

DODATAK

A. INDEKSNA NOTACIJA

U disertaciji su jednadžbe prikazane indeksnom (ili tenzorskom) notacijom zbog kratkoće zapisa u odnosu na Kartezijsku, a zbog transparentnosti u odnosu na vektorsku notaciju. Sve vektorske veličine označavaju se indeksima i, j, k koji mogu poprimiti tri vrijednosti 1, 2, 3 od kojih svaka odgovara jednoj koordinatnoj osi Kartezijevog koordinatnog sistema:

$$x_i \quad i=1,2,3 \quad (\text{A.1})$$

gdje su:

$$x_1 - x\text{-os}$$

$$x_2 - y\text{-os}$$

$$x_3 - z\text{-os}$$

Vektorska veličina φ_i sastoji se od tri međusobno ortogonalne komponente $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ u smjeru koordinatnih osi, što odgovara $\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z$ komponentama. Po pravilu indeksne notacije postoje dvije vrste indeksa: slobodni i nijemi. Slobodni indeks je onaj koji se u sumandu pojavljuje samo jednom i određuje smjer u vektorskoj jednadžbi, a nijemi indeks se pojavljuje dva puta i označuje sumaciju po tom indeksu. Slijedi primjer upotrebe nijemih indeksa te prijevod zapisa na vektorski i Kartezijski:

$$\frac{\partial \varphi_j}{\partial x_j} = \text{div } \boldsymbol{\varphi} = \frac{\partial \varphi_x}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_y}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_z}{\partial z} \quad (\text{A.2})$$

Vektorska jednadžba u indeksnoj notaciji kakva je na primjer:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j v_i) = \rho f_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{A.3})$$

prevodi se u vektorsku notaciju kao:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{A.4})$$

a u Kartezijskoj rasčlanjuje se na tri skalarnе diferencijalne jednadžbe:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_x) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_x) = \rho f_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_y) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_y) = \rho f_y + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_z) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_z) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_z) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_z) = \rho f_z + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \quad (\text{A.7})$$

U radu se koristi simetrični Kroneckerov δ_{ij} tenzor drugog reda definiran kao:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

koji ima supstituirajuće svojstvo:

$$\varphi_j \delta_{ij} = \varphi_i \quad (\text{A.9})$$

Neki dijelovi matematičkog modela nisu pisani pomoću indeksne notacije, jer indeksi (broj kemijske vrste, broj reakcije) nisu indeksi smjera koordinatnog sustava. U tim je slučajevima u tekstu navedeno koji od indeksa su izuzeti od pravila indeksne notacije. Iako je moguće i te indekse predstaviti kao dimenzije višedimenzionalnog prostora, i shodno tome na njih primijeniti pravila indeksne notacije, to nije uobičajeno u praksi, pa nije korišteno niti u ovome radu.

B. REYNOLDSOV TRANSPORTNI TEOREM

Osnovni zakoni održanja postavljeni su za materijalni volumen V_m , a pomoću Reynoldsovog transportnog teorema [91] mogu se prevesti u formu koja vrijedi za kontrolni volumen. Brzina promjene veličine φ unutar materijalnog volumena jednaka je brzini promjene te veličine unutar kontrolnog volumena (akumulacija) i promjeni te veličine zbog pomicanja granica materijalnog volumena (konvekcija):

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_m} \rho \varphi dV = \underbrace{\int_{KV} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varphi) dV}_{\text{akumulacija}} + \underbrace{\int_{KP} \rho \varphi v_j n_j dA}_{\text{konvekcija}} \quad (\text{B.1})$$

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

$$\varphi = \varphi(x_i, t) \quad (\text{B.2})$$

a v_j brzina strujanja fluida te n_j jedinični vektor normale na površinu kontrolnog volumena.

Osnovni zakoni se općenito mogu definirati kao promjena (izvor/ponor) fizikalne veličine φ u materijalnom volumenu pod utjecajem okoline. Ako se sa S_φ označi volumenski izvor veličine φ , a sa $J_{\varphi,j}$ fluks te veličine kroz kontrolnu površinu (difuzija), dobiva se sljedeći izraz:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_m} \rho \varphi dV = \int_{KV} S_\varphi dV + \int_{KP} J_{\varphi,j} n_j dA \quad (\text{B.3})$$

Izjednačavanjem izraza (B.1) i (B.3) dobiva se sljedeća jednačnja:

$$\int_{KV} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varphi) dV + \int_{KP} \rho \varphi v_j n_j dA = \int_{KV} S_\varphi dV + \int_{KP} J_{\varphi,j} n_j dA \quad (\text{B.4})$$

Na površinske integrale primjeni se teorem Gauss-Ostrogradskog [127]:

$$\int_{KP} \rho \varphi v_j n_j dA = \int_{KV} \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j \varphi) dV \quad (B.5)$$

$$\int_{KP} J_{\varphi,j} n_j dA = \int_{KV} \frac{\partial J_{\varphi,j}}{\partial x_j} dV \quad (B.6)$$

te se dobije integralno-diferencijalni oblik osnovnog zakona brzine promjene veličine φ :

$$\int_{KV} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j \varphi) \right] dV = \int_{KV} \left[S_\varphi + \frac{\partial J_{\varphi,j}}{\partial x_j} \right] dV \quad (B.7)$$

Primjenom leme o proizvoljnosti volumena integracije [91] dobije se diferencijalni oblik brzine promjene fizikalne veličine φ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j \varphi) = S_\varphi + \frac{\partial J_{\varphi,j}}{\partial x_j} \quad (B.8)$$

C. RAČUNANJE POVRŠINA DIREKTNE IZMJENE

Usporedbom integrala (3.130) i (3.142) vidi se da su površine direktne izmjene površina-volumen $\overline{s_1 g_2}$ i volumen-površina $\overline{g_1 s_2}$ identične:

$$\overline{gs} = \overline{sg} = \int_{\Delta A \Delta V} \frac{\alpha \cos \vartheta \tau(r)}{\pi r^2} dV dA \quad (C.1)$$

Površine direktne izmjene topline zračenjem $\overline{g_1 g_2}$ i $\overline{s_1 g_2}$ moraju se numerički integrirati. Primijenjena je Gauss-Legendreova metoda integracija.

Ako se volumenski integral (3.132) prevede u linijski, površina direktne izmjene volumen-volumen $\overline{g_1 g_2}$ postaje šesterostruki integral:

$$\overline{g_1 g_2} = \int_{\Delta V_2} \int_{\Delta V_1} \frac{\alpha^2 \tau(r)}{\pi r^2} dV_1 dV_2 = \quad (C.2)$$

$$\int_{\Delta z_2} \int_{\Delta y_2} \int_{\Delta x_2} \int_{\Delta z_1} \int_{\Delta y_1} \int_{\Delta x_1} \frac{\alpha^2 e^{-\alpha \sqrt{(x_2-x_1)^2 + (y_2-y_1)^2 + (z_2-z_1)^2}}}{\pi \left[(x_2-x_1)^2 + (y_2-y_1)^2 + (z_2-z_1)^2 \right]} dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2$$

Prema Gauss-Legendreovoj metodi integracije [128] integral funkcije $f(t)$ u granicama $[-1, 1]$ može se aproksimirati s:

$$\int_{-1}^1 f(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i f(t_i) \quad (C.3)$$

gdje su A_i i t_i faktori dani u tablici C.1, a n stupanj Legendreovog polinoma koji se koristi za interpolaciju. Veći broj daje u principu točnije rezultate, ali zahtjeva mnogo više kompjuterskog vremena. Za opći slučaj kada se integrira funkcija $f(x)$ na intervalu $[a, b]$ dobije se:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n A_i f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} t_i\right) \quad (C.4)$$

Tablica C.1. Faktori u Gauss-Legendreovoj integralnoj formuli trećeg i četvrtog stupnja

n	i	t_i	A_i
3	1; 3	∓ 0.77459667	5/9
	2	0	8/9
4	1; 4	∓ 0.86113631	0.34785484
	2; 3	∓ 0.33998104	0.6514516

Ako je funkcija $f(x)$ u stvari i sama integral funkcije $f_2(x_1, x_2)$ na intervalu $[a_2, b_2]$ dobije se aproksimativni izraz za dvostruki integral:

$$\int_{a_1, a_2}^{b_1, b_2} f(x_1, x_2) dx_2 dx_1 = \frac{b_1 - a_1}{2} \sum_{i_1=1}^{n_1} A_{i_1} \left[\frac{b_2 - a_2}{2} \sum_{i_2=1}^{n_2} A_{i_2} f\left(\frac{b_1 + a_1}{2} + \frac{b_1 - a_1}{2} t_{i_1}, \frac{b_2 + a_2}{2} + \frac{b_2 - a_2}{2} t_{i_2}\right) \right] \quad (C.5)$$

Uz:

$$\hat{A}_{i_m} = \frac{b_m - a_m}{2} A_{i_m} \quad (C.6)$$

$$x_{i_m} = \frac{b_m + a_m}{2} + \frac{b_m - a_m}{2} t_{i_m} \quad (C.7)$$

dobije se izraz za integraciju šesterostrukog integrala:

$$\int_{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6}^{b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6} f(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) dx_6 dx_5 dx_4 dx_3 dx_2 dx_1 = \sum_{i_1=1}^{n_1} \hat{A}_{i_1} \left[\sum_{i_2=1}^{n_2} \hat{A}_{i_2} \left[\sum_{i_3=1}^{n_3} \hat{A}_{i_3} \left[\sum_{i_4=1}^{n_4} \hat{A}_{i_4} \left[\sum_{i_5=1}^{n_5} \hat{A}_{i_5} \left[\sum_{i_6=1}^{n_6} \hat{A}_{i_6} f(x_{i_1}, x_{i_2}, x_{i_3}, x_{i_4}, x_{i_5}, x_{i_6}) \right] \right] \right] \right] \right] \right] \right] \quad (C.8)$$

Kao optimalna kombinacija reda polinoma integracije n_m odabrane su sljedeće vrijednosti:

$$n_m = \begin{cases} 3 & m = 1, 2, 3 \\ 4 & m = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (C.9)$$

U specijalnom slučaju površine direktne izmjene topline volumena sa samim sobom, podintegralna funkcija ima singularitete po čitavom volumenu kad god se točka u jednom volumenu poklapa identički s točkom u drugom volumenu. Da bi se izbjegli singulariteti

prilikom numeričke integracije stupnjevi polinoma integracije za tri osi jednog volumena ne smiju biti jednaki onima za tri osi drugoga volumena. Kod integracije površine direktne izmjene za dva susjedna volumena singulariteti se pojavljuju na dodirnoj plohi.

Na sličan se način računaju i peterostruki integrali površina direktne izmjene površina-volumen. Kako Gauss-Legendreova metoda ne uzima vrijednost funkcije na granici integracije u obzir tako u tom slučaju izbor stupnja polinoma nije važan.

D. THOMASOV ALGORITAM

Thomasov algoritam (ili TDMA, engl. *Three Diagonal Matrix Algorithm*) je direktna metoda koja rješava jednodimenzionalni problem (tj. matrica linearnog sistema ima tri dijagonale) u jednom prolazu. Recimo da je zadan sistem od n jednadžbi s n nepoznanica φ_i :

$$d_i \varphi_i = a_i \varphi_{i+1} + b_i \varphi_{i-1} + c_i \quad i = 1 \dots n \quad (\text{D.1})$$

Uz zadane rubne uvjete moguće je pokazati da sljedeća jednadžba sukcesivnim rješavanjem od većeg i prema manjem daje rješenje sistema:

$$\varphi_i = \alpha_i \varphi_{i+1} + \gamma_i \quad i = n \dots 1 \quad (\text{D.2})$$

gdje su:

$$\alpha_i = \frac{a_i}{d_i - b_i \alpha_{i-1}} \quad (\text{D.3})$$

$$\gamma_i = \frac{c_i - b_i \gamma_{i-1}}{d_i - b_i \alpha_{i-1}} \quad (\text{D.4})$$

Vrijednosti koeficijenata na donjoj granici zadane su kao:

$$\alpha_0 = 0 \quad (\text{D.5})$$

$$\gamma_0 = \varphi_0 \quad (\text{D.6})$$

E. VIŠEMREŽNA KOREKTIVNA METODA (MULTIGRID)

Višemrežna korektivna metoda (multigrid) je iterativna procedura koja nezavisno od koraka mreže te odnosa koeficijenata ubrzava konvergenciju [129]. Dobar teoretski uvid u metodu se može dobiti u [130]. Metoda je prvo razvijena u radovima [131] i [132]. Mogućnosti ove metode u rješavanju eliptičnih problema pokazane su u [133-134]. Brandt [135] interpolira rješenje na finijoj mreži, a metoda aditivne korekcije prvi put je predložena u [136]. Multigrid metoda aditivne korekcije (ACM) za anizotropne koeficijente iznesena je u radu Hutchinsona i Raithbyja [53] kakva je uz manje modifikacije [54-55] upotrebljena u ovome radu. Daljnji rad na primjeni metode u rješavanju problema strujanja fluida može se naći u [138].

Opća forma sistema algebarskih jednadžbi za najfiniju mrežu, dakle onu mrežu na kojoj se traži distribucija veličine φ , glasi (3.25):

$$\begin{aligned}
a_{\varphi,P}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_P &= a_{\varphi,E}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_E + a_{\varphi,W}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_W + \\
&\quad a_{\varphi,N}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_N + a_{\varphi,S}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_S + \\
&\quad a_{\varphi,U}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_U + a_{\varphi,D}^{i_0,j_0,k_0} \varphi_D + b_{\varphi}^{i_0,j_0,k_0}
\end{aligned} \tag{E.1}$$

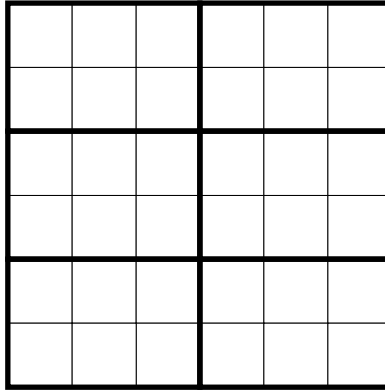
gdje su i_0, j_0, k_0 , koordinate elementa respektivno u x, y, z smjeru. Analognu jednadžbu treba riješiti i za prvi nivo multigrida, s time što se sad ne rješava distribucija veličine φ , nego korekcija te veličine δ na grubljoj mreži i_1, j_1, k_1 :

$$\begin{aligned}
a_{\delta^1,P}^{i_1,j_1,k_1} \delta_P^1 &= a_{\delta^1,E}^{i_1,j_1,k_1} \delta_E^1 + a_{\delta^1,W}^{i_1,j_1,k_1} \delta_W^1 + \\
&\quad a_{\delta^1,N}^{i_1,j_1,k_1} \delta_N^1 + a_{\delta^1,S}^{i_1,j_1,k_1} \delta_S^1 + \\
&\quad a_{\delta^1,U}^{i_1,j_1,k_1} \delta_U^1 + a_{\delta^1,D}^{i_1,j_1,k_1} \delta_D^1 + b_{\delta^1}^{i_1,j_1,k_1}
\end{aligned} \tag{E.2}$$

Za m -ti nivo multigrida dobije se sljedeći opći izraz:

$$\begin{aligned}
a_{\delta^m,P}^{i_m,j_m,k_m} \delta_P^m &= a_{\delta^m,E}^{i_m,j_m,k_m} \delta_E^m + a_{\delta^m,W}^{i_m,j_m,k_m} \delta_W^m + \\
&\quad a_{\delta^m,N}^{i_m,j_m,k_m} \delta_N^m + a_{\delta^m,S}^{i_m,j_m,k_m} \delta_S^m + \\
&\quad a_{\delta^m,U}^{i_m,j_m,k_m} \delta_U^m + a_{\delta^m,D}^{i_m,j_m,k_m} \delta_D^m + b_{\delta^m}^{i_m,j_m,k_m}
\end{aligned} \tag{E.3}$$

Da bi se očuvalo svojstvo konzervacije, tj. bilance fizikalne veličine po kontrolnom volumenu, koeficijent s jedne strane kontrolnog volumena grublje mreže jednak je zbroju svih koeficijenata s te strane ako oni donose vrijednost veličine iz čvora koji je izvan većeg kontrolnog volumena.



Slika E.1 Prijelaz s finije na grublju mrežu

Ako su m_x^m, m_y^m, m_z^m faktori okrupnjenja mreže između $m-1$ i m nivoa multigrida koeficijenti se proračunavaju na sljedeći način:

$$a_{\delta^m,E}^{i_m,j_m,k_m} = \sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} a_{\delta^{m-1,E}}^{m_x^m i_m, j_{m-1}, k_{m-1}} \right] \tag{E.4}$$

Treba primijetiti da se radi o sumi istočnih koeficijenata samo po zadnjoj ravnini u x smjeru elemenata u $m-1$ nivou koji su sadržani u kontrolnom volumenu m -tog nivoa multigrida. Ostali koeficijenti dobiju se na sličan način:

$$\mathbf{a}_{\delta^m, W}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, W}^{m_x^m(i_{m-1})+1, j_{m-1}, k_{m-1}} \right] \quad (\text{E.5})$$

$$\mathbf{a}_{\delta^m, N}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, N}^{i_{m-1}, m_y^m j_m, k_{m-1}} \right] \quad (\text{E.6})$$

$$\mathbf{a}_{\delta^m, S}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, S}^{i_{m-1}, m_y^m(j_m-1)+1, k_{m-1}} \right] \quad (\text{E.7})$$

$$\mathbf{a}_{\delta^m, U}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, U}^{i_{m-1}, j_{m-1}, m_z^m k_m} \right] \quad (\text{E.8})$$

$$\mathbf{a}_{\delta^m, D}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, D}^{i_{m-1}, j_{m-1}, m_z^m(k_m-1)+1} \right] \quad (\text{E.9})$$

Centralni koeficijent m -tog nivoa multigrida jednak je sumi centralnih koeficijenata $m-1$ nivoa umanjenoj za sumu svih koeficijenata $m-1$ nivoa koji prenose informaciju o svojstvu φ iz jednog u drugi volumen unutar kontrolnog volumena m -tog nivoa multigrida:

$$\mathbf{a}_{\delta^m, P}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{nb} \mathbf{a}_{\delta^m, nb}^{i_m, j_m, k_m} + \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \left(\mathbf{a}_{\delta^{m-1}, P}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} - \sum_{nb} \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, nb}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \right) \right] \right] \quad (\text{E.10})$$

Treba primijetiti da je ovako komplicirani izraz posljedica toga što centralni koeficijent nije samo suma susjednih, već u njemu postoji i komponenta izvora.

Slobodni koeficijent $\mathbf{b}_{\delta^m}^{i_m, j_m, k_m}$ suma je svih reziduala kontrolnih volumena na $m-1$ nivou koji ulaze u kontrolni volumen na m -tom nivou multigrida:

$$\mathbf{b}_{\delta^m}^{i_m, j_m, k_m} = \sum_{i_{m-1}=m_x^m(i_m-1)+1}^{m_x^m i_m} \left[\sum_{j_{m-1}=m_y^m(j_m-1)+1}^{m_y^m j_m} \left[\sum_{k_{m-1}=m_z^m(k_m-1)+1}^{m_z^m k_m} \mathbf{R}_{\delta^{m-1}}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \right] \right] \quad (\text{E.11})$$

gdje je rezidual $m-1$ nivoa multigrida:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\delta^{m-1}}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} &= \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, E}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_E^{m-1} + \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, W}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_W^{m-1} + \\ &\quad \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, N}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_N^{m-1} + \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, S}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_S^{m-1} + \\ &\quad \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, U}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_U^{m-1} + \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, D}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_D^{m-1} + \\ &\quad \mathbf{b}_{\delta^{m-1}}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} - \mathbf{a}_{\delta^{m-1}, P}^{i_{m-1}, j_{m-1}, k_{m-1}} \delta_P^{m-1} \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

Vrijednost korekcije δ_P^{m-1} dobije se podrelaksiranjem korekcije iz grublje mreže za čitavu poddomenu:

$$\delta_p^{m-1} = \delta_p^{*m-1} + \iota_{\delta^{m-1}} \delta_p^m \quad (\text{E.13})$$

gdje je δ_p^{*m-1} najsvježije dosad proračunata vrijednost δ_p^{m-1} , $\iota_{\delta^{m-1}}$ faktor relaksacije, a veza među indeksima mreže m i $m-1$ definirana kao:

$$i_m = \frac{i_{m-1} - 1}{m_x^m} + 1 \quad (\text{E.14})$$

$$j_m = \frac{j_{m-1} - 1}{m_y^m} + 1 \quad (\text{E.15})$$

$$k_m = \frac{k_{m-1} - 1}{m_z^m} + 1 \quad (\text{E.16})$$

Ako se sa δ^0 označi fizikalna veličina φ ovime je dobiven potpun sistem algebarskih jednadžbi na svim nivoima multigrida. Postavlja se nadalje pitanje kako odabrati faktore okrupnjenja mreže m_x^m , m_y^m , m_z^m . Prema [55] i [130] pokazalo se da se greška najbolje otklanja kada su faktori okrupnjenja 2, ali kako broj kontrolnih volumena nije uvijek djeljiv s 2 koriste se po potrebi i drugi: 3, 5, 7 itd. Na primjer mreža 20x48x20 okrupnjavati će se prema sljedećoj shemi:

Tablica E.1 Faktori okrupnjenja mreže za multigrid na primjeru mreže 20x48x20

m	mreža	m_x^m	m_y^m	m_z^m
0	20x48x20			
1	10x24x10	2	2	2
2	5x12x5	2	2	2
3	1x6x1	5	2	5

Algoritam prema [53] kreće od dva prolaza rješavača (linijski Gauss-Seidel) prvo na najfinijoj mreži pa u slučaju da suma reziduala nije prepolovljena [137], prelazi na grublju mrežu:

$$R_{\delta^m} \leq 0.5 R_{\delta^m}^* \quad (\text{E.17})$$

gdje su R_{δ^m} i $R_{\delta^m}^*$ sume reziduala iz tekuće i prošle iteracije na m -tom nivou multigrida:

$$R_{\delta^m} = \sum_{i_m=1}^{n_x^m} \left[\sum_{j_m=1}^{n_y^m} \left[\sum_{k_m=1}^{n_z^m} \left| R_{\delta^m}^{i_m, j_m, k_m} \right| \right] \right] \quad (\text{E.18})$$

gdje su n_x^m , n_y^m , n_z^m broj elemenata u x , y , z smjeru mreže m -tog nivoa multigrida.

Smatra se da je iterativni postupak rješavanja sistema algebarskih jednadžbi korekcija m -tog nivoa multigrida iskonvergirao, ako je smanjio sumu reziduala za jedan red veličine od onoga iz prethodnog, $m-1$ nivoa multigrida:

$$R_{\delta^m} \leq 0.1 R_{\delta^{m-1}} \quad (\text{E.19})$$

Dozvoljena suma reziduala na nivou najfinije mreže propisana je međutim svojom apsolutnom vrijednošću:

$$R_{\delta^0} = R_{\varphi} \leq \varepsilon_{\varphi} \quad (\text{E.20})$$

F. GEAROVA METODA

Za rješavanje sistema običnih diferencijalnih jednačbi (3.89), kakav se dobije postavljenjem modela izgaranja, primijenjena je metoda integracije razvijena od Geara [42, 139]. Ta je metoda upravo namijenjena za rješavanje krutih (engl. *stiff*) sistema običnih diferencijalnih jednačbi, karakteriziranih velikom razlikom između pojedinih vremenskih konstanti sistema, tj. maksimalnog koraka integracije koji omogućava stabilnost sistema i vremena potrebnog da se postigne ravnotežno stanje. U sistemu kemijskih reakcija ta razlika može iznositi i desetak redova veličine za neka, kratka, područja integracije. Rješavanje takvog sistema klasičnim metodama s konstantnim korakom bi izazvalo vrlo neekonomično korištenje kompjuterskog vremena za razliku od Gearove metode s promjenjivim korakom integracije.

Sistem običnih diferencijalnih jednačbi je dan izrazom:

$$\dot{Y}_i = \frac{dY_i}{dt} = f_i(Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_\alpha}, t) \quad (\text{F.1})$$

uz zadane početne uvjete $Y_{i,0}$. U n -tom vremenskom trenutku t_n definirane su vrijednosti $Y_{i,n}$, $\dot{Y}_{i,n}$, te korak integracije (treba napomenuti da se indeks n ne ponaša po pravilima indeksne notacije nego služi samo kao oznaka n -tog koraka):

$$h_n = t_n - t_{n-1} \quad (\text{F.2})$$

Gearova metoda sastoji se od dva koraka, prediktorskog u kojem se računa aproksimacija veličina $Y_{i,n}$ i $h_n \dot{Y}_{i,n}$, te korektorskog koji iste veličine korigira tako da bi sistem običnih diferencijalnih jednačbi bio zadovoljen.

Prediktorski korak računa te veličine ovisno o redu Gearove metode q , na temelju vrijednosti iz q prošlih vremenskih koraka:

$$Y_{i,n} = \sum_{j=1}^q \alpha_j Y_{i,n-j} + h_n \beta_0 \dot{Y}_{i,n} \quad (\text{F.3})$$

$$h_n \dot{Y}_{i,n} = \sum_{j=1}^q \gamma_j Y_{i,n-j} + h_n \delta_0 \dot{Y}_{i,n} \quad (\text{F.4})$$

gdje su faktori α , β , γ i δ konstante koje ovise o metodi. Ako tako aproksimirane vrijednosti označimo s gornjim indeksom 0 moguće je jednačbu (F.3) zapisati kao:

$$Y_{i,n}^0 - h_n \beta_0 \dot{Y}_{i,n}^0 = \sum_{j=1}^q \alpha_j Y_{i,n-j} \quad (\text{F.5})$$

Uvrštavanjem u jednačbu (F.3) dobije se:

$$Y_{i,n} = Y_{i,n}^{[0]} + \beta_0 (h_n \dot{Y}_{i,n} - h_n \dot{Y}_{i,n}^{[0]}) \quad (\text{F.6})$$

Kako se u toj jednadžbi zajedno pojavljuju i $Y_{i,n}$ i $\dot{Y}_{i,n}$, jednadžbu treba riješiti iterativno. Jednadžba se može pisati kao:

$$g_i(Y_{1,n}, Y_{2,n}, \dots, Y_{n_\alpha, n}) = Y_{i,n} - Y_{i,n}^{[0]} - \beta_0(h_n \dot{Y}_{i,n} - h_n \dot{Y}_{i,n}^{[0]}) = 0 \quad (\text{F.7})$$

Pronalaženje nula tog sistema jednadžbi može se efikasno postići Newtonovom metodom:

$$P_{ij,n}^{[m]}(Y_{j,n}^{[m+1]} - Y_{j,n}^{[m]}) = -g_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha, n}^{[m]}) \quad (\text{F.8})$$

gdje je m broj iteracije a:

$$P_{ij,n}^{[m]} = \delta_{ij} - h_n \beta_0 \left(\frac{\partial f_i}{\partial Y_j} \right)_{Y_{i,n}^{[m]}} \quad (\text{F.9})$$

Iz jednadžbe (F.3) očita je potreba za praćenjem povijesti rješenja. Umjesto stvarnih vrijednosti $Y_{i,n-1}$, $Y_{i,n-2}$, ..., $Y_{i,n-q}$ spremaju se aproksimacije vremenskih derivacija u vektor na sljedeći način:

$$\mathbf{z}_{i,n} = \left[Y_{i,n}, h_n \dot{Y}_{i,n}, \frac{h_n^2}{2!} \ddot{Y}_{i,n}, \dots, \frac{h_n^q}{q!} Y_{i,n}^{(q)} \right] \quad (\text{F.10})$$

Ako je vektor $\mathbf{z}_{i,n-1}$ poznat, predikcija vektora $\mathbf{z}_{i,n}^{[0]}$ može se dobiti njegovom multiplikacijom s gornjotrokutastom Pascalovom matricom:

$$\mathbf{z}_{ik,n}^{[0]} = A_{ij}(q) \mathbf{z}_{jk,n-1} \quad (\text{F.11})$$

gdje je:

$$\mathbf{A}(q) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ & 1 & 2 & 3 & \dots & q \\ & & 1 & 3 & \dots & \\ & & & 1 & \dots & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{F.12})$$

Nakon što je iterativnim putem izračunat korektor, vektor $\mathbf{z}_{i,n}$ se korigira:

$$\mathbf{z}_{ik,n} = \mathbf{z}_{ik,n}^{[0]} + \mathbf{c}_{i,n} l_k \quad (\text{F.13})$$

gdje je:

$$\mathbf{c}_{i,n} = \frac{Y_{i,n} - Y_{i,n}^{[0]}}{l_0} \quad (\text{F.14})$$

a l_k , ($k = 0, \dots, q$) su konstante koje ovise o metodi i njenom redu. Konstanta l_0 je identična konstanti β_0 u jednadžbi (F.3), a s ostalima je dana u tablici F.1.

Tablica F.1. Konstante integracije Gearove metode [139]

$q =$	1	2	3	4	5	6
l_0	1	2/3	6/11	24/50	120/274	720/1764
l_1	1	1	1	1	1	1
l_2		1/3	6/11	35/50	225/274	1624/1764
l_3			1/11	10/50	85/274	735/1764
l_4				1/50	15/274	175/1764
l_5					1/274	21/1764
l_6						1/1764

Potpuni je algoritam dan sljedećim skupom izraza:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{z}_{ik,n}^{[0]} &= \mathbf{A}_{ij}(q) \mathbf{z}_{jk,n-1} && \text{prediktor} \\
 Y_{i,n}^{[m+1]} &= Y_{i,n}^{[m]} + l_0 (P_{ij,n}^{[m]})^{-1} F_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}) \\
 h_n \dot{Y}_{i,n}^{[m+1]} &= h_n \dot{Y}_{i,n}^{[m]} + l_1 (P_{ij,n}^{[m]})^{-1} F_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}) \\
 F_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}) &= h_n f_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}, t_n) - h_n \dot{Y}_{i,n}^{[m]} \\
 \mathbf{c}_{i,n} &= \sum_{m=0}^M (P_{ij,n}^{[m]})^{-1} F_i(Y_{1,n}^{[m]}, Y_{2,n}^{[m]}, \dots, Y_{n_\alpha,n}^{[m]}) && \text{korektorske iteracije} \\
 &&& m = 0, 1, \dots, M-1 \\
 Y_{i,n} &= Y_{i,n}^{[0]} + \mathbf{c}_{i,n} l_0 \\
 \mathbf{z}_{ik,n} &= \mathbf{z}_{ik,n}^{[0]} + \mathbf{c}_{i,n} l_k \quad k = 0, \dots, q && \text{(F.15)}
 \end{aligned}$$

Prema diskusiji o stabilnosti metode [42] može se zaključiti da se algoritam može koristiti do uključivo šestog reda. Zato su i konstante dane samo do toga reda metode.

Do sada nije ništa rečeno kako se računaju početne vrijednosti vektora $\mathbf{z}_{i,n}$, tj. prije nego što je moguće izračunati nekoliko derivacija, te kako se mijenja veličina koraka integracije. Gearova metoda integracije sadrži algoritam za automatsku promjenu veličine koraka i reda metode kako bi se smanjilo vrijeme potrebno za rješavanje sistema običnih diferencijalnih jednadžbi. Korak je mali samo u području krutosti sistema, dok je u ostalom području integracije maksimaliziran tako da bi se još uvijek zadovoljili kriteriji stabilnosti.

U prvih se dva ili tri koraka Gearova metoda reducira na Eulerovu metodu prvog reda s vrlo malim koracima, da bi kasnije pokušala povećati korak i red metode. Za to je potrebno procijeniti grešku odbacivanja koraka integracije pri aktualnom redu metode, te jednom redu više i jednom redu niže. Greška odbacivanja jednog koraka za i -tu zavisnu varijablu iznosi:

$$C_{q+1}h_n^{q+1}Y_{i,n}^{(q+1)} + O(h_n^{q+2}) \quad (\text{F.16})$$

gdje C_{q+1} ovisi o metodi. Drugi se član zanemaruje, a prvi se aproksimira na sljedeći način:

$$Y_{i,n}^{(q+1)} \approx \frac{Y_{i,n}^{(q)} - Y_{i,n-1}^{(q)}}{h_n} \quad (\text{F.17})$$

Korekcija zadnjeg člana vektora $\mathbf{z}_{i,q,n}$ iznosi:

$$l_q c_{i,n} = \frac{h_n^q Y_{i,n}^{(q)}}{q!} - \frac{h_n^q Y_{i,n-1}^{(q)}}{q!} \quad (\text{F.18})$$

Kombinacijom tih dvaju izraza dobije se aproksimacija prvog člana greške odbacivanja (F.16):

$$C_{q+1}h_n^{q+1}Y_{i,n}^{(q+1)} \approx C_{q+1}l_q c q! \quad (\text{F.19})$$

Iterativni postupak računanja korekcije n -tog koraka je konvergirao kada je sljedeći test zadovoljen:

$$D_2 = \left(\frac{c_{i,n}}{\varepsilon_i} \right)^2 \leq E_2 \quad (\text{F.20})$$

gdje su:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_r |Y_{i,n-1}| + \varepsilon_a \quad (\text{F.21})$$

$$E_2 = n_\alpha \left(\frac{1}{l_q C_{q+1} q!} \right)^2 = n_\alpha \left(\frac{q+1}{l_q q!!} \right)^2 \quad (\text{F.22})$$

a ε_r i ε_a su relativna i apsolutna dozvoljena greška, tj. za male vrijednosti $|Y_{i,n-1}|$ koristi se apsolutna dozvoljena greška, a za veće vrijednosti koristi se relativna dozvoljena greška, što omogućuje da početna vrijednost $|Y_{i,n-1}|$ bude nula. U slučaju da uvjet (F.20) nije zadovoljen, čitav se korak ponavlja, ali s manjim korakom:

$$h_{n,2} = \frac{h_n}{\rho_2} \quad (\text{F.23})$$

gdje je ρ_2 faktor promjene koraka integracije:

$$\rho_2 = 1.2 \left(\frac{D_2}{E_2} \right)^{\frac{1}{2(q+1)}} \quad (\text{F.24})$$

Faktor 1.2 uzima u obzir zanemareni dio greške odbacivanja (F.16).

Da bi se smanjio red metode, greška odbacivanja iznosi:

$$C_q h_n^q Y_{i,n}^{(q)} + O(h_n^{q+1}) \quad (\text{F.25})$$

Postupa se kao i s greškom odbacivanja (F.16) s time što je sada prvi član poznat i proporcionalan zadnjem članu vektora $\mathbf{z}_{iq,n}$. Uvjet koji se sada postavlja je dakle:

$$D_1 = \left(\frac{\mathbf{z}_{iq,n}}{\varepsilon_i} \right)^2 \leq E_1 \quad (\text{F.26})$$

gdje je:

$$E_1 = n_\alpha \left(\frac{1}{I_q C_q q!} \right)^2 = n_\alpha \left(\frac{1}{I_q (q-1)!} \right)^2 \quad (\text{F.27})$$

Faktor promjene koraka integracije procjenjuje se za slučaj smanjivanja reda metode sa:

$$\rho_1 = 1.3 \left(\frac{D_1}{E_1} \right)^{\frac{1}{2q}} \quad (\text{F.28})$$

Faktor 1.3 u ovom izrazu služi da bi se dalo prednost ne mijenjanju reda metode.

Greška odbacivanja u višem redu metode iznosi:

$$C_{q+2} h_n^{q+2} Y_{i,n}^{(q+2)} + O(h_n^{q+3}) \quad (\text{F.29})$$

Drugi član se zanemaruje, a prvi se aproksimira na sljedeći način:

$$h_n^{q+2} Y_{i,n}^{(q+2)} = h_n^{q+1} Y_{i,n}^{(q+1)} - h_n^{q+1} Y_{i,n-1}^{(q+1)} = I_q q! (c_{i,n} - c_{i,n-1}) \quad (\text{F.30})$$

a uvjet je dan nejednadžbom:

$$D_3 = \left(\frac{c_{i,n} - c_{i,n-1}}{\varepsilon_i} \right)^2 \leq E_3 \quad (\text{F.31})$$

gdje je:

$$E_3 = n_\alpha \left(\frac{1}{I_q C_q q!} \right)^2 = n_\alpha \left(\frac{q+2}{I_q q!} \right)^2 \quad (\text{F.32})$$

Faktor promjene koraka integracije procjenjuje se za slučaj povećanja reda metode sa:

$$\rho_3 = 1.4 \left(\frac{D_3}{E_3} \right)^{\frac{1}{2(q+2)}} \quad (\text{F.33})$$

Faktor 1.4 i u ovom izrazu služi da bi se dalo prednost ne mijenjanju ili smanjivanju reda metode. Najmanja vrijednost od tri faktora ρ_1 , ρ_2 i ρ_3 će biti izabrana za dijeljenje koraka h_n . Ako je najmanji ρ_1 tada se red metode smanjuje, ako je najmanji ρ_3 tada se red metode povećava, a ako je pak najmanji faktor ρ_2 tada se red ne mijenja. Tome treba dodati i još nekoliko heurističkih uvjeta. Ukoliko je faktor povećanja korak manji od 1.1 onda se povećanje ne ostvaruje jer će greška nastala prilikom povećanja sasvim prebrisati djelovanje ubrzanja integracije. Iz istih razloga (povećanje koraka integracije unosi grešku) nakon promjene koraka integracije, $q+2$ koraka se ne dozvoljava nova promjena.

Da bi se smanjilo vrijeme računanja, inverzna matrica $(P_{ij,n}^m)^{-1}$ se ne evaluira u svakom koraku. Samo ako korak ne konvergira, ili ako je faktor h_n/l_0 promijenjen za više od 30%, te u najboljem slučaju ako je proteklo 20 koraka od zadnje evaluacije. U slučaju da i nakon evaluacije inverzne matrice postupak računanja korekcije koraka ne konvergira veličina koraka integracije je podijeljena s 4. Ako niti nakon 5 smanjivanja koraka postupak računanja korekcije i dalje ne konvergira, red metode se smanji na 1 a korak se podijeli s 10 i krene se ponovo od zadnjeg prihvaćenog koraka.

POPIS OZNAKA

Veličine

veličina	opis	jedinica
a	koeficijent interpolacionih polinoma	n.d.
	koeficijent u diskretiziranim jednažbama	kg/s
	donja granica integracije u Gauss-Legendreovoj metodi	m
	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
A	površina	m ²
A_i	faktori u Gauss-Legendreovoj metodi integracije	–
A_{ij}	Pascalova gornjotrokutasta matrica	–
a_t	koeficijent u temperaturnoj jednažbi	W/K
b	slobodni koeficijent u diskretiziranim jednažbama	*kg/s
	gornja granica integracije u Gauss-Legendreovoj metodi	m
	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
b_1	konstanta modela tri siva plina	–
b_2	konstanta modela tri siva plina	1/K
b_t	slobodni koeficijent u temperaturnoj jednažbi	W
c	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
	korektor u Gearovoj metodi	kg/kg
C	koncentracija	kmol/m ³
	konstanta	n.d.
	konstanta Gearove metode	–
C_P	specifična toplina	J/kg K
C_P	molarna specifična toplina	J/kmol K
d	koeficijent u jednažbi tlaka	m ² s/kg
	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
D	difuzivna provodnost	kg/m ² s, Pa s/m
	faktor u Gearovoj metodi	–
	protok pare	t/h
D_{ij}	tenzor brzine deformacije	1/s
e	gustoća zračenja	W/m ²
E	faktor u Gearovoj metodi	–
E_a	energija aktivacije	J/kmol
e_λ	spektralna gustoća zračenja	W/m ³
f	specifična masena sila	m/s ²
F	jačina konvekcije	kg/m ² s
g	specifična gravitacijska sila, gravitacijska konstanta	m/s ²
Δg	promjena molarne spec. Gibbsove slobodne energije kem. vrste	J/kmol
ΔG	promjena molarne spec. Gibbsove slobodne energije reakcije	J/kmol
\overline{gg}	površina direktne izmjene zračenjem volumen-volumen	m ²
\overline{gs}	površina direktne izmjene zračenjem volumen-površina	m ²

veličina	opis	jedinica
h	specifična entalpija	J/kg
	visina	m
	korak integracije	s
Δh	specifična entalpija	J/kg
ΔH	molarna specifična entalpija	J/kmol
H_d	donja ogrjevna vrijednost jedinice goriva	J/kg, J/m ³
i	intenzitet zračenja	W/m ²
i_λ	spektralni intenzitet zračenja	W/m ³
j	fluks kemijske vrste	kg/m ² s
J	fluks fizikalne veličine	*kg/m ² s
k	brzina izgaranja (reakcije)	(kmol/m ³) ^{1-m} /s
	turbulentna kinetička energije	J/kg, m ² /s ²
	konstanta modela tri siva plina	1/bar m
K	koeficijent apsorpcije	1/m
k_0	koeficijent frekvencije sudara	(kmol/m ³) ^{1-m} /sK _{α}
K_C	konstanta ravnoteže bazirana na koncentracijama	(kmol/m ³) ^{Δn}
K_n	konstanta ravnoteže bazirana na broju molova	kmol ^{Δn}
K_p	konstanta ravnoteže bazirana na parcijalnom tlaku	(N/m ²) ^{Δn}
K_X	konstanta ravnoteže bazirana na molnim udjelima	–
K_Y	konstanta ravnoteže bazirana na masenim udjelima	–
l	konstanta Gearove metode	–
L	srednja duljina puta zrake	m
l_m	duljina puta miješanja	m
ℓ	karakteristični put materijalne čestice	m
m	faktor okrupnjenja mreže	–
M	jedna od kemijskih vrsta	–
\dot{m}	maseni protok	kg/s
n	broj molova	kmol
	broj zraka, broj kontrolnih volumena	–
	stupanj Legendreovog polinoma	–
Δn	razlika sume stehiometrijskih koef. produkata i reaktanata	kmol
n_i	vektor normale	m
n_r	broj parova suprostavljenih reakcija koji se promatra	–
n_T	ukupni broj molova u smjesi	kmol
n_α	broj kemijskih vrsta u smjesi	–
p	tlak	Pa, bar
	parcijalni tlak	Pa, bar
	faktor promjene koraka u Gearovoj metodi	–
P_{ij}	matrica u Gearovoj metodi	–
Pr	Prandtlov broj, odnos viskozne sile i kondukcije	–
q	gustoća toplinskog toka	W/m ²
	red metode integracije	–
Q	toplinski tok	W
q''	gustoća toplinskog toka	W/m ²
q'''	volumenska gustoća toplinskog toka	W/m ³
r	put, udaljenost	m

veličina	opis	jedinica
R	opća plinska konstanta	J/kmol K
	rezidual	*kg/s
R_C	radijus	m
Re	Reynoldsov broj, odnos viskozne i inercione sile	–
s	udaljenost	m
S	izvor fizikalne veličine	*kg/m ³ s
ΔS	molarna specifična entropija	J/kmol K
\overline{sg}	površina direktne izmjene zračenjem površina-volumen	m ²
\overline{ss}	površina direktne izmjene zračenjem površina-površina	m ²
$S_{t,P}$	diskretizirani izvor u temperaturnoj jednadžbi	W/m ³ K
$S_{\varphi,P}$	diskretizirani izvor fizikalne veličine	kg/m ³ s
t	vrijeme	s
	temperatura	°C
T	temperatura	K
\mathcal{T}	karakteristično vrijeme materijalne čestice	s
t_i	faktori u Gauss-Legendreovoj metodi integracije	–
u	brzina u smjeru x -osi	m/s
v	brzina	m/s
	brzina u smjeru y -osi	m/s
V	volumen	m ³
w	brzina u smjeru z -osi	m/s
W	molekularna masa	kg/kmol
x	prostorna koordinata	m
X	molarni udio	kmol/kmol
y	prostorna koordinata	m
Y	maseni udio	kg/kg
z	prostorna koordinata	m
\mathbf{z}	vektor povijesti rješenja u Gearovoj metodi	kg/kg
α	eksponent nad temperaturom u Arrheniusovom izrazu	–
	koeficijent apsorpcije	1/m
	apsorptivnost	–
	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
	konstanta metode integracije sistema običnih dif. jed.	–
β	konstanta metode integracije sistema običnih dif. jed.	–
γ	koeficijent Thomasovog algoritma	n.d.
	konstanta metode integracije sistema običnih dif. jed.	–
Γ	koeficijent difuzije fizikalne veličine	Pa s
δ	korekcija	*
	konstanta metode integracije sistema običnih dif. jed.	–
δ_{ij}	jedinični tenzor (Kroneckerov δ)	–
ε	emisivnost	–
	disipacija turbulentne kinetičke energije	m ² /s ³
	dozvoljena apsolutna greška	*kg/s
ε_a	dozvoljena apsolutna greška u Gearovoj metodi	kg/kg
ε_i	ukupna dozvoljena apsolutna greška u Gearovoj metodi	kg/kg
ε_r	dozvoljena relativna greška u Gearovoj metodi	–
ζ	faktor zida pri prijelazu topline	–

veličina	opis	jedinica
ϑ	kut između normale na površinu i zrake	rad
ι	faktor relaksacije	–
λ	srednji slobodni put molekule	m
	valna duljina	m
	koeficijent toplinski	W/m K
	pretičak zraka	–
μ	dinamički koeficijent viskoznosti	Pa s
ν	stehiometrijski koeficijent	kmol
ρ	gustoća	kg/m ³
	refleksivnost	–
σ	Prandtl-Schmidtov broj, odnos viskozne sile i difuzije	–
	Stefan-Boltzmannova konstanta	W/m ² K ⁴
σ_{ij}	tenzor naprežanja	N/m ²
Σ_{ij}	tenzor viskoznih naprežanja	N/m ²
τ	srednje slobodno vrijeme molekule	s
	faktor slabljenja zrake	–
	vrijeme	s
τ_c	vremenska konstanta za jednu reakciju i jednu vrstu	s
φ	fizikalna veličina	*
	kut, nezavisna varijabla u sfernom koordinatnom sustavu	rad
ξ	geometrijski težinski faktor	–
ω	brzina produkcije kemijske vrste	kg/m ³ s
	prostorni kut	srad

objašnjenja za jedinice

m	broj reaktanata u određenoj reakciji
n.d.	nije definirana jednoznačno
–	veličina je bezdimenzionalna
*	jedinica ovisi o jedinici fizikalno svojstva φ

Konstante

konstanta	opis	iznos
C_1	konstanta u Planckovom zakonu	0.59544 10 ⁻¹⁶ W m ²
C_2	konstanta u Planckovom zakonu	14.388 10 ⁻⁶ m K
g	gravitacijska konstanta	9.80665 m/s ²
R	opća plinska konstanta	8314 J/kmol K
δ_{ij}	jedinični tenzor (Kroneckerov δ)	$i \neq j \Rightarrow \delta_{ij} = 0$ $i = j \Rightarrow \delta_{ij} = 1$
σ	Stefan-Boltzmannova konstanta	5.6696 10 ⁻⁸ W/m ² K ⁴

Donji indeksi

indeks	opis
0	početna vrijednost najfinija mreža, nulti nivo multigrida

indeks	opis
1	prvi nivo multigrida
<i>a</i>	apsorbiran
<i>b</i>	reakcija u povratnom smjeru (engl. <i>backward</i>) crno tijelo
<i>B</i>	gorivo
<i>bundle</i>	paket, zraka, kvant energije
<i>C</i>	izgaranje koncentracija slobodni dio izvornog člana
<i>d</i>	engl. <i>down</i> , donja kontrolna površina kontrolnog volumena
<i>D</i>	engl. <i>down</i> , donji kontrolni volumen, <i>i, j, k-1</i>
<i>e</i>	ekvilibrijum, ravnoteža emitiran efektivan engl. <i>east</i> , istočna kontrolna površina kontrolnog volumena
<i>E</i>	engl. <i>east</i> , istočni kontrolni volumen, <i>i+1, j, k</i>
<i>eff</i>	efektivan
<i>f</i>	reakcija od reaktanata do produkata (engl. <i>forward</i>) formacija masene sile
<i>g</i>	plin, plinski volumen
<i>h</i>	entalpija
<i>i</i>	indeks u indeksnoj notaciji <i>i</i> -ta kemijska vrsta <i>i</i> -ti kontrolni volumen u smjeru <i>x</i> -osi <i>i</i> -ti volumen ili površina izlazni <i>i</i> -ta diferencijalna jednačica
<i>j</i>	indeks u indeksnoj notaciji <i>j</i> -ta reakcija <i>j</i> -ti kontrolni volumen u smjeru <i>y</i> -osi <i>j</i> -ti red metode
<i>k</i>	indeks u indeksnoj notaciji <i>k</i> -ta kemijska vrsta <i>k</i> -ti kontrolni volumen u smjeru <i>z</i> -osi
<i>kem</i>	kemijski
<i>konv</i>	konvektivni
<i>l</i>	indeks koeficijenta
<i>m</i>	materijalan mehanički <i>m</i> -ta dimenzija <i>m</i> -ti nivo multigrida
<i>M</i>	jedna od kemijskih vrsta
<i>n</i>	broj molova engl. <i>north</i> , sjeverna kontrolna površina kontrolnog volumena <i>n</i> -ti korak, vremenski trenutak <i>n</i> -ti sivi plin
<i>N</i>	engl. <i>north</i> , sjeverni kontrolni volumen, <i>i, j+1, k</i>

indeks	opis
np	susjedni kontrolni volumen, jedan od W, E, S, N, D, U susjedna kontrolna površina, jedna od w, e, s, n, d, u
p	parcijalni tlak sila tlaka
P	engl. <i>point</i> , centralni kontrolni volumen, i, j, k
pr	pregrijanja
r	reflektiran zadržavanje, rezidualan
R	radijacija
s	površina, stijenka engl. <i>south</i> , južna kontrolna površina kontrolnog volumena
S	engl. <i>south</i> , južni kontrolni volumen, $i, j-1, k$
t	turbulentan temperatura
T	temperatura
u	mreža pomaknuta u smjeru x -osi engl. <i>up</i> , gornja kontrolna površina kontrolnog volumena brzina u ulazni
U	engl. <i>up</i> , gornji kontrolni volumen, $i, j, k+1$
v	volumenski mreža pomaknuta u smjeru y -osi brzina v
w	mreža pomaknuta u smjeru z -osi engl. <i>west</i> , zapadna kontrolna površina kontrolnog volumena brzina w zid, hlađenje na zidu
W	engl. <i>west</i> , zapadni kontrolni volumen, $i-1, j, k$
x	u smjeru x -osi
X	molarni udio
y	u smjeru y -osi
Y	maseni udio
z	u smjeru z -osi
α	kemijska vrsta
λ	spektralni
μ	viskozna sila
φ	fizikalna veličina

Gornji indeksi

indeks	opis
0	standardna vrijednost najfinija mreža, nulti nivo multigrida
[0]	aproksimacija vrijednosti u sljedećem koraku
1	prvi nivo multigrida
i	i -ti kontrolni volumen u smjeru x -osi
j	j -ti kontrolni volumen u smjeru y -osi

indeks	opis
k	k -ti kontrolni volumen u smjeru z -osi
m	m -ti nivo multigrada
$[m]$	m -ta iteracija
(q)	q -ta derivacija po vremenu
r	reakcija

Dijakritički znakovi

znak	opis
–	usrednjeni dio fizikalne veličine, Reynoldsovo usrednjavanje
~	usrednjeni dio fizikalne veličine, Favreovo usrednjavanje
·	promjena po vremenu, derivacija po vremenu
··	druga derivacija po vremenu
'	odnosi se na stehiometrijske koeficijente reaktanata usmjereno svojstvo pulzirajući dio fizikalne veličine nakon Reynoldsovog usrednjavanja pseudovelichina, neka veličina uvećana ili umanjena za neki dio korekcija
''	novoizračunata vrijednost, izračunata u tekućoj iteraciji
'''	odnosi se na stehiometrijske koeficijente produkata svedeno na površinu pulzirajući dio fizikalne veličine nakon Favreovog usrednjavanja
''''	svedeno na volumen
*	prethodna vrijednost, izračunata u prethodnoj iteraciji
	predikcija
	pretpostavljena vrijednost
**	prva korekcija
***	druga korekcija
-	odlazeće
+	dolazeće
ˆ	pseudovelichina, neka veličina uvećana ili umanjena za neki dio
ˆ	pseudovelichina, neka veličina uvećana ili umanjena za neki dio

Relacije

indeks	opis
$d\varphi$	infinitesimalna razlika
$\partial\varphi$	infinitesimalna razlika
$\delta\varphi$	konačna razlika
$\Delta\varphi$	konačna razlika
$ \varphi $	apsolutna vrijednost
$\ \varphi_1, \varphi_2\ $	veća vrijednost od φ_1 i φ_2
$O(\varphi)$	red veličine

LITERATURA

- [1] Hottel, H.C., Sarofim, A.F., *Radiant Transfer*, McGraw-Hill Book Company, New York (1967)
- [2] Kuznecov, N.V. i dr., *Tjeplovoi raschot koteljnih agregatov-normativni metod, Energia*, Moskva (1973)
- [3] Johnson, T.R., *Application of the Zone Method of Analysis to the Calculation of Heat Transfer from Luminous Flames*, PhD thesis, University of Sheffield (1971)
- [4] Field, M.A., Gill, D.W, Morgan, B.B, Hawksley, P.G.W., *Combustion of Pulverised Coal*, The British Coal Utilization Research Association, Leatherhead (1967)
- [5] Görner, K., *Technische Verbrennungssysteme*, Springer-Verlag, Berlin (1991)
- [6] Görner, K., Strömungsvorgänge in Feuerräumen von Dampferzeugern - Mathematisches Modell und Simulation, *VGB Kraftwerkstechnik* **66**, 224-233 (1986)
- [7] Richter, W., Anwendung von Berechnungsmodellen für Feuerräume, *VGB Kraftwerkstechnik* **62**, 845-852 (1982)
- [8] Carvalho, M.G., Lockwood, F.C., Thermal comparison of glass furnace operation with oil and natural gas, *Glastech. Ber.* **63**, 233-243 (1990)
- [9] Águas, M.P.N., Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., Modelling the heat transfer in a fluidized bed combustor, *Int. J. Heat & Technology* **10**, 107-124 (1992)
- [10] Coelho, P.J., Carvalho, M.G., Heat transfer in power station boilers, *ASME AES, Thermodynamics and the Design, Analyses and Improvements of Energy Systems* **27**, 365-372 (1992)
- [11] Saraiva, P.C., Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., Mathematical simulation of a circulating fluidized bed, *Combust. Sci. and Tech.* **93**, 223-243 (1993)
- [12] Carvalho, M.G., Mathematical modelling of industrial furnaces and boilers, Invited Lecture, *Proc. of the 3rd European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*, Lisbon, 45pg. (1995)
- [13] Miller, J.A., Bowman, C.T., Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion, *J. P. Energy Combust. Sci.* **15**, 287-338 (1989)
- [14] Champion, M., Bray, K.N.C., Moss, J.B., The turbulent combustion of a propane-air mixture, *Acta Astronaut.* **4**, 291 (1978)
- [15] Cremer, H., Zur Reaktionskinetik der Methan-Oxidation, *Chemie Ing. Techn.* **44**, 8 (1972)
- [16] Bockhorn, H., Lutz, G., Reaction models for the simulation of the oxidation of carbon monoxide in turbulent diffusion flames, *Chem. Eng. Technol.* **10**, 43 (1987)
- [17] Bockhorn, H., Simulation chemischer Reaktionen in turbulenten Strömungen, *Chem. Ing. Techn.* **63**, 715-724 (1991)
- [18] Glarborg, P., Lilleheie, N.I., Byggstřyl, S., Magnussen, B.F., Kilpinen, P., Hupa, M., A reduced mechanism for nitrogen chemistry in methane combustion, *Proc. of 24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 889-898 (1992)
- [19] Drake, M.C., Blint, R.J., Thermal NO_x in stretched laminar opposed-flow diffusion flames with CO/H₂/N₂ fuel, *Combustion and Flame* **76**, 151-167 (1989)
- [20] Drake, M.C., Blint, R.J., Calculations of NO_x formation pathways in propagating laminar, high pressure premixed CH₄/air flames, *Comb. Sci. and Tech.* **75**, 261-285 (1991)

- [21] Vranos, A., Hall, R.J., Influence of radiative loss on nitric oxide formation in counterflow diffusion flames at high pressure, *Combustion and Flame* **93**, 230-238 (1993)
- [22] Sano, T., NO₂ formation in laminar flames, *Comb. Sci. and Tech.* **29**, 261-275 (1982)
- [23] Michaud, M.G., Westmoreland, P.R., Feitelberg, A.S., Chemical mechanisms of NO_x formation for gas turbine conditions, *Proc. of 24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 879-887 (1992)
- [24] Correa, S.M., Smooke, M.D., NO_x in parametrically varied methane flames, *Proc. of 23th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 289-295 (1990)
- [25] Miller, J.A., Branch, M.C., McLean, W.J., Chandler, D.W., Smooke, M.D., Kee, R.J., The conversion of HCN to NO and N₂ in H₂-O₂-HCN-Ar flames at low pressure, *Proc. of 20th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 673-684 (1984)
- [26] Kuo, K.K., *Principles of Combustion*, John Wiley & Sons, New York (1986)
- [27] Patankar, S.V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington (1980)
- [28] Voss, J.B., Calculating turbulent reacting flows using finite chemical kinetics, *AIAA Journal* **25**, 1365-1372 (1987)
- [29] Bray, K.N.C., Turbulent flows with premixed reactants, Libby, P.A., Williams, F.A. (eds.), *Turbulent Reacting Flows*, Springer-Verlag, Berlin, 115 (1980)
- [30] Behrendt, F., Bockhorn, H., Rogg, B., Warnatz, J., Modeling of turbulent CO/air diffusion flames with detailed chemistry, Warnatz, J., Jäger, W. (eds.), *Complex Chemical Reaction Systems - Mathematical Modeling and Simulation*, Springer-Verlag, Berlin, 376 (1987)
- [31] Peters, N., Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, *Prog. Energy Combustion Sci.* **10**, 319 (1984)
- [32] Williams, F.A., Recent advances in theoretical descriptions of turbulent diffusion flames, Murthy, S.N.B. (ed.), *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*, Plenum Press, New York, 189 (1975)
- [33] Bilger, R.W., Turbulent flows with nonpremixed reactants, Libby, P.A., Williams, F.A. (eds.), *Turbulent Reacting Flows*, Springer-Verlag, Berlin, 65 (1980)
- [34] Rogg, B., Behrendt, F., Warnatz, J., Turbulent non-premixed combustion in partially premixed diffusion flamelets with detailed chemistry, *Proc. of 21st Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh (1987)
- [35] O'Brien, E.E., The probability density function (pdf) approach to reacting turbulent flows, Libby, P.A., Williams, F.A. (eds.), *Turbulent Reacting Flows*, Springer-Verlag, Berlin, 185 (1980)
- [36] Pope, S.B., Pdf methods for turbulent reactive flows, *Prog. Energy Combust. Sci.* **11**, 119 (1985)
- [37] Janicka, J., Kollman, W., A two-variables formalism for the treatment of chemical reactions in turbulent H₂-air diffusion flames, *Proc. of 17th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 421 (1979)
- [38] Janicka, J., Kolbe, W., Kollman, W., The solution of a pdf transport equation for turbulent diffusion flames, *Proc. of 26th Heat Transfer and Fluid Mechanics Institute*, 296 (1978)
- [39] Spalding, D.B., Mixing and chemical reaction steady, confined turbulent flames, *Proc. of 13th Symposium on Combustion*, Pittsburgh, 643 (1970)
- [40] Spalding, D.B., Development of the Eddy-Breakup model of the turbulent combustion, *Proc. of 16th Symposium on Combustion*, Pittsburgh, 1657 (1976)

- [41] Bray, K.N.C., Moss, J.B., A unified statistical model of the premixed turbulent flame, *Acta Astronaut.* **4**, 291 (1977)
- [42] Gear, C.W., The automatic integration of ordinary differential equations, *Comm. ACM* **14**, 176-179 (1971)
- [43] Kreuh, L., *Generatori pare*, Školska knjiga, Zagreb (1978)
- [44] Barrow, G.M., *Physical Chemistry*, McGraw Hill, New York (1966)
- [45] Welty, J.R., *Engineering Heat Transfer*, John Wiley & Sons, New York (1978)
- [46] Shih, T.M., *Numerical Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington (1984)
- [47] Schnell, U., Görner, K., Benim, A.C., *Matematische Modellierung von Kohlenstaubflammen*, 3. TECFLAM-Seminar, Karlsruhe (1987)
- [48] Gosman, A.D., Pun, W.M., Runchal, A.K., Spalding, D.B., Wolshtein, M., *Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows*, Academic Press, London, New York (1969)
- [49] Patankar, S.V., A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations, *Num. Heat Transfer* **2** (1979)
- [50] Issa, R.J., Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator splitting, *J. Comput. Physics* **62**, 40 (1985)
- [51] Jang, D.S., Jetli, R., Acharya, S., Comparison of the PISO, SIMPLER and SIMPLEC algorithms for the treatment of the pressure-velocity coupling in steady flow problems, *Num. Heat Transfer* **10**, 209 (1986)
- [52] Duić, N., *Trodimezionalni matematički model procesa u ložištu generatora pare*, magisterij, FSB, Zagreb, 121 str. (1993)
- [53] Hutchinson, B.R., Raithby, G.D., A multigrid method based on the additive correction strategy, *Num. Heat Transfer* **9**, 511 (1986)
- [54] Bogdan, Ž., Duić, N., Primjena višemrežne korektivne metode na rješavanje strujanja u ložištu generatora pare, *Zbornik radova FSB XVII*, Zagreb, 147-154 (1993)
- [55] Duić, N., Schneider, D.R., Bogdan, Ž., Sensitivity analyses of the additive correction multigrid method applied to furnace modeling, *18th International Conference Information Technology Interfaces '96*, Pula, 383-392 (1996)
- [56] Rogallo, R.S., Moin, P., Numerical simulation of turbulent flow, *Annual Review of Fluid Mechanics* **16**, 357-372 (1984)
- [57] Kim, J., Moin, P., Moser, R., Turbulence statistics in fully developed channel flow at Reynolds number, *J. Fluid Mechanics* **177**, 133-166 (1987)
- [58] Miyake, Y., Tsujimoto, K., Beppu, H., DNS of a turbulent flow in a wavy channel, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [59] Launder, B.E., Spalding, D.B., *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, London, New York (1972)
- [60] Wilcox, D.C., *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries, Inc., La Cañada, CA (1993)
- [61] Prandtl, L., Bericht über Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz, *ZAMM* **5**, 136 (1925)
- [62] Harlow, F.H., Nakayama, P.I., Transport of turbulence energy decay rate, *Los Alamos Sci. Lab. Univ. California Rep LA 3854*, Los Alamos (1968)
- [63] Deardorff, J.W., A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers, *J. Fluid Mechanics* **41**, 453-480 (1970)
- [64] Schumann, U., Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli, *J. Comp. Physics* **18**, 376-404 (1975)

- [65] Gao, S., Voke, P.R., Large-eddy simulation of turbulent heat transport in impinging jets, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [66] Gosman, A.D., Lockwood, F.C., Incorporation of a flux model for radiation into a finite-difference procedure for furnace calculations, *Proc. of 14th Symposium (Int.) on Combustion*, Pittsburgh, 661-671 (1973)
- [67] Hottel, H.C., Cohen, E.S., Radiant heat exchange in a gas filled enclosure: allowance for nonuniformity of gas temperature, *A.I.Ch.E.J.* **4**, 3 (1958)
- [68] Howell, J.R., Application of Monte Carlo to heat transfer problems, *Advances in Heat Transfer*, Vol. **5**, Academic Press, New York (1968)
- [69] Steward, F.R., Cannon, P., The calculation of radiative heat flux in a cylindrical furnace using the Monte Carlo method, *Int. J. Heat Mass Transfer* **14**, 245-262 (1971)
- [70] Lockwood, F.C., Shah, N.G., A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures, *Proc. of 18th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1405-1414 (1981)
- [71] Chai, J.C., Lee, H.S., Patankar, S.V., Finite volume method for radiation heat transfer, *J. of Thermophysics and Heat Transfer* **8**, 419-425 (1994)
- [72] Coelho, P.J., Afgan, N., Carvalho, M.G., rad u pripremi, privatna komunikacija (1995)
- [73] Bogdan, Ž., Duić, N., Schneider, D.R., Šerman, N., Afgan, N., Leakage detection in power plant boiler, *Proc. of the 3rd European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*, Lisbon, 6pg. (1995)
- [74] Prigogine, I., Defay, R., *Chemische Thermodynamik*, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig (1962)
- [75] Moore, W.J., *Fizička hemija*, Naučna knjiga, Beograd (1962)
- [76] Bogdan, Ž., Duić, N., Matematički model ložišta za izgaranje plinskog goriva, *CROSS*, Zagreb (1992)
- [77] Isserlina, A.S. i dr., *Teorija i prakтика sžiganja gaza*, Nedra, Lenjingrad (1972)
- [78] Stull, D.R., Prophet, H., *JANAF Thermochemical Tables*, Office of Standard and Reference Data, NBS, Washington, D.C. (1971)
- [79] Warnatz, J., Rate coefficients in the C/H/O system, Gardiner, W.C., Jr (ed.), *Combustion Chemistry*, Springer-Verlag, Berlin, 197 (1984)
- [80] Seinfeld, J.H., *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*, John Wiley & Sons, New York, NY (1986)
- [81] Johnston, H.S., Atmospheric Ozone, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **43**, 1 (1992)
- [82] Bowman, C.T., Control of combustion-generated nitrogen oxide emissions driven by regulation, *Proc. of 24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 859-878 (1992)
- [83] Warnatz, J., Mass, U., Dibble, R.W., *Combustion*, Springer-Verlag, Berlin (1996)
- [84] Chigier, N.A., Pollution formation and destruction in flames - introduction, *Prog. Energy Combust. Sci.* **1**, 3-15 (1975)
- [85] Barreiros, A., Carvalho, M.G., Costa, M., Lockwood, F.C., Prediction of the near burner region and measurements of NO_x and particulate emissions in heavy fuel oil spray flames, *Combustion and Flame* **92**, 231-240 (1993)
- [86] Saraiva, P.C., Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., Modelling combustion, NO_x emissions and SO₂ retention in a circulating fluidized bed, *Proc. of ASME Int. Conf. On Fluidized Bed Combustion*, 375-380 (1993)
- [87] Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., Coelho, P.J., Coimbra, C.F.M., Nogueira, M., Modelling of combustion and NO_x emissions in industrial equipment, *Pure & Appl. Chem.* **65**, 345-354 (1993)

- [88] Carvalho, M.G., Semião, V.S., Coelho, P.J., Modelling and optimization of the NO formation in an industrial glass furnace, *Trans. of ASME, J. Engineering for Industry* **114**, 514-523 (1992)
- [89] Waldmann, H., Huschauer, H., Verfahren zur Berechnung der Verteilung von Temperatur und Wärmestromdichte in Feuerräumen von Großdampferzeugern, *VDI-Berichte* **211**, 44-58 (1974)
- [90] Coimbra, C.F.M., Azevedo, J.L.T., Carvalho, M.G., 3-D numerical modelling for predicting NO_x emissions from an industrial pulverized coal combustor, *Fuel* **73**, 1128-1134 (1994)
- [91] Fancev, M., Mehanika fluida, *Tehnička enciklopedija* **8**, Jugoslavenski leksikografski zavod, Zagreb (1982)
- [92] Virag, Z., *Automatizacija postupka numeričkog rješavanja ravninskog turbulentnog strujanja*, magistarski rad, Zagreb (1985)
- [93] Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc., New York (1960)
- [94] Schneider, D.R., *Proračun ložišta generatora pare*, diplomski rad, FSB, Zagreb, 69 str. (1993)
- [95] Schneider, D.R., Duić, N., Bogdan, Ž., Primjena Monte Carlo metode pri modeliranju prijenosa topline zračenjem u kotlovskom ložištu, *Energetska i procesna postrojenja, Energetika marketing*, Dubrovnik, 259-264 (1996)
- [96] Bogdan, Ž., Schneider, D.R., Duić, N., Prediction of the thermal radiation heat transfer in a furnace by Monte Carlo zone method, *Proc. of the 16th International Conference Information Technology Interfaces '94*, Pula, 253-258 (1994)
- [97] Planck, M., Distribution of energy in the spectrum, *Ann. Phys.* **4**, 553 (1901)
- [98] Siegel, R., Howell, J.R., *Thermal Radiation Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington (1981)
- [99] Hinze, J.O., *Turbulence*, McGraw Hill, New York (1975)
- [100] Dempsey, S., Pericleous, K.A., Galea, E.R., Progress in the development of a new fractal LES model for the modelling of turbulent flows with heat transfer, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [101] Moinat, P., Lesieur, M., Large-eddy simulation of the turbulent flow over a swept backward-facing step, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [102] Hoffmann, G., Benocci, C., Large-eddy simulation of planar free jets, *Proc. of the Turbulence and Heat and Mass Transfer*, Lisbon (1994)
- [103] Boussinesq, J., Théorie de l'écoulement tourbillant, *Mem. Pre. par. div. Sav.* **23** (1877)
- [104] Nikuradse, J., Gesetzmäßigkeit der turbulenten Strömung in glatten Röhren, *Forsch. Arb. Ing. Wes.* **356** (1932)
- [105] Courant, R., Isaacson, E., Rees, M., On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by finite difference, *Comm. Pure Appl. Math.* **5**, 243 (1952)
- [106] Gentry, R.A., Martin, R.E., Daly, B.J., An Eulerian differencing method for unsteady compressible flow problems, *J. Comp. Phys.* **1**, 87 (1966)
- [107] Barakat, H.Z., Clark, J.A., Analytical and experimental study of transient laminar natural convection flows in partially filled containers, *Proc. 3rd Int. Heat. Transfer Conf.*, Chicago, vol. II, 152 (1966)
- [108] Runchal, A.K., Wolfshtein, M., Numerical integration procedure for the steady state Navier-Stokes equations, *J. Mech. Eng. Sci.* **11**, 445 (1969)

- [109] Michelfelder, v.S., Bartelds, H., Lowes, T.M., Pai, B.R., Berechnung des Wärmeflusses und der Temperaturverteilung in Verbrennungskammern, *VDI-Berichte* **211**, 23-31 (1974)
- [110] Carvalho, M.G., Farias, T., Fontes, P., Multidimensional modeling of radiative heat transfer in scattering media, *Transactions of ASME, J. of Heat Transfer* **115**, 486-489 (1993)
- [111] Duić, N., Bogdan, Ž., Schneider, D.R., Šerman, N., Afgan, N., Tube leakage effect on radiation heat flux in boiler, *Proc. of the ICHMT International Symposium on Radiative Heat Transfer*, Kuşadasi, 610-619 (1995)
- [112] Görner, K., Dietz, U., Strahlungsaustauschrechnungen mit der Monte-Carlo-Methode, *Chem.-Ing.-Tech.* **62**, 23-33 (1990)
- [113] Shyy, W., Effects of open boundary on incompressible Navier-Stokes flow computation, *Numerical Heat Transfer* **12**, 157-178 (1987)
- [114] Shyy, W., Numerical outflow boundary condition for Navier-Stokes flow calculations by a line iterative method, *AIAA Journal* **23**, 1847-1848 (1985)
- [115] *Svodnie tablice teplovyh raschotov kotel Pp 660/140 GM-P56*, Podoljskij mashinostroiteljnij zavod (1976)
- [116] Bogdan, Ž., Duić, N., Schneider, D.R., Three-dimensional simulation of the performance of an oil-fired combustion chamber, *Proc. of the 2nd European Thermal Sciences & 14th UIT National Heat Transfer Conference*, Rome, 1493-1498 (1996)
- [117] Bogdan, Ž., Duić, N., Zonalni proračun ložišta, *Proc. of Energetska i procesna postrojenja, Energetika marketing*, Dubrovnik, 165-169 (1994)
- [118] Duić, N., Bogdan, Ž., Modeling of the high-temperature dissociation of CO₂ in the steam generator furnace, *Proc. of the 16th International Conference Information Technology Interfaces '94*, Pula, 265-270 (1994)
- [119] Bogdan, Ž., Duić, N., Three-dimensional simulation of the combustion process in an oil-fired furnace, *Proc of the 15th International Conference Information Technology Interfaces '93*, Pula, 351-356 (1993)
- [120] Bogdan, Ž., Duić, N., Numerical simulation of air-flow in a heated room, *Proc. of the 12th International Symposium of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning INTERKLIMA '93*, Zagreb, 7-12 (1993)
- [121] Bogdan, Ž., Duić, N., The three-dimensional mathematical model of the horizontal furnace, *Proc. of the 38th International Annual Conference KoREMA*, Zagreb, 584-587 (1993)
- [122] Duić, N., Bogdan, Ž., Matematički model produkcije ugljičnog dioksida i sumpornog dioksida u ložištu generatora pare, *Proc. of the International Symposium on Energy and Environment '92*, Opatija, 255-262 (1992)
- [123] Bogdan, Ž., Duić, N., Proračun prijelaza topline u ložištu pomoću dvodimenzionalnog matematičkog modela, *Zbornik radova FSB XVI*, Zagreb, 197-204 (1992)
- [124] Bogdan, Ž., Duić, N., The mathematical model of the steam generator combustion chamber, *Automatika* **33**, 93-98 (1992) reprint from *Proc. of the 37th International Annual Conference KoREMA*, Zagreb, 77-80 (1992)
- [125] Kulagin, L.V., Ohotnikov, S.S., *Sžiganje tjaželjnih židkih topliv*, Nedra, Moskva (1967)
- [126] Radhakrishnan, K., Comparison of numerical techniques for integration of stiff ordinary differential equations arising in combustion chemistry, *NASA TP-2372* (1984)
- [127] Bronštejn, I.N., Semendjaev, K.A., *Spračovnik po matematike*, Nauka, Moskva (1980)
- [128] Demidovich, B.P., Maron, I.A., *Computational Mathematics*, Mir Publishers, Moscow (1976)

- [129] Sivaloganathan, S., Shaw, G.J., A multigrid method for recirculating flows, *Int. J. for Num. Methods in Fluids* **8**, 417 (1988)
- [130] Briggs, W.L., *A Multigrid Tutorial*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia (1987)
- [131] Fedorenko, R.P., A relaxation method for solving elliptic difference equations, *USSR Comput. Math. Math. Phys.* **1**, 1092 (1962)
- [132] Bakhvalov, N.S., On the convergence of a relaxation method with natural constraints on the elliptic operator, *USSR Comput. Math. Math. Phys.* **6**, 101 (1966)
- [133] Hackbusch, W., On the multi-grid method applied to difference equations, *Computing* **20**, 291 (1978)
- [134] Wesseling, P., A robust and efficient multigrid method, *Lecture Notes in Mathematics* **960**, Springer-Verlag, New York, 614 (1981)
- [135] Brandt, A., Multi-level Adaptive solutions to boundary-value problems, *Math. Comput.* **31**, 333 (1977)
- [136] Settari, A., Aziz, K., A generalization of the additive correction methods for the iterative solution of matrix equations, *SIAM J. Numer. Anal.* **10**, 506 (1973)
- [137] Phillips, R.E., Schmidt, F.W., Multigrid techniques for numerical solution of the diffusion equation, *Numer. Heat Transfer* **7**, 251 (1984)
- [138] Virag, Z., Džijan, I., Korbar, R., Application of additive correction method to fluid flow calculations, *Proc. of the 2nd Congress of Croatian Society of Mechanics*, Supetar, 575-582 (1997)
- [139] Krajačić, Z., *Gear-ova metoda*, diplomski rad, PMF, Zagreb (1989)
- [140] Coelho, P.J., Lemos, C., Carvalho, M.G., Duić, N., Modeling of a solid fuel combustion chamber of a ramjet using a multi-block domain decomposition technique, *34th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, AIAA 96-0847, Reno, NV, 11pg (1996)

KRATKA BIOGRAFIJA

Neven Duić je rođen u Zagrebu 1965. godine, gdje je završio osnovnu školu 1979., te maturirao 1983. u Matematičko-informatičkom obrazovnom centru. Iste godine je upisao Fakultet strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu, a studij strojarstva je započeo po odsluženju vojnog roka 1984. godine.

Diplomirao je 1990. obranom radnje "Matematički model ložišta". Krajem iste godine upisuje postdiplomski studij energetskog smjera na Fakultetu strojarstva i brodogradnje. Magistrirao je 1993. obranom rada pod nazivom "Trodimenzionalni matematički model procesa u ložištu generatora pare".

Od 1990. do 1995. radi kao znanstveni novak, prvo kao mlađi asistent, a od 1993. u statusu asistenta, na projektu "Prijenos topline i tvari u energetskim generatorima pare" (2-08-189), na Zavodu za energetska postrojenja Fakulteta strojarstva i brodogradnje. Od 1996. radi kao znanstveni novak, u statusu asistenta, na projektu "Napredne tehnologije vođenja pogona termoelektrana" (120-001). Početkom 1998. prihvaćen mu je poticajni projekt pod nazivom "Modeliranje izgaranja plinovitog goriva u ložištu" (120-056).

Objavio je 23 znanstvena rada, od toga pet u znanstvenim časopisima te šest radova na međunarodnim kongresima održanim u inozemstvu, od kojih je jedan i sam prezentirao.

Aktivno je učestvovao u osnivanju i organizaciji kompjuterske učionice Laboratorija za energetska postrojenja 1995. godine. Tijekom rada učionice u njoj je izrađeno 26 diplomskih radova, dva magisterija, te veliki broj semestralnih i drugih studentskih radova uz pomoć računala.

U okviru projekta "Prijenos topline i tvari u energetskim generatorima pare" provodi u nekoliko navrata 14 mjeseci (1994-97.) na studijskom boravku na Instituto Superior Técnico u Lisabonu, Portugal. Kao član organizacije IAESTE četiri puta je obavljao stručnu praksu u inozemstvu u ukupnom trajanju od 8 mjeseci: Finska, Švedska, Čehoslovačka i Poljska. Za vrijeme studija bio je demonstrator na Zavodu za energetska postrojenja te na predmetu Primjena elektroničkih računala.

Upisan je u registar istraživača 1992. godine u znanstvenom području strojarstvo, a od 1993. godine u znanstveno-istraživačkom zvanju znanstveni asistent pod matičnim brojem 179672.

Oženjen je.

Vlada engleskim, portugalskim i španjolskim jezikom. Portugalski jezik je studirao na Filozofskom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu. Služi se francuskim i talijanskim.

SHORT BIOGRAPHY

Neven Duić was born in Zagreb in 1965, where he graduated from the elementary school in 1979 and from the Mathematics and Computer Science Secondary School in 1983. The same year he was conscripted for a one-year military service. He started to study mechanical engineering at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, in 1984.

He graduated mechanical engineering in 1990 by defending the thesis "Mathematical Model of a Furnace". By the end of the same year he enters postgraduate study of the power engineering at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, which he finished by defending the master thesis "Three Dimensional Mathematical Model of the Processes in the Steam Generator Furnace" in 1993.

From 1990-95 he was a research assistant on the project "Heat and Mass Transfer in Utility Steam Generators" (2-08-189), at the Power Engineering Department, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture. Since 1996 he is a research assistant on the project "Advanced Control Technology in Thermal Power Plants" (120-001) at the same Department.

He authored 23 papers in all, five of them in scientific journals and six at the congresses held abroad, one of which he presented himself.

He took active role in establishing and managing of computer workshop of the Power Engineering Laboratory in 1995. Since its establishment the workshop produced 26 graduation thesis, two master thesis and a large number of student projects and assignments.

As a part of international scientific cooperation he spent in several periods 14 months (1994-97) as a guest researcher at the Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal. As a member of IAESTE he carried out four traineeships abroad (Finland, Sweden, Czech Republic, Poland) in the total duration of 8 months.

He is married.

He speaks, reads and writes English, Portuguese and Spanish. Portuguese language he studied at the Faculty of Philosophy, University of Zagreb. He can communicate in French and Italian.