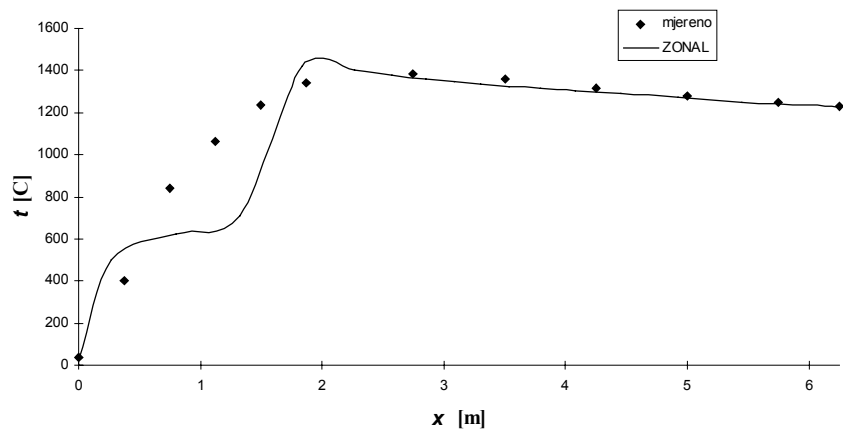
Slika 4.24 prikazuje izračunate distribucije različitih radikala i spojeva koji sudjeluju u procesu izgaranja, redom vode, elementarnog kisika i vodika, vodikovog peroksida, radikala HO_2 , vodika i radikala OH . Uočljivo je da vodikov peroksid i radikal HO_2 postižu maksimalne masene udjele u hladnom dijelu primarne struje, da bi u zoni zapaljenja naglo nestali. Obrnuto, vodik, elementarni kisik i vodik, te hidrosilni radikal imaju vrlo niske masene udjele u hladnoj primarnoj struji, te u zoni plamena naglo postižu maksimum.



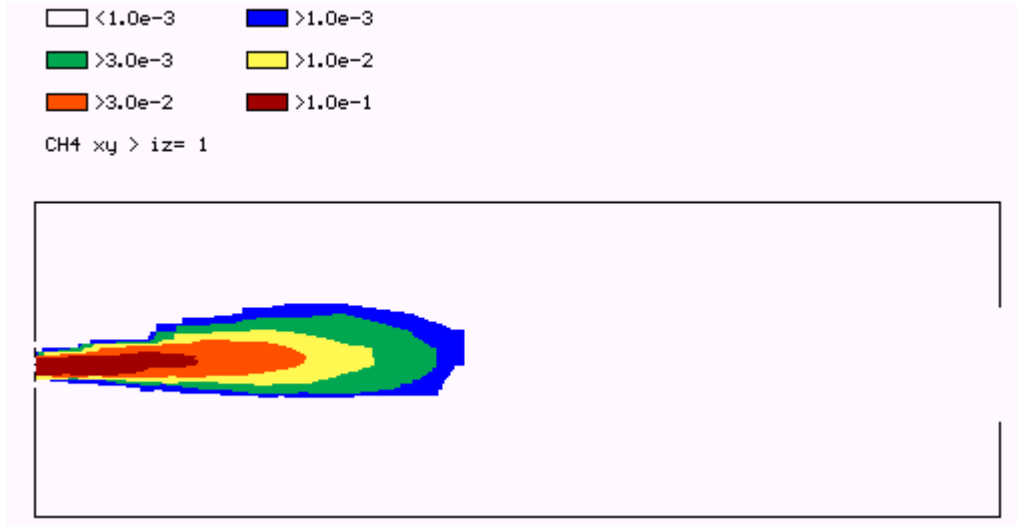
Slika 4.5. Mjerena distribucija temperature u horizontalnoj ravni ložišta u visini gorionika



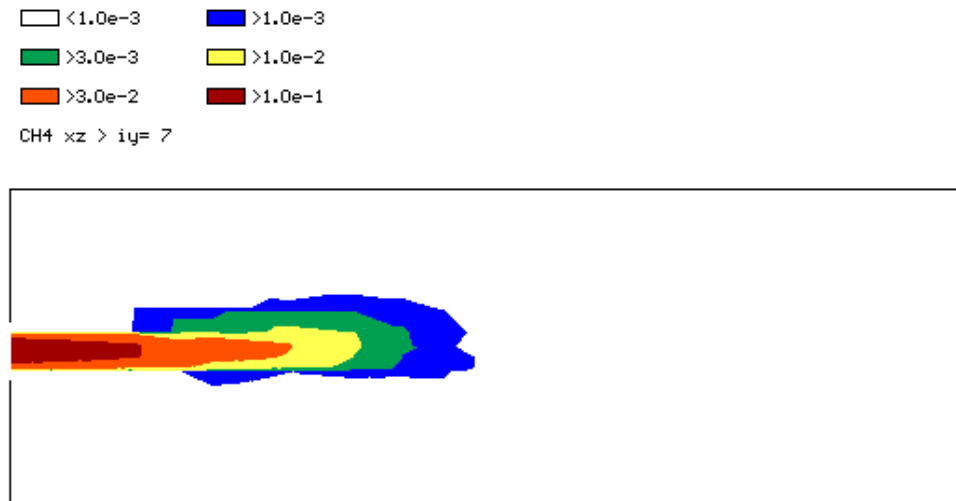
Slika 4.6. Izračunata distribucija temperature u horizontalnoj ravni ložišta u visini gorionika



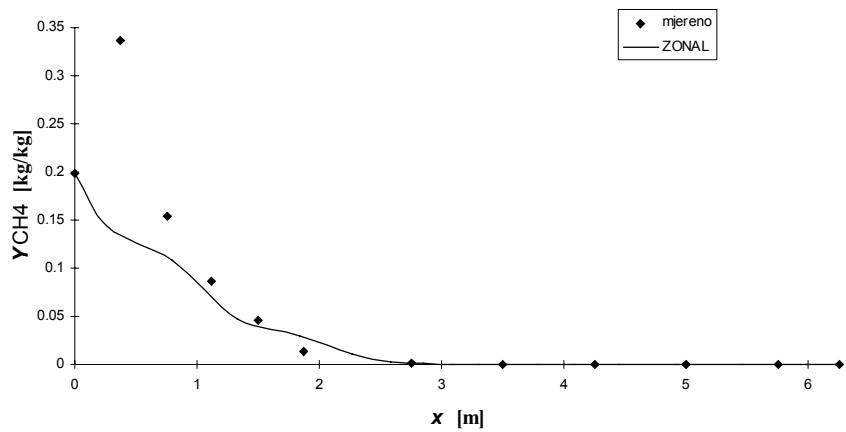
Slika 4.7. Usporedba mjerene i računane temperature u osi gorionika



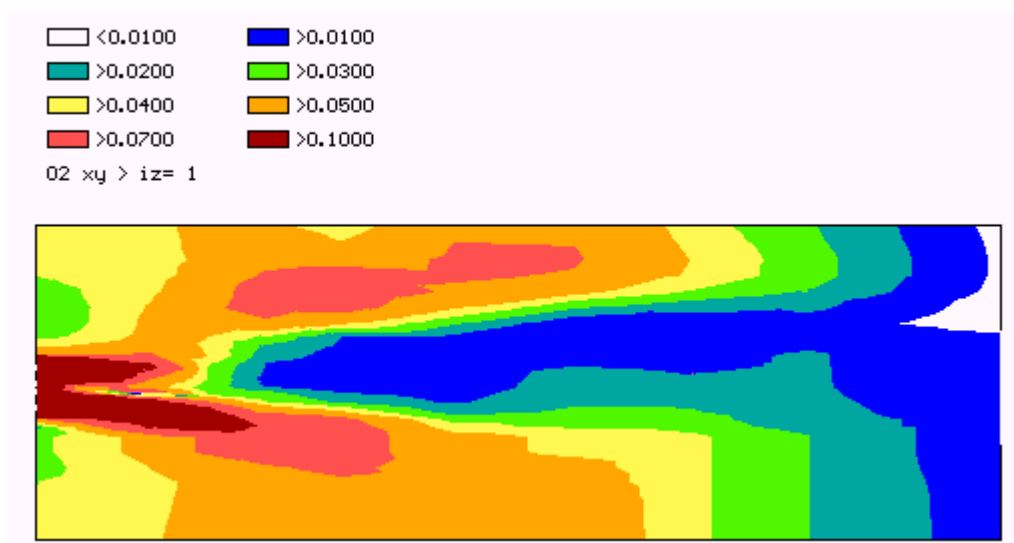
Slika 4.8. Mjerena distribucija metana u horizontalnoj ravni ložišta u visini gorionika



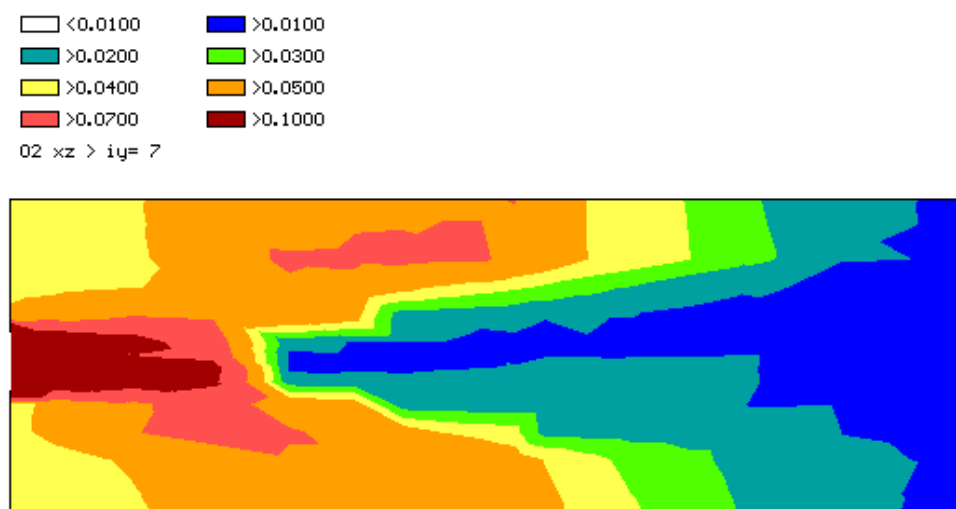
Slika 4.9. Izračunata distribucija metana u horizontalnoj ravni ložišta u visini gorionika



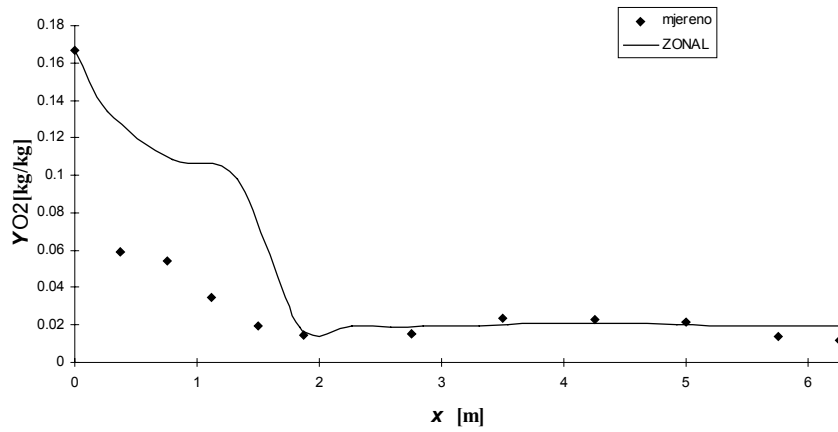
Slika 4.10. Usporedba mjenenog i računatog masenog udjela metana na osi gorionika



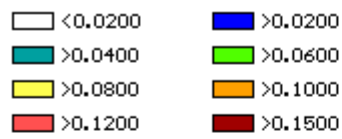
Slika 4.11. Mjerena distribucija kisika u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika



Slika 4.12. Izračunata distribucija kisika u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika



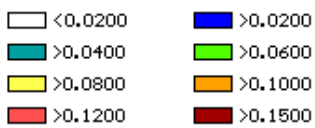
Slika 4.13. Usporedba mjenog i računatog masenog udjela kisika na osi gorionika



C02 xy > iz= 1



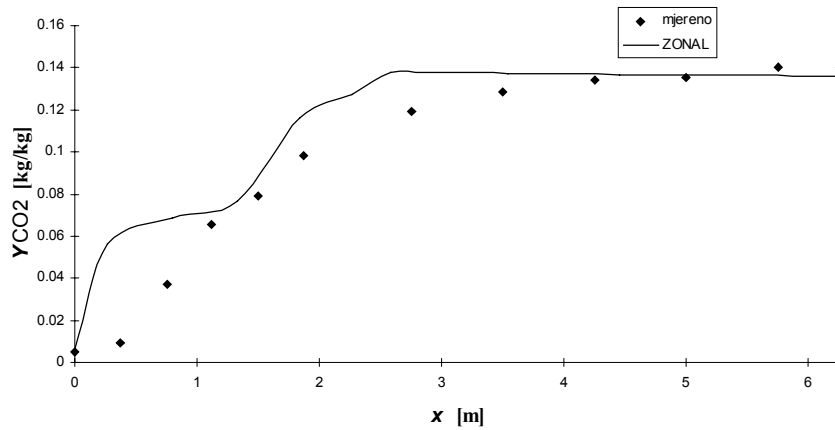
Slika 4.14. Mjerena distribucija ugljik (IV) oksida u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika



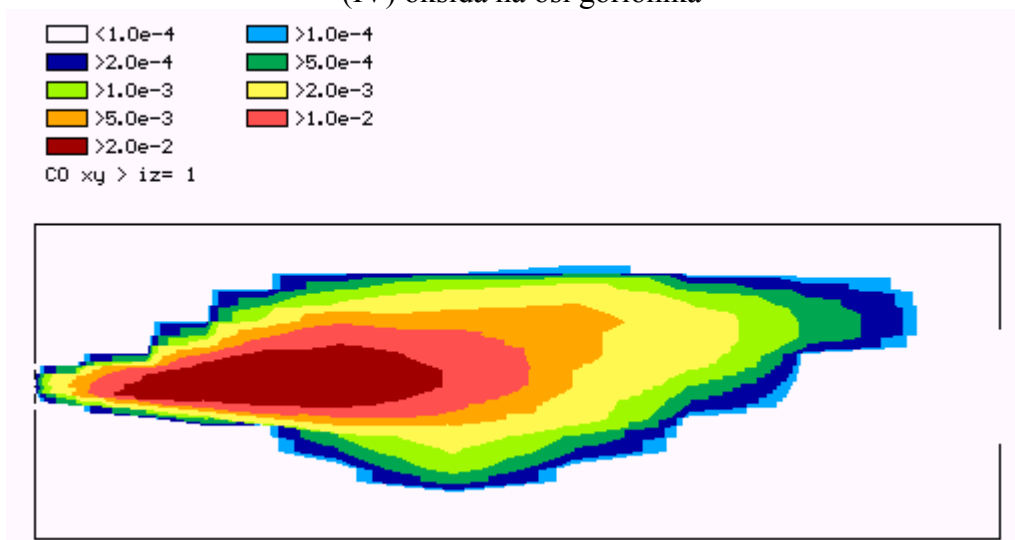
C02 xz > iy= 7



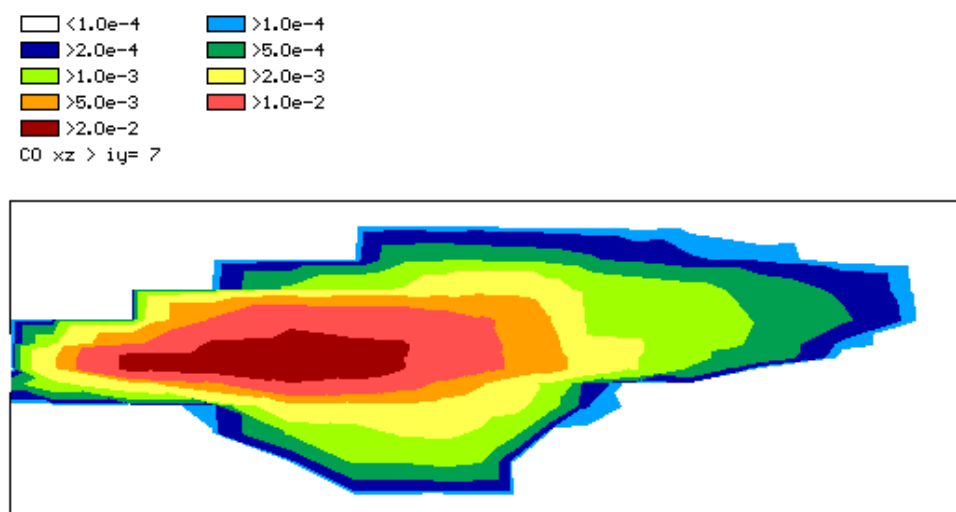
Slika 4.15. Izračunata distribucija ugljik (IV) oksida u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika



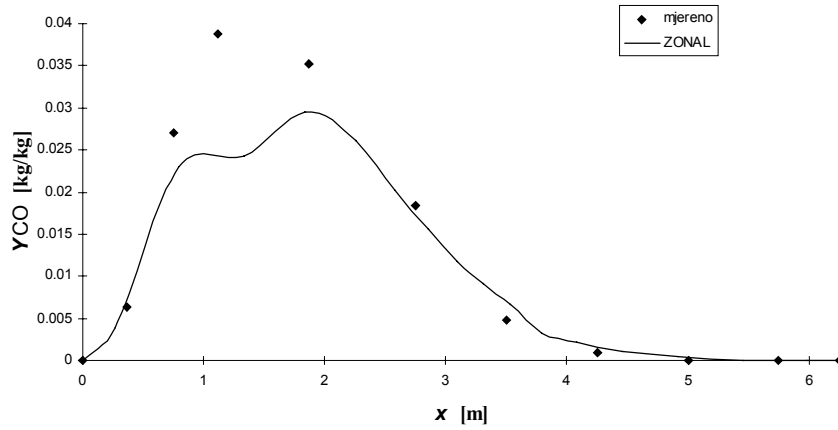
Slika 4.16. Usporedba mjenenog i računatog masenog udjela ugljik (IV) oksida na osi gorionika



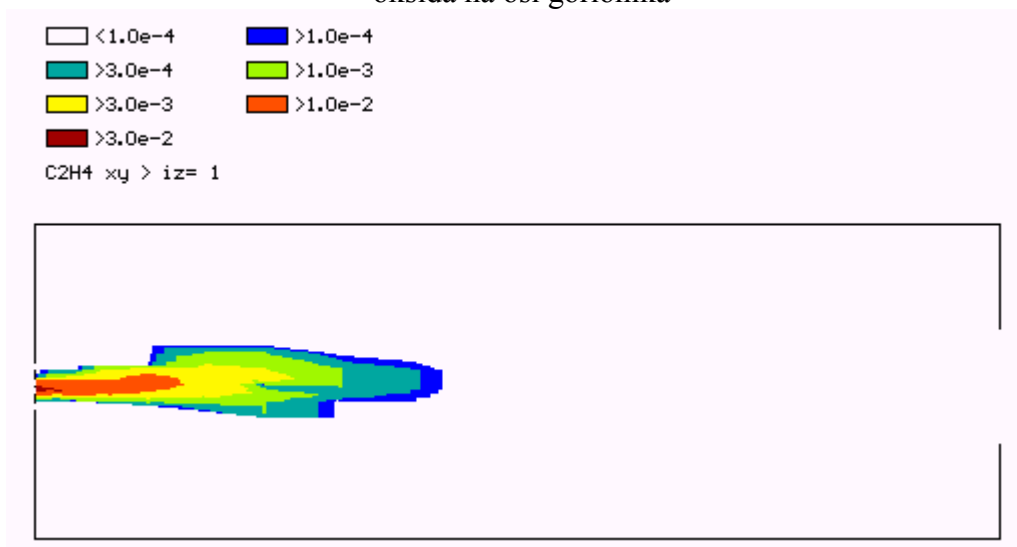
Slika 4.17. Mjerena distribucija ugljik (II) oksida u horizontalnoj ravni ložišta u visini gorionika



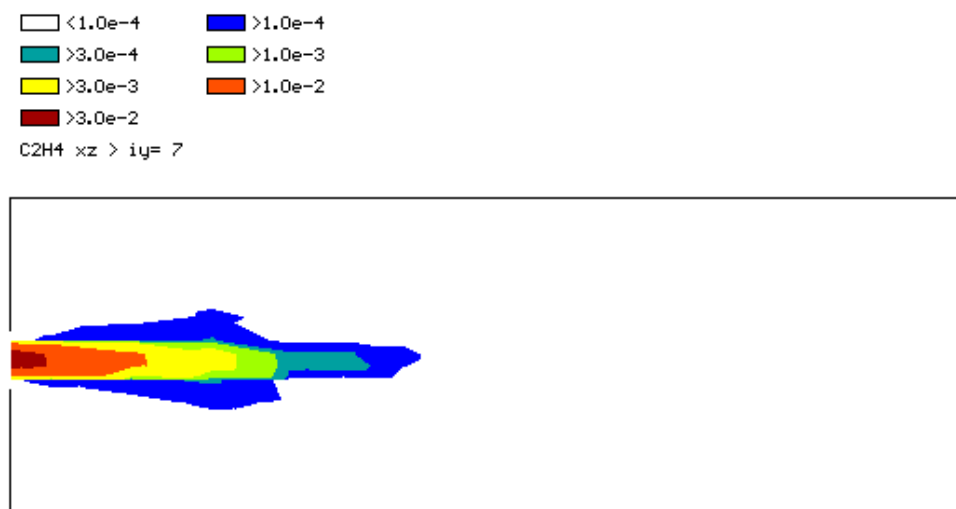
Slika 4.18. Izračunata distribucija ugljik (II) oksida u horizontalnoj ravni ložišta u visini gorionika



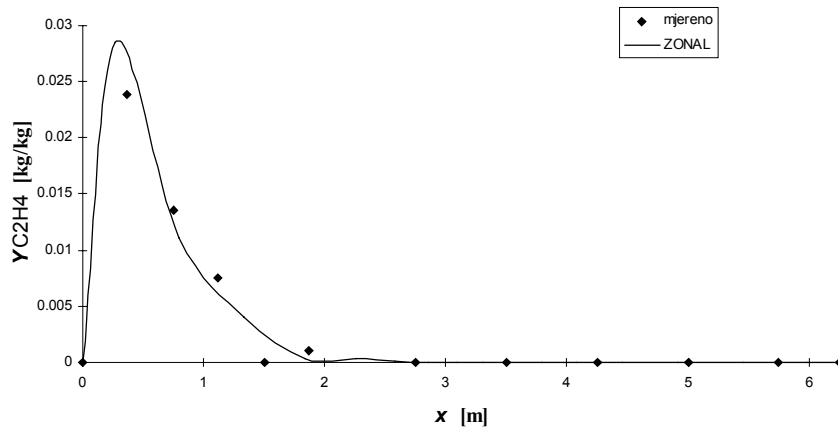
Slika 4.19. Usporedba mjenenog i računatog masenog udjela ugljik (II) oksida na osi gorionika



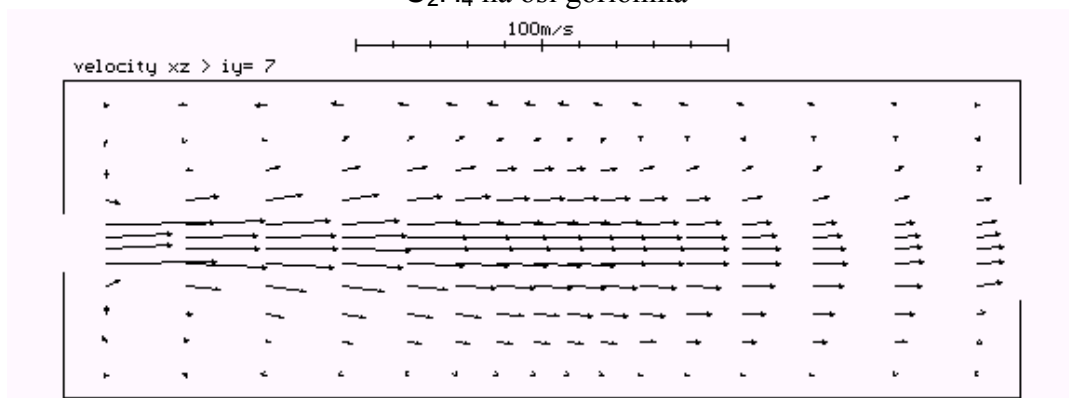
Slika 4.20. Mjerena distribucija radikala C_2H_4 u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika



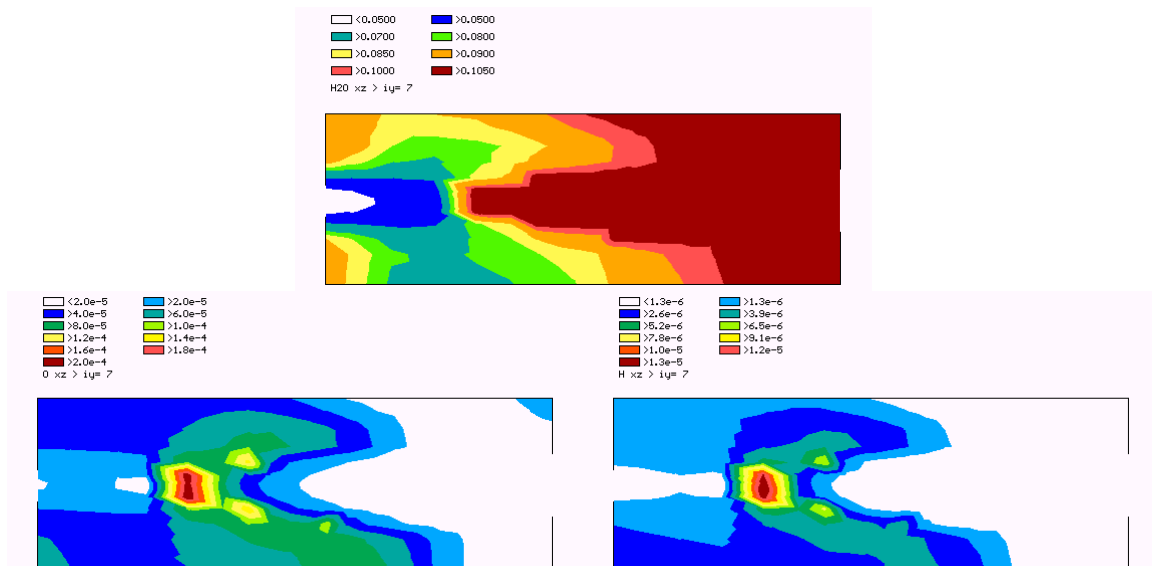
Slika 4.21. Izračunata distribucija radikala C_2H_4 u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika

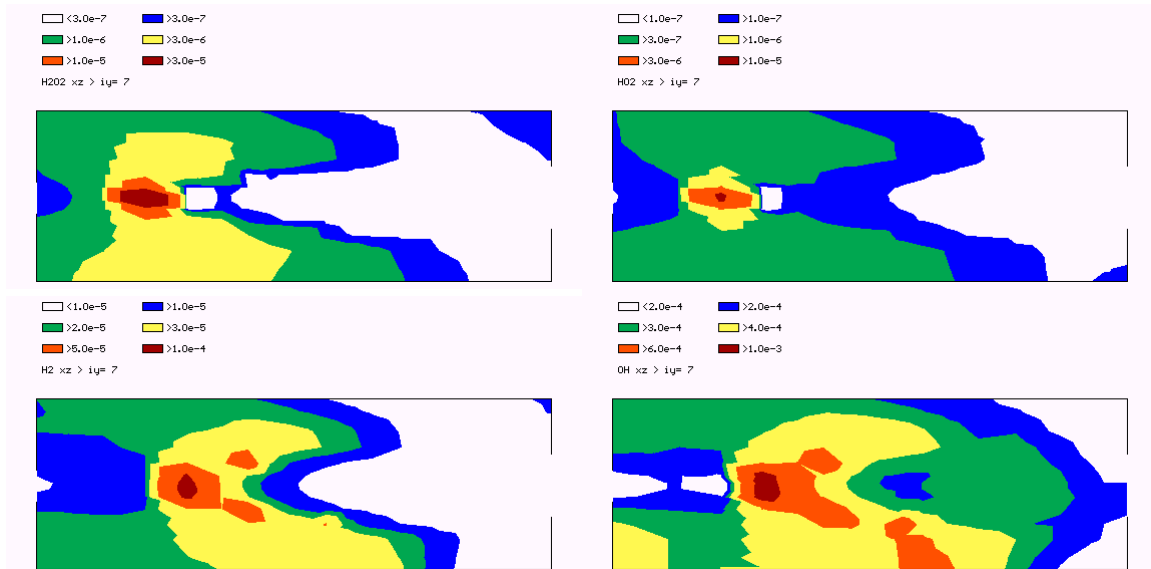


Slika 4.22. Usporedba mjenog i računatog masenog udjela radikala C_2H_4 na osi gorionika

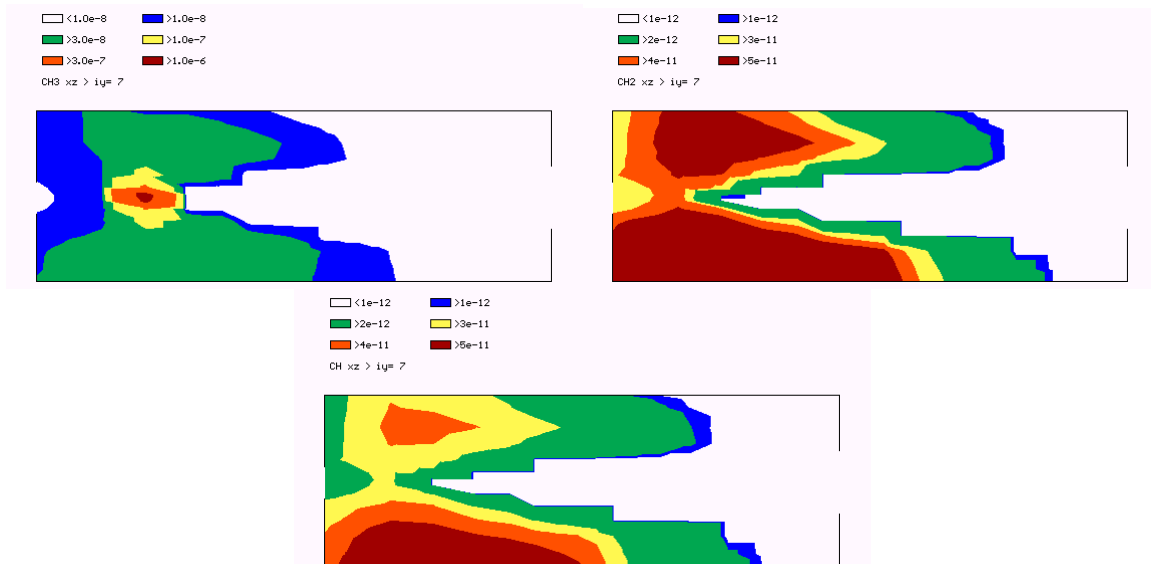


Slika 4.23. Izračunata distribucija brzina u horizontalnoj ravni ložišta u visini gorionika

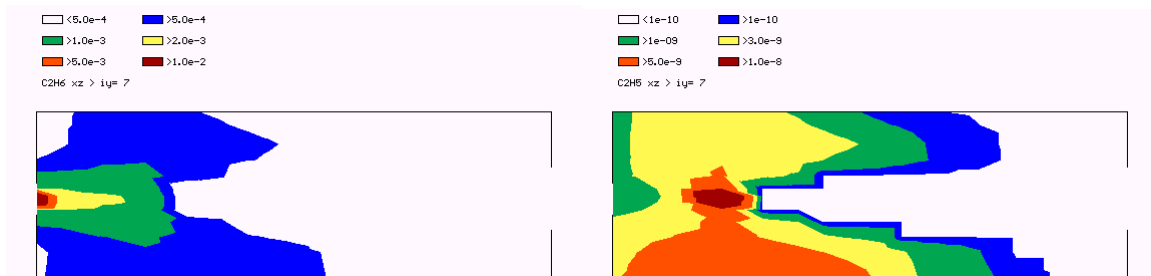


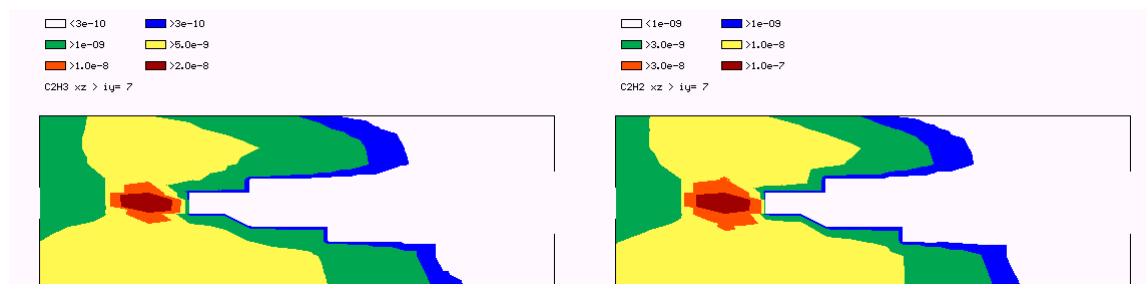


Slika 4.24. Izračunate distribucije spojeva vodikove kemije u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika



Slika 4.25. Izračunate distribucije kemijskih vrsta u metilnom lancu u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika



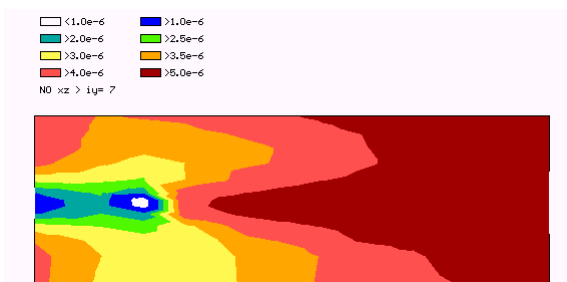


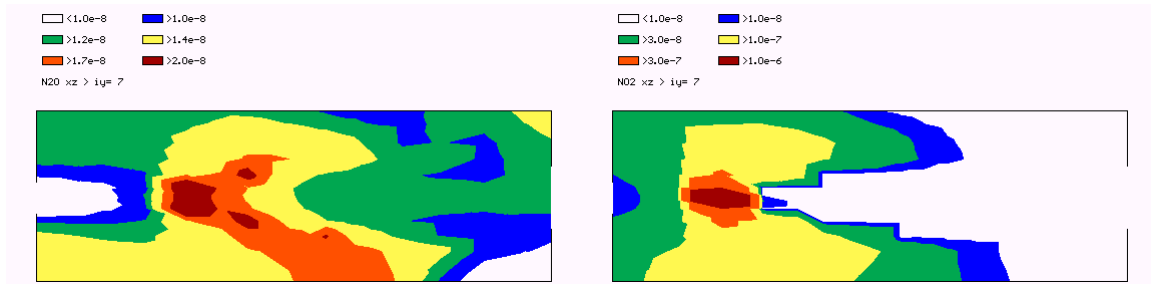
Slika 4.26. Izračunate distribucije kemijskih vrsta u etilnom lancu u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika

Slika 4.25 prikazuje neke od distribucija u C lancu oksidacije metana, redom metilnih radikala CH_3 , CH_2 i CH . Prvi od njih, CH_3 , dostiže maksimalne masene udjele u zoni prije samog plamena, dakle u hladnoj zoni, međutim kako se radi o vrlo niskim masnim udjelima, ovaj je radikal vrlo kratkotrajan, iako preko njega prolaze oba glavna lanca oksidacije metana. Preostala dva radikala su daleko manje značajni u kinetici izgaranja metana, imaju vrlo male masene udjele, te postižu maksimalne udjele na rubnim zonama plamena.

Slika 4.26 prikazuje masene udjele etana te dijela C_2 lanca oksidacije metana, redom radikale C_2H_5 , C_2H_3 i C_2H_2 , dok je distribucija najznačajnijeg radikala tog kinetičkog lanca, C_2H_4 , prikazana na slici 4.21. Etan, kao i metan ulazi u ložište kao dio plinskog goriva u struji primara. Njegov maseni udio opada kroz cijelu hladnu zonu primarne struje, ali tek u području plamena dolazi do naglog reagiranja. Maseni udio etilnog radikala C_2H_5 u kojeg etan prelazi gubitkom jednog atoma vodika, postepeno raste kroz hladnu zonu, da bi pred sam plamen dostigao maksimum. Međutim, maseni udjeli etilnog radikala C_2H_5 su izrazito mali, tako da nikako ne mogu objasniti niti smanjenje udjela etana, niti smanjenje udjela metana (preko C_2 lanca). Na slici 4.21 lijepo se može vidjeti da se masa goriva uglavnom skuplja u radikal C_2H_4 , u području hladne zone primarne struje. Tek potkraj te hladne zone dolazi do brzog prelaska C_2H_4 u kratkotrajni radikal C_2H_3 , koji gotovo momentalno prelazi u radikal C_2H_2 , i dalje preko više različitih kinetičkih putova u ugljik (II) oksid.

Slika 4.27 prikazuje distribucije dušičnih oksida, redom dušik (II) oksida, dušik (IV) oksida te dušik (I) oksida. Zbog relativno niskih temperatura koje se postižu u ovome ložištu, i maseni udjeli dušičnih oksida su relativno mali, ali se ipak na distribucijama mogu promatrati mehanizmi nastajanja. Dušik (I) oksid dostiže maksimalne masene udjele već u hladnoj zoni pred samom zonom plamena, gdje je zastupljeniji nego sam dušik (II) oksid, da bi se u samoj zoni plamena naglo reducirao u dušik (II) oksid, i na izlasku iz ložišta bio dva reda veličine manje zastupljen od njega. Naprotiv, dušik (II) oksid nastaje uglavnom u području plamena, u području viših temperatura.





Slika 4.27. Izračunate distribucije dušičnih oksida u horizontalnoj ravnini ložišta u visini gorionika

Usporedbom rezultata modela s rezultatima mjerenja na eksperimentalnom ložištu pokazana je u ovome radu kvalitativna i kvantitativna točnost iznesenog pristupa rješavanja modela strujanja u ložištima.

Posebno težak problem kod modeliranja ložišta u IJmuidenu je istovremeno postojanje i kinetičkog i difuznog plamena, prvoga u struji primara, a drugoga na granici između primarne struje smjese goriva i zraka i sekundarne struje zraka. Pokušaj rješavanja jednim od modela plamena opisanih u literaturi, koji su strogo ograničeni na jedan ili drugi plamen doveo bi do iskrivljene slike, uvlačenjem plamena u slučaju primjene nekog od kinetičkih modela, ili daljnjim odmicanjem plamena od gorionika u slučaju primjene nekog od modela difuzivnog plamena. Međutim, primjenom detaljnog kinetičkog modela prikazanog u ovome radu, bilo je moguće obuhvatiti oba mehanizma, te dobiti rezultate usporedljive s mjerenim podacima.

4.3. VERTIKALNO LOŽIŠTE

U ovome radu opisani matematički model procesa u ložištu generatora pare je primijenjen na ložište protočnog generatora pare RAMZIN P-56 kapaciteta $D = 330$ t/h pregrijane pare temperature $t_{pr} = 540$ °C i tlaka $p = 140$ bar na punom opterećenju, pri izgaranju zemnog plina. Ložište je presjeka $A = 8.4 \times 8.4$ m², a visine $h = 25.1$ m s po dva kombinirana plamenika za plin i mazut na bočnim stranama. Sastav goriva dan je tablici 4.5. Zbog vrlo malih udjela butana i propana u gorivu njihovi su udjeli pripojeni etanu. Donja ogrjevna moć goriva iznosi $H_d = 34460$ kJ/m_n³. Pretičak zraka je $\lambda = 1.05$.

Tablica 4.5. Sastav goriva

kem. vrsta	volumni udio [kmol/kmol]
CH ₄	0.926
C ₂ H ₆	0.034
C ₃ H ₈	0.007
C ₄ H ₁₀	0.003
CO ₂	0.007
N ₂	0.023

Tablica 4.6. Usporedba izlaznih temperatura dimnih plinova iz ložišta

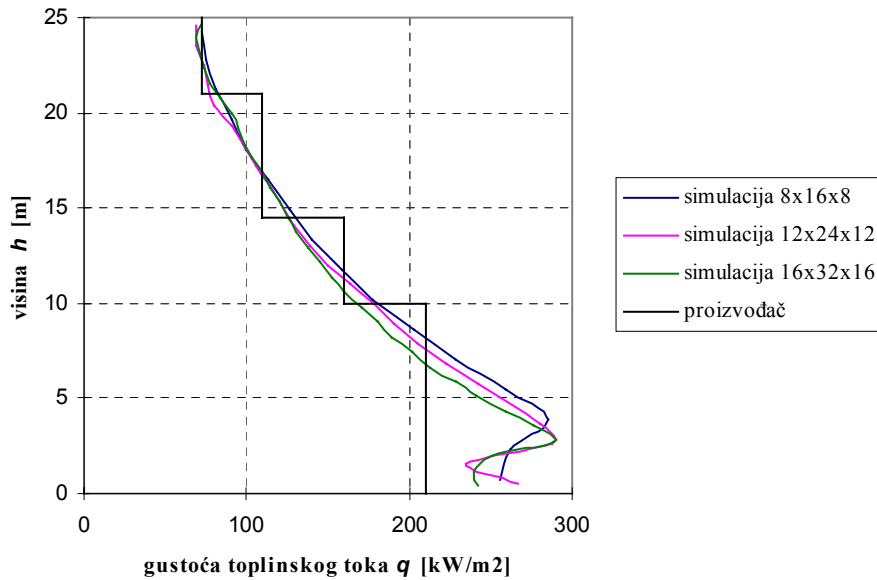
Proračun	temperatura dimnih plinova [°C]
Normativni [2]	1048
Proizvođač [115]	1015
DVODIM [76]	1044
ZONAL 4.40	1002

Tablica 4.7. Prosječne izlazne vrijednosti kemijskih vrsta

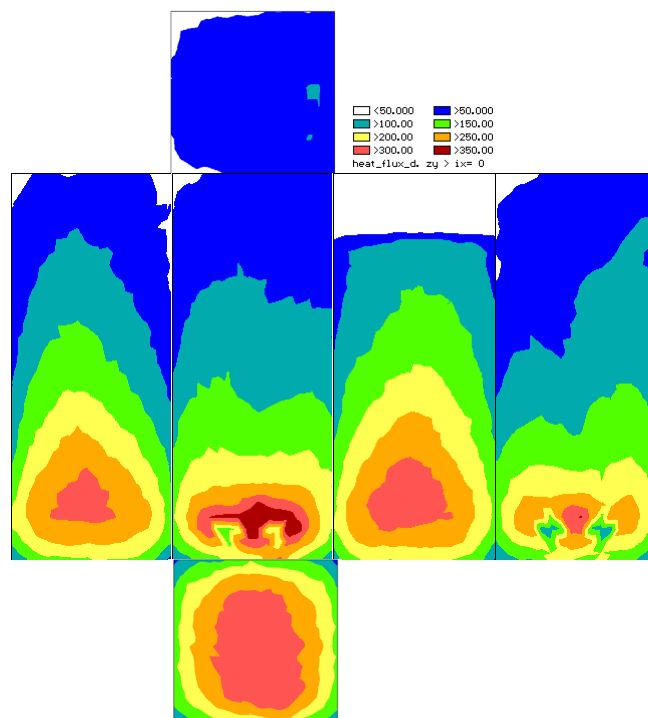
kem. vrst a	\dot{m}_α [kg/s]	Y_α [kg/kg]	X_α [kmol/kmol]
O	6.30E-04	6.03E-06	1.05E-05
O ₂	7.13E-01	6.82E-03	5.92E-03
H	3.53E-05	3.40E-07	9.38E-06
H ₂	1.57E-03	1.50E-05	2.08E-04
OH	1.10E-02	1.05E-04	1.72E-04
H ₂ O	1.24E+01	1.18E-01	1.83E-01
HO ₂	9.70E-06	9.00E-08	7.78E-08
H ₂ O ₂	5.66E-05	5.40E-07	4.43E-07
N ₂	7.47E+01	7.14E-01	7.09E-01
NO	1.51E-01	1.45E-03	1.34E-03
N ₂ O	6.00E-07	1.00E-08	3.54E-09
NO ₂	2.81E-05	2.70E-07	1.62E-07
CO	1.52E-02	1.45E-04	1.44E-04
CO ₂	1.54E+01	1.47E-01	9.27E-02

U tablici 4.6 dani su podaci za srednju izlaznu temperaturu dimnih plinova. Prva tri podatka preuzeta su iz [76]. Za potrebe toga rada, a radi mogućnosti usporedbe, ložište je proračunato na klasičan način pomoću "normativne" metode, te pomoću dvodimenzionalnog modela procesa u ložištu s jednostavnim jednostepenim modelom izgaranja plina, ugrađenim u

program pod imenom DVODIM. Taj je programski kod prethodio razvoju ZONAL-a. Rezultat dobiven sadašnjim modelom pokazuje bolje slaganje s temperaturom dimnih plinova koju je za takve uvjete izgaranja predvidio proizvođač ložišta, nego i “normativni” i dvodimenzionalni proračun. U tablici 4.7 dane su izlazne vrijednosti masenog toka, masenog udjela i molnog udjela kemijskih vrsta sa značajnijim udjelima na izlazu iz ložišta.

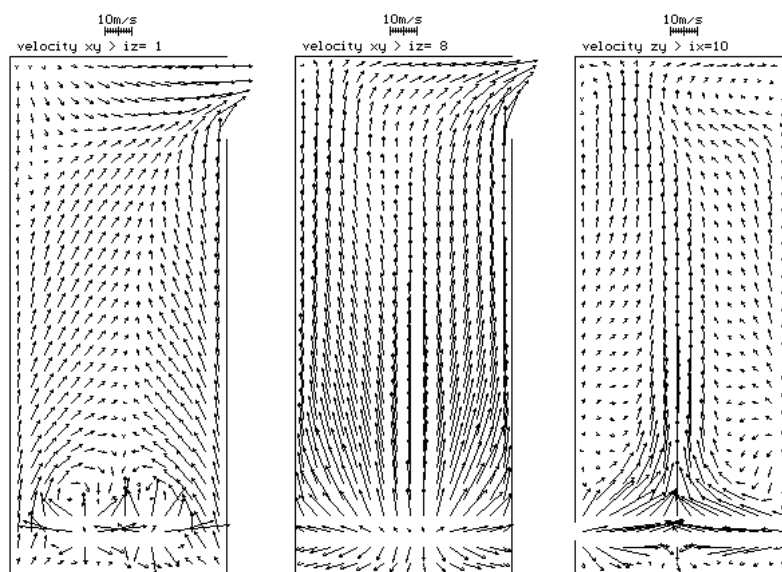


Slika 4.28. Profil gustoće toplinskog toka uzduž ložišta; usporedba rezultata dobivenih simulacijom pomoću opisanog modela s podacima koje daje proizvođač [115]

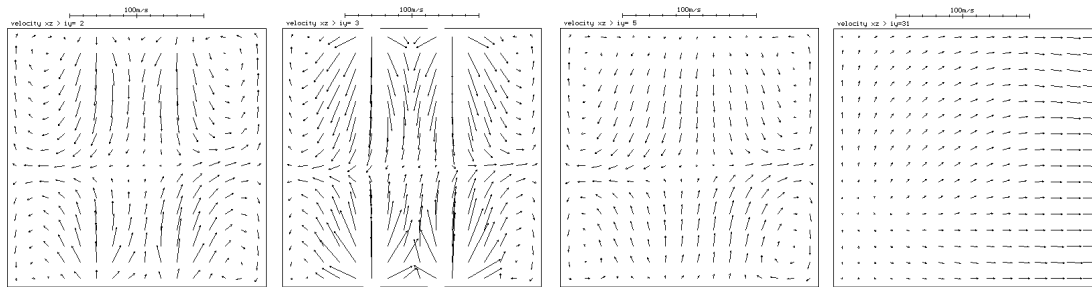


Slika 4.29. Distribucija gustoće toplinskog toka po plaštu ložišta

Na slici 4.28 prikazana je usporedba profila gustoće toplinskog toka uzduž ložišta između rezultata dobivenih simulacijom pomoću opisanog modela s podacima koje daje proizvođač [115]. Matematički je model primijenjen na tri različite mreže ($8 \times 16 \times 8 = 1024$, $12 \times 24 \times 12 = 3456$, $16 \times 32 \times 16 = 8096$ kontrolnih volumena). Slaganje s podacima proizvođača je prilično dobro za sve tri mreže, ali je za najgušću mrežu najbolje, što je i očekivani zaključak. U donjem je dijelu ložišta jedino slaganje rezultata dobivenih računanjem modela na najgušćoj mreži vrlo dobro. Distribucija gustoće toplinskog toka po plaštu ložišta prikazana je na slici 4.29. Vrlo je velika informativnost poznavanja distribucije gustoće toplinskog toka u situacijama u kojima treba pronaći maksimalne tokove koji su uzrok pucanja cijevi. Najveće vrijednosti gustoće toplinskog toka su lokalne i značajno više od srednjih. Poznavajući njihov iznos i lokaciju može se predvidjeti najvjerojatnija pozicija na kojoj će doći do pucanja ekranskih cijevi te pomoću modeliranja različitih situacija eventualno naći način da se incidencija takvih situacija smanji.



Slika 4.30. Distribucija brzina strujanja
 a) ravnina uz bočni zid, pogled sa strane
 b) centralna ravnina, pogled sa strane
 c) ravnina plamenika, pogled sprijeda



Slika 4.31. Distribucija brzina strujanja, tlocrt

- a) ravnina ispod plamenika
- b) ravnina plamenika
- c) ravnina iznad plamenika
- d) izlazna ravnina

Distribucija brzine u ložištu prikazana je na slikama 4.30 i 4.31 za različite presječne ravnine. Područje plamenika prikazano je presjekom 4.30c s prednje strane i slikom 4.31b iz tlocrta. Može se vidjeti da se struje iz nasuprotnih plamenika sudaraju, i da time stvaraju kutne vrtloge. Ti se vrtlozi još bolje mogu zamijetiti u presječnim ravninama ispod (sl. 4.31a) i nešto iznad (sl. 4.31c) ravnine plamenika. Slika 4.30c pokazuje da većina masenog toka prolazi sredinom ložišta, što je i za očekivati. Mogu se uočiti i vrtlozi koji nastaju u području iznad plamenika. Također je vidljiva nesimetrija koja je posljedica prethodno objašnjenih uzroka. Slika 4.30b prikazuje upravo centralnu ravninu u kojoj je uzlazno strujanje najjače.

Distribucija temperature prikazana je na slikama 4.32, 4.33 i 4.34 u različitim presječnim ravninama. Slike 4.32a-4.32d prikazuju promjenu temperaturnog polja prilikom pomicanja presjeka od bočnog zida do centralne ravnine. Primjetno je hladno područje oko plamenika u prvom i drugom presjeku do zida (sl. 4.32a-4.32b) koje već sasvim nestaje u petoj ravnini (sl. 4.32c). Daljnjim se pomakom prema centralnoj ravnini smanjuje područje najviših temperatura ($>1600\text{ }^{\circ}\text{C}$), ali se zato povećava oblak visokih temperatura. To ukazuje da se glavina reakcija koje oslobađaju toplinu nalazi negdje na četvrtini ložišta, gledano s bočne strane.

Usporedbom slika 4.32a i 4.32e može se dobiti uvid u nesimetričnost rezultata, koja je u donjem dijelu ložišta, u kojem se ionako nalaze kritični toplinski tokovi, mala, dok je nešto veća u gornjem dijelu ložišta, što se može uočiti s promatranjem distribucije toplinskih tokova (sl. 4.29).

Na slici 4.33a prikazana je ravnina plamenika u presjeku sprijeda. Vide se hladne zone u okolini samih plamenika, te područja visokih temperatura uokolo tih hladnih zona koja predstavljaju plamen. Uočljivo je da su zone najviših temperatura prepoznatljivije, tj. ne dolazi do njihovog potpunog spajanja za nasuprotne plamenike. Slika 4.33b prikazuje temperaturnu distribuciju uz stražnji zid. Ta distribucija ima veliki utjecaj na iznos toplinskih tokova, što se može i vidjeti usporedbom sa sl. 4.29. Slika 4.33c prikazuje distribuciju temperature na izlasku iz ložišta.

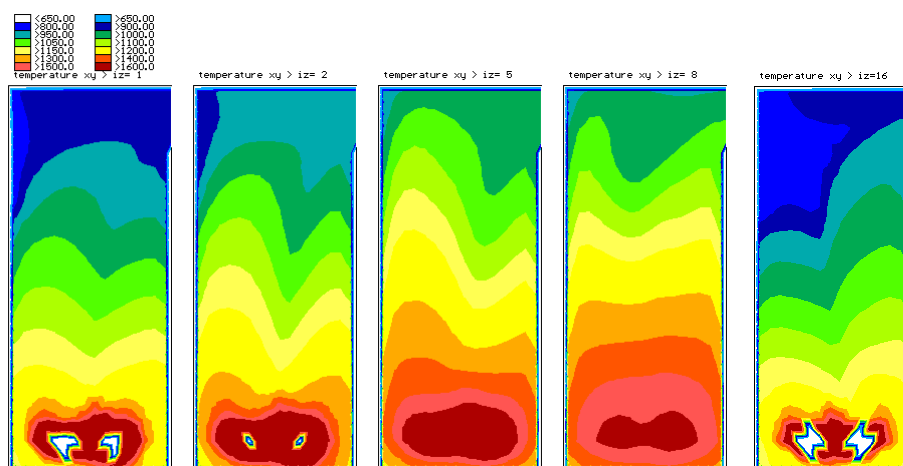
Na slici 4.34b prikazana je distribucija temperature u ravnini plamenika u tlocrtu. Uočljive su hladne zone neupaljene smjese goriva i zraka. Na sl. 4.34a prikazana je situacija ispod ravnine plamenika, a na sl. 4.34c i 4.34d iznad te ravnine. Najviši prikazani horizontalni

presjek ložišta nalazi se iznad zone plamena. Može se primijetiti da plamen ima ovalni presjek, tj. da je bliže prednjem i stražnjem ekranu nego bočnim stranama. Na taj se način može objasniti i distribucija gustoće toplinskog toka (sl. 4.29) s većim područjima jakih toplinskih tokova na prednjem i stražnjem zidu, iako su maksimalni tokovi u zoni oko plamenika na bočnim zidovima.

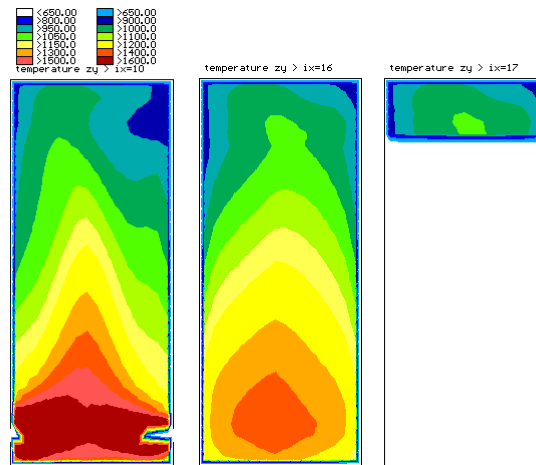
Distribucija goriva je prikazana na slici 4.35, razdvojenog na metan (sl. 4.35a) i etan (sl. 4.35b). Uočljiva je njihova vrlo brza razgradnja u metilni (CH_3) i etilni (C_2H_5) radikal čije su distribucije prikazane na sl. 4.36. Uočljivo je da su koncentracije tih radikala vrlo male, što znači da je njihovo trajanje kratko, te je njihova važnost u tome što su prijelazne kemijske vrste u procesu izgaranja. Na slici 4.35b nije moguće razlučiti sekundarni etan koji nastaje rekombinacijom dvaju metilnih radikala jer je maseni udio etana u gorivu značajan (tab. 4.5).

Daljnjom oksidacijom metilnog radikala CH_3 nastaju vrlo kratkotrajne kemijske vrste poput CH_2O , CH_2 , CH_2OH i CH_3O , ali njihove distribucije ovdje nisu prikazane jer je nemoguće odvojiti vrijednosti od šuma metode. Ubrzo, sve te kratkotrajne kemijske vrste oksidiraju u radikal HCO , čija je distribucija prikazana na slici 4.37. Pogled sa strane dan je na sl. 4.37a, centralna ravnina u pogledu sprijeda na sl. 4.37b, dok je ravnina plamenika u tlocrtu prikazana na sl. 4.37c.

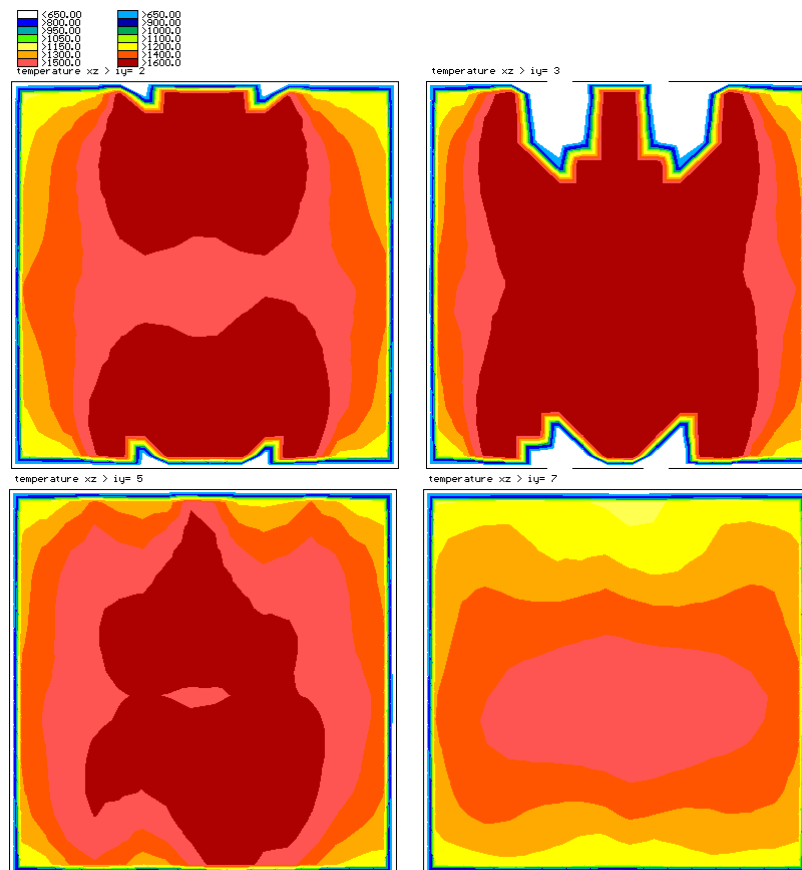
Daljnjom oksidacijom etilnog radikala C_2H_5 nastaje C_2H_4 , čija je distribucija prikazana na slici 4.38. U pogledu sa strane (sl. 4.38a-b) presječenom u dvije različite ravnine vidljivo je da je maksimalna koncentracija ovoga radikala u području gorionika, te da ona rapidno pada u području u kojem se plamenovi sudaraju. Još je to bolje uočljivo u pogledu sprijeda (sl. 4.38c). Prema tome se može zaključiti da ovaj radikal nastaje već kod nižih temperatura, te da se naročito nakuplja u područjima nižih temperatura ($<1100\text{ °C}$), dok u centru plamena, gdje su temperature više, maseni udio C_2H_4 pada vrlo nisko. Jedan dio nešto višeg masenog udjela C_2H_4 u gornjoj polovici ložišta posljedica je slabog uzlaznog strujanja uz zidove iz područja visokih udjela u zoni plamenika, ali čini se da veći dio ipak nastaje zbog redukcije u područjima nižih temperatura.



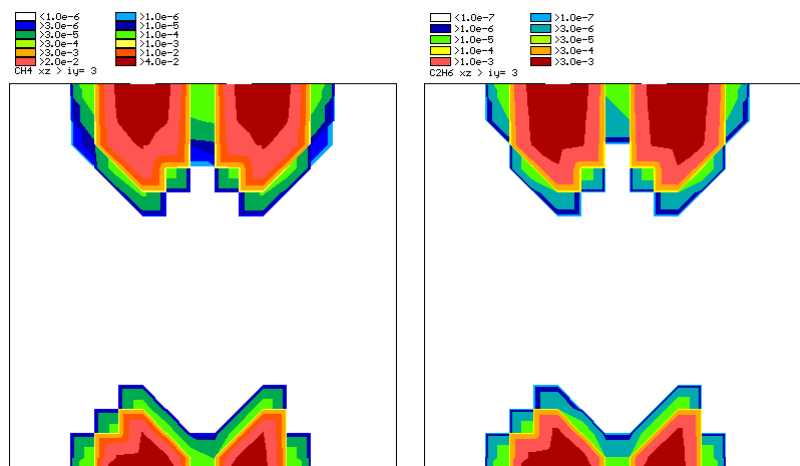
Slika 4.32. Distribucija temperature, pogled sa strane



Slika 4.33. Distribucija temperature, pogled sprijeda
 a) ravnina plamenika
 b) ravnina uz stražnji zid
 c) izlazna ravnina



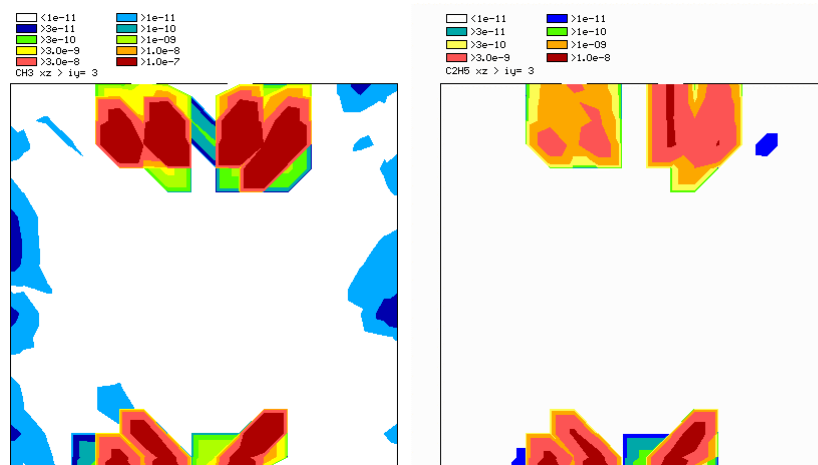
Slika 4.34. Distribucija temperature, tlocrt



Slika 4.35. Distribucija goriva, tloert

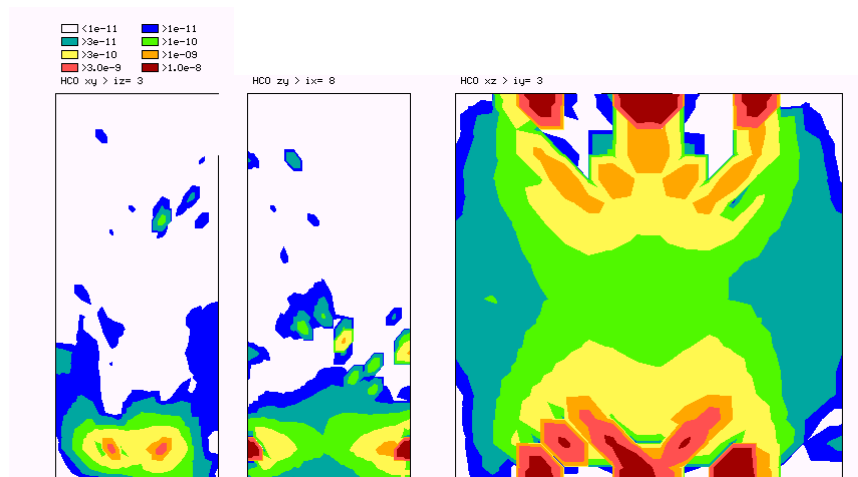
- a) metan
b) etan

Proces izgaranja C_2H_4 se nastavlja uglavnom gubitkom jednog vodikovog atoma, tj. prelaskom u radikal C_2H_3 , ali i u nekoliko drugih nestabilnih kemijskih vrsta (C_2H_2 , CH_2O , HCO). Radikal C_2H_3 dalje prelazi uglavnom u C_2H_2 , ali i u CH_2CO , C_2H , $HCCO$. Svi ti radikali (osim prethodno prikazane distribucije radikala HCO) su vrlo kratkotrajni, te im maseni udjeli ne dostižu vrijednosti koje se mogu prikazati kao distribucije odvojeno od šuma metode, iako su značajni kao prijelazni spojevi u kinetici izgaranja etana.



Slika 4.36. Distribucija radikala, ravnina plamenika, tloert

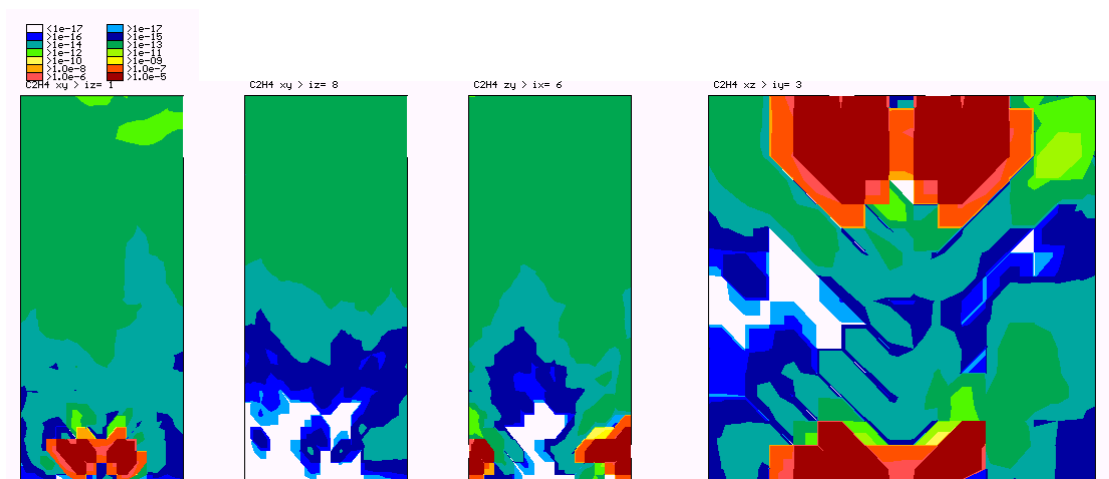
- a) metilni radikal CH_3
b) etilni radikal C_2H_5



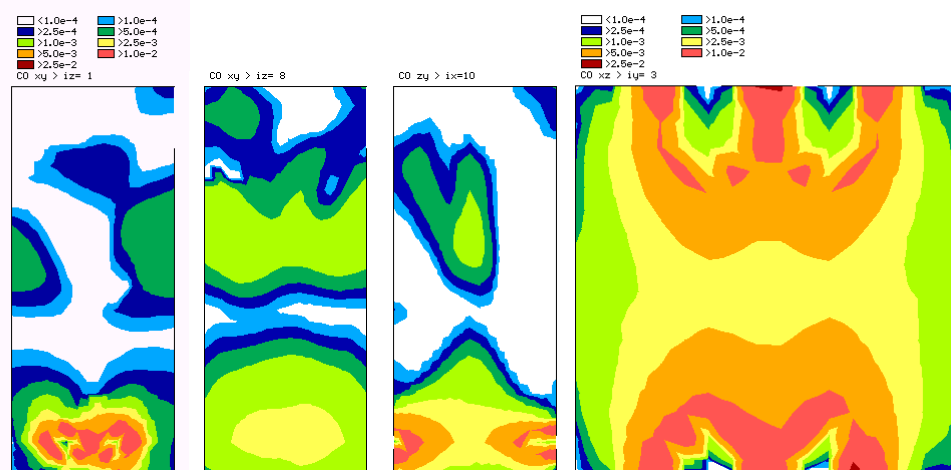
Slika 4.37. Distribucija radikala HCO

- pogled sa strane
- centralna ravnina, pogled sprijeda
- ravnina plamenika, tlocrt

Veći dio masenog udjela radikala C_2H_2 gubi atom ugljika i prelazi u radikal CH_2 , a ostatak prelazi u CH_2CO , C_2H , $HCCO$ i CH_3 . Radikal CH_2CO je vrlo kratkotrajan i prelazi u jednu od sljedećih kemijskih vrsta: CH_2O , HCO , $HCCO$ ili se raspada na molekule CH_2 i CO . Radikal $HCCO$ uglavnom prelazi u ugljik (II) oksid, kao i radikali C_2H , HCO , CH_2 , CH , ali jedan dio gubi ili atom ugljika ili atom kisika pa prelazi ili u HCO ili u C_2H . U svakom slučaju, kojim god putem da se odvijala kinetika izgaranja metana i etana, gotovo sav ugljik nakon gubitka vodikovih atoma prelazi u ugljik (II) oksid.

Slika 4.38. Distribucija etilnog radikala C_2H_4

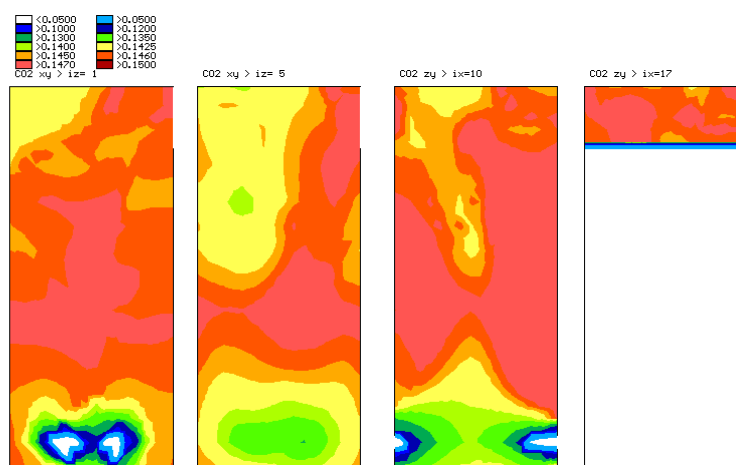
- ravnina uz zid, pogled sa strane
- centralna ravnina, pogled sa strane
- prva ravnina plamenika, pogled sprijeda
- ravnina plamenika, tlocrt



Slika 4.39. Distribucija ugljik (II) oksida

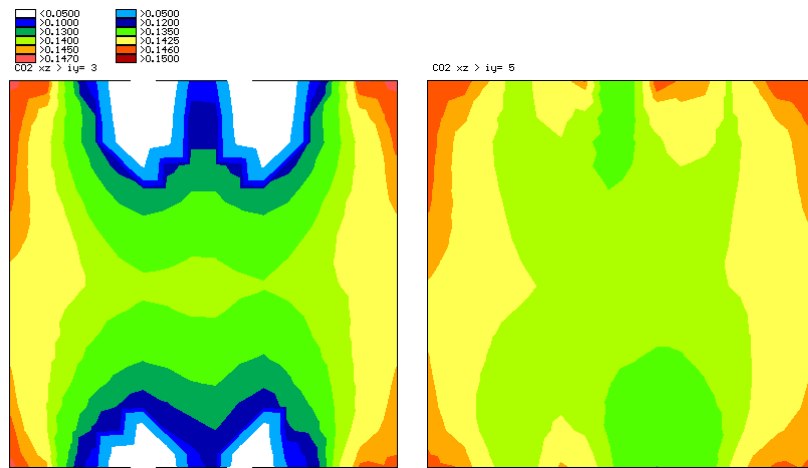
- ravnina uz zid, pogled sa strane
- centralna ravnina, pogled sa strane
- ravnina plamenika, pogled sprijeda
- ravnina plamenika, tlocrt

Distribucija ugljik (II) oksida prikazana je na slici 4.39. Dane su dvije presječne ravnine u pogledu sa strane, jedna uz bočni zid na kojem se nalaze plamenici (sl. 4.39a), a druga je centralna ravnina (sl. 4.39b), presječna ravnina u pogledu sprijeda, u ravnini plamenika (sl. 4.39c), te ravnina plamenika u tlocrtu (sl. 4.39d). Uočljivo je prema slikama 4.39c i 4.39d da CO ne nastaje u hladnoj zoni plamenika, nego tek u onom dijelu u kojem počinje brzo oslobađanje topline. Maseni udio ugljik (II) oksida brzo dostiže vrhunac, i zatim počinje polako opadati daljnjom oksidacijom u ugljik (IV) oksid. Međutim, na slikama 4.39b i 4.39c uočljiva je zona sekundarnog nastajanja CO u području u kojem plamen struji prema gore, što je očito posljedica disocijacije CO_2 .



Slika 4.40. Distribucija ugljik (IV) oksida

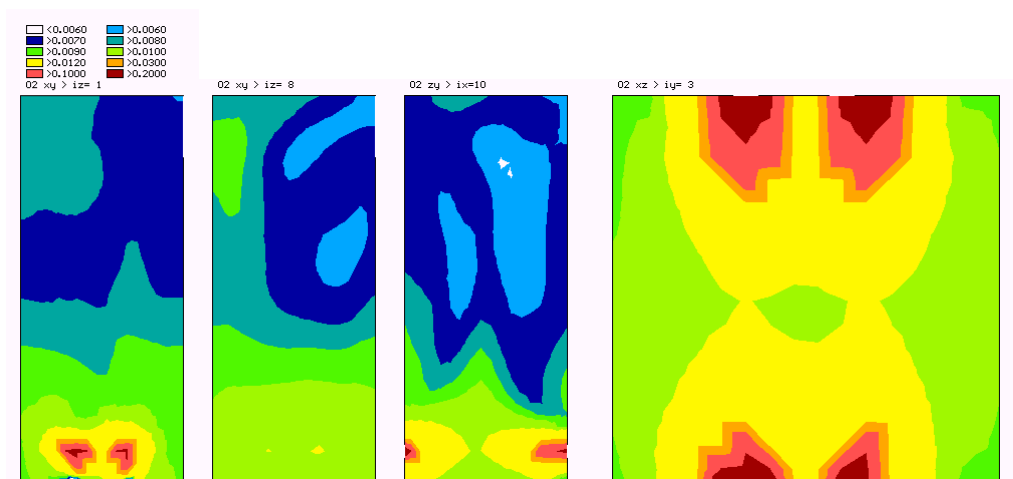
- ravnina uz zid, pogled sprijeda
- centralna ravnina, pogled sprijeda
- ravnina plamenika, pogled sprijeda
- izlazna ravnina, pogled sprijeda



Slika 4.41. Distribucija ugljik (IV) oksida, tlocrt

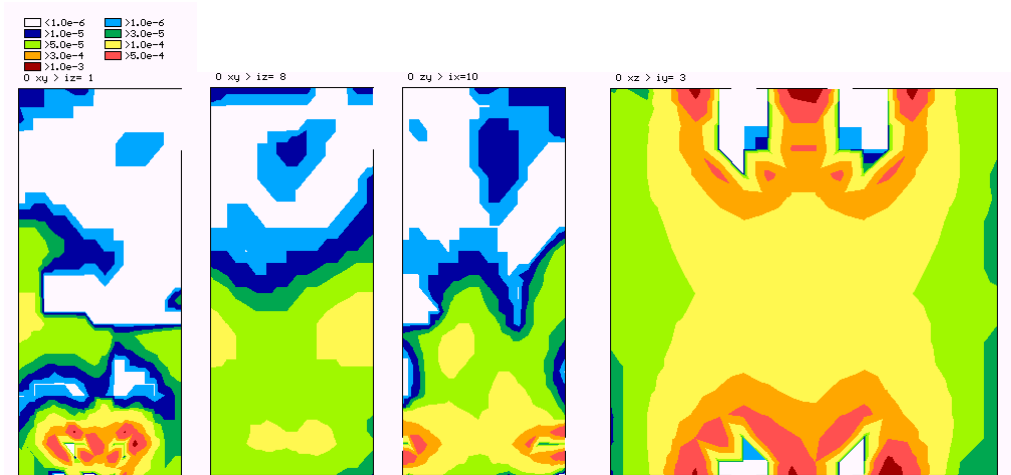
Na slikama 4.40 i 4.41 prikazana je distribucija ugljik (IV) oksida. Prikazane su dvije presječne ravnine u pogledu sa strane (sl. 4.40a-b), presjek u ravnini plamenika (sl. 4.40c) i izlazna ravnina (sl. 4.40d), obje u pogledu sprijeda, te dvije presječne ravnine u tlocrtu, u ravnini plamenika (sl. 4.41a) te iznad plamenika (sl. 4.41b).

Uočljivo je prema slikama 4.40a, 4.40c i 4.41a da CO_2 počinje nastajati tek kasnije u plamenu, tj. usporedbom sa slikama 4.39c i 4.39d moguće je zaključiti da počinje nastajati tek kada maseni udio ugljik (II) oksida dostigne maksimum, te da zatim nastavlja postepeni porast. Na slici 4.40c zamjetljiva je zona disocijacije u gornjem dijelu ložišta, ali se ovdje zamjećuje značajno slabije nego na slikama koje prikazuju distribuciju masenog udjela CO . Zona smanjenja masenog udjela u gornjem lijevom dijelu ložišta koja se može uočiti na slikama 4.40a-b nije međutim bilo moguće objasniti.



Slika 4.42. Distribucija kisika

- a) ravnina uz zid, pogled sa strane
- b) centralna ravnina, pogled sa strane
- c) ravnina plamenika, pogled sprijeda
- d) ravnina plamenika, tlocrt



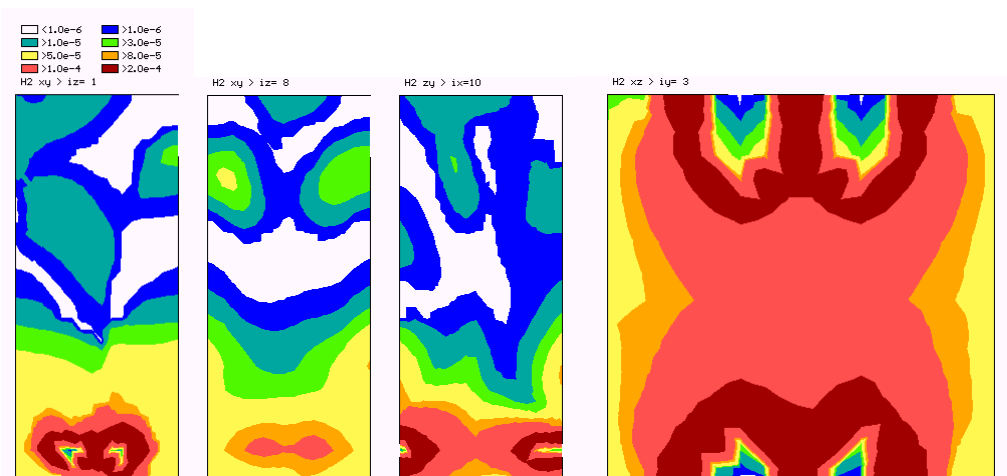
Slika 4.43. Distribucija atomarnog kisika

- a) ravnina uz zid, pogled sa strane
- b) centralna ravnina, pogled sa strane
- c) ravnina plamenika, pogled sprijeda
- d) ravnina plamenika, tlocrt

Distribucija kisika prikazana je na slici 4.42. Dane su presječne ravnine odmah uz zid plamenika (sl. 4.42a) i na sredini (sl. 4.42b) u pogledu sa strane, ravnina plamenika u pogledu sprijeda (sl. 4.42c) i ravnina plamenika u tlocrtu (sl. 4.42d). Može se uočiti nagli pad masenog udjela molekularnog kisika već na samoj granici hladne zone plamenika na polovicu ulazne vrijednosti, te daljnji postepeni pad u području plamena. Jedan dio molekularnog kisika prelazi u atomarni, i to upravo na samoj granici hladne zone plamenika, što se dobro može uočiti na slikama 4.43a, 4.43c i 4.43d, na kojima je prikazana distribucija molekularnog kisika. Međutim kako je atomarni kisik vrlo kratkog vijeka, ostatak kisika vrlo brzo ulazi u interakciju s vodikom i postaje dio niza radikala, što će biti kasnije prikazano.

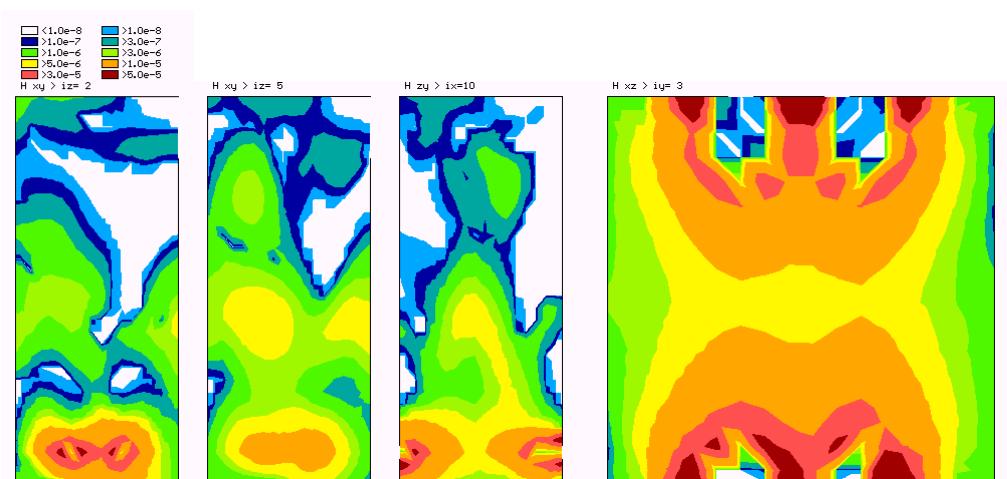
Molekularni vodik nastaje prilikom izgaranja ugljikovodika kao međuprodukt u dijelu plamena gdje dolazi do brzog oslobađanja topline. To se može vidjeti na distribuciji vodika u presječnoj ravnini uz zid plamenika u pogledu sa strane (sl. 4.44a), u ravnini plamenika u pogledu sprijeda (sl. 4.44c) i u tlocrtu (sl. 4.44d), koja u toj zoni dostiže vrhunac. Prema izlazu, maseni udio vodika opada.

Maseni udio atomarnog vodika dostiže vrhunac u istoj zoni plamena gdje i maseni udio molekularnog vodika. Distribucija je prikazana u raznim presječnim ravninama na slici 4.45. Maseni udjeli atomarnog vodika su vrlo mali, ali su izrazito važni jer sudjeluju u velikom broju elementarnih kemijskih reakcija.



Slika 4.44. Distribucija vodika

- a) ravnina uz zid, pogled sa strane
- b) centralna ravnina, pogled sa strane
- c) ravnina plamenika, pogled sprijeda
- d) ravnina plamenika, tlocrt

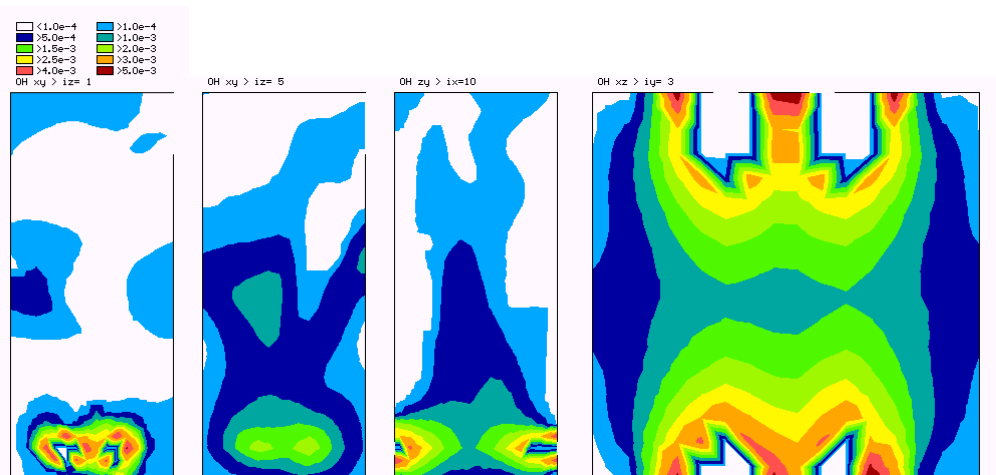


Slika 4.45. Distribucija atomarnog vodika

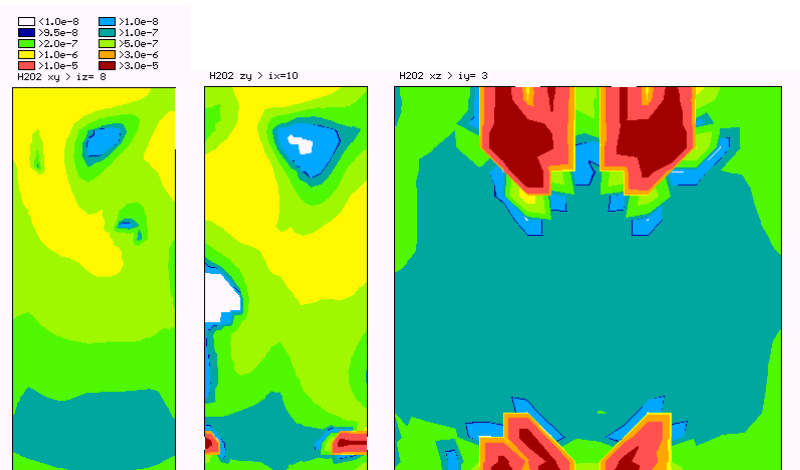
- a) ravnina u blizini zida, pogled sa strane
- b) ravnina na trećini ložišta, pogled sa strane
- c) ravnina plamenika, pogled sprijeda
- d) ravnina plamenika, tlocrt

Hidroksilni se radikal ponaša na sličan način kao i prethodne dvije kemijske vrste, naglo nastajući u zoni plamena s visokim temperaturnim gradijentom, te zatim polako nestajući u području razvijenog plamena. Njegova je distribucija prikazana u različitim presječnim ravninama na sl. 4.46.

Distribucija vodikovog peroksida prikazana je na slici 4.47. Vodikov peroksid nastaje već u hladnoj zoni plamenika, maksimum dostiže na granici područja s velikim temperaturnim gradijentima, zatim rapidno nestaje, što se sve najbolje vidi na slikama 4.47b-c, te zatim opet nastaje kada dimni plinovi izađu iz zone plamena u gornjoj polovici ložišta (sl. 4.47a-b). Na sličan se način ponaša i radikal HO_2 prikazan na slici 4.48, ali bez ponovnog rasta u gornjoj polovici ložišta.

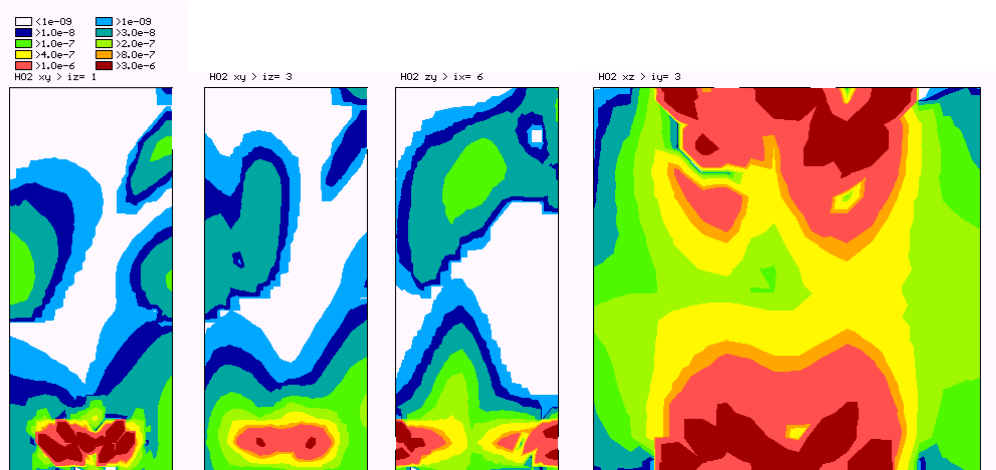


Slika 4.46. Distribucija hidroksilnog radikala
 a) ravnina uz zid, pogled sa strane
 b) ravnina na trećini ložišta, pogled sa strane
 c) ravnina plamenika, pogled sprijeda
 d) ravnina plamenika, tlocrt



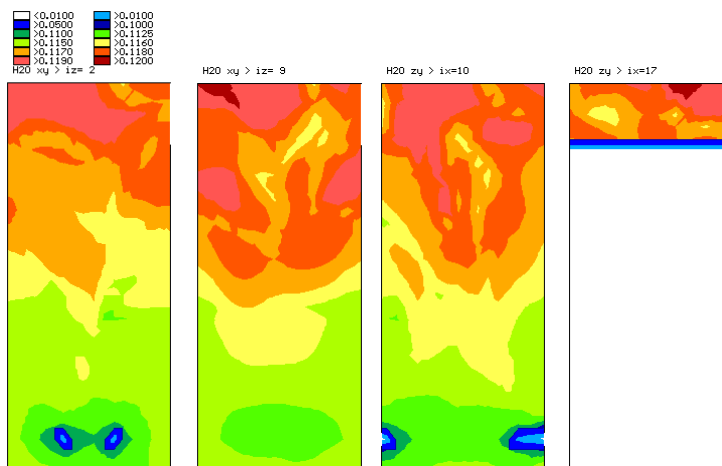
Slika 4.47. Distribucija vodikovog peroksida
 a) centralna ravnina, pogled sa strane
 b) ravnina plamenika, pogled sprijeda
 c) ravnina plamenika, tlocrt

Sav će vodik na kraju procesa oksidacije završiti kao dio vodene pare koja počinje nastajati već u dijelu plamena s visokim temperaturnim gradijentima. Taj se proces nastavlja dalje čitavim tokom kroz ložište, i tek pri izlazu iz ložišta dostiže vrhunac. Distribucija vodene pare prikazana je na slici 4.49.



Slika 4.48. Distribucija radikala HO_2

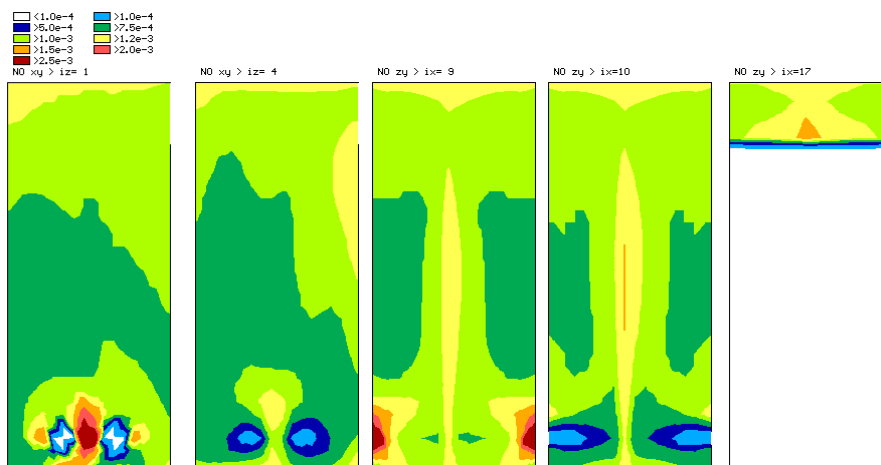
- ravnina uz zid plamenika, pogled sa strane
- ravnina na šestini ložišta, pogled sa strane
- ravnina plamenika, pogled sprijeda
- ravnina plamenika, tlocrt



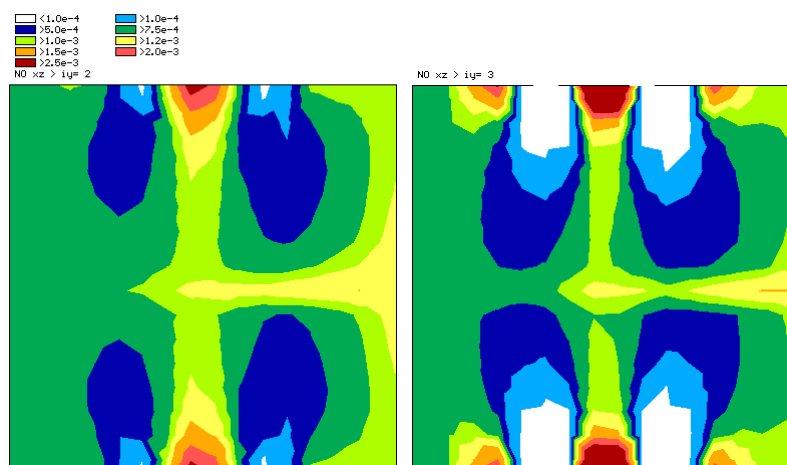
Slika 4.49. Distribucija vodene pare

- ravnina u blizini zida, pogled sa strane
- centralna ravnina, pogled sa strane
- druga ravnina plamenika, pogled sprijeda
- izlazna ravnina, pogled sprijeda

Distribucija dušik (II) oksida prikazana je na slikama 4.50 i 4.51, u različitim presječnim ravninama. Može se uočiti izraziti maksimum masenog udjela u području između dva plamenika (sl. 4.50a, 4.50c, 4.51b). Nešto manji maksimumi nalaze se i vanjske strane plamenika uz zid (sl. 4.51b). Očito je da u hladnoj zoni nema dušik (II) oksida, ali se zona s niskim masenim udjelom nastavlja i dalje prema sredini ložišta, što je vjerojatno posljedica toga što visoke brzine strujanja, i dakle kratko vrijeme zadržavanja, ne pogoduju nastanku NO. To bi objasnilo maksimume uza zid, u zoni visokih temperaturnih gradijenata i relativno niskih brzina strujanja. Maseni udio dušik (II) oksida pada nakon izlaska iz zone plamenika (donja trećina ložišta) što se može dobro vidjeti na slici 4.50, da bi zatim u gornjoj trećini ložišta maseni udio ponovo rastao. Na slikama 4.50c-d može se vidjeti još jedna zona nastanka NO, koja se proteže skoro čitavom dužinom ložišta i nalazi se u centru plamena.

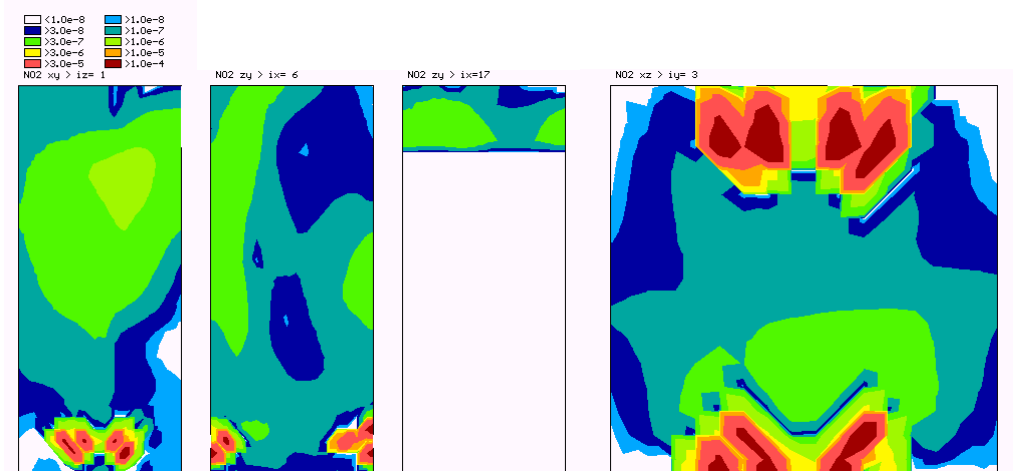


Slika 4.50. Distribucija dušik (II) oksida
 a) ravnina uz zid plamenika, pogled sa strane
 b) ravnina na četvrtini ložišta, pogled sa strane
 c) centralna ravnina, pogled sprijeda
 d) druga ravnina plamenika, pogled sprijeda
 e) izlazna ravnina, pogled sprijeda



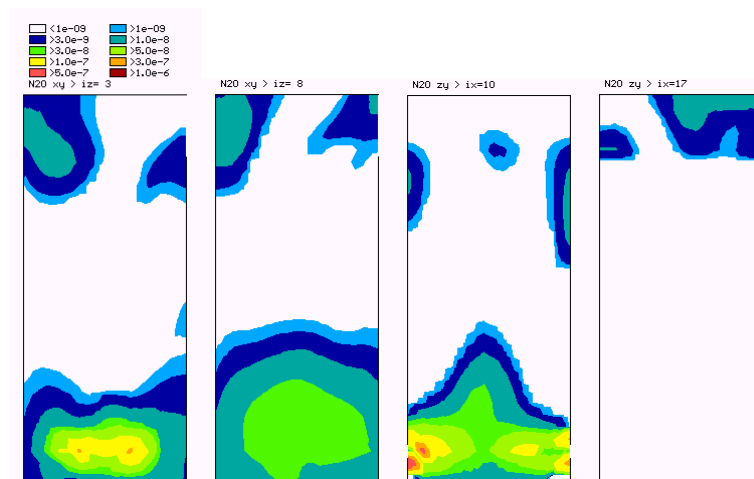
Slika 4.51. Distribucija dušik (II) oksida, tlocrt
 a) ravnina ispod ravnine plamenika
 b) ravnina plamenika

Nasuprot tome dušik (IV) oksid nastaje već u hladnoj zoni i vrlo brzo dostiže maksimum (sl. 4.52a-b i 4.52d), da bi se maseni udio nakon toga smanjivao. U gornjem dijelu ložišta NO_2 ponovo nastaje uz bočne zidove, dakle izvan područja plamena, te se maseni udio povećava (sl. 4.52a). Uočljivo je da je maseni udio NO_2 u centru plamena nizak (sl. 4.52b).



Slika 4.52. Distribucija dušik (IV) oksida

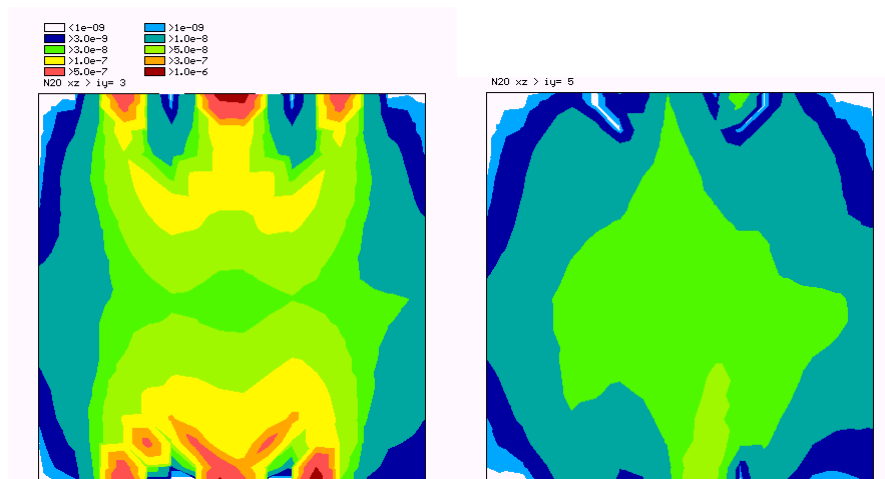
- ravnina uz zid, pogled sa strane
- ravnina plamenika, pogled sprijeda
- izlazna ravnina, pogled sprijeda
- ravnina plamenika, tlocrt



Slika 4.53. Distribucija dušik (I) oksida

- ravnina na šestini ložišta, pogled sa strane
- centralna ravnina, pogled sa strane
- ravnina plamenika, pogled sprijeda
- izlazna ravnina, pogled sprijeda

Distribucija trećeg dušikovog oksida, N_2O , prikazana je na slikama 4.53 i 4.54. Dušik (I) oksid nastaje uglavnom u zoni velikih temperaturnih gradijenata oko plamenika (sl. 4.53c i 4.54a). S padom temperature veći dio N_2O dalje oksidira u dušik (II) oksid, što se može vidjeti pogledom na slike 4.53a-c i 4.54b. Iznad zone plamenika oblak dušik (I) oksida poprima isti ovalni oblik kao i plamen.



Slika 4.54. Distribucija dušik (I) oksida, tlocrt

5. ZAKLJUČAK

U ovom je radu iznesen postupak sprežanja računanja prijenosa topline i mase metodom kontrolnih volumena s računanjem brzina produkcije kemijskih vrsta rješavanjem kinetičkog modela integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi. Izneseni postupak pretpostavlja da se svaki kontrolni volumen može modelirati kao kemijski reaktor, s početnim uvjetima stanja smjese opisanim izlaznim stanjem iz uzvodnih kontrolnih volumena. Iz promjena temperature i masenih udjela kemijskih vrsta tijekom zadržavanja smjese u kontrolnom volumenu računaju se brzine produkcije kemijskih vrsta te volumenski toplinski tok oslobođen izgaranjem.

U prvom poglavlju rada dan je pregled literature u području modeliranja ložišta s naglaskom na modele od posebnog interesa za ovaj rad, dakle kemijsku kinetiku i modeliranje izgaranja prirodnog plina, objašnjena je svrha rada s obzirom na dosad poznate činjenice u području te je dan pregled metoda istraživanja korištenih u radu.

U drugom je poglavlju prikazan matematički model ložišta generatora pare koji je korišten u radu i koji obuhvaća model izgaranja, konvektivni i difuzivni prijenos topline i mase, te prijenos topline zračenjem, sve to u uvjetima turbulentnog strujanja. Postavljen je detaljan neravnotežan kinetički model izgaranja prirodnog plina (pojednostavljenog smjesom metana i etana) koji obuhvaća 143 elementarne kemijske reakcije i 31 kemijsku vrstu te je pokazana fizikalna veza brzina produkcije kemijskih vrsta s njihovim transportom. Model prijenosa topline i mase prikazan je u Kartezijevom koordinatnom sistemu za stacionarno turbulentno strujanje slabo stlačive, newtonske, kemijski reaktivne, homogene smjese fluida. Turbulencija je modelirana Prandtlovom duljinom puta miješanja. Prijenos topline zračenjem računat je zonalnom metodom, u kojoj su površine direktne izmjene računane Monte Carlo metodom.

U trećem je poglavlju iznesena numerička procedura integracije transportnih jednadžbi metodom kontrolnih volumena, ukratko je objašnjena zonalna metoda prijenosa topline zračenjem za crna i siva tijela, prikazan je način proračuna brzine izgaranja za sistem reakcija integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi Gearovom metodom, te je izvedeno sprežanje modela izgaranja s modelom transporta. Nadalje su dani rubni uvjeti koji omogućavaju numeričko rješavanje problema, te je prikazan korišteni algoritam rješavanja spregnutih sistema nelinearnih algebarskih jednadžbi iterativnim rješavanjem lineariziranih sistema jednadžbi.

U četvrtom su poglavlju izneseni rezultati dobiveni primjenom prethodno prikazanog modela. Uspoređeni su rezultati proračuna smjese vodika i zraka integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi s eksperimentalnim podacima te je dobiveno vrlo dobro slaganje istih. Taj je primjer poslužio za validaciju samog modela kemijskog reaktora. Model prijenosa topline (uključivo zračenjem) i mase uspoređen je s eksperimentalnim podacima u cijelom nizu navedenih radova, pa se nije prišlo posebnoj validaciji u ovome radu. Međutim, model prijenosa topline i mase spregnut s modelom kemijskog reaktora u drugom je primjeru primijenjen na eksperimentalno horizontalno ložište u IJmuidenu, za koje postoje ekstenzivni eksperimentalni podaci. Rezultati proračuna pokazali su dobro slaganje s eksperimentalnim podacima. U trećem je primjeru model ložišta razvijen u ovome radu primijenjen na

komercijalno vertikalno ložište generatora pare u Sisku. Slaganje je ovdje moglo biti ispitano samo na nekoliko poznatih veličina, izlaznoj temperaturi iz ložišta te toplinskim tokovima na ekrane ložišta. Postignuto je vrlo dobro slaganje s poznatim veličinama. Ovaj je primjer napravljen da bi pokazao mogućnosti modela u proračunu polutanata koji nastaju prilikom izgaranja plinovitog goriva u ložištu generatora pare.

U ovome radu prikazan je razvijeni postupak koji obuhvaća detaljan model izgaranja prirodnog plina, kompatibilan s metodom kontrolnih volumena, čije numeričko rješavanje daje stabilne i konzistentne rezultate. Primijenjeni model izgaranja obuhvaća 143 elementarne kemijske reakcije u kojima sudjeluje 31 kemijska vrsta. Osim osnovnih reakcija u sistemu vodik-kisik, obuhvaćene su i reakcije oba lanca oksidacije metana, metanski i etanski, te dušikova kemija, i to neravnotežni Zeldovichev mehanizam i kemija dušik (I) oksida, dok je zanemarena kemija HNO lanca. Taj je model izgaranja ugrađen u matematički model prijenosa topline i mase u ložištu generatora pare, koji obuhvaća konvektivno-difuzivni transport mase, količine gibanja i energije, te prijenos topline zračenjem. Model je predstavljen s 36 parcijalnih diferencijalnih jednačbi. Na jednačbe je primijenjeno Favreovo usrednjavanje, a utjecaj turbulencije je opisan modelom Prandtlove duljine puta miješanja. Prijenos topline zračenjem rješavan je zonalnom metodom čije su dvije inačice, Hottelova i Monte Carlo, ugrađene u model. Model prijenosa topline i mase rješavan je metodom kontrolnih volumena uz primjenu modificiranog PISO algoritma i *upwind* sheme diferencijacije. Svaki je kontrolni volumen predodčen kao kemijski reaktor u kojem je model izgaranja predstavljen sistemom od 31 obične diferencijalne jednačbe (za svaku kemijsku vrstu po jedna). Sistem običnih diferencijalnih jednačbi rješavan je Gearovom metodom. Početni uvjeti za svaki kemijski reaktor (tj. kontrolni volumen) dobiveni su iz uzvodnih vrijednosti integracijom svih ulaznih kontrolnih površina. Dobivene brzine produkcije pojedinih kemijskih vrsta korištene su u transportnim jednačbama za kemijske vrste za proračun volumenskih promjena. Takav matematički model ložišta generatora pare je jaki alat u proučavanju mehanizama nastanka kemijskih spojeva koji zagađuju okolinu i osmišljavanju postupaka smanjivanja njihove produkcije. Proračunati rezultati među ostalim obuhvaćaju i masene udjele NO_x i CO na izlasku iz ložišta, kao i njihove distribucije po ložištu.

Sljedeći korak u primjeni detaljnog modela izgaranja predmiješanog plamena bilo bi dovođenje kemijske kinetike u međuzavisnost s turbulencijom. Kako će primjena direktne numeričke simulacije još neko vrijeme ostati samo za specijalne slučajeve, a ona bi automatski riješila problem međuzavisnosti, potrebno bi bilo naći palijativno rješenje. Smatra se da bi preuzimanje pristupa koji se najčešće primjenjuje pri modeliranju difuzivnog plamena, tj. rješavanje dodatne diferencijalne jednačbe za funkciju gustoće vjerojatnosti *pdf* moglo dati rezultate. Međutim, za detaljni model izgaranja bi bilo neophodno postaviti multidimenzionalnu *pdf* funkciju, tj. za svaku kemijsku vrstu te za temperaturu po jedna distribucijska varijabla. Osim toga trebalo bi odrediti oblik takve multidimenzionalne distribucije.

Nadalje bilo bi od iznimne važnosti osmisliti mehanizam izbora relevantnog sistema reakcija, koji bi prema željenom cilju proračuna (recimo toplinski tokovi ili nastanak NO_x uz željenu točnost) analizom osjetljivosti automatski napravio taj izbor. U literaturi se može naći vrlo veliki broj radova upravo na temu izbora relevantnog sistema reakcija za pojedini slučaj što znači da je potreba za time značajna. Smatra se da bi se određeni rezultati mogli postići primjenom neuralne mreže.

DODATAK

A. INDEKSNA NOTACIJA

U disertaciji su jednadžbe prikazane indeksnom (ili tenzorskom) notacijom zbog kratkoće zapisa u odnosu na Kartezijsku, a zbog transparentnosti u odnosu na vektorsku notaciju. Sve vektorske veličine označavaju se indeksima i, j, k koji mogu poprimiti tri vrijednosti 1, 2, 3 od kojih svaka odgovara jednoj koordinatnoj osi Kartezijevog koordinatnog sistema:

$$x_i \quad i=1,2,3 \quad (\text{A.1})$$

gdje su:

$$x_1 - x\text{-os}$$

$$x_2 - y\text{-os}$$

$$x_3 - z\text{-os}$$

Vektorska veličina φ_i sastoji se od tri međusobno ortogonalne komponente $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ u smjeru koordinatnih osi, što odgovara $\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z$ komponentama. Po pravilu indeksne notacije postoje dvije vrste indeksa: slobodni i nijemi. Slobodni indeks je onaj koji se u sumandu pojavljuje samo jednom i određuje smjer u vektorskoj jednadžbi, a nijemi indeks se pojavljuje dva puta i označuje sumaciju po tom indeksu. Slijedi primjer upotrebe nijemih indeksa te prijevod zapisa na vektorski i Kartezijski:

$$\frac{\partial \varphi_j}{\partial x_j} = \text{div } \boldsymbol{\varphi} = \frac{\partial \varphi_x}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_y}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_z}{\partial z} \quad (\text{A.2})$$

Vektorska jednadžba u indeksnoj notaciji kakva je na primjer:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j v_i) = \rho f_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{A.3})$$

prevodi se u vektorsku notaciju kao:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{A.4})$$

a u Kartezijskoj rasčlanjuje se na tri skalarne diferencijalne jednadžbe:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_x) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_x) = \rho f_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_y) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_y) = \rho f_y + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_z) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_z) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_z) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_z) = \rho f_z + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \quad (\text{A.7})$$

U radu se koristi simetrični Kroneckerov δ_{ij} tenzor drugog reda definiran kao:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

koji ima supstituirajuće svojstvo:

$$\varphi_j \delta_{ij} = \varphi_i \quad (\text{A.9})$$

Neki dijelovi matematičkog modela nisu pisani pomoću indeksne notacije, jer indeksi (broj kemijske vrste, broj reakcije) nisu indeksi smjera koordinatnog sustava. U tim je slučajevima u tekstu navedeno koji od indeksa su izuzeti od pravila indeksne notacije. Iako je moguće i te indekse predstaviti kao dimenzije višedimenzionalnog prostora, i shodno tome na njih primijeniti pravila indeksne notacije, to nije uobičajeno u praksi, pa nije korišteno niti u ovome radu.

B. REYNOLDSOV TRANSPORTNI TEOREM

Osnovni zakoni održanja postavljeni su za materijalni volumen V_m , a pomoću Reynoldsovog transportnog teorema [91] mogu se prevesti u formu koja vrijedi za kontrolni volumen. Brzina promjene veličine φ unutar materijalnog volumena jednaka je brzini promjene te veličine unutar kontrolnog volumena (akumulacija) i promjeni te veličine zbog pomicanja granica materijalnog volumena (konvekcija):

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_m} \rho \varphi dV = \underbrace{\int_{KV} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varphi) dV}_{\text{akumulacija}} + \underbrace{\int_{KP} \rho \varphi v_j n_j dA}_{\text{konvekcija}} \quad (\text{B.1})$$

gdje je $\rho \varphi$ volumenska gustoća neke fizikalne veličine, koja je definirana u prostoru i vremenu funkcijom:

$$\varphi = \varphi(x_i, t) \quad (\text{B.2})$$

a v_j brzina strujanja fluida te n_j jedinični vektor normale na površinu kontrolnog volumena.

Osnovni zakoni se općenito mogu definirati kao promjena (izvor/ponor) fizikalne veličine φ u materijalnom volumenu pod utjecajem okoline. Ako se sa S_φ označi volumenski izvor veličine φ , a sa $J_{\varphi,j}$ fluks te veličine kroz kontrolnu površinu (difuzija), dobiva se sljedeći izraz:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_m} \rho \varphi dV = \int_{KV} S_\varphi dV + \int_{KP} J_{\varphi,j} n_j dA \quad (\text{B.3})$$

Izjednačavanjem izraza (B.1) i (B.3) dobiva se sljedeća jednadžba:

$$\int_{KV} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varphi) dV + \int_{KP} \rho \varphi v_j n_j dA = \int_{KV} S_\varphi dV + \int_{KP} J_{\varphi,j} n_j dA \quad (\text{B.4})$$

Na površinske integrale primjeni se teorem Gauss-Ostrogradskog [127]:

$$\int_{KP} \rho \varphi v_j n_j dA = \int_{KV} \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j \varphi) dV \quad (B.5)$$

$$\int_{KP} J_{\varphi,j} n_j dA = \int_{KV} \frac{\partial J_{\varphi,j}}{\partial x_j} dV \quad (B.6)$$

te se dobije integralno-diferencijalni oblik osnovnog zakona brzine promjene veličine φ :

$$\int_{KV} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j \varphi) \right] dV = \int_{KV} \left[S_\varphi + \frac{\partial J_{\varphi,j}}{\partial x_j} \right] dV \quad (B.7)$$

Primjenom leme o proizvoljnosti volumena integracije [91] dobije se diferencijalni oblik brzine promjene fizikalne veličine φ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j \varphi) = S_\varphi + \frac{\partial J_{\varphi,j}}{\partial x_j} \quad (B.8)$$

C. RAČUNANJE POVRŠINA DIREKTNE IZMJENE

Usporedbom integrala (3.130) i (3.142) vidi se da su površine direktne izmjene površina-volumen $\overline{s_1 g_2}$ i volumen-površina $\overline{g_1 s_2}$ identične:

$$\overline{gs} = \overline{sg} = \int_{\Delta A \Delta V} \frac{\alpha \cos \vartheta \tau(r)}{\pi r^2} dV dA \quad (C.1)$$

Površine direktne izmjene topline zračenjem $\overline{g_1 g_2}$ i $\overline{s_1 g_2}$ moraju se numerički integrirati. Primijenjena je Gauss-Legendreova metoda integracija.

Ako se volumenski integral (3.132) prevede u linijski, površina direktne izmjene volumen-volumen $\overline{g_1 g_2}$ postaje šesterostruki integral:

$$\overline{g_1 g_2} = \int_{\Delta V_2} \int_{\Delta V_1} \frac{\alpha^2 \tau(r)}{\pi r^2} dV_1 dV_2 = \quad (C.2)$$

$$\int_{\Delta z_2} \int_{\Delta y_2} \int_{\Delta x_2} \int_{\Delta z_1} \int_{\Delta y_1} \int_{\Delta x_1} \frac{\alpha^2 e^{-\alpha \sqrt{(x_2-x_1)^2 + (y_2-y_1)^2 + (z_2-z_1)^2}}}{\pi [(x_2-x_1)^2 + (y_2-y_1)^2 + (z_2-z_1)^2]} dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2$$

Prema Gauss-Legendreovoj metodi integracije [128] integral funkcije $f(t)$ u granicama $[-1, 1]$ može se aproksimirati s:

$$\int_{-1}^1 f(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i f(t_i) \quad (C.3)$$

gdje su A_i i t_i faktori dani u tablici C.1, a n stupanj Legendreovog polinoma koji se koristi za interpolaciju. Veći broj daje u principu točnije rezultate, ali zahtjeva mnogo više kompjuterskog vremena. Za opći slučaj kada se integrira funkcija $f(x)$ na intervalu $[a, b]$ dobije se:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n A_i f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} t_i\right) \quad (C.4)$$

Tablica C.1. Faktori u Gauss-Legendreovoj integralnoj formuli trećeg i četvrtog stupnja

n	i	t_i	A_i
3	1; 3	∓ 0.77459667	5/9
	2	0	8/9
4	1; 4	∓ 0.86113631	0.34785484
	2; 3	∓ 0.33998104	0.6514516

Ako je funkcija $f(x)$ u stvari i sama integral funkcije $f_2(x_1, x_2)$ na intervalu $[a_2, b_2]$ dobije se aproksimativni izraz za dvostruki integral:

$$\int_{a_1, a_2}^{b_1, b_2} f(x_1, x_2) dx_2 dx_1 = \frac{b_1 - a_1}{2} \sum_{i_1=1}^{n_1} A_{i_1} \left[\frac{b_2 - a_2}{2} \sum_{i_2=1}^{n_2} A_{i_2} f\left(\frac{b_1 + a_1}{2} + \frac{b_1 - a_1}{2} t_{i_1}, \frac{b_2 + a_2}{2} + \frac{b_2 - a_2}{2} t_{i_2}\right) \right] \quad (C.5)$$

Uz:

$$\hat{A}_{i_m} = \frac{b_m - a_m}{2} A_{i_m} \quad (C.6)$$

$$x_{i_m} = \frac{b_m + a_m}{2} + \frac{b_m - a_m}{2} t_{i_m} \quad (C.7)$$

dobije se izraz za integraciju šesterostrukog integrala:

$$\int_{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6}^{b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6} f(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) dx_6 dx_5 dx_4 dx_3 dx_2 dx_1 = \sum_{i_1=1}^{n_1} \hat{A}_{i_1} \left[\sum_{i_2=1}^{n_2} \hat{A}_{i_2} \left[\sum_{i_3=1}^{n_3} \hat{A}_{i_3} \left[\sum_{i_4=1}^{n_4} \hat{A}_{i_4} \left[\sum_{i_5=1}^{n_5} \hat{A}_{i_5} \left[\sum_{i_6=1}^{n_6} \hat{A}_{i_6} f(x_{i_1}, x_{i_2}, x_{i_3}, x_{i_4}, x_{i_5}, x_{i_6}) \right] \right] \right] \right] \right] \right] \right] \quad (C.8)$$

Kao optimalna kombinacija reda polinoma integracije n_m odabrane su sljedeće vrijednosti:

$$n_m = \begin{cases} 3 & m = 1, 2, 3 \\ 4 & m = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (C.9)$$

U specijalnom slučaju površine direktne izmjene topline volumena sa samim sobom, podintegralna funkcija ima singularitete po čitavom volumenu kad god se točka u jednom volumenu poklapa identički s točkom u drugom volumenu. Da bi se izbjegli singulariteti

prilikom numeričke integracije stupnjevi polinoma integracije za tri osi jednog volumena ne smiju biti jednaki onima za tri osi drugoga volumena. Kod integracije površine direktne izmjene za dva susjedna volumena singulariteti se pojavljuju na dodirnoj plohi.

Na sličan se način računaju i peterostruki integrali površina direktne izmjene površina-volumen. Kako Gauss-Legendreova metoda ne uzima vrijednost funkcije na granici integracije u obzir tako u tom slučaju izbor stupnja polinoma nije važan.

D. THOMASOV ALGORITAM

Thomasov algoritam (ili TDMA, engl. *Three Diagonal Matrix Algorithm*) je direktna metoda koja rješava jednodimenzionalni problem (tj. matrica linearnog sistema ima tri dijagonale) u jednom prolazu. Recimo da je zadan sistem od n jednadžbi s n nepoznanica φ_i :

$$d_i \varphi_i = a_i \varphi_{i+1} + b_i \varphi_{i-1} + c_i \quad i = 1 \dots n \quad (\text{D.1})$$

Uz zadane rubne uvjete moguće je pokazati da sljedeća jednadžba sukcesivnim rješavanjem od većeg i prema manjem daje rješenje sistema:

$$\varphi_i = \alpha_i \varphi_{i+1} + \gamma_i \quad i = n \dots 1 \quad (\text{D.2})$$

gdje su:

$$\alpha_i = \frac{a_i}{d_i - b_i \alpha_{i-1}} \quad (\text{D.3})$$

$$\gamma_i = \frac{c_i - b_i \gamma_{i-1}}{d_i - b_i \alpha_{i-1}} \quad (\text{D.4})$$

Vrijednosti koeficijenata na donjoj granici zadane su kao:

$$\alpha_0 = 0 \quad (\text{D.5})$$

$$\gamma_0 = \varphi_0 \quad (\text{D.6})$$

E. VIŠEMREŽNA KOREKTIVNA METODA (MULTIGRID)

Višemrežna korektivna metoda (multigrid) je iterativna procedura koja nezavisno od koraka mreže te odnosa koeficijenata ubrzava konvergenciju [129]. Dobar teoretski uvid u metodu se može dobiti u [130]. Metoda je prvo razvijena u radovima [131] i [132]. Mogućnosti ove metode u rješavanju eliptičnih problema pokazane su u [133-134]. Brandt [135] interpolira rješenje na finijoj mreži, a metoda aditivne korekcije prvi put je predložena u [136]. Multigrid metoda aditivne korekcije (ACM) za anizotropne koeficijente iznesena je u radu Hutchinsona i Raithbyja [53] kakva je uz manje modifikacije [54-55] upotrebljena u ovome radu. Daljnji rad na primjeni metode u rješavanju problema strujanja fluida može se naći u [138].

Opća forma sistema algebarskih jednadžbi za najfiniju mrežu, dakle onu mrežu na kojoj se traži distribucija veličine φ , glasi (3.25):

$$\begin{aligned}
a_{\varphi,P}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_P &= a_{\varphi,E}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_E + a_{\varphi,W}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_W + \\
&\quad a_{\varphi,N}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_N + a_{\varphi,S}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_S + \\
&\quad a_{\varphi,U}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_U + a_{\varphi,D}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_D + b_{\varphi}^{i_0,j_0,k_0}
\end{aligned} \tag{E.1}$$

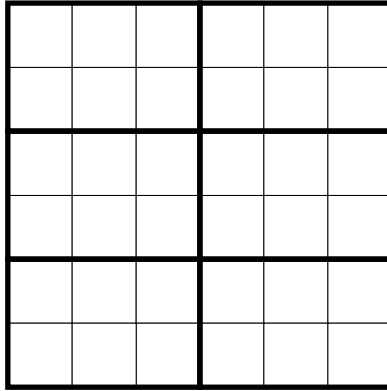
gdje su i_0, j_0, k_0 , koordinate elementa respektivno u x, y, z smjeru. Analognu jednadžbu treba riješiti i za prvi nivo multigrida, s time što se sad ne rješava distribucija veličine φ , nego korekcija te veličine δ na grubljoj mreži i_1, j_1, k_1 :

$$\begin{aligned}
a_{\delta^1,P}^{i_1,j_1,k_1} \delta_P^1 &= a_{\delta^1,E}^{i_1,j_1,k_1} \delta_E^1 + a_{\delta^1,W}^{i_1,j_1,k_1} \delta_W^1 + \\
&\quad a_{\delta^1,N}^{i_1,j_1,k_1} \delta_N^1 + a_{\delta^1,S}^{i_1,j_1,k_1} \delta_S^1 + \\
&\quad a_{\delta^1,U}^{i_1,j_1,k_1} \delta_U^1 + a_{\delta^1,D}^{i_1,j_1,k_1} \delta_D^1 + b_{\delta^1}^{i_1,j_1,k_1}
\end{aligned} \tag{E.2}$$

Za m -ti nivo multigrida dobije se sljedeći opći izraz:

$$\begin{aligned}
a_{\delta^m,P}^{i_m,j_m,k_m} \delta_P^m &= a_{\delta^m,E}^{i_m,j_m,k_m} \delta_E^m + a_{\delta^m,W}^{i_m,j_m,k_m} \delta_W^m + \\
&\quad a_{\delta^m,N}^{i_m,j_m,k_m} \delta_N^m + a_{\delta^m,S}^{i_m,j_m,k_m} \delta_S^m + \\
&\quad a_{\delta^m,U}^{i_m,j_m,k_m} \delta_U^m + a_{\delta^m,D}^{i_m,j_m,k_m} \delta_D^m + b_{\delta^m}^{i_m,j_m,k_m}
\end{aligned} \tag{E.3}$$

Da bi se očuvalo svojstvo konzervacije, tj. bilance fizikalne veličine po kontrolnom volumenu, koeficijent s jedne strane kontrolnog volumena grublje mreže jednak je zbroju svih koeficijenata s te strane ako oni donose vrijednost veličine iz čvora koji je izvan većeg kontrolnog volumena.



Slika E.1 Prijelaz s finije na grublju mrežu

Ako su m_x^m, m_y^m, m_z^m faktori okrupnjenja mreže između $m-1$ i m nivoa multigrida koeficijenti se proračunavaju na sljedeći način:

$$a_{\delta^m,E}^{i_m,j_m,k_m} = \sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} a_{\delta^{m-1},E}^{m_x^m i_m, j_{m-1}, k_{m-1}} \right] \tag{E.4}$$

Treba primijetiti da se radi o sumi istočnih koeficijenata samo po zadnjoj ravnini u x smjeru elemenata u $m-1$ nivou koji su sadržani u kontrolnom volumenu m -tog nivoa multigrida. Ostali koeficijenti dobiju se na sličan način:

$$\mathbf{a}_{\delta^m, W}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, W}^{m_x^m(i_{m-1})+1, j_{m-1}, k_{m-1}} \right] \quad (\text{E.5})$$

$$\mathbf{a}_{\delta^m, N}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, N}^{i_{m-1}, m_y^m j_m, k_{m-1}} \right] \quad (\text{E.6})$$

$$\mathbf{a}_{\delta^m, S}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, S}^{i_{m-1}, m_y^m(j_m-1)+1, k_{m-1}} \right] \quad (\text{E.7})$$

$$\mathbf{a}_{\delta^m, U}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, U}^{i_{m-1}, j_{m-1}, m_z^m k_m} \right] \quad (\text{E.8})$$

$$\mathbf{a}_{\delta^m, D}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, D}^{i_{m-1}, j_{m-1}, m_z^m(k_m-1)+1} \right] \quad (\text{E.9})$$

Centralni koeficijent m -tog nivoa multigrida jednak je sumi centralnih koeficijenata $m-1$ nivoa umanjenoj za sumu svih koeficijenata $m-1$ nivoa koji prenose informaciju o svojstvu φ iz jednog u drugi volumen unutar kontrolnog volumena m -tog nivoa multigrida:

$$\mathbf{a}_{\delta^m, P}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{nb} \mathbf{a}_{\delta^m, nb}^{i_m, j_m, k_m} + \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \left(\mathbf{a}_{\delta^{m-1}, P}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} - \sum_{nb} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, nb}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \right) \right] \right] \quad (\text{E.10})$$

Treba primijetiti da je ovako komplicirani izraz posljedica toga što centralni koeficijent nije samo suma susjednih, već u njemu postoji i komponenta izvora.

Slobodni koeficijent $\mathbf{b}_{\delta^m}^{i_m, j_m, k_m}$ suma je svih reziduala kontrolnih volumena na $m-1$ nivou koji ulaze u kontrolni volumen na m -tom nivou multigrida:

$$\mathbf{b}_{\delta^m}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \mathbf{R}_{\delta^{m-1}}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \right] \right] \quad (\text{E.11})$$

gdje je rezidual $m-1$ nivoa multigrida:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\delta^{m-1}}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} &= \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, E}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_E^{m-1} + \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, W}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_W^{m-1} + \\ &\quad \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, N}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_N^{m-1} + \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, S}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_S^{m-1} + \\ &\quad \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, U}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_U^{m-1} + \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, D}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_D^{m-1} + \\ &\quad \mathbf{b}_{\delta^{m-1}}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} - \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, P}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_P^{m-1} \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

Vrijednost korekcije δ_P^{m-1} dobije se podrelaksiranjem korekcije iz grublje mreže za čitavu poddomenu:

$$\delta_p^{m-1} = \delta_p^{*m-1} + \iota_{\delta^{m-1}} \delta_p^m \quad (\text{E.13})$$

gdje je δ_p^{*m-1} najsvježije dosad proračunata vrijednost δ_p^{m-1} , $\iota_{\delta^{m-1}}$ faktor relaksacije, a veza među indeksima mreže m i $m-1$ definirana kao:

$$i_m = \frac{i_{m-1} - 1}{m_x^m} + 1 \quad (\text{E.14})$$

$$j_m = \frac{j_{m-1} - 1}{m_y^m} + 1 \quad (\text{E.15})$$

$$k_m = \frac{k_{m-1} - 1}{m_z^m} + 1 \quad (\text{E.16})$$

Ako se sa δ^0 označi fizikalna veličina φ ovime je dobiven potpun sistem algebarskih jednadžbi na svim nivoima multigrida. Postavlja se nadalje pitanje kako odabrati faktore okrupnjenja mreže m_x^m , m_y^m , m_z^m . Prema [55] i [130] pokazalo se da se greška najbolje otklanja kada su faktori okrupnjenja 2, ali kako broj kontrolnih volumena nije uvijek djeljiv s 2 koriste se po potrebi i drugi: 3, 5, 7 itd. Na primjer mreža 20x48x20 okrupnjavati će se prema sljedećoj shemi:

Tablica E.1 Faktori okrupnjenja mreže za multigrid na primjeru mreže 20x48x20

m	mreža	m_x^m	m_y^m	m_z^m
0	20x48x20			
1	10x24x10	2	2	2
2	5x12x5	2	2	2
3	1x6x1	5	2	5

Algoritam prema [53] kreće od dva prolaza rješavača (linijski Gauss-Seidel) prvo na najfinijoj mreži pa u slučaju da suma reziduala nije prepolovljena [137], prelazi na grublju mrežu:

$$R_{\delta^m} \leq 0.5 R_{\delta^m}^* \quad (\text{E.17})$$

gdje su R_{δ^m} i $R_{\delta^m}^*$ sume reziduala iz tekuće i prošle iteracije na m -tom nivou multigrida:

$$R_{\delta^m} = \sum_{i_m=1}^{n_x^m} \left[\sum_{j_m=1}^{n_y^m} \left[\sum_{k_m=1}^{n_z^m} \left| R_{\delta^m}^{i_m, j_m, k_m} \right| \right] \right] \quad (\text{E.18})$$

gdje su n_x^m , n_y^m , n_z^m broj elemenata u x , y , z smjeru mreže m -tog nivoa multigrida.

Smatra se da je iterativni postupak rješavanja sistema algebarskih jednadžbi korekcija m -tog nivoa multigrida iskonvergirao, ako je smanjio sumu reziduala za jedan red veličine od onoga iz prethodnog, $m-1$ nivoa multigrida:

$$R_{\delta^m} \leq 0.1 R_{\delta^{m-1}} \quad (\text{E.19})$$

Dozvoljena suma reziduala na nivou najfinije mreže propisana je međutim svojom apsolutnom vrijednošću:

$$R_{\delta^0} = R_{\varphi} \leq \varepsilon_{\varphi} \quad (\text{E.20})$$

F. GEAROVA METODA

Za rješavanje sistema običnih diferencijalnih jednačbi (3.89), kakav se dobije postavljenjem modela izgaranja, primijenjena je metoda integracije razvijena od Geara [42, 139]. Ta je metoda upravo namijenjena za rješavanje krutih (engl. *stiff*) sistema običnih diferencijalnih jednačbi, karakteriziranih velikom razlikom između pojedinih vremenskih konstanti sistema, tj. maksimalnog koraka integracije koji omogućava stabilnost sistema i vremena potrebnog da se postigne ravnotežno stanje. U sistemu kemijskih reakcija ta razlika može iznositi i desetak redova veličine za neka, kratka, područja integracije. Rješavanje takvog sistema klasičnim metodama s konstantnim korakom bi izazvalo vrlo neekonomično korištenje kompjuterskog vremena za razliku od Gearove metode s promjenjivim korakom integracije.

Sistem običnih diferencijalnih jednačbi je dan izrazom:

$$\dot{Y}_i = \frac{dY_i}{dt} = f_i(Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_\alpha}, t) \quad (\text{F.1})$$

uz zadane početne uvjete $Y_{i,0}$. U n -tom vremenskom trenutku t_n definirane su vrijednosti $Y_{i,n}$, $\dot{Y}_{i,n}$, te korak integracije (treba napomenuti da se indeks n ne ponaša po pravilima indeksne notacije nego služi samo kao oznaka n -tog koraka):

$$h_n = t_n - t_{n-1} \quad (\text{F.2})$$

Gearova metoda sastoji se od dva koraka, prediktorskog u kojem se računa aproksimacija veličina $Y_{i,n}$ i $h_n \dot{Y}_{i,n}$, te korektorskog koji iste veličine korigira tako da bi sistem običnih diferencijalnih jednačbi bio zadovoljen.

Prediktorski korak računa te veličine ovisno o redu Gearove metode q , na temelju vrijednosti iz q prošlih vremenskih koraka:

$$Y_{i,n} = \sum_{j=1}^q \alpha_j Y_{i,n-j} + h_n \beta_0 \dot{Y}_{i,n} \quad (\text{F.3})$$

$$h_n \dot{Y}_{i,n} = \sum_{j=1}^q \gamma_j Y_{i,n-j} + h_n \delta_0 \dot{Y}_{i,n} \quad (\text{F.4})$$

gdje su faktori α , β , γ i δ konstante koje ovise o metodi. Ako tako aproksimirane vrijednosti označimo s gornjim indeksom 0 moguće je jednačbu (F.3) zapisati kao:

$$Y_{i,n}^0 - h_n \beta_0 \dot{Y}_{i,n}^0 = \sum_{j=1}^q \alpha_j Y_{i,n-j} \quad (\text{F.5})$$

Uvrštavanjem u jednačbu (F.3) dobije se:

$$Y_{i,n} = Y_{i,n}^{[0]} + \beta_0 (h_n \dot{Y}_{i,n} - h_n \dot{Y}_{i,n}^{[0]}) \quad (\text{F.6})$$

Kako se u toj jednadžbi zajedno pojavljuju i $Y_{i,n}$ i $\dot{Y}_{i,n}$, jednadžbu treba riješiti iterativno. Jednadžba se može pisati kao:

$$g_i(Y_{1,n}, Y_{2,n}, \dots, Y_{n_\alpha, n}) = Y_{i,n} - Y_{i,n}^{[0]} - \beta_0(h_n \dot{Y}_{i,n} - h_n \dot{Y}_{i,n}^{[0]}) = 0 \quad (\text{F.7})$$

Pronalaženje nula tog sistema jednadžbi može se efikasno postići Newtonovom metodom:

$$P_{ij,n}^{[m]}(Y_{j,n}^{[m+1]} - Y_{j,n}^{[m]}) = -g_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha, n}^{[m]}) \quad (\text{F.8})$$

gdje je m broj iteracije a:

$$P_{ij,n}^{[m]} = \delta_{ij} - h_n \beta_0 \left(\frac{\partial f_i}{\partial Y_j} \right)_{Y_{i,n}^{[m]}} \quad (\text{F.9})$$

Iz jednadžbe (F.3) očita je potreba za praćenjem povijesti rješenja. Umjesto stvarnih vrijednosti $Y_{i,n-1}$, $Y_{i,n-2}$, ..., $Y_{i,n-q}$ spremaju se aproksimacije vremenskih derivacija u vektor na sljedeći način:

$$\mathbf{z}_{i,n} = \left[Y_{i,n}, h_n \dot{Y}_{i,n}, \frac{h_n^2}{2!} \ddot{Y}_{i,n}, \dots, \frac{h_n^q}{q!} Y_{i,n}^{(q)} \right] \quad (\text{F.10})$$

Ako je vektor $\mathbf{z}_{i,n-1}$ poznat, predikcija vektora $\mathbf{z}_{i,n}^{[0]}$ može se dobiti njegovom multiplikacijom s gornjotrokutastom Pascalovom matricom:

$$\mathbf{z}_{ik,n}^{[0]} = A_{ij}(q) \mathbf{z}_{jk,n-1} \quad (\text{F.11})$$

gdje je:

$$\mathbf{A}(q) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ & 1 & 2 & 3 & \dots & q \\ & & 1 & 3 & \dots & \\ & & & 1 & \dots & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{F.12})$$

Nakon što je iterativnim putem izračunat korektor, vektor $\mathbf{z}_{i,n}$ se korigira:

$$\mathbf{z}_{ik,n} = \mathbf{z}_{ik,n}^{[0]} + \mathbf{c}_{i,n} l_k \quad (\text{F.13})$$

gdje je:

$$\mathbf{c}_{i,n} = \frac{Y_{i,n} - Y_{i,n}^{[0]}}{l_0} \quad (\text{F.14})$$

a l_k , ($k = 0, \dots, q$) su konstante koje ovise o metodi i njenom redu. Konstanta l_0 je identična konstanti β_0 u jednadžbi (F.3), a s ostalima je dana u tablici F.1.

Tablica F.1. Konstante integracije Gearove metode [139]

$q =$	1	2	3	4	5	6
l_0	1	2/3	6/11	24/50	120/274	720/1764
l_1	1	1	1	1	1	1
l_2		1/3	6/11	35/50	225/274	1624/1764
l_3			1/11	10/50	85/274	735/1764
l_4				1/50	15/274	175/1764
l_5					1/274	21/1764
l_6						1/1764

Potpuni je algoritam dan sljedećim skupom izraza:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{z}_{ik,n}^{[0]} &= \mathbf{A}_{ij}(q) \mathbf{z}_{jk,n-1} && \text{prediktor} \\
 Y_{i,n}^{[m+1]} &= Y_{i,n}^{[m]} + l_0 (P_{ij,n}^{[m]})^{-1} F_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}) \\
 h_n \dot{Y}_{i,n}^{[m+1]} &= h_n \dot{Y}_{i,n}^{[m]} + l_1 (P_{ij,n}^{[m]})^{-1} F_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}) \\
 F_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}) &= h_n f_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}, t_n) - h_n \dot{Y}_{i,n}^{[m]} \\
 \mathbf{c}_{i,n} &= \sum_{m=0}^M (P_{ij,n}^{[m]})^{-1} F_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}) && \text{korektorske iteracije} \\
 &&& m = 0, 1, \dots, M-1 \\
 Y_{i,n} &= Y_{i,n}^{[0]} + \mathbf{c}_{i,n} l_0 \\
 \mathbf{z}_{ik,n} &= \mathbf{z}_{ik,n}^{[0]} + \mathbf{c}_{i,n} l_k \quad k = 0, \dots, q && \text{(F.15)}
 \end{aligned}$$

Prema diskusiji o stabilnosti metode [42] može se zaključiti da se algoritam može koristiti do uključivo šestog reda. Zato su i konstante dane samo do toga reda metode.

Do sada nije ništa rečeno kako se računaju početne vrijednosti vektora $\mathbf{z}_{i,n}$, tj. prije nego što je moguće izračunati nekoliko derivacija, te kako se mijenja veličina koraka integracije. Gearova metoda integracije sadrži algoritam za automatsku promjenu veličine koraka i reda metode kako bi se smanjilo vrijeme potrebno za rješavanje sistema običnih diferencijalnih jednadžbi. Korak je mali samo u području krutosti sistema, dok je u ostalom području integracije maksimaliziran tako da bi se još uvijek zadovoljili kriteriji stabilnosti.

U prvih se dva ili tri koraka Gearova metoda reducira na Eulerovu metodu prvog reda s vrlo malim koracima, da bi kasnije pokušala povećati korak i red metode. Za to je potrebno procijeniti grešku odbacivanja koraka integracije pri aktualnom redu metode, te jednom redu više i jednom redu niže. Greška odbacivanja jednog koraka za i -tu zavisnu varijablu iznosi:

$$C_{q+1}h_n^{q+1}Y_{i,n}^{(q+1)} + O(h_n^{q+2}) \quad (\text{F.16})$$

gdje C_{q+1} ovisi o metodi. Drugi se član zanemaruje, a prvi se aproksimira na sljedeći način:

$$Y_{i,n}^{(q+1)} \approx \frac{Y_{i,n}^{(q)} - Y_{i,n-1}^{(q)}}{h_n} \quad (\text{F.17})$$

Korekcija zadnjeg člana vektora $\mathbf{z}_{i,q,n}$ iznosi:

$$l_q c_{i,n} = \frac{h_n^q Y_{i,n}^{(q)}}{q!} - \frac{h_n^q Y_{i,n-1}^{(q)}}{q!} \quad (\text{F.18})$$

Kombinacijom tih dvaju izraza dobije se aproksimacija prvog člana greške odbacivanja (F.16):

$$C_{q+1}h_n^{q+1}Y_{i,n}^{(q+1)} \approx C_{q+1}l_q c q! \quad (\text{F.19})$$

Iterativni postupak računanja korekcije n -tog koraka je konvergirao kada je sljedeći test zadovoljen:

$$D_2 = \left(\frac{c_{i,n}}{\varepsilon_i} \right)^2 \leq E_2 \quad (\text{F.20})$$

gdje su:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_r |Y_{i,n-1}| + \varepsilon_a \quad (\text{F.21})$$

$$E_2 = n_\alpha \left(\frac{1}{l_q C_{q+1} q!} \right)^2 = n_\alpha \left(\frac{q+1}{l_q q!!} \right)^2 \quad (\text{F.22})$$

a ε_r i ε_a su relativna i apsolutna dozvoljena greška, tj. za male vrijednosti $|Y_{i,n-1}|$ koristi se apsolutna dozvoljena greška, a za veće vrijednosti koristi se relativna dozvoljena greška, što omogućuje da početna vrijednost $|Y_{i,n-1}|$ bude nula. U slučaju da uvjet (F.20) nije zadovoljen, čitav se korak ponavlja, ali s manjim korakom:

$$h_{n,2} = \frac{h_n}{\rho_2} \quad (\text{F.23})$$

gdje je ρ_2 faktor promjene koraka integracije:

$$\rho_2 = 1.2 \left(\frac{D_2}{E_2} \right)^{\frac{1}{2(q+1)}} \quad (\text{F.24})$$

Faktor 1.2 uzima u obzir zanemareni dio greške odbacivanja (F.16).

Da bi se smanjio red metode, greška odbacivanja iznosi:

$$C_q h_n^q Y_{i,n}^{(q)} + O(h_n^{q+1}) \quad (\text{F.25})$$

Postupa se kao i s greškom odbacivanja (F.16) s time što je sada prvi član poznat i proporcionalan zadnjem članu vektora $\mathbf{z}_{iq,n}$. Uvjet koji se sada postavlja je dakle:

$$D_1 = \left(\frac{\mathbf{z}_{iq,n}}{\varepsilon_i} \right)^2 \leq E_1 \quad (\text{F.26})$$

gdje je:

$$E_1 = n_\alpha \left(\frac{1}{I_q C_q q!} \right)^2 = n_\alpha \left(\frac{1}{I_q (q-1)!} \right)^2 \quad (\text{F.27})$$

Faktor promjene koraka integracije procjenjuje se za slučaj smanjivanja reda metode sa:

$$\rho_1 = 1.3 \left(\frac{D_1}{E_1} \right)^{\frac{1}{2q}} \quad (\text{F.28})$$

Faktor 1.3 u ovom izrazu služi da bi se dalo prednost ne mijenjanju reda metode.

Greška odbacivanja u višem redu metode iznosi:

$$C_{q+2} h_n^{q+2} Y_{i,n}^{(q+2)} + O(h_n^{q+3}) \quad (\text{F.29})$$

Drugi član se zanemaruje, a prvi se aproksimira na sljedeći način:

$$h_n^{q+2} Y_{i,n}^{(q+2)} = h_n^{q+1} Y_{i,n}^{(q+1)} - h_n^{q+1} Y_{i,n-1}^{(q+1)} = I_q q! (c_{i,n} - c_{i,n-1}) \quad (\text{F.30})$$

a uvjet je dan nejednadžbom:

$$D_3 = \left(\frac{c_{i,n} - c_{i,n-1}}{\varepsilon_i} \right)^2 \leq E_3 \quad (\text{F.31})$$

gdje je:

$$E_3 = n_\alpha \left(\frac{1}{I_q C_q q!} \right)^2 = n_\alpha \left(\frac{q+2}{I_q q!} \right)^2 \quad (\text{F.32})$$

Faktor promjene koraka integracije procjenjuje se za slučaj povećanja reda metode sa:

$$\rho_3 = 1.4 \left(\frac{D_3}{E_3} \right)^{\frac{1}{2(q+2)}} \quad (\text{F.33})$$

Faktor 1.4 i u ovom izrazu služi da bi se dalo prednost ne mijenjanju ili smanjivanju reda metode. Najmanja vrijednost od tri faktora ρ_1 , ρ_2 i ρ_3 će biti izabrana za dijeljenje koraka h_n . Ako je najmanji ρ_1 tada se red metode smanjuje, ako je najmanji ρ_3 tada se red metode povećava, a ako je pak najmanji faktor ρ_2 tada se red ne mijenja. Tome treba dodati i još nekoliko heurističkih uvjeta. Ukoliko je faktor povećanja korak manji od 1.1 onda se povećanje ne ostvaruje jer će greška nastala prilikom povećanja sasvim prebrisati djelovanje ubrzanja integracije. Iz istih razloga (povećanje koraka integracije unosi grešku) nakon promjene koraka integracije, $q+2$ koraka se ne dozvoljava nova promjena.

Da bi se smanjilo vrijeme računanja, inverzna matrica $(P_{ij,n}^m)^{-1}$ se ne evaluira u svakom koraku. Samo ako korak ne konvergira, ili ako je faktor h_n/l_0 promijenjen za više od 30%, te u najboljem slučaju ako je proteklo 20 koraka od zadnje evaluacije. U slučaju da i nakon evaluacije inverzne matrice postupak računanja korekcije koraka ne konvergira veličina koraka integracije je podijeljena s 4. Ako niti nakon 5 smanjivanja koraka postupak računanja korekcije i dalje ne konvergira, red metode se smanji na 1 a korak se podijeli s 10 i krene se ponovo od zadnjeg prihvaćenog koraka.

POPIS OZNAKA

Veličine

veličina	opis	jedinica
a	koeficijent interpolacionih polinoma	n.d.
	koeficijent u diskretiziranim jednažbama	kg/s
	donja granica integracije u Gauss-Legendreovoj metodi	m
	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
A	površina	m ²
A_i	faktori u Gauss-Legendreovoj metodi integracije	–
A_{ij}	Pascalova gornjotrokutasta matrica	–
a_t	koeficijent u temperaturnoj jednažbi	W/K
b	slobodni koeficijent u diskretiziranim jednažbama	*kg/s
	gornja granica integracije u Gauss-Legendreovoj metodi	m
	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
b_1	konstanta modela tri siva plina	–
b_2	konstanta modela tri siva plina	1/K
b_t	slobodni koeficijent u temperaturnoj jednažbi	W
c	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
	korektor u Gearovoj metodi	kg/kg
C	koncentracija	kmol/m ³
	konstanta	n.d.
	konstanta Gearove metode	–
C_P	specifična toplina	J/kg K
C_P	molarna specifična toplina	J/kmol K
d	koeficijent u jednažbi tlaka	m ² s/kg
	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
D	difuzivna provodnost	kg/m ² s, Pa s/m
	faktor u Gearovoj metodi	–
	protok pare	t/h
D_{ij}	tenzor brzine deformacije	1/s
e	gustoća zračenja	W/m ²
E	faktor u Gearovoj metodi	–
E_a	energija aktivacije	J/kmol
e_λ	spektralna gustoća zračenja	W/m ³
f	specifična masena sila	m/s ²
F	jačina konvekcije	kg/m ² s
g	specifična gravitacijska sila, gravitacijska konstanta	m/s ²
Δg	promjena molarne spec. Gibbsove slobodne energije kem. vrste	J/kmol
ΔG	promjena molarne spec. Gibbsove slobodne energije reakcije	J/kmol
\overline{gg}	površina direktne izmjene zračenjem volumen-volumen	m ²
\overline{gs}	površina direktne izmjene zračenjem volumen-površina	m ²

veličina	opis	jedinica
h	specifična entalpija	J/kg
	visina	m
	korak integracije	s
Δh	specifična entalpija	J/kg
ΔH	molarna specifična entalpija	J/kmol
H_d	donja ogrjevna vrijednost jedinice goriva	J/kg, J/m ³
i	intenzitet zračenja	W/m ²
i_λ	spektralni intenzitet zračenja	W/m ³
j	fluks kemijske vrste	kg/m ² s
J	fluks fizikalne veličine	*kg/m ² s
k	brzina izgaranja (reakcije)	(kmol/m ³) ^{1-m} /s
	turbulentna kinetička energije	J/kg, m ² /s ²
	konstanta modela tri siva plina	1/bar m
K	koeficijent apsorpcije	1/m
k_0	koeficijent frekvencije sudara	(kmol/m ³) ^{1-m} /sK _{α}
K_C	konstanta ravnoteže bazirana na koncentracijama	(kmol/m ³) ^{Δn}
K_n	konstanta ravnoteže bazirana na broju molova	kmol ^{Δn}
K_p	konstanta ravnoteže bazirana na parcijalnom tlaku	(N/m ²) ^{Δn}
K_X	konstanta ravnoteže bazirana na molnim udjelima	–
K_Y	konstanta ravnoteže bazirana na masenim udjelima	–
l	konstanta Gearove metode	–
L	srednja duljina puta zrake	m
l_m	duljina puta miješanja	m
ℓ	karakteristični put materijalne čestice	m
m	faktor okrupnjenja mreže	–
M	jedna od kemijskih vrsta	–
\dot{m}	maseni protok	kg/s
n	broj molova	kmol
	broj zraka, broj kontrolnih volumena	–
	stupanj Legendreovog polinoma	–
Δn	razlika sume stehiometrijskih koef. produkata i reaktanata	kmol
n_i	vektor normale	m
n_r	broj parova suprostavljenih reakcija koji se promatra	–
n_T	ukupni broj molova u smjesi	kmol
n_α	broj kemijskih vrsta u smjesi	–
p	tlak	Pa, bar
	parcijalni tlak	Pa, bar
	faktor promjene koraka u Gearovoj metodi	–
P_{ij}	matrica u Gearovoj metodi	–
Pr	Prandtlov broj, odnos viskozne sile i kondukcije	–
q	gustoća toplinskog toka	W/m ²
	red metode integracije	–
Q	toplinski tok	W
q''	gustoća toplinskog toka	W/m ²
q'''	volumenska gustoća toplinskog toka	W/m ³
r	put, udaljenost	m

veličina	opis	jedinica
R	opća plinska konstanta	J/kmol K
	rezidual	*kg/s
R_C	radijus	m
Re	Reynoldsov broj, odnos viskozne i inercione sile	–
s	udaljenost	m
S	izvor fizikalne veličine	*kg/m ³ s
ΔS	molarna specifična entropija	J/kmol K
\overline{sg}	površina direktne izmjene zračenjem površina-volumen	m ²
\overline{ss}	površina direktne izmjene zračenjem površina-površina	m ²
$S_{t,P}$	diskretizirani izvor u temperaturnoj jednadžbi	W/m ³ K
$S_{\phi,P}$	diskretizirani izvor fizikalne veličine	kg/m ³ s
t	vrijeme	s
	temperatura	°C
T	temperatura	K
\mathcal{T}	karakteristično vrijeme materijalne čestice	s
t_i	faktori u Gauss-Legendreovoj metodi integracije	–
u	brzina u smjeru x -osi	m/s
v	brzina	m/s
	brzina u smjeru y -osi	m/s
V	volumen	m ³
w	brzina u smjeru z -osi	m/s
W	molekularna masa	kg/kmol
x	prostorna koordinata	m
X	molarni udio	kmol/kmol
y	prostorna koordinata	m
Y	maseni udio	kg/kg
z	prostorna koordinata	m
\mathbf{z}	vektor povijesti rješenja u Gearovoj metodi	kg/kg
α	eksponent nad temperaturom u Arrheniusovom izrazu	–
	koeficijent apsorpcije	1/m
	apsorptivnost	–
	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
	konstanta metode integracije sistema običnih dif. jed.	–
β	konstanta metode integracije sistema običnih dif. jed.	–
γ	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
	konstanta metode integracije sistema običnih dif. jed.	–
Γ	koeficijent difuzije fizikalne veličine	Pa s
δ	korekcija	*
	konstanta metode integracije sistema običnih dif. jed.	–
δ_{ij}	jedinični tenzor (Kroneckerov δ)	–
ε	emisivnost	–
	disipacija turbulentne kinetičke energije	m ² /s ³
	dozvoljena apsolutna greška	*kg/s
ε_a	dozvoljena apsolutna greška u Gearovoj metodi	kg/kg
ε_i	ukupna dozvoljena apsolutna greška u Gearovoj metodi	kg/kg
ε_r	dozvoljena relativna greška u Gearovoj metodi	–
ζ	faktor zida pri prijelazu topline	–

veličina	opis	jedinica
ϑ	kut između normale na površinu i zrake	rad
ι	faktor relaksacije	–
λ	srednji slobodni put molekule	m
	valna duljina	m
	koeficijent toplinski	W/m K
	pretičak zraka	–
μ	dinamički koeficijent viskoznosti	Pa s
ν	stehiometrijski koeficijent	kmol
ρ	gustoća	kg/m ³
	refleksivnost	–
σ	Prandtl-Schmidtov broj, odnos viskozne sile i difuzije	–
	Stefan-Boltzmannova konstanta	W/m ² K ⁴
σ_{ij}	tenzor naprezanja	N/m ²
Σ_{ij}	tenzor viskoznih naprezanja	N/m ²
τ	srednje slobodno vrijeme molekule	s
	faktor slabljenja zrake	–
	vrijeme	s
τ_c	vremenska konstanta za jednu reakciju i jednu vrstu	s
φ	fizikalna veličina	*
	kut, nezavisna varijabla u sfernom koordinatnom sustavu	rad
ξ	geometrijski težinski faktor	–
ω	brzina produkcije kemijske vrste	kg/m ³ s
	prostorni kut	srad

objašnjenja za jedinice

m	broj reaktanata u određenoj reakciji
n.d.	nije definirana jednoznačno
–	veličina je bezdimenzionalna
*	jedinica ovisi o jedinici fizikalno svojstva φ

Konstante

konstanta	opis	iznos
C_1	konstanta u Planckovom zakonu	0.59544 10 ⁻¹⁶ W m ²
C_2	konstanta u Planckovom zakonu	14.388 10 ⁻⁶ m K
g	gravitacijska konstanta	9.80665 m/s ²
R	opća plinska konstanta	8314 J/kmol K
δ_{ij}	jedinični tenzor (Kroneckerov δ)	$i \neq j \Rightarrow \delta_{ij} = 0$ $i = j \Rightarrow \delta_{ij} = 1$
σ	Stefan-Boltzmannova konstanta	5.6696 10 ⁻⁸ W/m ² K ⁴

Donji indeksi

indeks	opis
0	početna vrijednost najfinija mreža, nulti nivo multigrida

indeks	opis
1	prvi nivo multigrida
<i>a</i>	apsorbiran
<i>b</i>	reakcija u povratnom smjeru (engl. <i>backward</i>) crno tijelo
<i>B</i>	gorivo
<i>bundle</i>	paket, zraka, kvant energije
<i>C</i>	izgaranje koncentracija slobodni dio izvornog člana
<i>d</i>	engl. <i>down</i> , donja kontrolna površina kontrolnog volumena
<i>D</i>	engl. <i>down</i> , donji kontrolni volumen, <i>i, j, k-1</i>
<i>e</i>	ekvilibrijum, ravnoteža emitiran efektivan engl. <i>east</i> , istočna kontrolna površina kontrolnog volumena
<i>E</i>	engl. <i>east</i> , istočni kontrolni volumen, <i>i+1, j, k</i>
<i>eff</i>	efektivan
<i>f</i>	reakcija od reaktanata do produkata (engl. <i>forward</i>) formacija masene sile
<i>g</i>	plin, plinski volumen
<i>h</i>	entalpija
<i>i</i>	indeks u indeksnoj notaciji <i>i</i> -ta kemijska vrsta <i>i</i> -ti kontrolni volumen u smjeru <i>x</i> -osi <i>i</i> -ti volumen ili površina izlazni <i>i</i> -ta diferencijalna jednačica
<i>j</i>	indeks u indeksnoj notaciji <i>j</i> -ta reakcija <i>j</i> -ti kontrolni volumen u smjeru <i>y</i> -osi <i>j</i> -ti red metode
<i>k</i>	indeks u indeksnoj notaciji <i>k</i> -ta kemijska vrsta <i>k</i> -ti kontrolni volumen u smjeru <i>z</i> -osi
<i>kem</i>	kemijski
<i>konv</i>	konvektivni
<i>l</i>	indeks koeficijenta
<i>m</i>	materijalan mehanički <i>m</i> -ta dimenzija <i>m</i> -ti nivo multigrida
<i>M</i>	jedna od kemijskih vrsta
<i>n</i>	broj molova engl. <i>north</i> , sjeverna kontrolna površina kontrolnog volumena <i>n</i> -ti korak, vremenski trenutak <i>n</i> -ti sivi plin
<i>N</i>	engl. <i>north</i> , sjeverni kontrolni volumen, <i>i, j+1, k</i>

indeks	opis
np	susjedni kontrolni volumen, jedan od W, E, S, N, D, U susjedna kontrolna površina, jedna od w, e, s, n, d, u
p	parcijalni tlak sila tlaka
P	engl. <i>point</i> , centralni kontrolni volumen, i, j, k
pr	pregrijanja
r	reflektiran zadržavanje, rezidualan
R	radijacija
s	površina, stijenka engl. <i>south</i> , južna kontrolna površina kontrolnog volumena
S	engl. <i>south</i> , južni kontrolni volumen, $i, j-1, k$
t	turbulentan temperatura
T	temperatura
u	mreža pomaknuta u smjeru x -osi engl. <i>up</i> , gornja kontrolna površina kontrolnog volumena brzina u ulazni
U	engl. <i>up</i> , gornji kontrolni volumen, $i, j, k+1$
v	volumenski mreža pomaknuta u smjeru y -osi brzina v
w	mreža pomaknuta u smjeru z -osi engl. <i>west</i> , zapadna kontrolna površina kontrolnog volumena brzina w zid, hlađenje na zidu
W	engl. <i>west</i> , zapadni kontrolni volumen, $i-1, j, k$
x	u smjeru x -osi
X	molarni udio
y	u smjeru y -osi
Y	maseni udio
z	u smjeru z -osi
α	kemijska vrsta
λ	spektralni
μ	viskozna sila
φ	fizikalna veličina

Gornji indeksi

indeks	opis
0	standardna vrijednost najfinija mreža, nulti nivo multigrada
[0]	aproksimacija vrijednosti u sljedećem koraku
1	prvi nivo multigrada
i	i -ti kontrolni volumen u smjeru x -osi
j	j -ti kontrolni volumen u smjeru y -osi

indeks	opis
k	k -ti kontrolni volumen u smjeru z -osi
m	m -ti nivo multigrada
$[m]$	m -ta iteracija
(q)	q -ta derivacija po vremenu
r	reakcija

Dijakritički znakovi

znak	opis
–	usrednjeni dio fizikalne veličine, Reynoldsovo usrednjavanje
~	usrednjeni dio fizikalne veličine, Favreovo usrednjavanje
·	promjena po vremenu, derivacija po vremenu
··	druga derivacija po vremenu
'	odnosi se na stehiometrijske koeficijente reaktanata usmjereno svojstvo pulzirajući dio fizikalne veličine nakon Reynoldsovog usrednjavanja pseudoveličina, neka veličina uvećana ili umanjena za neki dio korekcija
''	novoizračunata vrijednost, izračunata u tekućoj iteraciji
'''	odnosi se na stehiometrijske koeficijente produkata svedeno na površinu pulzirajući dio fizikalne veličine nakon Favreovog usrednjavanja
''''	svedeno na volumen
*	prethodna vrijednost, izračunata u prethodnoj iteraciji
	predikcija
	pretpostavljena vrijednost
**	prva korekcija
***	druga korekcija
-	odlazeće
+	dolazeće
ˆ	pseudoveličina, neka veličina uvećana ili umanjena za neki dio
ˆ	pseudoveličina, neka veličina uvećana ili umanjena za neki dio

Relacije

indeks	opis
$d\varphi$	infinitesimalna razlika
$\partial\varphi$	infinitesimalna razlika
$\delta\varphi$	konačna razlika
$\Delta\varphi$	konačna razlika
$ \varphi $	apsolutna vrijednost
$\ \varphi_1, \varphi_2\ $	veća vrijednost od φ_1 i φ_2
$O(\varphi)$	red veličine

LITERATURA

- [1] Hottel, H.C., Sarofim, A.F., *Radiant Transfer*, McGraw-Hill Book Company, New York (1967)
- [2] Kuznecov, N.V. i dr., *Tjeplovoi raschot koteljnih agregatov-normativni metod, Energia*, Moskva (1973)
- [3] Johnson, T.R., *Application of the Zone Method of Analysis to the Calculation of Heat Transfer from Luminous Flames*, PhD thesis, University of Sheffield (1971)
- [4] Field, M.A., Gill, D.W, Morgan, B.B, Hawksley, P.G.W., *Combustion of Pulverised Coal*, The British Coal Utilization Research Association, Leatherhead (1967)
- [5] Görner, K., *Technische Verbrennungssysteme*, Springer-Verlag, Berlin (1991)
- [6] Görner, K., Strömungsvorgänge in Feuerräumen von Dampferzeugern - Mathematisches Modell und Simulation, *VGB Kraftwerkstechnik* **66**, 224-233 (1986)
- [7] Richter, W., Anwendung von Berechnungsmodellen für Feuerräume, *VGB Kraftwerkstechnik* **62**, 845-852 (1982)
- [8] Carvalho, M.G., Lockwood, F.C., Thermal comparison of glass furnace operation with oil and natural gas, *Glastech. Ber.* **63**, 233-243 (1990)
- [9] Águas, M.P.N., Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., Modelling the heat transfer in a fluidized bed combustor, *Int. J. Heat & Technology* **10**, 107-124 (1992)
- [10] Coelho, P.J., Carvalho, M.G., Heat transfer in power station boilers, *ASME AES, Thermodynamics and the Design, Analyses and Improvements of Energy Systems* **27**, 365-372 (1992)
- [11] Saraiva, P.C., Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., Mathematical simulation of a circulating fluidized bed, *Combust. Sci. and Tech.* **93**, 223-243 (1993)
- [12] Carvalho, M.G., Mathematical modelling of industrial furnaces and boilers, Invited Lecture, *Proc. of the 3rd European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*, Lisbon, 45pg. (1995)
- [13] Miller, J.A., Bowman, C.T., Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion, *J. P. Energy Combust. Sci.* **15**, 287-338 (1989)
- [14] Champion, M., Bray, K.N.C., Moss, J.B., The turbulent combustion of a propane-air mixture, *Acta Astronaut.* **4**, 291 (1978)
- [15] Cremer, H., Zur Reaktionskinetik der Methan-Oxidation, *Chemie Ing. Techn.* **44**, 8 (1972)
- [16] Bockhorn, H., Lutz, G., Reaction models for the simulation of the oxidation of carbon monoxide in turbulent diffusion flames, *Chem. Eng. Technol.* **10**, 43 (1987)
- [17] Bockhorn, H., Simulation chemischer Reaktionen in turbulenten Strömungen, *Chem. Ing. Techn.* **63**, 715-724 (1991)
- [18] Glarborg, P., Lilleheie, N.I., Byggström, S., Magnussen, B.F., Kilpinen, P., Hupa, M., A reduced mechanism for nitrogen chemistry in methane combustion, *Proc. of 24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 889-898 (1992)
- [19] Drake, M.C., Blint, R.J., Thermal NO_x in stretched laminar opposed-flow diffusion flames with CO/H₂/N₂ fuel, *Combustion and Flame* **76**, 151-167 (1989)
- [20] Drake, M.C., Blint, R.J., Calculations of NO_x formation pathways in propagating laminar, high pressure premixed CH₄/air flames, *Comb. Sci. and Tech.* **75**, 261-285 (1991)

- [21] Vranos, A., Hall, R.J., Influence of radiative loss on nitric oxide formation in counterflow diffusion flames at high pressure, *Combustion and Flame* **93**, 230-238 (1993)
- [22] Sano, T., NO₂ formation in laminar flames, *Comb. Sci. and Tech.* **29**, 261-275 (1982)
- [23] Michaud, M.G., Westmoreland, P.R., Feitelberg, A.S., Chemical mechanisms of NO_x formation for gas turbine conditions, *Proc. of 24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 879-887 (1992)
- [24] Correa, S.M., Smooke, M.D., NO_x in parametrically varied methane flames, *Proc. of 23th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 289-295 (1990)
- [25] Miller, J.A., Branch, M.C., McLean, W.J., Chandler, D.W., Smooke, M.D., Kee, R.J., The conversion of HCN to NO and N₂ in H₂-O₂-HCN-Ar flames at low pressure, *Proc. of 20th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 673-684 (1984)
- [26] Kuo, K.K., *Principles of Combustion*, John Wiley & Sons, New York (1986)
- [27] Patankar, S.V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington (1980)
- [28] Voss, J.B., Calculating turbulent reacting flows using finite chemical kinetics, *AIAA Journal* **25**, 1365-1372 (1987)
- [29] Bray, K.N.C., Turbulent flows with premixed reactants, Libby, P.A., Williams, F.A. (eds.), *Turbulent Reacting Flows*, Springer-Verlag, Berlin, 115 (1980)
- [30] Behrendt, F., Bockhorn, H., Rogg, B., Warnatz, J., Modeling of turbulent CO/air diffusion flames with detailed chemistry, Warnatz, J., Jäger, W. (eds.), *Complex Chemical Reaction Systems - Mathematical Modeling and Simulation*, Springer-Verlag, Berlin, 376 (1987)
- [31] Peters, N., Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, *Prog. Energy Combustion Sci.* **10**, 319 (1984)
- [32] Williams, F.A., Recent advances in theoretical descriptions of turbulent diffusion flames, Murthy, S.N.B. (ed.), *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*, Plenum Press, New York, 189 (1975)
- [33] Bilger, R.W., Turbulent flows with nonpremixed reactants, Libby, P.A., Williams, F.A. (eds.), *Turbulent Reacting Flows*, Springer-Verlag, Berlin, 65 (1980)
- [34] Rogg, B., Behrendt, F., Warnatz, J., Turbulent non-premixed combustion in partially premixed diffusion flamelets with detailed chemistry, *Proc. of 21st Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh (1987)
- [35] O'Brien, E.E., The probability density function (pdf) approach to reacting turbulent flows, Libby, P.A., Williams, F.A. (eds.), *Turbulent Reacting Flows*, Springer-Verlag, Berlin, 185 (1980)
- [36] Pope, S.B., Pdf methods for turbulent reactive flows, *Prog. Energy Combust. Sci.* **11**, 119 (1985)
- [37] Janicka, J., Kollman, W., A two-variables formalism for the treatment of chemical reactions in turbulent H₂-air diffusion flames, *Proc. of 17th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 421 (1979)
- [38] Janicka, J., Kolbe, W., Kollman, W., The solution of a pdf transport equation for turbulent diffusion flames, *Proc. of 26th Heat Transfer and Fluid Mechanics Institute*, 296 (1978)
- [39] Spalding, D.B., Mixing and chemical reaction steady, confined turbulent flames, *Proc. of 13th Symposium on Combustion*, Pittsburgh, 643 (1970)
- [40] Spalding, D.B., Development of the Eddy-Breakup model of the turbulent combustion, *Proc. of 16th Symposium on Combustion*, Pittsburgh, 1657 (1976)

- [41] Bray, K.N.C., Moss, J.B., A unified statistical model of the premixed turbulent flame, *Acta Astronaut.* **4**, 291 (1977)
- [42] Gear, C.W., The automatic integration of ordinary differential equations, *Comm. ACM* **14**, 176-179 (1971)
- [43] Kreuh, L., *Generatori pare*, Školska knjiga, Zagreb (1978)
- [44] Barrow, G.M., *Physical Chemistry*, McGraw Hill, New York (1966)
- [45] Welty, J.R., *Engineering Heat Transfer*, John Wiley & Sons, New York (1978)
- [46] Shih, T.M., *Numerical Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington (1984)
- [47] Schnell, U., Görner, K., Benim, A.C., *Matematische Modellierung von Kohlenstaubflammen*, 3. TECFLAM-Seminar, Karlsruhe (1987)
- [48] Gosman, A.D., Pun, W.M., Runchal, A.K., Spalding, D.B., Wolshtein, M., *Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows*, Academic Press, London, New York (1969)
- [49] Patankar, S.V., A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations, *Num. Heat Transfer* **2** (1979)
- [50] Issa, R.J., Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator splitting, *J. Comput. Physics* **62**, 40 (1985)
- [51] Jang, D.S., Jetli, R., Acharya, S., Comparison of the PISO, SIMPLER and SIMPLEC algorithms for the treatment of the pressure-velocity coupling in steady flow problems, *Num. Heat Transfer* **10**, 209 (1986)
- [52] Duić, N., *Trodimezionalni matematički model procesa u ložištu generatora pare*, magisterij, FSB, Zagreb, 121 str. (1993)
- [53] Hutchinson, B.R., Raithby, G.D., A multigrid method based on the additive correction strategy, *Num. Heat Transfer* **9**, 511 (1986)
- [54] Bogdan, Ž., Duić, N., Primjena višemrežne korektivne metode na rješavanje strujanja u ložištu generatora pare, *Zbornik radova FSB XVII*, Zagreb, 147-154 (1993)
- [55] Duić, N., Schneider, D.R., Bogdan, Ž., Sensitivity analyses of the additive correction multigrid method applied to furnace modeling, *18th International Conference Information Technology Interfaces '96*, Pula, 383-392 (1996)
- [56] Rogallo, R.S., Moin, P., Numerical simulation of turbulent flow, *Annual Review of Fluid Mechanics* **16**, 357-372 (1984)
- [57] Kim, J., Moin, P., Moser, R., Turbulence statistics in fully developed channel flow at Reynolds number, *J. Fluid Mechanics* **177**, 133-166 (1987)
- [58] Miyake, Y., Tsujimoto, K., Beppu, H., DNS of a turbulent flow in a wavy channel, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [59] Launder, B.E., Spalding, D.B., *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, London, New York (1972)
- [60] Wilcox, D.C., *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries, Inc., La Cañada, CA (1993)
- [61] Prandtl, L., Bericht über Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz, *ZAMM* **5**, 136 (1925)
- [62] Harlow, F.H., Nakayama, P.I., Transport of turbulence energy decay rate, *Los Alamos Sci. Lab. Univ. California Rep LA 3854*, Los Alamos (1968)
- [63] Deardorff, J.W., A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers, *J. Fluid Mechanics* **41**, 453-480 (1970)
- [64] Schumann, U., Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli, *J. Comp. Physics* **18**, 376-404 (1975)

- [65] Gao, S., Voke, P.R., Large-eddy simulation of turbulent heat transport in impinging jets, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [66] Gosman, A.D., Lockwood, F.C., Incorporation of a flux model for radiation into a finite-difference procedure for furnace calculations, *Proc. of 14th Symposium (Int.) on Combustion*, Pittsburgh, 661-671 (1973)
- [67] Hottel, H.C., Cohen, E.S., Radiant heat exchange in a gas filled enclosure: allowance for nonuniformity of gas temperature, *A.I.Ch.E.J.* **4**, 3 (1958)
- [68] Howell, J.R., Application of Monte Carlo to heat transfer problems, *Advances in Heat Transfer*, Vol. **5**, Academic Press, New York (1968)
- [69] Steward, F.R., Cannon, P., The calculation of radiative heat flux in a cylindrical furnace using the Monte Carlo method, *Int. J. Heat Mass Transfer* **14**, 245-262 (1971)
- [70] Lockwood, F.C., Shah, N.G., A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures, *Proc. of 18th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1405-1414 (1981)
- [71] Chai, J.C., Lee, H.S., Patankar, S.V., Finite volume method for radiation heat transfer, *J. of Thermophysics and Heat Transfer* **8**, 419-425 (1994)
- [72] Coelho, P.J., Afgan, N., Carvalho, M.G., rad u pripremi, privatna komunikacija (1995)
- [73] Bogdan, Ž., Duić, N., Schneider, D.R., Šerman, N., Afgan, N., Leakage detection in power plant boiler, *Proc. of the 3rd European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*, Lisbon, 6pg. (1995)
- [74] Prigogine, I., Defay, R., *Chemische Thermodynamik*, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig (1962)
- [75] Moore, W.J., *Fizička hemija*, Naučna knjiga, Beograd (1962)
- [76] Bogdan, Ž., Duić, N., Matematički model ložišta za izgaranje plinskog goriva, *CROSS*, Zagreb (1992)
- [77] Isserlina, A.S. i dr., *Teorija i prakтика sžiganja gaza*, Nedra, Lenjingrad (1972)
- [78] Stull, D.R., Prophet, H., *JANAF Thermochemical Tables*, Office of Standard and Reference Data, NBS, Washington, D.C. (1971)
- [79] Warnatz, J., Rate coefficients in the C/H/O system, Gardiner, W.C., Jr (ed.), *Combustion Chemistry*, Springer-Verlag, Berlin, 197 (1984)
- [80] Seinfeld, J.H., *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*, John Wiley & Sons, New York, NY (1986)
- [81] Johnston, H.S., Atmospheric Ozone, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **43**, 1 (1992)
- [82] Bowman, C.T., Control of combustion-generated nitrogen oxide emissions driven by regulation, *Proc. of 24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 859-878 (1992)
- [83] Warnatz, J., Mass, U., Dibble, R.W., *Combustion*, Springer-Verlag, Berlin (1996)
- [84] Chigier, N.A., Pollution formation and destruction in flames - introduction, *Prog. Energy Combust. Sci.* **1**, 3-15 (1975)
- [85] Barreiros, A., Carvalho, M.G., Costa, M., Lockwood, F.C., Prediction of the near burner region and measurements of NO_x and particulate emissions in heavy fuel oil spray flames, *Combustion and Flame* **92**, 231-240 (1993)
- [86] Saraiva, P.C., Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., Modelling combustion, NO_x emissions and SO₂ retention in a circulating fluidized bed, *Proc. of ASME Int. Conf. On Fluidized Bed Combustion*, 375-380 (1993)
- [87] Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., Coelho, P.J., Coimbra, C.F.M., Nogueira, M., Modelling of combustion and NO_x emissions in industrial equipment, *Pure & Appl. Chem.* **65**, 345-354 (1993)

- [88] Carvalho, M.G., Semião, V.S., Coelho, P.J., Modelling and optimization of the NO formation in an industrial glass furnace, *Trans. of ASME, J. Engineering for Industry* **114**, 514-523 (1992)
- [89] Waldmann, H., Huschauer, H., Verfahren zur Berechnung der Verteilung von Temperatur und Wärmestromdichte in Feuerräumen von Großdampfzeugern, *VDI-Berichte* **211**, 44-58 (1974)
- [90] Coimbra, C.F.M., Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., 3-D numerical modelling for predicting NO_x emissions from an industrial pulverized coal combustor, *Fuel* **73**, 1128-1134 (1994)
- [91] Fancev, M., Mehanika fluida, *Tehnička enciklopedija* **8**, Jugoslavenski leksikografski zavod, Zagreb (1982)
- [92] Virag, Z., *Automatizacija postupka numeričkog rješavanja ravninskog turbulentnog strujanja*, magistarski rad, Zagreb (1985)
- [93] Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc., New York (1960)
- [94] Schneider, D.R., *Proračun ložišta generatora pare*, diplomski rad, FSB, Zagreb, 69 str. (1993)
- [95] Schneider, D.R., Duić, N., Bogdan, Ž., Primjena Monte Carlo metode pri modeliranju prijenosa topline zračenjem u kotlovskom ložištu, *Energetska i procesna postrojenja, Energetika marketing*, Dubrovnik, 259-264 (1996)
- [96] Bogdan, Ž., Schneider, D.R., Duić, N., Prediction of the thermal radiation heat transfer in a furnace by Monte Carlo zone method, *Proc. of the 16th International Conference Information Technology Interfaces '94*, Pula, 253-258 (1994)
- [97] Planck, M., Distribution of energy in the spectrum, *Ann. Phys.* **4**, 553 (1901)
- [98] Siegel, R., Howell, J.R., *Thermal Radiation Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington (1981)
- [99] Hinze, J.O., *Turbulence*, McGraw Hill, New York (1975)
- [100] Dempsey, S., Pericleous, K.A., Galea, E.R., Progress in the development of a new fractal LES model for the modelling of turbulent flows with heat transfer, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [101] Moinat, P., Lesieur, M., Large-eddy simulation of the turbulent flow over a swept backward-facing step, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [102] Hoffmann, G., Benocci, C., Large-eddy simulation of planar free jets, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [103] Boussinesq, J., Théorie de l'écoulement tourbillant, *Mem. Pre. par. div. Sav.* **23** (1877)
- [104] Nikuradse, J., Gesetzmäßigkeit der turbulenten Strömung in glatten Röhren, *Forsch. Arb. Ing. Wes.* **356** (1932)
- [105] Courant, R., Isaacson, E., Rees, M., On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by finite difference, *Comm. Pure Appl. Math.* **5**, 243 (1952)
- [106] Gentry, R.A., Martin, R.E., Daly, B.J., An Eulerian differencing method for unsteady compressible flow problems, *J. Comp. Phys.* **1**, 87 (1966)
- [107] Barakat, H.Z., Clark, J.A., Analytical and experimental study of transient laminar natural convection flows in partially filled containers, *Proc. 3rd Int. Heat. Transfer Conf.*, Chicago, vol. II, 152 (1966)
- [108] Runchal, A.K., Wolfshtein, M., Numerical integration procedure for the steady state Navier-Stokes equations, *J. Mech. Eng. Sci.* **11**, 445 (1969)

- [109] Michelfelder, v.S., Bartelds, H., Lowes, T.M., Pai, B.R., Berechnung des Wärmeflusses und der Temperaturverteilung in Verbrennungskammern, *VDI-Berichte* **211**, 23-31 (1974)
- [110] Carvalho, M.G., Farias, T., Fontes, P., Multidimensional modeling of radiative heat transfer in scattering media, *Transactions of ASME, J. of Heat Transfer* **115**, 486-489 (1993)
- [111] Duić, N., Bogdan, Ž., Schneider, D.R., Šerman, N., Afgan, N., Tube leakage effect on radiation heat flux in boiler, *Proc. of the ICHMT International Symposium on Radiative Heat Transfer*, Kuşadasi, 610-619 (1995)
- [112] Görner, K., Dietz, U., Strahlungsaustauschrechnungen mit der Monte-Carlo-Methode, *Chem.-Ing.-Tech.* **62**, 23-33 (1990)
- [113] Shyy, W., Effects of open boundary on incompressible Navier-Stokes flow computation, *Numerical Heat Transfer* **12**, 157-178 (1987)
- [114] Shyy, W., Numerical outflow boundary condition for Navier-Stokes flow calculations by a line iterative method, *AIAA Journal* **23**, 1847-1848 (1985)
- [115] *Svodnie tablice teplovyh raschotov kotel Pp 660/140 GM-P56*, Podoljskij mashinostroiteljnij zavod (1976)
- [116] Bogdan, Ž., Duić, N., Schneider, D.R., Three-dimensional simulation of the performance of an oil-fired combustion chamber, *Proc. of the 2nd European Thermal Sciences & 14th UIT National Heat Transfer Conference*, Rome, 1493-1498 (1996)
- [117] Bogdan, Ž., Duić, N., Zonalni proračun ložišta, *Proc. of Energetska i procesna postrojenja, Energetika marketing*, Dubrovnik, 165-169 (1994)
- [118] Duić, N., Bogdan, Ž., Modeling of the high-temperature dissociation of CO₂ in the steam generator furnace, *Proc. of the 16th International Conference Information Technology Interfaces '94*, Pula, 265-270 (1994)
- [119] Bogdan, Ž., Duić, N., Three-dimensional simulation of the combustion process in an oil-fired furnace, *Proc of the 15th International Conference Information Technology Interfaces '93*, Pula, 351-356 (1993)
- [120] Bogdan, Ž., Duić, N., Numerical simulation of air-flow in a heated room, *Proc. of the 12th International Symposium of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning INTERKLIMA '93*, Zagreb, 7-12 (1993)
- [121] Bogdan, Ž., Duić, N., The three-dimensional mathematical model of the horizontal furnace, *Proc. of the 38th International Annual Conference KoREMA*, Zagreb, 584-587 (1993)
- [122] Duić, N., Bogdan, Ž., Matematički model produkcije ugljičnog dioksida i sumpornog dioksida u ložištu generatora pare, *Proc. of the International Symposium on Energy and Environment '92*, Opatija, 255-262 (1992)
- [123] Bogdan, Ž., Duić, N., Proračun prijelaza topline u ložištu pomoću dvodimenzionalnog matematičkog modela, *Zbornik radova FSB XVI*, Zagreb, 197-204 (1992)
- [124] Bogdan, Ž., Duić, N., The mathematical model of the steam generator combustion chamber, *Automatika* **33**, 93-98 (1992) reprint from *Proc. of the 37th International Annual Conference KoREMA*, Zagreb, 77-80 (1992)
- [125] Kulagin, L.V., Ohotnikov, S.S., *Sžiganje tjaželjnih židkih topliv*, Nedra, Moskva (1967)
- [126] Radhakrishnan, K., Comparison of numerical techniques for integration of stiff ordinary differential equations arising in combustion chemistry, *NASA TP-2372* (1984)
- [127] Bronštejn, I.N., Semendjaev, K.A., *Spračovnik po matematike*, Nauka, Moskva (1980)
- [128] Demidovich, B.P., Maron, I.A., *Computational Mathematics*, Mir Publishers, Moscow (1976)

- [129] Sivaloganathan, S., Shaw, G.J., A multigrid method for recirculating flows, *Int. J. for Num. Methods in Fluids* **8**, 417 (1988)
- [130] Briggs, W.L., *A Multigrid Tutorial*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia (1987)
- [131] Fedorenko, R.P., A relaxation method for solving elliptic difference equations, *USSR Comput. Math. Math. Phys.* **1**, 1092 (1962)
- [132] Bakhvalov, N.S., On the convergence of a relaxation method with natural constraints on the elliptic operator, *USSR Comput. Math. Math. Phys.* **6**, 101 (1966)
- [133] Hackbusch, W., On the multi-grid method applied to difference equations, *Computing* **20**, 291 (1978)
- [134] Wesseling, P., A robust and efficient multigrid method, *Lecture Notes in Mathematics* **960**, Springer-Verlag, New York, 614 (1981)
- [135] Brandt, A., Multi-level Adaptive solutions to boundary-value problems, *Math. Comput.* **31**, 333 (1977)
- [136] Settari, A., Aziz, K., A generalization of the additive correction methods for the iterative solution of matrix equations, *SIAM J. Numer. Anal.* **10**, 506 (1973)
- [137] Phillips, R.E., Schmidt, F.W., Multigrid techniques for numerical solution of the diffusion equation, *Numer. Heat Transfer* **7**, 251 (1984)
- [138] Virag, Z., Džijan, I., Korbar, R., Application of additive correction method to fluid flow calculations, *Proc. of the 2nd Congress of Croatian Society of Mechanics*, Supetar, 575-582 (1997)
- [139] Krajačić, Z., *Gear-ova metoda*, diplomski rad, PMF, Zagreb (1989)
- [140] Coelho, P.J., Lemos, C., Carvalho, M.G., Duić, N., Modeling of a solid fuel combustion chamber of a ramjet using a multi-block domain decomposition technique, *34th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, AIAA 96-0847, Reno, NV, 11pg (1996)

KRATKA BIOGRAFIJA

Neven Duić je rođen u Zagrebu 1965. godine, gdje je završio osnovnu školu 1979., te maturirao 1983. u Matematičko-informatičkom obrazovnom centru. Iste godine je upisao Fakultet strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu, a studij strojarstva je započeo po odsluženju vojnog roka 1984. godine.

Diplomirao je 1990. obranom radnje "Matematički model ložišta". Krajem iste godine upisuje postdiplomski studij energetskog smjera na Fakultetu strojarstva i brodogradnje. Magistrirao je 1993. obranom rada pod nazivom "Trodimenzionalni matematički model procesa u ložištu generatora pare".

Od 1990. do 1995. radi kao znanstveni novak, prvo kao mlađi asistent, a od 1993. u statusu asistenta, na projektu "Prijenos topline i tvari u energetskim generatorima pare" (2-08-189), na Zavodu za energetska postrojenja Fakulteta strojarstva i brodogradnje. Od 1996. radi kao znanstveni novak, u statusu asistenta, na projektu "Napredne tehnologije vođenja pogona termoelektrana" (120-001). Početkom 1998. prihvaćen mu je poticajni projekt pod nazivom "Modeliranje izgaranja plinovitog goriva u ložištu" (120-056).

Objavio je 23 znanstvena rada, od toga pet u znanstvenim časopisima te šest radova na međunarodnim kongresima održanim u inozemstvu, od kojih je jedan i sam prezentirao.

Aktivno je učestvovao u osnivanju i organizaciji kompjuterske učionice Laboratorija za energetska postrojenja 1995. godine. Tijekom rada učionice u njoj je izrađeno 26 diplomskih radova, dva magisterija, te veliki broj semestralnih i drugih studentskih radova uz pomoć računala.

U okviru projekta "Prijenos topline i tvari u energetskim generatorima pare" provodi u nekoliko navrata 14 mjeseci (1994-97.) na studijskom boravku na Instituto Superior Técnico u Lisabonu, Portugal. Kao član organizacije IAESTE četiri puta je obavljao stručnu praksu u inozemstvu u ukupnom trajanju od 8 mjeseci: Finska, Švedska, Čehoslovačka i Poljska. Za vrijeme studija bio je demonstrator na Zavodu za energetska postrojenja te na predmetu Primjena elektroničkih računala.

Upisan je u registar istraživača 1992. godine u znanstvenom području strojarstvo, a od 1993. godine u znanstveno-istraživačkom zvanju znanstveni asistent pod matičnim brojem 179672.

Oženjen je.

Vlada engleskim, portugalskim i španjolskim jezikom. Portugalski jezik je studirao na Filozofskom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu. Služi se francuskim i talijanskim.

SHORT BIOGRAPHY

Neven Duić was born in Zagreb in 1965, where he graduated from the elementary school in 1979 and from the Mathematics and Computer Science Secondary School in 1983. The same year he was conscripted for a one-year military service. He started to study mechanical engineering at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, in 1984.

He graduated mechanical engineering in 1990 by defending the thesis "Mathematical Model of a Furnace". By the end of the same year he enters postgraduate study of the power engineering at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, which he finished by defending the master thesis "Three Dimensional Mathematical Model of the Processes in the Steam Generator Furnace" in 1993.

From 1990-95 he was a research assistant on the project "Heat and Mass Transfer in Utility Steam Generators" (2-08-189), at the Power Engineering Department, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture. Since 1996 he is a research assistant on the project "Advanced Control Technology in Thermal Power Plants" (120-001) at the same Department.

He authored 23 papers in all, five of them in scientific journals and six at the congresses held abroad, one of which he presented himself.

He took active role in establishing and managing of computer workshop of the Power Engineering Laboratory in 1995. Since its establishment the workshop produced 26 graduation thesis, two master thesis and a large number of student projects and assignments.

As a part of international scientific cooperation he spent in several periods 14 months (1994-97) as a guest researcher at the Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal. As a member of IAESTE he carried out four traineeships abroad (Finland, Sweden, Czech Republic, Poland) in the total duration of 8 months.

He is married.

He speaks, reads and writes English, Portuguese and Spanish. Portuguese language he studied at the Faculty of Philosophy, University of Zagreb. He can communicate in French and Italian.