

5. ZAKLJUČAK

U ovom je radu iznesen postupak sprežanja računanja prijenosa topline i mase metodom kontrolnih volumena s računanjem brzina produkcije kemijskih vrsta rješavanjem kinetičkog modela integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi. Izneseni postupak pretpostavlja da se svaki kontrolni volumen može modelirati kao kemijski reaktor, s početnim uvjetima stanja smjese opisanim izlaznim stanjem iz uzvodnih kontrolnih volumena. Iz promjena temperature i masenih udjela kemijskih vrsta tijekom zadržavanja smjese u kontrolnom volumenu računaju se brzine produkcije kemijskih vrsta te volumenski toplinski tok oslobođen izgaranjem.

U prvom poglavlju rada dan je pregled literature u području modeliranja ložišta s naglaskom na modele od posebnog interesa za ovaj rad, dakle kemijsku kinetiku i modeliranje izgaranja prirodnog plina, objašnjena je svrha rada s obzirom na dosad poznate činjenice u području te je dan pregled metoda istraživanja korištenih u radu.

U drugom je poglavlju prikazan matematički model ložišta generatora pare koji je korišten u radu i koji obuhvaća model izgaranja, konvektivni i difuzivni prijenos topline i mase, te prijenos topline zračenjem, sve to u uvjetima turbulentnog strujanja. Postavljen je detaljan neravnotežan kinetički model izgaranja prirodnog plina (pojednostavljenog smjesom metana i etana) koji obuhvaća 143 elementarne kemijske reakcije i 31 kemijsku vrstu te je pokazana fizikalna veza brzina produkcije kemijskih vrsta s njihovim transportom. Model prijenosa topline i mase prikazan je u Kartezijevom koordinatnom sistemu za stacionarno turbulentno strujanje slabo stlačive, newtonske, kemijski reaktivne, homogene smjese fluida. Turbulencija je modelirana Prandtlovom duljinom puta miješanja. Prijenos topline zračenjem računat je zonalnom metodom, u kojoj su površine direktne izmjene računane Monte Carlo metodom.

U trećem je poglavlju iznesena numerička procedura integracije transportnih jednadžbi metodom kontrolnih volumena, ukratko je objašnjena zonalna metoda prijenosa topline zračenjem za crna i siva tijela, prikazan je način proračuna brzine izgaranja za sistem reakcija integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi Gearovom metodom, te je izvedeno sprežanje modela izgaranja s modelom transporta. Nadalje su dani rubni uvjeti koji omogućavaju numeričko rješavanje problema, te je prikazan korišteni algoritam rješavanja spregnutih sistema nelinearnih algebarskih jednadžbi iterativnim rješavanjem lineariziranih sistema jednadžbi.

U četvrtom su poglavlju izneseni rezultati dobiveni primjenom prethodno prikazanog modela. Uspoređeni su rezultati proračuna smjese vodika i zraka integracijom sistema običnih diferencijalnih jednadžbi s eksperimentalnim podacima te je dobiveno vrlo dobro slaganje istih. Taj je primjer poslužio za validaciju samog modela kemijskog reaktora. Model prijenosa topline (uključivo zračenjem) i mase uspoređen je s eksperimentalnim podacima u cijelom nizu navedenih radova, pa se nije prišlo posebnoj validaciji u ovome radu. Međutim, model prijenosa topline i mase spregnut s modelom kemijskog reaktora u drugom je primjeru primijenjen na eksperimentalno horizontalno ložište u IJmuidenu, za koje postoje ekstenzivni eksperimentalni podaci. Rezultati proračuna pokazali su dobro slaganje s eksperimentalnim podacima. U trećem je primjeru model ložišta razvijen u ovome radu primijenjen na

komercijalno vertikalno ložište generatora pare u Sisku. Slaganje je ovdje moglo biti ispitano samo na nekoliko poznatih veličina, izlaznoj temperaturi iz ložišta te toplinskim tokovima na ekrane ložišta. Postignuto je vrlo dobro slaganje s poznatim veličinama. Ovaj je primjer napravljen da bi pokazao mogućnosti modela u proračunu polutanata koji nastaju prilikom izgaranja plinovitog goriva u ložištu generatora pare.

U ovome radu prikazan je razvijeni postupak koji obuhvaća detaljan model izgaranja prirodnog plina, kompatibilan s metodom kontrolnih volumena, čije numeričko rješavanje daje stabilne i konzistentne rezultate. Primijenjeni model izgaranja obuhvaća 143 elementarne kemijske reakcije u kojima sudjeluje 31 kemijska vrsta. Osim osnovnih reakcija u sistemu vodik-kisik, obuhvaćene su i reakcije oba lanca oksidacije metana, metanski i etanski, te dušikova kemija, i to neravnotežni Zeldovichev mehanizam i kemija dušik (I) oksida, dok je zanemarena kemija HNO lanca. Taj je model izgaranja ugrađen u matematički model prijenosa topline i mase u ložištu generatora pare, koji obuhvaća konvektivno-difuzivni transport mase, količine gibanja i energije, te prijenos topline zračenjem. Model je predstavljen s 36 parcijalnih diferencijalnih jednačbi. Na jednačbe je primijenjeno Favreovo usrednjavanje, a utjecaj turbulencije je opisan modelom Prandtlove duljine puta miješanja. Prijenos topline zračenjem rješavan je zonalnom metodom čije su dvije inačice, Hottelova i Monte Carlo, ugrađene u model. Model prijenosa topline i mase rješavan je metodom kontrolnih volumena uz primjenu modificiranog PISO algoritma i *upwind* sheme diferencijacije. Svaki je kontrolni volumen predodčen kao kemijski reaktor u kojem je model izgaranja predstavljen sistemom od 31 obične diferencijalne jednačbe (za svaku kemijsku vrstu po jedna). Sistem običnih diferencijalnih jednačbi rješavan je Gearovom metodom. Početni uvjeti za svaki kemijski reaktor (tj. kontrolni volumen) dobiveni su iz uzvodnih vrijednosti integracijom svih ulaznih kontrolnih površina. Dobivene brzine produkcije pojedinih kemijskih vrsta korištene su u transportnim jednačbama za kemijske vrste za proračun volumenskih promjena. Takav matematički model ložišta generatora pare je jaki alat u proučavanju mehanizama nastanka kemijskih spojeva koji zagađuju okolinu i osmišljavanju postupaka smanjivanja njihove produkcije. Proračunati rezultati među ostalim obuhvaćaju i masene udjele NO_x i CO na izlasku iz ložišta, kao i njihove distribucije po ložištu.

Sljedeći korak u primjeni detaljnog modela izgaranja predmiješanog plamena bilo bi dovođenje kemijske kinetike u međuzavisnost s turbulencijom. Kako će primjena direktne numeričke simulacije još neko vrijeme ostati samo za specijalne slučajeve, a ona bi automatski riješila problem međuzavisnosti, potrebno bi bilo naći palijativno rješenje. Smatra se da bi preuzimanje pristupa koji se najčešće primjenjuje pri modeliranju difuzivnog plamena, tj. rješavanje dodatne diferencijalne jednačbe za funkciju gustoće vjerojatnosti *pdf* moglo dati rezultate. Međutim, za detaljni model izgaranja bi bilo neophodno postaviti multidimenzionalnu *pdf* funkciju, tj. za svaku kemijsku vrstu te za temperaturu po jedna distribucijska varijabla. Osim toga trebalo bi odrediti oblik takve multidimenzionalne distribucije.

Nadalje bilo bi od iznimne važnosti osmisliti mehanizam izbora relevantnog sistema reakcija, koji bi prema željenom cilju proračuna (recimo toplinski tokovi ili nastanak NO_x uz željenu točnost) analizom osjetljivosti automatski napravio taj izbor. U literaturi se može naći vrlo veliki broj radova upravo na temu izbora relevantnog sistema reakcija za pojedini slučaj što znači da je potreba za time značajna. Smatra se da bi se određeni rezultati mogli postići primjenom neuralne mreže.