

FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE  
Zagreb

# DIPLOMSKI RAD

Marko Ban

mentor:  
Neven Duić

Zagreb, 2004.

## SADRŽAJ

<b>POPIS SLIKA .....</b>	<b>5</b>
<b>POPIS TABLICA .....</b>	<b>6</b>
<b>1. UVOD.....</b>	<b>7</b>
<b>2. EMISIJE U PROCESIMA IZGARANJA.....</b>	<b>9</b>
2.1. Čađa.....	9
2.1.1. Modeliranje i simulacija nastanka čađe.....	11
2.1.2. Utjecaj omjera C/H.....	12
2.1.3. Utjecaj omjera C/O.....	13
2.1.4. Utjecaj temperature.....	14
2.1.5. Utjecaj tlaka.....	14
2.1.6. Utjecaj vremena zadržavanja.....	15
2.1.7. Mjerenje koncentracije čađe.....	15
2.2. NO <sub>x</sub> .....	15
<b>3. RAČUNALNA DINAMIKA FLUIDA.....</b>	<b>17</b>
3.1. Osnovne jednačbe.....	17
3.1.1. Zakon održanja mase (jednačba kontinuiteta).....	20
3.1.2. Zakon količine gibanja.....	21
3.1.3. Zakon momenta količine gibanja.....	22
3.1.4. Zakon održanja energije.....	23
3.1.5. Drugi zakon termodinamike.....	25
3.1.6. Dopunske jednačbe.....	25
3.2. Modeliranje turbulencije.....	27
3.2.1. Turbulentni Reynoldsov broj.....	27
3.2.2. Matematički model turbulencije.....	28
3.2.3. $k$ - $\epsilon$ model turbulencije.....	30
3.3. Modeliranje izgaranja.....	32
3.3.1. Izgaranje mlazeva.....	35
WAVE model.....	36
Interakcija stijenki i raspršenog mlaza.....	38
3.3.2. Turbulentni nepredmiješani plamen.....	39

3.3.3. PDF simuliranje turbulentnih nepredmiješanih plamena .....	41
3.3.4. <i>Flamelet</i> modeli .....	44
3.4. Čađa .....	47
3.4.1. Standardni model nastanka čađe .....	47
3.4.2. Napredni model nastanka čađe .....	47
3.5. NO <sub>x</sub> - Termalni NO (Zeldovich model) .....	48
<b>4. MODELIRANJE MREŽE KONTROLNIH VOLUMENA .....</b>	<b>51</b>
4.1. Selekcije .....	52
4.2. Početni uvjeti .....	55
Označavanje slučajeva opterećenja - Ispitivanje emisija - European Stationary Cycle (ESC) .....	55
<b>5. REZULTATI .....</b>	<b>59</b>
5.1. Tlak .....	59
5.2. Temperatura .....	62
5.3. NO <sub>x</sub> .....	63
5.4. Čađa .....	64
5.4.1. Variranje parametra za nastajanje čestica (engl. <i>Particle Inception</i> ) .....	64
5.4.2. Variranje oksidacijskog parametra .....	65
5.4.3. Variranje parametra površinskog rasta (engl. Surface growth = SGR) .....	66
5.4.4. Variranje fragmentacijskog parametra .....	68
<b>6. ZAKLJUČAK .....</b>	<b>70</b>
<b>7. LITERATURA .....</b>	<b>71</b>

## POPIS OZNAKA

Oznaka	Jedinica	Opis
c	-	varijabla toka reakcije
$C_{1\varepsilon}$	-	empirijska konstanta k- $\varepsilon$ modela turbulencije
$C_{2\varepsilon}$	-	empirijska konstanta k- $\varepsilon$ modela turbulencije
$C_\mu$	-	empirijska konstanta k- $\varepsilon$ modela turbulencije
d	m	promjer kapljice goriva
$D_{ji}$	1/s	tenzor brzine deformacije
e	J/kg	specifična energija
f	$m/s^2$	specifična masena sila
h	J/kg	specifična entalpija
k	$m^2/s^2$	turbulentna kinetička energija
$k_1, k_2$	$cm^3/mol\ s$	brzina kemijske reakcije
$k_3$	-	brzina kemijske reakcije
l	m	karakteristična duljina
Le	-	Lewisov broj
m	-	broj atoma kisika
n	-	broj atoma ugljika
n	-	jedinični vektor normale
p	Pa	tlak
q	$W/m^2$	gustoća toplinskog toka
Q	W	toplinski tok
$Re$	-	Reynoldsov broj
$R_t$	-	turbulentni Reynoldsov broj
S	-	izvor fizikalne veličine
	J/kmol K	entropija
t	s	vrijeme
T	K	temperatura
$T_{ij}$	$N/m^2$	tenzor naprezanja
u	m/s	brzina (gibanja granice kontrolnog volumena)
	J/kg	unutrašnja energija
V	$m^3$	volumen
v	m/s	brzina

We	-	Webberov broj
x	m	prostorna koordinata
y	m	prostorna koordinata
Y	-	maseni udio
z	m	prostorna koordinata
Z	-	udio smjese
$\Phi$	-	volumenska gustoća fizikalne veličine
	-	ekvivalentni omjer
$\Gamma$	Pa s	koeficijent difuzije fizikalne veličine
$\Sigma_{ji}$	N/m <sup>2</sup>	tenzor viskoznih naprezanja
$\alpha$	-	koeficijent funkcije gustoće vjerojatnosti
$\beta$	°	kut odbijanja kapljica
	-	koeficijent funkcije gustoće vjerojatnosti
$\delta_{ji}$	-	jedinični tenzor
$\varepsilon$	m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>	disipacija turbulentne kinetičke energije
$\varepsilon_{ijk}$	-	antisimetrični tenzor trećeg reda
$\varphi$	-	fizikalna veličina
$\lambda$	-	faktor pretička zraka
	W/m K	koeficijent toplinske vodljivosti
$\mu$	Pa s	dinamički koeficijent viskoznosti
$\mu_t$	Pa s	koeficijent turbulentne viskoznosti
$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	gustoća
$\sigma_i$	N/m <sup>2</sup>	vektor naprezanja
$\tau$	s	vrijeme
$\omega$	kmol/m <sup>3</sup> s	brzina produkcije kemijske tvari
$\psi$	°	kut

---

### Dijakritički znakovi

---

'	pulzirajuća komponenta fizikalne veličine, Reynoldsovo usrednjavanje
"	pulzirajuća komponenta fizikalne veličine, Favreovo usrednjavanje
-	usrednjena komponenta fizikalne veličine, Reynoldsovo usrednjavanje
~	usrednjena komponenta fizikalne veličine, Favreovo usrednjavanje

## POPIS SLIKA

Slika 2.1 Proces nastajanja čađe u vremenu .....	12
Slika 3.1 Turbulentne fluktuacije veličine $\varphi$ .....	28
Slika 3.2 Karakteristične veličine tokom zagrijavanja, isparavanja i izgaranja goriva	33
Slika 3.3 Razlika između standardnog WAVE modela i modela koji uključuje otkidanje .....	37
Slika 3.4 Mlaz pri 362 °KV .....	37
Slika 3.5 Raspršeni mlaz pri 400 °KV .....	<b>Error! Bookmark not defined.</b>
Slika 3.6 Funkcije gustoće vjerojatnosti za maseni udio goriva u turbuletnom mlazu	42
Slika 4.2 Mreža kontrolnih volumena pri 360°KV .....	52
Slika 4.3 Mreža kontrolnih volumena s označenim selekcijama.....	53
Slika 4.5 Područja opterećenja i brzina vrtnje .....	56
Slika 4.6 Dinamika ubrizgavanja goriva u svim promatranim slučajevima .....	58
Slika 5.1 Usporedba mjerenog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja B_50_A_0..	59
Slika 5.2 Usporedba mjerenog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja A_75_A_-4	60
Slika 5.3 Usporedba mjerenog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja C_25_A_0..	60
Slika 5.4 Usporedba mjerenog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja A_75_A_0..	61
Slika 5.5 Usporedba mjerenog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja A_25_A_0..	61
Slika 5.6 Usporedba temperatura svih varijanti opterećenja .....	62
Slika 5.7 Raspodjela temperatura (400 °KV) .....	62
Slika 5.10 Ovisnost proizvedene čađe o PI parametru (slučaj opterećenja B_50_A_0) .....	64
Slika 5.12 Varijacija oksidacijskog parametra (SO) na slučaju opterećenja A_25_A_0 .....	66
Slika 5.13 Ovisnost mase nastale čađe u parametru površinskog rasta.....	66
Slika 5.14 Varijacija parametra površinskog rasta u slučaju opterećenja B_50_A_0..	67
Slika 5.15 Ovisnost mase nastale čađe o fragmentacijskom parametru .....	68
Slika 5.16 Varijacija fragmentacijskog parametra u slučaju opterećenja C_25_A_0.	68
Slika 5.17 Usporedba slučajeva opterećenja s istim postavljenim vrijednostima parametara .....	69

## **POPIS TABLICA**

Tablica 2.1. Klasifikacija komponenti goriva.....	13
Tablica 4.1. Ispitivanje motora – ESC standard .....	55
Tablica 4.2. Početni uvjeti u svim slučajevima opterećenja.....	57

## 1. UVOD

Očuvanje okoliša već je nekoliko desetljeća u središtu interesa šire javnosti, te se poduzimaju razni koraci da se, uz ostalo, smanje štetne emisije. Kako se glavni uzroci emisija koje će se ovdje promatrati, nalaze u području transporta (pretvorba kemijske energije u mehaničku) [1][2], od posebnog su interesa svi mogući načini njihovog smanjenja.

Zakonske su se regulative na području vozila počele razvijati početkom 60-ih godina prošlog stoljeća, najprije na području sigurnosti, a zatim i zaštite okoliša (ograničenje CO, HC, NO<sub>x</sub>, čestice). Kako je rasla popularnost i pristupačnost motornih vozila, tako je rasao i broj zakonskih propisa koje vozilo mora zadovoljavati (danas je u Europi aktualna *Euro 3* razina zahtjeva) [1]. Stoga je dizajnerima motora s unutrašnjim izgaranjem, uz standardnu proizvodnju veće snage, poseban izazov stavljen na području ograničavanja štetnih emisija. Kao što će se pokazati, varijacijom samo dinamike i trenutka ubrizgavanja goriva, mogu se dobiti značajne promjene u sadržaju produkata izgaranja (čada, NO<sub>x</sub>). Upotrebom pouzdanog matematičkog modela pri ocjenjivanju efikasnosti određenog dizajna klipa (gledano s aspekta štetnih emisija), eliminirao bi se proces eksperimentalnog ispitivanja (što uključuje izradu modela i komplicirana mjerenja) i samim tim ubrzalo (pojeftinilo) proizvodnju. Sa snažnijim računalom, od početne skice udubljenja u čelu klipa do rezultata proračuna emisija (i tlaka i temperature) u ovom je slučaju potreban tek dan ili dva.

U posljednje vrijeme razvoj računalnih simulacija doveo je do novih modela i pristupa modeliranju izgaranja. Uz postojeće konvencionalne pristupe kod kojih se koriste jednostavniji modeli izgaranja koji usvajaju određene pretpostavke za simplifikaciju problema, razvijaju se i napredniji modeli koji uključuju kompleksnu kemijsku kinematiku. Ovi su doduše još uvijek vrlo ograničeni računalnim resursima i kao takvi omogućuju uključivanje relativno malog broja kemijskih reakcija.

U radu će biti dani osnove matematičkog modeliranja procesa dinamike fluida, te će biti ukratko opisani modeli korišteni pri simulaciji (k-ε model turbulencije, modeliranje mlazova i njihovog izgaranja, te modeli štetnih emisija – NO<sub>x</sub> i čada sa



standardnim i naprednim modelom). Problem čađe još nije u potpunosti kemijski, a pogotovo matematički objašnjen, no poznato je da u sebi uključuje stotine kemijskih reakcija i različitih tvari [4][5]. Stoga se u tom slučaju koriste statistički i ostali modeli bazirani na empiriji.

U programskom paketu "CFD Workflow Manager" koji se sastoji iz alata za modeliranje mreža kontrolnih volumena ("Imagine"), rješavanje jednadžbi ("Swift/Fire"), te alata za prikaz rezultata ("Impress"), ubačen je napredni model čađe koji koristi jednadžbe bazirane na ispitivanjima i dodatno uzima u obzir recirkulaciju ispušnih plinova (EGR) [3]. Kako je taj model nastajanja čađe nedavno implementiran i stoga nedovoljno detaljno isproban na stvarnim modelima, kao zadatak u ovom radu uzeta je upravo analiza parametara koji se u njemu koriste. Zadatak je bio varirati četiri parametra, koji su u programskom paketu ponuđeni korisniku, i ocijeniti njihov utjecaj na proces nastajanja čađe.

Upotrebom cilindra diesel motora predviđenog za visoka opterećenja (kamioni, autobusi) susreću se još dvije specifičnosti. Prva je korištenje mreže kontrolnih volumena koja se u vremenu deformira, a druga je izbjegavanje standardno korištenih *inlet/outlet* dijelova mreže kontrolnih volumena. Naime, pošto se radi o simulaciji kompresijskog i ekspanzijskog takta motora, izbjegava se simuliranje usisa zraka i ispuha produkata izgaranja iz prostora cilindra, dok se za uvođenje goriva u prostor izgaranja koristi model ubrizgavanja goriva u obliku mlaza kapljica.

## 2. EMISIJE U PROCESIMA IZGARANJA

Stalnim se povećanjem izgaranja goriva na bazi ugljikovodika, produkti samog procesa definiraju kao ozbiljan izvor zagađivanja okoliša. Glavni produkti izgaranja su CO<sub>2</sub> i voda, koji su do pred kraj prošlog stoljeća smatrani bezopasnima. Danas postoje spoznaje djelovanja ugljičnog dioksida na atmosfersku ravnotežu i problem efekta staklenika [2][6][5].

No krajem prošle godine strani su instituti došli do spoznaje da velike količine čađe, uglavnom proizvod vozila koja izgaraju fosilna goriva, ozbiljno utječu na regionalne klimatske promjene [7]. Čestice čađe u zraku absorbiraju sunčevu svjetlost, te smanjuju količinu svjetlosti koja dopire do zemljine površine. Absorpcijom se zagrijava atmosferski zrak, što uzrokuje vertikalna strujanja koja dovode do formiranja oblaka i pojačane pojave kiše u teže zagađenim područjima [9][10]. Isto tako, u područjima pokrivenima velikim količinama snijega i leda (koji ostaju u toj formi reflektirajući sunčevu svjetlost), povećanje koncentracije čađe koja se veže na snijeg i led smanjuje njihovu mogućnost refleksije i time im diže temperaturu do granice topljenja. Uz navedeni učinak na globalne klimatske promjene, vrlo je važno naglasiti i neposrednu opasnost od čestica čađe. Naime, dokazano je da čađa i aromatski ugljikovodici koje na sebe veže imaju kancerogeno djelovanje [6][7]. Dušični su oksidi, kao i čađa, opasni i po zdravlje ljudi (toksičnost[8]), i za okoliš, te će uz čađu detaljnije biti opisani u sljedećim poglavljima.

### 2.1. Čađa

Pri konstatnom plamenu, gorivo se u potpunosti razbija na C1- i C2- ugljikovodike. Ugljikovodici višeg reda koji se formiraju nakon ovog procesa, moraju stoga nastajati iz manjih fragmenata ugljikovodika. Važna vrsta viših ugljikovodika su policiklički aromatski ugljikovodici (PAH – engl. *polycyclic aromatic hydrocarbons*). Ove tvorevine se obično formiraju u mješavinama bogatih gorivom i mogu biti kancerogene. Također su važan prethodnik nastajanja čađe [3][7].

Aromatski prsteni nastaju reakcijom CH ili CH<sub>2</sub> s C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> što rezultira nastankom

molekula  $C_3H_3$  koje nakon rekombinacije mogu oformiti prvi prsten (benzen,  $C_6H_6$ ) što dodatno potiče i vrlo sporo odvijanje oksidacije  $C_3H_3$ .

Daljnje dodavanje acetilena ( $C_2H_2$ ) prstenu vodi povećanju molekule. Tipičan fenomen vezan uz takav proces "kondenzacije" je činjenica da, što je veći potreban broj koraka za rast molekula, veća je ovisnost o ekvivalentnom omjeru  $\Phi$  [3][7].

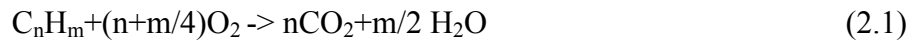
Široko je prihvaćeno mišljenje da daljnji rast PAH-a vodi nastajanju čađe. Nastaju razne vrste produkata, međusobno različite u sadržaju atoma vodika i ugljika. Unatoč mogućim različitim sastavima, čađa se se obično može opisati raspodjelom molarnih masa nastalih vrsta.

Teško je okarakterizirati strukturu čađe. Pri nastajanju nema čistog prijelaza iz plinovitog u tekuću, te iz tekuće u krutu fazu [11][13]. Svježa čađa sastoji se od policikličkih prstenova s dodatnim lancima, kojima je molarni odnos ugljika i vodika oko 1 [7]. S vremenom, pod utjecajem viših temperatura, dolazi do nastajanja komponenata s višim udjelom ugljika, nalik grafitu. Kao i kod PAH, nastajanje čađe čvrsto je povezano s nastajanjem viših ugljikovodika.

Čađa se koristi u mnogim industrijskim procesima (proizvodnja tinte, automobilske gume (60% sastava)...), dok je u procesima izgaranja nepoželjan nusprodukt. Više temperature i tlakovi, npr. u Diesellovim motorima, vode povećanim količinama čađe, koja osim što je sama po sebi kancerogena tvar, dodatno može absorbirati, na primjer, također kancerogene policikličke aromatske ugljikovodike. Doduše, u pećima je njena prisutnost poželjna, zbog toga što sudjeluje u izmjeni topline zračenjem. Strategije izgaranja u pećima zato obuhvaćaju nastajanje čađe rano u fazi formiranju plamena, iskorištavanje pri izmjeni topline zračenjem, te obaveznu oksidaciju prije napuštanja peći. Ako se proces vodi tako da se previše topline sa čađe odvede zračenjem, čađa ima prenisku temperaturu ( $<1500$  K) za brzu oksidaciju, te se stoga pojavljuje u ispuhu [6][7][14].

### 2.1.1. Modeliranje i simulacija nastanka čađe

Pri idealnim uvjetima, izgaranjem ugljikovodičnih goriva nastaju CO<sub>2</sub> i H<sub>2</sub>O [15]. Potrebna količina kisika naziva se stehiometrijski zahtjev i označava s O<sub>2,st</sub> koji se računa prema formuli:

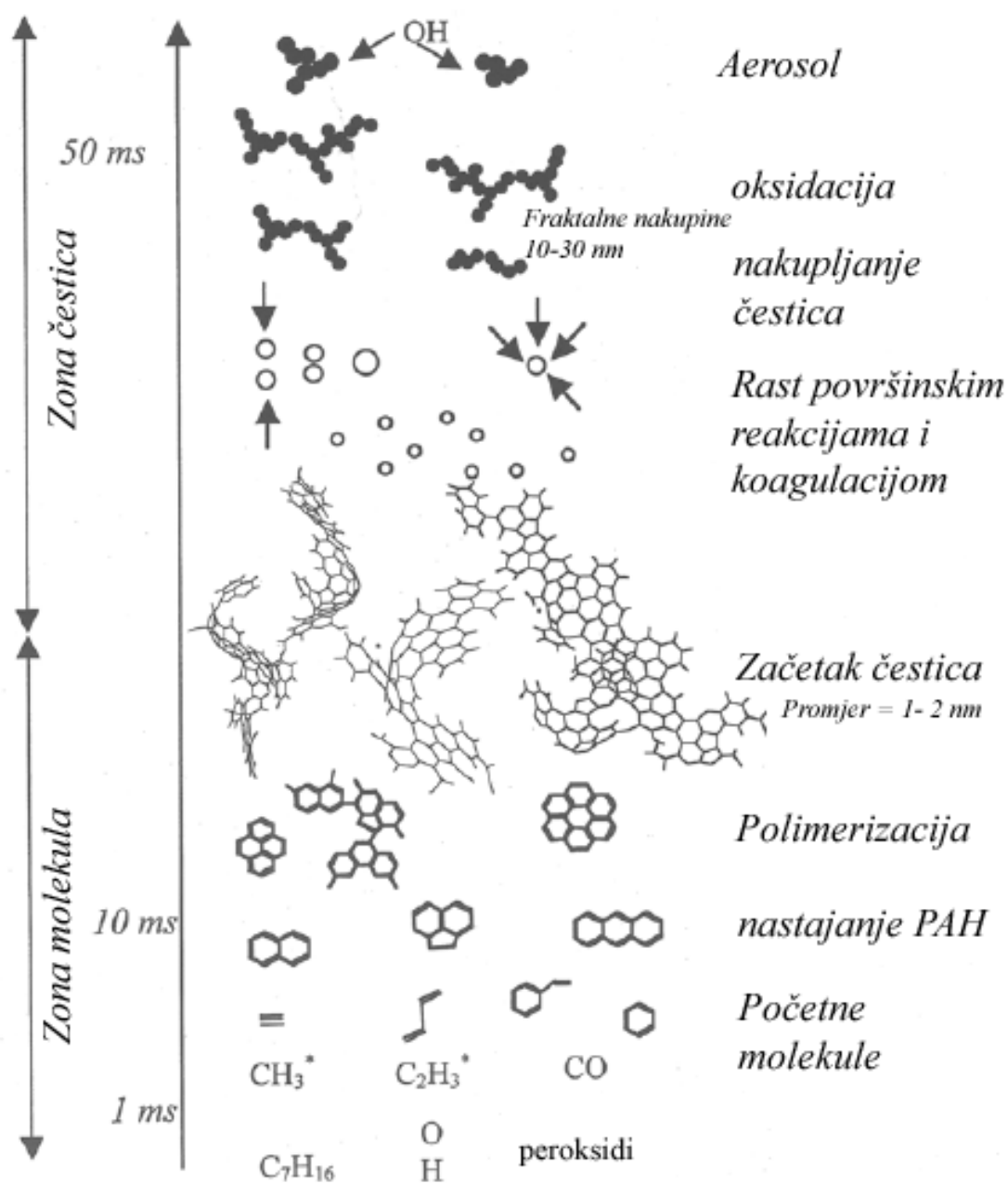


Prava količina kisika, koja je na raspolaganju pri izgaranju izražena je faktorom pretička zaraka  $\lambda=O_2/O_{2,st}$ , ili ekvivalentnim omjerom

$$\Phi=1/\lambda=O_{2,st}/O_2 \quad (2.2)$$

Pri uvjetima u kojima je  $\Phi > 1$ , postoji velika mogućnost za formiranje čađe.

Četiri su glavna procesa pri formiranju čađe [3][14][12]. To su nukleacija, koagulacija, površinski rast, te oksidacija (slika 2.1). Ispitivanjem predmiješanih plamena pokazalo se da se molekule goriva razbijaju u radikale, najčešće aceten. S vremenom, ti radikali rastu dvodimenzionalno daljnjim kemijskim reakcijama, oduzimanjem vodikovih atoma i dodavanjem molekula acetilena [18][21]. Ovi procesi formiraju velike aromatske prstene sastavljene od alifatskih tvari. U daljnjim stadijima molekule poprimaju trodimenzionalnu strukturu te koagulacijom formiraju ugljične čestice. Konverzijom iz plinovitih u čvrste tvari, čestice čađe nastaju kasnije (tokom procesa površinskog rasta). Sličan se proces zbiva i u difuznim plamenima, ali tu je znatno jači utjecaj nehomogenosti mješavine i turbulentnog miješanja.



Slika 2.1 Proces nastajanja čađe u vremenu

Najvažniji parametri tokom formiranja čađe su lokalni omjer zraka i goriva (C/H i C/O omjeri), temperatura, tlak i vrijeme zadržavanja [3].

### 2.1.2. Utjecaj omjera C/H

Nije moguće dati točnu ovisnost procesa nastanka čađe i sastava goriva. Gledano kemijski, komponente koje čine gorivo mogu se klasificirati ovisno o njihovim

molekularnim strukturama, kako je prikazano na tablici 2.1.

Tablica 2.1. Klasifikacija komponenti goriva

Alkani	$C_2H_{2n+2}$
Alkeni	$C_2H_{2n}$
Alkini	$C_nH_{2n-2}$
Nafteni	$C_nH_{2n}$
Aromatski ugljikovodici	Npr. benzen, naftalen

Težnja stvaranju čađe povećava se od parafinskih molekula do ugljikovodika. Uz to, spojevi koji su preteča čađi ili okidacijski procesi dominiraju ovisno o lokalnoj koncentraciji reaktanata [3][22]. Stoga, utjecaj omjera vodika i ugljika na nastajanje čađe je različit u predmiješanim i difuzijskim plamenima:

difuzijski plamen:      naftalen > benzen > acetilen > olefini > parafini  
predmiješani plamen:    naftalen > benzen > parafini > olefini > acetilen

Očit je i jak utjecaj ekvivalentnog omjera i temperature na ponašanje molekula acetilena [7].

### 2.1.3. Utjecaj omjera C/O

Teoretski gledajući, čađa ne nastaje ako za svaki atom ugljika postoji jedan atom kisika. Proces izgaranja kao rezultat daje CO i H. Teoretski omjer ugljika i kisika je jedan. Stehiometrijski proces izgaranja daje CO<sub>2</sub> i H<sub>2</sub>O, te je stehiometrijski omjer C/O:

$$(C/O)_{st} = n / (2n + m/2) \quad (2.3)$$

U difuzijskim plamenima, postoji snažna promjena lokalnog omjera C/O. Za predmiješane plamene, primjećeno je da postoji kemijska ravnoteža između CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> i H<sub>2</sub>O. Kritični se omjer (onaj pri kojem dolazi do formiranja čađe) definira kao

$$(C/O)_{st} < (C/O)_{kr} < 1 \quad (2.4)$$

te je ovisan o temperaturi. Do temperature od 1500 K naglo pada, dok se pri višim temperaturama povećava po skoro linearnom zakonu (u ovisnosti o temperaturi). Kritični se omjer smanjuje povećanjem tlaka od 1 do 10 bar pri relativno niskim temperaturama (1500 K). To znači da formiranje čađe počinje u područjima siromašnim gorivom. Također se i reduciranjem masenog protoka goriva i/ili zraka smanjuje i kritični omjer C/O. Razlog tome su veće temperature uslijed nižih brzina strujanja [3].

Općenito, primjećeno je da su za male omjere C/O koncentracije OH i O radikala povećane, što rezultira većom brzinom oksidacije. Koncentracije se spojeva koji nastaju kao preteča čađi, stoga, kao i količina same čađe, smanjuju dramatično.

#### **2.1.4. Utjecaj temperature**

Temperatura je jedan od glavnih parametara koji utječu na procese nastanka čađe. Povećana se brzina nastanka čađe primjećuje pri povećanju inicijalne temperature mješavine goriva i zraka. To je zbog povećane termalne pirolize koja za rezultat daje više preteča kao što su acetilen i butadien [3][22].

Do 1600 K koncentracija čađe se povećava progresivnom brzinom površinskoga rasta, dok je za temperature veće od 1650 K količina čađe smanjena povećanom oksidacijom [22].

#### **2.1.5. Utjecaj tlaka**

Površinski rast tokom procesa nastanka čađe rezultat je stalnog dodavanja ugljikovodika i acetilena. Povećavanjem tlaka, raste brzina površinskog rasta, dok se koncentracija acetilena smanjuje. Pri visokim tlakovima (10 bar) formiranje čađe može postati neovisno o sastavu goriva [3][22].

### 2.1.6. Utjecaj vremena zadržavanja

Vrijeme zadržavanja utječe na mehanizam koji ograničava proces formiranja čađe. Koncentracija čađe turbulentno se kontrolira u turbulentnim plamenima. Turbulentna brzina miješanja je veća od brzine kemijske reakcije. U ovom slučaju koncentracija se čađe povećava s povećanjem vremena zadržavanja.

Formiranje se čađe u difuznim plamenima kontrolira kemijski. Koncentracija čađe je funkcija koncentracija lokalnih tvari i temperature, te je neovisna o vremenu zadržavanja [3].

Matematički modeli korišteni pri simuliranju nastanka čađe bit će pobliže opisani u poglavlju 3.4.

### 2.1.7. Mjerenje koncentracije čađe

Jedan od problema koji se povezan uz fenomen nastanka čađe je taj što ne postoje sasvim točne metode za njeno mjerenje (u samom procesu izgaranja) [16][19]. U stranoj se literaturi često spominje novija metoda pod nazivom "Laserski inducirano žarenje" (LII – engl. *Laser Induced Incandescence*) [24][25][23], no ona se uglavnom koristi za dvodimenzionalno prikazivanje volumnog udjela čađe u prostoru izgaranja. U ovoj metodi se čestice čađe izlažu djelovanju snažnog laserskog mlaza. Upijajući energiju mlaza velikom se brzinom zagrijavaju i time se njihova užarenost povećava. To se žarenje snima visokofrekventnom kamerom i primjenom određenih filtera na snimke moguće je dobiti distribuciju čestica čađe u prostoru [24].

## 2.2. NO<sub>x</sub>

U drugoj polovici prošlog stoljeća, prepoznao se veliki utjecaj NO i NO<sub>2</sub>, zajedničkim nazivom NO<sub>x</sub>, na nastajanje fotokemijskog smoga u troposferi. NO<sub>x</sub> također sudjeluju u lančanim reakcijama koje uništavaju ozon iz stratosfere (što dovodi do povećanog ultraljubičastog zračenja). Sve su te spoznaje dovele do stavljanja u prvi plan



postupaka koji su imali za zadaću smanjenje proizvodnje NO<sub>x</sub> u procesima izgaranja [7][8].

Do tog se smanjenja dolazi sve većim razumijevanjem osnovnih kemijskih kinetičkih mehanizama koji su uzrok nastajanju NO<sub>x</sub>, te interakcije kemijske kinetike i dinamike fluida. Ovi modeli vode istraživanja prema novim načinima smanjenja štetnih produkata izgaranja.

Prepoznata su tri različita načina nastajanja NO<sub>x</sub>. To su termalni, promptni, i onaj vezan na gorivo. Od sva se tri modela tokom izgaranja u motorima s unutrašnjim izgaranjem može zanemariti NO iz goriva [3]. Promptni NO se također može zanemariti jer taj proces ne igra značajniju ulogu u usporedbi s termalnim (manje od 5% NO je rezultat procesa nastajanja promptnog NO). NO nastaje i u plamenoj fronti i plinovima nakon što plamen nestane. Kod motora s unutrašnjim izgaranjem, tlak u cilindru raste tokom procesa izgaranja, te su plinovi koji su u ranijoj fazi nastali komprimirani na višu temperaturu od one na kojoj su nastali. Stoga je termalni NO u plinovima izgaranja uvijek dominantniji od NO koji nastaje u fronti plamena i predstavlja glavni izvor dušičnih oksida u motorima čije su radne temperature vrlo visoke (>1600 K) [7][20]. Ovaj mehanizam se može prikazati u tzv. Zeldovichevom obliku, što je detaljnije objašnjeno u poglavlju 3.5.

### 3. RAČUNALNA DINAMIKA FLUIDA

Kao što i sam naziv govori, radi se o korištenju računalnih resursa pri rješavanju problema prijenosa mase i topline. Stalno poboljšavanje računala na području memorije i procesorske snage omogućuje dobivanje zadovoljavajućih rješenja mnogih problema vezanih uz strujanje fluida kako kompresibilnih tako i nekompresibilnih, bilo da se radi o turbulentnom bilo laminarnom strujanju, uključujući i kemijske reakcije [34]. Ova činjenica svrstava metodu računalne simulacije uz bok tradicionalnim metodama eksperimentalnog i klasičnog teorijskog pristupa. Uz točnost koja se dobiva korištenjem ove metode dobiva se i brzina postizanja rezultata kao i mogućnost simuliranja fenomena koji se vrlo teško mogu postići, a pogotovo izmjeriti eksperimentalnim putem. Eksperimentalnim analizama umanjenih modela (kada su eksperimenti na realnim objektima neisplativi) ne mogu se dobiti (osobito kada se radi o procesima s izgaranjem i turbulentnim strujanjem) rezultati usporedivi s mjerenjima na stvarnim modelima, zbog kompleksnosti procesa. Zbog navedenih prednosti, računalna dinamika fluida (engl. *Computational fluid dynamics*), zauzima sve veći prostor u području industrije, gdje je bitno dobiti rezultate što brže uz što manje financijsko opterećenje.

Numerička simulacija definira se kao znanstvena disciplina koja podrazumijeva simultano numeričko rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednadžbi kojima su opisani zakoni održanja mase, momenta, energije, turbulentnih karakteristika, itd. Klasične metode rješavanja problema kontinuiranih sustava temelje se na rješavanju diferencijalnih jednadžbi. Ova je rješenja moguće dobiti na jednostavnijim proračunskim modelima, i ovdje se primjenjuju približne numeričke metode koje se temelje na diskretizaciji kontinuiranog sustava, a diferencijalne se jednadžbe zamjenjuju sustavom algebarskih [32].

#### 3.1. Osnovne jednadžbe

Zakoni klasične fizike (zakon održanja mase, količine gibanja, momenta količine gibanja, energije) na kojima se bazira dinamika plinova definiraju se za sustav

materijalnih točaka (zatvoreni termodinamički sustav) odnosno materijalni volumen  $V_M(t)$ , koji se stalno sastoji od jednih te istih čestica fluida te je u općem slučaju vremenski promjenjivog položaja, oblika i veličine [35]. Definicije osnovnih zakona mogu se prikazati u općenitom obliku:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \Phi dV = \int_{V_M(t)} S_V dV \quad (3.1)$$

gdje je  $\Phi = \rho\phi$  volumna gustoća fizikalnog svojstva (izraženog po jediničnom volumenu), dok je  $S_V$  član koji označava postojanje izvora (nastajanje fizikalnog svojstva) ili ponora (nestajanje promatranog fizikalnog svojstva) unutar materijalnog volumena. Izraz (3.1) može se iskazati riječima:

"Brzina promjene sadržaja fizikalnog svojstva  $\Phi$  unutar materijalnog volumena, jednaka je izvoru, odnosno ponoru tog fizikalnog svojstva unutar materijalnog volumena".

Dodatno se uvode pojmovi kontrolnog volumena omeđenog kontrolnom površinom, koja ne mijenja oblik niti položaj u vremenu. S druge strane, slučaj materijalnog volumena kojem se granice slobodno mijenjaju naziva se proizvoljni volumen. Brzina promjene sadržaja fizikalne veličine  $\Phi$  unutar proizvoljnog volumena definira Leibnitzova formula:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \Phi dV = \int_{V(t)} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV + \int_{S(t)} \Phi u_j n_j dS \quad (3.2)$$

Pošto je materijalni volumen posebni slučaj općenitog proizvoljnog volumena kod kojeg je brzina gibanja granice jednaka brzini strujanja fluida ( $u_j = v_j$ ) izraz (3.2) se može zapisati (s time da se zbog važnosti sve brzine promjene označavaju slovom  $D$ ):

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \Phi dV = \int_{V_M(t)} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV + \int_{S_M(t)} \Phi v_j n_j dS, \quad (3.3)$$

dok za kontrolni volumen ( $u_j=0$ ) vrijedi:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \Phi dV = \int_{V(t)} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV \quad (3.4)$$

Smanjivanjem proizvoljnog volumena na infinitezimalni volumen  $\delta V$ , te primjenom Gaussove formule na posljednji član izraza (3.2), ovaj poprima sljedeći oblik:

$$\frac{d}{dt} (\Phi \delta V) = \left( \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial (\Phi u_j)}{\partial x_j} \right) \delta V \quad (3.5)$$

Raspisivanjem gornjeg izraza i uvrštavanjem  $\Phi=1$ , slijedi:

$$\frac{d(\delta V)}{dt} = \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \delta V, \quad (3.6)$$

što se, nakon dijeljenja s  $\delta V$  može iskazati riječima: "Relativna brzina promjene elementarnog dijela proizvoljnog volumena jednaka je divergenciji brzine gibanja njegove granice".

U trenutku kada se proizvoljni, kontrolni i materijalni volumeni poklapaju, svi površinski i volumenski integrali u tim volumenima imaju istu vrijednost, dok je brzina promjene različita te vrijedi:

$$\int_{V(t)} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV = \int_{V_M(t)} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV = \int_{KV(t)} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV \quad (3.7)$$

Uvrštavanjem u gornji izraz izraze (3.2), (3.3) i (3.4) i uzimajući u obzir da je površinski integral u trenutku poklapanja isti za sve tri površine, može se pisati:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \Phi dV = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \Phi dV + \int_{S(t)} \Phi (v_j - u_j) n_j dS \quad (3.8)$$

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \Phi dV = \frac{d}{dt} \int_{KV} \Phi dV + \int_{KP} \Phi v_j n_j dS = \int_{KV} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV + \int_{KP} \Phi v_j n_j dS \quad (3.9)$$

Izraz (3.9) naziva se još i **Reynoldsovim transportnim teoremom** [35][36][38] koji nam daje vezu između vremenske promjene neke fizikalne veličine  $\varphi$  unutar materijalnog volumena s vremenskom promjenom, odnosno njene volumenske gustoće  $\Phi$ , i fizikalne veličine unutar kontrolnog volumena kroz koji protječe fluid.

Diferencijalni oblik zakona (3.1) izgleda ovako:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial(\Phi v_j)}{\partial x_j} - S_V = 0 \quad (3.10)$$

i vrijedi za elementarni materijalni volumen, odnosno česticu volumena, gdje su svi članovi izraženi po jediničnom volumenu fluida.

### 3.1.1. Zakon održanja mase (jednadžba kontinuiteta)

Za materijalni volumen (onaj koji se sastoji stalno iz istih čestica) zakon održanja mase govori o činjenici da mu je masa stalno konstantna što se može izraziti ovako:

"Brzina promjene mase materijalnog volumena jednaka je nuli".

Matematički zapis ovog zakona izvodi se iz jednadžbe (3.1), gdje je promatrano fizikalno svojstvo masa  $m$ , odnosno, izraženo po jedinici volumena  $\Phi = dm/dV = \rho$ , dok je izvorski član  $S_V$  po samoj definiciji zakona jednak nuli. Može se stoga pisati:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \rho dV = 0 \quad (3.11)$$

Jednadžbom kontinuiteta nazivamo integralni oblik zakona održanja mase, a dobiva se primjenom Reynoldsova teorema na izraz (3.11) i glasi:

$$\frac{d}{dt} \int_{KV} \rho dV = \int_{KV} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = -\rho v_j n_j dS \quad (3.12)$$

U gornjem izrazu brzina promjene mase unutar kontrolnog volumena izražena je volumenskim integralom, a brzina izmjene mase kontrolnog volumena s okolinom površinskim integralom. Diferencijalni oblik izraza (3.12), prema jednadžbi (3.10) izgleda ovako:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3.13)$$

### 3.1.2. Zakon količine gibanja

Za materijalni volumen, zakon količine gibanja glasi ovako:

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

Fizikalno svojstvo koje se promatra je količina gibanja (umnožak mase i brzine), čija volumenska gustoća iznosi  $\Phi = d(mv_i)/dV = \rho v_i$ , a masena gustoća  $\varphi = dm v_i / dm = v_i$ . Član koji predstavlja izvor/ponor koji djeluje na maseni volumen predstavljaju masene i površinske sile koje na nj djeluju. Masene su sile posljedica položaja materijalnog volumena u polju masene sile, i mogu se zapisati na sljedeći način:

$$\int_{V_M(t)} \rho f_i dV$$

gdje  $f_i$  predstavlja masenu gustoću polja masene sile, a umnožak  $f_i \rho dV$  masenu silu koja djeluje na česticu fluida. S druge strane, na površinu materijalnog volumena djeluju površinske masene sile koje su posljedica interakcije materijalnog volumena s okolinom i definirane su vektorom naprezanja  $\sigma_i = n_j T_{ij}$  ( $n_j$  – vektor normalne na materijalnu površinu,  $T_{ij}$  – tenzor naprezanja u točki materijalne površine) u jednoj

točki, se ukupna površinska sila dobije integriranjem po čitavoj materijalnoj površini:

$$\int_{S_M(t)} \sigma_i dS = \int_{S_M(t)} n_j T_{ji} dS = \int_{V_M(t)} \frac{\partial T_{ji}}{\partial x_j} dV \quad (3.14)$$

dok izvorski član iznosi:

$$S_V = \rho f_i + \frac{\partial T_{ji}}{\partial x_j} \quad (3.15)$$

Izrečeni zakon količine gibanja može se matematički zapisati kao:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \rho v_i dV = \int_{V_M(t)} \rho f_i dV + \int_{S_M(t)} n_j T_{ji} dS \quad (3.16)$$

Integralni zapis zakona količine gibanja za kontrolni volumen glasi:

$$\int_{KV} \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} dV + \int_{KP} \rho v_i v_j n_j dS = \int_{KV} \rho f_i dV + \int_{KP} n_j T_{ji} dS \quad (3.17)$$

### 3.1.3. Zakon momenta količine gibanja

Momenti sila i moment količine gibanja računaju se obično u odnosu na ishodište koordinatnog sustava, ali se općenito ovaj zakon može izraziti na sljedeći način:

"Brzina promjene momenta količine gibanja materijalnog volumena, u odnosu na odabrani pol jednaka je sumi momenata vanjski masenih i površinskih sila koje djeluju na materijalni volumen, u odnosu na taj isti odabrani pol".

Volumenska gustoća momenta količine gibanja iznosi  $\mathcal{D} = \varepsilon_{ijk} x_j \rho v_k$ , a masena gustoća  $\varphi = \varepsilon_{ijk} x_j v_k$ . Moment masenih sila na materijalni volumen iznosi:

$$\int_{V_M(t)} \varepsilon_{ijk} x_j \rho f_k dV,$$

dok se moment površinskih sila može zapisati kao:

$$\int_{S_M(t)} \varepsilon_{ijk} x_j \sigma_k dS = \int_{S_M(t)} \varepsilon_{ijk} x_j n_p T_{pk} dS = \int_{V_M(t)} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial(x_j T_{pk})}{\partial x_p} dV \quad (3.18)$$

a izvorski član iznosi:

$$S_V = \varepsilon_{ijk} \left( x_j \rho f_k + \frac{\partial(x_j T_{pk})}{\partial x_p} \right) \quad (3.19)$$

Sada se ovaj zakon može zapisati na sljedeći način:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \varepsilon_{ijk} x_j \rho v_k dV = \int_{V_M(t)} \varepsilon_{ijk} x_j \rho f_k dV + \int_{S_M(t)} \varepsilon_{ijk} x_j n_p T_{pk} dS \quad (3.20)$$

Nakon što se gornji izraz zapiše u konzervativnom diferencijalnom obliku, te se isti integrira dobije se integralni oblik zakona momenta količine gibanja:

$$\int_{KV} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial(x_j \rho v_k)}{\partial t} dV = - \int_{KP} \varepsilon_{ijk} \rho x_j v_k v_p n_p dS + \int_{KV} \varepsilon_{ijk} \rho x_j f_k dV + \int_{KP} \varepsilon_{ijk} x_j T_{pk} n_p dS \quad (3.21)$$

### 3.1.4. Zakon održanja energije

Zakon održanja energije za materijalni volumen glasi:

"Brzina promjene zbroja kinetičke i unutarnje energije materijalnog volumena jednaka je snazi vanjskih masenih i površinskih sila koje djeluju na materijalni volumen, te brzini izmjene topline materijalnog volumena s okolinom."

Zbroj specifične kinetičke i unutarnje energije može se označiti s  $e$ . Tada se



volumenska gustoća zbroja ovih energija može zapisati kao:  $\Phi = \rho e = \rho(v^2/2 + u)$ , a masena kao:  $\varphi = e = v^2/2 + u$ .

Dijelovi izrečenog zakona zapisuju se na slijedeći način:

- snaga masenih sila (u materijalnom volumenu):

$$\int_{V_M(t)} \rho f_i v_i dV$$

koja predstavlja skalarni produkt masene sile na česticu fluida  $f_i \rho dV$  i njezine brzine  $v_i$ .

- snaga površinskih sila (djeluju po materijalnoj površini  $S_M(t)$ ):

$$\int_{S_M(t)} \sigma_i v_i dS = \int_{S_M(t)} n_j T_{ji} v_i dS = \int_{V_M(t)} \frac{\partial (T_{ji} v_i)}{\partial x_j} dS \quad (3.22)$$

- toplinski tok kroz površinu:

$$- \int_{S_M(t)} q_i n_i dS = - \int_{V_M(t)} \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV \quad (3.23)$$

gdje  $q_i$  predstavlja komponente vektora površinske gustoće toplinskog toka.

- ukupni izvorski član:

$$S_V = \rho f_i v_i + \frac{\partial (T_{ji} v_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i}. \quad (3.24)$$

Konačno, sada se može izrečeni zakon matematički zapisati na slijedeći način:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_M(t)} \rho e dV = \int_{V_M(t)} \rho f_i v_i dV + \int_{S_M(t)} n_j T_{ji} v_i dS - \int_{S_M(t)} q_i n_i dS \quad (3.25)$$

iz kojeg proizlazi integralni zapis

$$\frac{d}{dt} \int_{KV} \rho e dV = - \int_{KP} \rho e v_j n_j dS + \int_{KV} \rho f_i v_i dV + \int_{KP} n_j T_{ji} v_i dS - \int_{KP} q_i n_i dV \quad (3.26)$$

### 3.1.5. Drugi zakon termodinamike

Drugi zakon termodinamike izražava se činjenicom da entropija promatranog sustava raste ili ostaje ista (produkcija entropije je veća ili jednaka nuli) čime se ukazuje na strogu jednosmjernost odvijanja realnih termodinamičkih procesa. Brzina promjene entropije se može također izraziti jednadžbom kontinuiteta:

$$\rho T \frac{DS}{Dt} = \rho \frac{Du}{Dt} + p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \quad (3.27)$$

što se može iskazati i riječima: brzina promjene entropije čestice fluida razmjerna je brzini promjene unutarnje energije čestice (član  $\rho Du/Dt$ ) i snazi tlačnih sila koje djeluju na tu česticu (član  $p \partial v_j / \partial x_j$ ).

### 3.1.6. Dopunske jednadžbe

#### Newtonov zakon viskoznosti

Newtonov zakon viskoznosti uspostavlja linearnu vezu između simetričnog tenzora naprezanja i tenzora brzine deformacije i uz pretpostavku nepostojanja tangencijalnih naprezanja može se zapisati:

$$T_{ji} = -p \delta_{ji} + \Sigma_{ji}. \quad (3.28)$$

U gornjoj jednadžbi  $\delta_{ji}$  je jedinični tenzor,  $p$  je termodinamički tlak u fluidu a  $\Sigma_{ji}$

tenzor viskoznih naprežanja koji se može zapisati na sljedeći način:

$$\Sigma_{ji} = 2\mu D_{ji} - \frac{2}{3}\mu D_{kk}\delta_{ji}, \quad (3.29)$$

gdje je  $\mu$  dinamički koeficijent molekularne viskoznosti, a  $D_{ji}$  tenzor brzine deformacije.

### Fourierov zakon provođenja

Ovaj zakon spada u tzv. dodatne (konstitutivne) relacije, a daje vezu između gustoće toplinskog toka i gradijenta temperature što se može zapisati:

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (3.30)$$

gdje  $T$  predstavlja temperaturu, a  $\lambda$  koeficijent toplinske vodljivosti te je tako termodinamičko svojstvo fluida.

### Fickov zakon difuzije

Fickov zakon je također jedan od dopunskih, i uspostavlja vezu između difuzije kemijske vrste kroz površinu infinitezimalnog volumena i gradijenta koncentracije te vrste:

$$j_{\alpha,j} = -\Gamma_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_j}, \quad (3.31)$$

gdje je  $\Gamma_{\alpha}$  koeficijent difuzije vrste  $\alpha$  u smjesu.

## 3.2. Modeliranje turbulencije

### 3.2.1. Turbulentni Reynoldsov broj

Da bi se što univerzalnije opisao stupanj turbulentnosti, uvodi se turbulentni Reynoldsov broj:

$$R_l = \frac{\bar{\rho} \sqrt{2q} l_0}{\bar{\mu}} \quad (3.32)$$

koji je definiran integralnom karakterističnom duljinom  $l_0$  i turbulentnom kinetičkom energijom  $q$ , umjesto srednje brzine. Definicija Reynoldsovog broja  $R_l$  predstavlja poboljšanje tradicionalnog Reynoldsovog broja koji je eksplicitno ovisan o geometriji promatrane domene. Kolmogorovljeva dužina  $l_k$ , koja predstavlja veličinu pri kojoj je vrijeme potrebno da se vrtlog zarotira za pola punog okreta jednako vremenu difuzije duž promjera  $l_k$ , računa se iz turbulentnog Reynoldsovog broja uz pomoć izraza:

$$R_l = \left( \frac{l_0}{l_k} \right)^{4/3} \quad (3.33)$$

Stoga je turbulentni Reynoldsov broj mjera odnosa integralne karakteristične duljine i Kolmogorovljeve karakteristične duljine, te kao takav bolje opisuje turbulentna strujanja od standardnog Reynoldsovog broja [7].

Dodatno se uvodi još jedna karakteristična duljina koja se često koristi pri opisivanju disipacije. To je Taylorova karakteristična duljina  $l_T = 10/R_l^{1/2}$ . Turbulentna karakteristična duljina koja se bazira na Taylorovoj duljini definira se kao:

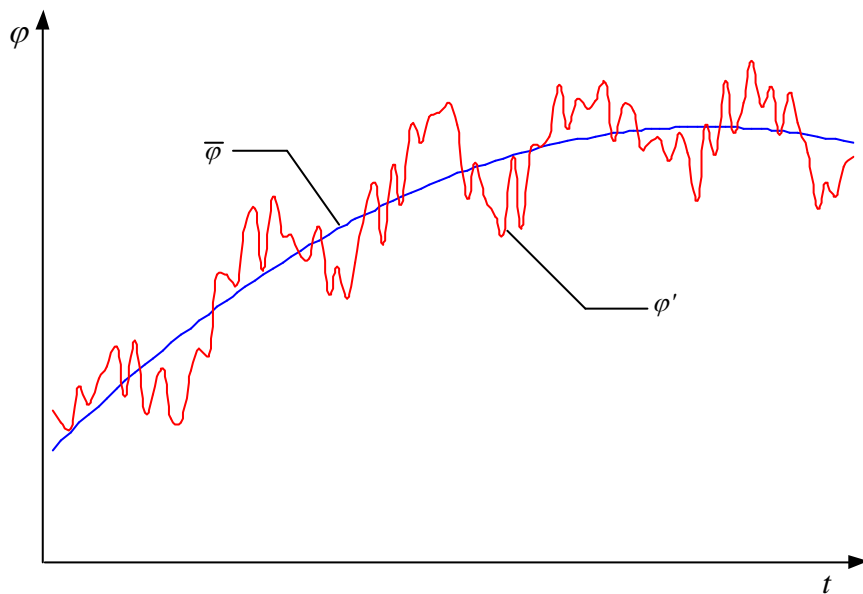
$$R_T = \frac{\bar{\rho} \sqrt{2q} l_T}{\bar{\mu}} \quad (3.34)$$

### 3.2.2. Matematički model turbulencije

Kada bi se i dobilo točno rješenje oblika turbulentnog toka, ono bi zbog velike količine podataka, kako vremenski tako i prostorno ovisnih, bilo od male praktične koristi. Tada se pristupa postupku usrednjavanja vremenski ovisnih vrijednosti da se dobije ono potrebno: npr. srednja potrošnja goriva, srednja snaga, srednja vrijednost formiranja polutanata itd... [7][38]. Potrebno je naći vremenski nezavisne jednadžbe koje će opisivati srednje vrijednosti ovih veličina. Pretpostavlja se da je tok okarakteriziran kaotičnim, sa slučajnim veličinama, te se koristi statistika da ga se što bolje opiše.

Trenutna se vrijednost fizikalne veličine  $\varphi$ , rastavlja se na vremenski srednju vrijednost  $\bar{\varphi}$  i fluktuaciju oko te vremenski srednje vrijednosti  $\varphi'$  [7][38].

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi' \quad (3.35)$$



Slika 3.1 Turbulentne fluktuacije veličine  $\varphi$

Srednja vrijednost može, a i nemora biti ovisna u vremenu. Kad je neovisna, takav slučaj naziva se statistički stacionarnim odnosno kvazistacionarnim, no u praksi se najčešće susrećemo s nestacionacionarnim slučajevima u kojima se vremenske

promjene lokalno usrednjavaju. Koriste se dva najčešća tip usrednjavanja: Reynoldsovo i Favreovo. U prvoj se metodi usrednjava fizikalna veličina  $\varphi$ , dok se kod Favreove metode usrednjava produkt fizikalne veličine i gustoće na sljedeći način:

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi} = \frac{1}{\tau_0} \int_{\tau}^{\tau+\tau_0} \rho(x_i, \tau)\varphi(x_i, \tau)d\tau \quad (3.36)$$

gdje vrijeme  $\tau_0$  mora biti dovoljno veliko u odnosu na vremensko mjerilo turbulencije (duže od trajanja najtrajnijeg turbulentnog vrtloga) i istovremeno dovoljno malo u odnosu na period laganih varijacija prosječnih veličina.

Odnos između ovih dviju metoda usrednjavanja prikazuje se na sljedeći način (veličine usrednjene Reynoldsovom metodom nose oznaku  $-$ , dok su veličine usrednjene Favreovom metodom označene s  $\sim$ ):

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi} = \bar{\rho}\bar{\varphi} + \overline{\rho'\varphi'} \quad (3.37)$$

Primjer korištenja Favreove metode usrednjavanja je jednadžba kontinuiteta za nestacionarno strujanje:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{v}_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (3.38)$$

dok se usrednjavanjem Navier-Stokesove jednadžbe dobije:

$$\frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{v}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{v}_j\tilde{v}_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} \right) - \left( \frac{2}{3}\mu - \mu_v \right) \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \bar{\rho}v_i v_j \right] + \bar{\rho}f_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}. \quad (3.39)$$

U jednadžbi (3.39) član  $\bar{\rho}v_i v_j$  predstavlja tenzor Reynoldsovih (turbulentnih) naprezanja koji se fizikalno može definirati kao transport količine gibanja turbulentnim fluktuacijama [38].

Usrednjavanjem jednadžbe transporta entalpije dobije se:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_j\tilde{h})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial\tilde{h}}{\partial x_j} \delta_{ij} - \bar{\rho}v_i "h" \right] \quad (3.40)$$

U gornjoj jednadžbi član  $\bar{\rho}v_i "h"$  predstavlja toplinski tok prouzročen turbulencijom i naziva se turbulentna difuzija.

Da bi se uspješno riješio sustav usrednjenih jednadžbi potrebno je poznavati Reynoldsova naprezanja i turbulentnu difuziju. Ovaj problem se rješava na dva načina koji se ovdje neće detaljnije objašnjavati, a to su: postavljanje transportne jednadžbe za dvojni korelaciju brzina, pa modelirati korelaciju trećeg reda, ili odmah modelirati dvojni korelaciju brzina.

### 3.2.3. $k$ - $\varepsilon$ model turbulencije

Ovaj model turbulencije je jedan od najčešće korištenih u industrijskim proračunima pošto se pokazao robusnim i točnim u prihvatljivim granicama te je implementiran u većinu CFD programa. Ovdje  $k$  predstavlja turbulentnu kinetičku energiju a  $\varepsilon$  turbulentnu disipaciju kinetičke energije [38]. Izvod jednadžbi za ovaj model zasniva se na fenomenološkim razmatranjima i empiriji te polazi od činjenice da se koeficijent turbulentne viskoznosti može iskazati karakterističnim veličinama u turbulentnom strujanju, te se zasnivaju na dvije diferencijalne jednadžbe koje opisuju raspodjelu tih veličina. U ovom slučaju to su transportne jednadžbe za karakterističnu turbulentnu brzinu i karakterističnu duljinu. Karakteristična brzina pulzacija usvaja se kao kvadratni korijen turbulentne kinetičke energije, a karakteristična geometrijska značajka turbulentnog strujanja određuje se iz disipacije turbulentne kinetičke energije  $\varepsilon$ , koja je proporcionalna s:

$$\tilde{\varepsilon} \propto \frac{\tilde{k}^2}{l_t} \quad (3.41)$$

Tada se koeficijent turbulentne viskoznosti računa kao:

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (3.42)$$

gdje je  $C_\mu$  empirijska konstanta.

Transportne jednadžbe koje se određuju iz Navier-Stokesovih jednadžbi, iz kojih se računaju turbulentna kinetička energija  $k$  i disipacija turbulentne kinetičke energije izgledaju ovako:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{k})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j} \right] + P_k - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \quad (3.43)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} P_k - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (3.44)$$

gdje je  $P_k$  produkcija turbulentne kinetičke energije i računa se kao:

$$P_k = -\bar{\rho} u_i u_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \left[ \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \bar{\rho} \tilde{k} \right) \delta_{ij} \right] \quad (3.45)$$

Konstante koje se pojavljuju u gornjim jednadžbama najčešće se uzimaju sa sljedećim vrijednostima:

$$C_\mu = 0.09, C_{1\varepsilon} = 1.44, C_{2\varepsilon} = 1.92, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3 \quad (3.46)$$



### 3.3. Modeliranje izgaranja

Pošto je područje izgaranja vrlo široko, ovdje će se promatrati samo specifičnosti vezane uz promatrani problem - područje izgaranja tekućeg raspršenog goriva (mlaza) te izgaranja kapljica. Izgaranje tekućina obično se postiže ubrizgavanjem tekućine kroz neki otvor u plinovito okruženje prostora izgaranja. Taj se mlaz tada raspršuje u gust oblak kapljica koje prodiru u područje izgaranja. Prijenos topline na pojedine kapljice povećava tlak pare do konačnog zapaljenja plinovite faze [41][42].

Nepredmiješan plamen okružuje kapljicu ili grupu kapljica. Potrebno je primijetiti da na kraju dolazi do izgaranja pare a ne same tekućine. Skup svih opisanih elemenata zajedno čini ono što se naziva izgaranje u mlazu. Ako postoji interes za modeliranje praktičnih sustava, tada se moraju uključiti i svi manji modeli fizikalnih procesa. Svi su oni aproksimirani do jednake razine tako da ukupan model ne zahtijeva ograničeno vrijeme računanja. Stoga se modeli raspršavanja mlaza, disperzije i isparavanja kapljica, turbulentno miješanje, kemijske reakcije plinovite faze, opisuju reduciranim modelima [7]. U slučaju da se krene u smjeru istraživanja pojedinih osnovnih fizikalno-kemijskih procesa koji se javljaju pri izgaranju u mlazu, posebna se pažnja posvećuje detaljima izgaranja pojedinih kapljica. Ovdje se mogu iskoristiti vrlo detaljni modeli opisivanja kemijskih reakcija, isparavanja, i molekularnog transporta (mase i energije) u plinovitoj fazi, kapljici kao i njihove međusobne interakcije.

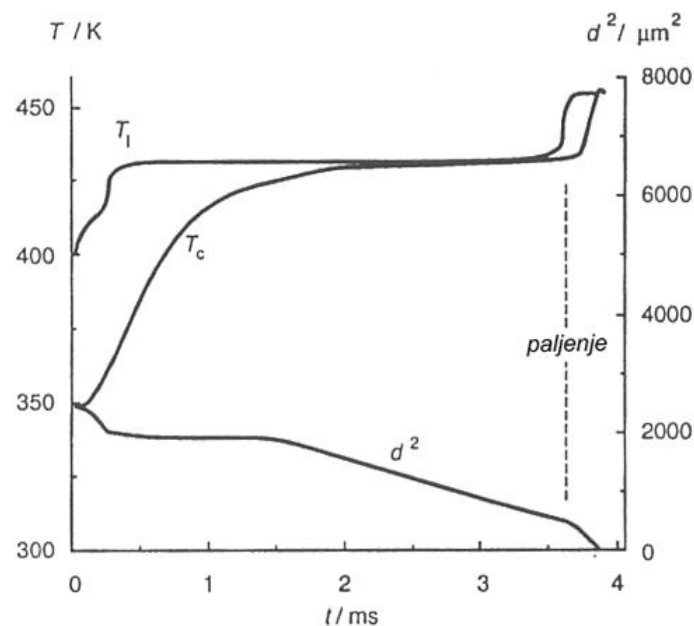
#### Izgaranje pojedinih kapljica

Implicitno se pri proučavanju izgaranja jedne kapljice podrazumijeva da se izgaranje gustog oblaka sastavljenog od mnogo kapljica koji se razvija iz mlaza goriva, može promatrati kao skup izgaranja svake pojedine kapljice. Ova pretpostavka je analogna onoj da se turbulentan plamen može promatrati kao skup više laminarnih[7][42]. Obje su pretpostavke dovele do boljeg poznavanja procesa izgaranja. Stoga, detaljnije razumijevanje procesa pri izgaranju jedne kapljice potreno je za bolje razumijevanje izgaranja skupa kapljica kao što je mlaz (raspršeni mlaz).

Veliko pojednostavljenje modela nastaje kad se pretpostavi sferna simetrija, pošto tada matematički model postaje jednodimenzionalan. Simulacija se provodi rješavajući jednačbe očuvanja u plinovitoj fazi, kapljici i njihove interakcije. Ovaj pojednostavljeni sustav eksperimentalno se realizira tako što se pojedina kapljica ubrizgava u komoru ispunjenu vrućim produktima izgaranja. Da bi se izbjegli efekti gravitacije, koji negativno utječu na sfernu simetriju, plinovi izgaranja se puštaju u smjeru pada kapljice istom brzinom, ili se još bolje posuda ispušta u slobodan pad da se poništi gravitacija barem kratko vrijeme. Proces izgaranja kapljice može se rastaviti u tri faze koje su određene različitim fizikalnim pojavama:

**Faza zagrijavanja:** toplina plinovite faze uzrokuje zagrijavanje površine kapljice. Većina se energije prenosi na kapljicu dok se cijela ne dovede blizu temperature isparavanja (ključanja). U tom trenutku počinje značajan gubitak mase kapljice.

**Faza isparavanja:** gorivo isparava u plinovitu fazu i time se stvara zapaljiva smjesa. Kvadrat se promjera kapljice smanjuje ovisno o proteklom vremenu (tzv  $d^2$  zakon – slika 3.2) [7].



Slika 3.2 Karakteristične veličine tokom zagrijavanja, isparavanja i izgaranja goriva

**Faza izgaranja:** dolazi do zapaljenja smjese koja izgara u sferno-

simetričnom, laminarnom nepredmiješanom plamenu. Sada se promjer kapljice smanjuje kroz vrijeme po drugačijem  $d^2$  zakonu (slika 3.2). Karakteristični parametri tokom trajanja ove tri faze zagrijavanja, isparavanja i izgaranja kapljice metanola okružene vrućim zrakom prikazani su na slici 3.2. Čim se kapljica nađe izložena utjecaju zraka, dolazi do prijenosa topline sa zraka na kapljicu, i temperatura  $T_l$  na površini kapljice brzo raste dok se ne dostigne ravnoteža faza. U kapljici, provođenje topline u unutrašnjost uzrokuje rast temperature središta  $T_c$ .

S vremenom, temperatura kapljice dostiže stacionarno stanje u kojem je provođenje topline na kapljicu u ravnoteži s isparavanjem tekućine s površine kapljice. Ova privremena ravnoteža vodi konstantnoj brzini isparavanja. Na osnovi pojednostavljenog promatranja procesa isparavanja može se pokazati da se kvadrat promjera kapljice smanjuje linearno s vremenom, tj.

$$\frac{d(d^2)}{dt} = const.$$

gdje konstanta ovisi o različitim svojstvima kapljice i okolne plinovite faze. Kao što se vidi iz ravnih linija na slici  $d^2$ -zakon je valjan za većinu životnog vijeka kapljice.

Zapaljenje plinovite faze nastaje nakon indukcijskog vremena (na slici je to  $t=3.5$  ms). Plamen koji okružuje kapljicu ujedno je i dovodi do zagrijanja, i time do ubrzanja isparavanja kao što se vidi u povećanom negativnom nagibu linije  $d^2$ /vrijeme u  $t=3.5$  ms na slici.

Zbog različitih fizikalno kemijskih procesa, na izgaranje kapljica utječu mnogi faktori. Poznavanje trenutka zapaljenja važno je za praktičnu upotrebu. Do samozapaljenja dolazi kada je temperatura dovoljno visoka a pri isparavanju se lokalno zadržala zapaljiva smjesa dovoljno dugo da dođe do eksplozije plinovite faze. Obično se vrijeme zapaljenja povećava s radijusom kapljice. Ovo je povećanje uzrokovano činjenicom da se toplina dovodi iz plinovite faze da bi se kapljica dovela u stanje isparavanja. Odstupanje od ovakvog ponašanja primjećuje se pri vrlo malim promjerima kapljica zbog toga što je kapljica u potpunosti isparila prije nego što

je došlo do zapaljenja.

Većina se tekućih goriva dobiva iz petroleja i sastoji iz stotina komponenata s različitim točkama ključanja. Nakon što se kapljica goriva počine zagrijavati većina zapaljivih tekućina prvo će ispariti, nakon čega prelazi u stanje srednje zapaljivosti (i time veće temperature ključanja), i na kraju tokom isparavanja prelazi u stanje niske zapaljivosti (viskozna ulja). Srećom, do samozapaljenja dolazi rano u ovom razvoju, tako da se isparavanje slabo zapaljivih ulja povećava plamenom koji sada okružuje ostatke kapljice [7][41].

### 3.3.1. Izgaranje mlazeva

Kao što je prije navedeno, prvi korak pri modeliranju izgaranja u mlazu je pretpostavka da je sam mlaz sastavljen od skupa međusobno odvojenih, pojedinih kapljica koje izgaraju svaka za sebe. One se razvijaju iz mlaza kao gusti oblak kapljica različitih promjera. Doduše, nije poznato kako one sa svojim različitim veličinama djeluju kako međusobno, tako i s okolnim turbulentnim plinovitim poljem strujanja. Na ova se pitanja odgovori traže dijeljenjem cjelovitog procesa na formaciju mlaza, gibanje kapljica, isparavanje i konačno izgaranje.

Raspršeni mlaz se formira, kad se mlaz goriva (koji izlazi iz npr. sapnice) razbije pod utjecajem smičnih sila tokom ubrizgavanja. Tekući fragmenti, koji još nemaju sferni oblik, lansirani su u polje strujanja (koje je obično turbulentno i recirkulirajuće) oksidacijskih plinova i produkata izgaranja. Raspored veličina kapljica u mlazu nije jednolik. Značajno je okarakterizirati raspored veličina u ovisnosti o različitim funkcijama u kojima su povezani s momentima koji se razvijaju tokom vremena. Distribucijska funkcija i njen kasniji razvitak velikim su dijelom određeni prirodom samog procesa ubrizgavanja i toka u prostoru izgaranja (npr. pomoću rubnih uvjeta).

Isparavanje kapljica i difuzija goriva u plinovitu fazu vodi stvaranju zapaljive mješavine, koja izgara pri dovoljno visokim temperaturama. Ako se uzimaju u obzir i razrijeđeni mlazovi (pri kojima je veća udaljenost između pojedinih kapljica), procesi

tokom zapaljenja i izgaranja se mogu shvatiti promatranjem pojedinačnih izoliranih kapljica. U gustim mlazovima (engl. *dense spray*) kapljice su previše blizu jedna drugoj da bi se njihova interakcija mogla zanemariti. Stoga se uvode mnoga pojednostavljena u matematičke modele koji pokušavaju simulirati ovaj slučaj. Često se kapljice smatraju točkastim (point) izvorima goriva u sustavu reakcija, dok je njihovo isparavanje prikazano jednim  $d^2$ -zakonom.

U solveru SWIFT/FIRE problematika mlazeva rješava se korištenjem često upotrebljavanog statističkog modela pod nazivom *Discreet Droplet Method* (DDM), kod kojeg se računaju obične diferencijalne jednadžbe za trajektorije, moment, prijenos mase i topline za svaku pojedinu česticu koja je dio grupe intencijalnih čestica koje međusobno nemaju nikakve interakcije. Stoga jedan član takve grupe predstavlja ponašanje svih čestica u grupi [43].

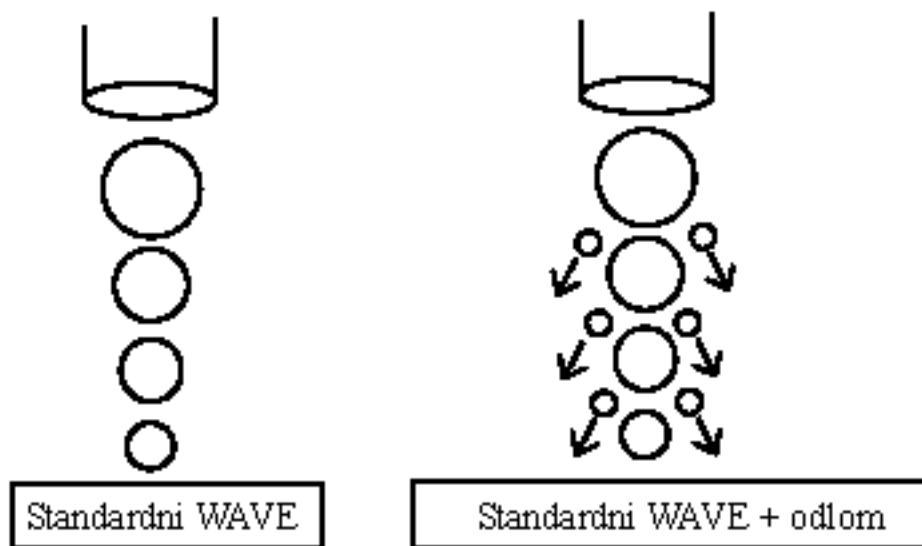
Posebno područje predstavljaju načini simuliranja uvođenja čestica (kapljica) u sustav (prostor izgaranja), kao i njihova interakcija s čvrstim stijenkama geometrije prostora izgaranja (ovo je specifičan problem kod malih ložišta/prostora izgaranja, kao što su motori s unutrašnjim izgaranjem). Ovdje se koriste WAVE (uvođenje čestica) i WALLJET (interakcija sa stijenkama) modeli [43].

### **WAVE model**

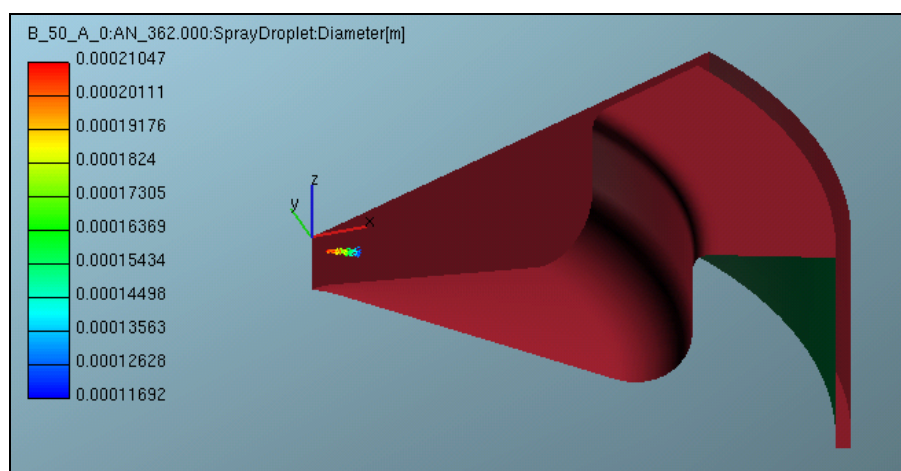
U ovom modelu porast inicijalnog rasipanja na površini fluida povezuje se s njegovom valnom dužinom i ostalim fizikalnim i dinamičkim parametrima ubrizganog goriva i fluida u domeni izgaranja. Dva su režima odvajanja čestica iz mlaza, brzi i spori. Kod prvog je slučaja veličina kapljica koje se odvajaju iz mlaza jednaka valnoj dužini površinskog vala koji najbrže raste ili se smatra najnestabilnijim. U drugom su slučaju kapljice koje se odvajaju veće od onih u mlazu, što ovaj režim čini nepogodnim za sustave s ubrizgavanjem pri visokom tlaku [43].

Problem kod standardnog WAVE modela mlaza je u tome što, zbog pretpostavke velikih kapljica koje izlaze iz mlaznice s pretpostavljenim inicijalnim promjerom

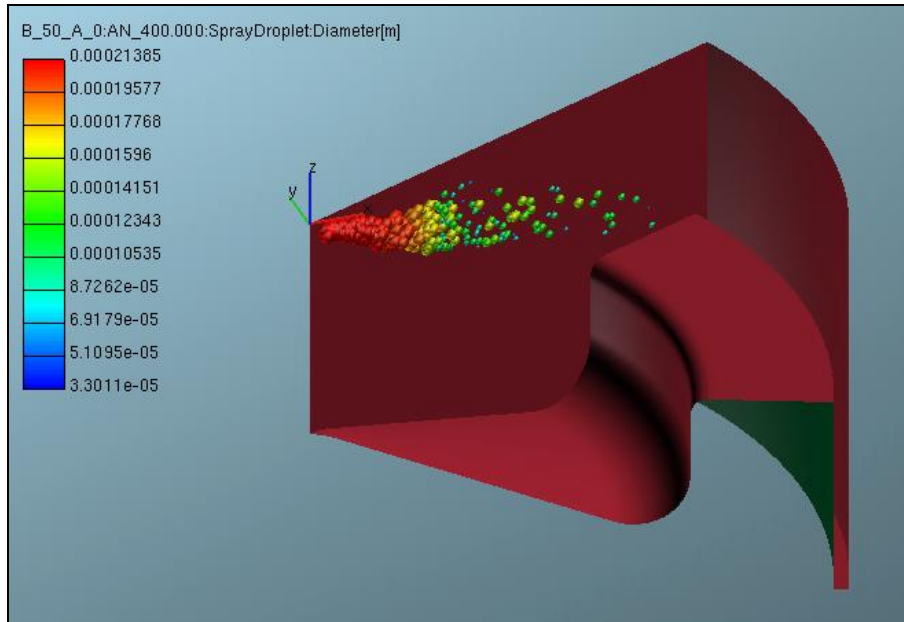
kapljice jednakim promjeru otvora mlaznice, nema isparavanja u njoj blizini. Razlog nedostatku isparavanja je navedena veličina kapljica zbog koje teško isparavaju. Jedan način rješavanja ovog problema je podjela jedinične mase na dva dijela. devet desetina mase uzima se kao velika kapljica dok je 10% sadržano u sitnim kapljicama koje okružuju veliku i omogućuju stvaranje sloja isparenog goriva.



Slika 3.3 Razlika između standardnog WAVE modela i modela koji uključuje otkidanje



Picture 3.4 Spray at 362°C



Picture 3.5 Spray at 400 °C

### Interakcija stijenki i raspršenog mlaza

Modeli koji opisuju interakciju (sudare) između raspršenog mlaza i stijenki geometrije su u korištenom programskom paketu nazvani WALLJET. Ne uzima se u obzir fizika povezana sa slojem fluida uz stijenk, što omogućuje pojednostavljenje cjelokupnog modela. Pretpostavljaju se, također, dva slučaja nakon sudara kapljice sa stijenkom što se definira Webberovim brojem (kritična vrijednost iznosi  $We_c=80$ ) [43].

Prvi slučaj s  $We < We_c$  definira sudar kapljica sa stijenkom na taj način da je nakon sudara tangencijalna komponenta brzine kapljica nepromijenjena dok normala na stijenk poprima suprotni predznak a veličina normalne komponente brzine postaje ovisna o Webberovu broju  $We = \rho_d D_d U_{n,in}^2 / \sigma$ .

U slučaju Weberovog broj većeg od  $We_c$  imamo slučaj koji se opisuje slično modelu mlaza. Brzina kapljica nakon sudara sa stijenkom računa se uzevši u obzir pretpostavku da se veličine ne mijenjaju nego samo smjerovi. Kut odbijanja  $\beta$  (između tangente na stijenk i vektora brzine kapljice) može se mijenjati u granicama  $0 < \beta < 5$  ili  $0 < \beta < 8$  stupnjeva. Kut tangencijalne komponente brzine kapljice može se mijenjati u granicama  $-180 < \psi < 180$  stupnjeva. Kut  $\psi$  određuje se PDF funkcijama [43].

Tri su specifična WALLJET modela:

- WALLJET0 : nema odvajanja nakon odbijanja kapljica od stijenke, kut  $\beta$  ima veličine od  $0 < \beta < 5$  stupnjeva:

- WALLJET1: promjer kapljica nakon sudara u oba gore navedena režima računa se u ovisnosti o Weberovu broju i to na sljedeći način:

$$\begin{aligned} - We < 50 & \quad d_1 = d_0 \\ - 50 \leq We \leq 300 & \quad d_1 = d_0 \cdot f(We_{\perp, in}) \\ - We > 300 & \quad d_1 = 0.2 \cdot d_0 \end{aligned}$$

kut odbijanja  $b$  može imati vrijednosti isto kao i u WALLJET0 modelu

- WALLJET2 : također se postavlja ovisnost promjera kapljice o Weberovu broju na sljedeći način:

$$\begin{aligned} - We \leq 50 & \quad d_1 = d_0 \\ - 50 < We \leq 300 & \quad d_1 = d_0 \cdot \left[ 1 - (We_{\perp, in} - 50) / 500 \right] \\ - We > 300 & \quad d_1 = 0.5 \cdot d_0 \end{aligned}$$

### 3.3.2. Turbulentni nepredmiješani plamen

Ova vrsta plamena posebno je zanimljiva u praktičnoj primjeni. Pojavljuje se u mlaznim motorima, Diesel motorima, parnim kotlovima, pećima itd. Osim u slučajevima predmiješanog izgaranja u primjerima motora za zapaljenjem pomoću svjećice (Otto), većina izgaranja je turbulentnog nepredmiješanog tipa [7].

Nepredmiješani su plameni sigurniji za rukovanje od predmiješanih, zbog miješanja goriva i oksidanta tek u prostoru izgaranja. Široka je upotreba ovog tipa glavni motiv brojnih pristupa modeliranju numeričke simulacije.

Razumijevanje se ovog tipa izgaranja svodi na pretpostavku da kemijski sastojci reagiraju onom brzinom kojom se međusobno miješaju [7][33]. S ovom



pretpostavkom, ostaje samo računati način na koji se gorivo miješa s oksidantom. Predviđanje načina miješanja u izotermalnim nereagirajućim turbulentnim mlazovima vrlo je komplicirano: potrebno je u razmatranje uključiti dodatne parametre kao što su promjenjiva gustoća i volumna ekspanzija zbog predaje topline tokom izgaranja što dodatno komplicira cijeli problem.

Problem miješanja mnogo se pojednostavljuje kad se pretpostave jednake difuzivnosti svih skalara. Tada se sve promatrane tvari miješaju slično, i stoga je moguće posvetiti pažnju jednoj varijabli. Pošto dolazi do gubitka molekula, bolje je pratiti miješanje komponenata pošto su one nepromijenjene kemijskim reakcijama. Da bi se to učinilo potrebno je definirati skalar koji se naziva “udio smjese” (engl. *mixture fraction*) koji se u laminarnim plamenima definira kao:

$$Z = \frac{Y_i - Y_{i2}}{Y_{i1} - Y_{i2}} \quad (3.47)$$

Računanjem procesa miješanja za varijablu  $Z$ , moguće je izračunati miješanje svih ostalih komponenata. Na primjer, mlaz goriva i zraka se može promatrati kao problem dvije struje, svaka s elementarnim masenim udjelima  $Y_{i1}$  i  $Y_{i2}$ . U struji 1 pretpostavljen je rubni uvjet  $Z=1$ , a u struji 2  $Z=0$ . Kako napreduje miješanje  $Z$  mijenja vrijednosti između 0 i 1. U svakom trenutku strujanja, na  $Z$  se može gledati kao na maseni udio fluida koji je potekao iz struje 1 a  $1-Z$  kao maseni udio fluida iz struje 2.

Koristeći jednadžbu očuvanja za udio smjese  $Z$  može se napisati:

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \bar{v} Z) - \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D \cdot \frac{\partial Z}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.48)$$

Potrebno je primijetiti da se u jednadžbi ne pojavljuje izvor/ponor,  $Z$  je očuvan tokom kemijske reakcije i stoga se često naziva “očuvanim skalarom”. Ako se dalje pretpostavi jednaka brzina difuzije energije za sve tvari (Lewisov broj  $Le = \lambda / (D \rho c_p) = 1$ ), tada se polje entalpije, kao i polje temperature, jednoznačno može

opisati  $Z$ -om (kinetička se energija toka također zanemaruje, dok je tlak konstantan):

$$Z = \frac{h - h_2}{h_1 - h_2} \quad (3.49)$$

Stoga, uz pretpostavke: a) ravnotežne (“brze”) kemije, b) jednake difuznosti i  $Le=1$ , te c) bez gubitka topline, sve se skalarne varijable (temperatura, maseni udjeli, gustoća) mogu izraziti preko udjela smjese. Tako se problem turbulentnog nepredmiješanog plamena svodi na opisivanje turbulentnog miješanja veličine  $Z$ .

### 3.3.3. PDF simuliranje turbulentnih nepredmiješanih plamena

Pošto se pri modeliranju nepredmiješanih turbulentnih plamena mnogo toga polaže na statističke pretpostavke [33], pristup preko funkcija gustoće vjerojatnosti (engl. *probability density function*, skr. PDF) doima se više nego prikladnim.

Vjerojatnost da fluid u točki određenoj koordinatama  $\mathbf{x}$  ima gustoću između  $\rho$  i  $\rho+d\rho$ , temperaturu između  $T$  i  $T+dT$  i sastav određen masenim udjelima između  $Y_i$  i  $Y_i+dY_i$  dana je funkcijom gustoće vjerojatnosti:

$$P(\rho, T, Y_1, \dots, Y_s; \mathbf{x}) d\rho dT dY_1 \dots dY_s$$

Ako bi se kao osnovna veličina uzela varijabla  $Z$  koja označava udio smjese, tada bi se PDF funkcija mogla zapisati za nju kao:

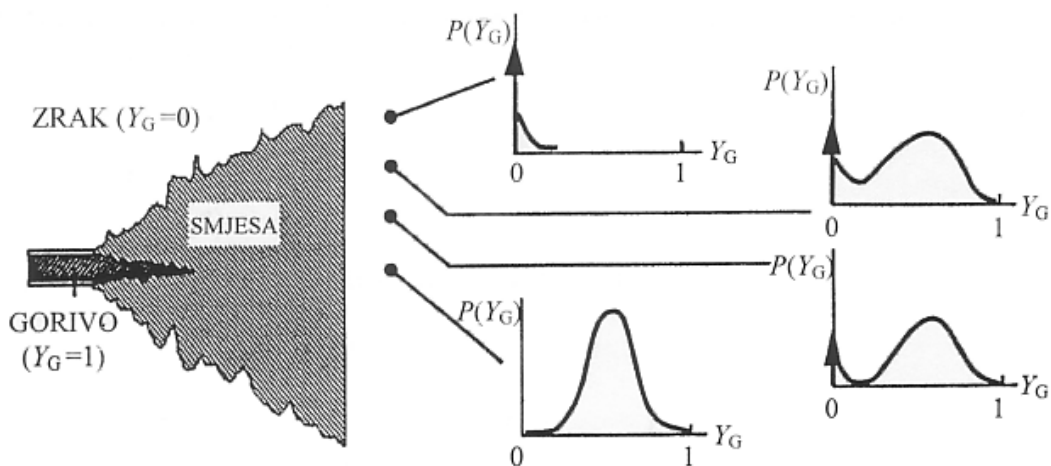
$$P(Z) = \frac{dF(Z)}{dZ} \quad (3.50)$$

gdje je član zapisan kao  $F(Z)$  zapravo vjerojatnost da se neka vrijednost  $z$  pojavi u intervalu  $z < Z$ . Uzimajući ovo u obzir, tada umnožak  $P(Z)dZ$  predstavlja također vjerojatnost da se vrijednost  $z$  pojavi u nekom intervalu, ali ovaj puta u  $Z \leq z < Z + dZ$ . Stoga je vjerojatnost da se  $z$  pojavi u intervalu  $-\infty \leq z \leq +\infty$  izvjesna, i može se zapisati:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(Z)dZ = 1, \quad (3.51)$$

što predstavlja zajedničko svojstvo svim PDF pristupima.

Na primjeru turbulentnog mlaza goriva (slika 3.6) koje se sa zrakom ubrizgava u ložište prikazane su funkcije gustoće vjerojatnosti za maseni udio goriva  $Y_G$ . Na ovoj se slici vidi da je na vanjskim granicama zone miješanja vjerojatnost da je prisutan čisti oksidant (zrak) vrlo visoka, dok je vjerojatnost pojave mješavine zraka i goriva vrlo mala.



Slika 3.6 Funkcije gustoće vjerojatnosti za maseni udio goriva u turbulentnom mlazu

Takve jednodimenzionalne funkcije gustoće vjerojatnosti najčešće se aproksimiraju tzv. odrezanom Gaussovom funkcijom ili beta-funkcijom [7][38].

Kod simuliranja turbulentnog nepredmiješanog plamena u fizikalnom prostoru, vrijednost PDF funkcije mora biti dostupna za svaku točku prostora  $x_k$  ( $k$  predstavlja Kartezijeve koordinate, te kao takva može imati vrijednost 1, 2 ili 3), te ako se susrećemo s nestacionarnim problemom za svaki vremenski korak  $t$ . Eksperimentima se pokazalo da je  $\beta$ -PDF pristup pogodan za kalkulacije relativnih skalara, te se Favreovom metodom usrednjena vrijednost ove funkcije računa kao:

$$P(Z; t, x_k) = \frac{Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} \quad (3.52)$$

gdje je  $B(\alpha, \beta)$  beta funkcija koeficijenata  $\alpha$  i  $\beta$ , koji moraju uvijek biti pozitivni i računaju se kao:

$$\alpha = Z \left[ \frac{Z(1-Z)}{Z'^2} - 1 \right] \quad (3.53)$$

$$\beta = (1-Z) \left[ \frac{Z(1-Z)}{Z'^2} - 1 \right] \quad (3.54)$$

dok se beta funkcije obično pišu u ovisnosti o gama funkciji  $\Gamma$ :

$$B(\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)}. \quad (3.55)$$

Gama funkcija se za neku vrijednost  $x$  računa kao:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt \quad (3.56)$$

Vremenska i prostorna ovisnost PDF funkcije usrednjene Favreovom metodom, izračunatom u jednadžbi (3.1), izražena je elementima  $Z = Z(t, x_k)$  i  $Z'' = Z''(t, x_k)$ .

Rješavanjem *flamelet* jednadžbi dobiju se kao rješenja maseni udjeli vrsta i temperature u ovisnosti o trenutačnoj varijabli  $Z$ , npr.  $Y_i = Y_i(Z)$  i  $T = T(Z)$ .

Favreove usrednjene vrijednosti masenih udjela vrsta u prostoru računaju se na sljedeći način:

$$Y_i(t, x_k) = \int_0^1 Y_i(Z) P(Z; t, x_k) dZ \quad (3.57)$$

dok se usrednjena temperatura računa kao:

$$T(t, x_k) = \int_0^1 T(Z) P(Z; t, x_k) dZ . \quad (3.58)$$

### 3.3.4. *Flamelet* modeli

Praktičnu zamjenu za računalno zahtjevne PDF modele predstavljaju modeli u kojima se dopušta pretpostavljanje osnovnih veličina. Mnogo se proračuna eliminira uključivanjem fizikalnog razumijevanja u formi podmodela (submodel), a jedan od takvih je i *flamelet*.

*Flamelet* model nepredmiješanih plamena identičan je onom predmiješanih. Opisuje turbulentni plamen kao laminarni predmiješani plamen umotan u polje turbulentnog strujanja. Kako se turbulentni Reynoldsov broj približava nuli, ovaj se model točno razvija u laminarni predmiješani. Općenito je prihvaćeno da se koncept flameleta može primijeniti na područja u kojima je veliki Damköhlerov broj s turbulentnim veličinama većima od debljine plamena. Damköhlerov broj je omjer između makroskopske vremenske veličine i vremenske veličine kemijskih reakcija. Kada je manji od 1 vrijeme potrebno za kemijsku promjenu je veće od vremena potrebnog za promjenu pod utjecajem gibanja fluida [7].

U *flamelet* režimu, glavni je problem određivanje brzine plamena koji je posljedica difuzije koja se održava kemijskim reakcijama. Stoga, potrebno je poznavati brzinu kemijske reakcije. Obično se koristi varijabla  $c$ , koja se naziva *varijabla toka reakcije*, i kojom se opisuje tijek izgaranja u fronti plamena i (poput udjela smjese) ima vrijednosti između 0 i 1 [7]. Temperatura se obično uzima kao indikator toka reakcija,

ali se mogu koristiti i druge skalarne veličine, npr. udio nastalog finalnog produkta, kao na primjer CO<sub>2</sub>,

$$w_{CO_2} = c \cdot w_{CO_2,b} \quad (3.59)$$

gdje indeks  $b$  govori da se radi o izgorenom plinu. Skalarni profil ne smije imati svoj maksimum između  $c_{max}$  i  $c_{min}$  jer u tom slučaju definicija varijable  $c$  ne bi bila jedinstvena. Skalari, kao što su OH, O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, itd., u svakom se trenutku u strujanju mogu opisati pomoću varijable  $c$  i, ako je potrebno, lokalne disipacije varijable  $c$ .

Laminarni predmiješani plameni s definiranim stupnjem disipacije mogu se proučavati u primjerima suprotnih strujanja kako eksperimentalno, tako i numerički koristeći jednodimenzionalnu jednadžbu očuvanja. Kako je analogan turbulentnom nepredmiješanom plamenu, ideja je da se turbulentni mogu opisati kao skup laminarnih predmiješanih plamena.

Uz pretpostavku uključenog *flamelet* podmodela, mora se u modelu opisati transport i razvoj varijable  $c$ . S varijablom  $c$  kao ulazom, flamelet podmodel vraća kao rezultat temperaturu, gustoću, i koncentraciju vrsta koje koristi podmodel zadužen za dinamiku fluida (podmodel turbulencije).

Najprimitivniji model kojim se opisuje transport i produkcija varijable  $c$  je *Eddy-break-up* (EBU) model koji sa sobom nosi način na koji se *flamelet* model spaja s modelom turbulencije. Ovim se modelom određuje stupanj nastajanja produkata  $\omega_c$  na način da se definira turbulentna frekvencija i intenzitet fluktuacije produkta  $c'_{rms}$ .  
Integracija

$$\bar{\omega}_c = -\frac{\bar{\rho}C_c}{M} c'_{rms} \frac{\tilde{\epsilon}}{\bar{k}} \quad (3.60)$$

donosi srednju varijabu  $\bar{c}$  iz koje se računa gustoća  $\rho$  iz flamelet modela, npr.  $c=(\rho$

$\rho_u)/(\rho_b-\rho_u)$  gdje je  $b$ =izgoreno i  $u$ =neizgoreno. Ova je gustoća potrebna u modelu turbulencije.

Prvi koji je izveo *flamelet* jednadžbe bio je Peters [39]. Ravnotežna jednadžba masenih udjela vrsta izgleda ovako:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_k Y_i)}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) + \dot{\omega}_i, \quad (3.61)$$

gdje je  $Y_i$  maseni udio pojedine vrste ( $i$  predstavlja raspon od 1 -  $N_{\text{spec}}$ , a  $N_{\text{spec}}$  ukupan broj vrsta). Koeficijent  $D_i$  predstavlja masenu difuzivnost vrste  $i$ , dok je  $\dot{\omega}_i$  kemijski izvor pojedine vrste.

### ***Eddy-breakup model***

*Eddy-breakup* modeli su empiričke naravi primjenjivi u slučajevima srednjih brzina reakcije i brze kemije. U ovom slučaju brzina reakcije vođena je brzinom turbulentne disipacije (“ono što je izmiješano, to je i izgoreno”). Zona reakcije se opisuje kao mješavina zona s neizgorenim i izgorenim komponentama [3].

Koristeći analogiju smanjenja turbulente energije, formulacija koju je uveo Spalding opisuje brzinu koja određuje otkidanje pojedinih domena neizgorenog plina u malim fragmentima [40]. Oni su u dovoljnom kontaktu s već izgorenim plinovima, koji stoga imaju dovoljno visoku temperaturu, što dovodi do međusobne reakcije. Za brzinu reakcije ( $F$ =gorivo,  $C_F$  je empirička konstanta reda veličine 1) dobija se (Spalding) [6]:

$$\bar{\omega}_F = -\frac{\bar{\rho} C_F}{\bar{M}} \sqrt{w_F''} \tilde{\epsilon} \tilde{k} \quad (3.62)$$

### 3.4. Čađa

#### 3.4.1. Standardni model nastanka čađe

U ovom se modelu rješava i dodatna diferencijalna transportna jednačba za maseni udio čađe, koja je izražena u tenzorskoj notaciji te ima oblik:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}u_j\phi_s) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_s}\frac{\partial\tilde{\phi}_s}{\partial x_j}\right) + S_\phi \quad (3.63)$$

gdje je brzina produkcije čađe određena izvorskim članom gornje jednačbe koji se sastoji iz tri slijedeća člana:

$$S_\phi = S_n + S_g + S_{O_2}. \quad (3.64)$$

U gornjoj jednačbi, članovi predstavljaju pojednostavljene elemente pojedinih etapa nastajanja čađe u vremenu. Član  $S_n$  je izvor koji pretstavlja vremenski period nukleacije,  $S_g$  se odnosi na površinski rast čađe, dok je zadnji  $S_{O_2}$  oksidacijski član i u jednačbu ulazi kao jedini s negativnim predznakom [3].

Pretpostavljeno je da su procesi koji se odnose na formiranje čestica čađe i njihov površinski rast ovisni o lokalnoj koncentraciji goriva i jezgara čađe kao i o temperaturi plamena.

#### 3.4.2. Napredni model nastanka čađe

Ovaj model računa volumne udjele izvora čađe, integrirane po funkciji vjerojatnosti gustoće udjela smjese, kao funkciju skalarne brzine disipacije, tlaka i temeperature na strani oksidanta. Četiri su pretpostavljena elementa koji čine izvor čađe i to su površinski rast, oksidacija, nastajanje čestica i fragmentacija. Ovi se izvori računaju za danu *beta* raspodjelu udjela neizgorenog i izgorenog goriva, brzinu disipacije skalara



(isto kao i gore), tlaka i temperature.

Različiti se izvori mogu prilagoditi problemu. Stoga se uvode četiri parametra za njihovo skaliranje. Njihove su početne vrijednosti postavljene na 1. Za svaki od pojedinih elemenata koji pridonose nastanku čađe, postoji jedan parametar. Taj se parametar množi s integralnom površinom različitih elemenata koja određuje kvalitativno koliko će jak biti utjecaj pojedinih izvora na izvor volumnog udjela čađe.

Brzina disipacije skalara određena je promjenom udjela smjese:

$$\tilde{\chi} = 2\tilde{Z}^{n_2} \frac{\mathcal{E}}{k} \quad (3.65)$$

gdje je varijanca udjela smjese:

$$\tilde{Z}^{n_2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (Z - \tilde{Z})^2 f(Z) dZ \quad (3.66)$$

Transportna jednadžba samog udjela smjese glasi:

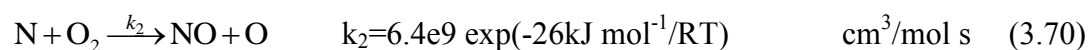
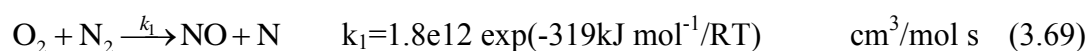
$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_e}{Sc_{t,Z}} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right) \quad (3.67)$$

gdje je udio smjese definiran kao omjer sume mase izgorenog i neizgorenog goriva i ukupne mase u sustavu:

$$Z = \frac{m_{neizg} + m_{izg}}{m_{uk}} \quad (3.68)$$

### 3.5. NO<sub>x</sub> - Termalni NO (Zeldovich model)

Termalni NO model (ili Zeldovich, nazvan po Y.B. Zeldovichu koji je postavio mehanizam) čine osnovne reakcije [7]:



Naziv termalni upotrebljava se zbog visoke aktivacijske energije potrebne za reakciju (3.69) zbog snažne trostruke veze u molekuli  $\text{N}_2$ , što ju čini dovoljno brzom tek na vrlo visokim temperaturama. Zbog svoje male brzine odvijanja, reakcija (3.69) je ona koja ograničava brzinu nastajanja termalnog NO.

Brzina nastajanja NO-a dobiva se preko jednadžbi reakcija (3.69-3.71), te slijedi:

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = k_1[\text{O}][\text{N}_2] + k_2[\text{N}][\text{O}_2] + k_3[\text{N}][\text{OH}] \quad (3.72)$$

Pošto je

$$\frac{d[\text{N}]}{dt} = k_1[\text{O}][\text{N}_2] - k_2[\text{N}][\text{O}_2] - k_3[\text{N}][\text{OH}] \quad (3.73)$$

a za dušikove se atome može pretpostaviti kvazi-stacionarno stanje, dobije se pojednostavljeno:

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = 2k_1[\text{O}][\text{N}_2] \quad (3.74)$$

Iz priloženog se vidi da se NO može smanjiti smanjenjem  $[\text{N}_2]$ ,  $[\text{O}_2]$ , ili  $k_1$  (npr. snižavanjem temperature).

Koncentracija  $\text{N}_2$  molekula može se točno izmjeriti sondom ili (također točno) procijeniti uz pretpostavku ravnoteže u ispušnim plinovima. Što se tiče koncentracije atoma kisika, ona se ne može računati preko jednadžbi ravnoteže pošto ista daje 10 puta manje vrijednosti od stvarnih kao rezultat kinetike u fronti plamena. Bolja se aproksimacija koncentracije atoma kisika je pretpostavka parcijalne ravnoteže s

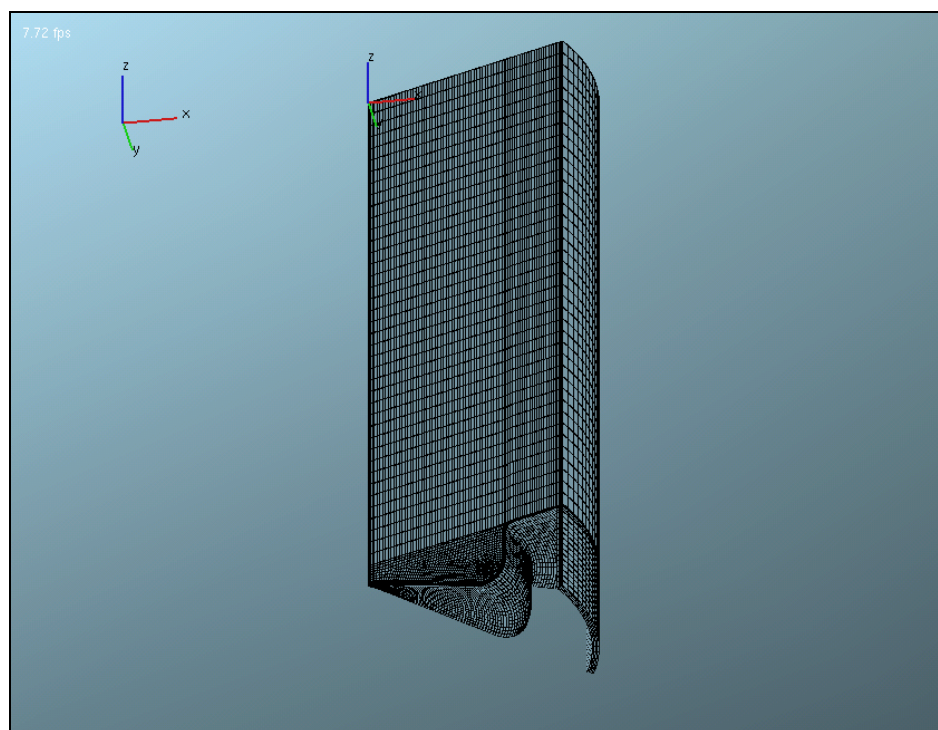
konačnom formulom:

$$[O] = \frac{k_{H+O_2} \cdot k_{OH+H_2} \cdot [O_2][H_2]}{k_{OH+O} \cdot k_{H+H_2O} \cdot [H_2O]} \quad (3.75)$$

Koncentracija se kisikovih atoma, stoga, može izračunati iz koncentracija  $[H_2O]$ ,  $[O_2]$  i  $[H_2]$  koji se mogu lako izmjeriti ili procijeniti, pošto su stabilne tvari. Ova pretpostavka parcijalne ravnoteže je valjana samo za temperature iznad 1700K. Pri našem razmatranju ovo ograničenje ne igra veliku ulogu pošto se ionako kreće od pretpostavke visokih temperatura gdje koeficijent  $k_1$  postaje značajniji.

#### 4. MODELIRANJE MREŽE KONTROLNIH VOLUMENA

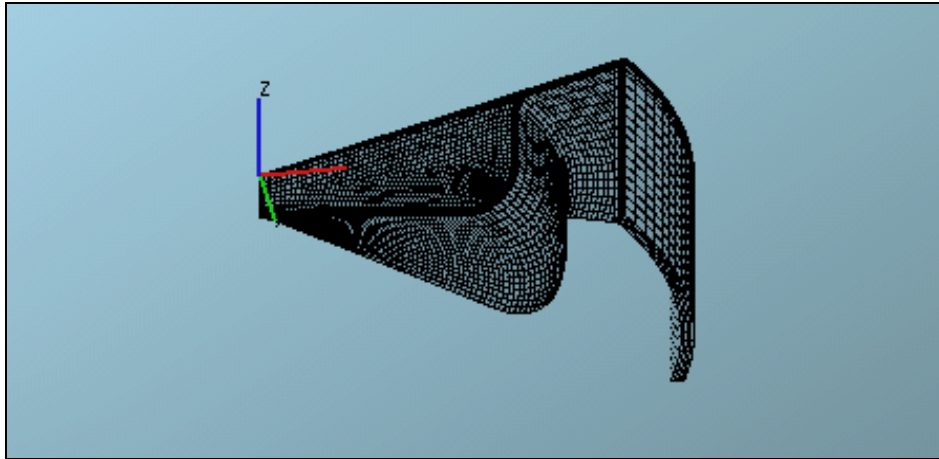
Model je rađen u modulu programskog paketa CFDWM pod nazivom “Imagine”. Mreža se sastoji iz tri glavna dijela. Prvi predstavlja udubinu na vrhu klipa (tzv. čelo klipa) koja u praksi služi boljem miješanju goriva sa zrakom [1]. Drugi dio je prostor samog cilindra na vrhu kojeg je glava cilindra koja je pojednostavljena ravnom plohom. Treći je dio praktične prirode, i nazvan je kompenzacijski volumen. Ovaj se dio mreže dodaje zbog navedenog pojednostavljenja glave cilindra koja je u stvarnosti zbog postojanja ventila, i opet zbog poboljšanog miješanja goriva i zraka, mnogo kompleksnije geometrije. Zbog toga se kod jednostavnije geometrije koja se koristi pri simulaciji gubi dio volumena što se odražava na promjeni kompresijskog omjera. Da bi se kompresijski omjer održao na razini stvarnog, dodaje se kompenzacijski volumen kojim se zapravo nadomješta volumen koji se izgubio simplifikacijom mreže. On se dodaje sa strane da ne bi utjecao na rezultate simulacije.



Slika 4.1 Mreža kontrolnih volumena

Na slici 4.1 prikazana je mreža na početku simulacije koja kreće od 247 stupnjeva zakreta koljenastog vratila (u daljnjem tekstu taj zakret će se označavati kao 247 °KV).

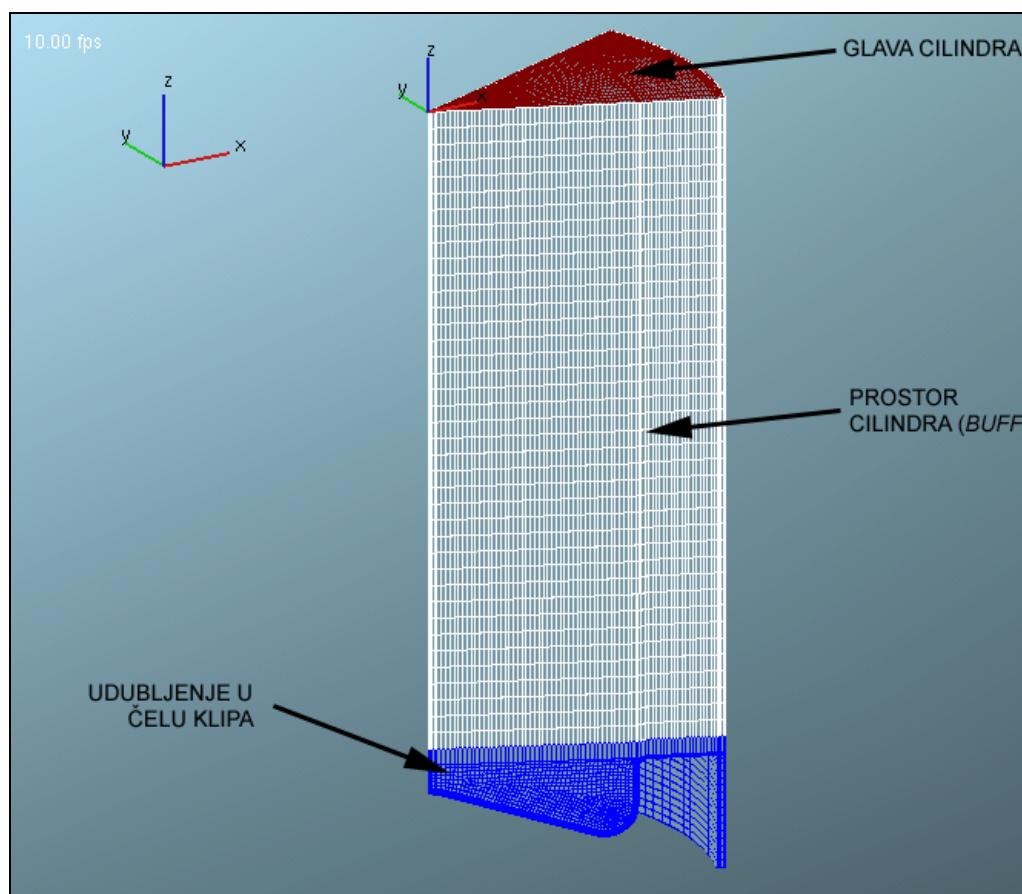
Gornja mrtva točka je na 360 °KV (slika 4.2).



Slika 4.2 Mreža kontrolnih volumena pri 360°KV

#### 4.1. Selekcije

Na slikama 4.3 i 4.4 prikazana je mreža sa selekcijama koje se koriste pri postavljanju početnih i rubnih uvjeta. Kako je već objašnjeno, radi se o zatvorenom sustavu pošto se ne simulira usis zraka i ispuh produkata izgaranja. Stoga na modelu ne postoje definirane *inlet/outlet* površine, već se ubrizgavanje goriva simulira također matematičkim modelima opisanima u prethodnim poglavljima. U samom se programu definira položaj mlaznice u koordinatnom sustavu, te trajanje ubrizgavanja, kao i njegova dinamika te oblik (u obliku stošca). Pošto se u praksi temperature klipa i cilindra održavaju približno konstantnima tako se toplinski tok zanemaruje u kompenzacijskom volumenu (koji ionako ne postoji u stvarnoj konstrukciji motora) dok se postavljaju temperature glave cilindra koja iznosi 500 K, stijenke cilindra od 410 K, te čela klipa sa temperaturom od 510 K.

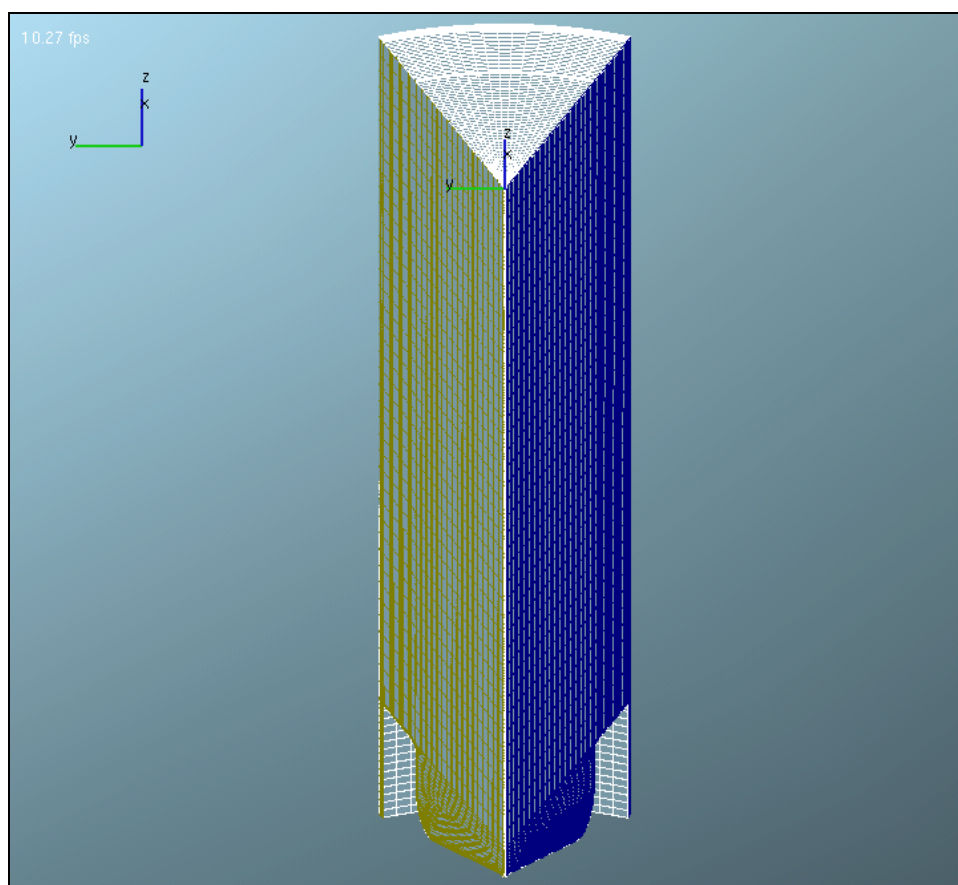


Slika 4.3 Mreža kontrolnih volumena s označenim selekcijama

Dio mreže koji predstavlja prostor cilindra, na slici 4.3 obojen bijelom bojom, predstavlja posebno važan dio mreže pri modeliranju domena s promjenjivom geometrijom. To je, naime, dio mreže koji se pri gibanju deformira. Dolazi do deformacije kontrolnih volumena u tom dijelu mreže, i da pri tome ne bi došlo do numeričkih problema zbog oblika kontrolnih volumena (debljina im se progresivno smanjuje do minimalne vrijednosti u 360 °KV), uvodi se tzv. rezoniranje (engl. *rezone*). Postupak se sastoji u povećanju visine kontrolnih volumena duž prostora cilindra smanjivanjem broja podjela duž osi  $z$  tako da kontrolni volumeni ostaju u zadovoljavajućem rasponu dimenzija. Isto se tako pri ekspanziji radi rezoniranje da se smanji visina kontrolnih volumena zbog dobivanja točnijih rezultata (u slučaju zadržavanja podjele kontrolnih volumena u trenutku prije ekspanzije, na kraju se ekspanzije dobije pregruba mreža za ikakve relevantnije rezultate). U ovom slučaju rezoniranje se vrši pri 300 °KV, 340 °KV, 370 °KV, 380°KV i 420°KV.



Pošto se simulacija vrši na modelu koji predstavlja 1/8 stvarne geometrije cilindra, uvode se i ciklički (ili periodični) rubni uvjeti kojima se povezuju bočne stijenke korištenog modela (slika 4.4).



Slika 4.4. Mreža kontrolnih volumena – selekcije za definiciju periodičkog rubnog uvjeta

Kod definiranja mlaza potrebno je prvo odabrati vrstu i temperaturu goriva. U ovom slučaju odabran je spoj  $C_7H_{16}$  koji dovoljno dobro zamijenjuje Diesel. Temperatura s kojom se uvodi u prostor izgaranja je 350 K. Potrebno je definirati i geometriju mlaznice. Mlaznica je smještena u središtu cilindra, udaljena od glave cilindra u negativnom smjeru osi  $z$  2.3 mm. Početna veličina kapljica koje se uvode u prostor izgaranja je 0.21 mm. Korišteni model izgaranja je opisani *Eddy-breakup* model, dok su korišteni modeli emisija *Zeldovich* ( $NO_x$ ) te *Advanced Soot Model* (čaća) čiji su parametri detaljnije objašnjeni u poglavlju 3.5.

## 4.2. Početni uvjeti

### Označavanje slučajeva opterećenja - Ispitivanje emisija - European Stationary Cycle (ESC)

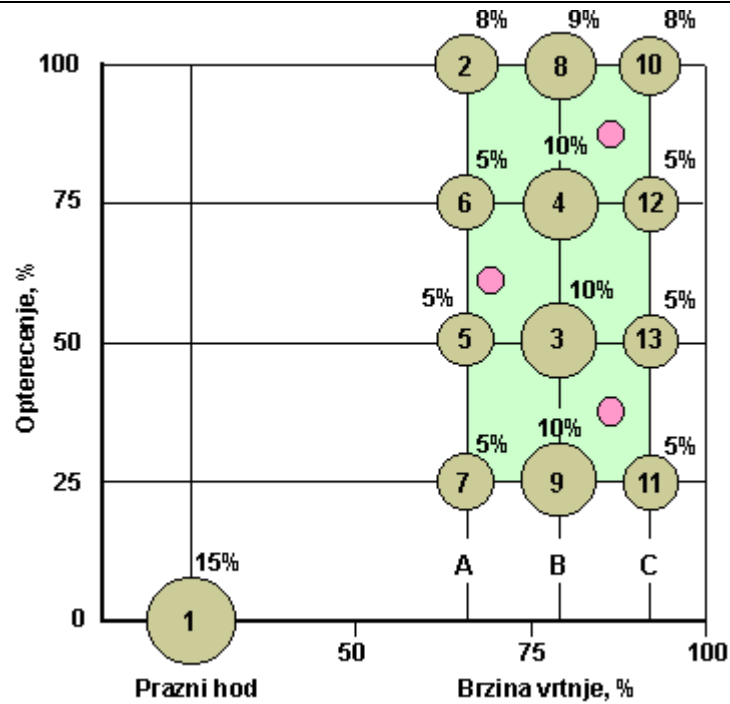
ESC ispitivanje emisija (također poznat pod nazivom OICA/ACEA), uveden je u današnjem obliku 2000. godine, i koristi se za testiranje emisija i certificiranje diesel motora za visoka opterećenja [44].

Motor se ispituje na dinamometru kroz niz različitih opterećenja (tablica 4.1). Motor se mora opteretiti tokom propisanog vremenskog intervala, s time da se do tražene brzine vrtnje i opterećenja mora doći u prvih 20 sekundi. Propisana brzina vrtnje može varirati za  $\pm 50$  o/min, dok je odstupanje okretnog momenta dopušteno unutar 2% maksimalnog postignutog pri propisanoj brzini vrtnje. Emisije se mjere tijekom svake serije i usrednjavaju koristeći usporedbene faktore.

Tablica 4.1. Ispitivanje motora – ESC standard

Režim	Brzina	% Opterećenja	Usporedni faktor, %	Trajanje
1	Prazni hod	0	15	4 minute
2	A	100	8	2 minute
3	B	50	10	2 minute
4	B	75	10	2 minute
5	A	50	5	2 minute
6	A	75	5	2 minute
7	A	25	5	2 minute
8	B	100	9	2 minute
9	B	25	10	2 minute
10	C	100	8	2 minute
11	C	25	5	2 minute
12	C	75	5	2 minute
13	C	50	5	2 minute





Slika 4.5 Područja opterećenja i brzina vrtnje

Brzine vrtnje određuju se na sljedeći način:

- visoka brzina  $n_{hi}$  dobije se računanjem 70% maksimalne neto snage motora i očitavanjem brzine vrtnje pri toj snazi,
- niska brzina  $n_{lo}$  dobije se računanjem 50% maksimalne neto snage motora i očitavanjem brzine vrtnje pri toj snazi,
- brzine A, B i C računaju se iz sljedećih jednadžbi:

$$A = n_{lo} + 0.25(n_{hi} - n_{lo})$$

$$B = n_{lo} + 0.50(n_{hi} - n_{lo})$$

$$C = n_{lo} + 0.75(n_{hi} - n_{lo})$$

Iz primjera oznake B\_50\_A\_0 može se stoga iščitati da se radi o slučaju srednje brzine vrtnje, i 50%-tnog opterećenja. Treći znak u oznaci (slovo “A”) je interna oznaka način ubrizgavanja i u ovdje je isti za sve slučajeve. Zadnji broj označava trenutak početka ubrizgavanja, odnosno pomak u stupnjevima zakreta koljenastog vratila od gornje mrtve točke (360 °KV) u kojem dolazi do ubrizgavanja.

Tablica 4.2. Početni uvjeti u svim slučajevima opterećenja

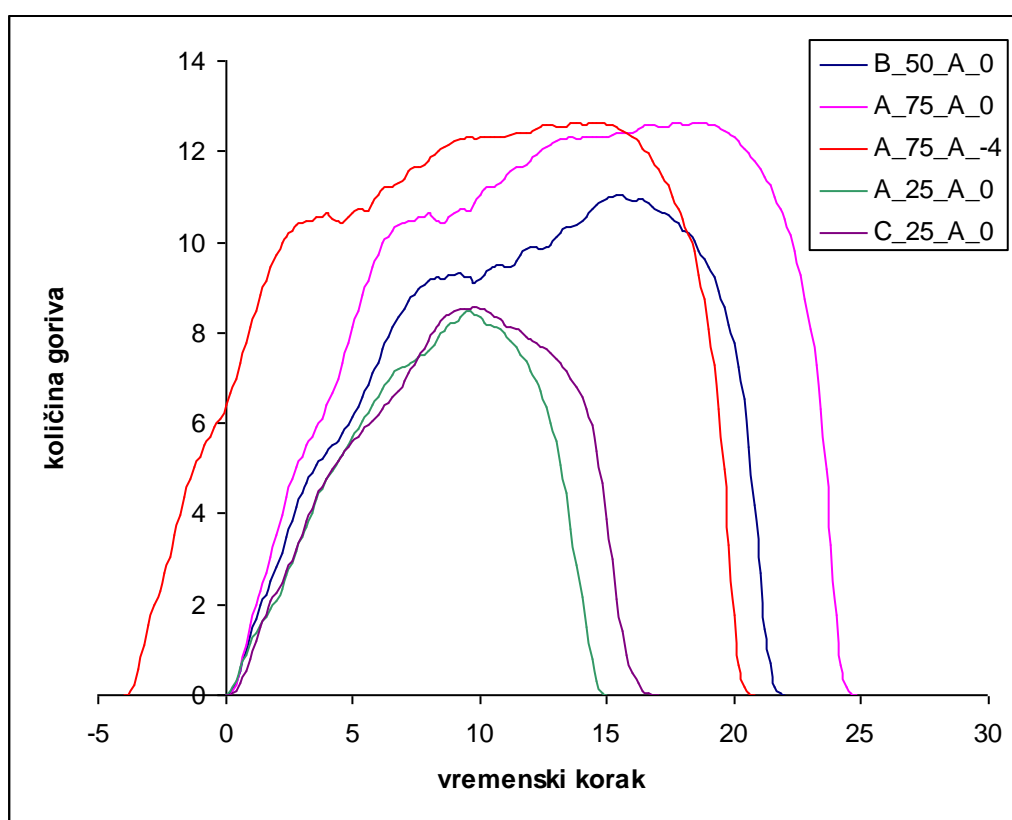
slučaj opterećenja	<b>B_50_A_0</b>	<b>A_75_A_0</b>
opći podaci:		
n	1420 o/min	1130 o/min
vtložni broj / vrtlog	0.71 / 1008 o/min	0.71 / 802 o/min
$p_{mjer}$ (@ 247 ° KV)	3.45E+05 N/m <sup>2</sup>	3.97E+05 N/m <sup>2</sup>
$p_0$ (@ 247 ° KV)	3.3379E+05 N/m <sup>2</sup>	3.8394E+05 N/m <sup>2</sup>
$T_0$ (@ 247 ° KV)	433.28 K	384.27 K
$k_0$ (@ 247 ° KV)	18.5 m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	11.7 m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$l_{t0}$ (@ 247 ° KV)	7.5E-04 m	7.5E-04 m
ubrzigavanje goriva:		
geometrija mlaznice	N=8;0.21 mm;152°	N=8;0.21 mm;152°
stvarni volumen	166.5003 mm <sup>3</sup>	231.8996 mm <sup>3</sup>
vol. za simulaciju	2.08125E-08 m <sup>3</sup>	2.8987E-08 m <sup>3</sup>
početak / kraj	360 / 382 ° KV	360 / 384.8 ° KV
mjereni podaci:		
NO <sub>x</sub>	4.08E-3 g/ciklus	6.80E-3 g/ciklus
čada	2.6E-05 g/ciklus	6.16E-05 g/ciklus

slučaj opterećenja	<b>A_75_A_m4</b>	<b>A_25_A_0</b>
opći podaci:		
n	1130 o/min	1130 o/min
vtložni broj / vrtlog	0.71 / 802 o/min	0.71 / 802 o/min
$p_{mjer}$ (@ 247 ° KV)	3.979E+05 N/m <sup>2</sup>	2.166E+05 N/m <sup>2</sup>
$p_0$ (@ 247 ° KV)	3.9716E+05 N/m <sup>2</sup>	2.1252E+05 N/m <sup>2</sup>
$T_0$ (@ 247 ° KV)	394.27 K	383.27 K
$k_0$ (@ 247 ° KV)	11.7 m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	11.7 m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$l_{t0}$ (@ 247 ° KV)	7.5E-04 m	7.5E-04 m
ubrzigavanje goriva:		
geometrija mlaznice	N=8;0.21 mm;152°	N=8;0.21 mm;152°
stvarni volumen	232.1 mm <sup>3</sup>	78.0997 mm <sup>3</sup>
vol. za simulaciju	2.9013E-08 m <sup>3</sup>	9.7625E-09 m <sup>3</sup>
početak / kraj	356 / 380.8 ° KV	360 / 375 ° KV
mjereni podaci:		
NO <sub>x</sub>	8.87E-3 g/ciklus	1.1E-3 g/ciklus
čada	2.11E-05 g/ciklus	2.07E-04 g/ciklus

slučaj opterećenja	<b>C_25_A_0</b>
opći podaci:	
n	1710 o/min
vtložni broj / vrtlog	0.71 / 1214 o/min
$p_{mjer}$ (@ 247 ° KV)	2.414E+05 N/m <sup>2</sup>
$p_0$ (@ 247 ° KV)	2.4199E+05 N/m <sup>2</sup>
$T_0$ (@ 247 ° KV)	391.27 K
$k_0$ (@ 247 ° KV)	26.8 m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$l_{t0}$ (@ 247 ° KV)	7.5E-04 m

ubrizgavanje goriva:	
geometrija mlaznice	N=8;0.21 mm;152°
stvarni volumen	89.4001 mm <sup>3</sup>
vol. za simulaciju	1.1175E-08 m <sup>3</sup>
početak / kraj	360 / 377 ° KV
mjereni podaci:	
NO <sub>x</sub>	1.67E-3 g/ciklus
čada	6.5E-05 g/ciklus

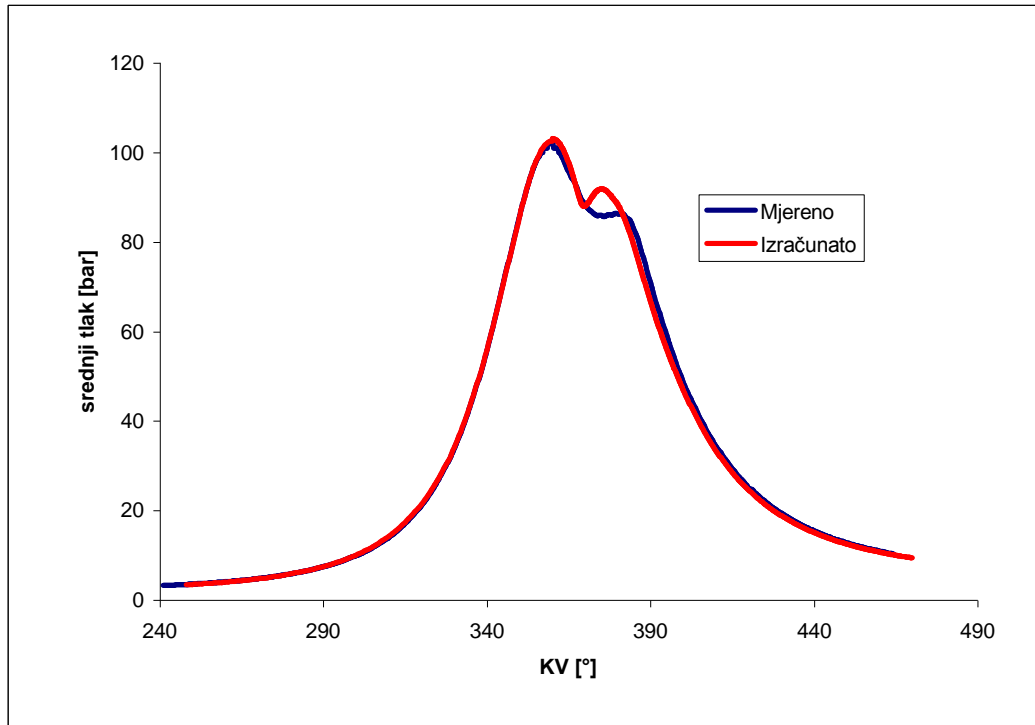
Uz varijaciju količine ubrizganog goriva, varirana je također i dinamika ubrizgavanja, što je prikazano na slici 4.6.



Slika 4.6 Dinamika ubrizgavanja goriva u svim promatranim slučajevima

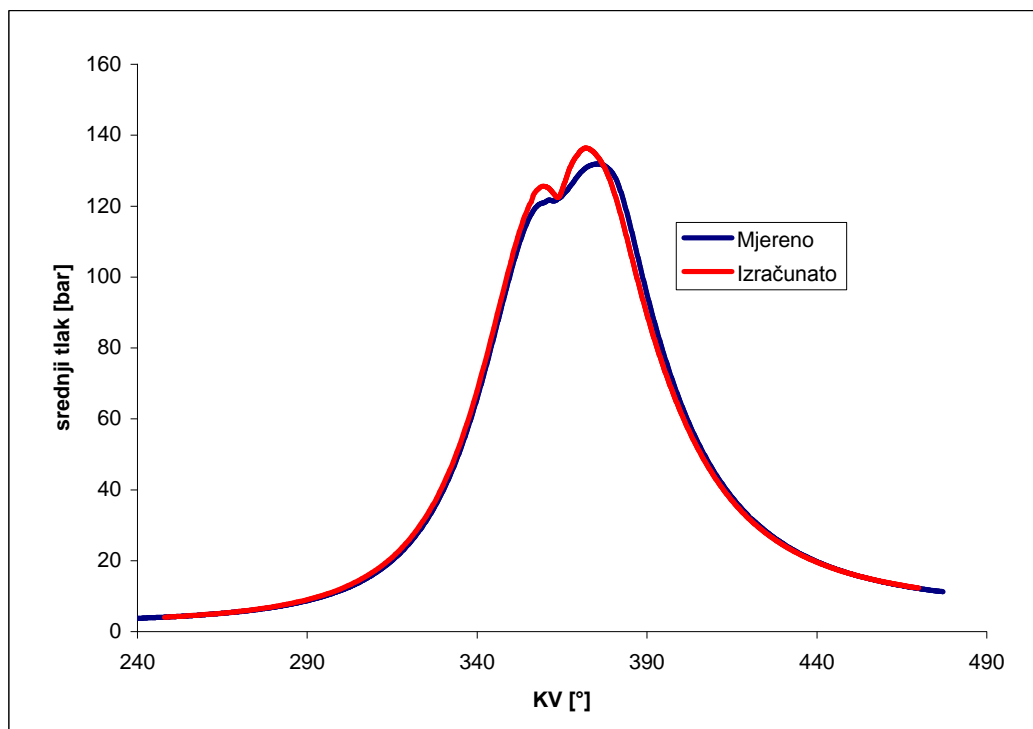
## 5. REZULTATI

### 5.1. Tlak

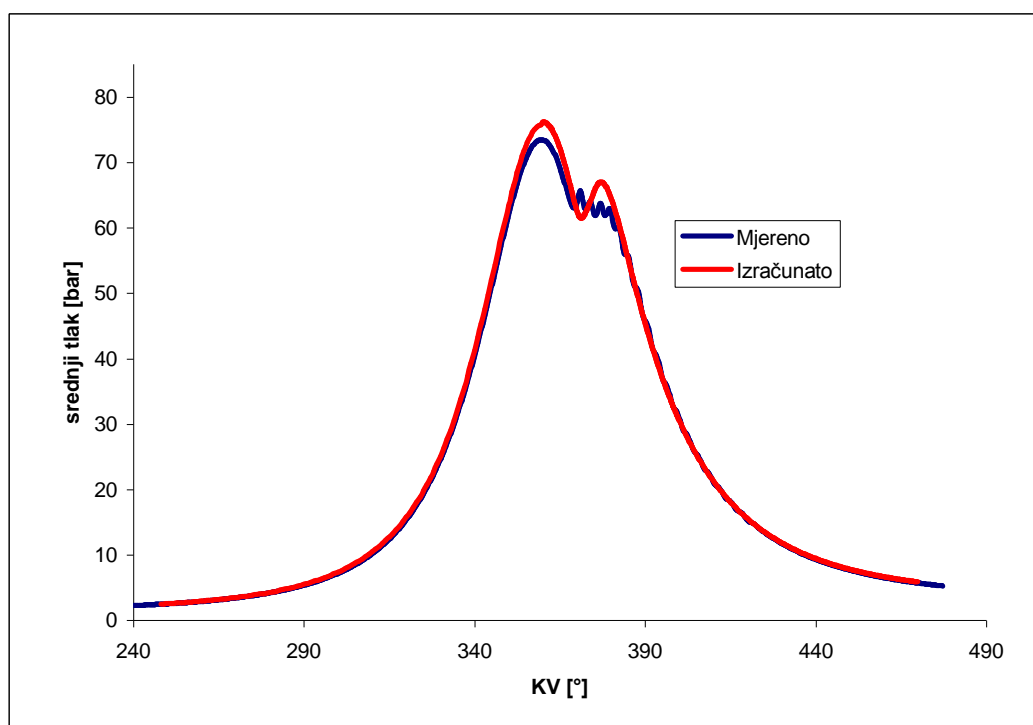


Slika 5.1 Usporedba mjerenog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja B\_50\_A\_0

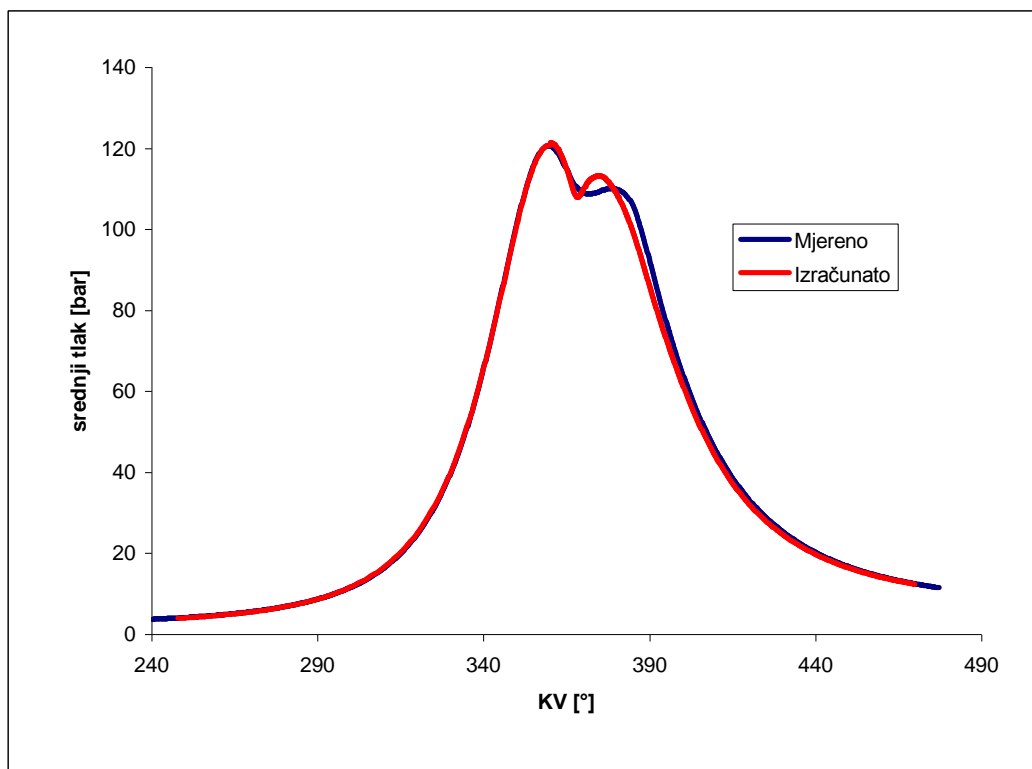
Na gornjoj slici (slika 5.1), kao i na slikama (5.2 – 5.4) koje slijede i koje prikazuju promjenu tlaka u vremenu, jasno se vidi utjecaj korištenog *Eddy-breakup* modela. Dok je u procesima kompresije i ekspanzije poklapanje gotovo savršeno, odstupanje se vidi kada počnu procesi izgaranja. Tada se vidi očit utjecaj pretpostavljene brze dinamike izgaranja te izračunate vrijednosti tlaka ne pokazuju tromost sustava koja se vidi iz rezultata mjerenja. U nastavku su prikazani dijagrami u kojima su uspoređene vrijednosti mjerenja s vrijednostima tlaka dobivenima proračunom. Na njima se također vidi navedena dinamika korištenog modela. Nakon početka izgaranja tlak u svakom od prikazanih slučajeva naglo poraste što nije uvijek slučaj u stvarnosti (slučajevi niskog opterećenja C\_25\_A\_0, A\_25\_A\_0).



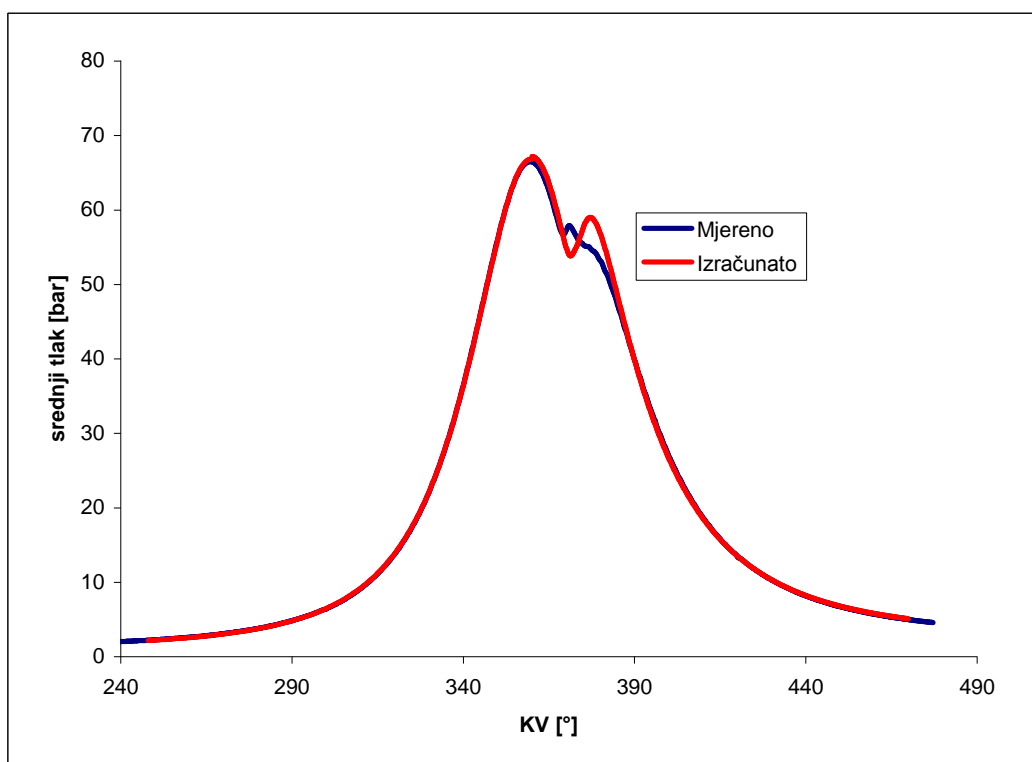
Slika 5.2 Usporedba mjerelog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja A\_75\_A\_-4



Slika 5.3 Usporedba mjerelog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja C\_25\_A\_0

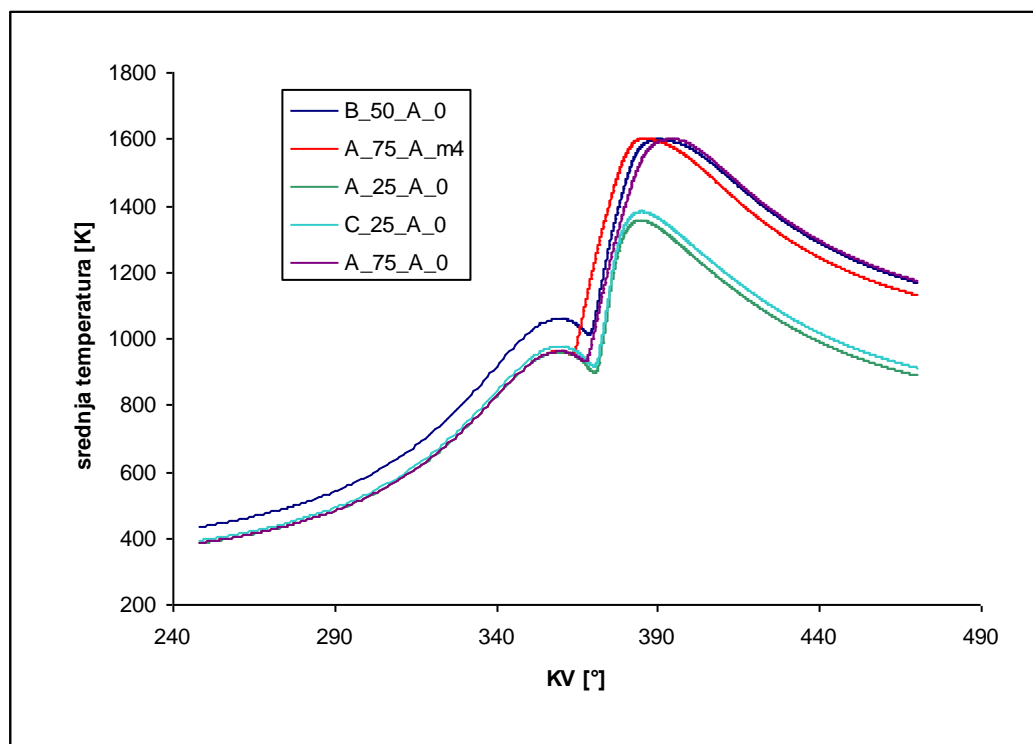


Slika 5.4 Usporedba mjenenog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja A\_75\_A\_0



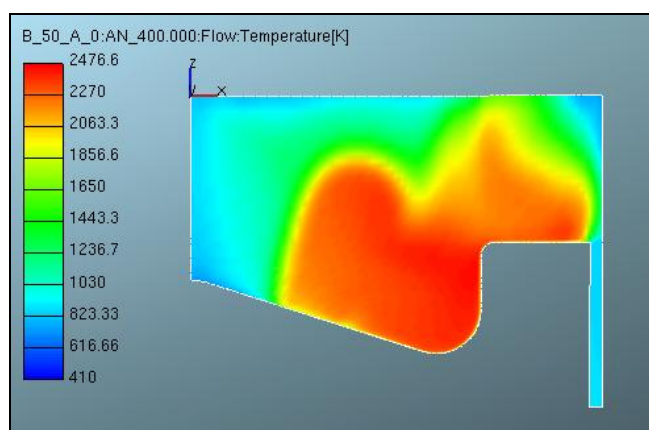
Slika 5.5 Usporedba mjenenog i izračunatog tlaka u slučaju opterećenja A\_25\_A\_0

## 5.2. Temperatura



Slika 5.6 Usporedba temperatura svih varijanti opterećenja

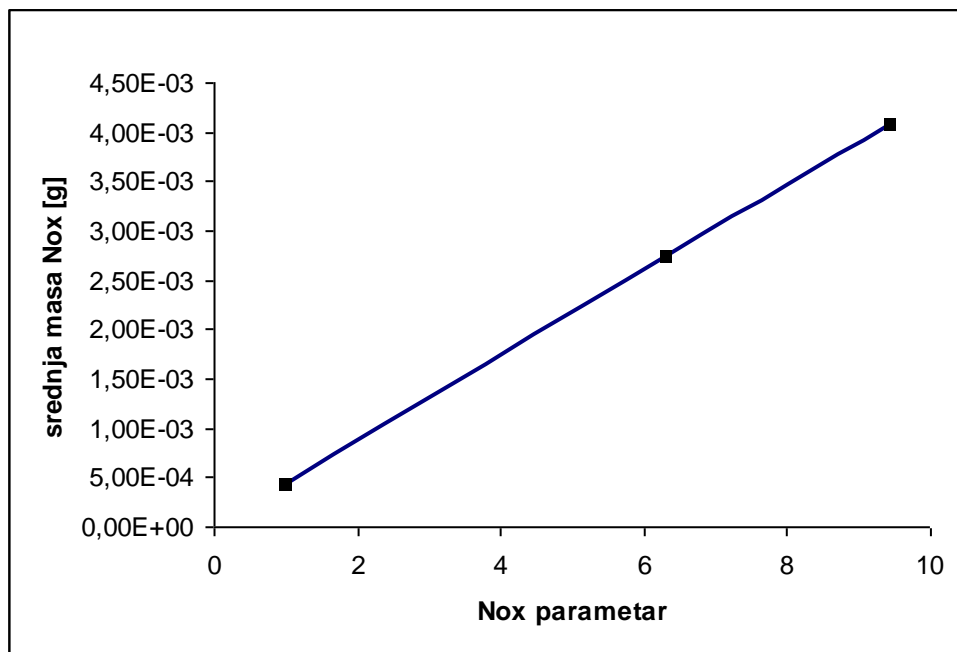
Mjerene vrijednosti za temperaturu tokom simuliranog procesa nisu dostupni, ali je sliku 5.6 zanimljivo pogledati uspoređujući je s dobivenim rezultatima mase nastale čađe, te ih usporediti s teorijski definiranim utjecajem temperature na nastalu čađu. Pošto se na gornjoj slici radi o srednjim temperaturama, stoga su i vrijednosti nešto niže od očekivanih. Maksimalne su temperature ipak u očekivanim granicama (slika 5.7).



Slika 5.7 Raspodjela temperatura (400 °KV)

### 5.3. NO<sub>x</sub>

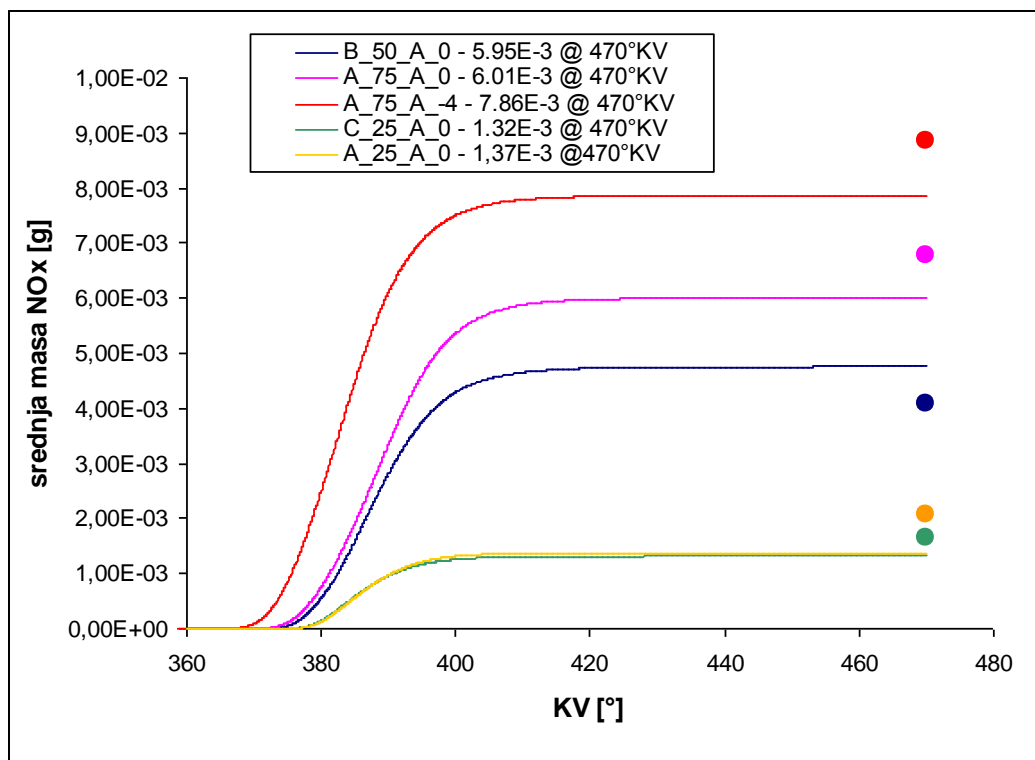
Kao što je već i opisano u poglavlju o matematičkom modeliranju nastanka NO<sub>x</sub>, pokazala se vrlo jednostavna ovisnost rezultirajuće mase NO<sub>x</sub> o korištenom parametru. Pošto su u Zeldovichevom modelu matematičke ovisnosti svih elemenata linearne, tako i rezultirajući dijagram na slici 5.8 pokazuje linearnu ovisnost proizvedene mase NO<sub>x</sub> o korištenom parametru u modelu.



Slika 5.8 Ovisnost proizvedene mase NO<sub>x</sub> o formacijskom parametru Zeldovich modela (slučaj opterećenja B\_50\_A\_0)

Na slici 5.9 prikazana je usporedba četiri modela opterećenja kod kojih je izvršen proračun s parametrom postavljenim na vrijednost 11. Vrijednosti u posljednjem vremenskom koraku, neposredno prije ispuha, uglavnom slijede mjerene vrijednosti, odnosno što je također značajno, odnose pojedinih slučajeva opterećenja, što je važno kod testiranja dizajna klipa i cilindra. S druge strane, da bi se dobile točne vrijednosti potrebno je imati na raspolaganju eksperimentalne rezultate, što u razvoju često nije moguće, te se proračunom uz uobičajenu vrijednost parametra dobivaju rezultati i do deset puta manji od stvarnih.

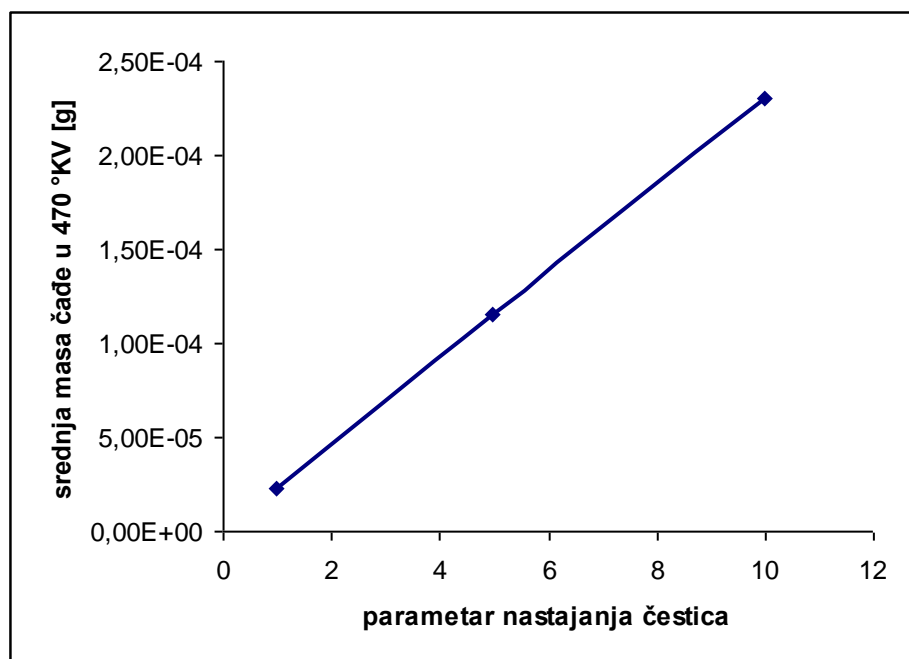




Slika 5.9 Usporedba produkcije NOx u četiri slučaja opterećenja (točke označavaju izmjerene vrijednosti)

## 5.4. Čada

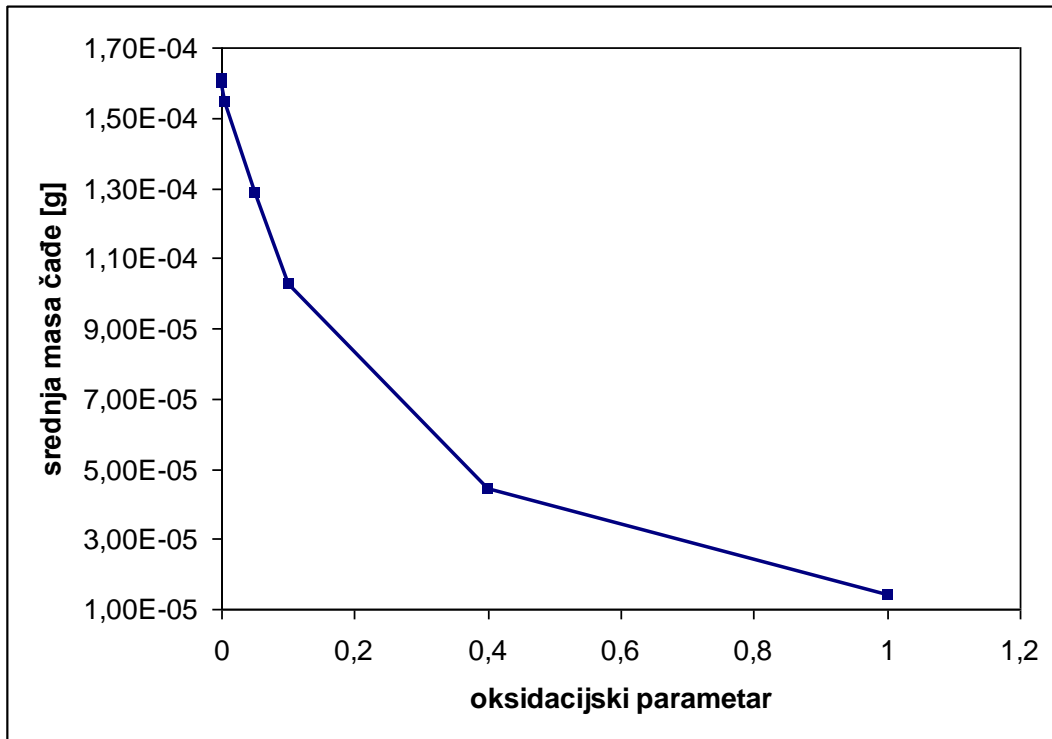
### 5.4.1. Variranje parametra za nastajanje čestica (engl. *Particle Inception*)



Slika 5.10 Ovisnost proizvedene čađe o PI parametru (slučaj opterećenja B\_50\_A\_0)

Varijacije parametra koji utječe na proces nastajanja čestica pokazale su, kao i kod NO<sub>x</sub>-a, strogo linearni karakter (također s prolaskom kroz ishodište koordinatnog sustava). Korištenjem bilo koje vrijednosti ovog parametra dobiva se količina čađe u svakom vremenskom koraku onoliko puta veća koliki je iznos parametra što ovaj parametar čini fizikalno malo značajnim.

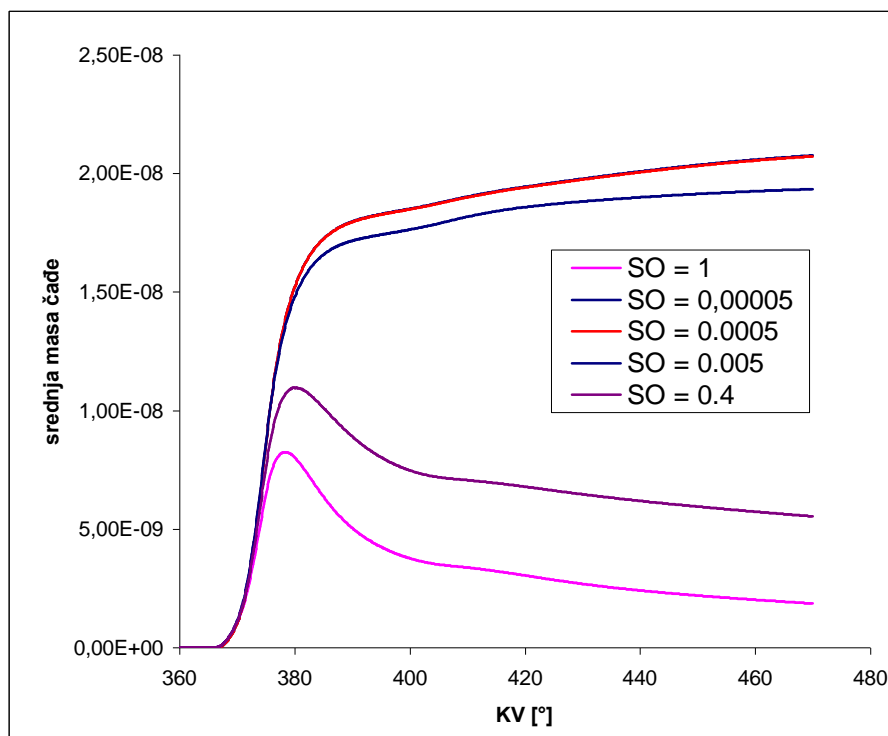
#### 5.4.2. Variranje oksidacijskog parametra



Slika 5.11 Ovisnost mase proizvedene čađe o oksidacijskom parametru

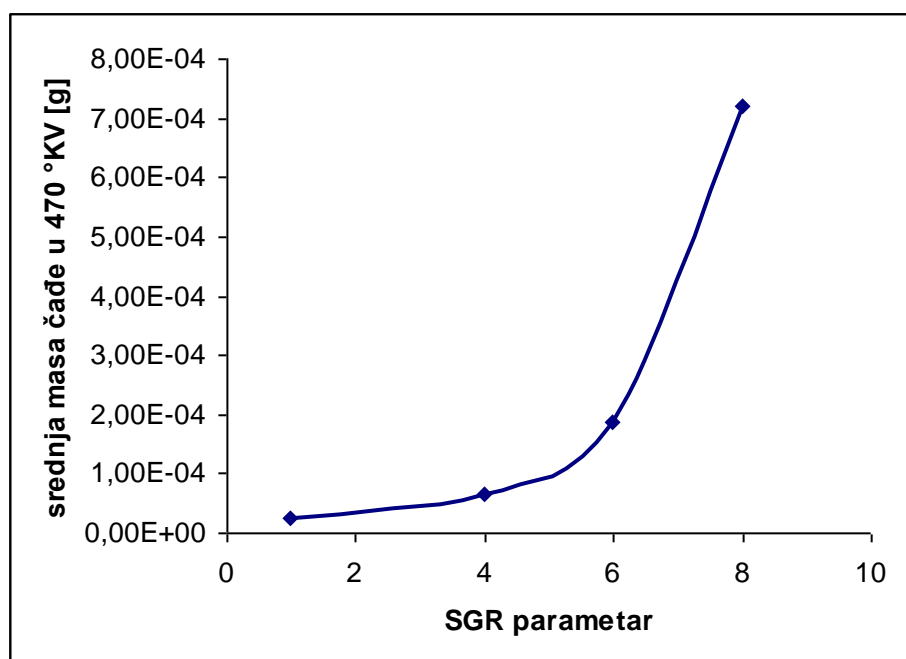
Kao što mu i samo ime govori, oksidacijskim se parametrom određuje utjecaj oksidacije pri računanju izvorskog člana u transportnoj jednadžbi čađe. Kako oksidacijski član (kao i fragmentacijski) ulazi u jednadžbu s negativnim predznakom (dakle, predstavlja ponor), do porasta rezultatne količine čađe dolazi smanjivanjem ovog parametra. Kada se vrijednost parametra približi nuli, što bi predstavljalo zanemarivanje procesa oksidacije, konačne se vrijednosti čađe ustale na nekoj vrijednosti koja je ovisna o ubrizganoj količini goriva (opterećenju) i ostalim parametrima (tlak, temperatura, parametri modela čađe). Kako se proračunom sa uobičajenom vrijednošću ovog parametra dobiju vrijednosti daleko manje od mjerenih, parametar se postavljao u području između 0 i 1. Povećanjem oksidacijskog parametra

na vrijednosti veće od 1, realno je očekivati, pošto se time oksidacija uvodi kao dominantan proces, smanjenje proizvedene čađe na vrijednosti blizu 0.

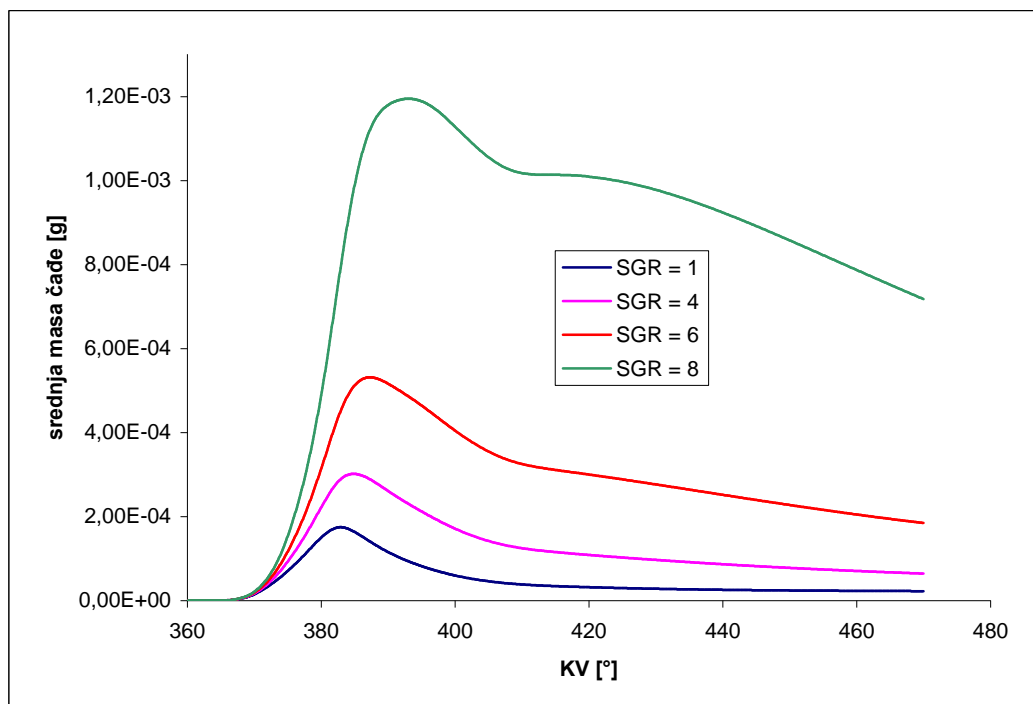


Slika 5.12 Varijacija oksidacijskog parametra (SO) na slučaju opterećenja A\_25\_A\_0

#### 5.4.3. Variranje parametra površinskog rasta (engl. Surface growth = SGR)



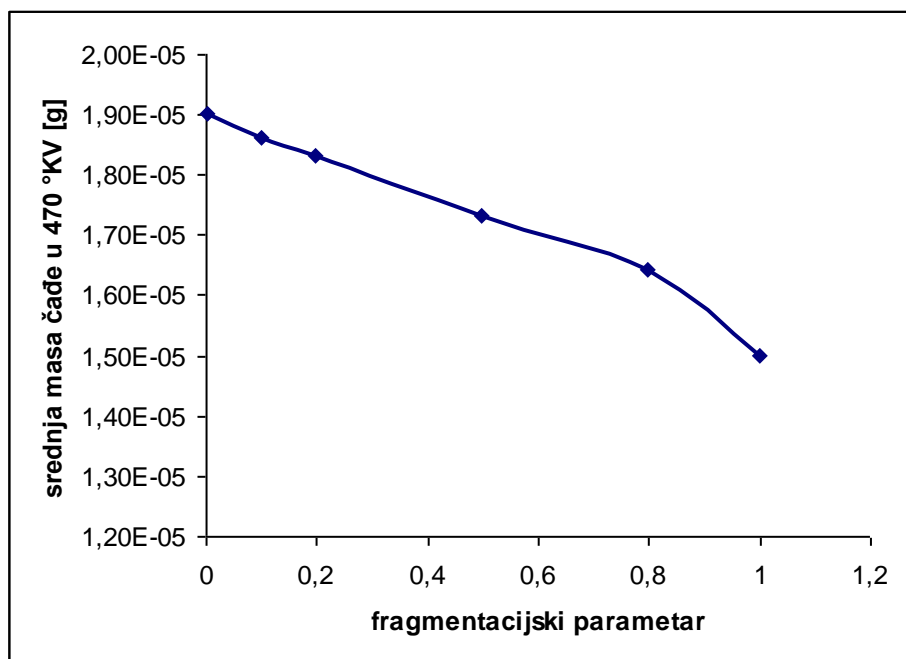
Slika 5.13 Ovisnost mase nastale čađe u parametru površinskog rasta



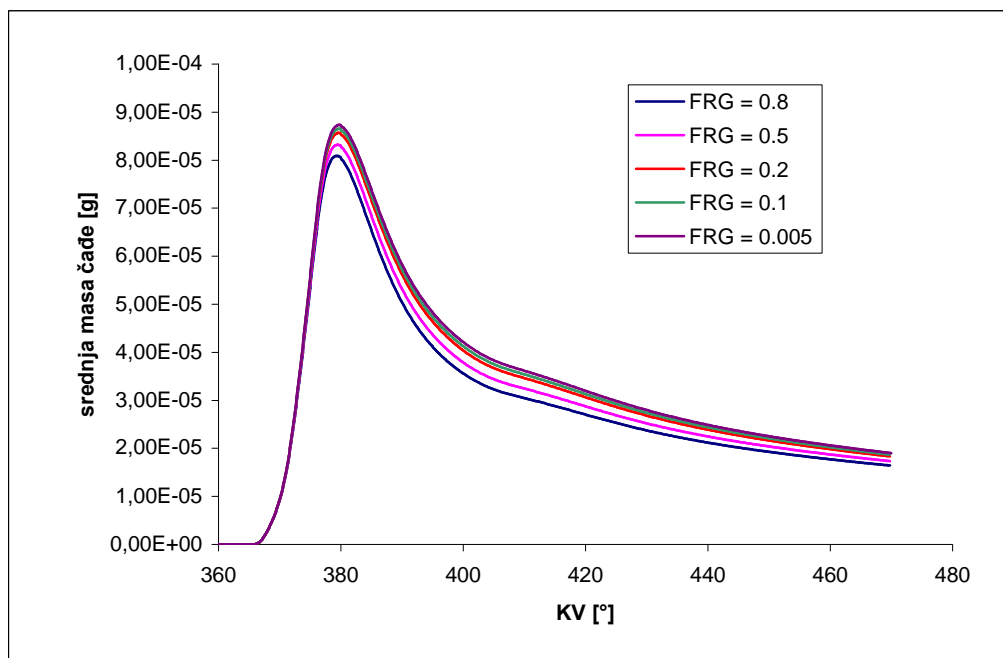
Slika 5.14 Varijacija parametra površinskog rasta u slučaju opterećenja B\_50\_A\_0

Na slici 5.13, na kojoj je prikazana ovisnost nastale količine čađe o parametru površinskog rasta, vidi se da je ovisnost nastale čađe o ovom parametru gotovo eksponencijalna. Pri korištenju većih vrijednosti ovog parametra povećava se količina (masa, pošto se radi o površinskom rastu) čađe, koja se ne može ukloniti oksidacijom u drugom dijelu procesa izgaranja (naravno, ako se to ne regulira adekvatno postavljenim oksidacijskim parametrom).

#### 5.4.4. Variranje fragmentacijskog parametra



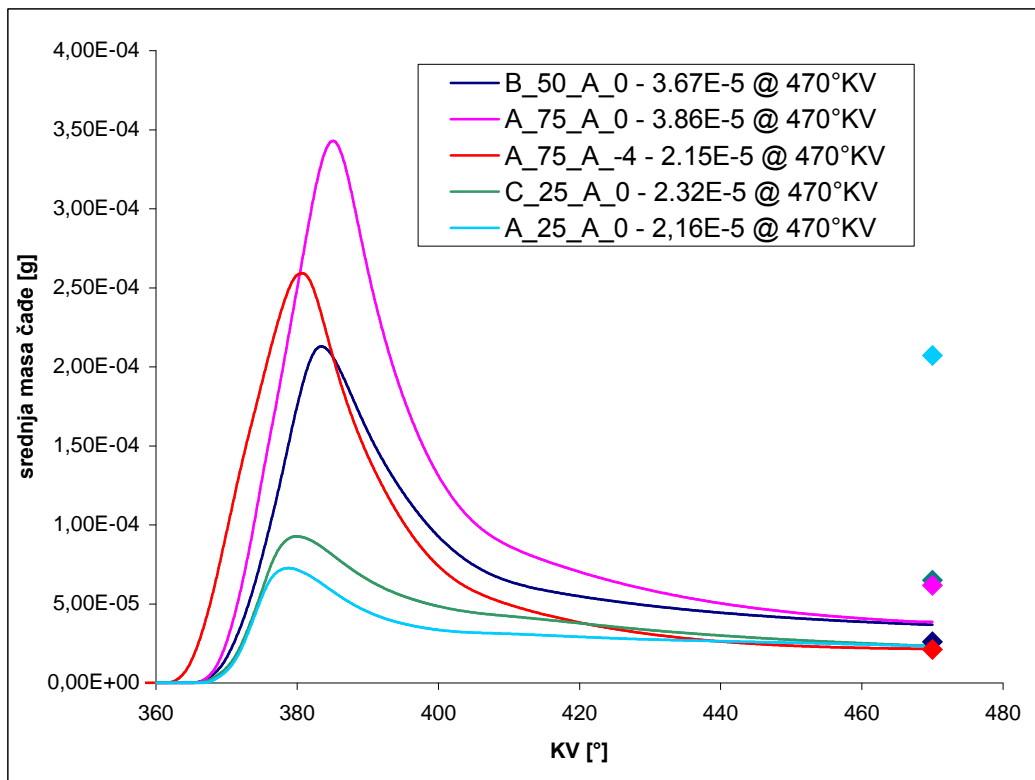
Slika 5.15 Ovisnost mase nastale čađe o fragmentacijskom parametru



Slika 5.16 Varijacija fragmentacijskog parametra u slučaju opterećenja C\_25\_A\_0

Kao što se vidi na gornjim slikama 5.15 i 5.16, varijacije ovog parametra nisu izazvale veće odstupanje od vrijednosti dobivenih s uobičajenom vrijednosti 1.

Na slici 5.17 prikazani procesi nastanka čađe u svim slučajevima opterećenja s istim postavljenim parametrima. Pošto su se kao dominantni pokazali oksidacijski i parametar površinskog rasta, tako su i oni promijenjeni na vrijednosti 2 (površinski rast) i 0.9 (oksidacija), dok su parametar nastajanja čestica i fragmentacijski parametar ostavljeni na uobičajenim vrijednostima (1). Rezultati na slici 5.17 pokazali su relativno dobro poklapanje vrijednosti u zadnjem vremenskom koraku u slučaju viših opterećenja (A\_75\_A\_0, A\_75\_A\_-4 i B\_50\_A\_0), dok su izračunate vrijednosti u slučaju niskih opterećenja mnogo niže od eksperimentalno dobivenih. To je pogotovo očito u slučaju A\_25\_A\_0 (uz nisko opterećenje, u ovom je slučaju i najniža brzina vrtnje), u kojem su mjerene vrijednosti desetak puta veće od onih dobivenih simulacijom. Na osnovi ovih rezultata može se zaključiti da je količina nastale čađe u korištenom matematičkom modelu ovisna najviše o količini ubrizganog goriva, te se s tim u skladu i dobiju veće vrijednosti čađe kod viših, odnosno niže vrijednosti kod nižih opterećenja, iako u stvarnosti to nije slučaj.



Slika 5.17 Usporedba slučajeva opterećenja s istim postavljenim vrijednostima parametara (rombovima su označene izmjerene vrijednosti)

## 6. ZAKLJUČAK

U sklopu ovog rada izvršene su simulacije kompresijskog i ekspanzijskog takta dieselskog motora za visoka opterećenja. Korišten je simulacijski *software* “CFD Workflow manager” tvrtke AVL. Uzeto je pet različitih slučajeva opterećenja, te su se promjenom parametara modela čađe i NO<sub>x</sub> pokušale dobiti vrijednosti proizvedene mase ovih emisija izmjerene u ispuhu.

Također, u radu su, osim općenitih podataka o emisijama čađe i NO<sub>x</sub>-a, dane i osnove matematičkog modeliranja strujanja i izgaranja. Pošto je područje modeliranja izgaranja vrlo široko, ograničilo se na opis korištenih metoda modeliranja mlazova i njihovog izgaranja, te osnova *flamelet* podmodela i modela baziranih na statistici (PDF). Opisana je mreža kontrolnih volumena, te su navedeni svi relevantni podaci korišteni pri simulacijama.

U posljednjem dijelu prikazani su dijagramski rezultati simulacija s pripadajućim komentarima. Pokazali su da se korištenjem naprednog modela nastanka čađe dobije produkcija čađe uglavnom ovisna o količini ubrizganog goriva (opterećenju), čime se dolazi do zaključka da je nemoguće definirati jedan optimizirani set parametara za sve slučajeve opterećenja. Također se pokazalo da parametar za reguliranje nastajanja čestica nema fizikalnog značenja, dok je utjecaj fragmentacijskog parametra zanemariv što ukazuje na dominantan utjecaj parametara koji djeluju na utjecaj površinskog rasta (izvor) i oksidacije (ponor). Pošto su mjerene vrijednosti bile dostupne samo na zadnjem vremenskom koraku, nije bilo moguće ocijeniti koliko dobro ovaj model slijedi stvarni proces nastanka čađe, ali u drobroj mjeri pomaže predvidjeti utjecaj na okoliš što je i najvažniji razlog računja ovih veličina.

## 7. LITERATURA

- [1] Mahalec I., *Motori s unutrašnjim izgaranjem*, FSB, Zagreb, 2000.
- [2] Duić N., *Osnove energetike, digitalni udžbenik*, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 2003.
- [3] AVL FIRE, CFD Solver v3.2, Fire version 8, Combustion, AVL, Graz, 2002.
- [4] Gustavsson J., Golovitchev V.I., *Spray Combustion Simulation Based on Detailed Chemistry Approach for Diesel Fuel Surrogate Model*, Chalmers University of Technology, Gothenburg, SWEDEN, 2003.
- [5] de Blas L., *Pollutant Formation And Interaction In The Combustion Of Heavy Liquid Fuels*, Department of Chemical Engineering, University College London, London
- [6] Kraft M., Balthasar M., Mauss F., *Soot and NOx Formation in a Stationary Turbulent Combustor*, Lund Institute of Technology, Lund, Sweden
- [7] Warnatz J., Mauss U., Dibble R. W., *Combustion*, Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [8] Sjöberg M., *The Rotating Injector as a Tool for Exploring DI Diesel Combustion and Emissions Formation Processes*
- [9] Troyer D. D., *Get Ready for More Soot*, Practicing Oil Analysis Magazine, 1999., objavljeno na: [http://www.practicingoilanalysis.com/article\\_detail.asp?articleid=51&relatedbookgroup=Maintenance](http://www.practicingoilanalysis.com/article_detail.asp?articleid=51&relatedbookgroup=Maintenance)
- [10] NASA, *NASA Finds Soot Has Impact On Global Climate*, USA, 2003. objavljeno na: <http://www.gsfc.nasa.gov/topstory/2003/0509pollution.html>
- [11] Stevens W. et al., *The Fundamentals of Soot Birth and Growth*, SC/BES, 2002.
- [12] Harris SJ., Maricq MM., *The role of fragmentation in defining the signature size distribution of diesel soot*, objavljeno u Journal of Aerosol Science, 2002



- [13] Hisaeda Y. et al., *Simulation Of Soot Formation And Aggregation In High Temperature Condition*, Tohoku University, Sendai, Japan, 2000.
- [14] Kleiveland R. N., *Modeling of Soot Formation and Oxidation in Turbulent Diffusion Flames*, Sintef Energy Research, 2002.
- [15] Galović A., *Termodinamika II – udžbenik*, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu, 2000.
- [16] Karl U., Rentz O., Kemper BM., Kamm K., *Uncertainties in the evaluation of emissions of carcinogenic air pollutants*, objavljeno u *Gefahrstoffe Reinhaltung der Luft*, 2002
- [17] Liu F., Guo H., Smallwood G. J., Goulder O. L., *Effects of gas and soot radiation on soot formation in a coflow laminar ethylene diffusion flame*, Institute for Chemical Process and Environmental Technology, Ottawa, Canada, 2002.
- [18] Morgan R. E., Gold M. R., Laguitton O., *Characterisation of the Soot Formation Processes in a High Pressure Combusting Diesel Fuel Spray*, SAE International, 2003.
- [19] Kandylas IP., Haralampous OA., Koltsakis GC., *Diesel soot oxidation with NO<sub>2</sub>: Engine experiments and simulations*. objavljeno u *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2002
- [20] Gopalakrishnan V., Abraham J., *Computed NO and soot distribution in turbulent transient jets under diesel conditions*, objavljeno u *Combustion Science & Technology*, 2004
- [21] Pugmire R. J., *Soot Formation Process*, Department of Chemical & Fuels Engineering, University of Utah, USA
- [22] Zhang H., Violi A., Sarofim A., Smith P. J., *Soot Formation and Burn Out*
- [23] Crua C., Kennaird DA., Heikal MR., *Laser-induced incandescence study of diesel soot formation in a rapid compression machine at elevated pressures*, objavljeno u *Combustion & Flame*, 2003.
- [24] Vlasov P. A., Warnatz J., *Detailed Kinetic Modeling of Soot Formation: Results, Problems, and Prospects*, Berlin, Germany, 2002.
- [25] Günther R., *Verbrennung und Feuerungen*, Berlin, 1974.

- [26] Gronki J., *Soot Formation in Internal Combustion Engines*, University of Heidelberg, Heidelberg, objavljeno na: [http://www.pci.uni-heidelberg.de/pci/cschulz/e\\_engine\\_soot.html](http://www.pci.uni-heidelberg.de/pci/cschulz/e_engine_soot.html)
- [27] Popovicheva OB., Persiantseva NM., Kuznetsov BV., Rakhmanova TA., Shonija NK., Suzanne J., Ferry D., *Microstructure and water adsorbability of aircraft combustor soots and kerosene flame soots: Toward an aircraft-generated soot laboratory surrogate*, objavljeno u *Journal of Physical Chemistry and Molecules*, 2003.
- [28] Fernandes MB., Skjemstad JO., Johnson BB., Wells JD., Brooks P., *Characterization of carbonaceous combustion residues. I. Morphological, elemental and spectroscopic features*, objavljeno u *Chemosphere*, 2003
- [29] Ahrens MJ., Hickey CW., *Extractability of polycyclic aromatic hydrocarbons in sediments: A matter of association?*, objavljeno u *Australian Journal of Chemistry*., 2003.
- [30] Escribano R., Sloan JJ., Siddique N., Sze N., Dudev T., *Raman spectroscopy of carbon-containing particles*, objavljeno u *Vibrational Spectroscopy*, 2001
- [31] Hofmann M., Bessler W. G., Schulz C., *Laser-induced incandescence (LII) for soot diagnostics at high pressures*, Physikalisch-Chemisches Institut, Universität Heidelberg, Heidelberg, Germany, 2002.
- [32] Concentration, Heat and Momentum Limited Co., *Introduction to CFD*, objavljeno na: <http://www.cham.co.uk/website/new/cfdintro.htm>
- [33] Lee D. Rutland CJ. *Probability density function combustion modeling of diesel engines*. objavljeno u *Combustion Science & Technology*. 2002
- [34] Apsley D., *Introduction to CFD*, Institute of Science and Technology, University of Manchester, Manchester, 2003.
- [35] Virag Z., *Dinamika plinova, Predavanja iz kolegija Dinamika Plinova*, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb
- [36] Duić N., *Prilog matematičkom modeliranju izgaranja plinovitog goriva u ložištu generatora pare*, doktorska disertacija, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 1998.

- [37] Hanjalić K., *Dinamika stišljivog fluida*, Igkro "Svjetlost", Sarajevo, 1978
- [38] Schneider D. R., *Istraživanje mogućnosti redukcije SO<sub>3</sub> pri izgaranju teškog loživog ulja*, doktorska disertacija, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 2002.
- [39] Rao S., Rutland C. J., *A Flamelet Time Scale combustion model for turbulent combustion in KIVA*, Engine Research Center, UW Madison
- [40] Ertesvag IS., Magnussen BF., *The eddy dissipation turbulence energy cascade model*, objavljeno u Combustion Science & Technology, 2000.
- [41] Golovitchev V. I., *Modeling Of Spray Formation, Ignition And Combustion*, Chalmers University of Technology, Gothenburg, SWEDEN, 1999.
- [42] Kim SK., Lee JK., Kim YM., Ahn JH., *Numerical modeling of combustion processes and pollutant formations in direct-injection diesel engines*, objavljeno u Ksme Journal, 2002
- [43] AVL SWIFT, CFD Solver v3.2, Swift version 3, *Spray*, AVL, Graz, 2003.
- [44] DieselNet, *European Stationary Cycle (ESC)*, objavljeno na: <http://www.dieselnet.com/standards/cycles/esc.html>