

## 3. NUMERIČKA PROCEDURA

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

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

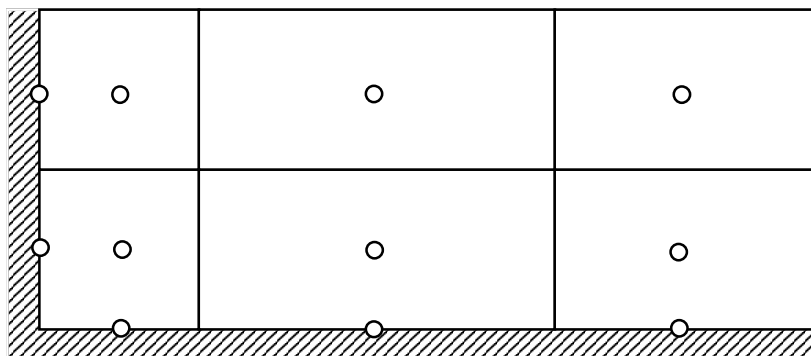
Izgaranje je upravljano lokalnim iznosima masenih udjela sudjelujućih kemijskih vrsta te lokalnom temperaturom. Kemijska kinetika izgaranja je vrlo brzi proces, izrazito osjetljiv na promjenu početnih uvjeta, ali ipak konačne brzine. Kemijska neravnoteža je važan činilac u nastanku spojeva poput dušičnih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

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

### 3.1. METODA KONTROLNIH VOLUMENA

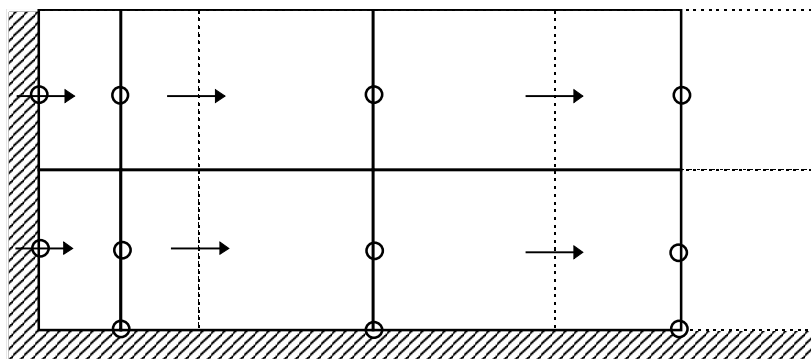
Prema metodi kontrolnih volumena koju su razvili Spalding i Patankar [27] domena se dijeli na konačni broj kontrolnih volumena, od kojih je svaki predstavljen vrijednošću fizikalne veličine u čvoru koji se nalazi unutar kontrolnog volumena. Iznosi fizikalnih veličina uzimaju se konstantnim unutar čitavog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

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



Slika 3.1. Rubni čvorovi za centralni mrežu

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



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

### Označavanje čvorova

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.1.1. Integracija opće transportne jednadžbe

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

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

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

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

Ako se taj ostatak fluksa za sada pripoji izvornom članu:

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

jednadžba (3.1) mijenja se u:

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

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

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

Tada jednačba (3.4) postaje:

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

Integracijom jednačbe preko kontrolnog volumena:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Gustoća  $\rho$  i koeficijent difuzije  $\Gamma_\varphi$  na kontrolnim površinama dobivaju se linearnom interpolacijom:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

gdje su koeficijenti definirani kao:

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

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

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

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

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

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

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

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

Koeficijent ispred  $\varphi_P$  postaje:

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

odnosno:

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

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

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

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

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

Jednadžba (3.25) s izrazima za koeficijente (3.26-3.31, 3.32, 3.36) predstavlja konačnu algebarsku jednadžbu bilance svojstva  $\varphi$  na kontrolnom volumenu  $\Delta V$ .

### 3.1.2. Stabilnost

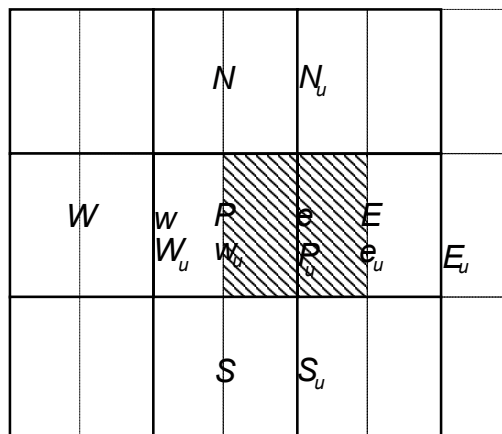
Kako su svi susjedni koeficijenti (3.26-3.31) *per definitionem* pozitivni, pod uvjetom da je  $S_{\varphi,P}$  pozitivan, zadovoljen je Scarborough kriterij stabilnosti [27]:

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

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

## 3.2. INTEGRACIJA JEDNADŽBI STRUJANJA

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



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

### 3.2.1. Pomaknuta mreža

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

### 3.2.2. Jednadžba količine gibanja kao transportna jednadžba

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

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

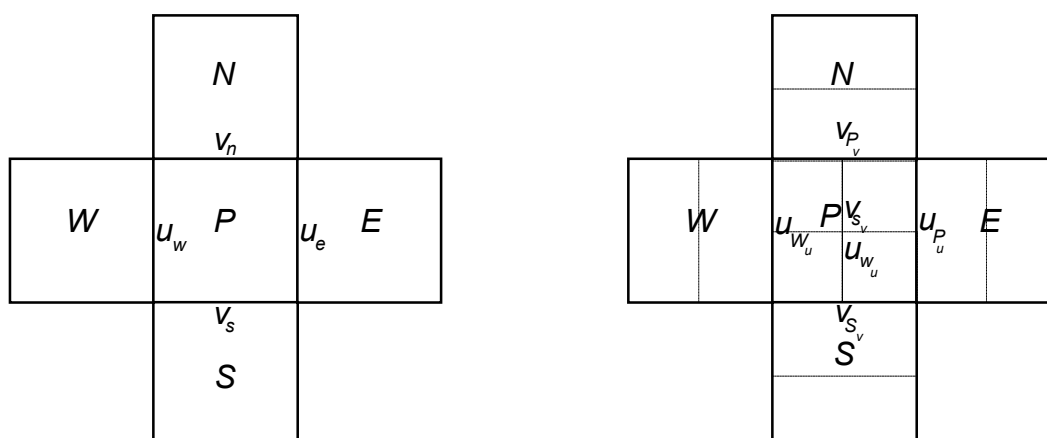
gdje je brzina  $v_i$  fizikalna veličina  $\varphi$  koju se transportira, koeficijent difuzije  $\Gamma_\varphi$  odgovara efektivnom koeficijentu dinamičke viskoznosti  $\mu_{\text{eff}}$ , a izvor je:

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

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

Tablica 3.1. Usporedbene vrijednosti indeksa za pojedine mreže

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



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

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

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

ili kraće:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

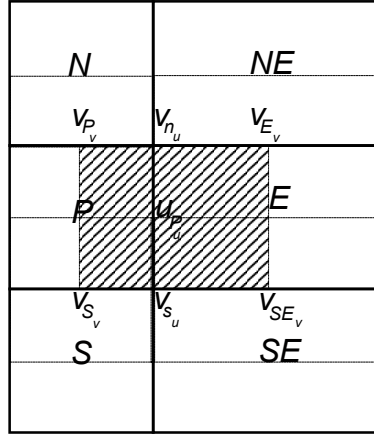
$$\mathbf{a}_{u,N} = \left( \left\| -\rho_{n_u} v_{n_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,n_u}}{\delta y_{n_u}} \right) \mathbf{A}_{n_u} \quad (3.51)$$

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

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

gdje je  $\xi_E$  geometrijski težinski faktor:

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



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

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

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

Treba primijetiti razliku između interpoliranja i ponderiranja. Uz:

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

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

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

dobije se:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{b}_{u,\mu} = \int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_j}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) dV = \quad (3.65)$$

$$\int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} - 2 \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] dV +$$

$$\int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial x} \right) dV + \int_{\Delta V_{P_u}} \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_{\text{eff}} \frac{\partial w}{\partial x} \right) dV$$

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

$$\mathbf{b}_{u,\mu} = \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} - 2 \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right]_{e_u} A_{e_u} - \quad (3.66)$$

$$\left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} - 2 \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right]_{w_u} A_{w_u} +$$

$$\left( \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial x} \right)_{n_u} A_{n_u} - \left( \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial x} \right)_{s_u} A_{s_u} +$$

$$\left( \mu_{\text{eff}} \frac{\partial w}{\partial x} \right)_{u_u} A_{u_u} - \left( \mu_{\text{eff}} \frac{\partial w}{\partial x} \right)_{d_u} A_{d_u} = \mathbf{b}_{u,\mu_u} + \mathbf{b}_{u,\mu_v} + \mathbf{b}_{u,\mu_w}$$

Tablica 3.2. Sistem algebarskih jednažbi za proračun brzine  $u$ 

**Sistem algebarskih jednažbi za proračun distribucije brzine  $u$**

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

gdje su:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Tablica 3.3. Sistem algebarskih jednačbi za proračun brzine  $v$

**Sistem algebarskih jednačbi za proračun distribucije brzine  $v$**

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

gdje su:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Tablica 3.4. Sistem algebarskih jednadžbi za proračun brzine  $w$ 

**Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije brzine  $w$**

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

gdje su:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.2.3. Jednadžba tlaka

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

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

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

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

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

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

a  $d_{u,P}$ :

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

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

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

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

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

gdje su:

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

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

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

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

Iz jednadžbe (3.72) dobije se:

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

gdje su:

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

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

Pomaknute za jedan element prema nižoj vrijednosti osi  $z$  dobije se:

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

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

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

Tablica 3.5. Sistem algebarskih jednačbi za proračun tlaka  $p$

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

### 3.3. PRORAČUN BRZINE IZGARANJA ZA SISTEM REAKCIJA

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.3.1. Model izgaranja s konačnim brzinama reakcija kao sistem običnih diferencijalnih jednadžbi

Model izgaranja u kojem u  $n_r$  elementarnih suprostavljenih reakcija sudjeluje  $n_\alpha$  kemijskih vrsta predstavljen je sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi:

$$\omega_\alpha = \frac{\partial}{\partial \tau}(\rho Y_\alpha) = W_\alpha \frac{\partial C_\alpha}{\partial \tau} = W_\alpha \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left( 1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) \quad (3.88)$$

tj.:

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left( 1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) \quad (3.89)$$

Da bismo odabrali metodu rješavanja treba poznavati vremenske konstante sistema. Vremenska konstanta  $\tau_c$  za jednu kemijsku vrstu i jednu reakciju definirana je [26] kao vrijeme potrebno da koncentracija reaktanta padne na  $e^{-1}$  početne koncentracije. Na primjeru reakcije prvog reda:



gdje je promjena koncentracije vrste  $A$  dana sa:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = -k C_A \quad (3.91)$$

i čije rješenje je:

$$C_A(\tau) = C_A(0) e^{-k\tau} \quad (3.92)$$

dobije se sljedeća vremenska konstanta:

$$\tau_c = k^{-1} \quad (3.93)$$

Kako brzina reakcije  $k$ , koja je eksponencijalna funkcija temperature (2.241), može varirati za veliki broj redova veličine (npr. 10) ovisno o reakciji i temperaturi na kojoj se ta reakcija odvija, tako će varirati i vremenska konstanta. Kako se kinetički sistem sastoji iz niza kemijskih vrsta, svaka od kojih sudjeluje u više reakcija, te čije se koncentracije mijenjaju prema vremenskim konstantama vrlo širokog raspona, može se dogoditi da numeričko rješenje dominantno zavisi upravo o kemijskim vrstama s najkraćim vremenskim konstantama, čak i onda kad su koncentracije tih vrsta zanemarive. Lanci reakcija najviše zavise od brzine intermedijarnih reakcija iako u njima nastaju vrste koje su često sasvim zanemarivih koncentracija, te upravo odgovaraju prethodnom opisu. Kinetički sistem je matematički predstavljen sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi. Sistemi običnih

diferencijalnih jednadžbi koji dominantno zavise od najkraćih vremenskih konstanti nazivaju se krutima [26].

U tablici 3.6 dane su četiri metode koje se koriste prema [26] za rješavanje krutih sistema običnih diferencijalnih jednadžbi, kakav je i kinetički sistem koji opisuje izgaranje. Zbog vremena računanja u interesu je izabrati metodu koja rjeđe računa Jakobijanu i ima fleksibilnost u izboru reda metode, ali metoda mora moći integrirati i najbrže promjene u problemu. Izbor metode je stoga pao na Geara [42], kao kompromisno rješenje koje bi trebalo zadovoljiti što se tiče integracije brzih promjena te zahtjevnosti na vrijeme računanja. Osim toga, ta je metoda u širokoj upotrebi i dobro je opisana. Metoda je ugrađena u komercijalni program Matlab pa je testiranje programa bilo olakšano, a kako je u [28] upotrijebljena također za izgaranje smatralo se da će biti zadovoljavajuća. Implementacija metode je dana u dodatku F.

Tablica 3.6. Usporedba različitih metoda za rješavanje krutih sistema običnih diferencijalnih jednadžbi [26]

metoda	red metode $q$	Jakobijana	tip problema
DIFSUB	1–6	svakih 10 koraka najviše	spori sistemi
Gear	1–5	svakih 10 koraka najviše	brze promjene
EPISODE	1–5	svakih 10 koraka najviše	vrlo brze promjene
K-integrator	3	svaki korak	ekstremno brze promjene

Da bi se riješio sistem običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) potrebno je na neki način odrediti početne vrijednosti koncentracija kemijskih vrsta i temperature, te vrijeme integracije. Osim toga treba još nešto reći i o računanju temperature kao posljedice sistema egzotermnih reakcija.

### 3.3.2. Proračun temperature

U sistemu reakcija kakvo je izgaranje plina, dakle jednog vrlo egzoternog procesa, temperatura značajno utječe na brzinu procesa. U izrazu za brzinu reakcije (2.241) temperatura se nalazi čak u eksponentu, dok preko utjecaja na konstantu ravnoteže (2.242) određuje da li se reakcija pretežno odvija u jednom ili drugom smjeru. Temperaturu je dakle neophodno računati tijekom integracije sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89).

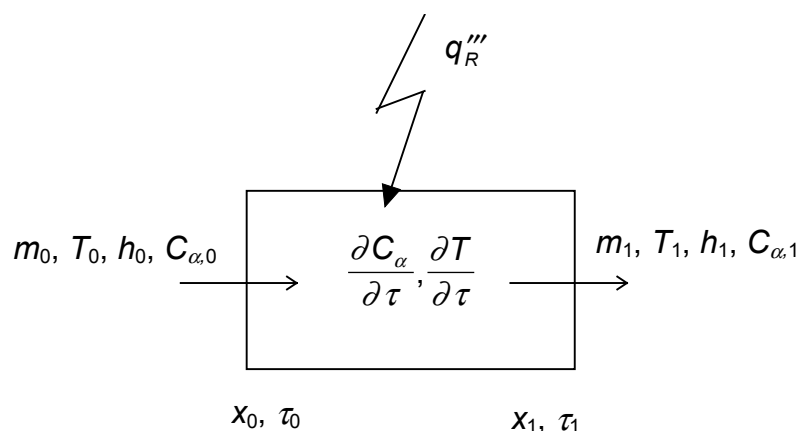
U poglavlju 2.8 gdje je opisan matematički model procesa u ložištu generatora pare rečeno je da je toplina izmijenjena između reaktivnog sistema jednaka (2.237):

$$q_C''' = - \sum_{k=1}^{n_\alpha} \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] \quad (3.94)$$

Iz toga bi izraza bilo moguće izračunati temperaturu, jer je implicitno sadržana u specifičnim molarnim entalpijama formacije kemijskih vrsta preko interpolacionih polinoma (2.243). Međutim u tom je slučaju potrebno poznavati zavisnost volumenskog toplinskog toka izgaranjem o vremenu:

$$q_C''' = q_C'''(\tau) \quad (3.95)$$

Da bi se propisala ta zavisnost pogledajmo prvo o kojem se tu vremenu radi, odnosno kakva je veza vremena i prostora (s obzirom da se radi o modelu procesa sa stacionarnim rubnim uvjetima) na primjeru jednodimenzionalnog strujanja uz zanemarenje difuzije.



Slika 3.6 Vrijeme integriranja kao prostorna nezavisna varijabla

Iz slike 3.6 se vidi da je dimenzija vremena zavisna od dimenzije prostora (što govori da se radi o dimenziji koja ima samo pseudo-vremenski karakter). Tako je u početnom vremenskom trenutku  $\tau_0$  unos topline u reaktivni sistem jednak iznosu entalpije koja ulazi ( $m_0 h_0$ ). Međutim da bi se dobio toplinski tok koji se struji pridružuje dok ona napreduje prema izlazu bilo bi potrebno znati kako rasporediti volumenski toplinski tok zračenjem  $q_R'''(\tau)$  u vremenu (odnosno od ulaza do izlaza u kontrolni volumen). To bi bilo iznimno teško, naročito u trodimenzionalnom slučaju, jer se tada pseudo-vremenska dimenzija više ne poklapa s  $x$  osi, nego predstavlja imaginarnu os koja prati strujnicu od ulaza do izlaza kontrolnog volumena. Stoga je pretpostavljena sljedeća zavisnost volumenskog toplinskog toka zračenjem o pseudo-vremenu:

$$q_R'''(\tau) = \begin{cases} \tau < \tau_1 & q_R'''(\tau) = 0 \\ \tau = \tau_1 & q_R'''(\tau) = q_R''' \end{cases} \quad (3.96)$$

tj. pretpostavljeno je da se sva toplina dozrači tek na samom izlasku iz kontrolnog volumena, dakle u gornjem limitu integracije. Kako nema drugog mehanizma prijenosa topline unutar kontrolnog volumena to implicira istu zavisnost i za unos topline iz okoline u reaktivni sistem:

$$q_C'''(\tau) = \begin{cases} \tau < \tau_1 & q_C'''(\tau) = 0 \\ \tau = \tau_1 & q_C'''(\tau) = q_C''' \end{cases} \quad (3.97)$$

iz toga slijedi da se promjena temperature po vremenu  $\tau$  može izračunati iz izraza za volumenski toplinski tok izgaranjem:

$$\int_{\tau_0}^{\tau_1-0} \sum_{k=1}^{n_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial \tau} [C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T] d\tau = 0 \quad (3.98)$$

odnosno nakon integracije po vremenu  $\tau$

$$\sum_{k=1}^{n_{\alpha}} [C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T] = \text{const} \quad (3.99)$$

Ako se dakle poznaje početni iznos temperature (iz toga proizlazi specifična molarna entalpija formacije) i koncentracija kemijskih vrsta, moguće je nekom od metoda (npr. Newton-Raphsonovom) izračunati iznos temperature u svakom vremenskom trenutku  $\tau$ .

Za vrijeme integracije sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) Gearovom metodom (ili nekom drugom) potrebno je riješiti jednadžbu (3.99) u svakom koraku da bi se dobila trenutačna vrijednost temperature.

### 3.3.3. Vrijeme zadržavanja

Rješavanje sistema reakcija opisanog sistemom običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) trebat će napraviti za svaki od kontrolnih volumena. Struja smjese konstantno ulazi u kontrolni volumen (sl. 3.6), u njemu se zadržava neko vrijeme, reagira, te zatim prelazi u susjedne kontrolne volumene. Za jednodimenzionalni problem prilično je jednostavno izračunati koliko se smjesa zadržava unutar kontrolnog volumena (treba napomenuti da se radi o homogenom modelu višekomponentnog strujanja) ako je poznata brzina:

$$\tau_x = \frac{2\Delta X_P}{|u_w + u_e|} = \frac{2\Delta X_P}{|u_{W_u} + u_{P_u}|} \quad (3.100)$$

Prijelaz na trodimenzionalni problem nije sasvim direktan. Moguće je recimo uzeti najmanje od tri vremena u tri smjera:

$$\tau_r = \min \left( \frac{2\Delta x_P}{|u_{W_u} + u_{P_u}|}, \frac{2\Delta y_P}{|v_{S_v} + v_{P_v}|}, \frac{2\Delta z_P}{|w_{D_w} + w_{P_w}|} \right) \quad (3.101)$$

ili se može uzeti da je vrijeme zadržavanja srednja vrijednost tih triju vremena (računata preko recipročnih vrijednosti):

$$\tau_r = \frac{1}{\frac{|u_{W_u} + u_{P_u}|}{2\Delta x_P} + \frac{|v_{S_v} + v_{P_v}|}{2\Delta y_P} + \frac{|w_{D_w} + w_{P_w}|}{2\Delta z_P}} \quad (3.102)$$

međutim razlika je uglavnom mala. Došlo bi u obzir, također, računati srednju vrijednost ponderiranjem masenim tokovima, ali se u tom slučaju javlja problem što su dani tokovi na granicama kontrolnog volumena. Pokazalo se da je sasvim zadovoljavajuće koristiti najjednostavniju varijantu danu izrazom (3.101).

### 3.3.4. Početne vrijednosti koncentracija i temperature

Integracija sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) zahtjeva poznavanje početnih vrijednosti koncentracija kemijskih vrsta i temperature za svaki od kontrolnih volumena. Prema slici 3.6 lako je moguće propisati iznos koncentracije na ulazu u kontrolni volumen  $C_{\alpha,0}$ . Ta je koncentracija naprosto jednaka izlaznoj koncentraciji iz prethodnog kontrolnog volumena:

$$C_{\alpha,0} = C_{\alpha,W} \quad (3.103)$$

Međutim, kako propisati iznos početne koncentracije za trodimenzionalni slučaj, kada može postojati nekoliko (do 6 u procesu rješavanja, a u konvergiranom slučaju do 5) ulaznih strana u kontrolni volumen. Slično kao i s vremenom zadržavanja potrebno je na neki način uzeti u

obzir različitu snagu pojedinih struja. Rješenje se javlja pogledom na opću jednadžbu bilance (3.25). Zamjenom općeg transportiranog svojstva  $\varphi$  masenim udjelima dobije se jednadžba bilance kemijske vrste  $\alpha$ :

$$a_{Y_{\alpha,P}} Y_{\alpha,P} = a_{Y_{\alpha,E}} Y_{\alpha,E} + a_{Y_{\alpha,W}} Y_{\alpha,W} + a_{Y_{\alpha,N}} Y_{\alpha,N} + a_{Y_{\alpha,S}} Y_{\alpha,S} + a_{Y_{\alpha,U}} Y_{\alpha,U} + a_{Y_{\alpha,D}} Y_{\alpha,D} + b_{Y_{\alpha}} \quad (3.104)$$

gdje se na desnoj strani jednadžbe nalaze ulazni tokovi (konvektivni i difuzivni) u kontrolni volumen (uz član izvora  $b$  koji, kao što je pokazano na primjeru temperature u prošloj glavi, ne utiče na način propisivanja ulazne koncentracije), a na lijevoj strani se nalazi izlazni tok. Prema tome se prosječna vrijednost masenog udjela na ulazu u kontrolni volumen može izračunati iz:

$$Y_{\alpha,0} = \frac{\sum_{np} a_{Y_{\alpha,np}} Y_{\alpha,np}^*}{\sum_{np} a_{Y_{\alpha,np}}} \quad (3.105)$$

gdje su sa zvjezdicom označene prethodne vrijednosti masenih udjela (vrijednosti iz prethodne iteracije). Početna vrijednost koncentracije  $C_{\alpha,0}$  se propisuje kao koncentracija koja odgovara prosječnom ulaznom masenom udjelu kemijske vrste  $Y_{\alpha,0}$ :

$$C_{\alpha,0} = \frac{\rho_0 Y_{\alpha,0}}{W_{\alpha}} \quad (3.106)$$

Na sličan se način uvrštavanjem entalpije u jednadžbu bilance za opće transportirano svojstvo  $\varphi$  (3.25) dobije prosječna ulazna specifična entalpija:

$$h_0 = \frac{\sum_{np} a_{h,np} h_{np}^*}{\sum_{np} a_{h,np}} \quad (3.107)$$

Tako se početna vrijednost temperature propisuje kao temperatura koja odgovara prosječnoj ulaznoj specifičnoj entalpiji:

$$T_0 = \frac{h_0}{c_{p,0}} + 273.16 \quad (3.108)$$

### 3.3.5. Spregnutost jednadžbi transporta i reaktivnog sistema

Integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) koji opisuje sistem reakcija, uz algebarsku petlju (3.99) kojom se računa temperatura u svakom vremenskom trenutku (koraku), te uz početne uvjete za koncentracije kemijskih vrsta  $C_{\alpha,0}$  (3.105-3.106) i temperaturu  $T_0$  (3.107-3.108) tijekom vremena zadržavanja smjese u kontrolnom volumenu  $\tau_r$  (3.101) dobiju se vrijednosti koncentracija i temperature,  $C_{\alpha,n}$  i  $T_n$ , na izlasku iz kontrolnog volumena.

Promjena koncentracije  $C_{\alpha}$  tijekom prolaska kroz kontrolni volumen mogla bi se predočiti kao razlika između koncentracije na kraju i na početku integracije podijeljena s vremenom zadržavanja:

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial \tau} = \frac{\int_0^{\tau_r} \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left( 1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) d\tau - C_{\alpha,0}}{\tau_r} = \frac{C_{\alpha,n} - C_{\alpha,0}}{\tau_r} \quad (3.109)$$

međutim taj pristup ima za posljedicu unošenje vrlo velike nestabilnosti u transportnu jednažbu kemijske vrste (2.234). Stabilnije se rješenje nameće direktno iz jednažbe bilance kemijske vrste (3.104). Integrira li se i izvorni član, brzina produkcije, dobije se:

$$\hat{S}_{Y_\alpha} \Delta V_P = \int_{\Delta V_P} \omega_\alpha dV = \omega_\alpha \Delta V_P \quad (3.110)$$

Za sada čitav se izvor ostavi na desnoj strani:

$$\sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, P} = \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, np} + \omega_\alpha \Delta V_P \quad (3.111)$$

Član na lijevoj strani je izlazni tok, a prvi član na desnoj strani je ulazni tok kemijske vrste. To isto vrijedi i kad masene udjele u pojedinim kontrolnim volumenima zamijenimo s masenim udjelima na početku i na kraju integracije prema izrazu (3.105):

$$\omega_\alpha \Delta V_P = \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, n} - \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, 0} = \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} \Delta Y_\alpha \quad (3.112)$$

gdje je  $\Delta Y_\alpha$  promjena masenog udjela kemijske vrste kao posljedica prostrujavanja reaktivnog sistema kroz kontrolni volumen i dobije se integracijom izraza za promjenu koncentracije (3.89):

$$\Delta Y_\alpha = Y_{\alpha, n} - Y_{\alpha, 0} = \frac{W_\alpha}{\rho_n} \int_0^{\tau_r} \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left( 1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) d\tau - Y_{\alpha, 0} \quad (3.113)$$

Uvrštavanjem izraza za brzinu produkcije kemijske vrste (3.112) u jednažbu bilance (3.111) te vrste po kontrolnom volumenu dobije se:

$$\sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, P} = \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, np} + \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} (Y_{\alpha, n} - Y_{\alpha, 0}) \quad (3.114)$$

Izvor se sada može rastaviti na pozitivni i negativni dio (što je potrebno prema kriteriju stabilnosti za slučaj da je produkcija negativna):

$$\hat{S}_{Y_\alpha} \Delta V_P = -S_{Y_\alpha, P} \Delta V_P Y_{\alpha, P} + S_{Y_\alpha, C} \Delta V_P = -S_{Y_\alpha, P} \Delta V_P Y_{\alpha, P} + b_{Y_\alpha} \quad (3.115)$$

te se dobiju, uz uvrštavanje izraza (3.105), sljedeći izrazi:

$$S_{Y_\alpha, P} = \frac{\sum_{np} a_{Y_\alpha, np} Y_{\alpha, np}^*}{\Delta V_P Y_{\alpha, P}^*} \quad (3.116)$$

$$b_{Y_\alpha} = \frac{W_\alpha}{\rho_n} \int_0^{\tau_r} \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{v'_{kj}} \left( 1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) d\tau \sum_{np} a_{Y_\alpha, np} \quad (3.117)$$

Rješavanje jednažbe (3.99) u svakom vremenskom koraku tijekom integracije će na kraju dati temperaturu smjese na izlasku iz kontrolnog volumena  $T_n$ . Entalpijska razlika može se

dobiti iz temperaturne (treba primijetiti da je kod razlike svejedno da li se radi o apsolutnim temperaturama ili ne):

$$\Delta h = c_p \Delta T = c_p (T_n - T_0) \quad (3.118)$$

Na sličan se način kao i s masenim udjelima može toplinski tok izgaranjem predstaviti s promjenom entalpije:

$$q_C''' \Delta V_P = \sum_{np} a_{h,np} \Delta h \quad (3.119)$$

Uvrštavanjem entalpije u jednadžbu bilance za opće transportirano svojstvo  $\varphi$  (3.25) dobije jednadžba bilance entalpije po kontrolnom volumenu:

$$a_{h,P} h_P = \sum_{np} a_{h,np} h_{np} + \sum_{np} a_{h,np} \Delta h + b_h \quad (3.120)$$

Rastavljanje nije potrebno jer će zbog egzoternosti izgaranja razlika entalpija biti uglavnom uvijek pozitivna. Prema tome izvorni član u bilanci entalpije izazvan izgaranjem iznosi:

$$b_{h,C} = \sum_{np} a_{h,np} c_p (T_n - 273.16) - \sum_{np} a_{h,np} h_{np}^* \quad (3.121)$$

gdje se  $T_n$  dobije rješavanjem jednadžbe (3.99).

### 3.3.6. Problemi oko stabilnosti sprege

Unatoč svim gore navedenim predostrožnostima ipak se čitava metoda pokazala relativno nestabilna, u proporcionalnoj vezi s brojem reakcija i kemijskih vrsta. Uzrokovano je to vrlo jakim nelinearnošću obzirom na vrijeme (tj. temperaturu) izraza za produkciju mase te njihovoj velikoj osjetljivosti o početnim uvjetima. Kako se početni uvjeti računaju modelom strujanja prvi uzrok nestabilnosti dolazi očito iz načina na koji se računaju konvektivno-difuzivni koeficijenti (3.26-3.31) u jednadžbama (3.105) i (3.107). Iz izraza (3.20) se može zaključiti da iznosi koeficijenta nisu dani kontinuiranom funkcionalnom zavisnošću nego diskretnom (uzvodna shema diferenciranja) te im je stoga prva derivacija nedefinirana u pojedinim točkama. I upravo u jednoj takvoj točki singulariteta je i primijećen vrlo jaki uzrok nestabilnosti, naročito kod izgaranja vodika koje je vrlo burno. Do problema dolazi kada na jednoj kontrolnoj površini kontrolnog volumena brzina prelazi tijekom iterativnog procesa iz pozitivne u negativnu i *vice versa*. Može se ustanoviti slijed događaja po kojem prvo smjesa ustrojava u kontrolni volumen, čime početne uvjete dovodi do točke naglog zapaljenja. Time se povećava temperatura i posljedično dolazi do obrata strujanja na toj kontrolnoj površini, čime se početni uvjeti značajno mijenjaju te se plamen gasi. Posljedično paljenje-gašenje smjese unutar kontrolnog volumena onemogućava konvergiranje iterativnog postupka rješavanja i dobivanje jednoznačnih distribucija fizikalnih veličina po ložištu.

Za početak je potrebno definirati razliku između “zapaljenog” i “ugašenog” kontrolnog volumena. Dovoljna je razlika početnih temperatura od svega nekoliko stupnjeva da bi se konačna temperatura kontrolnog volumena razlikovala za npr. 1500 K. Može se stanje više konačne temperature nazvati zapaljeno, a niže ugašeno.

Kontrolni volumen u kojem će nastati ovakva nestabilnost je takav u koji utiče vrlo jaki “hladni” konvektivni dotok (takav koji sam po sebi daje početne uvjete koji neće zapaliti

smjesu), a ostali su dotoci manji, topliji i dovode do povremenog paljenja. Ovaj se problem naročito javlja u blizini gorionika, i to kada su kontrolni volumeni veći.

Na te je kontrolne volumene primijenjena statistička metoda izbora stanja (upaljeno/ugašeno) tako da im se prvih nekoliko iteracija dopusti intermitirajuće paljenje, a da se nakon toga oni, ukoliko su većinom bili ugašeni, dalje drže prisilno ugašeni, i obrnuto. Takva je procedura za izgaranje vodika dala odlične rezultate. Prilikom proračuna izgaranja metana bilo je dodatnih problema zbog nesimetričnosti distribucija fizikalnih veličina (međurješenja) tijekom iterativnog procesa što je zahtijevalo vođenje statistike tijekom čitavog iterativnog postupka. Takva je statistika zahtijevala rješavanje sistema (3.89) u ugašenim kontrolnim volumenima, ali bi se, ukoliko dođe do zapaljenja, rješenje zanemarilo. Tek ako bi paljenje postalo statistički često (prethodno objašnjeno) prihvatilo bi se novo rješenje i volumen bi se držao prisilno zapaljenim. Da bi se omogućilo i naknadno gašenje, statistika se vodila i na početnim uvjetima, pa ako bi se statistički često događalo da bi početni uvjeti, unatoč prisilnoj zapaljenosti, doveli do gašenja, tada bi se volumen ugasio. Prisilno paljenje se postiže postavljanjem umjetno visoke početne temperature. Najčešće je bilo dovoljno postaviti tu temperatura na 50 K više od temperature zapaljenja goriva.

Osim toga kako su početni uvjeti u funkciji, među ostalim, i izgaranja u svim kontrolnim volumenima kroz koje je struja smjese prethodno prošla, bilo je neophodno podrelaksirati kako inicijalne temperature i koncentracije tako i rezultirajuće razlike (brzinu produkcije i toplinski tok izgaranjem). Za podrelaksaciju početnih vrijednosti korišten je faktor 0.4, a za brzine produkcije 0.8. Međutim podrelaksiranje volumenskog toplinskog toka izgaranjem vezano je na njegovu promjenu u odnosu na prethodnu iteraciju. Kod vrlo velikih promjena (koje odgovaraju intermitirajućem paljenju/ugašenju) korišten je faktor podrelaksacije 0.2, a kod manjih promjena je faktor težio prema 1.0 (dakle bez podrelaksiranja).

Moralo se voditi računa o tome da suma masenih udjela svih kemijskih vrsta bude 1, što nije automatski zadovoljeno tijekom iterativnog postupka, a od velikog je značaja za realnost rezultata integracije sistema običnih diferencijalnih jednadžbi (3.89) koje predstavljaju sistem reakcija. Taj se postupak provodio i na početnim masenim udjelima i na konačnima.

Kako tijekom iterativnog procesa nije općenito zadovoljena jednadžba kontinuiteta, nije zadovoljeno niti očuvanje atomarnih vrsta. Iako bi jednadžba kemijske vrste (2.234) to trebala osigurati na kraju iterativnog postupka, to će se primjenom ovakove sprege transportnih i kinetičkih procesa vrlo sporo i vrlo teško odvijati. Zbog toga je bilo neophodno uvesti korekciju masenih udjela kemijskih vrsta tako da zadovoljavaju, za svaki kontrolni volumen, uvjet održanja atomarnih vrsta. Faktori korekcije s vremenom teže k 1.0 što potvrđuje konzistentnost pristupa.

Da ne bi došlo do naglih eksplozija u modelu, što bi se moglo dogoditi tijekom iterativnog procesa, jer jedan te isti materijal može izgarati na više mjesta istovremeno, bilo je potrebno napraviti korekciju ukupne topline oslobođene u ložištu, tako da ona odgovara ukupnoj toplini oslobođenoj iz goriva između gorionika i izlaza iz ložišta.

Sve ove mehanizme je nažalost trebalo ugadati za svaki pojedini slučaj, iako su se gore navedeni faktori podrelaksacije pokazali umjereno osjetljivi, no to također vrijedi i za metodu kontrolnih volumena samu, gdje treba podesiti faktore podrelaksacija na pojedinim sistemima algebarskih jednadžbi.

Kako je u prvih nekoliko iteracija polje strujanja sasvim nerealno, pokazalo se poželjno prvo donekle stabilizirati isto (cca. 5 iteracija), a tek onda prići paralelnom rješavanju kinetike izgaranja.

Za početnu distribuciju kemijskih vrsta po ložištu, prije početka rješavanja kinetike, uzet je čisti zrak. Kad bi se početna distribucija postavila da odgovara smjesi na gorioniku, tada bi prilikom proračuna kinetike odjednom po čitavom ložištu došlo do snažnog izgaranja, koji bi u stvarnosti odgovaralo situaciji u kojoj je po čitavom ložištu smjesa kao na izlasku iz gorionika, koju se onda trenutačno zapali. Jedan veliki buuuuum. Postupak koji je primijenjen, puštanje smjese goriva i zraka na gorioniku tek nakon nekoliko iteracija, mogao bi se usporediti s nestacionarnim tako što svaka nova iteracija na neki način predstavlja novi vremenski korak. Međutim, kako se rubni uvjeti ne mijenjaju, rješava se stacionarni problem.

### 3.4. ZONALNA METODA PRORAČUNA PRIJENOSA TOPLINE ZRAČENJEM

Priroda prijenosa topline zračenjem sasvim je različita od druga dva načina: konvekcije i kondukcije. Energija se ne prenosi kretanjem i sudaranjem molekula nego elektromagnetskim zračenjem. Kao posljedica toga svaka točka u prostoru koja je vidljiva iz druge točke s njom i direktno izmjenjuje energiju. Transportni pristup prikazan u prethodnim glavama orijentiran je upravo na konvektivni i kondukcijski prijenos topline i nepodesan je za proračun prijenosa topline zračenjem.

Fluksne metode [66] razvijene su upravo s namjerom da se računanje prijenosa topline zračenjem prilagodi prirodi transportnih jednadžbi, ali s cijenom gubitka dijela informacije. Hottelova zonalna metoda [1, 3, 52, 67, 98, 109] je analitička metoda koja uključuje svu izmjenu topline zračenjem, ali je vrlo zahtjevna obzirom na kompjutersko vrijeme. Osim toga ograničena je na relativno jednostavne geometrije, a za slučaj sivih zidova (što je situacija u svim realnim problemima) potrebno je još riješiti dodatni sistem jednadžbi što značajno usporava proračun. Zonalna metoda se bazira na ideji podjele domene na pojedine zone plina i zidova, unutar kojih su radijativna svojstva i temperatura konstantni, što u osnovi odgovara metodi kontrolnih volumena i s njom je spojiva. Umjesto integriranja Hottelovih površina direktne izmjene nekoliko je autora [68-69, 96] predložilo statistički pristup Monte Carlo metodom. Ono što tu metodu čini posebno atraktivnom u računanju prijenosa topline zračenjem je to što se metoda bazira na praćenju zraka u čemu je upravo i priroda zračenja. Osim toga je metoda, što se tiče kompjuterskog vremena, gotovo neosjetljiva na dodatne zahtjeve poput sivih stijenki i komplicirane geometrije.

Lockwood i Shah [70] razvili su metodu diskretnog transfera (engl. *discrete transfer method*), uz modifikacije u [110] i dr., kombinaciju između zonalnog i fluks pristupa koristeći fluks metodu za proračun izmjene topline zračenjem između bliskih zona, a zonalnu metodu za proračun izmjene između dalekih zona. Treba još navesti i metodu diskretnih ordinata (engl. *discrete ordinates method*) koja je predložena [71] s namjerom da se maksimalno prilagodi metodi kontrolnih volumena.

Može se zaključiti usporedbom rezultata iz [72] i [73] da je zonalna metoda senzitivnija u slučaju računanja utjecaja probijanja vode u ložište (tj. lokalnog povećanja koncentracije

vodene pare) na prijenos topline zračenjem od fluks metode za čitav red veličine. Kako je u ložištima prijenos topline zračenjem daleko najvažniji vid prijenosa topline, a i jedan od najvažnijih fizikalnih procesa koji se odvijaju, potrebno mu je posvetiti veliku pažnju. Zbog toga se od samog početka prišlo primjeni zonalne metode.

U matematički model procesa u ložištu generatora pare ugrađena su oba načina računanja površina direktne izmjene među zonama, s time da je Hottelova zonalna metoda ograničena na modeliranje stijenki kao crnih površina i aproksimaciju realnog plina jednim sivim plinom, dok Monte Carlo metoda obuhvaća i sive površine te standardnu aproksimaciju realnog plina modelom tri siva plina.

### 3.4.1. Zonalna metoda

Zonalna metoda bazira se na podjeli ložišta na zone (plinske i površinske), uz pretpostavku konstantnih iznosa temperature i radijativnih svojstava po čitavoj zoni. Ako je broj zona dovoljno velik, greška koju ta pretpostavka unosi u sistem postaje zanemariva. Ta pretpostavka omogućuje da se integrali po čitavoj domeni (2.238-2.239) prikažu kao suma svih prinosa energije iz svih zona. Nakon integracije po kontrolnom volumenu jednadžbe transporta entalpije (2.235) član koji opisuje ukupni izvor topline zračenjem u kontrolnom volumenu (2.238) prema tome postaje:

$$\hat{S}_h \Delta V_P = \int_{\Delta V_P} q_R''' dV = -Q_g^- + Q_g^+ = -4\alpha\sigma T_P^4 \Delta V_P + \sum_i Q_{g_i \rightarrow P} + \sum_i Q_{s_i \rightarrow P} \quad (3.122)$$

što se može rastaviti na član koji u sebi sadrži potenciju temperature  $t$  (koja je u linearnoj zavisnosti od entalpije, 2.246), te ostatak izvora:

$$\hat{S}_h \Delta V_P = -S_{h,P} \Delta V_P h_P + S_{h,C} \Delta V_P = -S_{h,P} \Delta V_P h_P + b_{h,R} \quad (3.123)$$

Linearizacijom četvrte potencije temperature dobije se:

$$T_P^4 = 4(T_P^3)^* T_P - 3(T_P^4)^* \quad (3.124)$$

gdje zvjezdica (\*) označava vrijednost temperature koja je konstantna za vrijeme rješavanja linearnog sistema algebarskih jednadžbi (3.25) primijenjenog na entalpiju, a uzima se iz prethodnog koraka iteracije. Izvorni član postaje:

$$\begin{aligned} -S_{h,P} \Delta V_P h_P + b_{h,R} &= -4\alpha\sigma 4(T_P^3)^* \left( 1 + \frac{273.15}{(t_P)^*} \right) \Delta V_P \frac{h_P}{c_p} + \\ &4\alpha_p \sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_i Q_{g_i \rightarrow P} + \sum_i Q_{s_i \rightarrow P} \end{aligned} \quad (3.125)$$

Izvor se sada očigledno može podijeliti na dva dijela, jedan koji postaje dio centralnog koeficijenta, a drugi ostaje na desnoj strani jednadžbe transporta entalpije:

$$S_{h,P} = 4\alpha\sigma 4(T_P^3)^* \left( 1 + \frac{273.15}{(t_P)^*} \right) \frac{1}{c_p} \quad (3.126)$$

$$b_{h,R} = 4\alpha\sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_i Q_{g_i \rightarrow P} + \sum_i Q_{s_i \rightarrow P} \quad (3.127)$$

### 3.4.2. Hottelova zonalna metoda

Dotok energije u kontrolni volumen zračenjem prikazan je integralom u jednadžbi (2.238). Kako se u podintegralnoj funkciji nalazi temperatura, koja je nepoznata, potrebno bi bilo ovaj izraz numerički integrirati prilikom svakog proračuna koeficijenata temperaturne jednadžbe. Hottel i Cohen [67] su pretpostavili da je temperatura po volumenskim i površinskim zonama konstantna, pa uz tu pretpostavku izraz integrirali za svaku kombinaciju volumena i površina. Kako te podintegralne funkcije ne ovise o računatim fizikalnim veličinama, nego samo o geometriji, mogu se numerički integrirati unaprijed. Time je jednadžba (2.235) ponovo vraćena iz integralno-diferencijalnog u diferencijalni oblik, iako je ovisnost temperature u centralnom čvoru proširena sa susjednih čvorova na čitavu zračecu domenu. Takav je pristup potpuno kompatibilan s metodom kontrolnih volumena, koja domenu također dijeli na niz diskretnih volumena s konstantnim svojstvima.

Prema izrazu (2.143) infinitezimalni plinski volumen  $dV_g$  prima toplinski tok s infinitezimalne crne površine  $dA_s$ . Nakon integracije po kontrolnom volumenu  $\Delta V_p$  i po površini  $\Delta A_s$ , se dobije toplinski tok s površine na volumen:

$$Q_{s_i \rightarrow P} = \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta A_{s_i}} \sigma T_{s_i}^4 \frac{\cos \vartheta_{s_i} \alpha \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_i} dV_g \quad (3.128)$$

S obzirom na početnu pretpostavku o konstantnosti temperature stijenke po čitavoj kontrolnoj površini, može se ona izvući ispred integrala:

$$Q_{s_i \rightarrow P} = \sigma T_{s_i}^4 \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta A_{s_i}} \frac{\cos \vartheta_{s_i} \alpha \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_i} dV_g \quad (3.129)$$

Integral se može, uz pretpostavku konstantnog koeficijenta apsorpcije  $\alpha$  po čitavoj domeni, izračunati unaprijed, jer ovisi samo o geometrijskim faktorima:

$$\overline{s_i g_P} = \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta A_{s_i}} \frac{\cos \vartheta_{s_i} \alpha \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_i} dV_g \quad (3.130)$$

Na analogan se način iz izraza (2.144) koji definira toplinski tok s infinitezimalnog plinskog volumena  $dV_{g_1}$  na infinitezimalni plinski volumen  $dV_{g_2}$  integracijom po kontrolnom volumenu koji prima zračenje  $\Delta V_p$  i kontrolnom volumenu koji zračenje emitira  $\Delta V_{g_1}$ , uz pretpostavku konstantnosti temperature po kontrolnom volumenu, dobije toplinski tok s emitirajućeg na apsorbirajući kontrolni volumen:

$$Q_{g_1 \rightarrow P} = \sigma T_{g_1}^4 \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta V_{g_1}} \frac{\alpha^2 \tau(r)}{\pi r^2} dV_{g_1} dV_{g_2} \quad (3.131)$$

Površina direktne izmjene volumen-volumen, uz pretpostavku konstantnog koeficijenta apsorpcije po čitavoj domeni, može se proračunati unaprijed i iznosi:

$$\overline{g_i g_P} = \int_{\Delta V_p} \int_{\Delta V_{g_1}} \frac{\alpha^2 \tau(r)}{\pi r^2} dV_{g_1} dV_{g_2} \quad (3.132)$$

Ukupni toplinski tok zračenjem koji pristiže u kontrolni volumen  $\Delta V_p$  iz čitave zračee domene dobije se sumiranjem svih prinosa iz svih zona i iznosi:

$$Q_p^+ = \sum_i \overline{g_i g_p} \sigma T_{g_i}^4 + \sum_i \overline{s_i g_p} \sigma T_{s_i}^4 \quad (3.133)$$

Izvor topline zračenjem u kontrolnom volumenu nakon linearizacije četvrte potencije temperature i rastavljanja (3.126-3.127) na član koji u sebi sadrži potenciju temperature  $t$ , te ostatak izvora, postaje:

$$S_{h,p} = 4\alpha\sigma 4(T_p^3)^* \left( 1 - \frac{273.15}{(t_p)^*} \right) \frac{1}{c_p} \quad (3.134)$$

$$b_{h,R} = 4\alpha_p\sigma 3(T_p^4)^* \Delta V_p + \sum_i \overline{g_i g_p} \sigma T_{g_i}^4 + \sum_i \overline{s_i g_p} \sigma T_{s_i}^4 \quad (3.135)$$

gdje zvjezdica (\*) označuje vrijednost temperature koja se ne mijenja za vrijeme rješavanja linearnog sistema algebarskih jednadžbi (3.25) primijenjenog na entalpiju, a uzima se iz prethodnog koraka iteracije.

### Toplinska bilanca na kontrolnoj površini stijenke

Toplinska bilanca na infinitezimalnoj površini  $dA$  na stijenci može se kao i u volumenu bazirati na jednadžbi transporta entalpije (2.235) za stacionarno strujanje, s tim što nema izvora uzrokovanog izgaranjem, jer se izgaranje odvija samo u plinskom volumenu, te nema konvektivne izmjene topline. Ostala je izmjena topline kondukcijom kroz granični sloj, izmjena topline zračenjem te ponor topline na hladioca:

$$0 = n_j \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j} + q_R'' - q_W'' \quad (3.136)$$

Integracijom po kontrolnoj površini dobije se izraz za toplinski tok koji prelazi na hladioca:

$$\int_{\Delta A} q_W'' dA = \int_{\Delta A} n_j \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j} dA + \int_{\Delta A} q_R'' dA \quad (3.137)$$

$$Q_w = \zeta(\Delta s) \frac{\mu_{eff,g}}{\sigma_h} \frac{c_{p,g} t_g - c_{p,s} t_s}{\Delta s} \Delta A + Q_{s,b} \quad (3.138)$$

gdje je  $\Delta s$  udaljenost stijenke od prvog čvora u plinu,  $t_g$  temperatura u tom čvoru,  $t_s$  temperatura stijenke, a  $\zeta(\Delta s)$  je zidna funkcija za prijenos topline iz struje na zid. Prema iskustvu se pokazalo da za ložišta sasvim zadovoljavajuće koristiti konstantu  $\zeta = 0.1$ . Iznos konstante ovisi o udjelu prijenosa topline koji se na zid prenosi kroz granični sloj te o veličini kontrolnih volumena uz zid, te se određuje empirijski.

Prema izrazu (2.141) infinitezimalna površina stijenke ložišta  $dA_{s_2}$  prima toplinski tok s infinitezimalne površine  $dA_{s_1}$ . Nakon integracije po kontrolnoj površini stijenke  $\Delta A_p$  i po površini  $\Delta A_s$  se dobije toplinski tok s konačne površine na konačnu površinu, koji je uz pretpostavku zonalne metode o konstantnosti temperature stijenke po kontrolnoj površini:

$$Q_{s_1 \rightarrow s_2} = \sigma T_{s_1}^4 \int_{\Delta A_s} \int_{\Delta A_{s_1}} \frac{\cos \vartheta_{s_1} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_1} dA_{s_2} \quad (3.139)$$

Integral se može, uz pretpostavku konstantne apsorpcije  $\alpha$  po čitavoj domeni, izračunati unaprijed, jer ovisi samo o geometrijskim faktorima:

$$\overline{s_i s} = \int_{\Delta A_s} \int_{\Delta A_{s_1}} \frac{\cos \vartheta_{s_1} \cos \vartheta_{s_2} \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_1} dA_{s_2} \quad (3.140)$$

Na analogan način se iz izraza (2.142), koji definira toplinski tok s infinitezimalnog plinskog volumena  $dV_g$  na infinitezimalnu površinu stijenske  $dA_s$  integracijom po kontrolnoj površini  $\Delta A_p$  koja prima zračenje i kontrolnom volumenu koji zračenje emitira  $\Delta V_g$ , dobije, uz pretpostavku konstantnosti temperature po kontrolnom volumenu i apsorpcije po čitavoj domeni, toplinski tok s emitirajućeg na apsorbirajući kontrolni volumen:

$$Q_{g_i \rightarrow s} = \sigma T_{g_i}^4 \int_{\Delta A_s} \int_{\Delta V_{g_i}} \frac{\alpha \cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi r^2} dV_g dA_s \quad (3.141)$$

Direktna površina izmjene topline zračenjem volumen-površina prema tome iznosi:

$$\overline{g_i s} = \int_{\Delta A_s} \int_{\Delta V_{g_i}} \frac{\alpha \cos \vartheta_s \tau(r)}{\pi r^2} dV_g dA_s \quad (3.142)$$

Ukupni toplinski tok zračenjem koji prima kontrolna površina crne stijenske  $\Delta A_p$  iz čitave zračee domene se dobije sumiranjem toplinskih tokova sa svih plinskih volumena i svih površina stijenske:

$$Q_{s,b}^+ = \sum_i \overline{g_i s} \sigma T_{g_i}^4 + \sum_i \overline{s_i s} \sigma T_{s_i}^4 \quad (3.143)$$

Infinitezimalna površina crne stijenske  $dA_s$  emitira toplinski tok prema izrazu (2.135), te se nakon integracije po kontrolnoj površini  $\Delta A_p$ , uz konstantnu temperaturu po kontrolnoj površini, dobije toplinski tok kojim površina crne stijenske  $\Delta A_p$  zrači na domenu:

$$Q_{s,b}^- = \int_{\Delta A_s} \sigma T_s^4 dA_s = \sigma T_p^4 \Delta A_p \quad (3.144)$$

Ukupni izvor topline zračenjem u jednadžbi bilance topline na kontrolnoj površini prema tome iznosi:

$$Q_{s,b} = -Q_{s,b}^- + Q_{s,b}^+ = -\sigma T_p^4 \Delta A_p + \sum_i \overline{g_i s} \sigma T_{g_i}^4 + \sum_i \overline{s_i s} \sigma T_{s_i}^4 \quad (3.145)$$

Ukupni toplinski tok na kontrolnu površinu  $\Delta A_p$  ekranskog zida ložišta može se proračunati po sljedećem izrazu:

$$Q_w = \zeta(\Delta s) \frac{\mu_{\text{eff},g} c_{p,g} t_g - c_{p,s} t_s}{\sigma_h \Delta s} \Delta A - \sigma T_p^4 \Delta A_p + \sum_{g_1} \overline{g_1 s_2} \sigma T_{g_1}^4 \quad (3.146)$$

### 3.4.3. Monte Carlo metoda

Hottelova zonalna metoda je analitička metoda koja uzima u obzir sav radijativni prijenos, te postaje kompjuterski vrlo skupa, i to već za sasvim realnu željenu točnost, a broj potrebnih operacija raste s kvadratom broja kontrolnih volumena. Ako se žele u računanje uključiti sivi zidovi potrebno je riješiti dodatni sistem jednadžbi s brojem nepoznanica koji odgovara broju

kontrolnih volumena. Osim toga moguće ju je direktno primijeniti samo za relativno jednostavne geometrije. Svaka eventualna nadogradnja značajno komplicira metodu.

Kao postupak koji otklanja te nedostatke pruža se Monte Carlo metoda [68-69, 96], statistička metoda u kojoj se prati određeni broj energetskih kvantova-zraka (engl. *ray tracing*). Ta je metoda jednostavna za implementaciju za bilo kakvu geometriju i za bilo koji dodatni stupanj slobode u modeliranju zračenja, a broj operacija, iako u početku viši nego u Hottelovoj zonalnoj metodi, raste samo linearno s brojem kontrolnih volumena. U ovoj je disertaciji metoda primijenjena prema prethodnom radu na modelu zračenja iznesenom u [94] uz kasnija poboljšanja prema [96, 73, 111, 95].

Volumenski toplinski tok zračenjem  $q_R'''$  (2.238) predstavlja razliku između apsorbirane energije u volumenu (koja je emitirana iz čitave domene) i energije emitirane iz istog volumena. Nakon integracije po kontrolnom volumenu postaje kao što je već ranije pokazano:

$$\hat{S}_{h,R}\Delta V_P = \int_{\Delta V_P} q_R''' dV = -Q_g^- + Q_g^+ = -4K_P\sigma T_P^4\Delta V_P + \sum_i Q_{a,i} \quad (3.147)$$

Za razliku od implementacije Hottelove zonalne metode ovdje se koeficijent apsorpcije računa ovisno o lokalnim uvjetima, te će se zato označiti s  $K$ , a ne s  $\alpha$ . Također, kako je za Monte Carlo metodu svejedno da li se radi o emitiranju sa stijenke ili iz plina, posljednji član u jednadžbi,  $\sum_i Q_{a,i}$ , predstavlja energetski prinos iz čitave domene.

Prema Monte Carlo metodi energija emitirana zračenjem iz svakog kontrolnog volumena se raspodjeljuje na određeni broj diskretnih energetskih paketa (kvant, zraka, engl. *bundle*), koji se emitiraju iz slučajne pozicije u kontrolnom volumenu, pod slučajnim kutom. Nakon slučajne duljine puta, paket-zraka biva apsorbiran ili u plinu (može i u originalnom kontrolnom volumenu) ili na stijenci.

Tijekom iterativne procedure distribucija temperatura (pretpostavljena ili izračunata u prethodnoj iteraciji) u načelu ne zadovoljava jednadžbu transporta entalpije, što u pravilu dovodi do spore konvergencije iterativnog postupka k rješenju. Stoga je pretpostavljeno da se zraka apsorbirana u kontrolnom volumenu momentalno reemitira (u slučajnom smjeru pod slučajnim kutom) i na taj se način automatski osigura održanje energije u domeni. Tada je potrebno dodatno emitirati iz svakog kontrolnog volumena samo onu energiju predstavljenu s izvorom topline zračenjem  $-\hat{S}_{h,R}\Delta V_P$  u jednadžbi (3.147).

Linearni sistem algebarskih jednadžbi (3.25) primjeni se na entalpiju:

$$a_P h_P = \sum_{np} a_{np} h_{np} + q_C''' \Delta V_P + \hat{S}_{h,R} \Delta V_P \quad (3.148)$$

iz čega se može izračunati broj zraka emitiranih iz kontrolnog volumena, svaka s energijom  $Q_{bundle}$ :

$$n_{g,P} = \frac{\sum_{np} a_{np} h_{np} - a_P h_P + q_C''' \Delta V_P}{Q_{bundle}} \quad (3.149)$$

Ako je na stijenci temperatura dana kao rubni uvjet tada je moguće broj zraka izračunati na direktan način (kako se paket apsorbiran na stijenci ne reemitira jer će većina energije biti odnesena hladiocem):

$$n_{s,P} = \frac{\varepsilon \Delta A_P \sigma T_P^4}{Q_{bundle}} \quad (3.150)$$

Ukupni toplinski tok odnesen hladiocem na kontrolnoj površini  $\Delta A_P$  ekranskog zida ložišta može se proračunati prema prethodno izvedenom izrazu (3.146) za Hottelovu metodu:

$$Q_w = \zeta(\Delta s) \frac{\mu_{eff,g}}{\sigma_h} \frac{c_{p,g} t_g - c_{p,s} t_s}{\Delta s} \Delta A - \varepsilon \sigma T_P^4 \Delta A_P + \sum_i Q_{a,i} \quad (3.151)$$

Energija koju sa sobom nosi zraka  $Q_{bundle}$ , dobije se podjelom ukupne energije izmijenjene zračenjem u ložištu sa željenim brojem zraka  $n$ . Za tipični slučaj broj zraka za čitavo ložište se kreće oko  $10^7$ .

$$Q_{bundle} = \frac{H_{kem} + H_u - H_i - Q_{konv} + \sum_i \varepsilon \Delta A_P \sigma T_P^4}{n} \quad (3.152)$$

gdje je  $H_{kem}$  kemijska energija koja se oslobađa u ložištu,  $H_u$  i  $H_i$  su respektivno osjetne topline na ulazu i izlazu iz ložišta a  $Q_{konv}$  je prijenos topline konvekcijom na zid.

Zrake se kroz ložište prate upotrebom pseudo-slučajnih brojeva, i to tri za odabir pozicije, dva za kut smjera, i po jedan za svaki kontrolni volumen u koji zraka uđe. Ako je put apsorpcije, izračunat na osnovi lokalnog koeficijenta apsorpcije, duži od geometrijskog puta zrake određenog slučajnim brojem, tada se zraka ne apsorbira u kontrolnom volumenu nego biva proslijeđena u sljedeći. Ako se zraka apsorbira u kontrolnom volumenu ona se momentalno reemitira, iako se u stvari radi o potpuno novom paketu-zraci. Ako pak zraka udari u stijenku tada apsorpcija ovisi o odnosu slučajnog broja i apsorptivnosti površine.

### Model tri siva plina

Radijativna svojstva plina ovise pretežno o udjelu troatomnih plinova (i višeatomnih, ali njihov je udio zanemariv) u smjesi ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SO}_2$ ). Model tri siva plina daje korelaciju uz pomoću koje (i konstanti u tablici 3.7) se može izračunati koeficijent apsorpcije za lokalni sastav smjese i temperaturu:

$$\varepsilon_g = \sum_{n=1}^3 (b_{1,n} + b_{2,n} T_P) (1 - e^{-k_n (p_{\text{CO}_2} + p_{\text{H}_2\text{O}} + p_{\text{SO}_2}) L}) \quad (3.153)$$

Tablica 3.7. Konstante modela tri siva plina [112]

$n$	$k_n$	$b_{1,n}$	$b_{2,n}$
1	0	0.130	0.000265
2	0.835	0.595	-0.000150
3	26.25	0.275	-0.000115

Pod uvjetom da se ista jednadžba može upotrijebiti i za proračun apsorptivnosti plina  $\alpha_g$ , da je  $T_p$  srednja temperatura kontrolnog volumena koji apsorbira,  $p_{CO_2} + p_{H_2O} + p_{SO_2}$  suma parcijalnih tlakova troatomnih plinova, a  $L$  je srednja duljina puta zrake, koeficijent apsorpcije se može izračunati iz:

$$K = -\frac{\ln(1-\alpha_g)}{L} \quad (3.154)$$

### 3.5. INTEGRACIJA SKALARNIH JEDNADŽBI

Preostaje još ukratko prikazati kako se integriraju skalarnе jednadžbe, tj. jednadžbe kemijskih vrsta i entalpije. Za razliku od impulsnih jednadžbi, ove se jednadžbe integriraju na centralnoj mreži (sl. 3.1).

Opća diferencijalna transportna jednadžba (3.1) za skalarno svojstvo  $\varphi$  nakon integracije po kontrolnom volumenu daje algebarsku jednadžbu (3.25) za svaki kontrolni volumen, gdje su koeficijenti dani u izrazima (3.26-3.32, 3.36). Potrebno je još definirati jačinu konvekcije i difuzije (3.12) u tim izrazima, što se može učiniti na primjeru koeficijenta  $a_{\varphi,E}$  (3.26):

$$a_{\varphi,E} = \left( \left\| -F_e, 0 \right\| + D_e \right) A_e = \left( \left\| -\rho_e u_e, 0 \right\| + \frac{\Gamma_{\varphi,e}}{\delta x_e} \right) A_e \quad (3.155)$$

gdje je brzina  $u_e$  u stvari brzina u čvoru mreže pomaknute u smjeru osi  $x$  (tabl. 3.1). Uz geometrijski izraz (3.13) i zamjenu koeficijenta difuzije koeficijentom viskoznosti, te uz njegovu linearnu interpolaciju, dobije se:

$$a_{\varphi,E} = \left( \left\| -\rho_{P_u} u_{P_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,E}}{\sigma_{\varphi}(\Delta x_P + \Delta x_E)} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.156)$$

Na analogan način dobiju se i ostali koeficijenti:

$$a_{\varphi,W} = \left( \left\| \rho_{W_u} u_{W_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,W}}{\sigma_{\varphi}(\Delta x_P + \Delta x_W)} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.157)$$

$$a_{\varphi,N} = \left( \left\| -\rho_{P_v} v_{P_v}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,N}}{\sigma_{\varphi}(\Delta y_P + \Delta y_N)} \right) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.158)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,S} = \left( \left\| \rho_{S_v} \mathbf{v}_{S_v}, \mathbf{0} \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,S}}{\sigma_{\varphi}(\Delta \mathbf{y}_P + \Delta \mathbf{y}_S)} \right) \Delta \mathbf{x}_P \Delta \mathbf{z}_P \quad (3.159)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,U} = \left( \left\| -\rho_{P_w} \mathbf{w}_{P_w}, \mathbf{0} \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,U}}{\sigma_{\varphi}(\Delta \mathbf{z}_P + \Delta \mathbf{z}_U)} \right) \Delta \mathbf{x}_P \Delta \mathbf{y}_P \quad (3.160)$$

$$\mathbf{a}_{\varphi,D} = \left( \left\| \rho_{D_w} \mathbf{w}_{D_w}, \mathbf{0} \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,D}}{\sigma_{\varphi}(\Delta \mathbf{z}_P + \Delta \mathbf{z}_D)} \right) \Delta \mathbf{x}_P \Delta \mathbf{y}_P \quad (3.161)$$

Uz propisivanje turbulentnog Prandtl-Schmidtovog broja za svako pojedino transportno svojstvo dobiveni su algebarski izrazi koji obuhvaćaju mehanizme konvekcije i difuzije za sve skalarne jednačbe, tj. jednačbe kemijskih vrsta i entalpije. Međutim izvorni se članovi moraju integrirati za svaku skalarnu jednačbu ponaosob, jer su mehanizmi koji su opisani tim izvornim članovima različiti za svaku od diferencijalnih jednačbi. Ti su mehanizmi, kao i procedure njihove diskretizacije, već uglavnom opisani te ovdje slijedi samo njihova rekapitulacija i uklapanje u dani sistem.

Tablica 3.8. Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije masenog udjela kemijske vrste  $\alpha$ 

**Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije masenog udjela kemijske vrste  $\alpha$**

$$a_{Y_{\alpha},P} Y_{\alpha,P} = \sum_{np} a_{Y_{\alpha},np} Y_{\alpha,np} + b_{Y_{\alpha}} \quad (3.162a)$$

gdje su:

$$a_{Y_{\alpha},E} = \left( \left\| -\rho_{P_u} u_{P_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,E}}{\sigma_{\alpha}(\Delta X_P + \Delta X_E)} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.162b)$$

$$a_{Y_{\alpha},W} = \left( \left\| \rho_{W_u} u_{W_u}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,W}}{\sigma_{\alpha}(\Delta X_P + \Delta X_W)} \right) \Delta y_P \Delta z_P \quad (3.162c)$$

$$a_{Y_{\alpha},N} = \left( \left\| -\rho_{P_v} v_{P_v}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,N}}{\sigma_{\alpha}(\Delta y_P + \Delta y_N)} \right) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.162d)$$

$$a_{Y_{\alpha},S} = \left( \left\| \rho_{S_v} v_{S_v}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,S}}{\sigma_{\alpha}(\Delta y_P + \Delta y_S)} \right) \Delta x_P \Delta z_P \quad (3.162e)$$

$$a_{Y_{\alpha},U} = \left( \left\| -\rho_{P_w} w_{P_w}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,U}}{\sigma_{\alpha}(\Delta z_P + \Delta z_U)} \right) \Delta x_P \Delta y_P \quad (3.162f)$$

$$a_{Y_{\alpha},D} = \left( \left\| \rho_{D_w} w_{D_w}, 0 \right\| + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,D}}{\sigma_{\alpha}(\Delta z_P + \Delta z_D)} \right) \Delta x_P \Delta y_P \quad (3.162g)$$

$$a_{Y_{\alpha},P} = \sum_{np} a_{Y_{\alpha},np} + S_{Y_{\alpha},P} \Delta V_P \quad (3.162h)$$

$$S_{Y_{\alpha},P} = \frac{\sum_{np} a_{Y_{\alpha},np} Y_{\alpha,np}^*}{\Delta V_P Y_{\alpha,P}^*} \quad (3.162i)$$

$$b_{Y_{\alpha}} = \frac{W_{\alpha}}{\rho_n} \int_0^{\tau_r} \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) k_{f,j} \prod_{k=1}^{n_{\alpha}} c_k^{v_{kj}} \left( 1 - \frac{1}{K_{C,j}} \prod_{k=1}^{n_{\alpha}} c_k^{(v''_{kj} - v'_{kj})} \right) d\tau \sum_{np} a_{Y_{\alpha},np} \quad (3.162j)$$

$$k_{f,j} = k_{0,j} T^{\alpha_j} e^{-\frac{E_{a,j}}{RT}} \quad (3.162k)$$

$$K_{C,j} = (RT)^{-\sum_{k=1}^{n_{\alpha}} (v''_{k,j} - v'_{k,j})} e^{\left[ a'_{1,k}(1-\ln T) - \frac{a'_{2,k}}{2} T - \frac{a'_{3,k}}{6} T^2 - \frac{a'_{4,k}}{12} T^3 - \frac{a'_{5,k}}{20} T^4 + \frac{a'_{6,k}}{T} - a'_{7,k} \right]} \quad (3.162l)$$

$$\tau_r = \frac{1}{\frac{|u_{W_u} + u_{P_u}|}{2\Delta x_P} + \frac{|v_{S_v} + v_{P_v}|}{2\Delta y_P} + \frac{|w_{D_w} + w_{P_w}|}{2\Delta z_P}} \quad (3.162m)$$

### 3.5.1. Jednadžbe kemijskih vrsta

Jednadžba transporta kemijske vrste (2.234) je skalarna jednadžba koja nakon integracije po kontrolnom volumenu daje sistem algebarskih jednadžbi bilance za svaku kemijsku vrstu prema (3.25):

$$\mathbf{a}_{Y_{\alpha},P} Y_{\alpha,P} = \mathbf{a}_{Y_{\alpha},E} Y_{\alpha,E} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},W} Y_{\alpha,W} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},N} Y_{\alpha,N} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},S} Y_{\alpha,S} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},U} Y_{\alpha,U} + \mathbf{a}_{Y_{\alpha},D} Y_{\alpha,D} + \mathbf{b}_{Y_{\alpha}} \quad (3.163)$$

Uz propisani Prandtl-Schmidtov broj  $\sigma_{\alpha}$  (2.231) koeficijenti koji opisuju konvektivni i difuzivni mehanizam dani su u izrazima (3.156-3.161). Potrebno je još prikazati što se događa s izvornim članom, brzinom produkcije (2.236) koji proizlazi iz sprege sa sistemom koji opisuje kinetika izgaranja. Taj se član integrira na način kako je to pokazano u glavi 3.3.5 a kao rezultat dobiju se dva izvorna člana, jedan koji se dodaje centralnom koeficijentu (3.116) i drugi koji ostaje na desnoj strani jednadžbe bilance (3.117).

Sistem algebarskih jednadžbi (3.163) primijenjen na sve kemijske vrste obuhvaćene modelom, dat će uz poznate distribucije triju komponenti vektora brzine  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{w}$ , distribucije temperature  $T$  i gustoće  $\rho$ , te uz propisivanje modela izgaranja (brzine izgaranja  $K_{f,j}$ , konstante ravnoteže  $K_{c,j}$  i stehiometrijski koeficijenti  $v'_{\alpha,j}$  i  $v''_{\alpha,j}$ ), distribuciju masenih udjela (koncentracija) tih vrsta po ložištu.

### 3.5.2. Jednadžba temperature

Jednadžba transporta entalpije (2.235) je skalarna jednadžba koja nakon integracije po kontrolnom volumenu daje sistem algebarskih jednadžbi bilance entalpije prema (3.25):

$$\mathbf{a}_{h,P} h_P = \mathbf{a}_{h,E} h_E + \mathbf{a}_{h,W} h_W + \mathbf{a}_{h,N} h_N + \mathbf{a}_{h,S} h_S + \mathbf{a}_{h,U} h_U + \mathbf{a}_{h,D} h_D + \mathbf{b}_h \quad (3.164)$$

Uz dani Prandtl-Schmidtov broj  $\sigma_h$ , tj. turbulencijski Prandtlov broj  $Pr$  (2.230), koeficijenti koji opisuju konvektivni i difuzivni mehanizam dani su u izrazima (3.156-3.161). Potrebno bi bilo još prikazati što se događa s izvornim članovima, volumenskim toplinskim tokom izgaranjem (2.237) i zračenjem. Međutim pokazalo se spretnije rješavati jednadžbu temperature, koja se već nalazi u izvornom članu koji opisuje zračenje. Zamjenom entalpije s  $c_p t$  (2.246) dobije se jednadžba temperature:

$$\mathbf{a}_{h,P} c_{p,P} t_P = \sum_{np} \mathbf{a}_{h,np} c_{p,np} t_{np} + \mathbf{b}_h \quad (3.165)$$

Radi kraćeg pisanja uvode se posebni koeficijenti temperaturne jednadžbe:

$$\mathbf{a}_{t,P} t_P = \sum_{np} \mathbf{a}_{t,np} t_{np} + \mathbf{b}_t \quad (3.166)$$

Koeficijent  $\mathbf{a}_{t,E}$  (a tako i svi ostali susjedni koeficijenti) u odnosu na  $\mathbf{a}_{h,E}$  iznosi:

$$\mathbf{a}_{t,E} = \mathbf{a}_{h,E} c_{p,E} \quad (3.167)$$

Centralni koeficijent temperaturne jednadžbe  $\mathbf{a}_{t,P}$  dobije se zbrajanjem koeficijenata za entalpijsku jednadžbu (a ne za temperaturnu jednadžbu) i množenjem čitavog izraza s centralnom specifičnom toplinom:

$$\mathbf{a}_{t,P} = \mathbf{a}_{h,P} c_{p,P} = \sum_{np} \mathbf{a}_{h,np} c_{p,np} + \mathbf{S}_{h,P} c_{p,P} \Delta V \quad (3.168)$$

Tablica 3.9. Sistem algebarskih jednadžbi za proračun temperature  $t$ 

<b>Sistem algebarskih jednadžbi za proračun distribucije temperature <math>t</math></b>	
$a_{t,P}t_P = \sum_{np} a_{t,np}t_{np} + b_{t,R} + b_{t,C}$	(3.169a)
gdje su:	
$a_{t,E} = a_{h,E}c_{p,E} = \left( \left\  -\rho_{P_u} u_{P_u}, 0 \right\  + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,E}}{\sigma_h(\Delta X_P + \Delta X_E)} \right) \Delta y_P \Delta z_P c_{p,E}$	(3.169b)
$a_{t,W} = a_{h,W}c_{p,W} = \left( \left\  \rho_{W_u} u_{W_u}, 0 \right\  + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,W}}{\sigma_h(\Delta X_P + \Delta X_W)} \right) \Delta y_P \Delta z_P c_{p,W}$	(3.169c)
$a_{t,N} = a_{h,N}c_{p,N} = \left( \left\  -\rho_{P_v} v_{P_v}, 0 \right\  + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,N}}{\sigma_h(\Delta y_P + \Delta y_N)} \right) \Delta x_P \Delta z_P c_{p,N}$	(3.169d)
$a_{t,S} = a_{h,S}c_{p,S} = \left( \left\  \rho_{S_v} v_{S_v}, 0 \right\  + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,S}}{\sigma_h(\Delta y_P + \Delta y_S)} \right) \Delta x_P \Delta z_P c_{p,S}$	(3.169e)
$a_{t,U} = a_{h,U}c_{p,U} = \left( \left\  -\rho_{P_w} w_{P_w}, 0 \right\  + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,U}}{\sigma_h(\Delta z_P + \Delta z_U)} \right) \Delta x_P \Delta y_P c_{p,U}$	(3.169f)
$a_{t,D} = a_{h,D}c_{p,D} = \left( \left\  \rho_{D_w} w_{D_w}, 0 \right\  + \frac{\mu_{eff,P} + \mu_{eff,D}}{\sigma_h(\Delta z_P + \Delta z_D)} \right) \Delta x_P \Delta y_P c_{p,D}$	(3.169g)
$a_{t,P} = a_{h,P}c_{p,P} = \sum_{np} a_{h,np} c_{p,P} + S_{t,P} \Delta V$	(3.169h)
$b_{t,C} = \sum_{np} a_{h,np} c_{p,P} (T_n - 273.16) - \sum_{np} a_{t,np} t_{np}^*$	(3.169i)
$\sum_{k=1}^{n_\alpha} \left[ C_k (\Delta H_{f,k}^0)_T \right] = \text{const} \longrightarrow T_n$	(3.169j)
$S_{t,P} = 4\alpha\sigma 4(T_P^3)^* \left( 1 + \frac{273.15}{t_P^*} \right)$	(3.169k)
Hottelova zonalna metoda:	
$b_{t,R} = 4\alpha\sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_{g_1} \overline{g_1 g_2} \sigma T_{g_1}^4 + \sum_{s_1} \overline{s_1 g_2} \sigma T_{s_1}^4$	(3.169l)
$\overline{s_i g_P} = \int_{\Delta V_P} \int_{\Delta A_{s_i}} \frac{\cos \vartheta_{s_i} \alpha \tau(r)}{\pi r^2} dA_{s_i} dV_g$	(3.169m)
$\overline{g_i g_P} = \int_{\Delta V_P} \int_{\Delta V_{g_i}} \frac{\alpha^2 \tau(r)}{\pi r^2} dV_{g_1} dV_{g_2}$	(3.169n)
Monte Carlo metoda:	
$b_{t,R} = 4\alpha\sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_i Q_{a,i}$	(3.169o)

Pristup integraciji izvora izgaranjem prikazan je u glavi 3.3.5 a izvora zračenjem u glavi 3.4. Kao rezultat integracije izvora izgaranjem dobije se jedan član (3.121) koji prelaskom s koeficijentata iz entalpijske jednadžbe na koeficijente za jednadžbu temperature postaje:

$$b_{t,C} = \sum_{np} a_{h,np} c_{p,P} (T_n - 273.16) - \sum_{np} a_{t,np} t_{np}^* \quad (3.170)$$

Kao rezultat zračenja javljaju se dva izvorna člana. Za slučaj primjene Hottelove zonalne metode to su izraz (3.126) koji se dodaje centralnom koeficijentu, uz transformaciju s entalpije na temperaturu:

$$S_{t,P} = S_{h,P} c_{p,P} = 4\alpha\sigma 4(T_P^3)^* \left( 1 + \frac{273.15}{t_P^*} \right) \quad (3.171)$$

te drugi (3.135) koji ostaje na desnoj strani jednadžbe bilance, uz uvjet  $b_{h,R} = b_{t,R}$ . U slučaju Monte Carlo metode član koji se dodaje centralnom koeficijentu ostaje isti, a slobodni član iznosi:

$$b_{t,R} = 4\alpha\sigma 3(T_P^4)^* \Delta V_P + \sum_i Q_{a,i} \quad (3.172)$$

### 3.6. RUBNI UVJETI

Sistemi algebarskih jednadžbi razvijeni prethodno u ovome poglavlju postavljaju funkcionalnu zavisnost neke fizikalne veličine  $\varphi$  u nekom čvoru o šest susjednih čvorova, po jednim sa svake strane prizmatičnog kontrolnog volumena. Kada je taj čvor posljednji u nizu prije granice domene, potrebno je propisati rubnu vrijednost fizikalne veličine  $\varphi_B$  koja je susjedna čvoru  $\varphi_P$ . Postoje tri različita tipa granice. Na ulaznoj granici moraju biti propisane sve transportirane veličine osim tlaka, te još neke termodinamičke veličine. Na zidu koji je nepropusna granica nema konvekcije, nego je transport veličine isključivo vođen difuzijom. Treći tip granice koji se pojavljuje u ovom modelu ložišta je izlazni presjek. Pregled rubnih uvjeta dan je u tab. 3.10.

Rubni kontrolni volumen, onaj koji sadrži čvor na granici, je volumen infinitezimalne debljine. Tom pretpostavkom se postiže analognost rubnog čvora s onima iz domene. Udaljenost između čvora na granici i njemu najbližeg u domeni je pola koraka mreže u tome smjeru. Međutim, izlazni rubni kontrolni volumen nije infinitezimalno tanak, jer je potrebno računati normalnu brzinu na izlazu.

Na ulaznoj granici moraju biti definirane sve transportirane fizikalne veličine osim tlaka. U protivnom model nije dovoljno opisan. Ulazni rubni kontrolni volumen je infinitezimalno tanak.

Tlačna jednadžba koja iako ima izgled općeg algebarskog sistema jednadžbi za proračun fizikalne veličine  $\varphi$ , dobivena je iz jednadžbe kontinuiteta. Prilikom integracije iste prinos mase sa strane rubnog čvora se ne zamjenjuje impulsnom jednadžbom, nego se ostavlja kakav jest. Kako je poznata brzina u rubnom čvoru, nije potrebno definirati tlak niti na ulazu niti na zidu. Kako je brzina na izlazu nepoznata, tu se tlak mora propisati.

Tablica 3.10. Pregled rubnih uvjeta

veličina	ulaz	izlaz	zid
$c_P$	kao i u domeni	kao i u domeni	$c_P = c_P(T)$ , za zrak
$\rho$	nije definirano	$\rho = \rho_{ref}$	nije definirano
$T$	propisati	linearna ekstrapolacija	propisati
$u$	propisati	nulti gradijent, za normalnu komponentu $u = 0$ , za ostale komponente	0
$v$	propisati	<i>idem.</i>	0
$w$	propisati	<i>idem.</i>	0
$Y$	propisati	nulti gradijent	0
$\varepsilon$	propisati, 0.88	propisati, 0.4	propisati, 0.88
$\zeta$	1	1	propisati, 0.1
$\mu$	kao i u domeni	kao i u domeni	kao i u domeni
$\rho$	kao i u domeni	kao i u domeni	$\rho = \rho(T)$ , za zrak

Po čitavom izlaznom presjeku normalna brzina mora stvarno izlaziti iz ložišta. Kako je brzina na rubu nepoznata, recirkulacijom na izlazu došlo bi do nerealističnih rezultata unutar domene ili numerička procedura uopće ne bi konvergirala k rješenju [113-114]. Ako je zadovoljen uvjet o izlaznoj brzini, neće biti konvektivnog transporta s čvora na granici na posljednji čvor u domeni. Problem difuzije se može riješiti na više načina. Difuzija se kompletno može zanemariti, čime se doduše pravi greška. Takvo rješenje predlaže Patankar [27]. Drugo rješenje koje se nudi je nulti gradijent veličine  $\phi_B$  na granici. Treći je način, koji je za difuzivni transport temperature odabran za potrebe ovoga rad, linearna ekstrapolacija temperature u čvoru na izlaznoj granici pomoću vrijednosti u dva zadnja čvora u domeni.

Prilikom proračuna radijativnog prijenosa topline na izlaznu površinu treba uzeti u obzir i činjenicu da je izlaz u stvari šupljina koja prima više energije zračenjem nego što bi se dobilo pomoću gornje pretpostavke o rubnoj temperaturi. Zato je za potrebe radijativnog transporta potrebno propisati nižu temperaturu nego što se izračuna ekstrapolacijom.

Za komponente brzina koje nisu normalne na izlazni presjek uzima se da je vrijednost u rubnom čvoru nula, što odgovara računanju uz zanemarenje difuzije. Međutim brzina normalna na izlaz u čvoru na granici domene se mora računati zbog pomaknute mreže, a tek ona sljedeća predstavlja rubni uvjet. Za propisivanje brzine u rubnom čvoru, susjednom izlaznoj brzini, upotrebljena je pretpostavka o nultom gradijentu.

Tlačna jednadžba je u slučaju konstantne gustoće (u stvari neovisne o tlaku) sasvim linearna. Tako je moguće dobiti samo razlike tlakova. Konstanta  $C$  dodana tlaku po čitavoj domeni također je rješenje tlačne jednadžbe. Primjenom iterativnih metoda za rješavanje sistema dobiveno će rješenje ovisiti o početnoj pretpostavci polja tlaka. Ovo je moguće izbjeći fiksiranjem jedne vrijednosti tlaka u domeni ili zadavanjem tlaka na izlazu, koji sudjeluje kako u impulsnoj jednadžbi za brzinu normalnu na izlazni presjek, a tako i u samoj tlačnoj jednadžbi. U ovome radu tlak je usidren dvojako. Propisivanjem tlaka na izlazu te ovisnošću gustoće o tlaku. Međutim kod proračunavanja problema prirodne konvekcije u šupljini, dakle situacije gdje nema izlazne granice, i gdje su razlike tlakova tako male da nema govora o

utjecaju tlaka na gustoću, apsolutni će iznos proračunatog tlaka isključivo ovisiti o njegovoj početno pretpostavljenoj distribuciji.

Brzina normalna na nepropusnu granicu kontrolnog volumena jednaka je nuli, a time nema niti konvektivnog transporta s te strane. Kod jednadžbi kod kojih je difuzivni transport zanemaren, kao kod jednadžbi kemijskih vrsta, od strane zida nema nikakvog transporta, pa i iznos fizikalne veličine  $\varphi_B$  na zidu ne utječe na distribuciju po domeni. U impulsnim jednadžbama za dvije komponente brzine koje nisu normalne na zid postoji difuzivni transport, ali je vrijednost tih brzina zbog lijepljenja fluida na stijenku nula. Za jednadžbu temperature potrebno je međutim propisati temperaturu u svim čvorovima na zidu zbog difuzivnog i radijativnog transporta.

Termodinamičke veličine se mogu izračunati iz propisanih pomoću prethodno definiranih konstitutivnih relacija. Procjena je da je emisivnost ulazne površine slična kao i zida. Kako na ulaznom i izlaznom rubnom elementu postoji konvekcija nije potrebno vršiti korekciju prijelaza topline kondukcijom na zid, dakle  $\zeta = 1$ . Pokazalo se međutim da rezultati najbolje odgovaraju stvarnosti ako se iznos tog faktora na zidu propiše s  $\zeta = 0.1$ . Na taj se način uzima u obzir veliki nelinearni gradijent profila temperature uza zid. Kad bi se prilikom generiranja mreže, u viskozni podsloj stavilo veliki broj kontrolnih volumena, potreba za ovom korekcijom bi iščezla.

### 3.7. RJEŠAVANJE LINEARNOG SISTEMA ALGEBARSKIH JEDNADŽBI

Nakon izračunavanja koeficijenata u jednadžbi (3.25), na temelju pretpostavljenih vrijednosti, ona se privremeno može smatrati linearnim sistemom algebarskih jednadžbi. Taj je sistem moguće riješiti jednom od metoda za rješavanje linearnih sistema jednadžbi i time dobiti distribuciju fizikalne veličine  $\varphi$  po čitavom ložištu obzirom na zadane koeficijente:

$$\mathbf{a}_{\varphi,P} \varphi_P = \mathbf{a}_{\varphi,E} \varphi_E + \mathbf{a}_{\varphi,W} \varphi_W + \mathbf{a}_{\varphi,N} \varphi_N + \mathbf{a}_{\varphi,S} \varphi_S + \mathbf{a}_{\varphi,U} \varphi_U + \mathbf{a}_{\varphi,D} \varphi_D + \mathbf{b}_\varphi \quad (3.173)$$

Kod odabira metode rješavanja treba voditi računa da je matrica sistema izrazito rijetka, dakle da će većina koeficijenata biti nula, te da je popunjeno samo sedam dijagonala. Odabrana je metoda rješavanja sistema koja je najčešće zastupljena u literaturi, iterativna linijska Gauss-Seidelova metoda (engl. *line Gauss-Seidel*, LGS).

Gauss-Seidelova metoda sukcesivno rješava jednadžbu (3.173) za svaki  $\varphi_P$  tako da susjedne vrijednosti veličine  $\varphi$  prethodno pretpostavi. Izračunata vrijednost  $\varphi_P$  postaje nova pretpostavka za taj čvor.

$$\varphi_P = \frac{\sum_{np} \mathbf{a}_{\varphi,np} \varphi_{np} + \mathbf{b}_\varphi}{\mathbf{a}_{\varphi,P}} \quad (3.174)$$

Nakon što su izračunate vrijednosti fizikalne veličine  $\varphi$  u svim čvorovima domene, kreće se iz početka, i tako sve dok razlike između pretpostavljene i izračunate vrijednosti za sve čvorove ne padnu ispod dozvoljenog odstupanja.

Linijska Gauss-Seidel metoda je varijacija Gauss-Seidelove metode u kojoj se ne rješava sukcesivno svaka nepoznanica za sebe, nego se odjednom rješava jednodimenzionalna poddomena Thomasovim algoritmom (dodatak D). Za jednodimenzionalnu poddomenu odabere se dimenzija koja ima najviše kontrolnih volumena u svom smjeru. Recimo da je to u smjeru  $x$ -osi. Tada se sljedeća tridijagonalna matrica sustava rješava Thomasovim algoritmom:

$$a_{\varphi,P}\varphi_P = a_{\varphi,E}\varphi_E + a_{\varphi,W}\varphi_W + b'_\varphi \quad (3.175)$$

gdje je:

$$b'_\varphi = a_{\varphi,N}\varphi_N + a_{\varphi,S}\varphi_S + a_{\varphi,U}\varphi_U + a_{\varphi,D}\varphi_D + b_\varphi \quad (3.176)$$

Prijeđe li se međutim na veći broj elemenata, reda veličine  $10^3$ – $10^5$ , dosad opisana iterativna metoda će vrlo sporo konvergirati prema rješenju. Naročito je sporo konvergiranje prilikom rješavanja tlačne jednadžbe. Za ubrzavanje konvergencije primijenjena je višemrežna korektivna metoda (multigrid) razvijena prema [53-55] i opisana u dodatku E.

### 3.7.1. Relaksiranje

Linijska Gauss-Seidel metoda rješavanja algebarskog sistema jednadžbi može u nekim situacijama divergirati. Tada treba konvergenciju usporiti podrelaksacijom. Konvergencija se može i ubrzati nadrelaksacijom. Privremeno se rješenje (međurješenje) relaksira na sljedeći način:

$$\varphi_P = \iota_\varphi \left( \frac{\sum_{np} a_{\varphi,np} \varphi_{np} + b_\varphi}{a_{\varphi,P}} \right) + (1 - \iota_\varphi) \varphi_P^* \quad (3.177)$$

gdje je  $\iota_\varphi$  faktor relaksacije, a  $\varphi_P^*$  prethodna pretpostavka, koja tijekom iterativnog procesa postane jednaka izračunatoj vrijednosti  $\varphi_P$ . Kad je faktor relaksacije manji od jedan konvergencija se usporava (podrelaksira). Međutim kad je faktor veći od 1 konvergencija se ubrzava i to se zove nadrelaksacija.

Drugi način relaksiranja je pomoću inercije. Jednadžba (3.174) konstruira se na sljedeći način:

$$(a_{\varphi,P} + \iota_\varphi) \varphi_P = \sum_{np} a_{\varphi,np} \varphi_{np} + b_\varphi + \iota_\varphi \varphi_P^* \quad (3.178)$$

Pozitivna vrijednost inercije  $\iota_\varphi$  usporava konvergenciju, a negativna ju ubrzava.

Osim toga prilikom rješavanja modela vršena je podrelaksacija koeficijenata u impulsnim jednadžbama, temperature, gustoće, koeficijenta viskoznosti, brzine produkcije kemijske vrste, volumenskog toplinskog toka izgaranjem te inicijalnih vrijednosti temperature i masenih udjela kemijskih vrsta, tako da je prilikom izračunavanja istih uzet jedan udio nove vrijednosti, a jedan udio prethodne vrijednosti:

$$\varphi = \iota_\varphi \varphi' + (1 - \iota_\varphi) \varphi^* \quad (3.179)$$

gdje je  $\varphi'$  nova vrijednost izračunata nekim postupkom, a  $\varphi^*$  vrijednost koju je varijabla imala prije postupka proračuna.

Općenito je nemoguće dati upute o upotrebi relaksiranja. Svaki slučaj zahtijeva posebnu pažnju. Ako se javljaju problemi s konvergiranjem pojedinog iterativnog postupka treba uvesti podrelaksaciju.

### 3.8. ALGORITAM ZA RJEŠAVANJE SPREGNUTIH SISTEMA NELINEARNIH ALGEBARSKIH JEDNADŽBI

Rješavanjem linearnog sistema algebarskih jednadžbi (3.25) za svaku fizikalnu veličinu ne dobije se konačno rješenje. Iako je jednadžba (3.25) prikazana kao linearna, nelinearnost je sadržana u koeficijentima. Neke jednadžbe su međusobno spregnute, tj. rješenja jedne ovise o rješenjima druge i obrnuto. Tako zbog konvektivnog transporta sve ostale fizikalne veličine ovise o brzinama. Brzine pak ovise o tlaku i gustoći, koja je opet funkcija temperature. Temperatura je preko izvora izgaranjem snažno spregnuta s jednadžbama kemijskih vrsta.

U literaturi se mogu naći mnogobrojni algoritmi za rješavanje spregnutih sistema koji opisuju strujanje fluida. Najpoznatiji među njima su svakako SIMPLE, SIMPLER i PISO. Da bi se iznio algoritam koji je korišten u ovome radu prvo će se dati pregled tih algoritama.

#### SIMPLE

Algoritam SIMPLE predložen u [48] rješava jedan sistem za drugim vraćajući se nakon prolaska kroz sve sisteme opet na početak. Ovaj iterativni algoritam polazi od pretpostavke polja tlaka  $p^*$ . Umjesto tlačne jednadžbe rješava jednadžbu korekcije tlaka  $p'$ . Ona se od jednadžbe (3.86) razlikuje po tome što se u izrazu za koeficijent  $b_p$  ne nalaze pseudobrzine  $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$ ,  $\hat{w}$  nego posljednje izračunate brzine  $u^*$ ,  $v^*$ ,  $w^*$ :

$$b_p = (\rho_{P_u} u_{P_u}^* - \rho_{W_u} u_{W_u}^*) \Delta y_P \Delta z_P + (\rho_{P_v} v_{P_v}^* - \rho_{S_v} v_{S_v}^*) \Delta x_P \Delta z_P + (\rho_{P_w} w_{P_w}^* - \rho_{D_w} w_{D_w}^*) \Delta x_P \Delta y_P \quad (3.180)$$

Algoritam se može predstaviti sljedećim nizom koraka:

1. Pretpostavi se polje tlaka  $p^*$ .
2. Nađu se rješenja jednadžbe količine gibanja da bi se dobile distribucije  $u^*$  (3.67),  $v^*$  (3.71),  $w^*$  (3.72).
3. Riješi se jednadžba korekcije tlaka  $p'$ .
4. Izračuna se polje tlaka zbrajanjem pretpostavke i korekcije  $p = p^* + p'$ .
5. Brzine  $u^*$ ,  $v^*$ ,  $w^*$  korigiraju se korekcijom tlaka i dobiju se brzine  $u$  (3.74),  $v$  (3.78),  $w$  (3.82).
6. Riješe se jednadžbe kemijskih vrsta (3.162) i temperature (3.169).
7. Izračunaju se svojstva fluida iz dobivenih brzina, tlaka, temperature i koncentracija.
8. Korigirani tlak  $p$  uzme se kao nova pretpostavka  $p^*$  te se vrati na točku 2, sve dok se ne dobije konvergirano rješenje.

#### SIMPLER

Poboljšanje tog postupka ponudili su isti autori pod imenom SIMPLER. Ovaj algoritam za razliku od prethodnog rješava i tlačnu jednadžbu i jednadžbu korekcije tlaka:

1. Pretpostave se brzine.
2. Izračunaju se pseudobrzine  $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$ ,  $\hat{w}$  (3.86m-o).
3. Riješi se jednadžba tlaka  $p^*$  (3.86).
4. Riješe se jednadžbe količine gibanja da bi se dobile distribucije  $u^*$  (3.67),  $v^*$  (3.71),  $w^*$  (3.72).
5. Izračunaju se koeficijenti  $b_p$  (3.180) tako da se umjesto pseudobrzina koriste posljednje izračunate vrijednosti brzina  $u^*$ ,  $v^*$ ,  $w^*$  te se riješi jednadžba korekcije tlaka  $p'$  na isti način kao u SIMPLE-u.
6. Brzine  $u^*$ ,  $v^*$ ,  $w^*$  korigiraju se korekcijom tlaka i dobiju se brzine  $u$  (3.74),  $v$  (3.78),  $w$  (3.82).
7. Riješe se jednadžbe kemijskih vrsta (3.162) i temperature (3.169).
8. Izračunaju se svojstva fluida iz dobivenih brzina, tlaka, temperature i koncentracija.
9. Korigirane brzine  $u$ ,  $v$ ,  $w$  uzmu se kao nove pretpostavke te se vrati na točku 2, sve dok se ne dobije konvergirano rješenje.

## PISO

Algoritam PISO [50] bazira se na rastavljanju jednadžbi na taj način da se dokine utjecaj na točnost rezultata rješavanja tlačne jednadžbe činjenice da brzine izračunate iz jednadžbe količine gibanja ne zadovoljavaju jednadžbu kontinuiteta. Umjesto iterativnog postupka, PISO sadrži predikciju i dvije korekcije za rješavanje jednadžbi koje opisuju strujanje, što daje vrlo dobre rezultate kod nestacionarnog slučaja.

Prilikom rješavanja stacionarnog problema povećanjem vremenskog koraka u beskonačnost dvije korekcije više nisu dostatne, a također pretpostavka o linearnosti nikako nije zadovoljena. Zato se u primjeni PISO algoritma za rješavanje stacionarnog strujanja koristi (engl.) *time-marching* [51] procedura. Stacionarnom se stanju, umjesto iterativnim postupkom, približava u malim vremenskim koracima rješavanjem nestacionarnih transportnih jednadžbi. Takav način rješavanja problema sa stacionarnim rubnim uvjetima odgovara stvarnosti, jer se stacionarni oblik diferencijalnih jednadžbi može shvatiti kao nestacionarni s beskonačno velikim vremenskim korakom. Procesorsko vrijeme rješavanja je istog reda veličine kao i da se računa iterativno. Prema [51] postupak PISO je pokazao superiornost nad algoritmom SIMPLER prilikom rješavanja modela strujanja bez dodatnih skalarnih jednadžbi, dakle bez jednadžbi  $k$ - $\varepsilon$  modela turbulencije, transporta kemijskih vrsta ili temperature. Postupak se međutim komplicira dodavanjem tih transportnih jednadžbi, a naročito spregnutih jednadžbi kemijskih vrsta i temperature. U tom slučaju je prema istom radu algoritam SIMPLER superiorniji. Ovdje je algoritam dan samo za jednadžbe strujanja za slučaj beskonačnog vremenskog koraka:

### Predikcija:

1. Pretpostavi se polje tlaka  $p$ .
2. Riješe se jednadžbe količine gibanja da bi se dobile distribucije  $u^*$  (3.67),  $v^*$  (3.71),  $w^*$  (3.72). Ove brzine generalno ne zadovoljavaju jednadžbu kontinuiteta.

### Prva korekcija:

3. Riješi se jednadžba tlaka  $p^*$  (3.86).

4. Izračunaju se brzine  $u^{**}$ ,  $v^{**}$ ,  $w^{**}$  iz jednadžbi (3.67, 3.71, 3.72) tako da se na mjestu susjednih brzina uzmu prije izračunate brzine  $u^*$ ,  $v^*$ ,  $w^*$  te tlak  $p^*$ . Ako je korištena shema kontrolnih volumena to u potpunosti odgovara korekciji tlakom  $p^*$  prema jednadžbama (3.74), (3.78) i (3.82) pseudobrзина izračunatih iz brzina  $u^*$ ,  $v^*$ ,  $w^*$ . Ove brzine zadovoljavaju jednadžbu kontinuiteta.

#### Druga korekcija:

5. Riješi se jednadžba tlaka  $p^{**}$  (3.86).
6. Izračunaju se brzine  $u^{***}$ ,  $v^{***}$ ,  $w^{***}$  iz jednadžbi (3.67, 3.71, 3.72) tako da se na mjestu susjednih brzina uzmu prije izračunate brzine  $u^{**}$ ,  $v^{**}$ ,  $w^{**}$  te tlak  $p^{**}$ . Kao i u prvoj korekciji ako je korištena shema kontrolnih volumena to u potpunosti odgovara korekciji tlakom  $p^{**}$  prema jednadžbama (3.74), (3.78) i (3.82) pseudobrзина izračunatih iz brzina  $u^{**}$ ,  $v^{**}$ ,  $w^{**}$ . Ove brzine zadovoljavaju i jednadžbu kontinuiteta i jednadžbu količine gibanja.

#### Modifikacija:

Zbog jake spregnutosti ostalih transportnih jednadžbi s jednadžbama strujanja i velikog broja korekcija koje bi trebale biti upotrebljene, u ovome radu je zadržan iterativni postupak rješavanja. Točnost rješenja brzina i tlaka nakon jednog prolaza krugom prediktor-korektor prestaje biti važna zbog značajne ovisnosti tih veličina o temperaturi i koncentracijama preko gustoće. Jednadžbe količine gibanja u korektivnim koracima PISO postupka identični su korekciji brzina u jednadžbama (3.74), (3.78) i (3.82). Postupak korišten u ovome radu može se smatrati modifikacijom PISO algoritma:

1. Pretpostave se sve relevantne fizikalne veličine
2. Riješe se jednadžbe količine gibanja da bi se dobile distribucije  $u$  (3.67),  $v$  (3.71),  $w$  (3.72).

#### Korekcije tlak-brzina

3. Izračunaju se pseudobrzone  $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$ ,  $\hat{w}$  (3.86m-o).
4. Riješi se jednadžba tlaka  $p$ .
5. Pseudobrzone  $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$ ,  $\hat{w}$  korigiraju se novoizračunatim tlakom i dobiju se brzine  $u$  (3.74),  $v$  (3.78),  $w$  (3.82).
6. Vraća se na točku 3. Taj se postupak ponavlja zadani broj puta.
7. Riješe se jednadžbe kemijskih vrsta (3.162) i temperature (3.169).
8. Izračunaju se svojstva fluida (gustoća, efektivna dinamička viskoznost, specifična toplina) iz dobivenih brzina, tlaka, temperature i koncentracija.
9. Izračunate veličine uzmu se kao nove pretpostavke i vraća se na točku 2, sve dok se ne dobije konvergirano rješenje.

Pokazalo se da se optimalni rezultati dobivaju s tri do pet korekcija za model strujanja, uz pretpostavku konstantnih koeficijenata, iako autor PISO algoritma tvrdi da su dvije korekcije dovoljne. To treba pripisati beskonačno velikom vremenskom koraku. Zbog nelinearnosti, tj. zbog ovisnosti koeficijenata u općoj algebarskoj jednadžbi (3.25) o brzinama i gustoći, a time i o tlaku, temperaturi i koncentracijama, mora se s obzirom na beskonačno veliki vremenski korak strujanje računati iterativno. Između dva proračuna strujanja potrebno je riješiti ostale skalarne transportne jednadžbe, te izračunati svojstva fluida.

Postupak se ponavlja dok se ne postigne konvergencija iterativnog postupka na globalnom nivou. Kao uvjet konvergencije koristi se rezidual na jednadžbi kontinuiteta, što se prema

iskustvu uz kontrolu reziduala na ostalim jednadžbama pokazalo dovoljno, koji se za jedan kontrolni volumen računa na sljedeći način:

$$\begin{aligned}
 R_P = & (\rho_w u_{W_u} - \rho_e u_{P_u}) \Delta y_P \Delta z_P + \\
 & (\rho_s v_{S_v} - \rho_n v_{P_v}) \Delta x_P \Delta z_P + \\
 & (\rho_d w_{D_w} - \rho_u w_{P_w}) \Delta x_P \Delta y_P
 \end{aligned} \tag{3.181}$$

Zbroj apsolutnih vrijednosti masenih reziduala po čitavoj domeni:

$$R = \sum_{i=1}^{n_x} \left[ \sum_{j=1}^{n_y} \left[ \sum_{k=1}^{n_z} |R_P^{i,j,k}| \right] \right] \tag{3.182}$$

mora biti manji od neke dozvoljene greške:

$$R \leq \varepsilon \tag{3.183}$$