

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Damir Foschio

Zagreb, 2012.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

Utjecaj modela turbulencije na rezultate numeričke simulacije izgaranja ugljene prašine

Mentor:

Prof. dr. sc. Neven Duić, dipl. ing.

Student:

Damir Foschio

Zagreb, 2012

IZJAVA

Izjavljujem da sam ovaj rad izradio samostalno koristeći znanja stečena na Fakultetu Strojarstva i Brodogradnje služeći se navedenom literaturom.

ZAHVALA

Zahvaljujem mentoru prof.dr.sc. Nevenu Duiću na smjernicama i sugestijama koje su pridonijele izradi ovog diplomskog rada.

Posebna zahvala ide dr.sc. Milanu Vujanoviću i Hrvoju Mikulčiću mag.ing. na velikom strpljenju i pruženoj pomoći koju su nesebično iskazali tijekom izrade rada.

Obitelji i kolegama sa fakulteta hvala na podršci tijekom studiranja.

Damir Foschio



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE



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

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

DIPLOMSKI ZADATAK

Student:

Mat. br.:

Naslov:

Opis zadatka:

Zadatak zadan:

Rok predaje rada:

Zadatak zadao:

Predsjednik Povjerenstva:

Prof. dr. sc. Mladen Andrassy

Referada za diplomske i završne ispite

Obrazac DS - 3A/PDS - 3A

SADRŽAJ

SADRŽAJ	1
POPIS SLIKA	3
POPIS TABLICA	4
POPIS OZNAKA	5
SAŽETAK	9
SUMMARY	10
1. UVOD	11
2. MATEMATIČKI MODEL	13
2.1. Uvod.....	13
2.2. Transportni procesi	13
2.3. Osnovne jednađbe dinamike fluida	14
2.3.1. Zakon očuvanja mase.....	14
2.3.2. Zakon očuvanja količine gibanja	15
2.3.3. Zakon očuvanja energije	16
2.3.4. Reynoldsov transportni teorem	17
2.3.5. Konstitutivne relacije	18
2.4. Numerička procedura	20
2.5. Metoda kontrolnih volumena	22
3. MODELIRANJE TURBULENCIJE	23
3.1. Osnove turbulentnog strujanja	23
3.2. Usrednjavanje transportnih jednađbi.....	26
3.3. Boussinesqova hipoteza	28
3.4. Korišteni modeli turbulencije u ovom radu	29
3.4.1. k-ε model turbulencije (standardni)	30
3.4.2. k-zeta-f	32
3.4.3. PANS	34
4. IZGARANJE	36
4.1. Uvod.....	36
4.2. Arrheniusov zakon brzine kemijske reakcije	36
4.3. Model izgaranja ugljene prašine	37
4.3.1. Piroliza	37
4.3.2. Oksidacija	38
4.3.3. Model opisivanja izgaranja čistog ugljika	40
4.3.4. Masena bilanca čestice ugljene prašine	41
4.3.5. Dodatne homogene reakcije.....	43
4.3.6. Transportne jednađbe za kemijske vrste	44
5. PRIJENOS TOPLINE ZRAČENJEM	46

5.1. Uvod.....	46
5.2. Jednadžba prijenosa topline zračenjem.....	47
5.3. Model zračenja P1.....	48
6. RAČUNALNA DOMENA I POSTAVKE SIMULACIJE.....	49
6.1. Ložište.....	49
6.2. Gorionik.....	50
6.3. Postavke simulacije.....	51
6.3.1. Mreža i rubni uvjeti.....	51
6.3.2. Ulazni parametri.....	52
6.3.3. Vremenski korak.....	53
6.3.4. Podjela domene na više procesora.....	53
6.3.5. Korištena numerička shema diferencije.....	54
6.3.6. Podrelaksacijski faktori.....	55
7. REZULTATI.....	56
7.1. Temperaturno polje.....	56
7.2. Plinovita faza.....	57
7.2.1. Metan CH ₄	57
7.2.2. Ugljikov dioksid CO ₂	58
7.2.3. Ugljikov monoksid CO.....	59
7.2.4. Dušik N ₂	60
7.2.5. Kisik O ₂	61
7.3. Čestice.....	62
7.3.1. Prikaz udjela u čestici ugljena za k-ε model turbulencije.....	62
7.3.2. Prikaz udjela u čestici ugljena za k-ζ-f model turbulencije.....	63
7.3.3. Prikaz udjela u čestici ugljena za PANS model turbulencije.....	64
7.3.4. Vrijeme zadržavanja čestica.....	65
7.3.5. Temperatura čestica.....	67
7.4. Usporedba s eksperimentalnim vrijednostima.....	68
7.4.1. Aksijalna temperatura.....	68
7.4.2. Radijalna temperatura na 0.1m.....	69
7.4.3. Radijalna temperatura na 0.3m.....	70
7.4.4. Radijalna temperatura na 1.9m.....	71
8. ZAKLJUČAK.....	72
9. PRILOG.....	73
10. LITERATURA.....	74

POPIS SLIKA

Slika 1. Metoda kontrolnih volumena [5]	22
Slika 2. Udio modeliranja prikazan na energetske Kolmogorovoj skali [6].....	24
Slika 3. Pristup modeliranju turbulencije.....	25
Slika 4. Pulzacije fizikalne veličine φ u ovisnosti od vremena t [7].....	26
Slika 5. Ovisnost faktora mehanizma f_m o temperaturi i veličini čestice [14].....	39
Slika 6. Prijenos topline zračenjem	47
Slika 7. Presjek eksperimentalnog ložišta, IJmuiden [22]	49
Slika 8. Prikaz gorionika [22]	50
Slika 9. 2D domena s rubnim uvjetima.....	51
Slika 10. Mješavina CDS i UDS za različite faktore miješanja [4]	54
Slika 11. Temperaturno polje ložišta za k- ϵ , k- ζ -f i PANS modele turbulencije	56
Slika 12. Raspodjela masenog udjela metana CH ₄	57
Slika 13. Raspodjela masenog udjela ugljičnog dioksida CO ₂	58
Slika 14. Raspodjela masenog udjela ugljičnog monoksida CO.....	59
Slika 15. Raspodjela masenog udjela dušika N ₂	60
Slika 16. Raspodjela masenog udjela kisika O ₂	61
Slika 17. Prikaz udjela čestica ugljene prašine za k- ϵ model turbulencije.....	62
Slika 18. Prikaz udjela čestica ugljene prašine za k- ζ -f model turbulencije	63
Slika 19. Prikaz udjela čestica ugljene prašine za PANS model turbulencije.....	64
Slika 20. Prikaz vremena zadržavanja čestica za k- ϵ , k- ζ -f i PANS model turbulencije	65
Slika 21. Prikaz temperature čestice ugljene prašine k- ϵ , k- ζ -f i PANS modela turbulencije .	67
Slika 22. Usporedba aksijalne temperature eksperimenta sa sva tri modela turbulencije.....	68
Slika 23. Usporedba radijalnih temperatura na udaljenosti 0.1m od ulaza peći	69
Slika 24. Usporedba radijalnih temperatura na udaljenosti 0.3m od ulaza peći	70
Slika 25. Usporedba radijalnih temperatura na udaljenosti 1.9m od ulaza peći	71

POPIS TABLICA

Tablica 1. Prednosti i nedostaci ekperimentalnog i numeričkog pristupa	20
Tablica 2. Koeficijenti k - ϵ modela turbulencije	31
Tablica 3. Koeficijenti k-zeta-f modela turbulencije	33
Tablica 4. Koeficijenti PANS modela turbulencije.....	35
Tablica 5. Podaci za kameni i smeđi ugljen [14]	38
Tablica 6. Dimenzije gorionika [mm]	50
Tablica 7. Ulazni parametri gorionika za primarni zrak	52
Tablica 8. Ulazni parametri gorionika za sekundarni zrak.....	52
Tablica 9. Sastav ugljena.....	52
Tablica 10. Vremenski korak	53
Tablica 11. Postavke shema diferencije	55

POPIS OZNAKA

Oznaka	Jedinica	Opis
a	m^{-1}	Koeficijent apsorpcije
a_p	m^{-1}	Koeficijent apsorpcije čestice
A_{pn}	m^2	Projecirana površina n-te čestice
C	-	Konstanta modela
D_0	$m^2 s^{-1}$	Difuzijski koeficijent kisika
$D_{k,m}$	m^2/s	Koeficijent difuzije kemijske vrste k u smjesi
e	J/kg	Specifična energija
E_a	kJ/kg	Energija aktivacije
E_p	Wm^{-3}	Koeficijent emisije čestice
f_i	-	Vektor masene gustoće vanjskih sila
f_m	-	Faktor mehanizma
f_{pn}	-	Koeficijent rasipanja n-te čestice
G	Wm^{-2}	Površinsko zračenje (eng. <i>incident radiation</i>)
I	W/m^2	ukupni intenzitet zračenja
K_{spec}	-	Ukupni broj kemijskih vrsti
k	m^2/s^2	Turbulentna kinetička energija, intenzitet turbulencije
k_o	-	Koeficijent frekvencije sudara
k_1	$kg/m^2 s bar$	Brzina reakcije prilikom pirolize
k_2	$kg/m^2 s bar$	Ukupna brzina reakcije prilikom oksidacije
k_2^{ph}	$kg m^{-2} s^{-1}$	Fizikalni limitator
k_2^{ch}	$m^{-2} s^{-1}$	Kemijska brzina reakcije
M	$gmol^{-1}$	Molarna masa

m_{ash}	kg	Masa pepela
m_C	kg	Masa čistog ugljika
m_p	kg	Masa čestice
m_{pc}	kg	Masa ugljena (eng. <i>pit coal</i>)
\dot{m}	kg/s	Promjena mase
Pe	-	Peclet-ov broj
q_r	Wm^{-2}	Toplinski tok zračenja
R	$J mol^{-1} K^{-1}$	Opća plinska konstanta
Re	-	Reynoldsov broj
\dot{r}_k	$kg/m^3 s$	Brzina reakcije kemijske vrste
S	l/s	Tenzor brzine deformacije
S	-	Izvorni član
Sc_t	-	Turbulentni Schmidt-ov broj
s	m	Duljina puta
\vec{s}	-	Vektor smjera raspršenja
t	s	Vrijeme
T	K	Temperatura
T_p	K	Temperatura čestice
T_g	K	Temperatura plina
u	m/s	Brzina
V	m^3	Volumen
V_i	-	Polje brzine
x, y, z	m	Prostorne koordinate
y_k	-	Maseni udio pojedine kemijske vrste

α	-	Temperaturni koeficijent
γ	-	Faktor miješanja (eng. <i>Blending factor</i>)
\sum_{ji}	N/m^2	Simetrični tenzor viskoznih naprežanja
δ_{ij}	-	Jedinični tenzor (Kroneckerov broj)
Γ	$kg/m\ s$	Difuzivnost fizikalne veličine
Γ_{y_k}	m	Difuzni član pojedine kemijske vrste
\mathcal{E}	m^2/s^3	Disipacija turbulentne kinetičke energije
\mathcal{E}_{pn}	-	Emisija n-te čestice
λ	W/mK	Koeficijent toplinske vodljivosti
μ	$Pa\ s$	Dinamički koeficijent viskoznosti
μ_v	$Pa\ s$	Dinamički koeficijent volumenske viskoznosti
μ_{eff}	$Pa\ s$	Koeficijent efektivne viskoznosti
ν	m^2/s	Kinematska viskoznost
ρ	kg/m^3	Gustoća
σ	W/m^2K^{-4}	Stephan-Boltzmannova konstanta
σ_{ij}	N/m^2	Tenzor naprežanja
σ_p	m^{-1}	Koeficijent rasipanja čestice
τ	s	Srednje vrijeme između sudara molekula
τ_{ji}	N/m^2	Tenzor viskoznih naprežanja
φ	-	Fizikalna veličina
Φ	-	Fazna funkcija

Djakritički znakovi

- Usrednjena komponenta fizikalne veličine (Reynolds usrednjavanje)
- ~ Usrednjena komponenta fizikalne veličine (Favreovo usrednjavanje)

Popis skraćenica

DNS	Izravne numeričke simulacije (eng. <i>Direct Numerical Simulations</i>)
CDS	Shema centralne diferencije (eng. <i>Central Differencing Sceme</i>)
CFD	Computational Fluid Dynamics
LES	Metoda simulacije velikih vrtloga (eng. <i>Large Eddy Simulation</i>)
UDS	Shema uzvodne diferencije (eng. <i>Upwind Differencing Scheme</i>)
MPI	Message Passing Interface
PANS	Partially Averaged Navier Stokes
RANS	Metoda usrednjenih Navier-Stokes jednađbi (eng. <i>Reynolds Averaged Navier -Stokes</i>)
WM	Workflow Manager

SAŽETAK

U ovom radu numeričkim je putem izvršena simulacija izgaranja ugljene prašine u ložištu. Provedena je analiza utjecaja tri modela turbulencije: k- ϵ , k- ζ -f i PANS. Za simulaciju je korišten komercijalan CFD programski paket AVL CFD-Workflow Manager/FIRE koji se sastoji od predprocesora FAME, rješavača FIRE i postprocesora IMPRESS.

Numerički model temelji se na Eulerovom pristupu za plinovitu fazu, te na Lagrangeovom pristupu za čestice. U ovom radu korišten je RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) pristup modeliranju turbulencije temeljen na Boussinesqovoj hipotezi turbulentne viskoznosti.

Za opisivanje procesa izgaranja ugljene prašine koristio se dostupni matematički model izgaranja ugljene prašine u rješavaču FIRE, modeliran Arrheniusovom jednačbom brzine reakcije. Također su detaljno opisani procesi pirolize i oksidacije koji se javljaju prilikom izgaranja ugljene prašine. U radu je korišten P1 matematički model prijenosa topline zračenjem.

Sve simulacije provedene su s istom geometrijom ložišta. Radi pojednostavljenja korišten je dvodimenzionalni pristup simulacije računalne domene. Parcijalne diferencijalne jednačbe koje opisuju model prijenosa topline i mase u ovom radu rješavaju se metodom kontrolnih volumena. Korištena je kombinacija Minmod-relaxed shema diferencije u omjeru 30% UDS naprema 70% CDS.

Prvi dio rada sastoji se u generiranju mreže kontrolnih volumena za zadanu geometriju. U drugom dijelu simulirano je izgaranje ugljene prašine za različite modele turbulencije. Na kraju je prikazana usporedba eksperimentalnih podataka s rezultatima dobivenim simulacijom te odabran optimalni model turbulencije za prikazani slučaj.

SUMMARY

In this master thesis, combustion of pulverized coal was numerically simulated.. Effect of the three different turbulence models was analyzed: k- ϵ , k- ζ -f and PANS.

Two-dimensional combustion process of pulverized coal in a simple combustion chamber geometry was numerically solved using software package CFD Workflow Manager, which integrates the preprocessor FAME, solver FIRE and the postprocessor IMPRESS into a common tool.

In the CFD-code used in this thesis, the motion and transport of solid particles are tracked through the flow field using the Lagrangian formulation, while the gas phase is described by solving conservation equations using the Eulerian formulation.

Furthermore, process of pyrolysis and oxidation are described in details. The radiation heat transfer from the coal particles into the gas is incorporated via the P-1 model. The differencing scheme used for the balances was Minmod-relaxed in ratio of 30% UDS toward 70% CDS.

The first part of thesis work consists of mesh generation. In the second part, pulverized coal combustion for three different turbulence models was simulated. The third part shows results of the numerical simulation compared to the existing temperature curves obtained from experimental measurements. Also, mass fraction of formed chemical species are shown through the domain, as well as the coal particle composition.

1. UVOD

Veliki udio svjetske energije još uvijek se dobiva iz fosilnih goriva, predstavnika ekološki neprihvatljivog izvora energije. Izgaranje fosilnih goriva s ciljem zadovoljavanja potreba za energijom ima za posljedicu oslobađanje velikih količina polutanata u okoliš. Sve oštrije regulacijske mjere za smanjenje emisije tih polutanata i ograničenja potrošnje goriva ima za posljedicu razvoj novih načina korištenja fosilnih goriva, osiguravajući da njihovo izgaranje bude energetski učinkovitije i prihvatljivije za okoliš.

Upravo su inženjeri ti na kojima je zadatak detaljno razumjeti složene fizikalne i kemijske procese koji se odvijaju u tehničkim sustavima za izgaranje konvencionalnih goriva, te konstantnim unaprjeđenjem pronaći što efikasnija rješenja za zadovoljavanje propisanih granica emisije polutanata. Eksperimentalna istraživanja ili izrada prototipova vremenski su i financijski zahtjevni, pa stoga računalni alati dugogodišnjim razvojem svojih mogućnosti više ne predstavljaju privilegiju, već su postali vrlo važan korak u razvojnom procesu. Računalni i eksperimentalni pristup dva su komplementarna pristupa, koji se međusobno nadopunjuju i pomažu jedan drugome u razvoju. Potpuno je pogrešno shvatiti računalne simulacije kao zamjenu za eksperiment, već ih treba gledati kao izvrsnu nadopunu eksperimenta koja rezultira smanjenjem troškova i vremena cjelokupnog razvoja. Eksperimentalni pristup ima ključnu ulogu potvrđivanja rezultata dobivenih numeričkim simulacijama.

Primjena računalne dinamike fluida ili RDF-a svakim danom postaje sve raširenija, s jedne strane zbog napredne tehnologije koja omogućuje snažna računala za relativno malo novaca, a s druge strane zbog sve veće jednostavnosti programskih RFD paketa kao što je AVL Fire, korišten u ovom radu. Prema [1], numerička simulacija definira se kao znanstvena disciplina koja podrazumijeva simultano numeričko rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednadžbi zakona očuvanja i jednadžbi koje opisuju prijenos topline i mase te kemijske reakcije, a temelji se na ideji da se na računalu vjerodostojno simuliraju realni kemijski i fizikalni procesi inženjerskih sustava [2].

Ovaj rad bavi se analizom izgaranja ugljene prašine. Ugljen je vrlo važan izvor energije, ako se uzme u obzir i činjenica da su njegove rezerve mnogo veće od ostalih fosilnih goriva. Kod izgaranja ugljene prašine, vrlo je važno što je više moguće ograničiti zagađivače okoliša kao

što su NO_x , SO_x i pepeo te neizgoreni ugljik. Da bi se to i ostvarilo, potrebno je razumjeti složeni mehanizam izgaranja ugljene prašine, kod kojeg temperature plamena premašuju 1500°C , a neke od supstanci su izrazito teško mjerljive. Razvijanje novih peći i gorionika zahtijeva puno vremena i novaca. Numeričkom simulacijom se omogućuje detaljni uvid o raspodjeli temperature i kemijskih vrsti. te ponašanje čestica ugljene prašine duž cijele domene izgaranja, a takve informacije se ne mogu osigurati eksperimentima.

U modelima koji se koriste u radu, fizikalne se veličine usrednjavaju, te se zatim računaju obzirom na relevantna karakteristična vremena i duljine, a utjecaj vrtloga čija su karakteristična vremena i duljine manje, se modelira prema Boussinesqovoj hipotezi.

Proces izgaranja ugljene prašine može se podijeliti na dvije reakcije, pirolizu i oksidaciju čiji modeli su objašnjeni u daljnjem tekstu.

2. MATEMATIČKI MODEL

2.1. Uvod

Svaka računalna simulacija temelji se na matematičkom modelu, koji ustvari predstavlja matematički zapis fizikalnog i kemijskog modela. Svaki fizikalni i kemijski model sadrži u sebi niz pretpostavki (hipoteza) koje više ili manje uspješno aproksimiraju relevantne fenomene stvarnog svijeta. Pri modeliranju teži se ravnoteži između jednostavnosti matematičkog modela i kvalitete fizikalnog modela.

Matematički model opisuje različite procese prijenosa mase i topline, izgaranja te prijenosa topline zračenjem. Uz međusoban utjecaj ovih procesa, prisutni su i uvjeti turbulentnog strujanja. Ponašanje krutih čestica prati se preko Lagrangeovih formulacija, a plinovita faza rješena je preko Eulerove formulacije.

2.2. Transportni procesi

Struktura materije sastoji se od elementarnih čestica: atoma, molekula i slobodnih iona, koji su nosioci nekog fizikalnog svojstva φ . Međusobnim sudaranjem elementarnih čestica dolazi do promjene iznosa njihovih fizikalnih svojstava. Srednji put između dva sudara naziva se srednji slobodni put molekule λ , a srednje vrijeme između dva sudara srednje slobodno vrijeme τ . Usrednjavanjem fizikalnog svojstva φ za veliki broj elementarnih čestica dobije se prosječna vrijednost fizikalnog svojstva φ za makroskopsku česticu, koja se značajno mijenja nakon karakterističnog puta λ i vremena τ . Ako se sa dx_i i dt označi prostorni i vremenski korak u makrosvijetu, pri čemu $dx_i \approx \lambda$ i $dt \approx \tau$, tada infinitezimalnom koraku dx_i , dt odgovara infinitezimalna promjena makroskopskog fizikalnog svojstva φ , koje tada postaje neprekidna funkcija vremensko-prostornih koordinata [3]:

$$\varphi = \varphi(x_i, t) \tag{1}$$

Infinitezimalni volumen fluida može se prikazati materijalnom česticom, tj. skupom uvijek jedno te istih elementarnih čestica, ili zatvorenim prostorom kroz koji prolaze materijalne čestice. Materijalni volumen predstavlja infinitezimalni volumen koji obuhvaća uvijek iste elementarne čestice (prati se materijalna čestica), dok je sa druge strane kontrolni volumen

zadan koordinatnim sustavom koji miruje u odnosu na promatrača. Kod Langrangeovog pristupa strujanju fluida prati se pojedina materijalna čestica, a kod Eulerovog pristupa se promatra prolaz materijalnih čestica kroz volumen definiran prostornim koordinatama.

2.3. Osnovne jednadžbe dinamike fluida

Matematički model kojim se opisuje neki fizikalni problem skup je integralno-diferencijalnih jednadžbi i konstitutivnih relacija te početnih i rubnih uvjeta. Osnovne jednadžbe dinamike fluida vrijede za svaku materiju bez ograničenja, a izvedene su iz zakona očuvanja:

- mase
- količine gibanja
- energije

Jednadžbe očuvanja su prvo izvedene u integralnom obliku, budući da kao takve tvore bazu pristupanja metodi kontrolnih volumena. Nadalje su te jednadžbe dane u diferencijalnom obliku, koji se često koristi u pisanju zbog lakšeg objašnjenja njenih fizikalnih značenja. Također je prikazana i transportna jednadžba, koja predstavlja zajedničku formu svih jednadžbi, a koristi se kao početna točka u numerici u metodi konačnih volumena.

2.3.1. Zakon očuvanja mase

Jedna od glavnih jednadžbi koja opisuje ponašanje fluida je zakon očuvanja mase (jednadžba kontinuiteta). Sljedeća jednadžba prikazuje ravnotežu ulaznog i izlaznog toka mase nekog sustava u integralnom obliku:

$$\int_S \rho u_j n_j dS = - \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV \quad (2)$$

Lijeva strana predstavlja maseni protok kroz kontrolnu površinu, a desna strana označuje vremensku promjenu mase fluida u kontrolnom volumenu. Primjenom Reynoldsovog transportnog teorema, zakon očuvanja mase u diferencijalnom obliku poprima sljedeći oblik:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (3)$$

2.3.2. Zakon očuvanja količine gibanja

Zakon očuvanja količine gibanja naziva se još i prvi Cauchyjev zakon:

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

Integralni oblik ovog zakona:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) dV + \int_S (\rho u_i) u_j n_j dS = \int_V \rho f_i dV + \int_S \sigma_{ji} n_j dS \quad (4)$$

Prvi član jednadžbe (4) predstavlja brzinu promjene količine gibanja, drugi član fluks količine gibanja, treći masenu silu, a četvri površinsku silu. Pomoću Gaussovog teorema, a onda i Reynoldsovog transportnog teorema dobije se diferencijalni oblik ovog zakona za nestacionarno strujanje stlačivog fluida:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = \rho f_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (5)$$

f_i - vektor masene gustoće vanjskih sila

σ_{ij} -tenzor naprezanja u fluidu

Površinske sile koje se ovdje javljaju nastaju uslijed djelovanja tlaka te uslijed normalnih i smičnih naprezanja koja su posljedica relativnog gibanja susjednih čestica fluida.

Jednadžba (5) je vektorska jednadžba, što znači da sadrži tri skalarne jednadžbe. Tenzor naprezanja je simetričan tenzor, što dokazuje primjena zakona brzine promjene momenta količine gibanja (drugi Cauchyjev zakon):

$$\sigma_{kj} = \sigma_{jk} \quad (6)$$

Zakon momenta količine gibanja svodi se na činjenicu simetričnosti tenzora naprezanja, te ako se ta simetričnost unaprijed postavi, jednadžba momenta količine gibanja se ispušta iz skupa osnovnih integralno-diferencijalnih jednadžbi, jer ne nosi nikakvu novu informaciju u odnosu na jednadžbu količine gibanja.

2.3.3. Zakon očuvanja energije

Zakon očuvanja energije empirijski je zakon fizike koji kaže da se ukupna energija zatvorenog sustava s vremenom ne mijenja, tj. ostaje konstantnom. Iz ovoga proizlazi zaključak da se energija ne može stvoriti ili uništiti već samo transformirati iz jednog stanja u drugo. Zakon očuvanja energije je ustvari prvi zakon termodinamike. Ukupna promjena energije termodinamičkog sustava između neka dva stanja jednaka je izmijenjenoj toplini i radu s okolinom između ta dva stanja. Pod ukupnom energijom sustava podrazumijeva se suma svih oblika energije koji se tijekom procesa mijenjaju.

Specifična ukupna energija jednaka je zbroju kinetičke i unutarnje energije:

$$e = \frac{1}{2} u_i u_i + u \quad (7)$$

U integralnom obliku, zakon očuvanja energije glasi:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho e) dV + \int_S (\rho e) u_j n_j dS = \int_V \rho f_i u_i dV + \int_V S dV + \int_S \sigma_{ji} n_j u_i dS - \int_S q_j n_j dS \quad (8)$$

Prvi i drugi član lijeve strane u jednadžbi očuvanja energije predstavljaju promjenu totalne energije i gubitke kroz granice kontrolnog volumena. Prvi član sa desne strane predstavlja specifičnu snagu uslijed masenih sila, a drugi označuje distribuirani toplinski izvor (npr. uslijed radijacije). Treći član predstavlja brzinu promjene rada uslijed tlaka i viskoznih sila, dok posljednji član predstavlja toplinski tok (fluks topline). Preko Gaussovog teorema površinski integrali transformiraju se u volumenske:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho e) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho e u_j) dV = \int_V \rho f_i u_i dV + \int_V S dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ji} u_i) dV - \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} q_j dV \quad (9)$$

nakon čega slijedi opći oblik zakona očuvanja energije u diferencijalnom obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho e u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ji} u_i - q_j) + S + \rho f_i u_i \quad (10)$$

2.3.4. Reynoldsov transportni teorem

Reynoldsov transportni teorem [4] omogućuje nam transformaciju osnovnih zakona održanja (materijalnu derivaciju nekog fizikalnog svojstva) koji su postavljeni za materijalni volumen u formu koja vrijedi za infinitezimalni prostorni volumen, kontrolni volumen, kakav se i upotrebljava u računalnoj dinamici fluida.

Integralni oblik generalne transportne jednadžbe za neko fizikalno svojstvo φ ima oblik:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho\varphi) dV + \int_S (\rho\varphi) u_j n_j dS = \int_V S_\varphi dV + \int_S (\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}) n_j dS \quad (11)$$

Diferencijalni oblik brzine promjene fizikalne veličine φ glasi:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\rho\varphi)}_{\text{akumulacija}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \varphi)}_{\text{konvekcija}} = \underbrace{S_\varphi}_{\text{izvor/ponor}} + \underbrace{\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}}_{\text{difuzija}} \quad (12)$$

$\rho\varphi$ - volumenska gustoća fizikalne veličine, definirane u prostoru i vremenu

funkcijom $\varphi = \varphi(x_i, t)$

u_j - brzina strujanja fluida,

S_φ - volumenski izvor veličine φ ,

Γ_φ - difuzijski tok veličine kroz površine infinitezimalnog prostornog volumena

Prvi član na lijevoj strani jednadžbe (12) označuje lokalnu promjenu fizikalne veličine φ u vremenu, dok je drugi član izmjena te veličine s okolnim prostorom putem konvekcije. Na desnoj strani, prvi član predstavlja volumenski izvor ili ponor veličine, a drugi član označuje izmjenu te veličine s okolnim prostorom putem difuzije.

2.3.5. Konstitutivne relacije

Konstitutivne relacije predstavljaju makroskopski odraz molekularnih pojava, svojstvenih promatranoj materiji. Konstitutivne relacije, za razliku od osnovnih fizikalnih zakona, ovise o stanju i vrsti fluida.

2.3.5.1. Newtonov zakon viskoznosti

Newtonov zakon viskoznosti predstavlja linearnu ovisnost simetričnog tenzora naprezanja i tenzora brzine deformacije. Takvi fluidi zovu se newtonski fluidi. Ako u nekom mirujućem plinu vlada termodinamički tlak p , a pri tome su tangencijalna naprezanja jednaka nuli, tenzor naprezanja može se prikazati u obliku:

$$\tau_{ji} = -p\delta_{ij} + \sum_{ji} \quad (13)$$

gdje δ_{ij} predstavlja jedinični tenzor, a \sum_{ji} simetrični tenzor viskoznih naprezanja, koji se uz pretpostavku izotropnosti fluida modelira izrazom:

$$\sum_{ji} = \mu \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_j} + \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_v \right) \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (14)$$

Kontrakcijom izraza (13) slijedi:

$$\frac{1}{3} \tau_{jj} = -p + \mu_v \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \quad (15)$$

Lijeva strana izraza (15) prikazuje srednje mehaničko naprezanje, čija se negativna vrijednost naziva i mehaničkim tlakom p_m , a razlikuje se od termodinamičkog tlaka p za član koji je proporcionalan koeficijentu volumenske viskoznosti i relativnoj brzini promjene volumena čestice fluida.

$$p = p_m + \mu_v \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \quad (16)$$

Ako uvrstimo Newtonov zakon viskoznosti u jednadžbu količine gibanja dobije se Navier-Stokesova jednadžba za stacionarni slučaj koja opisuje strujanje stlačivog newtonskog fluida:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j v_i) = \rho f_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_j} + \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_v \right) \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (17)$$

2.3.5.2. Fourierov zakon provođenja

Ovaj zakon pruža linearnu vezu vektora površinske gustoće toplinskog toka i gradijenta temperature:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (18)$$

U gornjem izrazu je λ koeficijent toplinske vodljivosti fluida koja ovisi od lokalnog termodinamičkog stanja. Predznak minus na desnoj strani izraza (18) govori da će toplina spontano prelaziti uvijek s mjesta više temperature prema mjestu niže temperature, tj. u smjeru suprotnom gradijentu temperature.

2.4. Numerička procedura

Teorijski pristup temelji se na analitičkom rješavanju matematičkih modela strujanja fluida koje daje kompletnu fizikalnu sliku nekog problema. Tako jednom određeno analitičko rješenje prikladno je za analizu utjecaja pojedinih parametara u matematičkom modelu. Nažalost, većina problema vezanih na strujanje fluida opisana je nelinearnim parcijalnim diferencijalnim (Navier-Stokes) jednadžbama, koje kao takve ne sadrže opće analitičko rješenje. Upravo zato su se u prošlosti ovakvi problemi rješavali eksperimentalnim pristupom. Međutim, eksperimentalnim pristupom dobiva se samo ograničeni broj informacija o nekoj pojavi. Razvojem računala stvoreni su uvjeti za numeričko rješavanje matematičkih modela za opisivanje strujanja fluida. Numeričkom metodom se rješavanje diferencijalnih jednadžbi svodi preko prikladne diskretizacije na rješavanje linearno algebarskog sustava jednadžbi koje su analitički rješive. Eksperimentalni i teorijski pristup rješavanja problema se nadopunjuju. Neke prednosti i nedostaci oba pristupa dani su u tablici 1.

Tablica 1. Prednosti i nedostaci ekperimentalnog i numeričkog pristupa

	PREDNOSTI	NEDOSTATCI
EKSPERIMENT	-vjerodostojniji rezultati	-ograničen broj dobivenih informacija -dugotrajno ispitivanje
NUMERIKA	-brži rezultati -kompletna slika strujanja -sve jeftinije	-ograničena primjena za slučajeve za koje postoji matematički model (npr. modeliranje turbulencije) -idealizirani uvjeti

Iz gore navedenog zaključuje se da numerički pristup pomaže razumijevanju fizike i unaprjeđenju eksperimenta, a eksperimentalni rezultati pomažu unaprjeđenju matematičkih modela. Za probleme gdje postoji pouzdan matematički model, računalni pristup zauzima značajnije mjesto, dok eksperimentalni pristup ima značajniju ulogu u potvrđivanju konačnog rješenja. Pri rješavanju složenijih problema, nužno je kombinirati oba pristupa.

Tri su osnovna koraka svake numeričke simulacije:

- pred-procesor (definiranje problema i generiranje mreže kontrolnih volumena)
- procesor (numeričko rješavanje)
- post-procesor (analiza rezultata)

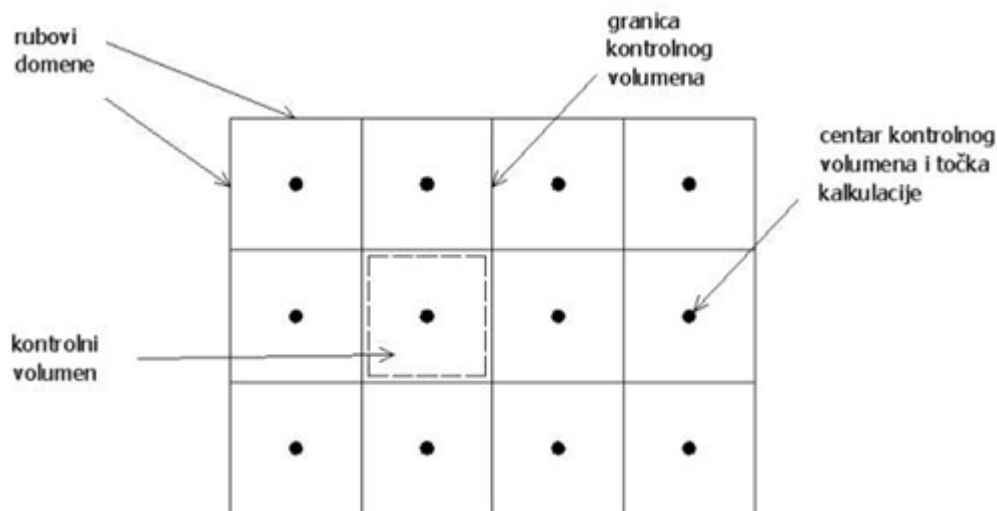
Korak predprocesuiranja odnosi se na definiranje problema te diskretizaciju prostora. Definiranje problema odnosi se na izbor odgovarajućeg matematičkog modela. Matematički model predstavlja sustav parcijalnih diferencijalnih jednažbi plus početni i rubni uvjeti. Jednažbe daju opće rješenje, tj. sadrže određeni broj funkcija integracije (konstante), dok početni i rubni uvjeti definiraju te funkcije integracije čineći rješenje jedinstvenim. Diskretizacija prostora je podjela područja proračuna na određeni broj manjih volumena, a svakom volumenu se dodijeli jedan ili više čvorova u kojima će se računati vrijednosti polja fizikalnih veličina koja se pojavljuju u jednažbama matematičkog modela

Korak procesiranja je diskretizacija jednažbi matematičkog modela, s obzirom na specifične rubne uvjete. Provodi se jednom od metoda (metoda konačnih volumena, konačnih elemenata, konačnih razlika i sl.). Rezultat ove diskretizacije na zadanoj geometrijskoj mreži je sustav algebarskih jednažbi koje su nelinearne i rješavaju se iterativnim postupkom koji u sebi sadrži rješavanje sustava linearnih algebarskih jednažbi.

Zadnji korak, post-procesuiranje, odnosi se na analizu rezultata, koja podrazumijeva prikaz skalarnih, vektorskih i tenzorskih polja, integraciju protoka, sile, momenata, toplinskih tokova i sl. uz dijagramski prikaz veličina.

2.5. Metoda kontrolnih volumena

Diskretizacija parcijalnih diferencijalnih jednadžbi u ovom radu provodi se metodom kontrolnih volumena,



Slika 1. Metoda kontrolnih volumena [5]

gdje se računalna domena dijeli na konačan broj kontrolnih volumena. Svaki od tih volumena je predstavljen vrijednošću fizikalne veličine φ u čvoru koji se nalazi unutar kontrolnog volumena, tako 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 φ u jednom čvoru se dobiva integracijom odgovarajuće diferencijalne jednadžbe po kontrolnom volumenu. Skup svih tih algebarskih izraza za sve čvorove u domeni daje nam sustav algebarskih jednadžbi za proračun distribucije fizikalne veličine φ po domeni.

3. MODELIRANJE TURBULENCIJE

3.1. Osnove turbulentnog strujanja

Strujanje fluida u prirodi najčešće je turbulentno (trodimenzionalan i izrazito nestacionaran karakter sa slučajnim pulzacijama fizikalnih veličina, čak i pri stacionarnim rubnim uvjetima). Razlog zašto razlikujemo laminarno i turbulentno strujanje leži u nestabilnoj, prividnoj stohastičnosti, turbulentnog strujanja uzrokovanih time što su karakteristična vremena i duljine fizikalnih pojava koje utječu na strujanje mnogo manja nego što su karakteristična vremena i duljine proizašla iz rubnih uvjeta.

Općenito je potreba za računanjem strujanja vezana za rubne uvjete, i za rezultate s relativno velikim karakterističnim vremenima i duljinama, pa računanje turbulentnog strujanja sustavom osnovnih diferencijalnih jednačbi u najmanju ruku je neekonomično. Međutim, pojavom računala omogućena je numerička simulacija turbulentnog strujanja.

U problemima prijenosa topline i mase, bitne su jedino usrednjene vrijednosti fizikalnih veličina. Ipak mora se voditi računa i 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, pa time i ubrzavaju procese kemijskih reakcija, a s druge strane zato što kemijski procesi snažno ovise o lokalnim iznosima fizikalnih veličina (temperaturi i koncentracijama), te ih lokalne pulzacije ubrzavaju. Proces miješanja fluida turbulentnim vrtlozima se često naziva turbulentna difuzija. Naziv je više posljedica modeliranja (i tradicije zasnovane na Boussinesqovoj hipotezi) nego fizikalnosti takve veze. U svakom slučaju, potrebno je na neki način modelirati međuutjecaj usrednjenih veličina i lokalnih oscilacija trenutačnih vrijednosti tih veličina.

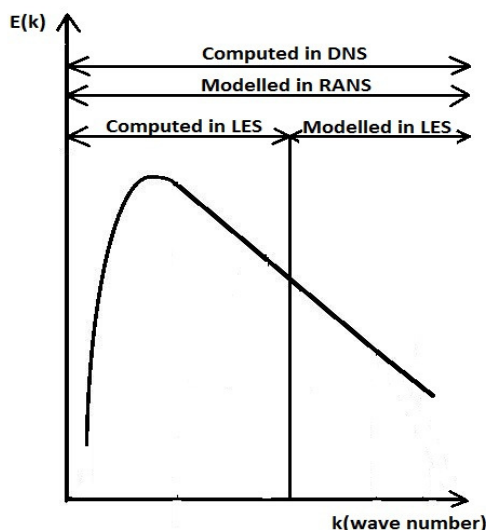
Postoje različiti pristupi modeliranja turbulencije:

- izravno rješavanje Navier-Stokes jednačbi (eng. *Direct Numerical Simulations*, DNS)
- modeliranje malih vrtloga i direktno rješavanje velikih vrtloga (eng. *Large Eddy Simulation*, LES)
- modeliranje svih vrtloga Reynoldsovim usrednjavanjem jednačbi (eng. *Reynolds Averaged Navier-Stokes*, RANS)

U ovome radu korišten je RANS pristup kako bi se dobilo što točnije rješenje turbulentnog izgaranja ugljene prašine.

U klasi RANS modela postoji više razina modela, od najjednostavnijih modela temeljenih na Boussinesqovoj hipotezi i modeliranju turbulentne viskoznosti pa do modela u kojima se rješavaju jednačbe za turbulentna naprezanja (eng. *Reynolds stress models*, *RSM*). Najpoznatiji modeli za definiranje raspodjele turbulentne viskoznosti s dvije jednačbe su k- ϵ i k-zeta-f modeli, a s jednom jednačbom Spalart-Allmaras model. Kod RANS pristupa modeliranju turbulencije, manji su numerički troškovi, imaju mogućnost jednostavnije geometrije (2D strujanja), te mreže mogu biti grublje.

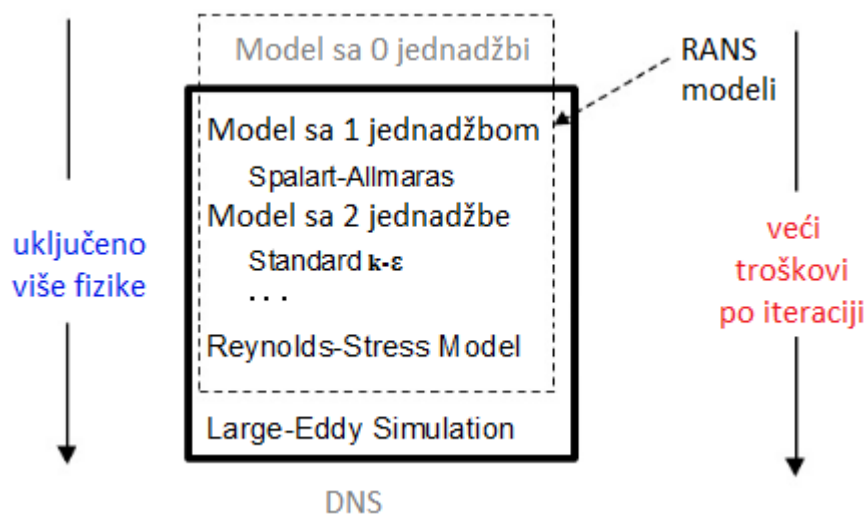
Turbulenciju promatramo kao skup mnogobrojnih vrtloga sa širokim rasponom različitih promjera (karakterističnih dužina). DNS pristup zapravo ne koristi modele turbulencije uopće, on je samo alat za proučavanje modela. Za točno rješenje moramo izravno na čvorovima računalne domene moći obuhvatiti sve karakteristične dužine, tj. sve promjere svih vrtloga, pa tako i najmanjih. Mana DNS pristupa je što je ograničen na akademske probleme i ima previsoke numeričke troškove (fina mreža).



Slika 2. Udio modeliranja prikazan na energetske Kolmogorovoj skali [6]

Da bi se mogli opisati i najmanji vrtlozi, čvorovi računalne mreže moraju biti postavljeni dovoljno blizu, a to podrazumijeva vrlo guste mreže. Ukoliko povećamo razmak između čvorova, tada onemogućujemo izravno rješavanje najmanjih (i malih) vrtloga. To je LES metoda kojom se smanjuje potreba za računalnim resursima, a ono što ne možemo dobiti izravno na čvorovima domene, moramo modelirati. To znači da kod LES pristupa moramo

imati model utjecaja malih vrtloga na ukupno rješenje. LES metodom izravno na čvorovima dobivamo samo velike vrtloge dok se utjecaj malih i najmanjih modelira.



Slika 3. Pristup modeliranju turbulencije

Iako danas postoje vrlo snažna računala, DNS pristup rješavanja vremenski ovisnih Navier-Stokes jednadžbi prikladan je samo za relativno jednostavne probleme pri niskim Reynoldsovim brojevima. Upravo zbog toga su razvijeni različiti turbulentni modeli. Pa tako postoji pet osnovnih klasa:

algebarski	}	1. stupanj
jedna jednadžba		
više jednadžbi		
RSM	}	2. stupanj
LES		
DNS	}	3. stupanj

Prva tri pripadaju prvom stupnju (eng. *first order closures*). Zasnivaju se većinom na hipotezi Boussinesqua, ali za neke probleme i na nelinearnom pristupu modeliranja turbulentne viskoznosti.

Modeliranje turbulencije zapravo je manipuliranje jednadžbama i stvaranje modela u onoj formi koja nam dozvoljava simuliranje turbulencije pod zadanim uvjetima.

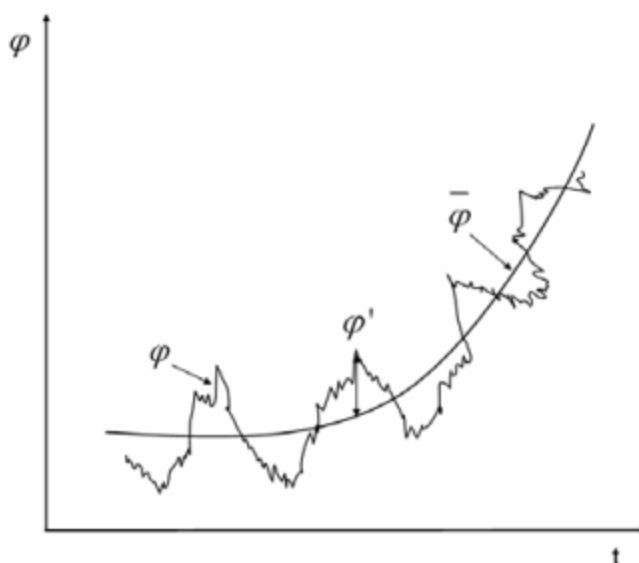
3.2. Usrednjavanje transportnih jednadžbi

U industrijskoj praksi najprihvaćenija metoda za modeliranje turbulentnih strujanja je RANS metoda. Ovaj pristup zasniva se na usrednjavanju osnovnih jednadžbi. Vremensko usrednjavanje pretpostavlja da se svaka fizikalna veličina φ može zapisati pomoću njene usrednjene komponente $\bar{\varphi}$ i njene pulzirajuće komponente φ' [6].

Tako primjerice, za brzinu vrijedi:

$$v_i = \bar{v}_i + v_i' \quad (19)$$

Vremenska ovisnost veličine φ prikazana je na slici 4. Sa slike je vidljivo da srednja vrijednost komponente fizikalne veličine ovisi o vremenu t . Njena usrednjena vrijednost u ovom slučaju je nestacionarna. Za slučaj da je srednja vrijednost $\bar{\varphi}$ nezavisna od vremena, strujanje je tada kvazistacionarno.



Slika 4. Pulzacije fizikalne veličine φ u ovisnosti od vremena t [7]

Dva su najčešća tipa usrednjavanja: Reynoldsovo i Favreovo. Kod Reynoldsove se metode usrednjava fizikalna veličina φ , dok se kod Favreove metode usrednjava produkt fizikalne veličine i gustoće [3]. Kad se gustoća može uzeti kao konstantna, primjenjuje se Reynoldsovo usrednjavanje, dok se u slučaju stlačivog strujanja koristi Favreova metoda. Iako bi pretpostavka nestlačivog strujanja u ložištu generatora pare bila osnovana zbog malog

Machovog broja, zbog velikih gradijenata gustoće koji se javljaju kod tokova s izgaranjem i značajnom izmjenom topline, Reynoldsova metoda neće dati dobre rezultate.

Usrednjavanjem transportnih jednadžbi Favreovom metodom dobivaju se jednadžbe koje su formalno jednostavnije jer se ne pojavljuju članovi koji uključuju fluktuacije gustoće. Po Favreu se količina gibanja po jedinici volumena $\rho\varphi$ usrednjava kao:

$$\overline{\rho\tilde{\varphi}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \rho(x_i, \tau) \varphi(x_i, \tau) d\tau \quad (20)$$

Kako se u praksi ne može ostvariti beskonačno vrijeme integracije T , uzima se vrijeme T koje mora biti veće od maksimalne duljine trajanja fluktuacije fizikalne veličine T_1 , i istovremeno dovoljno malo da ne obuhvati preveliku promjenu usrednjene komponente $\overline{\varphi}$, tj. manje od vremena T_2 :

$$\overline{\rho\tilde{\varphi}} = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \rho(x_i, \tau) \varphi(x_i, \tau) d\tau \quad , \quad T_1 \ll T \ll T_2 \quad (21)$$

gdje $\overline{\rho}$ predstavlja gustoću usrednjenu po Reynoldsu, dok je $\tilde{\varphi}$ fizikalna veličina usrednjena Favreovom metodom. Veza između veličina usrednjenih Reynoldsovom i Favreovom metodom je sljedeća:

$$\overline{\rho\tilde{\varphi}} = \overline{\rho\varphi} + \overline{\rho'\varphi'} \quad (22)$$

3.3. Boussinesqova hipoteza

U modelima korištenim 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 prema Boussinesqovoj hipotezi oblika:

$$-\overline{\rho v_i v_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \delta_{ij} \quad (23)$$

gdje μ_t predstavlja koeficijent turbulentne viskoznosti (eng. *eddy viscosity*) koji za razliku od molekularne viskoznosti μ , nije fizikalno svojstvo fluida, već funkcija uvjeta strujanja, a jednak je nuli u laminarnom strujanju kao i u stanju mirovanja. Član s usrednjenom kinetičkom energijom turbulencije $\bar{k} = \overline{v_i v_i} / 2$ dodan je u cilju zadovoljavanja gornje jednadžbe za slučaj kontrakcije indeksa. Hipotezom Boussinesqa, šest komponenti tenzora Reynoldsovih naprezanja modelirano je jednim nepoznatim poljem koeficijenta turbulentne viskoznosti.

Ova hipoteza govori da se efektivno turbulentno tangencijalno naprezanje uzrokovano dvojnomo korelacijom pulzirajućih brzina može zamijeniti s produktom gradijenta brzine i veličine koju je nazvao turbulentnom viskoznošću.

Postoji velik broj način na koji se dobivene korelacije modeliraju, a najčešće su: model Prandtlove duljine puta miješanja, $k-\varepsilon$ model i model Reynoldsovih naprezanja. U posljednje vrijeme sve više se koriste i modeli bazirani na računanju velikih vrtloga (engl. *Large Eddy Simulation*).

3.4. Korišteni modeli turbulencije u ovom radu

Kao rezultat stalnih istraživanja u području modeliranja turbulencije s ciljem povećanja točnosti simulacija, AVL ne koristi samo standardne modele turbulencije, već razvija i svoje vlastite. Modeli turbulencije korišteni u ovom radu su:

- k- ϵ
- k-zeta-f
- PANS

Modeliranje turbulencije je računalni postupak definiranja sustava jednadžbi usrednjenog strujanja (eng. *mean flow*). Da bi model turbulencije bio koristan, mora imati široku primjenjivost, točnost, jednostavnost i ekonomičnost. Broj jednadžbi nekog modela turbulencije govori koliko je dodatnih parcijalnih diferencijalnih jednadžbi potrebno riješiti.

Niti jedan model turbulencije ne može biti maksimalno pouzdan za svaki tip strujanja, što će reći da svaki od njih ima svoje prednosti i mane. Tako, primjerice, ako neki model radi savršeno u slučaju graničnog sloja, velika je vjerojatnost da će zakazati potpuno u slučaju odvojenog strujanja. Isto tako treba voditi računa o količini truda uloženog u modeliranje nekog problema, jer možda neki jednostavniji model može dati dovoljno točne rezultate za naš problem kao i daleko kompliciraniji model turbulencije.

U ovom radu koristio se standardni k- ϵ model zbog svoje široke upotrebe, model k- ζ -f iz razloga što se radi o modelu koji je razvijen u programskom paketu FIRE, te PANS turbulentni model koji je ustvari hibridni model između RANS-a i LES-a.

3.4.1. k - ε model turbulencije (standardni)

Najčešće korišteni model u RANS pristupu je k - ε turbulentni model (Eddy-Viscosity Model sa dvije diferencijalne jednačbe). U tim jednačbama se potpuno odvojeno rješavaju dvije nove varijable: brzina turbulencije izražena kinetičkom energijom turbulencije k i turbulentna dužina izražena količinom disipacije turbulencije ε . Derivacija transportnih jednačbi za k i ε provodi se pod pretpostavkom da je cijelo područje domene modela potpuno turbulentno, a efekti molekularne viskoznosti su zanemarivi te je stoga ovaj model primjenjiv samo za potpuno turbulentna strujanja. To je polu-empirijski model kod kojeg se izvod jednačbi modela zasniva na fenomenološkim zaključcima i empiriji.

U k - ε modelu, dakle postoje dvije diferencijalne jednačbe, a to su jednačba turbulentne kinetičke energije i jednačba energije disipacije. Prema definiciji, turbulentna kinetička energija k predstavlja kinetičku energiju pulzirajuće brzine:

$$k = \frac{1}{2} \overline{v'_i v'_i} \quad (24)$$

Turbulentna disipacija energije ε uvijek je pozitivna veličina, te je prema definiciji jednaka:

$$\varepsilon = \nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} \quad (25)$$

Točnu jednačbu za k dobije se skalarnim množenjem transportne jednačbe pulzirajuće brzine sa samom pulzirajućom brzinom:

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dv'_j}{Dt} \cdot v'_j &= \rho \frac{D \left[\frac{1}{2} \overline{(v'_j)^2} \right]}{Dt} = \rho \frac{Dk}{Dt} = \\ \underbrace{\rho \frac{\partial k}{\partial t}}_L + \underbrace{\rho v'_j \frac{\partial k}{\partial x_j}}_K &= \underbrace{\overline{\rho f_i v'_i}}_{\rho G} - \underbrace{\overline{\rho v'_i v'_j} \frac{\partial v'_i}{\partial x_j}}_{\rho P} - \underbrace{\overline{\mu \left(\frac{\partial v'_i}{\partial x_j} \right)^2}}_{\rho \varepsilon} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} - \overline{\rho k v'_i} - \overline{p v'_j} \right)}_D \end{aligned} \quad (26)$$

U jednačbi (26) mogu se prepoznati tipični članovi općeg zakona očuvanja fizikalnog svojstva:

L – lokalna promjena k

K – konvektivna promjena k

G – produkcija/destrukcija k putem masenih sila

P – produkcija k prijenosom energije strujanja

ε – disipacija k u toplinu putem viskoznog (molekularnog) naprezanja

D – molekularna i turbulentna difuzija

Molekularna difuzija označuje difuzni transport k putem viskoznosti. Turbulentna difuzija sastoji se od dva člana, od kojih prvi označuje difuziju uslijed kaotičnog miješanja čestica fluida, a drugi difuziju uslijed pulzirajućeg tlaka. S obzirom da se ε u jednadžbi (26) pojavljuje s negativnim predznakom, označuje ponor, odnosno brzinu smanjenja kinetičke energije turbulencije, tj. brzinu njene pretvorbe u unutarnju energiju. Sada se može napisati modelska jednadžba za k :

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \rho(P + G - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (27)$$

Modelska jednadžba za ε , za razliku od jednadžbe za k , se manje oslanja na točnu derivaciju utjecajnih članova, a više na koeficijente koji su ovisni o empirijskim pretpostavkama:

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \left(C_1 P - C_2 \varepsilon + C_3 G + C_4 k \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \cdot \frac{\varepsilon}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \quad (28)$$

Veličina ε/k u jednadžbi (28) predstavlja recipročnu vrijednost karakteristične turbulentne vremenske veličine. Ovako jednostavno zapisanu jednadžbu za ε lako je implementirati unutar CFD koda. Po pitanju prezentacije fizikalnih zbivanja, ona je ograničena, no danas još uvijek ne postoji univerzalna modifikacija modelske jednadžbe, koja bi davala prihvatljive rezultate za sve tipove strujanja. U tablici 2. prikazani su koeficijenti k - ε modela turbulencije.

Tablica 2. Koeficijenti k - ε modela turbulencije

C_μ	C_1	C_2	C_3	C_4	σ_k	σ_ε
0.09	1.44	1.92	0.8	-0.373	1	1.3

Najslabija točka k - ε modela je ε jednadžba, budući da se modeliranje ove jednadžbe ne može verificirati mjerenjima.

3.4.2. *k-zeta-f*

Ovaj model su 2004. godine razvili Hanjalić, Popovac i Hadžiabdić [8]. Autori su unaprijedili verziju modela turbulentne viskoznosti temeljene na Durbinovom eliptičnom konceptu iz 1991. godine. Cilj je bio unaprijediti numeričku stabilnost izvornog $\overline{v^2} - f$ modela rješavanjem transportne jednadžbe za omjer $\zeta = \overline{v^2} / k$ umjesto za v^2 [9]. Turbulentna viskoznost ν_t je prikazana u obliku:

$$\nu_t = C_\mu \zeta \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (29)$$

Članovi iz gornje jednadžbe dobiju se na sljedeći način. Turbulentna kinetička energija k :

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \rho (P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (30)$$

Disipacija turbulentne kinetičke energije ε :

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \rho \frac{C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \varepsilon}{T} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (31)$$

Normirana karakteristična brzina ζ :

$$\rho \frac{D\zeta}{Dt} = \rho f - \rho \frac{\zeta}{k} \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\zeta} \right) \frac{\partial \zeta}{\partial x_j} \right] \quad (32)$$

gdje se eliptična funkcija f računa prema:

$$f - L^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_j} = \left(C_1 + C_2 \frac{P_k}{\zeta} \right) \frac{(2/3 - \zeta)}{T} \quad (33)$$

Slijedi produkcija turbulentne kinetičke energije P_k :

$$P_k = \nu_t S^2 \quad (34)$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (35)$$

Turbulentno vrijeme T :

$$T = \max \left[\min \left(\frac{k}{\varepsilon}, \frac{0.6}{\sqrt{6}C_\mu |S| \zeta} \right), C_T \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/2} \right] \quad (36)$$

Turbulentna dužina L :

$$L = C_L \max \left[\min \left(\frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, C_\eta \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \right) \right] \quad (37)$$

Koeficijenti upotrijebljeni u k-zeta-f modelu dobiveni su eksperimentalnim putem te ubačeni u FIRE, a njihove vrijednosti se mogu vidjeti u tablici 3.

Tablica 3. Koeficijenti k-zeta-f modela turbulencije

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_1	C_2	σ_k	ε_k	σ_ζ	C_T	C_L	C_η
0,22	1,4	1,9	0,4	0,65	1	1,3	1,2	6	0,36	85

3.4.3. PANS

PANS model turbulencije (eng. *Partially Averaged Navier Stokes*) razvio je 2006. godine Girimaji [10]. Radi se o djelomičnoj numeričkoj simulaciji Navier Stokes jednadžbi gdje kinetička energija k i disipacija kinetičke energije ε variraju između nepotpune i potpune vrijednosti. PANS jednadžbe napisane su u formi parcijalno usrednjenog polja brzine i polja tlaka:

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau(V_i, V_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (38)$$

gdje je polje brzine podijeljeno na dvije komponente, parcijalnu komponentu brzine U_i i podkomponentu brzine:

$$V_i = U_i + u_i \quad (39)$$

Definiranje pod-napreznjanja vrši se Boussinesqovom aproksimacijom:

$$\tau(V_i, V_j) = -2\nu_u S_{ij} + \frac{2}{3} k_u \delta_{ij}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (40)$$

gdje je nepotpuna turbulentna viskoznost ν_u jednaka:

$$\nu_u = C_\mu \frac{k_u^2}{\varepsilon_u} \quad (41)$$

Dvije osnovne jednadžbe PANS modela, nepotpuna kinetička energija k_u i nepotpuna disipacija kinetičke energije ε_u služe za definiranje gornjih jednadžbi:

$$\frac{Dk_u}{Dt} = (P_u - \varepsilon_u) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_u}{\sigma_{ku}} \right) \frac{\partial k_u}{\partial x_j} \right] \quad (42)$$

$$\frac{D\varepsilon_u}{Dt} = C_{\varepsilon 1} P_u \frac{\varepsilon_u}{k_u} - C_{\varepsilon 2}^* \frac{\varepsilon_u^2}{k_u} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_u}{\sigma_{\varepsilon u}} \right) \frac{\partial \varepsilon_u}{\partial x_j} \right] \quad (43)$$

Koeficijenti modela su:

$$C_{\varepsilon 2}^* = C_{\varepsilon 1} + \frac{f_k}{f_\varepsilon} (C_{\varepsilon 2} - C_{\varepsilon 1}), \quad \sigma_{k,\varepsilon_u} = \sigma_{k,\varepsilon} \frac{f_k^2}{f_\varepsilon} \quad (44)$$

gdje su f_k i f_ε omjeri nepotpune i potpune vrijednosti kinetičke energije i disipacije:

$$f_k = \frac{k_u}{k}, \quad f_\varepsilon = \frac{\varepsilon_u}{\varepsilon} \quad (45)$$

Parametar f_k je taj koji utječe na to stanje vrijednosti. Definiran je prostorom mreže, te se mijenja na svakoj točki na kraju svakog vremenskog koraka iteracije, i ostaje konstantan tijekom sljedećeg vremenskog koraka:

$$f_k = \frac{1}{\sqrt{C_\mu}} \left(\frac{\Delta}{\Lambda} \right)^{2/3} \quad (46)$$

gdje se Δ odnosi na veličinu ćelije, a Λ na Taylor-ov red turbulencije. U programskom paketu FIRE, PANS je primijenjen preko k - ζ - f modela, dajući PANS k - ε - ζ - f model od četiri jednačbe.

$$\frac{\partial \zeta_u}{\partial t} + U_j \frac{\partial \zeta_u}{\partial x_j} = f_u - \frac{\zeta_u}{k_u} P_u + \frac{\zeta_u}{k_u} \varepsilon_u (1 - f_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v_u}{\sigma_{\zeta_u}} \frac{\partial \zeta_u}{\partial x_j} \right) \quad (47)$$

$$L_u^2 \nabla^2 f_u - f_u = \frac{1}{T_u} \left(C_1 + C_2 \frac{P_u}{\varepsilon_u} \right) \left(\zeta_u - \frac{2}{3} \right) \quad (48)$$

gdje su L_u i T_u dužina i vrijeme definirani nepotpunom kinetičkom energijom. Izrazi (42), (43), (47) i (48) predstavljaju PANS-ov model turbulencije sa 4 jednačbe. Tri od četiri varijable, k_u , ε_u i ζ_u , dobiju se rješavanjem transportnih jednačbi, a četvrta varijabla f_u preko Poissonove jednačbe. Koeficijenti PANS modela prikazani su tablicom 4.

Tablica 4. Koeficijenti PANS modela turbulencije

C_μ	C_1	C_2	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0,22	0,4	0,65	$1.4(1 + 0.045/\sqrt{\zeta})$	1.9

4. IZGARANJE

4.1. Uvod

Izgaranje je kemijski proces kod kojeg dolazi do oksidacije gorivih sastojaka nekog goriva. U gorivu kemijska energija oksidacijom se pretvara u toplinsku energiju. Sudionici reakcije su gorivo i zrak potreban za izgaranje, dok su reakcijski produkti dimni plinovi i pepeo. Kisik, potreban za izgaranje, dovodi se u ložište s atmosferskim zrakom, u kojem je količinski (molarni) udio kisika 21%.

Kako je izgaranje izrazito neizotermna pojava, prijenos topline, odnosno njeno odvođenje iz područja plamena je od velikog značaja za proces.

Reakcije koje se odvijaju u ložištu, pri čemu reakcije djeluju jedna na drugu, modeliraju se na način koji pretpostavlja fiktivnu reakciju između goriva i kisika s dimnim plinovima kao produktom [11]. Ta se fiktivna reakcija modelira Arrheniusovom jednadžbom brzine reakcije.

4.2. Arrheniusov zakon brzine kemijske 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. Brzina reakcije modela koji se opisuje ima zanemariv utjecaj o gradijentu tlaka. Prema Arrheniusovom zakonu, brzina reakcije k funkcija je lokalne temperature T prema izrazu:

$$k = k_0 T^\alpha e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (49)$$

gdje član $k_0 T^\alpha$ označuje koeficijent brzine reakcije, a fizikalno predstavlja učestalost sudara molekula. Boltzmanov faktor $e^{-\frac{E_a}{RT}}$ predstavlja onaj udio molekula koje su uspjele skupiti energiju potrebnu za reakciju. Ostali članovi u jednadžbi (49) određuju se eksperimentalnim putem za svaku pojedinu reakciju:

k_0 - koeficijent frekvencije sudara

E_a - energija aktivacije

α - temperaturni koeficijent

Da bi se moglo prikazati kako strujanje utječe na procese u ložištu, potrebno je iznijeti mehanizam praćenja transportnih procesa sa strane točke u prostoru, ili sa strane infinitezimalnog volumena.

4.3. Model izgaranja ugljene prašine

Svrha svakog modela za izgaranje je izračun stanja fizikalnih veličina u reakcijskom prostoru, odnosno izračun koncentracija različitih kemijskih vrsta prisutnih u kemijskim reakcijama te utjecaj na gustoću, viskoznost i temperaturu.

Čestica matematičkog modela ugljene prašine sastavljena je od tri komponente:

- čisti ugljik C
- ugljen C₃H₄ (eng. *pit coal*)
- pepeo

Proces izgaranja ugljene prašine može se podijeliti na dva dijela. Čestice ugljena koje se sastoje od tri navedene komponente u prvom dijelu procesa prolaze pirolitičko razdvajanje na hlapljive tvari i čisti ugljik. Pepeo u ugljenu predstavlja samo inertni sastojak. U drugom dijelu, stadiju oksidacije, koji se istovremeno odvija uz pirolizu, čisti ugljik oksidira u ugljični monoksid CO i ugljični dioksid CO₂ [12].

4.3.1. Piroliza

Najvažnija fizikalno-kemijska promjena čestice ugljena tijekom njenog zagrijavanja je piroliza (termalna fragmentacija). Prilikom ove pojave dolazi do smanjenja mase uslijed ishlapljavanja hlapljivih tvari, koje ovisi o sastavu ugljena, njegovoj granulaciji i temperaturi. Tijekom toga raspada, istovremeno se odvijaju nekoliko reakcija, što heterogenih, što homogenih [13]. Porastom temperature, dolazi do otpuštanja vlage i plinova zarobljenih u čestici ugljena. Nakon što se hlapljive tvari otpuste, preostali kruti ostatak još uvijek u sebi sadrži mali postotak hlapljivih tvari (oko 1,5%), kao npr. H₂ i N₂, koji zahtijevaju temperature blizu 2000°C za potpuno uklanjanje. Temperatura se izdvaja kao najvažniji faktor pirolize, a čisti ugljik kao najčešće glavni produkt pirolize.

Heterogena kemijska reakcija jednostupanjske pirolize prikazana je sljedećim izrazom:



gdje pri određenoj temperaturi dolazi do raspadanja čestice ugljena na ugljik C i metan CH₄, pri čemu se brzina reakcije pirolize računa prema Arrheniusovom izrazu:

$$k_1 = k_{0,1} \exp(-E_1 / RT) \quad (51)$$

u kojemu $k_{0,1}$ predstavlja frekvencijski koeficijent, a E_1 energiju aktivacije, čije se vrijednosti za kameni i smeđi ugljen mogu vidjeti u tablici 5.

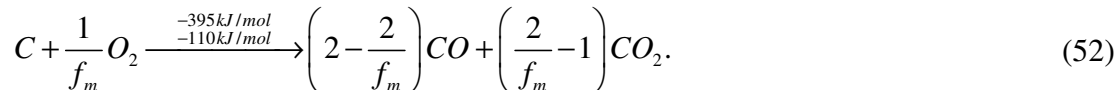
Tablica 5. Podaci za kameni i smeđi ugljen [14]

	N [-]	$k_{0,1}$ [1/s]	E_1/R [K]
kameni ugljen	1	$1,50 \cdot 10^5$	8900
smeđi ugljen	1	$3,15 \cdot 10^5$	8900

4.3.2. Oksidacija

Drugi dio procesa izgaranja ugljene prašine koji se odvija istovremeno uz pirolizu je oksidacija čistog ugljika na ugljični monoksid CO i ugljični dioksid CO₂.

Heterogena kemijska reakcija oksidacije čistog ugljika je oblika:



Ovdje, f_m označuje tzv. faktor mehanizma (eng. *mechanism factor*) [15], koji se kreće u granicama između 1 i 2, a ovisi o temperaturi i veličini čestice. Ovisnost o veličini čestice odnosi se uglavnom na procese razmjene tvari, dok temperaturna ovisnost opisuje kemijsku pretvorbu u CO ili CO₂.

$$f_m = f_m(d_p, T_p) \quad (53)$$

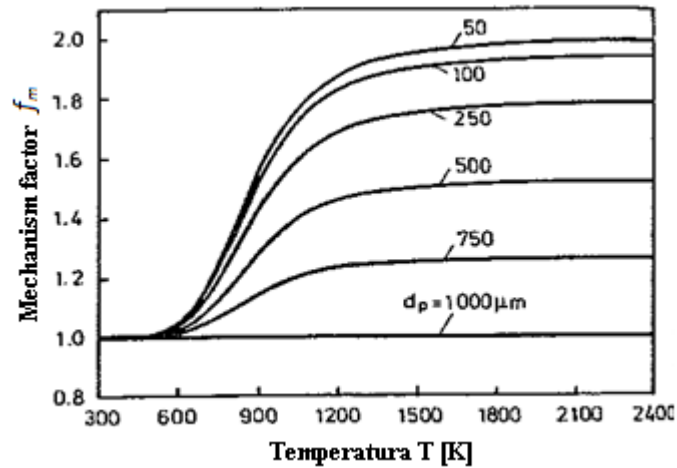
Za faktor mehanizma postoje dva granična slučaja. Kada f_m poprima vrijednost 1, tada na površini zrna nastaje CO₂, i kada f_m ima vrijednost 2, tada nastaje samo CO, što je vidljivo iz jednadžbe (52).

$$f_m = \frac{2f_{CO} + 2}{f_{CO} + 2}, \quad d_p < 50 \mu m \quad (54)$$

$$f_m = \frac{2f_{CO} + 2}{f_{CO} + 2} - \frac{f_{CO}(d_p - 50)}{(f_{CO} + 2) \cdot 950}, \quad 50\mu m < d_p < 1000\mu m \quad (55)$$

Temperaturna ovisnost računa se prema Arthuru [9]:

$$f_{CO} = 2500 \cdot \exp(-6240/T) \quad (56)$$



Slika 5. Ovisnost faktora mehanizma f_m o temperaturi i veličini čestice [14]

Slika 5. pokazuje da za vrijednosti faktora bliže jedinici, a pri nižim temperaturama do 900K, doći će do stvaranja više CO_2 , dok će se pri većim temperaturama stvarati više CO.

4.3.3. Model opisivanja izgaranja čistog ugljika

Postoje nekoliko modela za opisivanje izgaranja čistog ugljika [16]:

- Baum-Street model
- Intrinsic Reaction Rates: Smith
- Hampartsoumian
- Hurt et al.
- Extended Resistance Equation

Za numerički model u ovom radu korišten je Baum-Street model [17]. Ukupna brzina kemijske reakcije oksidacije k_2 sastoji se od kemijske brzine reakcije k_2^{ch} i fizikalnih limitatora k_2^{ph} , te se računa prema sljedećoj jednadžbi:

$$k_2 = \frac{k_2^{ch} \cdot k_2^{ph}}{k_2^{ch} + k_2^{ph}}. \quad (57)$$

Brzina kemijske reakcije računa se prema: (58)

$$k_2^{ch} = k_{0,2}^{ch} \cdot \exp(-E_2^{ch} / RT),$$

dok se fizikalni limitatori oksidacije kisika unutar same čestice ugljika računaju kao:

$$k_2^{ph} = \frac{24 \cdot f_m \cdot D_0}{R \cdot d_p \cdot T_0^{1.75}} T^{0.75} \cdot 10^5, \quad (59)$$

gdje je D_0 difuzijski koeficijent kisika, koji ovisi o poroznosti, zakrivljenosti i veličini pore te se prikazuju prema [18]:

$$D_0 = 9.7 \cdot 10^2 \cdot r_{pore} \left(\frac{T}{M_0} \right)^{0.5} \cdot \frac{\epsilon_0}{\tau_0}. \quad (60)$$

4.3.4. Masena bilanca čestice ugljene prašine

Ukupna masa čestice ugljene prašine sastoji se od mase ugljena, m_{pc} mase čistog ugljika m_C i mase pepela m_{ash} . Uslijed procesa izgaranja dolazi do promjene mase na sljedeći način:

$$\begin{aligned}
 m_p &= m_{pc} + m_C + m_{ash} \\
 \dot{m}_{pc} &= -\dot{m}_C + -\dot{m}_{CH_4} \\
 \dot{m}_C &= -\dot{m}_{C+} - \dot{m}_{C-} \\
 \dot{m}_{ash} &= 0 \\
 \dot{m}_p &= -\dot{m}_{CH_4} + \dot{m}_{C-}
 \end{aligned} \tag{61}$$

Promjena mase ugljena \dot{m}_{pc} smanjuje se tijekom pirolize uslijed nastajanja novog ugljika C te stvaranja metana CH_4 . Promjena mase čistog ugljika \dot{m}_C odvija se uslijed pirolize (nastajanje) te uslijed oksidacije (nestajanje). Promjene mase pepela \dot{m}_{ash} nema jer je to inertni dio. Do promjene mase čestice \dot{m}_p dolazi zbog stvaranja CH_4 (ishlapljuje) i zbog nestajanja ugljika tijekom oksidacije. Negativni predznak označuje smanjenje mase.

Smanjenje mase ugljena može se prikazati kao:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m_{pc}}{m_p} \right) = -k_{py} \quad \Rightarrow \quad \dot{m}_{pc} = -k_{py} m_p + \left(\frac{m_{pc}}{m_p} \right) \dot{m}_p \tag{62}$$

Sljedeća dva izraza prikazuju stvaranje ugljena i metana tijekom procesa pirolize:

$$\dot{m}_{C+} = -2 \left(\frac{M_C}{M_{pc}} \right) \dot{m}_{pc}, \tag{63}$$

$$\dot{m}_{CH_4} = - \left(\frac{M_{CH_4}}{M_{pc}} \right) \dot{m}_{pc} n_{dro}. \tag{64}$$

Potrošnja ugljena tijekom procesa oksidacije:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m_{C-}}{m_p} \right) = -k_{ox} \quad \Rightarrow \quad \dot{m}_{C-} = -k_{ox} m_p + \left(\frac{m_{C-}}{m_p} \right) \dot{m}_p \tag{65}$$

Promjena mase ostalih produkata izgaranja:

$$\dot{m}_{O_2} = \frac{1}{f_m} \left(\frac{M_{O_2}}{M_C} \right) \dot{m}_{C-n_{dro}}, \quad (66)$$

$$\dot{m}_{CO} = -2 \left(1 - \frac{1}{f_m} \right) \left(\frac{M_{CO}}{M_C} \right) \dot{m}_{C-n_{dro}}, \quad (67)$$

$$\dot{m}_{CO_2} = \left(1 - \frac{2}{f_m} \right) \left(\frac{M_{CO_2}}{M_C} \right) \dot{m}_{C-n_{dro}}. \quad (68)$$

Promjena temperature čestice i promjena temperature plinovite faze računa se prema sljedećim jednadžbama:

$$\dot{T}_p = \frac{1}{m_p c_p} \left(\frac{-f \Delta H_R \dot{m}_{C-}}{M_{C-}} + \alpha A (T_g - T_s) + \varepsilon \sigma A (T_g^4 - T_s^4) \right), \quad (69)$$

$$\dot{T}_g = \frac{\left[\left(\frac{-(1-f) \Delta H_R \dot{m}_{C-}}{M_{C-}} + \alpha A (T_g - T_s) + \varepsilon \sigma A (T_g^4 - T_s^4) \right) n_d + \sum \dot{m}_i c_{pi} (T_p - T_g) \right]}{\sum m_i (c_{pi} + \frac{dc_{pi}}{dT} T)} \quad (70)$$

Izraz (69) predstavlja promjenu temperature čestice \dot{T}_p uslijed same reakcije, uslijed konvekcije te uslijed zračenja, a izraz (70) predstavlja promjenu temperature plinovite faze \dot{T}_g uslijed reakcije, konvekcije, zračenja i dodatno uslijed promjene mase. Veličina n_d odnosi se na broj čestica.

Dakle, matematički model izgaranja ugljene prašine sastoji se ukupno od devet jednadžbi:

- 7 jednadžbi za pojedinu kemijsku vrstu (O_2 , CO , CO_2 , CH_4), komponente čestice C_3H_4 i C te jedna jednadžba za samu promjenu mase cijele čestice \dot{m}_p
- 2 entalpijske jednadžbe ravnoteže

4.3.5. Dodatne homogene reakcije

Nadalje, dodatne homogene reakcije su uzete u obzir unutar plinovite faze, kod oksidacije ugljičnog monoksida CO i izgaranja metana CH₄ [14].:



Jednadžba (71) prikazuje oksidaciju ugljičnog monoksida CO i četverofazni Jones-Lindstedt mehanizam za plinovitu fazu [19]. Homogene reakcije unutar plinovite faze rješavaju se istovremeno s pirolizom i oksidacijom čistog ugljika.

4.3.6. Transportne jednadžbe za kemijske vrste

Special Transport Modul u programskom paketu FIRE pruža mogućnost rješavanja transportnih jednadžbi kemijskih vrsta. Postoje nekoliko opcija za računanje fizikalnih svojstava kemijskih vrsta, smjese plinova i tekućina. FIRE nudi dva modela, a to su:

- a) General model
- b) Standard model

U ovom radu korišten je General model koji za izgaranje ugljene prašine uključuje sedam kemijskih vrsta, a to su O_2 , N_2 , H_2O , CO_2 , CO , CH_4 i H_2 s time da se transportna jednadžba za dušik N_2 ne računa zbog numeričke stabilnosti i smanjenja vremena kalkulacije. Kod General modela kemijski sastav nije predefiniран, već se za svaku kemijsku vrstu posebno računa Arrheniusov zakon brzine reakcije.

Opća transportna jednadžba kemijskih vrsti može se prikazati u diferencijalnom obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{y_k} \frac{\partial y_k}{\partial x_i} \right) + S_{y_k} \quad k = 1 \dots K_{spec} \quad (72)$$

gdje y_k predstavlja maseni udio pojedine kemijske vrste k , a K_{spec} označuje ukupni broj kemijskih vrsti. Koeficijent difuzije pojedine kemijske vrste Γ_{y_k} računa se prema izrazu:

$$\Gamma_{y_k} = \left(\rho D_{k,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \quad (73)$$

gdje je Sc_t turbulentni Schmidt-ov broj sa vrijednošću 0.7, a $D_{k,m}$ koeficijent difuzije vrste k u smjesi.

Izvor S_{y_k} definiran je jednadžbom:

$$S_{y_k} = \dot{r}_k \cdot M_k \quad (74)$$

u kojoj su \dot{r}_k i M_k brzina reakcije i molarna masa kemijske vrste k .

Slijede transportne jednadžbe pojedine kemijske vrste:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho y_{O_2}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_{O_2}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma y_{O_2} \frac{\partial y_{O_2}}{\partial x_i} \right) + S_{O_2} \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho y_{N_2}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_{N_2}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma y_{N_2} \frac{\partial y_{N_2}}{\partial x_i} \right) + S_{N_2} \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho y_{H_2O}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_{H_2O}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma y_{H_2O} \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial x_i} \right) + S_{H_2O} \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho y_{CO_2}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_{CO_2}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma y_{CO_2} \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial x_i} \right) + S_{CO_2} \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho y_{CO}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_{CO}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma y_{CO} \frac{\partial y_{CO}}{\partial x_i} \right) + S_{CO} \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho y_{CH_4}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_{CH_4}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma y_{CH_4} \frac{\partial y_{CH_4}}{\partial x_i} \right) + S_{CH_4} \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho y_{H_2}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_{H_2}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma y_{H_2} \frac{\partial y_{H_2}}{\partial x_i} \right) + S_{H_2}
 \end{aligned} \tag{75}$$

Kao što je i prije spomenuto, za svaki od izraza u jednadžbi (75), posebno se računa Arrheniousov zakon brzine reakcije pomoću CHEMKIN datoteke koja je povezana s FIRE rješavačem.

5. PRIJENOS TOPLINE ZRAČENJEM

5.1. Uvod

Zračenjem, kao najvažnijim mehanizmom prijenosa topline u ložištu, prenese se oko 90% ukupno izmijenjene toplinske energije [3]. Pod zračenjem se podrazumijeva prijenos energije elektromagnetskim valovima, koje kod termičkog zračenja obuhvaća valne duljine od 10^{-4} m do 10^{-7} m.

Do danas su razvijene mnoge metode za rješavanje modela prijenosa topline zračenjem od kojih su neke: fluksne metode, Hottelova zonalna metoda, Monte Carlo metoda, metoda diskretnog transfera, metoda diskretnih ordinata itd. U ovom radu koristi se P-1 model zračenja. Sve te metode će za dovoljno finu diskretizaciju postići korektno rješenje i s tog su gledišta sve zadovoljavajuće. Razlika među njima je u ekonomičnosti i upotrebljivosti metode, te u kompleksnosti matematičkog modela.

Najveći iznos energije zračenja koja može biti emitirana kod zadane valne duljine i zadane temperature naziva se zračenje crnog tijela. Tijelo koje takav iznos energije emitira naziva se crno tijelo. Crno tijelo je idealno tijelo koje upija svu energiju zračenja koja na njega padne neovisno o valnoj duljini ili kutu zračenja. Dakle crno tijelo idealni je apsorber, ali i idealni emiter.

Zračenje se na makroskopskom nivou promatra kao prijenos energije putem elektromagnetskih valova, što odgovara klasičnom termodinamičkom pristupu koji vodi do integralno-diferencijalne jednadžbe koja se teško rješava. Na mikroskopskom nivou zračenje se prikazuje kao transport energije pomoću čestica energije (kvanti i fotoni). Takav pristup je kvantni pristup.

5.2. Jednadžba prijenosa topline zračenjem

Općenito za neki medij koji emitira, apsorbira i raspršuje zračenje u točki određenoj vektorom \mathbf{r} u smjeru vektora \mathbf{s} , jednadžba prijenosa topline zračenjem glasi [20]:

$$\frac{dI(r, s)}{ds} + (a + \sigma_s)I(r, s) = a \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(r, s') \Phi(s \cdot s') d\Omega' \quad (76)$$

s' - vektor smjera raspršenja

s - duljina puta

a - koeficijent apsorpcije

σ_s - koeficijent raspršenja

σ - Stephan-Boltzmannova konstanta

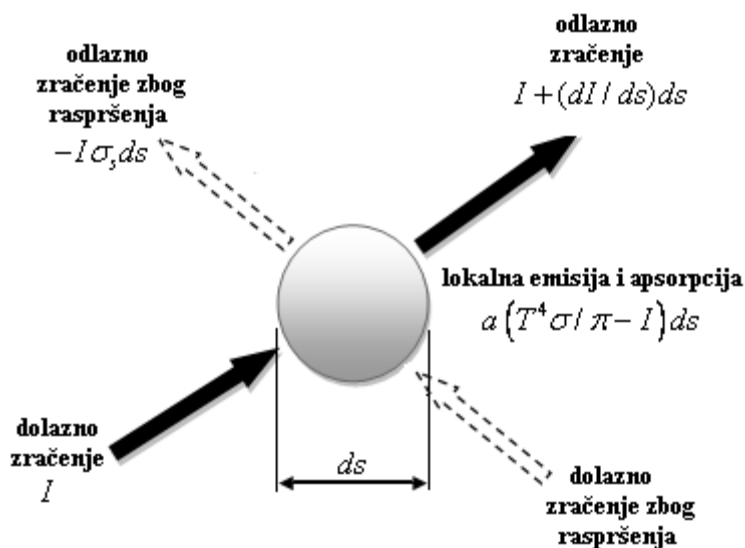
I - ukupni intenzitet zračenja

T - lokalna temperatura

Φ - fazna funkcija (vjerojatnost da će zračenje iz smjera s biti raspršeno u smjeru s')

Ω' - prostorni kut

Prijenos topline zračenjem ilustriran je na slici 6.



Slika 6. Prijenos topline zračenjem

5.3. Model zračenja P1

U ovom radu za prijenos topline zračenjem i efekt zračenja čestica ugljene prašine korišten je P-1 model zračenja[21]. Prednost ovog modela je što uključuje efekt rasipanja (eng. *scattering*) koji podrazumijeva da jedan dio zračenja može skrenuti s puta kao rezultat lokalne interakcije čestica. Nedostatak je pretpostavka da su sve površine difuznog karaktera, kao i tendencija modela da predviđa tok zračenja iz izvora ili ponora. Model se prikazuje sljedećom jednadžbom:

$$\nabla(\Gamma\nabla G) = (a + a_p)G - 4\pi \left(a \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p \right), \quad (77)$$

gdje član na lijevoj strani predstavlja promjenu površinskog zračenja G. Prvi član na desnoj strani označuje apsorpciju iz plinovite faze i čestica, a drugi član emisiju, također iz plinovite faze i čestica. Slijedi objašnjenje pojedinih izraza u jednadžbi (77). Izraz za koeficijent emisije čestice E_p glasi:

$$E_p = \frac{1}{\Delta V} \sum_{n=1}^N \varepsilon_{pn} A_{pn} \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (78)$$

Koeficijent apsorpcije čestice a_p računa se prema izrazu:

$$a_p = \frac{1}{\Delta V} \sum_{n=1}^N \varepsilon_{pn} A_{pn} \quad (79)$$

Koeficijent difuzije Γ :

$$\Gamma = \frac{1}{3(a + a_p + \sigma_p)} \quad (80)$$

σ_p označuje koeficijent rasipanja čestice:

$$\sigma_p = \frac{1}{\Delta V} \sum_{n=1}^N (1 - f_{pn})(1 - \varepsilon_{pn}) A_{pn} \quad (81)$$

Izvorni član računa se kao:

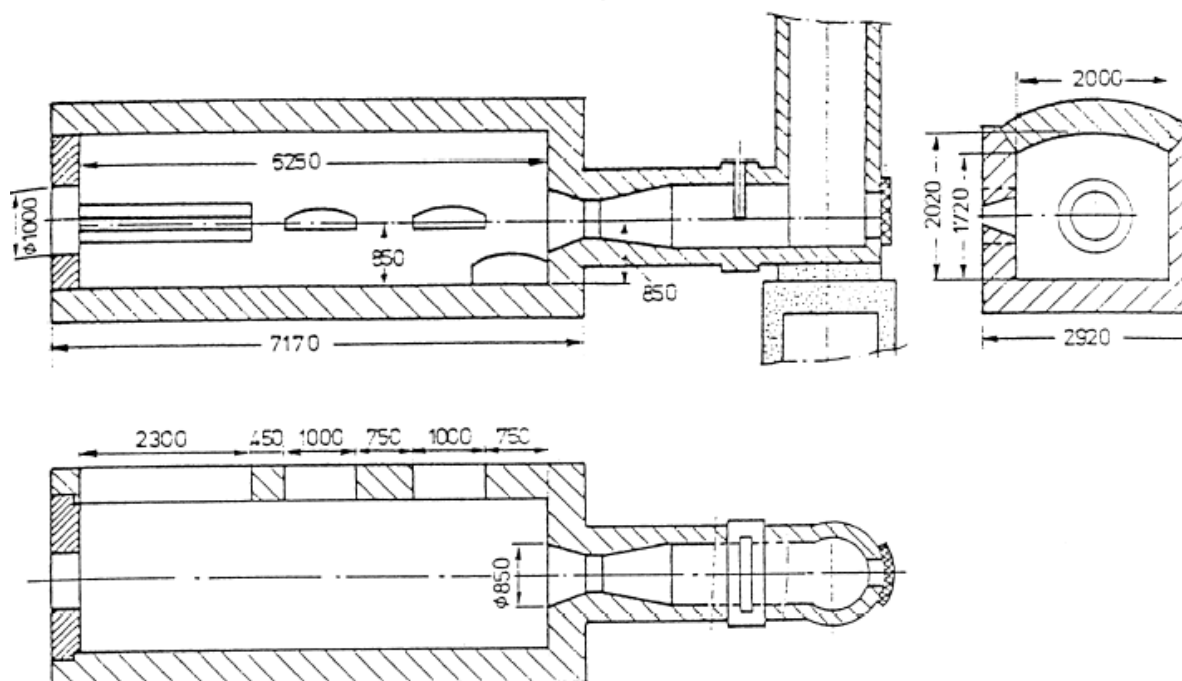
$$-\nabla q_r = -4\pi \left(a \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p \right) + (a + a_p)G \quad (82)$$

6. RAČUNALNA DOMENA I POSTAVKE SIMULACIJE

Upotrebom AVL-ovog programskog paketa "CFD WM", simulirano je dvodimenzionalno izgaranje ugljene prašine u ložištu.

6.1. Ložište

Eksperimentalni rezultati mjerenja na horizontalnom ložištu u IJmuidenu opširno su prikazani u [22]. Ložište ima oblik horizontalno položenog kvadra sa blago zaobljenim stropom kao što je prikazano na slici 7.

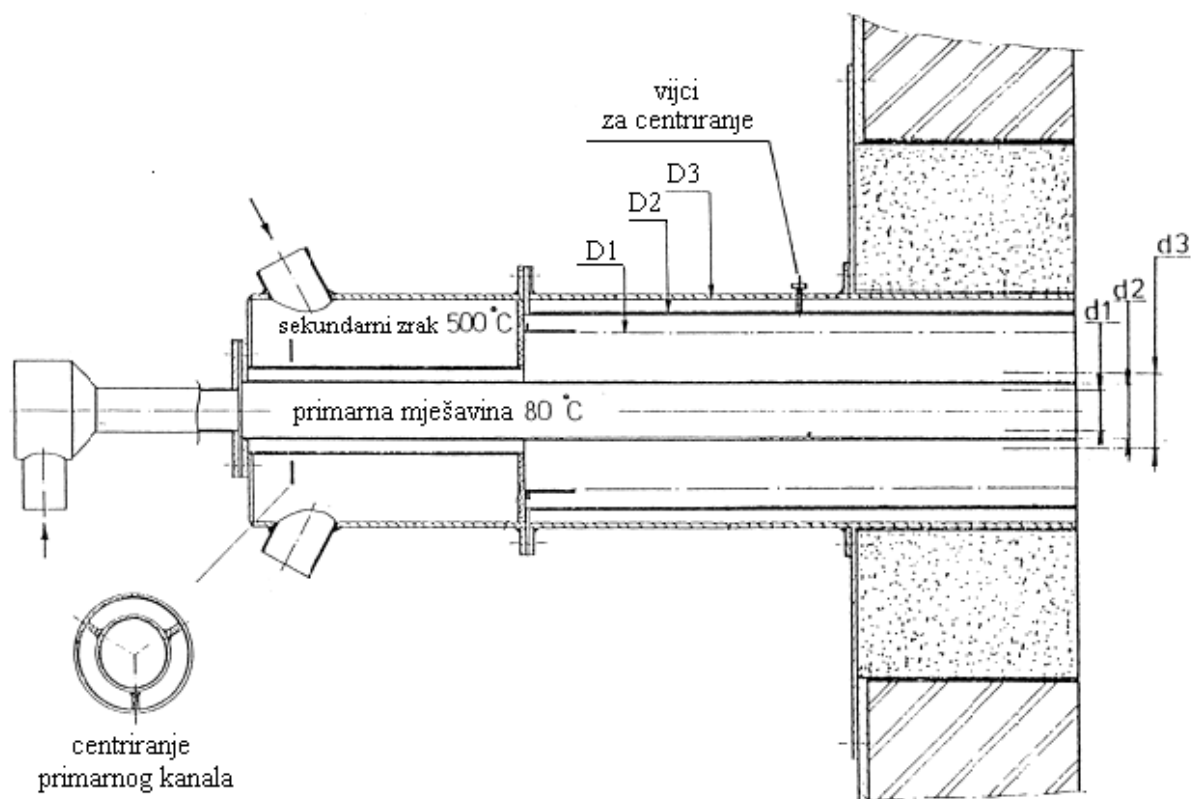


Slika 7. Presjek eksperimentalnog ložišta, IJmuiden [22]Error! Reference source not found.

U ložištu se teži ostvarenju potpunog izgaranja, kako bi se eliminirali toplinski gubici vezani na neizgorenost gorivih sastojaka goriva. Potpuno se izgaranje načelno postiže dovođenjem u ložište dovoljno velike količine zraka. S druge pak strane poželjno je količinu (masu) zraka koji se dovodi u ložište držati što manjom, da bi na izlazu iz ložišta bila što manja količina dimnih plinova.

6.2. Gorionik

U ovom radu korišten je gorionik "cijev u cijevi". Kroz manju cijev struji mješavina zraka i ugljene prašine zvan primarni zrak, a kroz veću samo vrući zrak zvan sekundarni zrak. Ovaj sekundarni zrak koji je potreban za stabilizaciju plamena u sredini, upuhuje se kroz kružni prsten sa unutarnje strane, kao što se može vidjeti na slici 8.



Slika 8. Prikaz gorionika [22]

Dimenzije gorionika dane su tablicom 6.

Tablica 6. Dimenzije gorionika [mm]

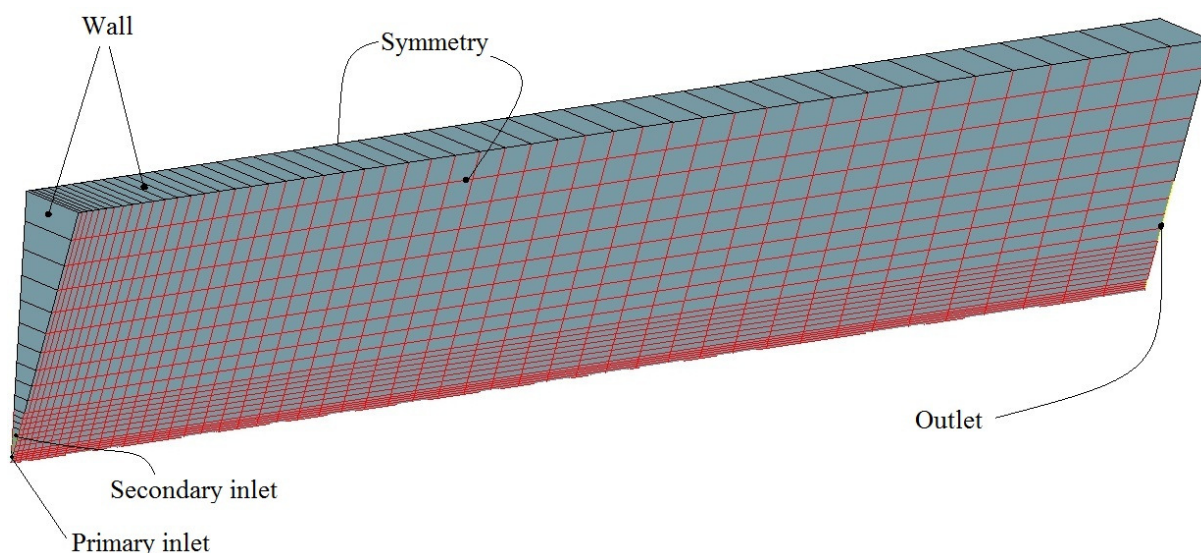
D1	D2	D3	d1	d2	d3
260,4	339,6	399	70,3	107,1	130

6.3. Postavke simulacije

6.3.1. Mreža i rubni uvjeti

Diskretizacija prostora izvedena je sa 1.000 kontrolnih volumena korištenjem potpuno automatskog generatora mreže "FAME Advanced Hybrid". Radi pojednostavljenja problema i skraćivanja simulacije mreža je dvodimenzionalna, u obliku kriške. Na njoj se definiraju selekcije za četiri različita rubna uvjeta (prikazana na slici 9.):

- velocity inlet
- outlet
- wall
- symmetry



Slika 9. 2D domena s rubnim uvjetima

Kako bi simulacija na takvoj domeni odgovarala simulaciji cijele domene peći, rubne stranice isječka definiraju se kao SYMMETRY, označeno crvenom bojom na slici 9. Crnom bojom označena je selekcija WALL koja se u rubnim uvjetima definira kao stacionarni zid. Temperaturni rubni uvjet ove selekcije uzima se 1300 K. Za rubni uvjet na primarnom ulazu definira se maseni tok od 10.63 kg/h smjese zraka i ugljene prašine, a na sekundarnom ulazu maseni tok od 86 kg/h zraka. Za izlaz fluida iz domene definira se selekcija OUTLET na kojoj se definira statički tlak 100.000 Pa.

6.3.2. Ulazni parametri

Nakon generiranja mreže kontrolnih volumena, potrebno je definirati određene parametre kao što su vrsta strujanja, početni i rubni uvjeti itd. Podaci smjese ugljene prašine i zraka (primarni zrak) prikazani su tablicom 7., a podaci sekundarnog zraka tablicom 8.

Tablica 7. Ulazni parametri gorionika za primarni zrak

ulaz	ugljena prašina		zrak	
	u [m/s]	T [K]	u [m/s]	T [K]
primarni zrak	23.02	343.15	23.02	343.15

Tablica 8. Ulazni parametri gorionika za sekundarni zrak

ulaz	ugljena prašina			zrak		
	\dot{m} [kg/h]	u [m/s]	T [K]	\dot{m} [kg/h]	u [m/s]	T [K]
sekundarni zrak	-	-	-	86	43.83	573.15

Ukupno vrijeme trajanja simulacije je deset sekundi. Nakon prve sekunde ulaze čestice ugljene prašine. Od početka do treće sekunde imamo zagrijavanje sekundarnim zrakom od 2000 K, nakon čega se temperatura u 3,3 sekunde spušta na referentnu vrijednost od 473 K.

Tablica 9. Sastav ugljena

element	% maseni	maseni
C	74.65	0.7465
H	4.7	0.047
N	11.2	0.112
S	8.5	0.085
O	11.08	0.1108

Sastav ugljene prašine dan je tablicom 9.

6.3.3. Vremenski korak

Proces izgaranja izrazito je nestacionaran proces koji zahtijeva mali vremenski korak. Ako je vremenski korak prevelik, može doći do nestabilnosti simulacije uslijed velikih gradijenata pri izmjeni mase. Na početku simulacije stavlja se veći vremenski korak, no on se smanjuje odmicanjem simulacije, kao što to prikazuje tablica 10.

Tablica 10. Vremenski korak

Vrijeme kalkulacije do [s]	Time step
1	0.001
10	0.00025

6.3.4. Podjela domene na više procesora

Da bi se postigao brži i efikasniji proračun tijekom kalkulacije, koristi se paralelni rad procesora u AVL CFD Solveru (eng. *MPI parallelization*). Pri tome dolazi do podjele ukupne domene gdje svaki procesor rješava funkcije za određenu prostornu domenu. Treba naglasiti da ovime ne dolazi do razdvajanja matematičkih operacija, već samo domene (eng. *domene decomposition*).

Dobar algoritam za paralelni rad mora omogućiti sljedeće:

- adekvatno povećanje brzine: upotreba više procesora istovremeno vodi ka smanjenju potrebnog vremena računanja
- dobru raspodjelu podataka: svaki procesor mora obrađivati aproksimativno jednaku količinu podataka
- dobru sposobnost varijacije broja procesora: laka promjena broja procesora prilikom rada

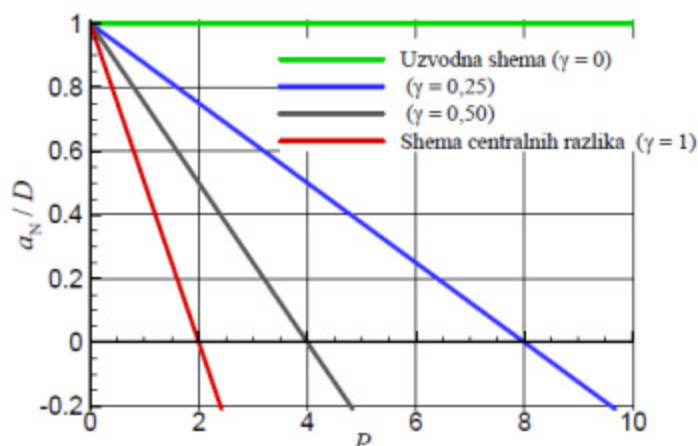
6.3.5. Korištena numerička shema diferencije

Način na koji se računaju vrijednosti varijabli na površini ćelije ima veliki utjecaj na točnost i konvergenciju numeričke metode. Shema diferencije korištena u ovom radu je tzv. „MINMOD Relaxed“. Ona predstavlja linearnu kombinaciju uzvodne sheme (eng. *Upwind Differencing Scheme*, UDS) i sheme centralne diferencije (eng. *Central Differencing Scheme*, CDS), u kojoj je koeficijent a_N definiran kao:

$$a_N = \gamma a_N^{CDS} + (1 - \gamma) a_N^{UDS}, \quad (83)$$

gdje je γ faktor miješanja (eng. *Blending factor*). Za $\gamma = 1$ dobije se shema centralnih razlika, a za $\gamma = 0$, uzvodna shema. Slika 7. prikazuje promjenu koeficijenta a_N ovisno o faktoru γ . Očito se područje pozitivnog koeficijenta povećava sa smanjivanjem faktora γ , čime je shema stabilnija, ali i manjeg reda točnosti.

Sve vrijednosti prikazane su u ovisnosti o lokalnom Pecletovom broju, Pe (omjer konvekcije i difuzije).



Slika 10. Mješavina CDS i UDS za različite faktore miješanja [4]

UDS je shema prvog reda točnosti te unosi lažnu difuziju u numeričko rješenje. Prednost je da neće davati ne fizikalna oscilatorna rješenja, niti će praviti probleme vezano na konvergenciju numeričkog postupka. Neki autori preferiraju primjenu centralne sheme zbog drugog reda točnosti, ali treba imati na umu da shema može uvesti dodatnu numeričku nestabilnost.

Ako želimo postići više redova točnosti sheme diferencije, u definiciji sheme treba koristiti više čvorova, čime će se povećati i računalna molekula odnosno povećati popunjenost matrice sustava linearnih algebarskih jednadžbi (QUICK shema).

Tablica 11. Postavke shema diferencije

Shema diferencije	
momentum	MINMOD Relaxed
contuinity	MINMOD Relaxed
turbulence	Upwind
energy	MINMOD Relaxed
scalar	Upwind

U tablici 11. se vidi da je u ovom radu korišteni omjer shema diferencije 30% UDS te 70% CDS. Sa CDS shemom se dobiva rješenje drugog reda točnosti, a UDS shemom je omogućena dodatna stabilnost koja ne bi bila ostvarena korištenjem isključivo CDS sheme.

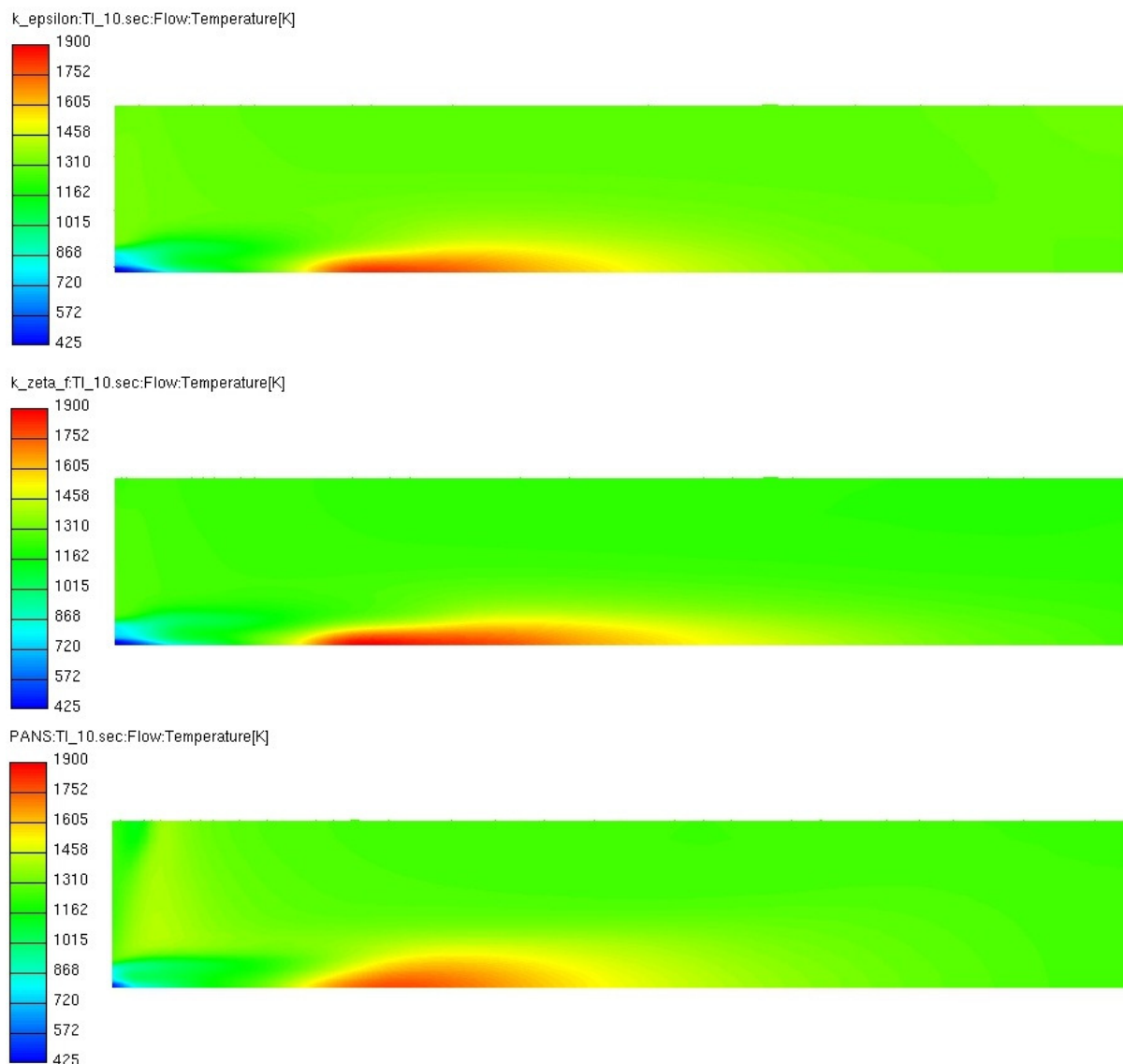
6.3.6. Podrelaksacijski faktori

Definiranjem različitih vrijednosti ovih faktora kontrolira se brzina konvergencije jednadžbi strujanja. Njihove se vrijednosti kreću u granicama od 0 do 1. Ako podrelaksacijski faktori imaju vrijednost 0, stabilnost rješenja simulacije se povećava, ali se povećava i vrijeme trajanja simulacije. Ako pak podrelaksacijski faktori teže 1, tada se stabilnost rješenja smanjuje, ali i vrijeme računanja se smanjuje. Cilj je optimalno definirati ove faktore tako da se postigne stabilnost i konvergencija rješenja uz što je moguće kraće vrijeme računanja. To se određuje iskustveno iz razloga što svaka simulacija se odlikuje svojom posebnosti.

7. REZULTATI

7.1. Temperaturno polje

Slika 11. prikazuje temperaturno polje računalne domene ložišta za $k-\varepsilon$, $k-\zeta-f$ i PANS modele turbulencije. Iz slike je vidljivo da je maksimalna temperatura u ložištu približno 1900 K.



Slika 11. Temperaturno polje ložišta za $k-\varepsilon$, $k-\zeta-f$ i PANS modele turbulencije

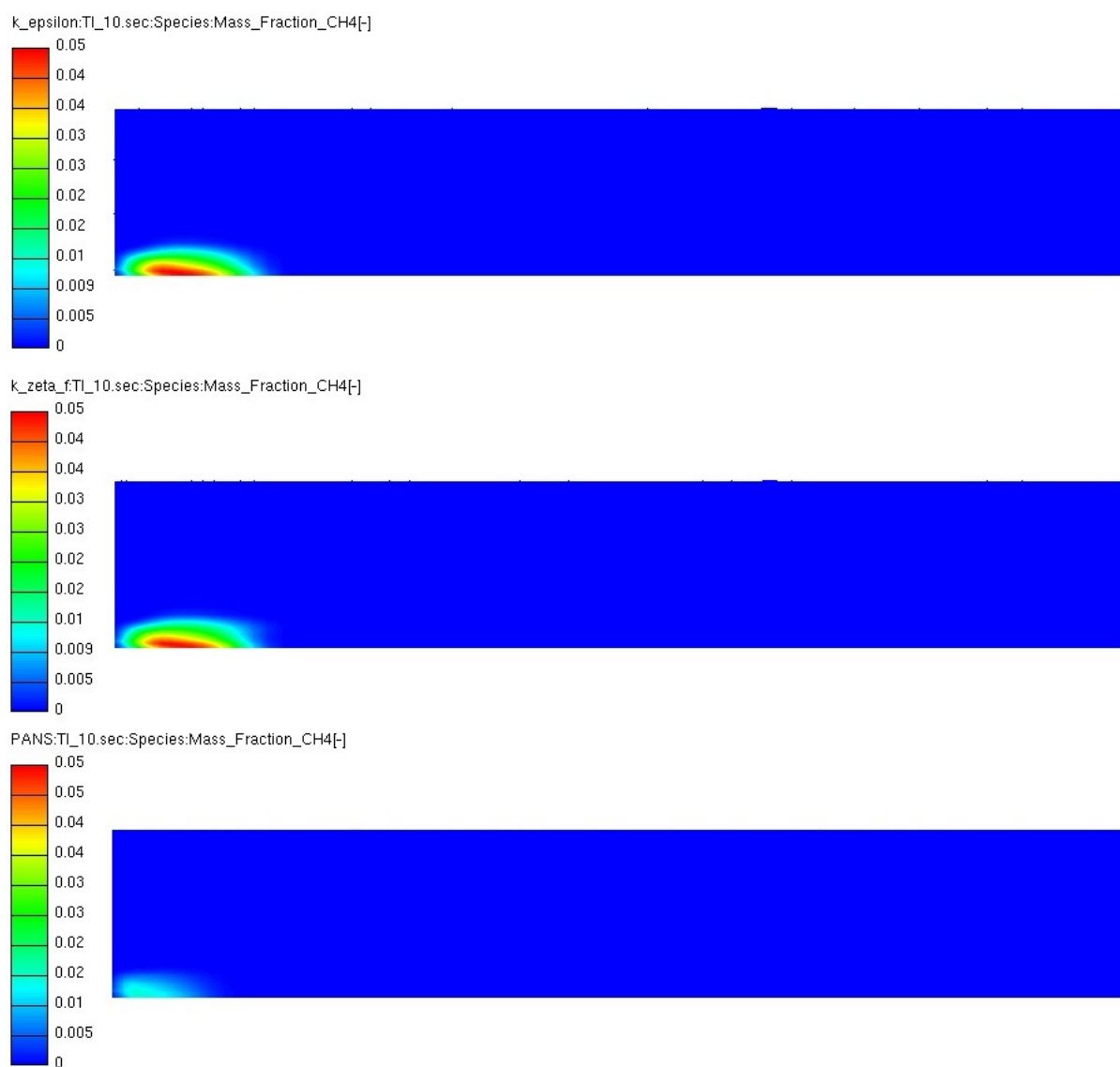
Također se može primijetiti kako prve dvije slike koje prikazuju $k-\varepsilon$ i $k-\zeta-f$ modele turbulencije imaju slična temperaturna polja, dok PANS prikazuje nešto niže temperature u polju plamena.

7.2. Plinovita faza

U nastavku slijedi prikaz masenih udjela najznačajnijih kemijskih vrsta plinovite faze, za CH_4 , CO_2 , CO , N_2 i O_2 .

7.2.1. Metan CH_4

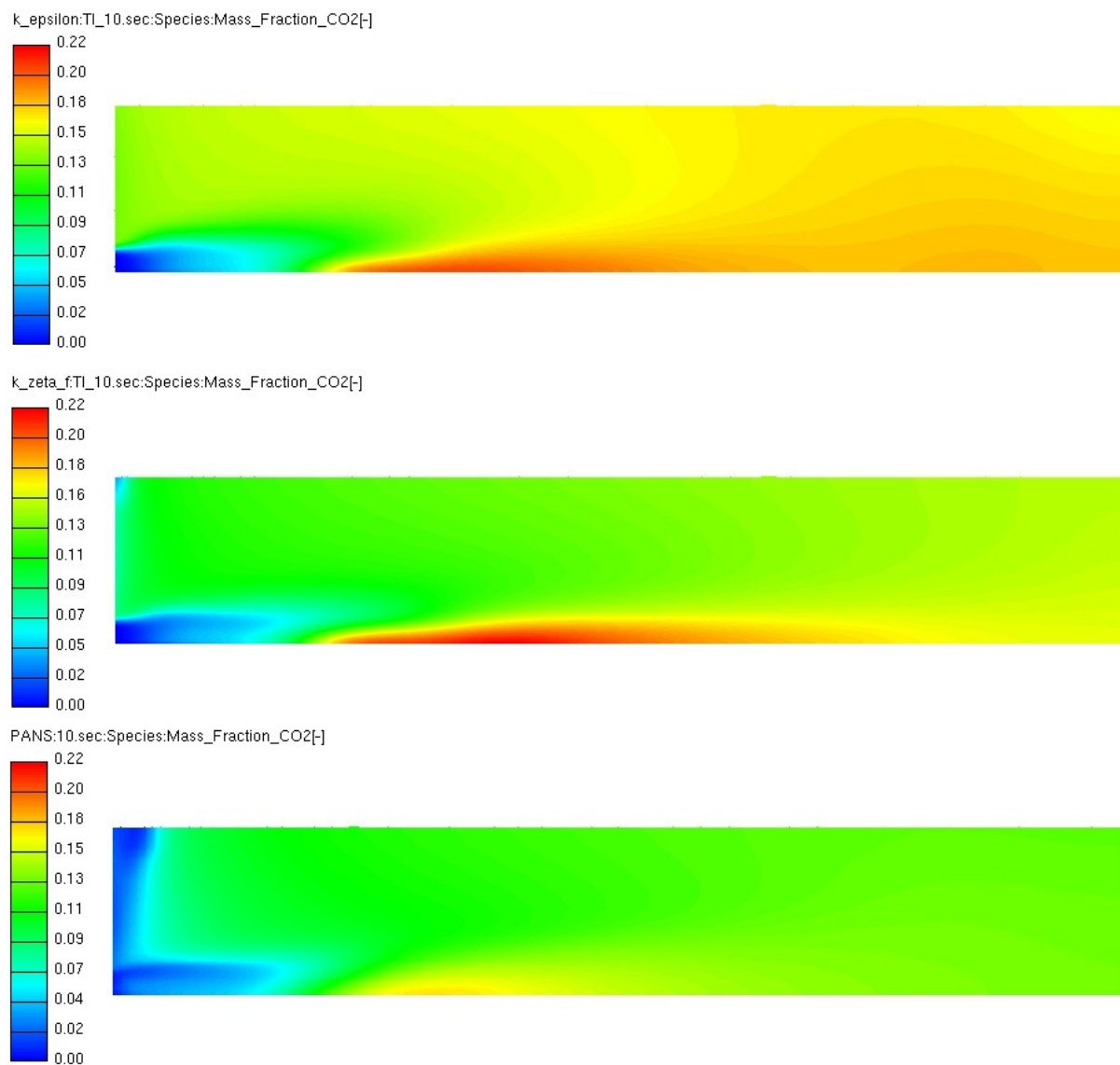
Na slici 12. prikazana je raspodjela masenog udjela metana CH_4 za tri različita modela turbulencije: $k-\varepsilon$, $k-\zeta-f$ te PANS. Udio metana u ložištu je najniži od svih kemijskih vrsta plinovite faze. Najviše ga dakako ima na mjestu odvijanja pirolize, gdje daljnjim reakcijama s kisikom i vodenom parom potpuno iščezava, tj. prelazi u ugljični monoksid i vodik.



Slika 12. Raspodjela masenog udjela metana CH_4

7.2.2. Ugljikov dioksid CO_2

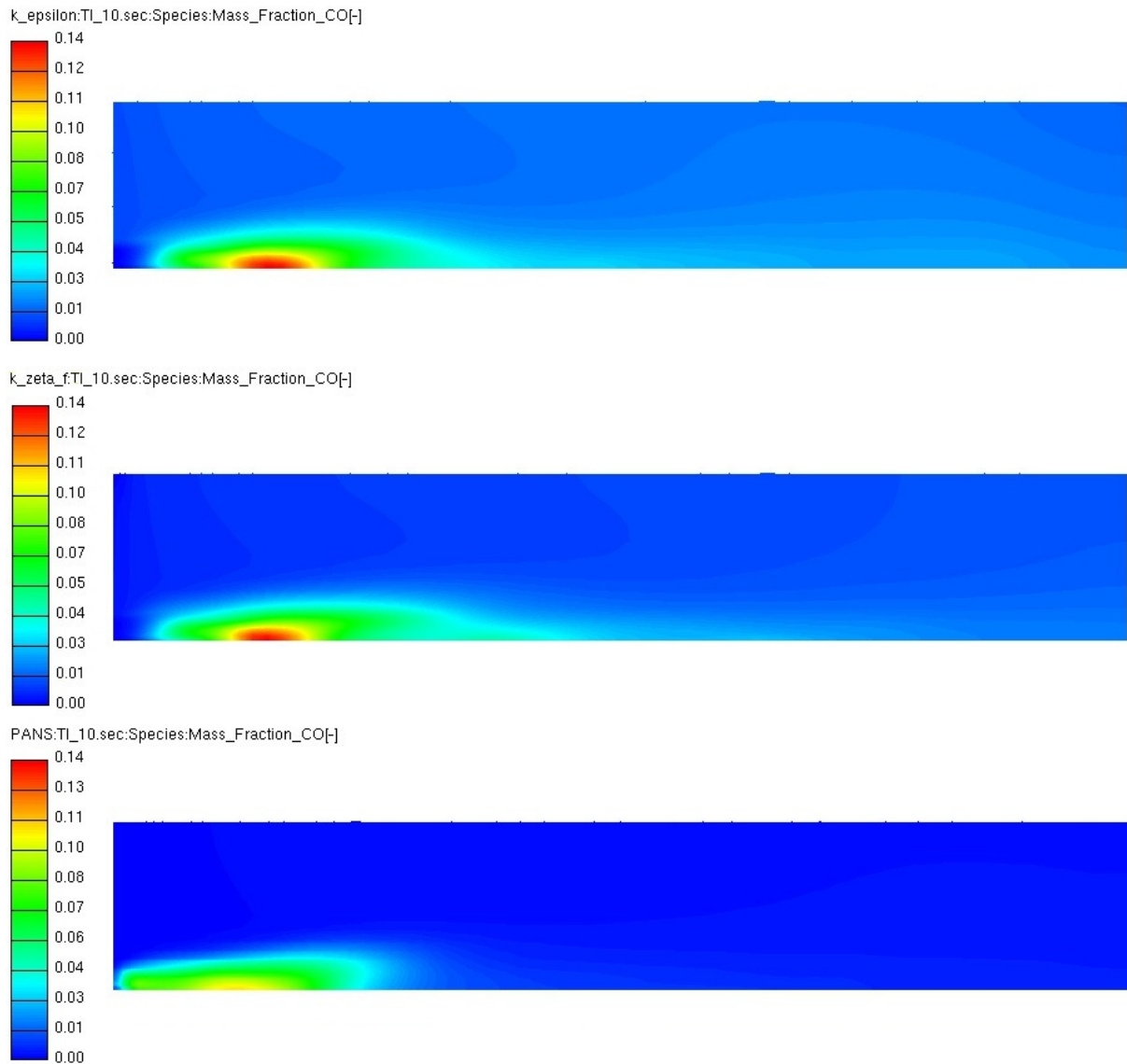
Na slici 13. prikazana je raspodjela masenog udjela ugljičnog dioksida CO_2 za k- ϵ , k- ζ -f te za PANS model turbulencije. Jasno je da na samom ulazu domene nema ugljičnog dioksida. Iz prikaza se može zaključiti kako najviše CO_2 nastaje upravo u području oksidacije čistog ugljika i ugljičnog monoksida.



Slika 13. Raspodjela masenog udjela ugljičnog dioksida CO_2

7.2.3. Ugljikov monoksid CO

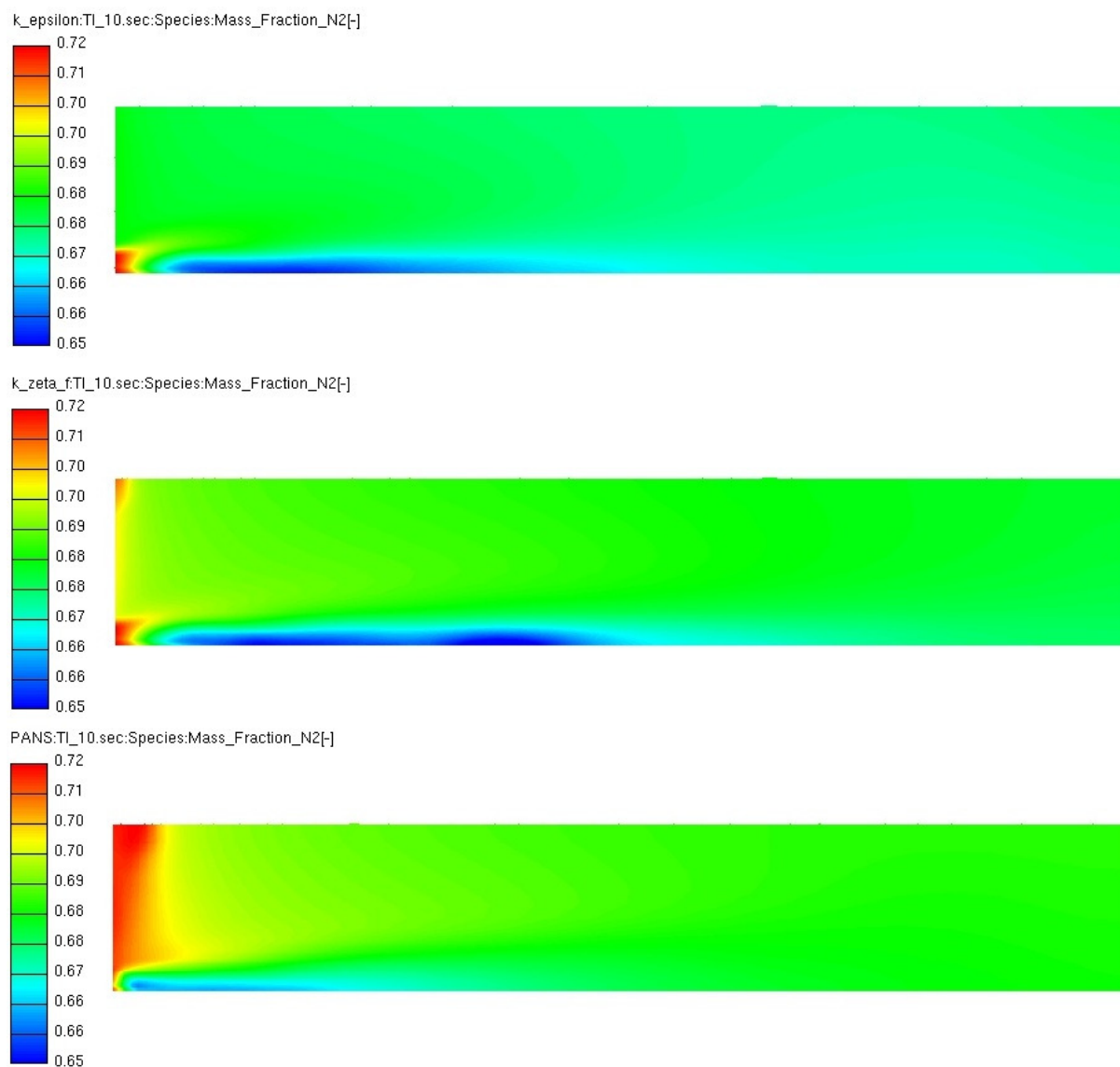
Na slici 14. prikazana je raspodjela masenog udjela ugljičnog monoksida CO za $k-\epsilon$, $k-\zeta-f$ te PANS model turbulencije. Najveća koncentracija ugljičnog monoksida prisutna je tamo gdje je najniža koncentracija kisika (slika 16.). Razlog je proces oksidacije čistoga ugljika. Ugljičnog monoksida praktički nema u ostalom dijelu domene jer oksidira u ugljični dioksid CO_2 .



Slika 14. Raspodjela masenog udjela ugljičnog monoksida CO

7.2.4. Dušik N_2

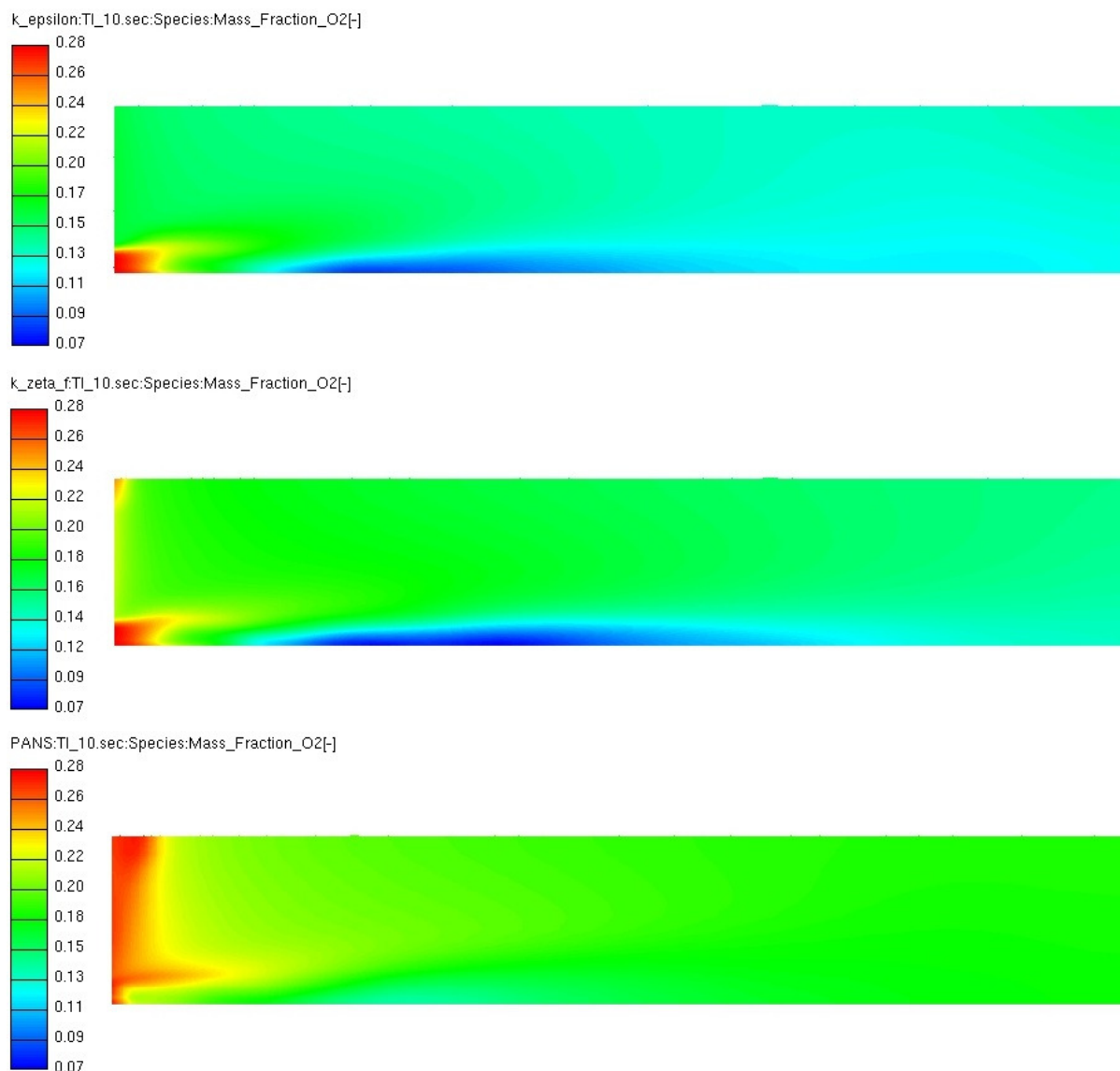
Na slici 15. prikazana je raspodjela masenog udjela dušika N_2 duž računalne domene za $k-\varepsilon$, $k-\zeta-f$ te PANS modele turbulencije.



Slika 15. Raspodjela masenog udjela dušika N_2

7.2.5. Kisik O_2

Na slici 16. prikazana je raspodjela masenog udjela kisika O_2 za k - ϵ , k - ζ - f te za PANS model turbulencije. Kako je bilo i za očekivati, najviše kisika nalazi se na ulazu u ložište. Plava boja koja predstavlja područje oko središnje linije ložišta govori da se tu odvija intenzivna oksidacija, dakle dolazi do stvaranja CO i CO_2 (slike 13. i 14.).



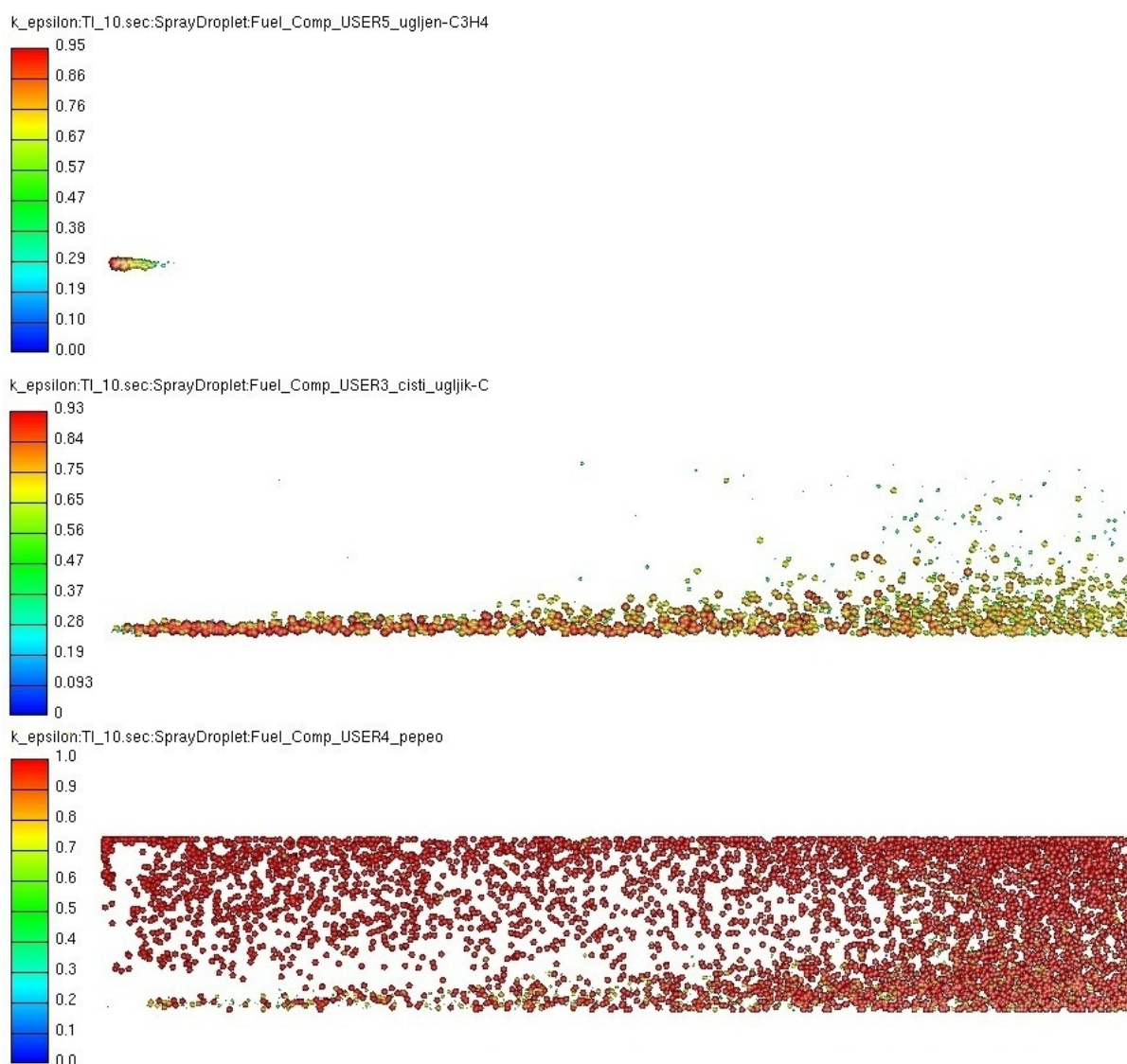
Slika 16. Raspodjela masenog udjela kisika O_2

7.3. Čestice

U ovom poglavlju prati se ponašanje ugljena C_3H_4 , čistog ugljika C te pepela unutar računalne domene.

7.3.1. Prikaz udjela u čestici ugljena za $k-\varepsilon$ model turbulencije

Slika 17. prikazuje udio ugljena C_3H_4 , čistog ugljika C te pepela u ukupnoj masi čestice ugljena na kraju simulacije izgaranja ugljene prašine za $k-\varepsilon$ model turbulencije.



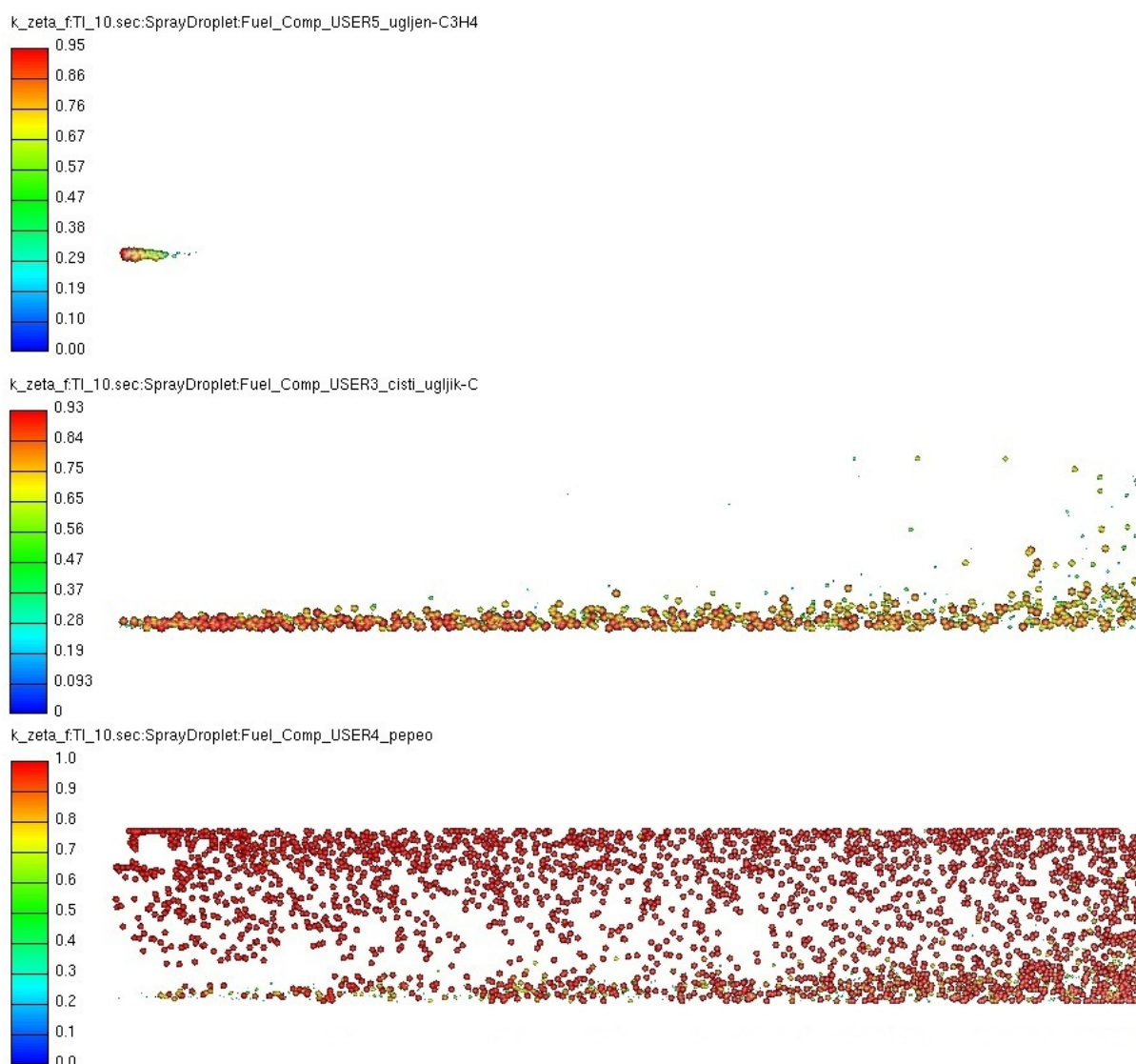
Slika 17. Prikaz udjela čestica ugljene prašine za $k-\varepsilon$ model turbulencije

Na prvoj slici vidi se kako je udio ugljena C_3H_4 u ukupnoj masi ugljena na ulazu domene najveći, a onda se smanjuje zbog procesa pirolize, tokom koje nastaje čisti ugljik. Druga slika prikazuje udio čistog ugljika C u ukupnoj masi ugljena, gdje se može primijetiti kako njega

ima najviše na početku domene, a onda se njegov udio smanjuje uslijed procesa oksidacije, gdje oksidira u CO i CO₂. Treća slika prikazuje udio pepela. Na ulazu domene udio pepela je očekivano najmanji, a dalje se njegov udio u ukupnoj masi ugljena povećava. Isto tako iz treće slike je vidljivo da kako je recirkulacijska zona ispunjena česticama ugljena koje su potpuno izgorjele, tj. česticama pepela.

7.3.2. Prikaz udjela u čestici ugljena za k - ζ - f model turbulencije

Slika 18. prikazuje udio ugljena C₃H₄, čistog ugljika C te pepela u ukupnoj masi čestice ugljena na kraju simulacije izgaranja ugljene prašine k - ζ - f model turbulencije.

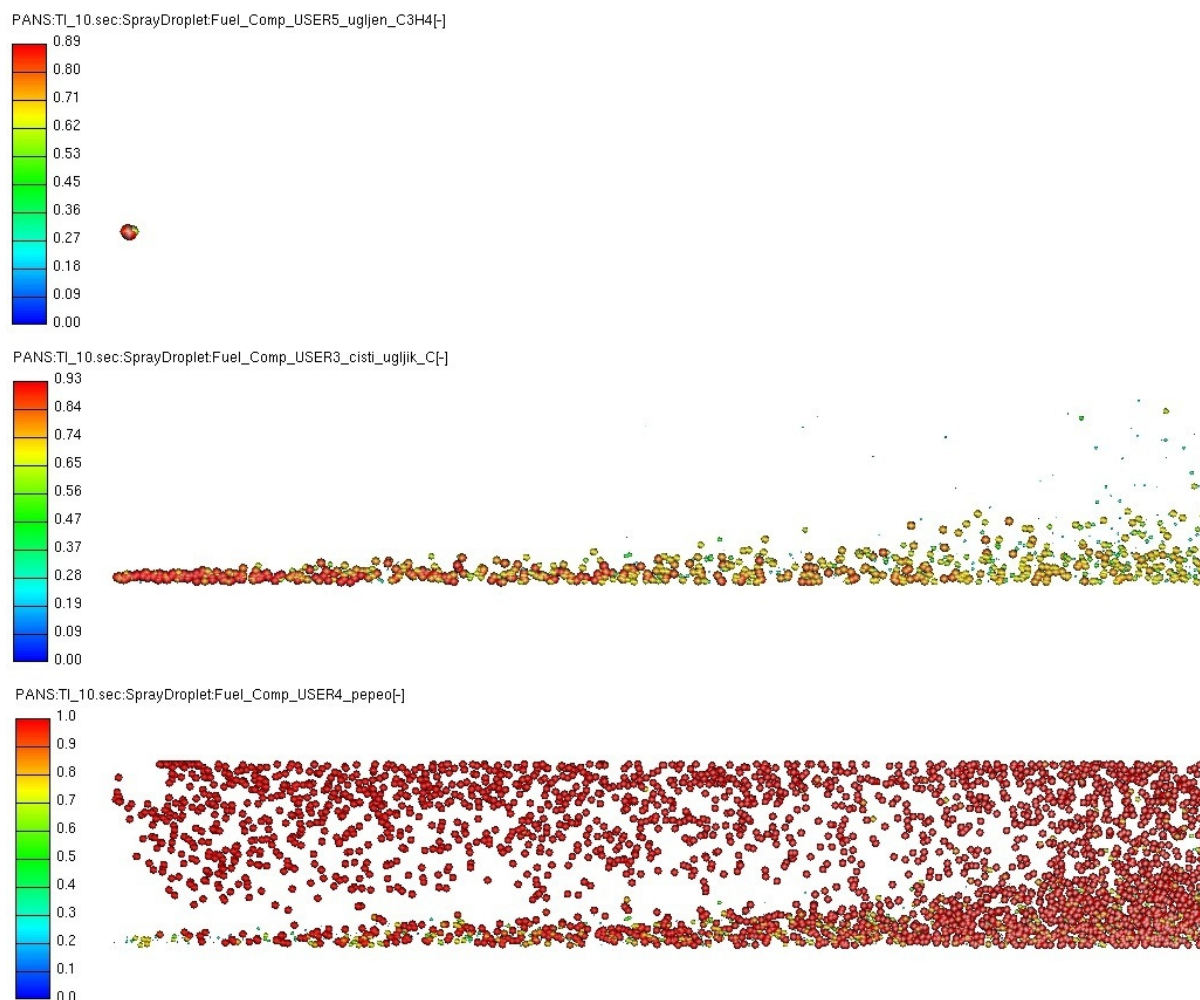


Slika 18. Prikaz udjela čestica ugljene prašine za k - ζ - f model turbulencije

Na gornjoj se slici može vidjeti da je udio ugljena C_3H_4 u ukupnoj masi čestice najveći na ulazu u računalnu domenu. Odmah nakon ulaska u računalnu domenu udio ugljena C_3H_4 u ukupnoj masi čestice se brzo smanjuje uslijed procesa. Srednja slika prikazuje udio čistog ugljika C u ukupnoj masi čestice kojeg najviše ima u dijelu domene gdje se odvija proces pirolize, a onda se njegov udio smanjuje uslijed oksidacije. Donja slika prikazuje udio pepela u ukupnoj masi čestice. Na ulazu domene udio pepela je najmanji, a dalje nastajanjem njegov udio se povećava.

7.3.3. Prikaz udjela u čestici ugljena za PANS model turbulencije

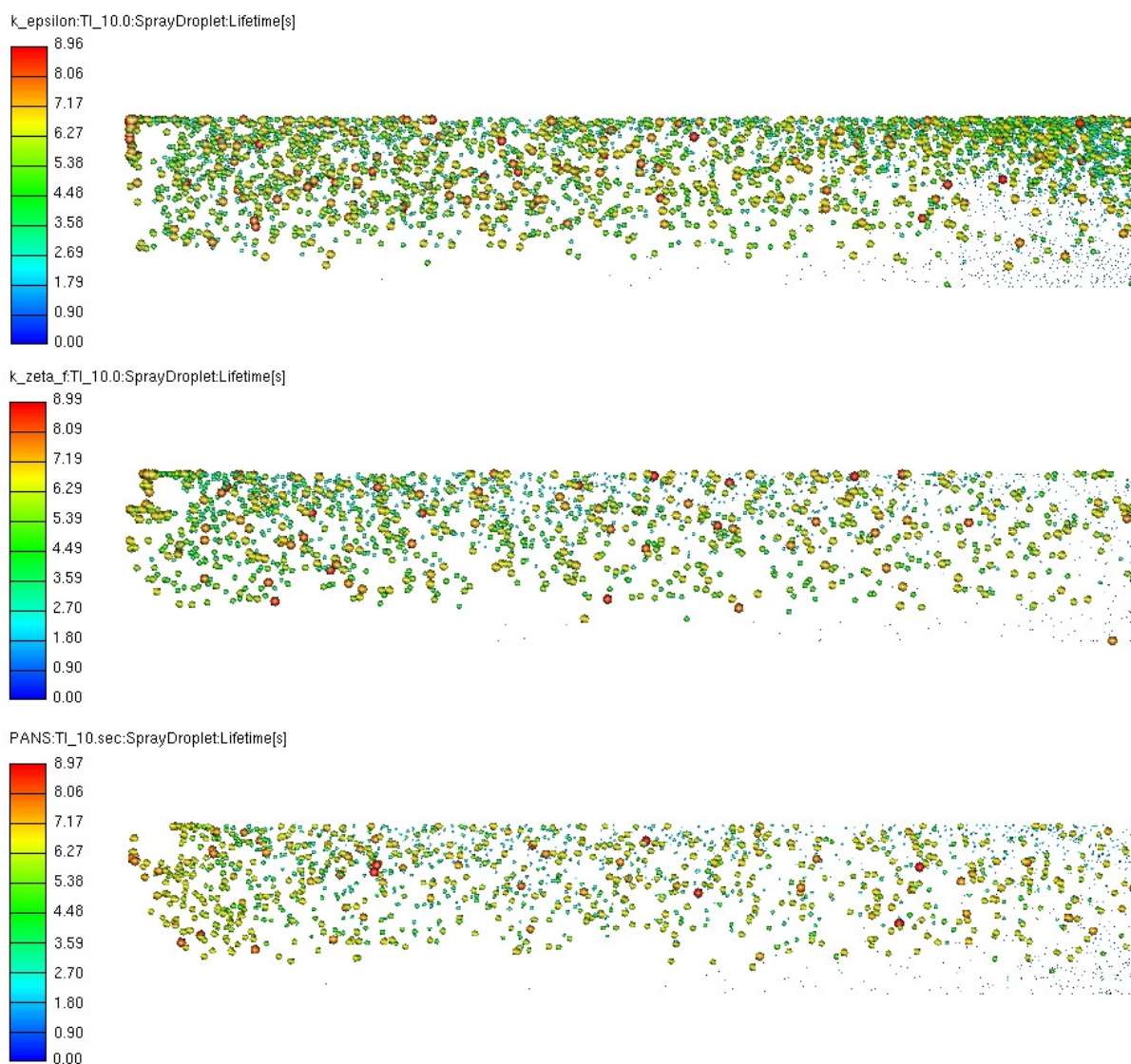
Slika 19. prikazuje udio ugljena C_3H_4 , čistog ugljika C te pepela u ukupnoj masi čestice ugljena za PANS model turbulencije.



Slika 19. Prikaz udjela čestica ugljene prašine za PANS model turbulencije

Na gornjoj slici može se vidjeti da su na ulazu čestice jače raspršene radijalno nego u slučaju $k-\varepsilon$ ili $k-\zeta-f$ modela koji te čestice više gurnu da idu ravno. Prema tome se može zaključiti kako PANS model ima bolje izraženu, tj. bolje izmodeliranu turbulenciju. Srednja slika prikazuje udio čistog ugljika C koji se smanjuje oksidacijom. Donja slika daje prikaz udjela pepela u ukupnoj masi čestice ugljena koji je na ulazu domene najmanji, a u recirkulacijskoj zoni najveći.

7.3.4. Vrijeme zadržavanja čestica



Slika 20. Prikaz vremena zadržavanja čestica za $k-\varepsilon$, $k-\zeta-f$ i PANS model turbulencije

Slika 20. prikazuje koliko se dugo čestice ugljena zadržavaju unutar računalne domene, za sva tri modela turbulencije koja se ispituju. Iako vrijeme simulacije traje punih deset sekundi,

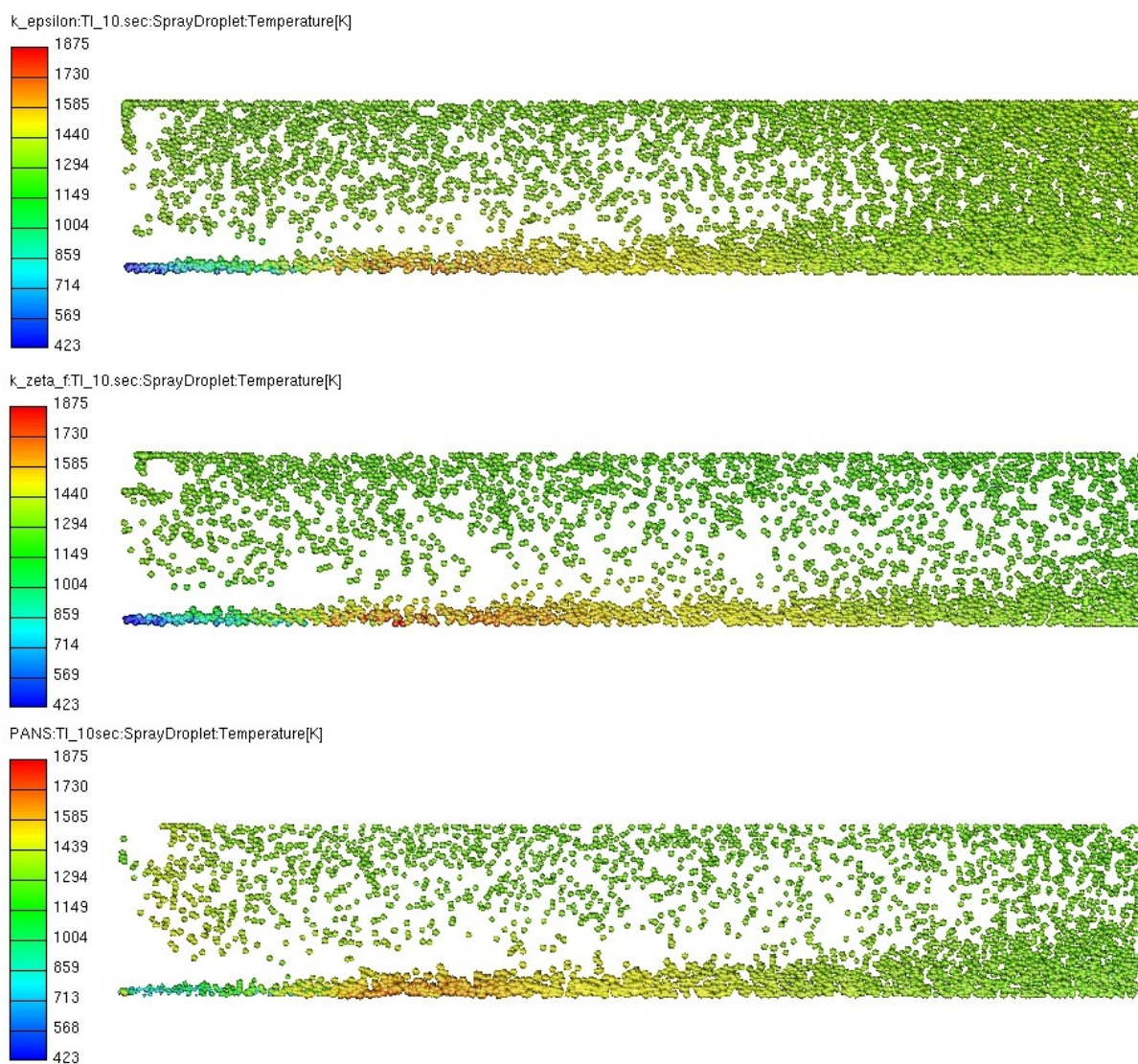
vremenska skala kreće se maksimalno do devete sekunde iz razloga što u postavkama simulacije je definirano da čestice ugljene prašine krenu ulaziti tek nakon prve sekunde.

Može se primijetiti kako se većina čestica nalazi u gornjem dijelu računalne domene. One se sudaranjem zadržavaju, tj. recirkuliraju. Iz toga razloga one su dugo u domeni pa su prikazane crvenom bojom.

U sva tri slučaja čestice nisu prisutne u donjem dijelu domene. Te čestice nisu nestale, već su tek ušle u domenu i tamo se nalaze samo djelić sekunde te nisu stigle ostati dovoljno dugo unutar domene da budu prikazane.

7.3.5. Temperatura čestica

Na slici 21. može se vidjeti prikaz svih čestica zajedno, za sva tri modela turbulencije. Na dnu računalne domene nalaze se pretežito čestice čistoga ugljika, a iznad njih čestice pepela. To se može objasniti time što se gorionik nalazi u donjem lijevom uglu 2D računalne domene, iz kojega u domenu ulazi ugljen C_3H_4 koji se tokom procesa pirolize raspada na čisti ugljik C i metan CH_4 . Iz rezultata je vidljivo da čestice imaju najveću temperaturu u području gdje dolazi do oksidacije čistoga ugljika C.



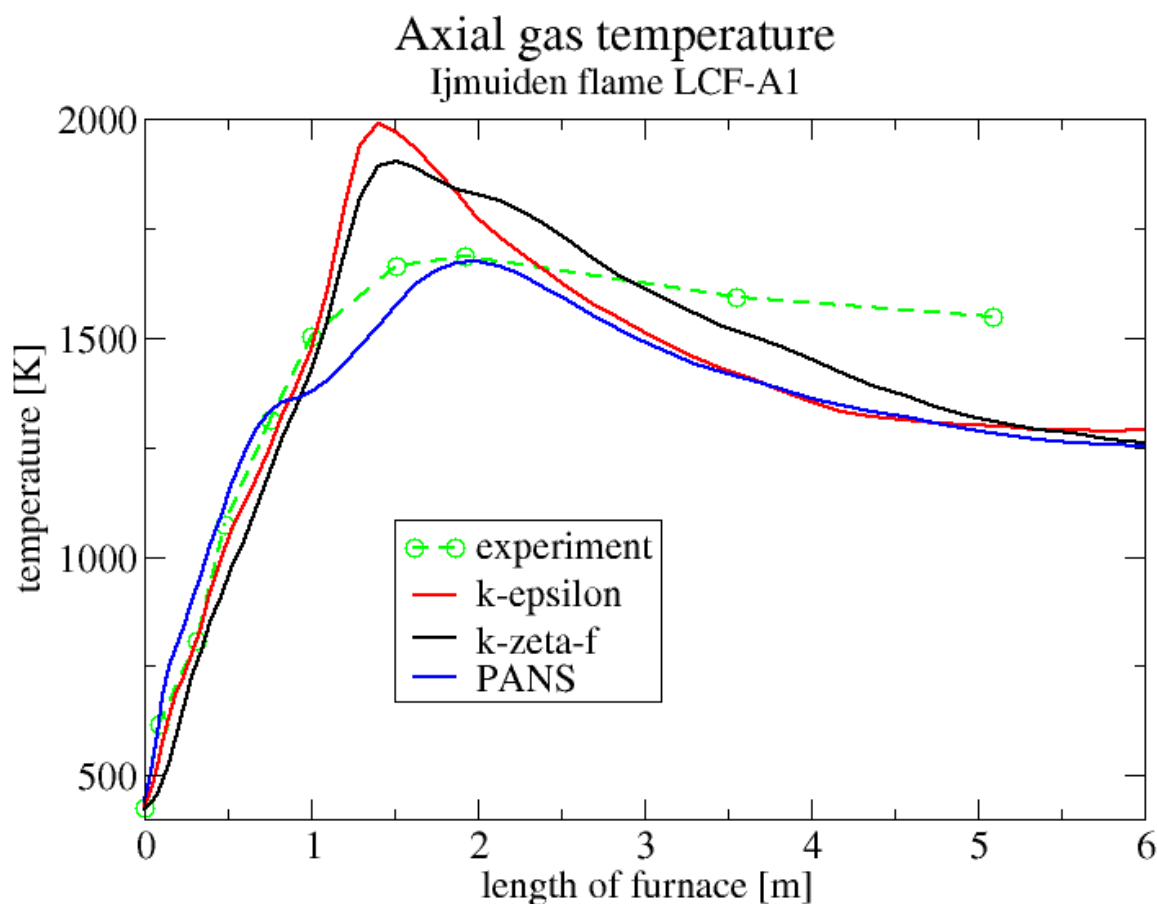
Slika 21. Prikaz temperature čestice ugljene prašine k- ϵ , k- ζ -f i PANS modela turbulencije

7.4. Usporedba s eksperimentalnim vrijednostima

Rezultati dobiveni numeričkim simulacijama uspoređeni su s postojećim eksperimentalnim podacima [22], gdje su se uspoređivali aksijalni i radialni temperaturni profili.

7.4.1. Aksijalna temperatura

Slika 22. prikazuje aksijalnu raspodjelu temperature kroz cijelu računalnu domenu. Eksperimentalni podaci uspoređeni su s numerički dobivenim rezultatima za sva tri modela turbulencije. Od ulaza pa sve do otprilike 2 metra, temperatura raste, te se prema kraju domene smanjuje. Iz rezultata je vidljivo da PANS turbulentni model ima najmanje odstupanje od eksperimentalnih rezultata, za razliku od $k-\varepsilon$ i $k-\zeta-f$ modela koji pokazuju odstupanje od otprilike 400K. Nakon drugog metra mjereno od ulaza ložišta, $k-\varepsilon$ i PANS pokazuju slične rezultate, dok $k-\zeta-f$ malo odstupa. Na izlazu ložišta numerički rezultati od eksperimenta odstupaju oko 250K.

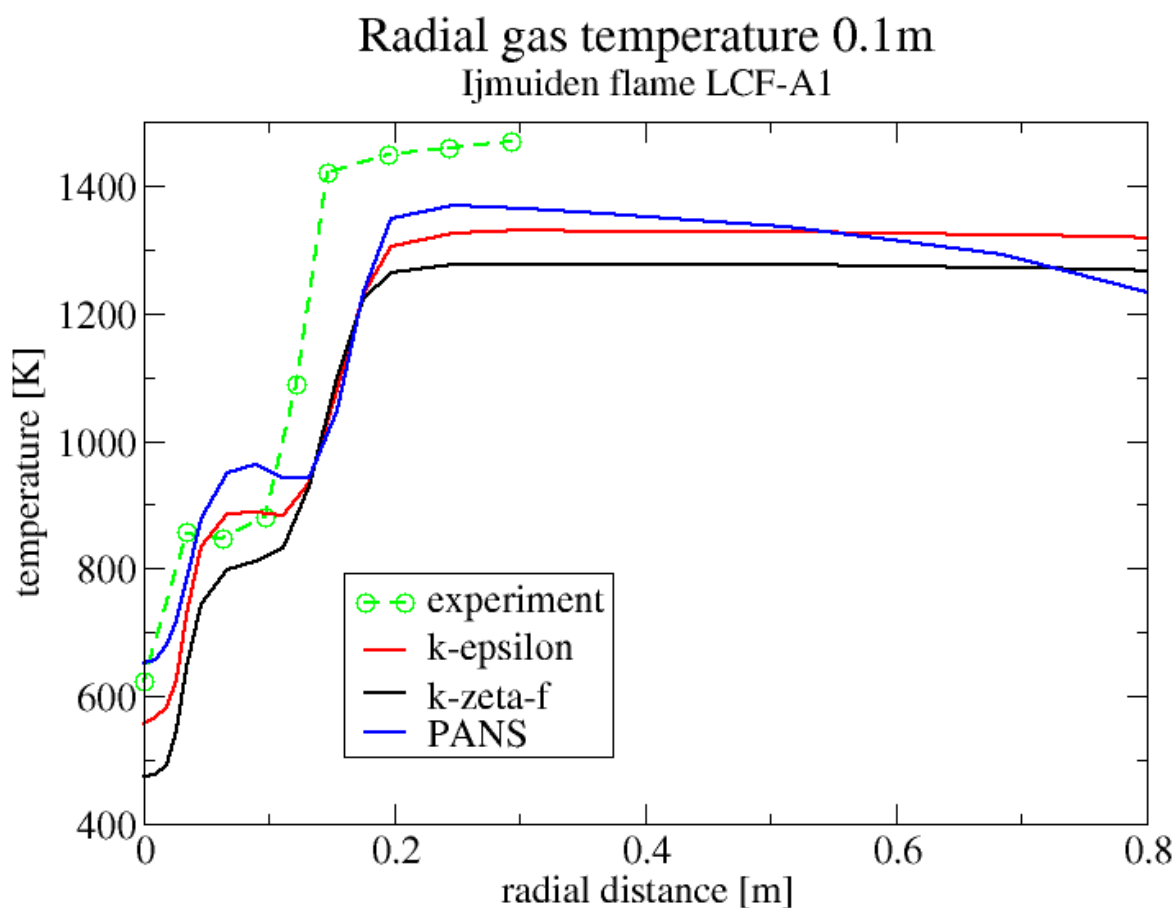


Slika 22. Usporedba aksijalne temperature eksperimenta sa sva tri modela turbulencije

Može se primijetiti kako najbolji rezultat, tj. najbolje slaganje s eksperimentom daje krivulja PANS modela turbulencije.

7.4.2. Radijalna temperatura na 0.1m

Slika 23. prikazuje usporedbu radijalne temperature eksperimenta s temperaturama dobivenih simulacijom s različitim modelima turbulencije na 0.1m udaljenosti od ulaza peći. Temperatura na radijalnoj udaljenosti 0m odgovara temperaturi na aksijalnoj udaljenosti od 0.1m na slici 22. Iz rezultata je vidljivo da temperatura od središnje osi prema vanjskom zidu peći raste.

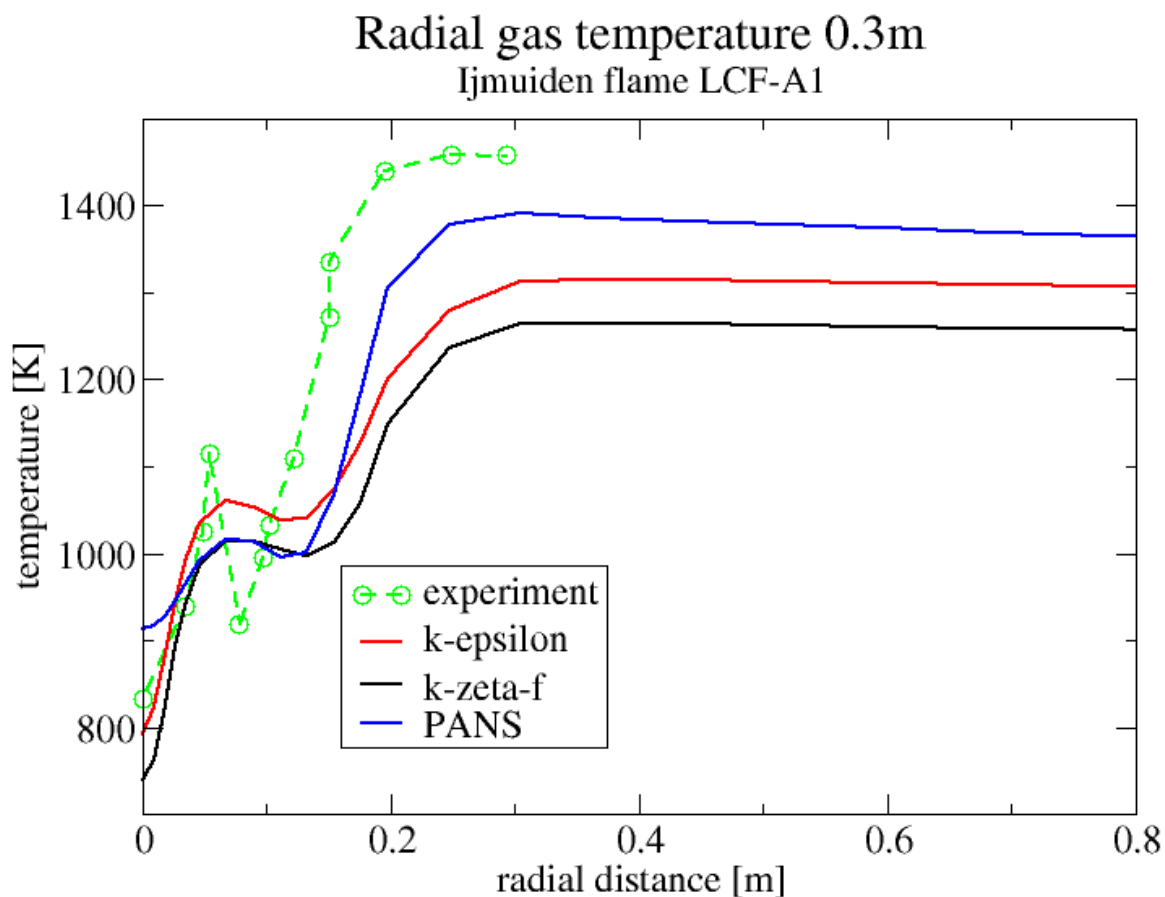


Slika 23. Usporedba radijalnih temperatura na udaljenosti 0.1m od ulaza peći

Od sva tri modela, najbolji rezultat pokazuje PANS, a najviše od eksperimenta odstupa k - ζ - f model turbulencije.

7.4.3. Radijalna temperatura na 0.3m

Slika 24. prikazuje usporedbu radijalne temperature eksperimenta s temperaturama različitih modela turbulencije na udaljenosti 0.3m od ulaza peći

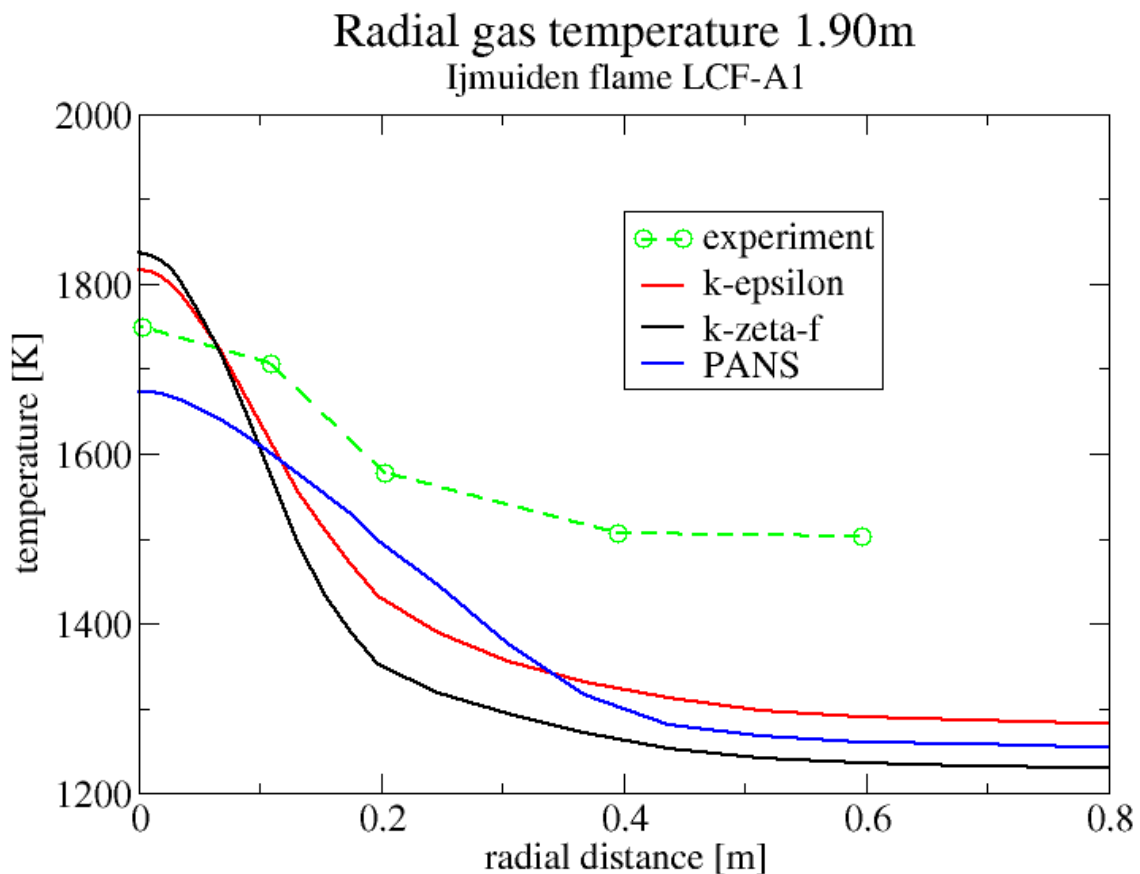


Slika 24. Usporedba radijalnih temperatura na udaljenosti 0.3m od ulaza peći

Iz ovih rezultata je također vidljivo da najbolje slaganje s eksperimentalnim podacima daje PANS turbulentni model.

7.4.4. Radijalna temperatura na 1.9m

Slika 25. prikazuje usporedbu radijalne temperature eksperimenta s temperaturama različitih modela turbulencije na udaljenosti 1.9m od ulaza peći. Temperatura od središnje osi opada prema zidu peći.



Slika 25. Usporedba radijalnih temperatura na udaljenosti 1.9m od ulaza peći

I u ovom slučaju, PANS daje najbolji rezultat od sva tri modela turbulencije.

8. ZAKLJUČAK

Izvršena je numerička simulacija procesa izgaranja ugljene prašine te prikazan utjecaj modela turbulencije. Korištena su tri modela turbulencije. Standardni turbulentni model $k-\varepsilon$ izabran je zbog svoje široke upotrebe, model $k-\zeta-f$ zato jer se radi o modelu koji je razvijen u programskom paketu FIRE, a PANS iz razloga što je taj model ustvari hibrid model između RANS-a i LES-a.

Prikazani su maseni udjeli pojedinih kemijskih vrsta. Također su prikazani udjeli ugljena C_3H_4 , čistog ugljika C te pepela, kao i njihovo ponašanje unutar računalne domene.

Rezultati dobiveni numeričkim simulacijama uspoređeni su s postojećim eksperimentalnim podacima[22], gdje su se uspoređivali aksijalni i radijalni temperaturni profili.

Najbolje slaganje rezultata dobivenih simulacijom u odnosu na eksperimentalne podatke pokazuje PANS model turbulencije. Isto tako, PANS pokazuje da bolje modelira turbulenciju širim raspršenjem čestica na ulazu u usporedbi sa ostala dva modela, $k-\varepsilon$ i $k-\zeta-f$, koja daju vrlo slične rezultate. Međutim, isto tako treba uzeti u obzir da se u slučaju PANS radi o modelu višeg reda.

9. PRILOG

I. CD-R disc

10. LITERATURA

- [1] Wendt F.J., Computational Fluid Dynamics, A von Karman Institute Book, Springer-Verlag, New York, 1992
- [2] Patankar, S.V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, Washington (1980)
- [3] Duić N. : Prilog Matematičkom Modeliranju Izgaranja Plinovitog Goriva u Ložištu Generatorske Pare, Doktorska disertacija, Zagreb, 1998
- [4] Virag Z., Dinamika plinova, Predavanja iz kolegija Dinamika plinova, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb
- [5] <http://powerlab.fsb.hr/numericke metode/metoda kontrolnih volumena.htm>
- [6] Peyret R., Taylor D.T., Computational methods for fluid flow, Springer-Verlag, New York, 1983
- [7] Vujanović M., Numerical modeling of multiphase flow in combustion of liquid fuel, Doctoral thesis, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, Zagreb
- [8] Hanjalic, K., Popovac, M., Hadziabdic, M.: A robust near-wall elliptic relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD
- [9] Arthur, J.A., Reactions between Carbon and Oxygen. Trans. Faraday Soc., 47 (1951), pp 164-178
- [10] AVL_v2011_Manuals
- [11] Duić N., Trodimenzionalni matematički model procesa u ložištu generatorske pare, magisterij, FSB, Zagreb (1993)
- [12] Mikulčić H., Vujanović M., Duić N., Reducing the CO₂ emissions in Croatia cement industry, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb
- [13] D.K. Fidaros, C.A. Baxevanou, C.D. Dritselis, N.S. Vlachos, Numerical modelling of flow and transport processes in a calciner for cement production, Powder Technology 171 (2007) 81-95
- [14] Görner K. Technische Verbrennungssysteme, Grundlagen, Modelbildung, Simulation. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag; 1991

-
- [15] Mikulčić H., Von Berg E., Vujanović M., Priesching P., Perković L., Tatschl R., Duić N., Numerical modelling of calcination reaction mechanism for cement production, *Chemical Engineering Science* 69 (2012) 607-615
- [16] Williams, A., Pourkashanian, M., Jones, J.M., *The Combustion of Coal and Some Other Solid Fuels, Chars*, Proceedings of the Combustion Institute, Volume 28, 2000., pp. 2141-2162
- [17] M.M. Baum, P.J. Street, Predicting the combustion behavior of coal particles, *Combustion Science and Technology* 3 (1971) 231-243
- [18] Charpenay, S. Serio, M.A., Solomon, P.R., *The Prediction of Coal Char Reactivity Under Combustion Conditions*, Twenty-Fourth Symposium on Combustion, 1992, pp. 1189-1197
- [19] Jones WP, Lindstedt RP. Global reaction scheme for hydrocarbon combustion, *Combust Flame* 1988;73:233-49
- [20] R. Siegel, J.R. Howell, *Thermal Radiation Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington, 1981
- [21] S.S. Sazhin, E.M. Sazhina, O. Faltsi-Saravelou, P.Wild, The P-1 model for thermal radiation transfer advantages and limitations, *Fuel* 75 (3) (1996) 298-294
- [22] J.B. Michel, R. Payne, Detailed measurement of long pulverized coal flames for the characterization of pollutant formation, Research report IJmuiden, 1980