SVEUČILIŠTE U RIJECI TEHNIČKI FAKULTET

ANALIZA UTJECAJA OBLIKA I VELIČINE ČESTICA BIOMASE PRI IZGARANJU

Doktorska disertacija

Igor Bonefačić

Mentor: Red. prof. dr. sc. Bernard Franković, dipl. ing. Komentor: Red. prof. dr. sc. Vladimir Medica, dipl. ing.

Rijeka, 2012.

SAŽETAK

U disertaciji je prikazana numerička analiza procesa izgaranja smjese ugljene prašine i biomase u letu u cilindričnom, vertikalnom laboratorijskom ložištu. Analiza je vršena pri omjeru mase ugljena i biomase 80:20. Postavljen je matematički model fizikalnih pojava izgaranja u ložištu koji opisuje procese turbulentnog strujanja, prijenosa topline i tvari te devolatilizacije i izgaranja. Koristeći programski paket FLUENT razvijen je trodimenzijski model izgaranja koji pri određivanju putanja čestica biomase unutar ložišta uzima u obzir njen cilindrični oblik. Takav se pristup pokazao opravdanim i pokazuje točnije rezultate od dosadašnjih modela koji su oblik čestice biomase smatrali sfernim što je dokazano i eksperimentalnim mjerenjima. Mjerenja su vršena na laboratorijskom ložištu nominalne snage 20 kW s kontroliranom temperaturom stijenki. Vršeno je više ispitivanja u različitim temperaturnim režimima koji se kreću od 960°C do 1550°C s različitim faktorom pretička zraka. Veličine čestica biomase u ovom radu bile su manje od 500 µm. Analiza je pokazala da utjecaj oblika čestice na procesi izgaranja raste s porastom veličine same čestice. Također, pokazalo se da geometrija cilindričnih čestica značajno utječe na početak i brzinu otpuštanja volatila te potom i na izgaranje.

ABSTRACT

Numerical analysis of co-firing pulverized coal and biomass in vertical cylindrical laboratory furnace is explored. Ratio of coal and biomass in the fuel was 80:20 by mass.for all cases. Mathematical model of combustion in the furnace was established describing physical phenomena such as turbulent flow, heat and mass transfer, devolatilization and combustion. 3D-model of combustion in laboratory furnace was created using CFD software FLUENT. The shape of biomass particles was estimated as cylinder and was accounted in the calculation of particle trajectories via custom developed model. Newly developed model shows better agreement with experimental data than the existing model which estimates particles as spheres. Experimental measurements were conducted on 20 kW laboratory furnace with controllable wall temperature. Temparature varied in the range from 960°C to 1550°C depending on the case. Also, excess air for combustion was set at 10% or 20% depending on the case. The size of biomass particles was less than 500 μ m. Analysis of the results shows that the influence of the particle size increases with the size of the particle. Also, the geometry of the cylindrical particles strongly influences the beginning and the intensity of devolatilization and subsequently the combustion.

PREDGOVOR

Nakon stoljeća korištenja energije fosilnih goriva, danas se globalna slika mijenja a obnovljivi se izvori sve više smatraju jednim od ključnih čimbenika budućih strategija razvitka. Među ostalim obnovljivim izvorima, u bližoj se budućnosti od biomase očekuje naročito značajan doprinos. Sve relevantne energetske statistike pokazuju nezanemariv udio biomase u proizvodnji toplinske i električne energije, a od nedavno i u prometu. Na razini Europske unije predviđa se stalan porast proizvodnje energije iz biomase, a uz nezanemariv udio u energetskoj bilanci prepoznate su i brojne druge posljedice korištenja energije biomase. Danas se primjena biomase za proizvodnju energije potiče uvažavajući načelo održivog razvoja. Najčešće se koristi drvna masa koja je nastala kao sporedni proizvod ili otpad te ostaci koji se ne mogu više iskoristiti u druge svrhe. Takva se biomasa koristi kao gorivo u postrojenjima za proizvodnju električne i toplinske energije (direktno korištenje biomase) ili se prerađuje u plinovita i tekuća goriva za primjenu u vozilima, kućanstvima ili industriji (indirektno korištenje biomase). Postoje razne procjene potencijala i uloge biomase u globalnoj energetskoj politici u budućnosti no u svim se scenarijima predviđa njezin značajan porast i bitno važnija uloga. Za usporedbu može poslužiti podatak kako je 1990. godine potrošnja energije u svijetu iznosila 376,8 EJ, a 2050. godine se prema raznim scenarijima očekuje potrošnja od 586 do 837 EJ. Međunarodno prihvaćena potreba za obuzdavanjem i smanjenjem emisije stakleničkih plinova otvorila je širom vrata za projekte korištenja biomase, što je posebno vidljivo iz posljednjeg izvještaja Međuvladine komisije za klimatske promjene (IPCC-Third Assesment Report).

U Hrvatskoj je, također, u novije vrijeme prepoznat potencijal korištenja biomase [1]. U predjelima Panonske Hrvatske i Slavonije, na primjer, ostaci kultura poput suncokreta, soje i repice mogu se iskoristiti za proizvodnju energije. U primorskoj Hrvatskoj, pak, na isti način moguće je koristiti ostatke od uzgoja i obrade maslina. Planinski predjeli, Gorski Kotar, Lika i neki istočni dijelovi Hrvatske bogati su šumom i tamo je zastupljena drvnoprerađivačka industrija čiji ostaci se u velikim količinama mogu koristiti za proizvodnju energije kako za direktnu proizvodnju toplinske energije tako i za proizvodnju električne energije u termoelektranama. Da bi biomasa ispunila svoj potencijal kao izvor energije potrebna su daljnja istraživanja u čitavom lancu njenog iskorištavanja od uzgoja i genetskog modificiranja do pretvorbe u druge oblike energije. Istraživanja su potrebna uslijed relativno niskog stupnja efikasnosti pretvorbe energije iz biomase u energetskim postrojenjima od svega 12-25% za izgaranje čiste biomase do 33-38% za izgaranje u kombinaciji s ugljenom (suizgaranje). Niska efikasnost pretvorbe čini energiju iz biomase skupljom od energije dobivene iz fosilnih goriva. Stoga su potrebni novi pristupi i nove tehnologije da bi se ta efikasnost povećala a to se može postići samo razumijevanjem jedinstvenih karakteristika biomase kao goriva. Iako još postoje pitanja bez odgovora vezana na klimatske promjene promatranjem ukupnog životnog ciklusa biomase, jasne postaju nedvojbene prednosti biomase u odnosu na ostale izvore energije. Korištenjem novih tehnologija poput skupljanja i skladištenja ugljičnog dioksida nastalog izgaranjem biomase (engl. Carbon Capture and Storage - CCS) utjecaj na okoliš može se dodatno smanjiti.

Istraživanje i izrada ove doktorske disertacije izvedeni su u sklopu znanstvenog projekta *Istraživanje i razvoj komponenata i sustava obnovljivih izvora energije* čiji je voditelj red. prof. dr. sc. Bernard Franković te u suradnji s Mašinskim fakultetom Univerziteta u Sarajevu, BiH.

Ovom se prigodom želim zahvaliti mentoru red. prof. dr. sc. Bernardu Frankoviću i komentoru red. prof. dr. sc. Vladimiru Medici, te ostalim kolegama sa Zavoda za termodinamiku i energetiku koji su mi svojim konstruktivnim savjetima olakšali izradu disertacije. Zahvalio bih

se i kolegama dr. sc. Anesu Kazagiću iz Bosanske Elektroprivrede te prof. dr. sc. Izetu Smajeviću i mr. sc. Nihadu Hodžiću s Mašinskog Fakulteta Univeziteta u Sarajevu na gostoprimstvu, nesebičnoj pomoći i konstruktivnim savjetima prilikom mog boravka na Mašinskom fakultetu. Te na kraju supruzi Kristini i mojoj obitelji na riječima ohrabrenja i nadasve na strpljenju i razumijevanju koje su pokazali.

Autor

SADRŽAJ

SAŽETAK	I
PREDGOVOR	II
1. UVOD	1
1.1. Svrha i cilj istraživanja	3
1.2. Metodologija rada	4
1.3. Struktura rada	4
1.4. Dosadašnja istraživanja	4
2. PROCES IZGARANJA KRUTIH GORIVA	.11
2.1. Temeljni pojmovi	.11
2.2. Stehiometrijske jednadžbe izgaranja ugljena i biomase	12
2.3. Određivanje adijabatske temperature plamena	. 16
3. SASTAV BIOMASE I PROCES IZGARANJA	. 19
3.1. Sastav biomase	. 19
3.1.1. Celuloza	. 19
3.1.2. Hemiceluloza	. 19
3.1.3. Lignin	20
3.2. Mehanizmi izgaranja biomase	21
3.2.1. Zagrijavanje i sušenje	22
3.2.2. Piroliza	23
3.2.4. Izgaranje koksnog ostatka	
3.2.5. Utjecaj oblika i veličine čestica	27
4. MATEMATIČKI MODEL	29
4.1. Jednadžbe očuvanja	29
4.1.1. Jednadžba očuvanja ukupne mase	29
4.1.2. Jednadžba očuvanja mase kemijskog spoja	30
4.1.3. Jednadžbe očuvanja količine gibanja (Navier-Stokesove diferencijalne jednadžbe).	30
4.1.4. Jednadzba ocuvanja energije	
4.2. Matematicki model turbulencije	
4.2.1. Reynoldsovo 1 Favreovo usrednjavanje	
4.2.3. Realistični k - ε model turbulencije	.36
4.2.4. Zakon stijenke	
4.3. Model izgaranja	41
4.3.1. Karakteristike turbulentnog izgaranja	41
4.3.2. Modeliranje turbulentnog izgaranja prijenosom tvari	42
4.4. Model diskretne faze	45
4.4.1. Proračun putanje čestice goriva	45
4.4.2. Turbulentna disperzija čestica	
4.4.5. Izmjena topline i mase diskretne i kontinuirane faze $4.4.4$ Interakcija diskretne i kontinuirane faze	
4.4.4. Interacting diskreting i kontinunane faze	
4.3. IVIOUEI ZI ACEIIJA	.30

4.5.1. Model diskretnih ordinata	58
4.5.2. Model sume utjecaja sivih plinova	59
4.5.3. Rubni uvjeti za model diskretnih ordinata	61
4.6. Modeliranje NO_x emisija	62
4.6.1. Termalni NO_x	62
$4.6.2$. Trendum in promptin NO_x	64
4.7. Modeliranje SO_x emisija	67
4.8. Matematički model turbulentnog reaktivnog strujanja	70
4.8.1. Ulazni rubni uvjet konstantnog masenog protoka	72
4.8.2. Rubni uvjet izlaznog tlaka	73
4.8.3. Rubni uvjet krute stijenke	73
4.8.4. Rubni uvjet periodičnosti	74
5. NUMERIČKI MODEL	75
5.1. Diskretizacija jednadžbi očuvanja	75
5.1.1. Upwind shema drugog reda točnosti	76
5.2. Linearni oblik diskretizacije	76
5.3. Povezivanje tlaka i brzine	76
5.3.1. SIMPLE algoritam	77
6. VERIFIKACIJA I PRIKAZ REZULTATA NUMERIČKOG MODELA IZGARANJA	79
6.1. IFRF ispitno ložište	79
6.2. Model izgaranja ugljene prašine u letu	82
6.3. Validacija modela izgaranja ugljena u letu	83
6.4. AUCR laboratorijsko ložište	89
6.5. Tijek ispitivanja izgaranja smjese ugljena i biomasa u letu	92
6.5.1. Mjerna oprema	94
6.5.2. Nesigurnosti mjerenja	95
6.6. Model izgaranja smjese ugljene prašine i biomase u letu	98
6.7. Validacija modela izgaranja smjese ugljena i biomase u letu	102
6.8. Utjecaj geometrije čestica na izgaranje	107
6.8.1. Utjecaj geometrije na otpuštanje i izgaranje volatila	107
6.8.2. Utjecaj geometrije na izgaranje koksnog ostatka	113
7. ZAKLJUČAK	115
POPIS LITERATURE	119
POPIS OZNAKA I SIMBOLA	125
POPIS SLIKA	129
POPIS TABLICA	130
POPIS PRILOGA	131
PRILOZI	132
KRATAK ŽIVOTOPIS	143

1. UVOD

Izgaranje je općenito govoreći, složen fizikalno-kemijski proces uzajamnog djelovanja goriva i oksidanta uz oslobađanje topline. Bez obzira na visoki nivo teorijskih spoznaja koje postoje na pojedinim područjima fizike i kemije, danas još uvijek nije moguće u potpunosti sagledati sve pojave, procese i stadije koji se zbivaju i nastupaju u procesu izgaranja. Bez obzira na to, danas postoje mogućnosti da se na osnovu stečenih teorijskih spoznaja i praktičkih iskustava pronalaze daljnji putovi za boljom organizacijom procesa izgaranja.

Radi boljeg sagledavanja mnogobrojnih aspekata organizacije procesa izgaranja neophodno je u najkraćim crtama razmotriti osnovne fizikalne i kemijske pojave u procesima izgaranja, najizraženije utjecajne faktore o kojima se mora voditi računa kod organizacije procesa izgaranja, osnovne zahtjeve koji se postavljaju pred takve uređaje te posebno aspekt očuvanja čovjekova okoliša kao i nove moguće procese razvoja i daljnjih poboljšanja.

Kao što je već kod definiranja pojma izgaranja rečeno, osnovna karakteristika svih procesa izgaranja jest oslobađanje određene količine topline. S obzirom da se u procesu izgaranja odvijaju i stanovite kemijske reakcije, svakidašnje iskustvo ukazuje na to da je oslobađanje topline u procesima izgaranja zapravo posljedica odvijanja određenih kemijskih reakcija. Iz iskustva je također poznato je za njihovo odvijanje potrebno reagirajućim tvarima dovesti toplinu. Oslobađanjem topline povećava se temperatura u procesu izgaranja čime se ubrzavaju preostale kemijske reakcije. Ta činjenica razjašnjava sposobnost reakcija izgaranja da se nakon pojave reakcije u jednoj točki, u određenim uvjetima, reakcija dalje širi bez vanjskog utjecaja. Ovo je svakako veoma značajna činjenica čime se problematika započinjanja procesa izgaranja znatno sužava, ograničavajući se na stvaranje onih uvjeta u kojima se reakcija samoinicijativno širi.

Oslobođena toplina u kemijskim reakcijama izgaranja naziva se u literaturi toplina reakcija ili toplina stvaranja i podvrgava se Hessovom zakonu koji proizlazi iz zakona o očuvanju energije i koji se ukratko može sažeti u sljedećem: "Toplina reakcija ne ovisi od puta kemijske reakcije i ovisna je isključivo od početnog i konačnog stanja reagirajućeg sustava". S obzirom da je oslobađanje topline u procesima izgaranja posljedica odvijanja određenih kemijskih reakcija, jasno je da je nužno poznavati osnovne pojave i zakonitosti koje se javljaju u kemijskim reakcijama.

Jednak značaj za razumijevanje i uspješnu organizaciju procesa izgaranja uz poznavanje kemijskih pojava i njihovih zakonitosti ima i poznavanje fizikalnih pojava i njihovih zakonitosti. Tu svakako odlučujuću ulogu igraju pojave prijenosa mase, energije i količine gibanja. Posebnu pažnju treba posvetiti poznavanju procesa prijenosa mase s obzirom da u velikom broju tehničkih procesa izgaranja oni određuju karakter i brzinu. Upravo su procesi difuzije bitni za stvaranje zapaljive smjese oksidanta i goriva. U pojedinim slučajevima molekularna difuzija određivat će brzinu stvaranja zapaljive smjese dok će u drugim slučajevima prevladavati turbulentna difuzija. Zakonitosti molekularne i turbulentne difuzije danas su već dovoljno istražene tako da mogu biti od velike koristi kod izračunavanja procesa izgaranja. Molekularna difuzija kao i ostale pojave prijenosa, posljedica je toplinskog gibanja molekula. Iz tog razloga intenzitet difuzije proporcionalan je pored gradijenta koncentracije, srednjoj duljini puta molekula i srednjoj brzini molekula. Iste teorijske podloge molekularno-kinetičke teorije plinova i tekućina koriste se i za tumačenje pojava prijenosa toplinske energije pri postojanju gradijenta temperature. Nije stoga nimalo slučajna matematička istovjetnost relacija koje opisuju zakonitosti pojava prijenosa. U tehnički organiziranim procesima izgaranja u termoenergetskim postrojenjima odvijaju se kako pojave prijenosa mase i to molekularne i turbulentne, tako i pojave prijenosa energije odnosno topline te količine gibanja.

Vrijeme potrebno da se proces izgaranja izvrši sastoji se od vremena potrebnog za stvaranje zapaljive smjese goriva i oksidanta i vremena potrebnog za odvijanje kemijske reakcije. Ovisno o međusobnim odnosima tih vremena, proces izgaranja se može odvijati u tri različita područja. U slučaju da je vrijeme odvijanja kemijskih reakcija mnogo dulje od vremena potrebnog za stvaranje zapaljive smjese, brzina trajanja cijelog procesa izgaranja uvjetovana je praktički samo kinetikom kemijskih reakcija. Za takve procese izgaranja kaže se da se odvijaju u kinetičkom području. Kad je međutim vrijeme potrebno za stvaranje fizičkog kontakta između oksidanta i goriva znatno veće od vremena potrebnog za odvijanje kemijskih reakcija, proces je određen fizikalnim pojavama, prvenstveno difuzijskim, te se kaže da se proces izgaranja odvija u difuzijskom području. Treći slučaj je prijelazno područje kad su vremena potrebna za stvaranje fizičkog kontakta goriva i oksidanta i za odvijanje kemijskog procesa usporediva. Tehnički procesi izgaranja krutih goriva u termoenergetskim postrojenjima odvijaju se uglavnom u difuzijskom području jer su temperature kod kojih se ti procesi odvijaju dovoljno visoke da su vremena odvijanja kemijskih reakcija neusporedivo kraća od vremena potrebnog za stvaranje smjese goriva i oksidanta.

U najvećem broju tehnički organiziranih procesa izgaranja, osnovni uvjet je plamen stabilizirati u određenom prostoru, što znači da se brzine rasprostiranja plamena moraju uravnotežiti s brzinom pritjecanja zapaljive smjese goriva i oksidanta. Struja zapaljive smjese ili smjese goriva i zraka može dotjecati prostoru u kojem se proces organizira laminarno i turbulentno. U termoenergetskim postrojenjima kao i u gotovo svim tehnički organiziranim procesima kojima je cilj oslobađanje što veće količine energije vezane u gorivu u danom prostoru u jedinici vremena, dostrujavanje smjese u pravilu je turbulentno. Zbog toga u takvim procesima nastupa pojava rasprostiranja plamena po turbulentnoj struji. Istraživanje mehanizama odvijanja difuzijskog turbulentnog izgaranja je cilj mnogih teorijskih i eksperimentalnih istraživanja, gdje se kao široko primijenjen alat kojim se nastoje objasniti pojave i procesi koji se pritom pojavljuju, koristi numerička simulacija.

Mehanizmi izgaranja ugljena u industrijskim ložištima su do danas dovoljno razjašnjeni te su na temelju tih spoznaja razvijeni mnogi matematički i numerički modeli koji uspješno opisuju promatrane fizikalne procese. Međutim, nerealno je za očekivati da su ti modeli primjenjivi i kod modeliranja izgaranja biomase pošto se biomasa ipak razlikuje od ugljena prema fizikalnim i kemijskim svojstvima. Upravo je zbog tih razlika u svojstvima i mehanizam izgaranja ponešto drugačiji. Neke od značajnijih razlika dane su u tablici 1.1.

	Gustoća [kg/m ³]	Veličina čestica [mm]	Oblik čestica	H/C [kmol/kmol]	O/C [kmol/kmol]	H _{d,daf} [MJ/kg]	Udio volatila (daf)
Ugljen	~1300	~0,1	Sferičan	~0,8	0,02~0,4	~25	>40 %
Biomasa	~500	~3,0	Nepravilan	~1,5	0,4~1,0	~16	>80 %

Tablica 1.1. Usporedba karakteristika biomase i ugljena

Značajne razlike u veličini i obliku čestica biomase igraju bitnu ulogu u samom procesu izgaranja. Za čestice malih dimenzija, kao kod ugljene prašine, Biotov broj ($Bi=\alpha L/\lambda$) je u pravilu puno manji od jedan čime je prilikom izgaranja, opravdana pretpostavka konstantne raspodjele temperature unutar čestice. Za čestice biomase čija je veličina i do 3 mm a koeficijent prijelaza topline konvekcijom oko 30 W/m²K, Biotov broj je oko 0,8 što čini tu pretpostavku neodrživom. Kod čestica goriva većih dimenzija dolazi do znatnih temperaturnih gradijenata i nehomogenosti u samoj čestici [2] što modele izgaranja biomase čini znatno složenijima. Nadalje, raznolikost oblika i dimenzija čestica biomase uzrokuje različite omjere vanjske površine i volumena čestice te nejednoliko provođenje topline unutar čestice što direktno utječe na brzinu stvaranja volatila i oksidacije. Česticu biomase najčešće je moguće opisati kao cilindar ili disk. Na slici 1.1 vidljivo je da oba spomenuta geometrijska tijela imaju znatno veći omjer površine i mase nego sfera kojom se uobičajeno opisuje čestica ugljene prašine. Kao posljedica navedenog, potrebno je pri izradi modela izgaranja biomase, posebnu pažnju posvetiti utjecaju oblika i veličine čestica biomase.



Slika 1.1 Omjer površina nesferičnih i sferičnih čestica istog volumena kao funkcija omjera dimenzija nesferičnih čestica, [2]

1.1. Svrha i cilj istraživanja

Ovaj rad se temelji na pretpostavci da sferni oblik ne opisuje dovoljno dobro nepravilnu geometriju čestica biomase prilikom izgaranja u letu. Oblik čestica je vrlo važan utjecajni parametar pri modeliranju fizikalnih procesa koji se odvijaju prilikom turbulentnog strujanja i izgaranja u ložištima procesnih peći. Čestice istoga volumena mogu se bitno razlikovati po površini preko koje se izmjenjuje toplina s okolinom, također, različiti oblici djeluju na smjer strujanja čestice uslijed aerodinamičkih sila. Stoga je primarni cilj ove disertacije postaviti funkcionalni model strujanja čestica biomase cilindričnog oblika pri izgaranju krutog goriva u letu koji bi te procese vjernije opisao.

Problematika istraživanja je i nedovoljno poznavanje koncepta izgaranja biomase, odnosno mehanizma odvijanja kemijskih reakcija od ulaska čestice u struju vrelog zraka do izgaranja koksnog ostatka. Nedostupnost parametara izgaranja neminovno će dovesti do određenih pojednostavljenja prilikom postavljanja modela izgaranja.

1.2. Metodologija rada

Metodologija istraživanja ovog rada temelji se na analizi teorijskih osnova pri postavljanju prikladnog matematičkog modela s definiranim rubnim i početnim uvjetima kojima bi se što točnije opisale fizikalne pojave prilikom izgaranja krutog goriva u letu. Slijedi analiza i usporedba dobivenih rezultata s rezultatima mjerenja izvršenih na IFRF ispitnom ložištu dostupnim iz literature, te eksperimentalnih mjerenja vršenih na AUCR laboratorijskom ložištu konstruiranom za izgaranje smjese ugljena i biomase u letu, nominalne snage 20 kW, instaliranom na Mašinskom fakultetu Univerziteta u Sarajevu. Razvijeni model će, nadalje, poslužiti za analizu utjecaja geometrije čestica na kvalitetu izgaranja u ložištu.

Matematički model riješit će se odgovarajućom numeričkom metodom. Numerička analiza bit će provedena primjenom računalnog programa za rješavanje problema prijelaza topline i dinamike fluida – FLUENT 6.3.

1.3. Struktura rada

U uvodnom poglavlju razmatrani su osnovni aspekti organizacije procesa izgaranja krutih goriva u termoenergetskim postrojenjima s posebnim osvrtom na izgaranje biomase. Opisan je cilj i metodologija rada te je dan pregled dosadašnjih istraživanja na ovome području.

U drugom poglavlju su objašnjeni osnovni načini upravljanja procesom izgaranja te kontrola izgaranja.

U trećem poglavlju su opisane osnovne karakteristike biomase kao goriva. Također su obrađeni fizikalni procesi koji se odvijaju od trenutka ulaska čestice goriva u ložište i stvaranja smjese goriva i zraka te faktori koji na te procese utječu.

U četvrtom poglavlju postavljen je matematički model turbulentnog strujanja, izmjene topline i prijenosa tvari, model strujanja čestica goriva te izgaranja u ložištu.

Numerički model baziran na metodi konačnih volumena tj. postupak pretvorbe matematičkog modela u oblik prikladan za rješavanje iteracijskim metodama dan je u petom poglavlju.

U šestom poglavlju slijedi usporedba rezultata dobivenih postavljenim modelom izgaranja u letu s rezultatima mjerenja iz relevantne literature te mjerenjima na eksperimentalnom ložištu. U nastavku je dan prikaz rješenja dobivenih numeričkom metodom.

U zaključku kao posljednjem poglavlju, formulirani su i prezentirani rezultati istraživanja, dana je ocjena uspješnosti numeričkog rješenja postavljenog problema i njegove primjenjivosti u praksi te je opisan znanstveni doprinos ovoga rada. Također, predložene su smjernice za daljnji razvoj modela.

1.4. Dosadašnja istraživanja

Složene procese izgaranja ugljena u letu istraživali su i modelirali u svojim radovima još koncem prošlog stoljeća *Truelove*, 1985., [3] koji je opisao teorijski model strujanja i izgaranja ugljene prašine u letu. Postavio je model transporta diskretnih čestica unutar struje zraka te pretpostavio

izgaranje volatila diktirano brzinom mješanja s oksidantom. Model je primijenio kod istraživanja ovisnosti polja strujanja i procesa izgaranja kod vrtložnih plamenika. Zatim, Choi i Kruger, 1985., [4] razvijaju matematički model prijenosa topline zračenjem, koji uključuju u procese devolatilizacije i izgaranja čestice ugljena i opisuju mehanizme prijenosa topline između čestica, oblaka volatila, plamena i okoline. Model se temelji na postojećim modelima izgaranja kapljica goriva prilagođenim u tu svrhu. Jamaluddin et al., 1985., [5] u svom radu postavljaju dvodimenzijski model izgaranja ugljene prašine u letu pri vrlo velikim brzinama zagrijavanja (10ⁿ K/s) te pri temperaturama preko 2000 K. Model razmatra miješanje goriva i oksidanta, sušenje, devolatilizaciju i izgaranje koksnog ostatka kao i prijenos topline konvekcijom i zračenjem. Lixing, et. al. 1988., [6] vrše trodimenzijsku numeričku simulaciju izgaranja ugljena u cilindričnom ložištu. Dobivenim numeričkim modelom istražuju utjecaj centralne zone recirkulacije na zagrijavanje, devolatilizaciju i zapaljenje čestice ugljena te mogućnosti optimizacije plamenika. Abbas et al., 1993., se u radu [7] osvrću na važnost veličine čestica pri izgaranju ugljena u letu. Eksperimentalno istražuju utjecaj veličine čestice na formaciju NO u laboratorijskom ložištu velikih dimenzija za izgaranje ugljene prašine u letu. Prilikom istraživanja sakupili su arhivu podataka o mehanizmima produkcije/destrukcije i svojstvima stabilnih dušikovih spojeva koji se pojavljuju prilikom izgaranja ugljena s tri različite veličine čestica (25 µm, 46 µm i 121 µm). Slično kao i Williams et. al., 1994., koji u [8] modeliraju formaciju NO_x tijekom izgaranja ugljene prašine u letu s ciljem optimizacije "low-NO_x" plamenika.

Sva su dotadašnja istraživanja izgaranja bila vezana uz ugljen kao dominantno kruto gorivo. Tek se sporadično pojavljuju istraživanja vezana uz biomasu. Tako su još 1985.g. *Chan* et al. [10], modelirali fizikalne i kemijske procese pri pirolizi čestica biomase u mirovanju.

Di Blasi, 1993., se u svom radu [9] posebno osvrće na izgaranje drvne biomase. Daje opis različitih procesa koji se odvijaju prilikom izgaranja krutih goriva. Navodi nekoliko kinetičkih modela izgaranja različite kompleksnosti poput *single-step* globalnih reakcija gdje je gubitak mase goriva definiran jednom reakcijom tipa:

$$Biomasa \xrightarrow{k} Volatili + Kruti ostatak,$$
(1.1)

ili nešto složenijom reakcijom koja uključuje različite udjele spojeva u nastalim volatilima:

Biomasa
$$\xrightarrow{k} a$$
(Plinoviti produkti) + b (Katran) + c (Kruti ostatak). (1.2)

Kinetički parametri u tim reakcijama određeni su eksperimentalno. Zatim navodi *multi-step* mehanizme reakcija koji također u obzir uzimaju samo primarnu degradaciju goriva koja se u ovom slučaju sastoji iz većeg broja reakcija kojima nastaju različiti produkti degradacije goriva i svaka je određena svojim kinetičkim parametrom:

$$\operatorname{Biomasa} \xrightarrow{k_i} (\operatorname{Produkt})_i. \tag{1.3}$$

Treći model naveden u radu je *semi-global* mehanizam koji u obzir uzima i primarnu degradaciju goriva i sekundarnu degradaciju nastalih produkata pirolize. Kao primjer je naveden mehanizam degradacije celuloze:

Celuloza $\xrightarrow{k_1}$ Anhidroceluloza Celuloza $\xrightarrow{k_2}$ Katran (1.4) Anhidroceluloza $\xrightarrow{k_3}$ Plinoviti produkti + Kruti ostatak. Dalje u radu još opisuje procese izgaranja u plinovitoj fazi te izgaranje krute faze.

Međutim, kako je već rečeno, izgaranje biomase se uvelike razlikuje od izgaranja ugljene prašine čije se čestice u pravilu prilikom izgaranja aproksimiraju kao sferične. Čestica biomase je nesferičnog oblika i najčešće sliči cilindru ili disku. Aproksimacija čestice biomase sferom daje ekstremne vrijednosti omjera volumena i površine koji ima utjecaj na gibanje i brzinu odvijanja kemijskih reakcija prilikom izgaranja. Nesferična čestica je zbog svojeg oblika podvrgnuta dodatnim hidrodinamičkim silama (uzgon, torzija, itd.). Postoji određen broj teorijskih i eksperimentalnih istraživanja koja uspješno predviđaju gibanje nesferičnih čestica u dvofaznom strujanju kao Gradon, Grzybowski i Pilacinski, 1988., [11] i Higashitani, Inada i Ochi, 1991., [12]. U oba rada radi se o nereaktivnom strujanju čestica malih dimenzija te se promatra utjecaj oblika i sile otpora na taloženje čestica na stjenkama. Fan i Ahmadi 2000., [13], simuliraju putanju elipsoidnih čestica različitih veličina, oblika i gustoće u turbulentnoj struji. U jednadžbu gibanja čestice uključuju hidrodinamičke sile, sile uzgona, torziju i Brownove sile. Rezultate simulacija su statistički obradili i kao rezultat su dobili empirijske jednadžbe stvaranja depozita čestica na stjenkama u turbulentnoj struji. Blaser, 2002., [14] Postavlja trodimenzijski matematički model kojim definira normalno i tangencijalno naprezanje na malu elipsoidnu česticu pri različitim režimima strujanja.

Yin et. al., 2003., [15] modeliraju nereaktivno strujanje cilindrične čestice duljine 150 mm i promjera 20 mm. U model gibanja čestice također uključuju hidrodinamičke sile te gravitaciju, silu gradijenta tlaka, virtualnu masu kao i moment koji česticu zakreće. Dobiveni model ispitali su na primjeru cilindrične čestice od PVC-a pri slobodnom padu u posudi s vodom (slika 1.2).



Slika 1.2. Izračunata putanja cilindrične čestice i rezultirajuće polje brzina strujanja fluida, prema [15]

 $Mand\phi$ et al. 2007. [16], uspoređuje dosadašnja istraživanja i modele za određivanje koeficijenta otpora strujanju koji pretpostavljaju gibanje nesferičnih čestica u turbulentnom strujanju i koriste faktor oblika da bi opisali nesferičnost čestica. Klasificira nesferične čestice prema složenosti oblika na:

- pravilne (kocka, disk, cilindar, tetraedar i elipsod),

- nepravilne (određene sirovinom): slama, sjemenke, listovi i sl.,
- nepravilne (određene metodom proizvodnje): piljenjem, brušenjem, mljevnjem i sl. i

- složene: aglomerati, kristali, pahulje i sl.

Većina postojećih istraživanja primjenjiva su samo na pojedine čestice ili čestice sfernog oblika i ne uključuju izgaranje. Tek u novije vrijeme pojavljuju se istraživanja koja uključuju i procese izgaranja. *Van de Weerdhof*, 2010. je u svojoj disertaciji, [17] proučavao utjecaj temperature i veličine čestice biomase na pirolizu i izgaranje koksnog ostatka, slika 1.3 i slika 1.4.



Slika 1.3. Utjecaj veličine čestica na otpuštanje volatila u funkciji vremena, [17]



Slika 1.4. Gubitak mase čestica različitog polumjera u funkciji vremena, [17]

Učinio je to modelirajući zasebno proces pirolize pojedinačne čestice biomase te u drugoj fazi izgaranje koksnog ostatka. Tom prilikom je u model pirolize uključio degradaciju celuloze, hemiceluloze i lignina kao tri zasebna goriva. Svaki od tih sastojaka degradira u plinoviti dio i koksni ostatak preko dvije neovisne reakcije.

Slična tema obrađena je i u radu *Janse* et al, 2000. [18], gdje je modelirana samo piroliza pojedinačne čestice drveta. Sušenje i pirolizu čestice drvne biomase većih dimenzija simulirali su i eksperimentalno mjerili u svom radu *Peters* i *Bruch*, 2003., [19]. Korak dalje išao je *Lu*, 2006. [2], koji je u svojoj disertaciji modelirao izgaranje pojedinačnih čestica biomase različitih oblika istoga volumena koje je opisao kao diskove, cilindre ili kao skoro sferične. Razvio je jednodimenzijski model kojim opisuje procese sušenja, devolatilizacije i izgaranja pojedinačne čestice biomase. Model je u stanju simulirati izgaranje čestica ili kapljica goriva bilo kojeg oblika i veličine. Korišten je za predviđanje temperature čestica te brzine otpuštanja i koncentracije nastalih spojeva u funkciji vremena. Neki od dobivenih rezultata prikazani su na sljedeće dvije slike.



Slika 1.5. Utjecaj oblika čestice biomase na zagrijavanje i otpuštanje volatila, [2]

Porteiro, Miguez, Granada i *Moran* 2006. [20], proučavaju u svom radu, mehanizme prijenosa topline i difuzije unutar i na površini čestice biomase cilindričnog oblika tijekom izgaranja. U proračun uključuju i provođenje topline s obzirom na vlaknastu strukturu drveta.

Sva su spomenuta istraživanja vezana uz izgaranje biomase, vršena tek na pojedinačnim česticama goriva. Izgaranje biomase, te smjese ugljena i biomase u ložištima uglavnom je modelirano sferičnim česticama koji, eventualno, nesferičnost uzimaju u obzir samo preko faktora oblika. Tako su *Backreedy* et. al, 2005. [21], koristili u svom radu model strujanja nesferične čestice prema *Haideru* i *Levenspielu*, [22] prilikom modeliranja izgaranja smjese ugljena i biomase u letu u masenom omjeru 97% ugljena i 3% biomase. Modelirali su pritom izgaranje u testnom ložištu snage 1 MW koristeći komercijalni paket FLUENT 6.1.



Slika 1.6. Predviđene putanje čestica smjese ugljena i biomase, obojene prema masi u kg, za slučaj različitih ekvivalentnih promjera čestica biomase (A) 0,75 mm; (B) 1 mm; (C) 0,5 mm; [21]

Odabrali su RNG model turbulencije i P1 model zračenja. Model disipacije vrtloga koristili su pri modeliranju izgaranja volatila a intristički model za izgaranje koksnog ostatka. Razvijenim modelom ispitivali su utjecaj različite brzina otpuštanja volatila i izgaranja kokosnog ostatka biomase na krajnji rezultat. Došli su do zaključka da kod čestica biomase, veličina i sastav značajno utječu na brzinu izgaranja kod ekvivalentnog promjera čestice većeg od 200 µm.

I. Bonefačić, doktorska disertacija, Analiza utjecaja oblika i veličine čestica biomase pri izgaranju.

2. PROCES IZGARANJA KRUTIH GORIVA

2.1. Temeljni pojmovi

Pri opisu procesa izgaranja i pritom nastalih smjesa plinova koriste se različite varijable i pojmovi koje je potrebno ukratko objasniti.

Kemijska reakcija je izmjena i/ili rearanžiranje atoma među molekulama pri njihovom sudaru. Tijekom kemijske reakcije je očuvan broj atoma koji učestvuju u reakciji dok se molekule i unutarnje veze atoma mijenjaju tj. ne ostaju sačuvane [23]. Energija pohranjena u vezama atoma unutar molekula predstavlja *entalpiju formiranja* kemijskog spoja.

Ukupna masa smjese, m je suma masa pojedinačnih sastojaka. *Maseni udio*, Y_i je udio mase m_i itog sastojka u ukupnoj masi m smjese.:

$$m = \sum m_i , \qquad (2.1)$$

$$Y_i = m_i / m \,. \tag{2.2}$$

Količina tvari, n_i [kmol] nekog sastojka je mjera za broj čestica (molekula ili atoma) i-tog sastojka, pri čemu količina tvari od 1 mol odgovara $N_L = 6,023 \cdot 10^{23}$ čestica (N_L - Avogadrov broj). *Molni udio, X_i* i-tog sastojka označava udio količine tvari n_i i-tog sastojka u ukupnoj količini tvari *n* smjese. *Molna masa, M_i* [kg/kmol] i-tog sastojka je masa količine tvari sadržane u 1 kmol. *Prosječna molna masa* neke smjese predstavlja prosječnu masu različitih tvari u smjesi:

$$\overline{M} = \sum X_i M_i . \tag{2.3}$$

Ako su svi sastojci u plinovitom stanju, molni udio odgovara volumnom udjelu.

Iz navedenoga se mogu izvesti sljedeći izrazi koji vrijede za smjese s ukupno N_S sastojaka:

$$Y_{i} = \frac{m_{i}}{m} = \frac{M_{i}n_{i}}{\sum_{j=1}^{N_{s}} M_{j}n_{j}} = \frac{M_{i}X_{i}}{\sum_{j=1}^{N_{s}} M_{j}X_{j}},$$
(2.4)

$$X_{i} = \frac{n_{i}}{n} = \frac{Y_{i}}{M_{i}} \overline{M} = \frac{Y_{i} / M_{i}}{\sum_{j=1}^{N_{s}} Y_{j} / M_{j}}.$$
(2.5)

Molna koncentracija tvari, c_i [kmol/m³] i-tog sastojka je omjer količine tvari i-tog sastojka n_i i volumena V:

$$c_i = \frac{n_i}{V}.$$

Kod kemijskih procesa uobičajeno je da se koncentracija tvari prikazuje kemijskim simbolom tvari u uglatoj zagradi (npr. $c_{CO} = [CO]$).

Kod procesa izgaranja, smjese plinova moguće je smatrati idealnim plinovima te se uzajamna ovisnost tlaka, temperature, mase i volumena može prikazati jednadžbom stanja idealnog plina:

$$p_i V = n_i RT , \qquad (2.7)$$

gdje je p_i [Pa] parcijalni tlak i-tog sastojka, V [m³] volumen, n_i [kmol] količina tvari i-tog sastojka, T [K] temperatura i R [J/kmol·K] opća plinska konstanta (R = 8314 J/kmol·K). Uzimajući u obzir jednadžbu stanja idealnog plina moguće je izvesti sljedeće izraze za koncentraciju tvari i gustoću smjese ρ :

$$c_i = \frac{p_i}{RT} = X_i \frac{p}{RT}, \qquad (2.8)$$

$$\rho = \frac{p\overline{M}}{RT} = \frac{p}{RT\sum_{i=1}^{N_s} \frac{Y_i}{M_i}}.$$
(2.9)

2.2. Stehiometrijske jednadžbe izgaranja ugljena i biomase

U gorivima se izgaranjem oslobađa unutarnja kemijska energija koja se prenosi na molekule povećavajući njihovu kinetičku energiju. Time se povećava unutarnja energija radne tvari, a zbog toga i temperatura. Kisik se gorivu u pravilu dovodi sa zrakom u kojemu ga ima oko 21% u volumnom udjelu. Gorivo se sastoji od gorive tvari, vode i pepela. Izgaranjem goriva stvaraju se plinoviti produkti izgaranja od kojih vodena para može kondenzirati te nesagorivi ostatak u obliku pepela. Prilikom potpunog izgaranja svi gorivi sastojci u potpunosti izgore (oksidiraju) dok u slučaju nedovoljne količine zraka ili slabog mješanja goriva i zraka, proizvodi izgaranja mogu još uvijek sadržavati gorive sastojke. Uz gorivo i kisik, za početak procesa izgaranja potrebno je osigurati i treći uvjet, a to je temperatura zapaljenja. Zanimljivo je što se proces oksidacije (spajanje s kisikom) javlja na svim temperaturama pri čemu se oslobađa toplina ali je pri niskim temperaturama taj proces dovoljno spor da se odvođenje topline lako ostvaruje. Kako se temperatura povisuje, proces oksidacije, a time i oslobađanje topline se intenzivira s naročitim ubrzanjem na temperaturi zapaljenja zbog toga jer povećanje temperature nakon zapaljenja ubrzava ostale kemijske reakcije (jednadžba po Arrheniusu).

Proces izgaranja potrebno je optimizirati s ciljem postizanja što veće iskoristivosti utrošenog goriva. Za optimizaciju takvog procesa potrebno je poznavati utjecajne faktore. Izgaranje je, najjednostavnije rečeno, kemijski proces kojim se gorivo sastavljeno od ugljika i vodika uz prisustvo kisika pretvara u ugljični dioksid (CO₂) i vodenu paru (H₂O) uz oslobađanje toplinske energije. Iskoristivost je smanjena ako je izgaranje nepotpuno pri čemu nastaje ugljični monoksid (CO), te zbog viška zraka za izgaranje na čije se zagrijavanje troši dio topline izgaranja. Ako je količina kisika dovedena zrakom u smjesi goriva i zraka upravo takva da se on kemijski spaja sa svakim atomom ugljika i vodika iz goriva, tada se takav omjer zraka i goriva naziva *stehiometrijski omjer*. U realnim uvjetima je u području visokih temperatura praktički nemoguće postići potpuno miješanje goriva i zraka, stoga je za potpuno izgaranje potrebno osigurati višak kisika tj. zraka za izgaranja. Obično se te vrijednosti kreću u rasponu od 5% do

25% zraka. Dovedeni višak zraka mora biti minimalan pošto se zrak u procesu zagrijava i pritom troši dio osjetne topline.

Mehanizam je izgaranja goriva vrlo složen i težak za proračun kada se žele pratiti sve faze procesa. Ako se promatra samo bilanca tvari i topline što je za veliki dio praktičnih problema dovoljno, tada se proračun izgaranja bitno olakšava. Iz stehiometrijskih jednadžbi moguće je na jednostavan način izračunati količinu zraka potrebnog za izgaranje kao i količine nastalih dimnih plinova.

Za proračun izgaranja potrebno je poznavati sastav goriva koji se dobije elementarnom analizom. Sastav goriva po jedinici mase se za kruta goriva prikazuje kao:

$$Y_C + Y_H + Y_S + Y_O + Y_N + Y_w + Y_a = 1.$$
(2.10)

Oznake redom predstavljaju masene udjele: ugljika, vodika, sumpora, kisika, dušika, vlage i pepela.

Proces izgaranja ugljena i biomase sa zrakom može se pojednostavljeno opisati izrazom:

$$v_{\rm r}({\rm C},{\rm H},{\rm O},{\rm N},{\rm S}) + v_{\rm o}(3,76\,{\rm N}_2 + {\rm O}_2) \rightarrow v_{\rm p}({\rm CO},{\rm CO}_2,{\rm H}_2{\rm O},{\rm O}_2,{\rm N}_2,{\rm NO},{\rm NO}_2,{\rm N}_2{\rm O},{\rm SO}_2,{\rm C}_x{\rm H}_y...)$$

(2.11)

pri čemu se stehiometrijski koeficijenti *v*, dobivaju iz bilanci reaktanata (r), zraka (o) i produkata (p) izgaranja. Kruta goriva ekvivalentnog kemijskog sastava $C_{x_1}H_{y_1}O_{z_1}$, u procesu potpunog izgaranja, oksidiraju s kisikom prema:

$$C_{x_1}H_{y_1}O_{z_1} + v'_2 O_2 \rightarrow v''_3 CO_2 + v''_4 H_2O$$
 (2.12)

Iz elementarne analize goriva određuju se molni udjeli ugljika, vodika i kisika u gorivu:

$$x_{1} = Y_{C}/M_{C} = Y_{C}/12$$

$$y_{1} = Y_{H}/M_{H} = Y_{H}/1$$

$$z_{1} = Y_{O}/M_{O} = Y_{O}/16$$
(2.13)

a stehiometrijski odnosi v'_2 , v''_3 i v''_4 postavljenjem bilanci ugljika, vodika i kisika iz čega proizlazi:

$$v_{3}'' = x_{1}$$

$$v_{4}'' = y_{1}/2$$

$$v_{2}' = \frac{1}{2} (v_{4}'' + 2v_{3}'' - z_{1}) = \frac{1}{2} (y_{1}/2 + 2x_{1} - z_{1})$$
(2.14)

Iz tehničke analize goriva određuju se udjeli volatila Y_{ν} , koksnog ostatka Y_k , pepela Y_a i vlage Y_w . Izgoriva masa goriva sastoji se iz volatila Y_{ν} i koksnog ostatka Y_k . Nadalje, u numeričkim analizama se pretpostavlja da koksni ostatak sadrži samo ugljik, $C_{(s)}$ a volatili sadrže kemijske elemente ekvivalentnog sastava $C_{x_a}H_{\nu_a}O_{z_a}$.

Potpuno izgaranje krutog goriva definira se sljedećim stehiometrijskim odnosima:

Ugljik:

$$C + O_{2} \rightarrow CO_{2} + 406,8 \text{ MJ/kmol}_{C}$$

$$1 \text{ kg } C + 1,867 \text{ m}_{n}^{3} \text{ } O_{2} \rightarrow 1,867 \text{ } \text{m}_{n}^{3} \text{ } CO_{2} + 33,9 \text{ } \text{ MJ/kg}_{C}$$

$$(2.15)$$

Vodik:

$$H_{2} + 0.5 O_{2} \rightarrow H_{2}O + 239.4 \text{ MJ/kmol}_{H}$$

$$1 \text{ kg } H_{2} + 5.6 \text{ m}_{n}^{3} O_{2} \rightarrow 11.2 \text{ m}_{n}^{3} \text{ H}_{2}O + 119.7 \text{ MJ/kg}_{H}$$
(2.16)

Sumpor:

$$S + O_{2} \rightarrow SO_{2} + 298,7 \text{ MJ/kmol}_{S}$$

$$1 \text{ kg } S + 0,7 \text{ m}_{n}^{3} \text{ } O_{2} \rightarrow 0,7 \text{ } \text{m}_{n}^{3} \text{ } SO_{2} + 9,334 \text{ MJ/kg}_{S}$$

$$(2.17)$$

Kod nepotpunog izgaranja ugljik oksidira u ugljični monoksid:

$$C + 0.5 O_{2} \rightarrow CO + 122.4 \text{ MJ/kmol}_{C}$$

$$1 \text{ kg } C + 0.933 \text{ m}_{n}^{3} O_{2} \rightarrow 1.867 \text{ m}_{n}^{3} \text{ CO} + 10.2 \text{ MJ/kg}_{C}$$

$$(2.18)$$

Brzina odvijanja kemijske reakcije poput reakcije (2.12) je:

$$\frac{d[CO_2, H_2O]}{dt} = k \left[C_{x_1} H_{y_1} O_{z_1} \right]^{\nu'_1} \left[O_2 \right]^{\nu'_2} \left[\frac{kmol}{m^3 s} \right]$$

i definira se modificiranom Arrheniusovom jednadžbom:

$$k = A \left(T / T_0 \right)^{\beta} e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)}$$
(2.19)

U izrazu za konstantu brzine kemijske reakcije k pojavljuju se predeksponencijalni faktor A, temperatura T, referentna temperatura T_0 , energija aktivacije E i opća plinska konstanta R. Konstanta reakcije k označava broj sudara molekula po jedinici vremena koje završavaju kemijskom reakcijom. Predeksponencijalni faktor označava ukupni broj sudara u jedinici vremena, a eksponencijalni član označava vjerojatnost da će sudar molekula završiti reakcijom. Energija aktivacije E označava minimalnu količinu energije koju molekula mora posjedovati da bi od reaktanta, uz prisustvo kisika, postala produkt.

Iz bilanci (2.15)-(2.18) slijedi da je minimalna teorijska količina kisika i zraka za potpuno izgaranje jednaka:

$$o_{\min} = 1,867Y_{\rm C} + 5,6Y_{\rm H} + 0,7(Y_{\rm S} - Y_{\rm O}), \ m_{\rm n}^{3}/{\rm kg}_{\rm G}$$

$$o_{\min} = 2,667Y_{\rm C} + 8Y_{\rm H} + Y_{\rm S} - Y_{\rm O}, \ {\rm kg}/{\rm kg}_{\rm G}$$
(2.20)

$$l_{\min} = \frac{o_{\min}}{0,21}, \ \mathbf{m}_{n}^{3}/\mathbf{kg}_{G}$$

$$l_{\min} = \frac{o_{\min}}{0,232}, \ \mathbf{kg}/\mathbf{kg}_{G}$$
(2.21)

Stvarna količina zraka za izgaranje iznosi:

$$l = \lambda \cdot l_{\min}, \ \mathbf{m}_{n}^{3} / \mathbf{kg}_{G}, \ \mathbf{kg} / \mathbf{kg}_{G}$$
(2.22)

Vrijednost pretička zraka λ ovisi o vrsti goriva, plameniku i ložištu u kojemu se vrši izgaranje. Za kruta goriva poput ugljena i biomase pri izgaranju u letu uobičajene vrijednosti se kreću između $\lambda = 1,1-1,4$. Kod izgaranja goriva u ložištu potrebno je, s jedne strane, pretičak zraka držati što manjim, kako bi količina dimnih plinova i gubici osjetne topline, te emisije štetnih plinova bili čim manji. S druge strane, pretičak zraka mora biti dovoljno velik kako bi se osiguralo potpuno izgaranje goriva jer bi inače dodatni gubici nastajali zbog nepotpunog izgaranja. Pri potpunom izgaranju, vlažni dimni plinovi izgaranja sastoje se iz CO₂, H₂O, SO₂, N₂ i O₂, te iz jednog kilograma goriva nastaje:

$$V_{vl} = CO_2 + SO_2 + N_2 + O_2 + H_2O, [kmol/kg_g]$$
 (2.23)

Prema prethodno pokazanim bilancama pojedini članovi u (2.23) mogu se prikazati u obliku

$$\operatorname{CO}_2 = \frac{Y_{\rm C}}{12} \tag{2.24}$$

$$H_2 O = \frac{Y_H}{2} + \frac{Y_w}{18}$$
(2.25)

$$SO_2 = \frac{Y_S}{32}$$
 (2.26)

$$N_2 = \frac{Y_N}{28} + 0,79\lambda l_{\min}$$
(2.27)

$$O_2 = 0,21(\lambda - 1)l_{\min}$$
(2.28)

Sve su veličine sudionika u dimnim plinovima prikazane u [kmol/kg]. Količina suhih dimnih plinova izgaranja dobiva se oduzimanjem vodene pare iz izraza (2.23):

$$V_{\rm s} = V_{\rm vl} - H_2 O = CO_2 + SO_2 + N_2 + O_2, \ \left[\text{kmol/kg}_{\rm g} \right]$$
 (2.29)

Gustoća dimnih plinova izgaranja određuje se iz jednadžbe stanja smjese idealnih plinova:

$$\rho_{\rm vl} = \frac{M_{\rm vl}p}{RT} \quad \text{odnosno} \quad \rho_{\rm s} = \frac{M_{\rm s}p}{RT} \tag{2.30}$$

2.3. Određivanje adijabatske temperature plamena

Za ložište vrijedi i bilanca energije: toplina koja se dovodi zrakom i gorivom mora biti jednaka toplini koja se odvodi iz ložišta i toplini dimnih plinova izgaranja:

$$H_{\rm d} + c_{p,\rm G} \Big|_{0}^{T_{\rm G}} T_{\rm G} + \lambda l_{\rm min} c_{p,\rm Z} \Big|_{0}^{T_{\rm Z}} T_{\rm Z} = V_{\rm vl} M_{\rm vl} c_{p,\rm vl} \Big|_{0}^{T_{\rm vl}} T_{\rm vl} + q$$
(2.31)

Temperatura izgaranja u ložištu kojemu se odvodi toplina q [J/kg_G] iznosi:

$$T_{\rm vl} = \frac{H_{\rm d} + c_{p,\rm g} \Big|_{0}^{T_{\rm G}} T_{\rm g} + \lambda l_{\rm min} c_{p,\rm z} \Big|_{0}^{T_{\rm z}} T_{\rm z} - q}{V_{\rm vl} M_{\rm vl} c_{p,\rm vl} \Big|_{0}^{T_{\rm vl}}}$$
(2.32)

Adijabatska (teorijska) temperatura izgaranja je ona temperatura koja se postigne potpunim izgaranjem bez odvođenja topline (q = 0) iz ložišta:

$$T_{\rm ad} = \frac{H_{\rm d} + c_{p,\rm G} \Big|_{0}^{T_{\rm G}} T_{\rm G} + \lambda l_{\rm min} c_{p,\rm z} \Big|_{0}^{T_{\rm z}} T_{\rm z}}{V_{\rm vl} M_{\rm vl} c_{p,\rm vl} \Big|_{0}^{T_{\rm ad}}}$$
(2.33)

Specifični toplinski kapacitet vlažnih dimnih plinova izgaranja dobiva se prema jednadžbi smjese idealnih plinova:

$$c_{p,vl}\Big|_{0}^{T_{ad}} = \sum_{i} Y_{i,vl} c_{p,i}\Big|_{0}^{T_{ad}}$$
(2.34)

Iz izraza (2.33) vidi se da adijabatska temperatura izgaranja raste s toplinskom moći goriva. Slika 2.1 prikazuje ovisnost adijabatske temperature izgaranja o koeficijentu pretička zraka za odabrani ugljen i biomasu. Sastojci prethodno osušenog ugljena su: 39,6% C, 3,1% H, 7,9% O, 1,1% N, 2,6% S i 45,7% pepela; Sastojci prethodno osušene drvne biomase su: 43,8% C, 8,3% H, 46,8% O, 0,4% N, 0,4% S i 0,3% pepela.



Slika 2.1. Adijabatska temperatura izgaranja za odabrani ugljen i biomasu prema (2.33)

Također, za određeno gorivo, adijabatska temperatura raste povećanjem temperature predgrijanja goriva i zraka odnosno pada porastom količine dimnih plinova izgaranja. Izračunom adijabatske temperature izgaranja moguće je procijeniti temperaturu plamena u ložištu. Maksimalna temperatura plamena, radi očuvanja postojanosti materijala stijenki ložišta, ne bi smijela prelaziti 2000-2100K, što se postiže odabirom odgovarajućeg koeficijenta pretička zraka.

U stvarnosti je kinetika kemijskih reakcija mnogo složenija i potrebne su stotine reverzibilnih kemijskih reakcija za opis izgaranja ugljikovodika. Produkti procesa izgaranja, pri visokim temperaturama koje se pritom pojavljuju, nisu jednostavne smjese produkata izgaranja kao što bi se to moglo zaključiti iz jednostavnih globalnih kemijskih jednadžbi izgaranja (2.15-2.18) korištenih za određivanje stehiometrijske smjese. Kemijske tvari disociraju stvarajući pritom velik broj jednostavnijih kemijskih tvari koje dalje u nizu elementarnih kemijskih reakcija reagiraju međusobno. Na primjer, produkti izgaranja ugljikovodika sa zrakom, CO₂, H₂O, O₂ i N₂ disociraju te se kao rezultat pojavljuju nove kemijske tvari H₂, OH, CO, H, O, N, NO i dr. Zadatak je u nastavku definirati model izgaranja koji na zadovoljavajući način opisuje te složene procese koristeći pritom raspoložive računalne resurse.

I. Bonefačić, doktorska disertacija, Analiza utjecaja oblika i veličine čestica biomase pri izgaranju.

3. SASTAV BIOMASE I PROCES IZGARANJA

3.1. Sastav biomase

Biomasa se po sastavu sastoji od celuloze, hemiceluloze i lignina. Ostale manje značajne komponente koje čine organski dio biomase su lignani, lako hlapljiva ulja, tanini, resini, proteini, itd. Anorganski dio uključuje biološki aktivne elemente kalij i klor, čestice materijala uključenih u samu biljku kao silikati i vrlo često razne nečistoće, nevezane uz biomasu, koje se javljaju kao posljedica procesa obrade, transporta i skladištenja (razni metali, plastika, staklo i sl.). U produktima izgaranja taj se anorganski dio biomase u najvećem dijelu može naći u pepelu.

3.1.1. Celuloza

Celuloza čini najveći udio u drvnoj biomasi. Maseni udio se kreće se od 30% kod nekih vrsta drva i ljuski orašastih plodova do preko 90% kod pamuka i sličnih materijala. Celulozu sačinjava do 10.000 anhidroglukoznih jedinica (slika 3.1) u kojoj je maseni udio kisika 49%. Kemijska formula celuloze je $(C_6H_{10}O_5)_n$ a atomi unutar polimera su povezani kovalentnim vezama, vodikovim vezama i Wan Der Waalsovim silama te je po sastavu polisaharid na bazi glukoze.



Slika 3.1. Kemijska struktura celuloze, [24]

3.1.2. Hemiceluloza

Hemiceluloza čini oko 25% mase biomase kod većine biljaka. Hemiceluloza je po kemijskom sastavu slična celulozi osim što ona nije polimer tj. ne sastoji se od lanca ponavljajućih jedinica, monomera, kao što je to slučaj kod celuloze. Lanac hemiceluloze je dosta kraći i uključuje nekoliko ugljikohidratnih monomera (heteropolisaharida) uglavnom heterogeno vezanih sa 6-ugljičnim i 5-ugljičnim anhidro-šećerima, pri čemu je maseni udio kisika u 5-ugljičnom šećeru oko 54%. Kemijska struktura nekih važnijih hemiceluloza, koje se nalaze u sastavu tvrdog i mekog drveta, dana je na slici 3.2.



Slika 3.2. Kemijska struktura nekih tipičnih hemiceluloza, [24]

3.1.3. Lignin

Pod imenom lignin podrazumijeva se grupa visokomolekulskih, umreženih, amorfnih spojeva koji čine oko 25-30% mase biomase. Taj je udio nešto viši kod drvne biomase nego kod biljne biomase. Molekula mu je izrazito trodimenzijska i razgranata, dugog lanca sličnog polimerima osim što se sastoji od različitih monomera, uglavnom fenil-propan jedinica spojenih vezom ugljik-ugljik. Strukture lignina su različite, ovisno o izvoru iz kojeg je dobiven. Najčešće zastupljeni monomer je koniferil alkohol. Na slici 3.3 je pretpostavljena struktura lignina koju je noguće prikazati kao p-kumaril alkohol ($C_9H_6O_3$), koniferil alkohol ($C_{10}H_{12}O_3$) i sinapil alkohol ($C_{11}H_{14}O_4$).



Slika 3.3. Najčešći monomeri lignina, [24]

Udjeli navedenih fenola u ligninu ovise o vrsti biljke i njenom staništu, [24]. Lignini mekog drva se najčešće nazivaju "guaiacil lignini" jer im građevni elementi potječu od transkoniferil alkohola (preko 90%), dok ostatak čini uglavnom trans-p-kumaril alkohol. Lignini tvrdog drva ili "guaiacil-siringil lignini" sastavljeni su od trans-koniferil akohola i trans-sinapil alkohola u podjednakim omjerima. Sadržaj kisika u ligninima je značajno niži nego kod celuloze i hemiceluloze i kreće se u rasponu od 12-30%. Model kemijske strukture lignina prikazan je na slici 3.4.

Pirolizom lignina tijekom sagorijevanja drva ili drvenog ugljena nastaju različiti proizvodi od kojih su karakteristični metoksifenoli.



Slika 3.4. Model kemijske strukture lignina, [24]

3.2. Mehanizmi izgaranja biomase

Proces izgaranja biomase je kompleksan problem sa stanovišta kemije i fizike te se sastoji od nekoliko koraka:

- Zagrijavanje i sušenje,
- Piroliza (devolatilizacija),
- Izgaranje plinske faze (volatila) i
- Izgaranje koksnog ostatka.

Važnost i utjecaj svakog od navedenih koraka na proces izgaranja varira i ovisi o fizikalnim i kemijskim karakteristikama goriva, uvjetima izgaranja i primijenjenoj tehnologiji. S obzirom na način dobave goriva, proces izgaranja moguće je podijeliti na izgaranje kod serijske dobave i izgaranje kod kontinuirane dobave goriva, te s obzirom na dobavu zraka za izgaranje na prisilnu i prirodnu dobavu zraka. Serijska dobava goriva koristi se najčešće kod manjih procesnih peći na drva i drvnu biomasu kod kojih je dobava zraka uglavnom prirodnim putem. Peći srednje veličine i velike peći su u pravilu s kontinuiranom dobavom goriva i prisilnom dobavom zraka za izgaranje. Kod takvih uvjeta izgaranja navedeni procesi se odvijaju odvojeno u različitim

sekcijama peći. Slika 3.5 kvalitativno prikazuje proces izgaranja manje čestice biomase dok se kod čestica većih dimenzija javlja određeni stupanj preklapanja faza.



Slika 3.5. Faze izgaranja čestice biomase manjih dimenzija kod kontinuirane dobave zraka, [25]

3.2.1. Zagrijavanje i sušenje

Da bi došlo do pirolize čestice goriva potrebno ju je prethodno zagrijati do temperature na kojoj piroliza započinje (400-600 K). Taj proces uvelike ovisi o količini vlage u drvu. Povećani udio vode zahtijeva i povećanu količinu energije za njeno isparivanje a time i energiju potrebnu za postizanje temperature pirolize. Nadalje, voda povećava toplinsku vodljivost čestice te je time ubrzan transport energije prema njenom središtu.

Vlaga (voda) se u biomasi pojavljuje u dva oblika: slobodna vlaga i vezana vlaga. Naziv slobodna vlaga odnosi se na udio vode unutar pora čestice biomase dok se vezana vlaga odnosi na udio vode kemijski vezane za stijenke ili u obliku hidratnih spojeva unutar čestica.

Slobodna vlaga isparava s površine i iz unutrašnjosti čestice brzinom određenom tlakom zasićene vodene pare na njenoj površini, parcijalnim tlakom vodene pare u plinovitoj fazi te površinom čestice. Vezana vlaga ne isparava na isti način kao i slobodna vlaga, već se oslobađa uslijed kemijskih reakcija hidratnih spojeva. Neki od osnovnih modela kojima se opisuje sušenje čestica biomase u procesu izgaranja su toplinski model koji pretpostavlja da se sušenje odvija pri konstantnoj temperaturi vrenja te da je zona sušenja beskonačno tanka tj. nastala vodena para trenutačno napušta česticu [26]. Brzina sušenja je u potpunosti kontrolirana brzinom izmjene topline. Primjeri upotrebe toplinskog modela sušenja dani su u radovima [19,27]. Drugi model, nazvan model ravnoteže, bazira se na pretpostavci ravnoteže vodene pare i tekuće faze tj. parcijalni tlak vodene pare određen je tlakom zasićenja [28-31]. Treći je kinetički model koji otpuštanje vlage iz čestice opisuje preko Arrheniusovog izraza.

U ovom radu su čestice biomase prethodno sušene čime je odstranjena sva slobodna i vezana vlaga prije izgaranja.

3.2.2. Piroliza

Piroliza se može definirati kao razgradnja organske tvari pod utjecajem visoke temperature bez dovođenja oksidanta dok je devolatilizacija razgradnja istoga uz prisustvo oksidanta. U ložištima procesnih peći izgaranje se u pravilu vrši uz dovoljnu količinu oksidanta, međutim, kako se čestica biomase nalazi u oblaku kojeg čine volatili sam proces prijenosa tvari između nje i plinske faze odvija se uz nedostatak oksidanta. Stoga je u ovom slučaju teško raditi razliku između ova dva procesa, pa se u ovom radu, kao i u većini literature s ovom tematikom, ne čini razlika između dva navedena procesa.

Pirolizom iz biomase nastaje kompleksna smjesa u kojoj se može naći i više od stotinu ugljikovodika. U smjesi se u najvećem udjelu pojavljuju CO i CO₂ kao posljedica značajne količine kisika u biomasi, zatim H₂O, H₂, ugljikovodici malih molekularnih masa i katran kao smjesa ugljikovodika velikih molekularnih masa. Sastav i nastala količina produkata ovise o procesnim parametrima poput geometrije ložišta, temperature, tlaka i brzine dovođenja topline [32], također, ovise o kemijskom sastavu biomase, njezinim fizikalnim svojstvima, gustoći, toplinskoj provodljivosti, toplinskom kapacitetu te o obliku i veličini čestica. Mehanizam odvijanja pirolize biomase još uvijek nije do kraja razjašnjen unatoč činjenici da je dostupna značajna količina podataka o mehanizmu i kinetici devolatilizacije biomase. Toplinska razgradnja celuloze, promjene faze i nastanak katrana kao produkta osnova su na kojoj se temelji većina postojećih matematičkih modela pirolize biomase. Primjer mogućeg tijeka toplinske razgradnje celuloze dan je na slici 3.6. Pirolizu kao proces moguće je dalje podijeliti u tri uzastopna procesa:

Primarni procesi: Formiraju se produkti u gorivu pri nižim temperaturama (CO₂, alifati, ugljikovodici sa sadržajem kisika i različiti uljni spojevi).

Sekunadarni procesi: Pri porastu temperature formiraju se sekundarni produkti u plinskoj fazi pucanjem lanaca primarnih produkata ili reakcijom plinovitih spojeva na stijenkama čestica.

Tercijarni procesi: Pucanjem lanaca sekundarnih produkata ili repolimerizacijom na teške aromatske spojeve pri visokim temperaturama nastaju novi spojevi



Slika 3.6. Mogući mehanizam degradacije celuloze pirolizom, [33]

Na slici 3.7 prikazani su rezultati termogravimetrijske analize (TGA) za četiri vrste drva. Svi uzorci pokazuju sličan trend gubitka mase i brzine devolatilizacije u funkciji temperature, međutim, razlike su vidljive u nekim detaljima. Prilikom početnog zagrijavanja dolazi do sušenja uzoraka. Na temperaturi od 473 K započinje devolatilizacija i uočljiv je porast brzine devolatilizacije s porastom temperature. Postoje dva temperaturna područja u kojima je vidljiv nagli rast krivulje. Niže temperaturno područje odgovara razgradnji hemiceluloze te više temperaturno područje odgovara razgradnji celuloze. Tvrda drva (tvrdoća po Brinellu) poput bukve i bagrema te breza kao drvo srednje tvrdoće, sadrže veći postotak hemiceluloze nego meka crnogorična drva te je kod njih nešto izraženija devolatilizacija u nižem temperaturnom području. Na temperaturi od 673 K većine volatila u drvu više nema te brzina devolatilizacije naglo pada, međutim, još uvijek je prisutna do temperature od 773 K uslijed razgradnje lignina. Razgradnja lignina je prisutna od početka devolatilizacije ali je najizraženija pri višim temperaturama do 773 K. Kod smreke, udio celuloze kreće se u rasponu 40-45% a hemiceluloze i lignina od 25-30%.



Slika 3.7. Termogravimetrijska analiza četiri vrste drva, [34]

3.2.3. Izgaranje produkata pirolize

Produkti nastali procesom pirolize biomase ili ugljena mogu se s obzirom na agregatno stanje, pri sobnoj temperaturi, podijeliti u tri grupe. Plinoviti produkti (volatili), tekuća faza ili katran te koksni ili ugljični ostatak.

Plinovite produkte čine spojevi čija je molekularna masa manja od 100 kg/kmol. Nekoliko radova je posvećeno određivanju sastava plinske faze kod pirolize biomase (Hajaligol et al [35], Nunn et al [36] [37], De Jong et al [38], Di Blasi et al [39]). Najčešći spojevi koji su se pritom pojavili su CO, CO₂, CH₂O, CH₃CHO i H₂O. U tablici 3.1 dani su rezultati mjerenja pojedinih spojeva u plinovitim produktima pirolize različitih vrsta biomase. Vidljivo je značajno odstupanje u izmjerenim vrijednostima sastava plinova kao posljedica nedovoljne točnosti primijenjenih metoda mjerenja, varijacija u sastavu biomase i uvjeta ispitivanja. Taj efekat je dodatno povećan velikim udjelom katrana u biomasi zbog kojeg mjerene vrijednosti udjela manje zastupljenih plinova postaju vrlo osjetljive na sitne varijacije u njegovom sastavu.

Katran je naziv za skupinu ugljikovodika koji se pri sobnoj temperaturi nalaze u tekućem stanju ali se pri temperaturama na kojima se odvija piroliza oni nalaze u plinovitoj fazi. Nakon pirolize spojevi iz katrana čine najveći dio mase nastalih produkata. To su spojevi velikih molekularnih masa, reda veličine jednog monomera celuloze. Točan sastav katrana je, zbog njegove složene strukture, teško odrediti.

Volatili koji nastaju pri isplinjavanju tijekom pirolize promatranog krutog goriva, izgaraju u plinskoj fazi pri temperaturama od 600 do 800 K ovisno o sastavu. Oni tvore smjesu nepoznatog sastava tako da detaljan opis, temeljen na elementarnoj kemijskoj kinetici, nije moguće izvesti sa zadovoljavajućom točnošću.

Spoi	Celuloza, brzina	Celuloza, brzina	Celuloza, brzina	Tvrdo drvo, brzina	Lignin, brzina	Drvni peleti, brzina	Drvni peleti, brzina	Drvni peleti, brzina
(maseni udio u gorivu)	zagrijavanja	zagrijavanja	zagrijavanja	zagrijavanja	zagrijavanja	zagrijavanja	zagrijavanja	zagrijavanja
	Konačna	Konačna	Konačna	Konačna	Konačna	konačna	konačna	konačna
	temperatura	temperatura	temperatura	temperatura	temperatura	temperatura	temperatura	temperatura
	500 K [35]	750 K [35]	1000 K [35]	1400 K [37]	1400 K [36]	900 K [38]	900 K [38]	900 K [38]
CO	0,99	15,82	22,57	17,00	19,00	7,48	6,77	5,10
H ₂ O	3,55	8,72	9,22	5,10	3,80	10,60	16,00	13,60
CO ₂	0,30	2,38	3,36	6,10	4,10	5,90	5,08	4,88
CH ₃ CHO	0,01	1,58	1,70	1,40	0,90	9,28	8,11	3,97
CH ₂ O	*	*	*	2,00	1,40	3,66	2,93	3,15
CH ₃ COOH	*	*	*	1,50	0,20	2,78	2,37	2,28
НСООН	*	*	*	*	*	2,68	1,73	0,82
CH ₄	0,00	1,11	2,62	2,30	3,20	1,27	1,30	1,15
$C_3H_6O + C_4H_4O$	0,07	1,00	0,82	0,90	0,30	2,05	2,15	1,63
CH ₃ OH	0,25	1,03	0,98	1,50	1,70	0,98	0,74	0,64
C ₆ H ₅ OH	*	*	*	*	*	1,46	0,65	0,73
C_2H_4	0,00	1,05	2,18	1,30	0,90	0,15	0,23	0,09
CHO(CH ₃ COOH)	0,12	0,85	0,58	*	*	*	*	*
H ₂	0,00	0,36	1,18	*	*	*	*	*
C ₃ H ₆	0,00	0,70	0,80	0,40	0,30	*	*	*
$C_4H_8+C_2H_5OH$	0,00	0,29	0,38	0,60	0,60	*	*	*
C_2H_6	0,00	0,17	0,28	0,20	0,30	*	*	*
Razno	*	*	*	0,70	*	0,55	0,36	0,53
Katran	16,37	59,92	49,12	46,00	47,00	37,20	38,80	48,40
Koksni ostatak	83,63	3,32	3,91	7,00	14,00	13,80	13,80	13,80

* Nema podataka

Tablica 3.1. Izmjereni sastav plinovitih produkata pirolize biomase

3.2.4. Izgaranje koksnog ostatka

Koksni ostatak je porozna ugljična tvorevina koja ostaje nakon što su s čestice biomase isparili svi volatili. Osim ugljika u njoj se još nalaze i kruti ostaci pirolize, minerali i metali. Izgaranje koksnog ostatka je također složen proces. Ima vrlo niski tlak para (visoku temperaturu isparavanja) tako da do isparavanja i naknadne oksidacije ne dolazi. Površinski ugljik reagira s oksidantom (O₂, OH, O, CO₂, itd.) iz plinske faze koji udara i lijepi se na površinu čestice. Nastali CO ima visoki tlak para (nisku temperaturu isparavanja) tako da napušta površinu i u plinskoj fazi dalje oksidira u CO₂. Koksni ostatak je vrlo porozan te mu je ukupna površina puno veća od vanjske površine. Modeliranje ovih heterogenih procesa vodi u procese izgaranja s utvrđenim formalizmom kemije katalizatora. Formalizam obuhvaća adsorpciju kisika, kemijske reakcije na površini i desorpciju produkata izgaranja, difuziju u porama i difuziju na granicama čestica koksa. Suprotno procesima izgaranja u plinskoj fazi, heterogene reakcije izgaranja koksa još uvijek nisu dovoljno istražene. Slika 3.8 prikazuje tri tipična režima izgaranja na površini čestice. Prvi režim pretpostavlja da izgaranjem dominira difuzija oksidanta unutar pora čestice a kemijska kinetika je zanemarena. Drugi režim uz difuziju uključuje i kemijsku kinetiku dok je u trećem režimu difuzija zanemarena te se pretpostavlja da kemijska kinetika određuje brzinu odvijanja reakcija a reakcije se odvijaju jednolikom brzinom unutar volumena čestice. Kod izgaranja čestica većih dimenzija pri višim temperaturama realno je za prepostaviti da dominira difuzija. Sa smanjenjem veličine čestica ili snižavanjem temperature procesa, utjecaj kemijske kinetike raste što odgovara procesima s izgaranjem ugljena i biomase u letu. Također, predviđanje brzine izgaranja koksnog ostatka uvelike ovisi o površini same čestice kao i o koncentraciji oksidanta. Pošto je struktura koksnog ostatka vrlo složena i veličina pora različita je od čestice do čestice, ovisno o procesu devolatilizacije, javlja se nedostatak podataka kojim bi se na zadovoljavajući način opisao taj proces. Brojni modeli izgaranja poroznih čestica razvijeni su da bi se to prevladalo.



Slika 3.8. Režimi izgaranja koksnog ostatka

Istraživanja su pokazala da udjeli različitih faza kod pirolize biomase uvelike variraju ovisno o porijeklu biomase i samoj eksperimentalnoj proceduri. Rezultati su se pokazali osobito osjetljivi na varijacije u brzinama dovođenja topline i ispitnim temperaturama. Rasponi masenih udjela za biomasu iznose od 10-30% za plinovite produkte, 45-90% za katran te 2-25% za koksni ostatak. Najznačajnija razlika u odnosu na pirolizu ugljena je puno veći udio plinske faze i katrana kod biomase (do 90% za biomasu i oko 50% za ugljen).

3.2.5. Utjecaj oblika i veličine čestica

Još 2000.g. *Janse* i *Westerhout* su simulirali u svom radu [18], brzu pirolizu pojedinačne čestice drva. Ispitivanja su vršena na česticama oblika sfere, cilindra i diska. Rezultati njihova ispitivanja prikazani su na slici 3.9, gdje je vidljivo da sferične čestice reagiraju najbrže ukoliko je kao karakteristična veličina uzeta najmanja dimenzija čestice, pošto je u tom slučaju njezin omjer površine i volumena najveći. U slučaju kada je za karakterističnu veličinu uzet ekvivalentni promjer sferi, (promjer sfere istoga volumena/mase kao nesferična čestica) rezultati su suprotni tj. čestica sfernog oblika reagira najsporije. Takav rezultat nije posljedica greške u proračunu već jednostavno, posljedica različitog kriterija usporedbe. Pri malim promjerima čestica (ispod 200 µm) i nižim procesnim temperaturama brzina izgaranja određena je brzinom odvijanja kemijskih reakcija na površini čestice a vrijeme konverzije približno je jednako za sve promatrane oblike čestica. Situacija se mijenja s porastom veličine čestica kao što je vidljivo na slici 3.9a. Spomenuto istraživanje je, također, pokazalo da različiti oblici čestica daju različite

omjere volatila i koksnog ostatka i da se taj omjer mijenja s porastom čestice, slike 3.9b i 3.9c. Vidljivo je i da povećanje promjera čestice kao ni njen oblik ne utječu značajno na udio nastalog katrana, slika 3.9d. Bitno je napomenuti da su navedeni rezultati dobiveni pri relativno niskoj procesnoj temperaturi od 823 K koju su autori koristili u svom radu.



Slika 3.9. Utjecaj oblika i veličine čestica na vrijeme pretvorbe i udjele koksnog ostatka, katrana i lakih plinova tijekom pirolize biomase, [18]
4. MATEMATIČKI MODEL

Sustav strujanja plinova uz odvijanje kemijskih reakcija je u svakoj točki prostora i vremena potpuno opisan navođenjem tlaka, gustoće, temperature, brzine strujanja i koncentracije svakog od sastojaka. Ova se svojstva mogu mijenjati po prostoru i vremenu. Promjene su prouzročene strujanjem (konvekcija), kemijskim reakcijama, molekularnim prijenosom (npr. provođenjem topline, difuzijom i viskoznošću) i zračenjem. Matematički opis plamena mora zbog toga uzeti u obzir sve ove uzročnike promjena [40].

Neke fizikalne veličine imaju svojstvo da se neovisno o utvrđenim procesima ne mogu stvoriti niti potrošiti. Tu spadaju energija, masa i količina gibanja. Sumiranjem po svim procesima koji uzrokuju promjene dobivamo jednadžbe koje opisuju očuvanje tih veličina, tj. *jednadžbe očuvanja*.

Matematički model je razvijen za stacionarno turbulentno reaktivno strujanje slabo stlačivog, newtonskog fluida i realiziran je u Kartezijevom koordinatnom sustavu. Pritom je pretpostavljeno da se i kemijske tvari i smjesa ponašaju po zakonu idealnog plina.

U procesima reaktivnog strujanja, moguće je s obzirom na mali Machov broj te zanemarivu vrijednost gradijenta tlaka, usvojiti nestlačivost fluida. Međutim, zbog značajnog utjecaja gradijenta temperature koji se javlja u ložištu, potrebno je zadržati ovisnost fizikalnih veličina i gustoće.

4.1. Jednadžbe očuvanja

Za analizu procesa izgaranja unutar ložišta potrebno je definirati detaljan matematički model svih relevantnih procesa u ložištu što uključuje definiranje jednadžbi očuvanja mase, količine gibanja, energije te jednadžbe očuvanja mase sastojka (kemijske tvari), uz prisustvo čestica goriva. Prisustvo čestica goriva utječe na smjesu plinova utoliko što između njih dolazi do izmjene mase, količine gibanja i energije. Ti su utjecaji uključeni u jednadžbe očuvanja preko izvornog člana, *S*.

4.1.1. Jednadžba očuvanja ukupne mase

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = S_m \,, \tag{4.1}$$

gdje je:

ρ

 \mathcal{U}_i

– gustoća fluida,
– brzina strujanja fluida,

 S_m – izvorni član koji uključuje izmjenu mase do koje dolazi isparavanjem volatila iz čestica goriva.

4.1.2. Jednadžba očuvanja mase kemijskog spoja

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i Y_k \right) = -\frac{\partial}{\partial x_i} J_k + \omega_k + S_{m,k}, \quad k = 1, \dots, N_S,$$
(4.2)

gdje je:

 Y_k – maseni udio kemijskog spoja,

- ω_k brzina nastajanja/trošenja k-tog spoja uslijed kemijske reakcije [kg/m³s],
- N_S ukupan broj kemijskih spojeva,
- $S_{m,k}$ izvorni član kojim je uključena produkcija mase uslijed interakcije s česticama goriva (npr. isparavanjem goriva),
- J_k difuzijski tok definiran Fickovim zakonom:

$$J_{k} = -\rho D_{k} \frac{\partial Y_{k}}{\partial x_{i}}, \qquad (4.3)$$

gdje je: D_k – koeficijent difuzije mase k-tog spoja u smjesu [m²/s].

4.1.3. Jednadžbe očuvanja količine gibanja (Navier-Stokesove diferencijalne jednadžbe)

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i u_j \right) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho g_i + S_{F,i}, \qquad (4.4)$$

gdje je:

 g_i – ubrzanje sile gravitacije,

 $S_{F,i}$ – izvorni član kao posljedica sile uzrokovane interakcijom s česticama goriva, σ_{ii} – tenzor naprezanja definiran Newtonovim zakonom viskoznosti:

$$\sigma_{ij} = -pI_{ij} + \tau_{ij}, \qquad (4.5)$$

gdje je p tlak fluida, I_{ii} jedinični tenzor a τ_{ii} tenzor viskoznih naprezanja definiran kao:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_{\nu} \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} I_{ij}, \qquad (4.6)$$

gdje je: μ – koeficijent molekularne (dinamičke) viskoznosti, μ_{ν} – koeficijent volumenske viskoznosti.

Nakon uvrštavanja Newtonovog zakona viskoznosti (4.5) i tenzora viskoznih naprezanja (4.6) u jednadžbu očuvanja količine gibanja (4.4), dobije se Navier-Stokesova jednadžba za stacionarno strujanje stlačivog newtonskog fluida koja glasi:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i u_j \right) = \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_v \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} I_{ij} \right] + \rho g_i + S_{F,i}.$$
(4.7)

4.1.4. Jednadžba očuvanja energije

Jednadžbu očuvanja energije moguće je izraziti preko ukupne specifične entalpije H.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho u_i H \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) + S_{H,R} + S_{H,\check{c}}$$
(4.8)

gdje je:

 λ – koeficijent toplinske vodljivosti kontinuirane faze,

- c_p specifični toplinski kapacitet kontinuirane faze pri konstantnom tlaku,
- $S_{H,R}$ izvorni član uslijed zračenja,

 $S_{H,\check{c}}$ – izvorni član uslijed interakcije s diskretnom fazom (česticama goriva).

Specifični toplinski kapacitet kontinuirane faze računa se za smjesu plinova prema (2.34) a toplinski kapaciteti sudionika su definirani polinomom i ovise o temperaturi (prilog P1).

Ukupna specifična entalpija u izrazu (4.8) definirana je kao:

$$H = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^{N_s} \rho_k \left(\int_{T_{ref}}^T c_{p,k} \, \mathrm{d}T + \left(\Delta h_f^0 \right)_k \right) = h + \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^{N_s} \rho_k \left(\Delta h_f^0 \right)_k, \qquad (4.9)$$

gdje je: h – specifična entalpija $(\Delta h^0_f)_k$ – standardna entalpija formacije k-tog sastojka

U jednadžbi (4.8) je na temelju eksperimentalnih podataka pretpostavljeno da su koeficijenti difuzije mase sastojaka D_k i koeficijent temperaturne vodljivosti $a = \lambda/\rho c_p$ otprilike jednaki [23]. Iz tih uvjeta proizlazi da je Lewisov broj Le $= a/D_k = \lambda/D_k\rho c_p \approx 1$. S obzirom na veličine toplinskih tokova kod procesa izgaranja, zanemarene su brzine promjene tlaka, pretvorba mehaničke energije u toplinsku te član viskozne disipacije [41]. Izvor topline uslijed kemijskih reakcija uključen je u izraz za ukupnu entalpiju (4.9) preko entalpija formacije.

4.2. Matematički model turbulencije

Turbulentnom strujanju je svojstven trodimenzijski i nestacionarni karakter čak i kod stacionarnih rubnih uvjeta. Međutim, jednako kao i laminarno strujanje i turbulentno je strujanje fluida potpuno opisano Navier-Stokesovim jednadžbama. Za razliku od laminarnog strujanja, turbulencija se sastoji od vremenskih i prostornih fluktuacija varijabli u polju strujanja koja su prividno stohastična što je uzrokovano time što su karakteristična vremena i duljine fizikalnih pojava koje utječu na strujanje mnogo manja nego što su karakteristična vremena i duljine proizašle iz zadanih rubnih uvjeta. Kako je potreba za računanjem strujanja vezana uz rubne uvjete i za rezultate s relativno velikim karakterističnim vremenima i duljinama, računanje turbulentnog strujanja preko sustava diferencijalnih jednadžbi je neekonomično.

Direktna numerička simulacija, DNS (engl. *Direct Numerical Simulation*), je numerička motoda kojom se dobiva kompletno trodimenzijsko, nestacionarno rješenje Navier-Stokesovih jednadžbi. Metoda razlučuje (računa) cijeli spektar turbulentnih skala a radi veličine najmanjih skala (Kolmogorovljevih skala) metoda je vrlo zahtjevna sa stanovišta veličine numeričke mreže i

vremenskog koraka. Direktna numerička simulacija uobičajenih inženjerskih problema (veliki Reynoldsovi brojevi) zahtjeva računalnu moć koja uvelike premašuje mogućnosti trenutno dostupnih računala. DNS-om se stoga rješavaju strujanja jednostavnih modela pri malom Reynoldsovom broju gdje je ipak moguće dobiti jasan uvid u turbulentni proces i turbulentnu strukturu.

Praktična vrijednost DNS-a je u testiranju i vrednovanju turbulentnih modela, a koristi se i kao dodatni izvor podataka veličina koje nisu mjerljive mjernom opremom (npr. fluktuacije tlaka).

Poznavanje kompletnog turbulentnog spektra je od vrlo slabog značaja u svakodnevnoj praksi. Za mnoge inženjerske probleme je nepotrebno razlučiti turbulentne fluktuacije, ali je s druge strane bitno znati utjecaj turbulencije na glavnu struju. Ovakve informacije daju modeli koji se zasnivaju na vremenski osrednjenim Navier-Stokesovim jednadžbama (engl. *Reynolds Averaged Navier Stokes*), u nastavku RANS. Ovi modeli ne računaju, već adekvatno modeliraju turbulenciju. Radi jednostavnosti, ekonomičnosti sa stanovišta računanja i točnosti imaju vrlo široku primjenu u industriji.

Između ova dva smjera, direktnog računanja (DNS) i modeliranja cijelog turbulentnog spektra (RANS), nalazi se, kako mnogi autori navode "zlatna sredina", metoda simuliranja velikih vrtloga, LES (engl. *Large Eddy Simulation*). LES-om se veliki vrtlozi direktno računaju, a manji vrtlozi modeliraju. Pristup je vrlo logičan budući da su veliki vrtlozi pod direktnim utjecajem graničnih uvjeta (promjenjivi od problema do problema) dok su mali vrtlozi neovisni o problemu te time pogodni za modeliranje. Mogućnost modeliranja najnižih skala omogućuje upotrebu numeričkih mreža i vremenskih koraka koji su, za razliku od DNS-a, znatno veći od Kolmogorovljevih skala. Razvojem računala LES dobiva sve veći značaj ali je i dalje najviše raširen samo u akademskoj zajednici.

4.2.1. Reynoldsovo i Favreovo usrednjavanje

Turbulentno strujanje okarakterizirano je izrazito oscilirajućim poljem brzina (slika 4.1), koje utječe na ostale transporne veličine koje zbog toga također osciliraju. S obzirom da su te oscilacije vrlo malih dimenzija i visoke frekvencije, računalno su prezahtjevne za direktno numeričko simuliranje. Umjesto direktne numeričke simulacije, Navier-Stokesove jednadžbe se različitim metodama usrednjavaju što rezultira novim setom jednadžbi koje su računalno manje zahtjevne za rješavanje [42]. Međutim, modificirane jednadžbe sadrže nove nepoznate varijable koje se određuju iz već poznatih varijabli upotrebom različitih modela turbulencije.



Slika 4.1. Vremenske fluktuacije i vremenska srednja vrijednost kod turbulentnog strujanja

Trenutna vrijednost neke veličine Φ može se prikazati kao zbroj srednje vrijednosti i fluktuacije:

I. Bonefačić, doktorska disertacija, Analiza utjecaja oblika i veličine čestica biomase pri izgaranju.

$$\boldsymbol{\Phi} = \overline{\boldsymbol{\Phi}} + \boldsymbol{\Phi}' \tag{4.10}$$

Pri tome vrijedi da je srednja vrijednost fluktuacija jednaka nuli tj.:

$$\overline{\Phi}' = 0 \tag{4.11}$$

Srednja vrijednost veličine $\overline{\Phi}$ predstavlja sada veličinu Φ u polju turbulentnog strujanja. Na isti način moguće je dobiti srednju vrijednost umnoška dviju varijabli Φ_1 i Φ_2 :

$$\overline{\Phi_1 \Phi_2} = \overline{\Phi_1} \overline{\Phi_2} + \overline{\Phi_1' \Phi_2'} \,. \tag{4.12}$$

Važno je napomenuti da je izraz $\overline{\Phi'_1 \Phi'_2}$ nepoznata veličina i uglavnom je različita od nule.

Reynoldsovo usrednjavanje često uključuje dodatne izraze koji ovise o brzini i gustoći ukoliko gradijenti gustoće nisu zanemarljivi. U tom slučaju uobičajeno je usrednjavanje Favreovom metodom gdje se vrši usrednjavanje po gustoći. Analogno Reynoldsovoj metodi, Favreovim usrednjavanjem veličina Φ rastavlja se na srednju vrijednost $\tilde{\Phi}$ i fluktuaciju Φ'' :

$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\tilde{\Phi}} + \boldsymbol{\Phi}'', \tag{4.13}$$

ali je pri tome:

$$\overline{\rho \Phi''} = 0. \tag{4.14}$$

Srednja vrijednost po Favreu može se izvesti iz izraza:

$$\overline{\rho}\widetilde{\Phi} = \overline{\rho}\overline{\Phi} \tag{4.15}$$

gdje $\overline{\rho}$ gustoća usrednjena po Reynoldsu. Veza između veličina usrednjenih po Reynoldsovoj metodi i Favreovoj metodi je sljedeća:

$$\overline{\rho}\widetilde{\Phi} = \overline{\rho}\overline{\Phi} + \overline{\rho'\Phi'} \tag{4.16}$$

Kada se radi o kvazistacionarnom strujanju tj. turbulentnom toku koji se ne mijenja s vremenom, moguće je Favreovim usrednjavanjem [43], dobiti sljedeće izraze za jednadžbe očuvanja:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_i \right) = \overline{S}_m, \tag{4.17}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{i} \widetilde{u}_{j} \right) = -\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\mu \left(\frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_{\nu} \right) \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}} I_{ij} - \overline{\rho} \overline{u_{i}'' u_{j}''} \right] + \overline{\rho} g_{i} + \overline{S}_{F,i},$$

$$(4.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{H} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial x_i} - \overline{\rho} \overline{u_i'' H''} \right) + \overline{S}_{H,R} + \overline{S}_{H,\mathcal{E}} , \qquad (4.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{\sigma_{Y,k}} \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i} - \overline{\rho} \overline{u_i'' Y_k''} \right) + \overline{M_k \omega_k} + \overline{S}_{m,k} .$$
(4.20)

Usrednjene Navier-Stokesove jednadžbe očuvanja nisu određene dok se ne specificiraju članovi oblika $\overline{\rho u''_{i} \Phi''}$. Da bi se došlo do rješenja, koriste se modeli koji opisuju članove Reynoldsovog naprezanja $\overline{\rho u''_{i} \Phi''}$ u funkciji zavisnih varijabli. Najčešće se član $\overline{\rho u''_{i} \Phi''}$ opisuje kao turbulentni transport i koji je jednak umnošku koeficijenta turbulentne difuzije Γ_t i gradijenta srednje vrijednosti transportirane veličine Φ [44,45]:

$$\overline{\rho}\overline{u_i''\Phi''} = -\Gamma_t \frac{\partial \widetilde{\Phi}}{\partial x_i} = -\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \widetilde{\Phi}}{\partial x_i} , \qquad (4.21)$$

gdje μ_t predstavlja turbulentnu viskoznost a σ_t turbulentni Prandtl-Schmidtov broj.

Član $-\overline{\rho u_i''u_j''}$ u jednadžbi (4.18) naziva se Reynolds-ov tenzor naprezanja i predstavlja dodatno naprezanje uslijed turbulentnog strujanja. Prema Boussinesqovoj hipotezi [43], Reynolds-ov tenzor naprezanja se zamjenjuje umnoškom turbulentne viskoznosti μ_t i gradijenta srednjih brzina:

$$-\overline{\rho}\overline{u_i''u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3} \left(\overline{\rho}k + \mu_t \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}\right) I_{ij}, \qquad (4.22)$$

gdje je k usrednjena turbulentna kinetička energija definirana kao:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_k'' u_k''} \tag{4.23}$$

Uvrštavanjem izraza za Reynoldsov tenzor naprezanja (4.22) u jednadžbu (4.18) te ako se definiraju efektivna viskoznost μ_{eff} i efektivni tlak \overline{p}_{eff} kao:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \tag{4.24}$$

i

$$\overline{p}_{eff} = \overline{p} + \frac{2}{3}\overline{\rho}k, \qquad (4.25)$$

slijedi:

$$\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{i} \widetilde{u}_{j} \right) = -\frac{\partial \overline{p}_{eff}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu_{eff} - \mu_{\nu} \right) \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}} I_{ij} \right] + \overline{\rho} g_{i} + \overline{S}_{f,i}$$
(4.26)

Prema izrazu (4.21) definiraju se članovi turbulentne difuzije za ostale usrednjene jednadžbe očuvanja.

Eksperimentima je ustanovljeno da je turbulentni Prandtl-Schmidtov broj za entalpiju jednak Prandtlovom broju [44]:

$$\sigma_{t,H} = \Pr = \frac{\mu \cdot c_p}{\lambda}.$$
(4.27)

Jednadžba očuvanja energije (4.19) je definirana, uzimajući u obzir izraze (4.24) i (4.27) kao:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{H} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{eff}}{\Pr} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_i} \right) + \overline{S}_{H,R} + \overline{S}_{H,\check{c}} , \qquad (4.28)$$

Analogno se dobije i jednadžba očuvanja mase sastojka (4.20), gdje se za velike vrijednosti turbulentnog Reynoldsovog broja ($Re_t = \mu_t / \mu > 100$) molekularna difuzija može zanemariti u odnosu na turbulentnu:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_{i,Yk}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \overline{M}_k \omega_k + \overline{S}_{m,k} .$$
(4.29)

Turbulentni Prandtl-Schmidtov broj sastojka $\sigma_{t,Yk}$, određuje se eksperimentalno.

Turbulentni modeli koji koriste Bousinessquovu pretpostavku se nazivaju modeli turbulentne viskoznosti. Smanjenjem broja nepoznanica sustav i dalje ostaje otvoren te je potrebno unijeti dodatne jednadžbe za računanje turbulentne viskoznosti.

4.2.2. Standardni k- ε model turbulencije

k- ε model [44] je model turbulencije koji se bazira na jednadžbama očuvanja turbulentne kinetičke energije k i turbulentne disipacije po jediničnoj masi ε . Jednadžba očuvanja turbulentne kinetičke energije koristi se u svom izvornom obliku dok se za turbulentnu disipaciju koristi modelirana jednadžba očuvanja:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} k \widetilde{u}_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_i}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \overline{\rho} \varepsilon , \qquad (4.30a)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \varepsilon \widetilde{u}_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_i}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} G_k - C_{2\varepsilon} \overline{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k}, \qquad (4.30b)$$

gdje je: G_k – produkcija turbulentne kinetičke energije uslijed gradijenta brzine, definirana preko Bousinessquove pretpostavke (4.22):

$$G_{k} = -\overline{\rho} \overline{u_{i}'' u_{j}''} \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} = \left[\mu_{i} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} \right) - \frac{2}{3} \left(\overline{\rho} k + \mu_{i} \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}} \right) I_{ij} \right] \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}}.$$
(4.31)

Turbulentna viskoznost u usrednjenoj jednadžbi očuvanja količine gibanja (4.26) se računa kombiniranjem turbulentne kinetičke energije i turbulentne disipacije, sljedećim izrazom:

$$\mu_t = \overline{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}.$$
(4.32)

Fickov se zakon difuzije (4.3) proširuje turbulentnim članom prema:

$$J_{k} = -\left(\rho D_{k} + \frac{\mu_{i}}{\mathrm{Sc}_{i}}\right) \frac{\partial Y_{k}}{\partial x_{i}}$$

$$(4.33)$$

Standardni *k*- ε model turbulencije uvodi u jednadžbama (4.30-4.32) koeficijente $C_{I\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, C_{μ} , σ_k i σ_{ε} čije su vrijednosti u standardnom modelu konstantne i smatraju se univerzalnim za sve klase strujanja. Dobivene su kalibriranjem iz mjerenja različitih klasa strujanja i prikazane su u tablici 4.1.

$C_{l\varepsilon}$	$C_{2arepsilon}$	C_{μ}	σ_k	$\sigma_arepsilon$
1,44	1,92	0,09	1,0	1,3

Tablica 4.1. Koeficijenti standardnog $k-\varepsilon$ modela turbulencije [44]

Nedostatak standardnog k- ε modela turbulencije je u modeliranju zona s niskim Reynoldsovim brojem kao npr. područjima blizu stijenki. Nadalje, model ne zadovoljava kod tokova koji uključuju zakrivljenost strujnica, vrtloženja te granične slojeve s velikim gradijentima tlaka [46]. Ti su nedostaci otklonjeni u realističnom k- ε modelu turbulencije [47].

4.2.3. Realistični k- ε model turbulencije

Realistični k- ε model turbulencije izveden je od standardnog modela od kojeg se razlikuje po formulaciji turbulentne viskoznosti te po novoj jednadžbi očuvanja turbulentne disipacije ε .

Jednadžba očuvanja turbulentne kinetičke energije k realističnog k- ε modela identičnog je oblika kao i kod standardnog k- ε modela (4.30):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} k \widetilde{u}_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_i}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \overline{\rho} \varepsilon , \qquad (4.34)$$

dok je jednadžba očuvanja za turbulentnu disipaciju:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \varepsilon \widetilde{u}_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_i}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \overline{\rho} C_1 S_{ij} \varepsilon - \overline{\rho} C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v\varepsilon}}, \qquad (4.35)$$

gdje je:

$$C_1 = \max\left(0,43;\frac{\eta}{\eta+5}\right) \tag{4.36}$$

$$\eta = S_{ij} \frac{k}{\varepsilon}.$$
(4.37)

U jednadžbama (4.34) i (4.35) G_k predstavlja produkciju turbulentne kinetičke energije zbog gradijenta brzine kao i u standardnom *k*- ε modelu. Koeficijenti C_2 , σ_k i σ_{ε} imaju konstantne vrijednosti koje su dane u tablici 4.2:

	C_2	σ_k	$\sigma_arepsilon$
Ī	1,9	1,0	1,2

Tablica 4.2. Koeficijenti realističnog k- ε modela turbulencije [44]

Za razliku od turbulentne kinetičke energije, jednadžba turbulentne disipacije je različita nego kod standardnog k- ε modela turbulencije. Član produkcije u ε jednadžbi ne uključuje produkciju turbulentne kinetičke energije k. Zatim, član destrukcije (posljednji član u ε jednadžbi) je uvijek određen, pošto mu nazivnik nikad nije jednak nuli, što nije slučaj kod standardnog k- ε modela turbulencije.

Koeficijent turbulentne viskoznosti računa se kao i kod standardnog k- ε modela turbulencije, tj.:

$$\mu_{t} = \overline{\rho} C_{\mu} \frac{k^{2}}{\varepsilon}, \qquad (4.38)$$

međutim, kod realističnog k- ε modela koeficijent C_{μ} nije konstantan već je funkcija brzine deformacije i brzine rotacije sustava te turbulentnih veličina k i ε :

$$C_{\mu} = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{kU^*}{\epsilon}}$$
(4.39)

gdje je:

$$U^* \equiv \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}} , \qquad (4.40)$$

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - 2\varepsilon_{ijk}\omega, \qquad (4.41)$$

$$\Omega_{ij} = \overline{\Omega}_{ij} - \mathcal{E}_{ijk}\omega \quad , \tag{4.42}$$

gdje je $\overline{\Omega}_{ij}$ usrednjeni tenzor brzine rotacije u koordinatnom sustavu koji rotira kutnom brzinom ω . Konstante A_0 i A_s iznose:

$$A_0 = 4,04; \quad A_s = \sqrt{6}\cos\phi,$$
 (4.43)

gdje je: $\phi = \frac{1}{3} \arccos\left(\sqrt{6} \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\sqrt{S_{ij}S_{ij}}}\right).$

U izrazu (4.44) S_{ij} predstavlja tenzor brzine deformacije, definiran kao:

(4.44)

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right).$$
(4.45)

Ovaj model turbulencije je detaljno ispitan na različitim modelima strujanja [47,48] i u svim slučajevima se pokazao znatno boljim od standardnog k- ε modela pogotovo u modeliranju širenja mlaza, zatim kod tokova koja uključuju jaku zakrivljenost strujnica, jaka vrloženja te granične slojeve s velikim gradijentima tlaka.

4.2.4. Zakon stijenke

Prandtl je još 1904. godine razvio koncept graničnog sloja. Prema njegovoj hipotezi, kasnije potvrđenoj mjerenjima, efekti unutrašnjeg trenja se pojavljuju samo u uskom sloju koji se nalazi uz čvrstu stijenku.

Relativna brzina fluida na čvrstoj stijenci jednaka je nuli, a s udaljavanjem od granice se povećava i na kraju asimptotski dostiže vrijednost brzine glavne struje. Ovakva promjena (gradijent brzine) se kod fluida ostvaruje smičnim silama koje reduciraju smično strujanje relativno na granicu. Sloj u kojem se ova promjena brzine dešava i koji se nalazi pod utjecajem čvrste stijenke se naziva graničnim slojem. Prandtl predlaže upotrebu eksponencijalnog zakona raspodjele brzine u graničnom sloju glatke cijevi koji glasi:

$$\frac{U}{U_{\text{max}}} = \left(\frac{y}{r_0}\right)^{1/7},\tag{4.46}$$

gdje je: y – udaljenost od stijenke, r_0 – polumjer cijevi.

Ovaj izraz se često naziva 1/7 zakon ali je nepraktičan jer se u eksperimentima pokazalo da je eksponent izrazito ovisan o Reynoldsovom broju Re. Mjerenja su pokazala da vrijednost eksponenta kod glatkih cijevi pri $\text{Re} = 4 \cdot 10^5$ iznosi 1/8 dok pri $\text{Re} = 4 \cdot 10^6$ iznosi 1/10.

Mjerenjima je ustanovljeno da se relativna brzina fluida, udaljavajući se okomito od stijenke, mijenja logaritamski. Ovakvo ponašanje karakteristično je i za unutrašnja i za vanjska strujanja, a zakonitost se naziva zakon stijenke. Zakon stijenke je jedan od najznačajnijih empirijski utvrđenih veza pri turbulentnom strujanju uz krutu stijenku.

Na slici 4.2. prikazan je tipični profil brzina za turbulentni granični sloj na kojoj su jasno vidljiva tri područja: viskozni podsloj, logaritamski sloj i defektni sloj.



Slika 4.2. Profil brzina turbulentnog graničnog sloja, [86]

U viskoznom podsloju, koji je vrlo tanak, nema turbulentnih vrtložnih gibanja te su smični efekti dominirani viskoznim silama. Pretpostavljajući smičnu silu konstantnom i jednakoj smičnoj sili stijenke τ_w proizlazi, nakon integracije, linearna veza brzine i udaljenosti od stijenke:

$$\tau(y) = \mu \frac{\partial U}{\partial y} \cong \tau_w \tag{4.47}$$

$$U = \frac{\tau_w y}{\mu} \tag{4.48}$$

Korištenjem bezdimenzijske brzine u^+ i udaljenosti od stijenke y^+ moguće je linearnu ovisnost brzine i udaljenosti od stijenke u viskoznom podsloju zapisati u još kraćem obliku:

$$u^+ = y^+ \tag{4.49}$$

uz:

$$u^+ = \frac{U}{u_\tau} \tag{4.50}$$

$$y^{+} = \frac{u_{\tau}y}{v},$$
 (4.51)

gdje je v kinematska viskoznost, a u_{τ} skala brzine reprezentativna za brzine blizu krute granice. Ova brzina se još naziva i brzina smicanja i iznosi:

$$u_{\tau} = \sqrt{\frac{\tau_{w}}{\rho}} \,. \tag{4.52}$$

Logaritamski sloj ($30 < y^+ < 300$) je dio graničnog sloja gdje se viskozni podsloj i defektni sloj spajaju, odnosno to je područje gdje se preklapaju unutarnji i vanjski dio graničnog sloja. Eksperimentalna istraživanja su pokazala da debljina ovog sloja iznosi 2 - 20% ukupne debljine

graničnog sloja. Zakon stijenke točno opisuje promjenu brzine s udaljenošću od granice, a dat je sljedećim izrazom:

$$u^{+} = \frac{1}{\kappa} \ln y^{+} + C , \qquad (4.53)$$

gdje je:

 κ – von Karmanova konstanta,

C – bezdimenzijska integracijska konstanta.

Numeričke vrijednosti konstanti dobivene su kalibriranjem iz mjerenja i iznose $\kappa = 0,4$, a konstanta C = 5,5 za glatke stijenke.

Bezdimenzijska debljina viskoznog podsloja određena je kao sjecište linearnog i logaritamskog zakona (4.49) i (4.53). Slijedi da je linearni zakon primjenjiv za $y^+ < 11,63$ dok je za $y^+ > 11,63$ primjenjiv logaritamski zakon.

Vrijednost konstante C je nepromjenjiva do određene srednje vrijednosti neravnina čvrste stijenke kada počinje opadati kao što se vidi na slici 4.3.



Slika 4.3. Ovisnost konstante zakona stijenke o neravninama krute stijenke, [86]

$$k_s^+ = (u_\tau k_s)/\nu$$
 – bezdimenzijska visina neravnina (4.54)

Zakon stijenke u slučaju potpuno hrapave stijenke glasi:

$$u^{+} = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{y}{k_s}\right) + 8.5, \qquad (4.55)$$

gdje je: k_s – srednja vrijednost neravnina stijeke.

Gornja granica (y^+) primjene zakona stijenke izuzetno je ovisna o promjeni tlaka u smjeru strujanja. Kod negativnih gradijenata tlaka gornja granica primjene zakona raste dok se u suprotnom slučaju smanjuje.

Defektni sloj se nalazi između logaritamskog sloja i ruba graničnog sloja. Naziv dobiva iz defekta (nedostatka) brzine ($U_{max} - U$) koji se smanjuje približavanjem rubu graničnog sloja. Brzina se u ovom sloju asimptotski približava brzini glavne struje te logaritamskom zakonu stijenke. Radi toga promjena brzine i u ovome području ima logaritamski karakter koji glasi:

$$u^{+} = \frac{1}{\kappa} \ln y^{+} + C + \frac{2\Pi}{\kappa} \sin\left(\frac{\pi}{2} \cdot \frac{y}{\delta}\right)$$
(4.56)

gdje je: δ – debljina graničnog sloja, Π – Coleov parametar.

Coleov parametar Π je ovisan o promjeni tlaka, a mjerenja su pokazala da pri konstantnom tlaku iznosi $\Pi \approx 0.6$.

4.3. Model izgaranja

4.3.1. Karakteristike turbulentnog izgaranja

Turbulentno strujanje presjecanjem fronte plamena znatno ubrzava, što se pripisuje velikom oslobađanju topline odnosno velikim promjenama kinematskog viskoziteta plinova te Reynoldsovog broja [49]. Fronta plamena dijeli područje s kemijskim reakcijama od područja sa svježom i neizgorenom smjesom. Zbog različitih temperatura, brzina strujanja izgorene smjese je veća od brzine strujanja neizgorene smjese što dovodi do vrtloženja fronte plamena. Osim što može pojačati turbulenciju strujanja (*flame-generated turbulence*), spomenuti mehanizam može i prigušiti turbulenciju. Suprotni mehanizam, tj. djelovanje turbulencije na frontu plamena, očituje se pak promjenom strukture plamena, ubrzavanjem ili usporavanjem kemijskih reakcija (pa čak i gašenjem plamena) koje se odvijaju pri izgaranju. Uzgonski se efekti drugačije očituju na područja s različitim temperaturama i uzimaju se u obzir kada je strujanje većim dijelom prirodno.

Pretpostavi li se turbulentno strujanje homogeno i izotropno, odnos fluktuacijske komponente brzine vrtloga, u'(l), i karakteristične veličine vrtloga l, glasi:

$$\frac{u'(l)^3}{l} = \varepsilon$$
(4.57)

gdje je ε [m²/s³] disipacija turbulentne kinetičke energije vrtloga. Karakteristično vrijeme vrtloga, τ_e , definira se prema

$$\tau_e = \frac{l}{u'(l)} = \frac{l^{2/3}}{\varepsilon^{1/3}}$$
(4.58)

Karakteristično vrijeme plamena, τ_p , omjer je debljine fronte plamena, δ , i njene brzine širenja, prema:

$$\tau_p = \frac{\delta}{u_p} \tag{4.59}$$

Damköhlerov broj je omjer karakterističnog vremena disipacije vrtloga odnosno vremena miješanja reaktanata i karakterističnog vremena plamena odnosno vremena kemijskih reakcija:

$$Da = \frac{\tau_e}{\tau_p} \tag{4.60}$$

Procesi izgaranja s velikim Damköhlerovim brojevima (Da >> 1) posjeduju vrlo brze kemijske reakcije u odnosu na karakteristično vrijeme vrtloga i u tom slučaju turbulencija utječe na frontu plamena. Procesi izgaranja s malim Damköhlerovim brojevima (Da << 1) posjeduju kemijske reakcije koje se odvijaju puno sporije od vremena miješanja reaktanata i tada turbulentno strujanje nema značajniji utjecaj na proces izgaranja već izgaranjem upravlja kemijska kinetika. U procesima izgaranja s Da \approx 1, vremena kemijskih reakcija i vremena miješanja reaktanata su usporediva, a svojstva izgaranja ovise kako o strujanju tako i o brzinama kemijskih reakcija. Još uvijek postoji razilaženje u načinu odabira reprezentativnog vrtloga (4.57), odnosno u

Jos uvijek postoji razilazenje u nacinu odabira reprezentativnog vrtioga (4.57), odnosno u odabiru veličina u'(l) i l, a na kojem se kasnije temelji izbor modela turbulentnog izgaranja. Granični slučajevi dobivaju se kada reprezentativni vrtlog postane najveći odnosno najmanji (Kolmogorov) vrtlog u strujanju. Damköhlerov broj najvećeg vrtloga, s karakterističnom veličinom L, glasi:

$$\mathrm{Da}_{L} = \frac{\tau_{L}}{\tau_{p}} = \frac{L/u'(L)}{\delta/u_{p}}$$
(4.61)

Kolmogorova veličina je najmanja karakteristična duljina u turbulentnom strujanju:

$$\zeta = \left(\frac{v^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \tag{4.62}$$

Karlovitzev broj je recipročna vrijednost Damköhlerova broja najmanjeg (Kolmogorovog) vrloga u strujanju:

$$\operatorname{Ka}_{\zeta} = \frac{1}{\operatorname{Da}_{\zeta}} = \frac{\tau_p}{\tau_{\zeta}} = \frac{\delta / u_p}{\zeta / u'(\zeta)}$$
(4.63)

Vrijednosti Ka_c < 1 označavaju procese izgaranja s vremenima odvijanja kemijskih reakcija kraćim od vremena karakterističnih vrtloga, fronta plamena je naborana i male debljine. U procesima izgaranja s $Da_L < 1$ turbulencija ima snažan utjecaj na frontu plamena. Izgaranja s Ka_c > 1 i $Da_L > 1$ označavaju izgaranja u kojima su kemijske reakcije brže od vremena vrtloga ali su najmanji (Kolmogorovi) vrtlozi dovoljno mali da promjene oblik fronte plamena.

4.3.2. Modeliranje turbulentnog izgaranja prijenosom tvari

Četiri su osnovna numerička modela turbulentnog izgaranja s transportom tvari i kemijskim reakcijama na raspolaganju korisnicima računarskog softwarea FLUENT, [42]:

1. Laminarni (ili Arrheniusov) model (engl. *Laminar Finite-Rate Model*): Koristi se za procese izgaranja gdje se reaktanti brzo miješaju (ili su izmješani prije ulaska u računalnu domenu) ali izgaraju u konačnim vremenima. Dinamika kemijskih reakcija opisana je Arrheniusovim

jednadžbama. Utjecaj turbulentnog miješanja se zanemaruje a brzina i druga svojstva kemijskih reakcija izračunavaju se na temelju karakteristika strujanja.

2. Model disipacije vrtloga, EDM (engl. *Eddy Dissipation Model*) koristi se za turbulentne procese izgaranja u kojima su brzine odvijanja kemijskih reakcija puno veće od brzine miješanja reaktanata turbulencijom. Pretpostavlja se da turbulentno miješanje ne utječe značajnije na strukturu plamena te da je odvijanje kemijskih reakcija beskonačno brzo. Karakteristično za procese izgaranja koji se rješavaju ovim modelom su veliki Damköhlerovi brojevi (Da >> 1) i Reynoldsovi brojevi (Re >> 1).

3. Kombinirani Arrheniusov/EDM model (engl. *Finite Rate/Eddy-Dissipation Model*) pruža mogućnost numeričkog modeliranja zapaljenja i odvijanja procesa izgaranja i za prethodno pripremljene gorive smjese.

4. EDC (engl. *Eddy-Dissipation Concept*) model: Radi se o proširenom EDM modelu koji pruža mogućnost uključenja kemijskih reakcija s međuproduktima u turbulentnom izgaranju. Model je računarski zahtjevan i koristi se za izgaranja s duljim vremenima kemijskih reakcija.

Model disipacije vrtloga – EDM

EDM model temelji se na radu *Magnussena* i *Hjertagera* [50], koji pretpostavlja da turbulentno strujanje dovodi do polaganog mješanja goriva i oksidanta u zoni reakcije gdje dolazi do trenutnog izgaranja te se kemijska kinetika može zanemariti. U EDM modelu disipacija turbulentnih vrtloga proporcionalna je omjeru disipacije turbulencije i turbulentne kinetične energije, ε/k . Model se pokazao dobrim kompromisom između vremena računanja i vjerodostojnosti rješenja (u usporedbi s mjerenjima) za širi raspon problema [51]. Brzina kemijskih reakcija u kojima sudjeluje *n*-ti sudionik u izgaranju, ω_k [kg/m³s] (4.29), modelira se dvjema jednadžbama. Prva jednadžba odnosi se na sudionik *n* u reaktantima kemijske reakcije *r*, a druga se odnosi na sudionik *n* u produktima reakcije. Mjerodavna je manja od dviju vrijednosti produkcije/destrukcije *n*-tog sudionika reakcije *r*:

$$\omega_{n,r} = \beta_1 \ \nu'_{n,r} \ M_n \ \rho \ \frac{\varepsilon}{k} \times \min_{R} \left(\frac{Y_R}{\nu'_{R,r} M_R} \right)$$
(4.64)

$$\omega_{n,r} = \beta_1 \ v'_{n,r} \ M_n \ \rho \ \frac{\varepsilon}{k} \times \beta_2 \frac{\sum_p Y_p}{\sum_p v''_{p,r} M_p}$$
(4.65)

gdje je $v'_{n,r}$ stehiometrijski koeficijent promatranog kemijskog spoja *n* kao reaktanta u kemijskoj reakciji *r*. Stehiometrijski koeficijenti reaktanta *R* i produkata *P* u kemijskoj reakciji *r*, označeni su s $v'_{R,r}$ i $v''_{P,r}$. Odgovarajući maseni udjeli označeni su s Y_P odnosno Y_R . Empirijske konstante u jednadžbi (4.64) i (4.65) su za izgaranje ugljena i biomase uzete $\beta_1 = 4,0$ i $\beta_2 = 0,5$ prema preporuci [42]. Molna masa označena je s *M*. Turbulentna kinetička energija i njena veličina disipacije označene su s *k* i ε .

Prema ovom modelu izgaranje se odvija uvijek kada postoji turbulencija $(k/\varepsilon > 0)$, a za startanje izgaranja nije potrebno paljenje, već samo postojanje gorive smjese. Drugim riječima, goriva će se smjesa zapaliti na ulazu u domenu (zrak i gorivo su prethodno izmješani) odnosno čim se gorivo i zrak promješaju (zrak i gorivo nisu prethodno izmješani). Taj nedostatak EDM modela otklonjen je kombinacijom laminarnog Arrheniusovog i EDM modela (engl. *Finite Rate/Eddy-Dissipation Model*), pri čemu se sustav (4.64) i (4.65) proširuje sa još jednim izrazom za za reverzibilnu reakciju *r* u kojoj sudjeluju reaktanti R_n i produkti P_n , $(n \in [1,N])$:

$$\sum_{n=1}^{N} \mathcal{V}_{n,r}' R_n \underbrace{\stackrel{k_{f,r}}{\longleftarrow}}_{k_{b,r}} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{V}_{n,r}'' P_n \quad , \tag{4.66}$$

gdje je vrijednost produkcije/destrukcije kemijskog spoja:

$$\omega_{n,r} = \left(\nu_{n,r}'' - \nu_{n,r}'\right) \left[k_{f,r} \prod_{m=1}^{N} \left[c_{m,r}\right]^{\eta_{m,r}'} - k_{b,r} \prod_{m=1}^{N} \left[c_{m,r}\right]^{\nu_{m,r}''}\right].$$
(4.67)

Za nereverzibilnu reakciju gdje je $k_{b,r} \ll k_{f,r}$, izraz (4.67) postaje:

$$\omega_{n,r} \approx \left(\nu_{n,r}'' - \nu_{n,r}' \right) \left[k_{f,r} \prod_{m=1}^{N} \left[c_{m,r} \right]^{\left(\eta_{m,r}' + \eta_{m,r}'' \right)} \right], \tag{4.68}$$

gdje je:

e: $c_{m,r}$ - molna koncentracija kemijskog spoja *m* u reakciji *r* [kmol/m³], $\eta'_{m,r}$ - eksponent reaktanta *m* u reakciji *r*,

 $\eta''_{m,r}$ - eksponent produkta *m* u reakciji *r*.

Stehiometrijski koeficijenti reaktanata označeni su s $v'_{n,r}$ dok su stehiometrijski koeficijenti produkata kemijske reakcije *r* označeni s $v''_{n,r}$. Konstanta brzine polazne kemijske reakcije, $k_{f,r}$, određuje se iz Arrheniusove jednadžbe:

$$k_{f,r} = A_r \ T^{\beta} \ e^{-E_r/RT} .$$
 (4.69)

Konstanta povratne kemijske reakcije određuje se preko konstante ravnoteže:

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r} \tag{4.70}$$

gdje je konstanta ravnoteže kemijske reakcije K_r određena sa:

$$K_{r} = \left(\frac{p_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{i} \nu_{n,r}^{"} - \nu_{n,r}^{'}} \exp\left[\frac{\Delta s_{n}^{0}}{R} - \frac{\Delta h_{n}^{0}}{RT}\right],$$
(4.71)

Za atmosferski tlak u izrazu (4.71) uzima se, $p_{atm} = 1,01325$ bar.

Komponente promjene Gibbsove slobodne energije u izrazu (4.71) su:

$$\frac{\Delta s_n^0}{R} = \sum_{n=1}^N \left(\nu_{n,r}'' - \nu_{n,r}' \right) \frac{s_n^0}{R}$$
(4.72)

$$\frac{\Delta h_n^0}{RT} = \sum_{n=1}^N \left(\nu_{n,r}'' - \nu_{n,r}' \right) \frac{h_n^0}{RT}$$
(4.73)

Gdje su s_n^0 i h_n^0 standardna entropija i entalpija nastajanja kemijskog spoja *n*.

4.4. Model diskretne faze

Zbog dodatnih procesa faznih promjena i višefaznih procesa pri ovom izgaranju, ono nije tako dobro analizirano do danas kao što je to izgaranje plinske faze. Pored procesa koji se odvijaju u plinskoj fazi ovdje je potrebno uzeti u obzir i procese na granici krute i plinske faze kao i njihov međusobni utjecaj (prijenos mase, količine gibanja i energije). Da bi se omogućilo rješavanje tako opsežnih procesa razvijeni su brojni modeli izgaranja krutih goriva koji u sebi sadrže niz aproksimacija i pojednostavljenja.

U ovom radu se izgaranje gustog oblaka sitnih čestica (diskretne faze) koji nastaje disperzijom goriva opisuje Lagrangeovom formulacijom tj. čestice se prate zasebno po njihovim putanjama koristeći sustav običnih diferencijalnih jednadžbi. Matematičko modeliranje provodi se rješavanjem jednadžbi očuvanja u čestici, plinskoj fazi te na granici krute i plinske faze, te se sastoji od nekoliko koraka:

- proračun putanje diskretne faze (čestica krutog goriva) uključujući silu otpora strujanju, silu gravitacije, uzgon i silu gradijenta tlaka,
- predviđanje efekata turbulencije na disperziju čestica,
- izmjena topline između čestica goriva i plinske faze,
- devolatilizacija i izgaranje čestica goriva i
- izračun izmijenjenog polja strujanja kontinuirane (plinske) faze uslijed izmjene količine gibanja između fluida i diskretne faze.

4.4.1. Proračun putanje čestice goriva

Model sfernih čestica

Putanja pojedinih čestica goriva računa se iz jednadžbe gibanja u kojoj se izjednačuje inercija čestice sa silama koje na nju djeluju:

$$\frac{\mathrm{d}u_{\varepsilon,i}}{\mathrm{d}t} = F_{D,i} + F_{g,i} + F_{PG,i} \,. \tag{4.74}$$

Gdje su sile koje djeluju na česticu u gibanju po jedinici mase:

- Gravitacijska sila:

$$F_{g,i} = g_i \frac{\left(\rho_c - \rho\right)}{\rho_c}; \tag{4.75}$$

- Sila gradijenta tlaka fluida oko čestice:

$$F_{PG,i} = \frac{\rho}{\rho_{\check{c}}} u_{\check{c},i} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}; \qquad (4.76)$$

- Sila otpora strujanju promatrane čestice:

$$F_{D,i} = \frac{1}{2} \frac{C_D \rho A_{ef,1}}{m_e} \Big| u_i - u_{e,i} \Big| \Big(u_i - u_{e,i} \Big),$$
(4.77)

U prethodnim izrazima oznake bez indeksa odnose se na fluid a oznake s indeksom " \check{c} " na česticu goriva. Efektivna površina $A_{ef,1}$ u izrazu (4.77) predstavlja površinu projekcije čestice u smjeru sile otpora strujanju te je za sferu jednaka površini kružnice promjera $d_{\check{c}}$.

Koeficijent otpora strujanju za česticu sfernog oblika C_D definiran je, prema *Morsi* i *Alexanderu* [52], izrazom:

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{\text{Re}} + \frac{a_3}{\text{Re}^2},$$
(4.78)

Gdje je Reynoldsov broj, Re, za česticu promjera d_{c} definiran kao:

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho d_{\check{c}} \left| u_{\check{c}} - u \right|}{\mu}.$$
(4.79)

Konstante a_1 , a_2 , a_3 iz izraza (4.78) vrijede za glatku sferičnu česticu za širok raspon vrijednosti Reynoldsovog broja i dane su u [52]. Sferni oblik donekle odgovara česticama ugljena dok za čestice biomase ta pretpostavka ne stoji. Točniji opis gibanja čestica nesferičnog oblika dan je prema *Haideru* i *Levenspielu* [22] gdje se uvodi faktor oblika ϕ , koji je definiran kao omjer površine sfere, A_{sf} kojoj je volumen jednak volumenu čestice i stvarne površine čestice, A:

$$\phi = \frac{A_{sf}}{A} \,. \tag{4.80}$$

Faktor oblika može poprimiti vrijednost $0 \le \phi \le 1$. Za čestice ugljene prašine može se uzeti vrijednost faktora oblika $\phi = 1,0$ (sfera), dok se za čestice biomase (s izduženim i nepravilnim oblikom) vrijednost faktora oblika uzet $\phi = 0,6$. Koeficijent otpora strujanju nesferične čestice, C_D , je prema [22]:

$$C_{D} = \frac{24}{\text{Re}_{sf}} \left(1 + b_1 \,\text{Re}_{sf}^{b_2} \right) + \frac{b_3 \,\text{Re}_{sf}}{b_4 + \text{Re}_{sf}}, \qquad (4.81)$$

gdje je Reynoldsov broj, Re_{sf} računat sa promjerom sfere volumena jednakog čestici, d_{sf} , po izrazu (4.79). Empirijski koeficijenti b_1 , b_2 , b_3 , i b_4 izračunavaju se prema izrazima:

$$\begin{aligned} \ln b_1 &= 2,3288 - 6,4581\phi + 2,4486\phi^2 \\ b_2 &= 0,0964 + 0,5565\phi \\ \ln b_3 &= 4,905 - 13,8944\phi + 18,4222\phi^2 - 10,2599\phi^3 \\ \ln b_4 &= 1,4681 - 12,2584\phi - 20,7322\phi^2 + 15,8855\phi^3 \end{aligned} \tag{4.82}$$

Model cilindričnih čestica

U oba opisana modela sila otpora strujanju ne ovisi o orijentaciji čestice niti je uključena sila uzgona što je donekle prihvatljivo kod modeliranja sfernih čestica poput ugljena, međutim kod čestica biomase čija je geometrija nepravilna te je utjecajne faktore potrebno uključiti. Stoga je kreiran model strujanja čestica biomase koji njihov oblik aproksimira cilindrom ili diskom uključujući i silu uzgona dok su čestice ugljena aproksimirane sferom.

Prema [53] gdje je obrađen veći broj dostupnih korelacija za izračun koeficijenta otpora strujanju C_D , najtočniji se pokazao model prema *Ganseru* [54] koji uzima u obzir stvarni oblik čestice. Efektivna površina u izrazu za silu otpora strujanju (4.77) za cilindar visine L i promjera $d_{\check{c}}$ iznosi:

$$A_{ef,1} = \frac{d_{\check{c}}^2}{4} \pi \sqrt{\cos^2 \alpha + \left(4L/d_{\check{c}}\pi\right)^2 \sin^2 \alpha}$$
(4.83)

i ovisi o napadnom kutu α između relativne brzine strujanja čestice $(\vec{u} - \vec{u}_c)$ i njene osi \vec{z}' (slika 4.4).



Slika 4.4. Napadni kut i aerodinamičke sile na cilindričnu česticu

Koeficijent otpora strujanju za cilindričnu česticu biomase je, prema [54]:

$$C_{D} = \frac{24}{\operatorname{Re}_{sf} K_{1}} \left[1 + 0.1118 \left(\operatorname{Re}_{sf} K_{1} K_{2} \right)^{0.6567} \right] + \frac{0.4305 \cdot K_{2}}{1 + 3305 / \left(\operatorname{Re}_{sf} K_{1} K_{2} \right)},$$
(4.84)

Gdje se Reynoldsov broj računa po izrazu (4.79) s promjerom sfere volumena jednakog čestici.

Koeficijenti K_1 i K_2 su:

$$K_{1} = \left(\frac{d_{n}}{3d_{sf}} + \frac{2}{3\phi^{0.5}}\right)^{-1}$$

$$\log K_{2} = 1.8148 \left(-\log\phi\right)^{0.5743}$$
(4.85)

gdje je:

 ϕ – faktor oblika definiran prema (4.80),

- d_{sf} promjer sfere volumena jednakog čestici,
- *d_n* promjer kružnice površine jednake projiciranoj površini čestice u smjeru sile otpora strujanju:

$$d_n = \sqrt{\frac{4A_{ef,1}}{\pi}} \,. \tag{4.86}$$

Uslijed cilindričnog oblika čestice biomase potrebno je u izraz (4.74) uključiti i silu uzgona, F_L :

$$\frac{\mathrm{d}u_{c,i}}{\mathrm{d}t} = F_{D,i} + F_{g,i} + F_{PG,i} + F_{L,i}$$
(4.87)

Vektor sile uzgona je okomit na relativnu brzinu strujanja čestice $(\vec{u} - \vec{u}_{c})$ te uz odgovarajuća pojednostavljenja i na vektor sile otpora strujanju \vec{F}_{D} . Također, sila uzgona leži u ravnini definiranoj s osi čestice, \vec{z}' i vektorom relativne brzine $(\vec{u} - \vec{u}_{c})$, stoga slijedi:

$$\vec{F}_{L} = \frac{1}{2} \frac{C_{L} \rho A_{ef,2}}{m_{c}} \frac{\vec{z}' \cdot (\vec{u} - \vec{u}_{c})}{|\vec{u} - \vec{u}_{c}|} \left[\vec{z}' \times (\vec{u} - \vec{u}_{c}) \right] \times (\vec{u} - \vec{u}_{c}),$$
(4.88)

gdje je $A_{ef,2}$ površina projekcije čestice u smjeru sile uzgona:

$$A_{ef,2} = \frac{d_{\check{c}}^2}{4} \pi \sqrt{\sin^2 \alpha + \left(4L/d_{\check{c}}\pi\right)^2 \cos^2 \alpha} .$$

$$(4.89)$$

Intenzitet vektora sile uzgona iz izraza (4.88) može se odrediti iz omjera sile uzgona i sile otpora strujanju koji, prema [55] iznosi:

$$\frac{\left|\vec{F}_{L}\right|}{\left|\vec{F}_{D}\right|} = \left|\sin^{2}\alpha \cdot \cos a\right|$$
(4.90)

Pri napadnom kutu $\alpha \neq 0^{\circ}$ središte djelovanja tlaka na površini čestice ne podudara se s centrom njene mase, pa se osim navedenih sila na česticu javlja i moment sile koji ju pokušava zakrenuti. Zbog pojednostavljenja taj je moment u ovom radu zanemaren.

Stvoreni model cilindričnih čestica uključen je u FLUENT rješavač preko korisnički definiranih funkcija (engl. *User Defined Functions* - UDF) napisanih u programskom jeziku C. Izvorni kôd dan je u prilogu P2.

4.4.2. Turbulentna disperzija čestica

Disperzija krutih čestica goriva u domeni i utjecaj turbulentnih fluktuacija na putanju čestica modelira se statističkim modelom praćenja (engl. stochastic tracking model-STM). Putanja čestice izračunava se integriranjem jednadžbe (4.74) za sferične čestice tj. (4.87) za cilindrične čestice pri čemu se brzina čestice sastoji iz usrednjene i fluktuirajuće komponente:

$$u = \overline{u} + u'(t) . \tag{4.91}$$

Računanjem dovoljnog velikog broja putanja reprezentativnih čestica, ovom metodom uključeni su slučajni efekti turbulencije.

Kod određivanje fluktuirajuće komponente brzine u' korištena je metoda diskretnog slučajnog koraka, DRW (engl. Discrete Random Walk) [42]. Vrijednosti fluktuirajućih komponenti brzine u', v' i w' tijekom vremena trajanja turbulentnog vrtloga τ_e , određuju se prema Gaussovoj vjerojatnosti distribucije:

$$u' = \zeta \sqrt{\overline{u'^2}}, \qquad (4.92)$$

gdje je ζ normalno distribuiran slučajni broj a ostatak na desnoj strani je lokalna vrijednost standardne devijacije fluktuirajuće komponente brzine. Vrijednosti standardne devijacije svih komponenata moguće je odrediti preko turbulentne kinetičke energije koja je poznata u svakoj točki polja strujanja:

$$\sqrt{\overline{u'^2}} = \sqrt{\overline{v'^2}} = \sqrt{\overline{w'^2}} = \sqrt{\frac{2k}{3}}.$$
 (4.93)

Vrijeme trajanja turbulentnog vrtloga τ_e definirano je kao slučajna varijacija oko Lagrangeovog vremena integracije τ_L :

$$\tau_e = -\tau_L \log(r) \,, \tag{4.94}$$

gdje je r uniformno distribuiran slučajni broj između 0 i 1, dok je Lagrangeovo vrijeme integracije za k- ε model turbulencije određeno izrazom:

$$\tau_L \approx 0.15 \frac{k}{\varepsilon} \,. \tag{4.95}$$

Vrijeme koje je potrebno čestici da prođe kroz vrtlog definirano je izrazom:

$$\tau_{pr} = -\tau_{rel} \cdot \ln\left(1 - \frac{L_e}{\tau_{rel} \left|u - u_{\check{c}}\right|}\right),\tag{4.96}$$

gdje je: τ_{rel} – vrijeme relaksacije čestice, L_e

- karakteristična veličina vrtloga.

Međusobno djelovanje čestice goriva i plinske faze odvija se tijekom manjeg od dva vremenska intervala: vremena trajanja vrtloga τ_e i vremena prolaska čestice kroz vrtlog τ_{pr} . Nakon isteka karakterističnog vremenskog intervala uzima se nova vrijednost slučajnog broja ζ u izrazu (4.92) i računa se nova vrijednost trenutačne brzine.

4.4.3. Izmjena topline i mase diskretne i kontinuirane faze

Izmjena topline i mase čestice goriva koja ulazi u struju vrućeg zraka odvija se u nekoliko faza.

Faza zagrijavanja i hlađenja

Ova faza traje sve dok je temperatura čestice manja od temperature isparavanja volatila:

$$T_{\check{c}} < T_{v} \tag{4.97}$$

Jednadžba topline izmijenjene konvekcijom i zračenjem između diskretne i kontinuirane faze uz pretpostavljenu jednoliku temperaturu čestice, glasi:

$$m_{\check{c}}c_{p,\check{c}}\frac{\mathrm{d}T_{\check{c}}}{\mathrm{d}t} = \alpha A_{\check{c}}\left(T_{\infty} - T_{\check{c}}\right) + \mathcal{E}_{\check{c}}A_{\check{c}}\sigma\left(T_{R}^{4} - T_{\check{c}}^{4}\right),\tag{4.98}$$

gdje je: $m_{\check{c}}$ – masa čestice,

- $c_{p,\check{c}}$ specifični toplinski kapacitet čestice (prilog P1),
- $A_{\check{c}}$ površina čestice,
- T_{∞} lokalna temperatura kontinuirane faze,
- α koeficijent prijelaza topline konvekcijom,
- $\varepsilon_{\check{c}}$ koeficijent emisije čestice,
- σ Stefan-Boltzmannova konstanta zračenja (5,672·10⁻⁸ W/(m²K⁴)),
- T_R temperatura zračenja određena izrazom:

$$T_{R} = \left(\int_{0}^{4\pi} I \,\mathrm{d}\,\Omega \,\Big/ \,4\sigma\right)^{1/4} \tag{4.99}$$

I – intenzitet zračenja,

 Ω – prostorni kut.

Jednadžba (4.98) se integrira po vremenu koristeći približnu, lineariziranu formu koja pretpostavlja da se temperatura čestice mijenja relativno sporo tijekom tog vremenskog intervala:

$$m_{\check{c}}c_{p,\check{c}}\frac{\mathrm{d}T_{\check{c}}}{\mathrm{d}t} = A_{\check{c}}\left[-\left(\alpha + \varepsilon_{\check{c}}\sigma T_{\check{c}}^{3}\right)T_{\check{c}} + \left(\alpha T_{\infty} + \varepsilon_{\check{c}}\sigma T_{R}^{4}\right)\right]$$
(4.100)

Nakon izračuna putanje čestice, jednadžba (4.100) se integrira, te se dobije temperatura čestice za idući vremenski interval $(t + \Delta t)$:

$$T_{\check{c}}(t + \Delta t) = a + [T_{\check{c}}(t) - a] \cdot e^{-b\Delta t}$$
(4.101)

gdje je Δt vremenski interval integracije, $T_{c}(t)$ temperatura čestice u vremenu t, dok su koeficijenti a i b dani izrazima:

$$a = \frac{\alpha T_{\infty} + \varepsilon_{\varepsilon} \sigma T_{R}^{4}}{\alpha + \varepsilon_{\varepsilon} \sigma T_{\varepsilon}^{3}(t)}$$
(4.102)

i

$$b = \frac{A_{\check{c}} \left[\alpha + \varepsilon_{\check{c}} \sigma T_{\check{c}}^{3}(t) \right]}{m_{\check{c}} c_{p,\check{c}}}.$$
(4.103)

Koeficijent prijelaza topline konvekcijom α određuje se iz Nusseltove bezdimenzijske značajke, prema [56,57]:

$$Nu = \frac{\alpha d_{\check{c}}}{\lambda} = 2,0 + 0,6Re^{1/2}Pr^{1/3}$$
(4.104)

gdje je:

 $d_{\check{c}}$ – promjer čestice goriva, λ – toplinska vodljivost kontinuirane faze,

- Re Reynoldsov broj definiran izrazom (4.79)
- Pr Prandtlov broj kontinuirane faze $(c_p \mu / \lambda)$.

Kao promjer čestice biomase cilindričnog oblika u izrazu (4.104) kao i dalje u računu uzima se promjer sfere volumena jednakog čestici.

Tijekom faze zagrijavanja i hlađenja ne dolazi do izmjene mase s kontinuiranom fazom.

Faza devolatilizacije

Faza devolatilizacije započinje u trenutku kada temperatura čestice dosegne temperaturu otpuštanja volatila T_{v} :

$$(4.105)$$

i traje sve dok u čestici ima isparljivih sastojaka:

 $m_{\tilde{c}} > (1 - f_{\nu,0}) m_{\tilde{c},0},$ (4.106)

gdje je:

 $f_{v,0}$ – Maseni udio volatila u početnoj masi čestice, $m_{\varepsilon,0}$ – Početna masa čestice.

S obzirom na značajan udio volatila u česticama goriva, posebno kod biomase, tijekom devolatilizacije uzet je u obzir i koeficijent bubrenja čestice C_{sw} (engl. *swelling coefficient*). Stoga se, promjer čestice $d_{\tilde{c}}$, prilikom devolatilizacije mijenja u odnosu na početni promjer $d_{\tilde{c},0}$, prema relaciji:

$$\frac{d_{\check{c}}}{d_{\check{c},0}} = 1 + (C_{sw} - 1) \frac{m_{\check{c},0} - m_{\check{c}}}{f_{v,0} m_{\check{c},0}} , \qquad (4.107)$$

Ukoliko je $C_{sw} > 1$ promjer čestice raste u fazi devolatilizacije, ukoliko je $C_{sw} < 1$, promjer čestice se smanjuje. Približnu vrijednost koeficijenta za biomasu i ugljen moguće je odrediti iz početnih gustoća čestica, $\rho_{\xi,0}$, gustoće koksnog ostatka, ρ_k , te masenog udjela volatila na početku faze devolatilizacije, $f_{v,0}$, po izrazu [58]:

$$C_{sw} = \left[\frac{\left(1 - f_{v,0}\right)\rho_{\check{c},0}}{\rho_k}\right]^{\frac{1}{3}}.$$
(4.108)

Za vrijednosti gustoća (prilog P3), dobiju se približne vrijednosti koeficijenta bubrenja za ugljen $C_{sw} = 1,0$, te za biomasu $C_{sw} = 0,8$.

U fazi otpuštanja volatila jednadžba topline izmijenjene konvekcijom i zračenjem između diskretne i kontinuirane faze, izraz (4.98), proširuje se s članom koji uključuje latentnu toplinu volatilizacije, h_{fg} [J/kg]:

$$m_{\check{c}}c_{p,\check{c}}\frac{\mathrm{d}T_{\check{c}}}{\mathrm{d}t} = \alpha A_{\check{c}}\left(T_{\infty} - T_{\check{c}}\right) + \varepsilon_{\check{c}}A_{\check{c}}\sigma\left(T_{R}^{4} - T_{\check{c}}^{4}\right) + \frac{\mathrm{d}m_{\check{c}}}{\mathrm{d}t}h_{fg}, \qquad (4.109)$$

te se rješava analitički uz pretpostavku da se temperatura i masa čestice ne mijenjaju značajno tijekom vremenskog koraka Δt po izrazu (4.101) uz koeficijente:

$$a = \frac{\alpha A_{c}T_{\infty} + \varepsilon_{c}A_{c}\sigma T_{R}^{4} + \frac{\mathrm{d}\,m_{c}}{\mathrm{d}\,t}h_{fg}}{\alpha A_{s} + \varepsilon_{s}A_{s}\sigma T_{s}^{3}} \tag{4.110}$$

i

$$b = \frac{A_{\check{c}} \left[\alpha + \varepsilon_{\check{c}} \sigma T_{\check{c}}^3 \right]}{m_{\check{c}} c_{p,\check{c}}}.$$
(4.111)

Do sada je razvijen veliki broj modela otpuštanja volatila pri izgaranju ugljene prašine u letu. Takvi modeli u načelu vrijede i za biomasu, stoga je kao model devolatilizacije biomase odabran *Single Kinetic Rate* model koji pretpostavlja da je brzina volatilizacije proporcionalna količini preostalih volatila u čestici [59]:

$$-\frac{\mathrm{d}\,m_{\check{c}}}{\mathrm{d}\,t} = \Re\Big[m_{\check{c}} - (1 - f_{v,\check{c}})m_{\check{c},0}\Big],\tag{4.112}$$

gdje je brzina reakcije, \Re , definirana prema:

$$\Re = A_1 e^{-(E_1/RT_c)}. \tag{4.113}$$

Uz pretpostavku da se temperatura čestice neznatno mijenja u diskretnom vremenskom koraku integracije Δt , moguće je dobiti približno analitičko rješenje jedandžbe (4.112):

$$m_{\check{c}}(t + \Delta t) = (1 - f_{v,0})m_{\check{c},0} + [m_{\check{c}}(t) - (1 - f_{v,0})m_{\check{c},0}]e^{-\Re\Delta t}$$
(4.114)

S obzirom da je proces devolatilizacije ugljene prašine dovoljno istražen i dostupno je puno više podataka u literaturi moguće je odabrati složeniji model stvaranja volatila te je odabran Kobayashijev model ili *Two Competing Rates* model. Karakteristika ovog modela su dvije neovisne brzine reakcija \Re_1 i \Re_2 koje kontroliraju proces devolatilizacije unutar različitih temperaturnih raspona:

$$\Re_1 = A_1 e^{-(E_1/RT_c)}, \qquad (4.115a)$$

$$\Re_2 = A_2 e^{-(E_2/RT_c)}.$$
 (4.115b)

Navedene brzine reakcija se interpoliraju prema:

$$\frac{m_{\nu}(t)}{m_{\varepsilon,0} - m_a} = \int_0^t (\alpha_1 \Re_1 + \alpha_2 \Re_2) e^{-\int_0^t (\Re_1 + \Re_2) dt} dt, \qquad (4.116)$$

gdje je: $m_v(t)$ – masa otpuštenih volatila do vremena t, m_a – masa pepela u čestici, α_1, α_2 – faktori otpuštanja volatila.

Kobayashijev model zahtijeva poznavanje dvaju predeksponencijalnih faktora, A_1 i A_2 , dviju energija aktivacije, E_1 i E_2 , te vrijednosti faktora α_1 i α_2 za određenu vrstu i sastav goriva. Za korišteni smeđi ugljen *Kakanj*, uzete su vrijednosti predeksponencijalnih faktora i energija aktivacije iz [60]. Iz iste literature preporuka je da se za prvu reakciju, koja se odvija na nižim temperaturama te je stoga sporija, faktor α_1 uzme udio volatila određen tehničkom analizom goriva, te za drugu, bržu rekaciju, pri višim temperaturama, uzme faktor $\alpha_2 = 1$.

Faza izgaranja koksnog ostatka

Nakon završetka faze volatilizacije čestice tj. nakon što su se svi volatili oslobodili i prešli u plinsku fazu, počinje faza izgaranja koksnog ostatka, f_k čestice:

$$m_{\check{c}} \le \left(1 - f_{v,0}\right) m_{\check{c},0} \tag{4.117}$$

koja traje sve dok se taj udio ne potroši:

$$m_{\check{c}} > \left(1 - f_{\nu,0} - f_k\right) m_{\check{c},0}. \tag{4.118}$$

U ovoj fazi reaktivni udio čestice, C_(s) izgara prema:

$$C_{(s)} + 0.5O_2 \rightarrow CO \tag{4.119}$$

Nastali ugljik-monoksid oslobađa se u plinsku fazu.

Trenutno su četiri modela izgaranja koksnog ostatka dostupna korisnicima CFD programa FLUENT 6.3 od kojih je jedan još u eksperimentalnoj fazi te zbog toga nije ušao u razmatranje. S obzirom na dostupne podatke o karakteristikama korištenog goriva, odabran je

Kinetics/Diffusion-Limited Rate Model [61,62] prema kojemu izgaranje čestice koksnog ostatka ovisi o difuziji kisika prema površini čestice D_{O_2} i brzini oksidacije goriva na površini čestice \Re :

$$\frac{\mathrm{d}m_{\check{c}}}{\mathrm{d}t} = -A_{\check{c}}p_{\mathrm{O}_{2}}\frac{D_{\mathrm{O}_{2}}\Re}{D_{\mathrm{O}_{2}}+\Re}$$
(4.120)

gdje je p_{O_2} parcijalni tlak kisika u blizini čestice koji se može izraziti preko masenog udjela kisika, Y_{O_2} :

$$p_{O_2} = \frac{\rho R T_{\infty} Y_{O_2}}{M_{O_2}}$$
(4.121)

Molekularna difuzija kisika i kinetička brzina reakcije određene su izrazima:

$$D_{0_2} = \frac{C_1}{d_{\check{c}}} \left(\frac{T_{\check{c}} + T_{\infty}}{2}\right)^{3/4}$$
(4.122)

$$\Re = C_2 e^{-(E/RT_c)}$$
(4.123)

Vrijednosti konstanti C_1 i C_2 te vrijednost energije aktivacije E [J/kmol] za ugljen uzeti su iz [63] i navedene su u prilogu P3.

Reakcija na površini čestice prilikom izgaranja koksnog (4.119) ostatka troši O₂ iz plinovite faze što znači da se u jednadžbi očuvanja kemijskog spoja O₂ (4.29) pojavljuje izvorni član negativnog predznaka ($S_{m,k} < 0$ za $k = O_2$). Istovremeno, reakcijom nastaje CO koji se u jednadžbi očuvanja kemijskog spoja CO javlja kao izvorni član pozitivnog predznaka ($S_{m,k} > 0$ za k = CO). Reakcijom oksidacije na površini čestice, također, nastaje ili se troši energija. U fazi izgaranja koksnog ostatka jednadžba topline izmijenjene konvekcijom i zračenjem između diskretne i kontinuirane faze uključujući i energiju reakcije na površini čestice, glasi:

$$m_{\check{c}}c_{p,\check{c}}\frac{\mathrm{d}T_{\check{c}}}{\mathrm{d}t} = \alpha A_{\check{c}}\left(T_{\infty} - T_{\check{c}}\right) + \varepsilon_{\check{c}}A_{\check{c}}\sigma\left(T_{R}^{4} - T_{\check{c}}^{4}\right) - f_{h}\frac{\mathrm{d}m_{\check{c}}}{\mathrm{d}t}H_{reak}, \qquad (4.124)$$

gdje je H_{reak} toplinska energija oslobođena kemijskom reakcijom (4.119) na površini čestice, a f_h udio oslobođene energije reakcije direktno apsorbiran od čestice. Ukoliko je produkt oksidacije koksnog ostatka CO, preporuka je da se uzme faktor $f_h = 1,0$ [64]. Time se sva oslobođena energija troši na povećanje temperature čestice. Jednadžba (4.124) se rješava analitički uz pretpostavku da se temperatura i masa čestice ne mijenjaju značajno tijekom vremenskog koraka Δt po izrazu (4.101) uz koeficijente:

$$a = \frac{\alpha A_{\varepsilon} T_{\infty} + \varepsilon_{\varepsilon} A_{\varepsilon} \sigma T_{R}^{4} - f_{h} \frac{\mathrm{d} m_{\varepsilon}}{\mathrm{d} t} H_{reak}}{\alpha A_{\varepsilon} + \varepsilon_{\varepsilon} A_{\varepsilon} \sigma T_{\varepsilon}^{3}}$$
(4.125)

i

$$b = \frac{A_{\check{c}} \left[\alpha + \varepsilon_{\check{c}} \sigma T_{\check{c}}^3 \right]}{m_{\check{c}} c_{p,\check{c}}}.$$
(4.126)

Nakon završetka faze izgaranja ostatak čestice čini negorivi dio koji se dalje ponaša kao inertna čestica u prethodno opisanoj fazi zagrijevanja i hlađenja.

4.4.4. Interakcija diskretne i kontinuirane faze

Tijekom proračuna putanje diskretne faze, gubici ili dobici topline, mase i količine gibanja čestice goriva uključuju se u jednadžbe očuvanja kontinuirane faze. Njihov međusobni utjecaj postiže se naizmjeničnim rješavanjem jednadžbi diskretne i kontinuirane faze do konvergencije. Međufazna izmjena topline, mase i količine gibanja prikazana je na slici 4.5.



Slika 4.5. Izmjena topline, mase i količine gibanja između diskretne i kontinuirane faze

Izmjena količine gibanja

Prijenos količine gibanja s kontinuirane na diskretnu fazu računa se promatrajući promjenu količine gibanja čestice prilikom prolaska kroz svaki konačni volumen koristeći izraz:

$$F = \sum \left[F_{D,i} + F_{g,i} + F_{PG,i} + F_{L,i} \right] \cdot \dot{m}_{\dot{c}} \Delta t , \qquad (4.127)$$

gdje je: $\dot{m}_{\tilde{c}}$ – maseni protok čestica goriva u [kg/s], Δt – vremenski korak [s].

Izraz (4.127) vrijedi za model cilindrične čestice dok se kod sferne čestice sila uzgona $F_{L,i}$, ne uzima u obzir. Promjena količine gibanja definirana izrazom (4.127) pojavljuje se kao izvorni član $S_{F,i}$, u jednadžbi očuvanja količine gibanja za kontrolni volumen kontinuirane faze (4.26) pri svakom sljedećem proračunu polja strujanja.

Izmjena topline

Toplina predana s kontinuirane na diskretnu fazu računa se preko promjene toplinske energije čestice tijekom prolaska kroz svaki konačni volumen:

$$\dot{Q} = \left[\overline{m}_{\check{c}}c_{p,\check{c}}\Delta T_{\check{c}} + \frac{\Delta m_{\check{c}}}{m_{\check{c},0}} \left(-H_{lat} + \int_{T_{ref}}^{T_{\check{c}}} c_{p,\nu} \,\mathrm{d}\,T\right)\right] \frac{\dot{m}_{\check{c},0}}{m_{\check{c},0}},\tag{4.128}$$

gdje je: $\overline{m}_{\check{c}}$ – srednja vrijednost mase čestice u konačnom volumenu [kg], $\dot{m}_{\check{c},0}$ – početni maseni protok čestica [kg/s], $\Delta m_{\check{c}}$ – promjena mase čestice u konačnom volumenu [kg], $\Delta T_{\check{c}}$ – promjena temperature čestice u konačnom volumenu [K], $T_{\check{c}}$ – temperatura čestice na izlazu iz konačnog volumena [K], T_{ref} – referentna temperatura za entalpiju, (T_{ref} =298,15 K), $c_{p,\check{c}}$ – specifični toplinski kapacitet čestice [J/kgK] (prilog P1), $c_{p,v}$ – specifični toplinski kapacitet volatila [J/kgK] (prilog P1), H_{lat} – latentna toplina stvaranja volatila [J/kg].

Izmijenjena toplina izračunata preko izraza (4.128) pojavljuje se preko izvornog člana $S_{H,\check{c}}$, u energetskoj jednadžbi kontinuirane faze (4.28) pri svakom sljedećem proračunu polja strujanja.

Izmjena mase

Prijenos mase s kontinuirane na diskretnu fazu računa se promatrajući promjenu mase čestice prilikom prolaska kroz svaki konačni volumen koristeći izraz:

$$\Delta \dot{m} = \frac{\Delta m_{\check{c}}}{m_{\check{c},0}} \dot{m}_{\check{c},0} \tag{4.129}$$

Izmijenjena masa izračunata preko izraza (4.129) uključena je u jednadžbu očuvanja mase (4.17) preko izvornog člana S_m , te u jednadžbu očuvanja mase kemijskog spoja (4.29) kao izvor/ponor kemijskog spoja $S_{m,k}$, ($k = CO, O_2$), pri svakom sljedećem proračunu polja strujanja.

4.5. Model zračenja

Izmjenu topline zračenjem potrebno je uzeti u obzir u uvjetima kada je toplinski tok zračenja, dan izrazom:

$$\dot{q}_{R} = \sigma \left(T_{\max}^{4} - T_{\min}^{4} \right),$$
 (4.130)

istog reda veličine ili veći od topline izmijenjene konvekcijom ili provođenjem. S obzirom na zavisnost topline izmijenjene zračenjem o četvrtoj potenciji temperature za zaključiti je da zbog visokih temperatura koje se javljaju prilikom izgaranja u ložištu, zračenje nije zanemarljivo. Prijenos topline zračenjem u točki određenoj vektorom \vec{r} u smjeru \vec{s} definiran je jednadžbom:

$$\frac{\mathrm{d}I(\vec{r},\vec{s})}{\mathrm{d}s} + (\alpha + \sigma_s)I(\vec{r},\vec{s}) = \alpha n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r},\vec{s}') \Phi(\vec{s}\cdot\vec{s}') \mathrm{d}\Omega', \qquad (4.131)$$

gdje je: *I* – intenzitet zračenja

- T lokalna temperatura
- *s* duljina puta
- \vec{s}' vektor smjera raspršenja
- α koeficijent apsorpcije
- *n* koeficijent loma
- σ_s koeficijent raspršenja

- σ Stefan-Boltzmannova konstanta (5,672·10⁻⁸ W/(m²K⁴))
- Ω' prostorni kut
- Φ fazna funkcija koja predstavlja vjerojatnost da će se zračenje u smjeru \vec{s}' , ograničeno prostornim kutem d Ω' , raspršiti u smjeru \vec{s} , ograničeno prostornim kutem d Ω (slika 4.6)



Slika 4.6. Prikaz fazne funkcije

Na slici 4.7. prikazan je proces prijenosa topline zračenjem.



Slika 4.7. Izmjena topline zračenjam

Izraz $(\alpha + \sigma_s)$ ds predstavlja optičku debljinu medija. Za koeficijent loma se može uzeti da je n = 1.

Odabrani model zračenja mora uključivati izmjenu topline zračenjem s diskretnom fazom (česticama goriva). Od dostupnih modela u FLUENT-u jedino P-1 model [65,66] i model diskretnih ordinata [67,68,69] zadovoljavaju taj uvjet. P-1 model je eliminiran zbog tendencije da precijeni izmijenjenu toplinu zračenjem u slučaju lokalnih izvora topline te zbog manje točnosti od modela diskretnih ordinata u slučajevima kada je ukupna optička debljina medija $\alpha L < 1$. Stoga je, kao odgovarajući model zračenja odabran model diskretnih ordinata.

4.5.1. Model diskretnih ordinata

Model diskretnih ordinata rješava jednadžbe prijenosa topline zračenjem (4.131) za konačan broj prostornih kuteva određenih vektorom smjera \vec{s} . Svaki oktant prostorne sfere 4π diskretiziran je s $N_{\Phi} \times N_{\theta}$ prostornih kontrolnih kutova ω_i . Kutevi θ i Φ su polarni i azimutni kut definirani u Kartezijevom koordinatnom sustavu (slika 4.8).

Broj jednadžbi jednak je broju prostornih kuteva tj. jednak je broju vektora smjera \vec{s} . Za trodimenzijski slučaj, rješava se $8 \cdot N_{\Phi} \cdot N_{\theta}$ jednadžbi oblika:

$$\frac{d(I\cdot\vec{s})}{ds} + (\alpha + \sigma_s)I(\vec{r},\vec{s}) = \alpha \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r},\vec{s}') \Phi(\vec{s}\cdot\vec{s}') d\Omega'.$$
(4.132)



Slika 4.8. Diskretizacija sfere

Ako se uzme u obzir izmjena topline zračenjem s česticama goriva, jednadžba (4.132) se transformira u:

$$\frac{\mathrm{d}(I\cdot\vec{s})}{\mathrm{d}s} + (\alpha + \alpha_{\check{c}} + \sigma_{\check{c}})I(\vec{r},\vec{s}) = \alpha \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_{\check{c}} + \frac{\sigma_{\check{c}}}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r},\vec{s}') \Phi(\vec{s}\cdot\vec{s}')\mathrm{d}\Omega', \qquad (4.133)$$

Gdje su $\alpha_{\check{c}}$ ekvivalentni koeficijent apsorpcije zbog prisustva čestica goriva i $E_{\check{c}}$ ekvivalentna emisija čestica goriva definirani izrazima:

$$E_{\check{c}} = \lim_{V \to 0} \sum_{n=1}^{N_{\check{c}}} \mathcal{E}_{\check{c},n} \cdot A_{\check{c},n} \frac{\sigma T_{\check{c},n}^4}{\pi V}$$
(4.134)

i

$$\alpha_{\check{c}} = \lim_{V \to 0} \sum_{n=1}^{N_{\check{c}}} \mathcal{E}_{\check{c},n} \frac{A_{\check{c},n}}{V}, \qquad (4.135)$$

gdje su $\varepsilon_{\check{c},n}$, $A_{\check{c},n}$ i $T_{\check{c},n}$ emisivnost, projekcija površine i temperatura *n*-te čestice goriva.

Projekcija površina čestice goriva sfernog oblika iznosi:

$$A_{\check{c},n} = \frac{\pi d_{\check{c},n}^2}{4} \tag{4.136}$$

gdje je $d_{\check{c},n}$ promjer *n*-te čestice.

Ekvivalentni faktor raspršenja čestica goriva $\sigma_{\check{c}}$ u izrazu (4.133) definiran je kao:

$$\sigma_{\check{c}} = \lim_{V \to 0} \sum_{n=1}^{N_{\check{c}}} (1 - f_{\check{c},n}) (1 - \varepsilon_{\check{c},n}) \frac{A_{\check{c},n}}{V}, \qquad (4.137)$$

gdje je $f_{\check{c},n}$ faktor raspršenja za *n*-tu česticu.

Sumacija u izrazima (4.134), (4.135) i (4.137) vrši se za $N_{\check{c}}$ čestica goriva u konačnom volumenu V.

Emisijska, apsorpcijska i difuzna svojstva diskretnih čestica u plinovitoj fazi ovise o koncentraciji i obliku samih čestica te indeksu refrakcije materijala čestice. U numeričkom modelu pretpostavlja se sferičnost i homogenost čestica krutog goriva. Zapravo, promatrane čestice nisu niti sferične niti homogene, međutim, svojstva zračenja oblaka čestica nisu osjetljiva na te pretpostavke.

4.5.2. Model sume utjecaja sivih plinova

Prilikom modeliranja izgaranja za očekivati je da će se među produktima izgaranja nalaziti nesivi plinovi CO_2 i H_2O . U tom slučaju bilo bi pogrešno nastale plinove izgaranja smatrati sivim plinovima s konstantnim koeficijentom apsorpcije α , već on ovisi o lokalnom sastavu izgorenih plinova.

Model sume utjecaja sivih plinova ili kraće WSGGM (engl. *Weighted sum of gray gases model*) uzima u obzir efekte zračenja nesivih plinova poput CO_2 i H_2O koji nastaju kao produkti izgaranja u ložištu. Taj je model kompromis između pojednostavljenog modela sivih plinova i kompletnog modela koji uzima u obzir promjenljivi koeficijenat apsorpcije plinova ovisno o području valnih duljina. Prema WSGGM, emisivnost ε_i i-tog sivog plina na putu *s* iznosi:

$$\mathcal{E}_i = 1 - e^{-\alpha_i ps} \tag{4.138}$$

Gdje je: α_i – koeficijent apsorpcije za *i*-ti sivi plin određen eksperimentalno, *p* – suma parcijalnih tlakova svih apsorbirajućih plinova.

Ukupna emisivnost je suma umnoška emisivnosti i faktora utjecaja emisivnosti $a_{\varepsilon,i}$ za N_I sivih plinova:

$$\varepsilon = \sum_{i=0}^{N_I} a_{\varepsilon,i} \left(1 - e^{-\alpha_i ps} \right)$$
(4.139)

Vrijednosti $a_{\varepsilon,i}$ i α_i ovise o sastavu plina a $a_{\varepsilon,i}$ ovisi još i o temperaturi, te su uzete prema [70,71].

Za dijelove spektra visoke apsorpcije vrijedi:

$$\sum_{i=1}^{N_I} a_{\varepsilon,i} < 1 \tag{4.140}$$

Nulti sivi plin (*i*=0) uzima se proziran s koeficijentom apsorpcije $\alpha_i = 0$ čime se uzmaju u obzir ostali dijelovi spektra. Faktor utjecaja emisivnosti za 0-ti sivi plin računa se prema [71]:

$$a_{\varepsilon,o} = 1 - \sum_{i=1}^{N_I} a_{\varepsilon,i}$$
 (4.141)

Temperaturna ovisnost faktora utjecaja emisivnosti aproksimirana je polinomom stupnja N_J -1:

$$a_{\varepsilon,i} = \sum_{j=1}^{N_j} b_{\varepsilon,i,j} T^{j-1} \,. \tag{4.142}$$

gdje su $b_{\varepsilon,i,j}$ koeficijenti polinoma funkcije za *i*-ti sivi plin, određeni eksperimentalno [70,71,72].

Eksperimentalni podaci su često dostupni u obliku dijagrama ovisnosti ukupnih emisivnosti o produktu $p \cdot s$. Model WSGGM dan jednadžbom (4.138) dobro se poklapa s promjenom emisivnosti u ovisnosti od umnoška $p \cdot s$ čak i za mali broj sivih plinova ($N_I = 3$). Vrijednosti koeficijenata polinoma $b_{\varepsilon,i,j}$ u jednadžbi (4.142) dobiju se primjenom metode minimalne sume kvadrata odstupanja na jednadžbu (4.139).

Koeficijent apsorpcije se u ovisnosti o karakterističnoj veličini konačnog volumena *s* aproksimira po izrazima:

$$\alpha = -\frac{\ln(1-\varepsilon)}{s} \quad \text{za } s > 10^{-4} \text{ m}, \tag{4.143}$$

gdje je ε emisivnost izračunata prema (4.139) i

$$\alpha = \sum a_{\varepsilon,i} \alpha_i p \qquad \text{za } s \le 10^{-4} \text{ m.}$$
(4.144)

4.5.3. Rubni uvjeti za model diskretnih ordinata

Sivi difuzni zid

Ulazni toplinski tok zračenjem na sivi zid, \dot{q}_{ul} , je:

$$\dot{q}_{ul} = \int_{\vec{s}' \cdot \vec{n} > 0} I_{ul} \vec{s}' \cdot \vec{n} \mathrm{d}\Omega' \tag{4.145}$$

Izlazni toplinski tok zračenjem sivog zida, \dot{q}_{iz} , je:

$$\dot{q}_{iz} = (1 - \varepsilon_z) q_{ul} + \varepsilon_z \sigma T_z^4, \qquad (4.146)$$

gdje je:

 T_z – temperatura zida ε_z – emisivnost zida koja u ovom radu iznosi 0,8.

Intenzitet zračenja zida u svim smjerovima iznosi:

$$I_0 = \frac{q_{iz}}{\pi} \,. \tag{4.147}$$



Slika 4.9. Rubni uvjet sivog difuznog zida

Ulaz i izlaz iz domene

Ulazni i izlazni rubni uvjet definiran je kao rubni uvjet stijenke zida uz koeficijent emisije $\varepsilon_{ul} = \varepsilon_{iz} = 1$.

4.6. Modeliranje NO_x emisija

Dušikovi oksidi (većinom NO, NO₂ i N₂O) pridonose stvaranju kiselih kiša i uništenju ozonskog omotača. Standardima su propisane granice maksimalnih emisija NO_x u procesima izgaranja. Stoga se pridaje velika pažnja numeričkim modelima koji predviđaju količine NO_x emisija iz ložišta. Modeliranje NO_x emisija vrši se postprocesorski iz rješenja izgaranja, što je moguće jer su udjeli NO_x spojeva u dimnim plinovima mali i stoga neznatno utječu na dobiveno rješenje izgaranja. Važno je za dobivanje točnih predviđanja NO_x emisija, specifični slučaj procesa izgaranja riješiti s odgovarajućim modelima turbulencije, zračenja, kemijskih reakcija, itd. Dušikovi oksidi nastaju oksidacijom atmosferskog dušika iz zraka koji se dovodi ložištu (termalni NO_x), iz brzih kemijskih reakcija na fronti plamena (promptni NO_x) i oksidacijom dušika iz goriva (NO_x iz goriva). Numeričko modeliranje NO_x emisije uzima u obzir jednadžbe očuvanja dušikovog monoksida NO i međuprodukata cijanovodika HCN te amonijaka NH₃:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{\rm NO}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_{\rm NO}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial Y_{\rm NO}}{\partial x_i}\right) + \omega_{\rm NO,t} + \omega_{\rm NO,p} + \omega_{\rm NO,g}$$
(4.148)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{\rm HCN}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_{\rm HCN}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial Y_{\rm HCN}}{\partial x_i}\right) + \omega_{\rm HCN}$$
(4.149)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_{\mathrm{NH}_3} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i Y_{\mathrm{NH}_3} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_{\mathrm{NH}_3}}{\partial x_i} \right) + \omega_{\mathrm{NH}_3}$$
(4.150)

Jednadžbe (4.148), (4.149) i (4.150) definiraju promjenu masenih udjela spojeva NO, HCN i NH_3 u dimnim plinovima izgaranja konvekcijom, difuzijom i odvijanjem kemijskih reakcija. Kod termalnog i promptnog NO_x mehanizma nastajanja rješava se jedino jednadžba očuvanja (4.148)

4.6.1. Termalni NO_x

Kod izgaranja ugljena i biomase, termalni NO_x , u ukupnim emisijama NO_x , ovisno o temperaturi, sudjeluje s 5% - 20% [73]. Kemijske reakcije kojima nastaje termalni NO_x definirane su Zeldovichevim mehanizmom:

$$O + N_2 \underset{k_{ij}}{\overset{k_{if}}{\longrightarrow}} N + NO$$
(4.151)

$$N + O_2 \xrightarrow[k_{2f}]{} O + NO$$
(4.152)

$$OH + N \underset{k_{3b}}{\overset{k_{3f}}{\longrightarrow}} H + NO$$
(4.153)

Porast koncentracije termalnog dušikovog oksida kemijskim reakcijama (4.151), (4.152) i (4.153) dan je izrazom:

$$\frac{d[NO_t]}{dt} = k_{1f}[O][N_2] + k_{2f}[N][O_2] + k_{3f}[N][OH] - k_{1b}[NO][N] - k_{2b}[NO][O] - k_{3b}[NO][H]$$
(4.154)

Koncentracije pojedinih plinova u izrazu (4.154) izražene su u jedinici [kmol/m³]. Brzine polaznih kemijskih reakcija s dušikovim oksidom kao proizvodom određene su konstantama k_{1f} , k_{2f} i k_{3f} a brzine povratnih kemijskih reakcija u kojima je dušikov oksid reaktant, određene su konstantama k_{1b} , k_{2b} i k_{3b} . Sve navedene konstante brzina kemijskih reakcija s termalnim NO izražene su u [m³/kmol·s]. Funkcija su temperature i računaju se prema izrazima Arrheniusovog oblika i određene su eksperimentalno [74]:

$$k_{1f} = 1,8 \cdot 10^8 e^{-38370/T} \qquad k_{1b} = 3,8 \cdot 10^7 e^{-425/T} k_{2f} = 1,8 \cdot 10^4 T e^{-4680/T} \qquad k_{2b} = 3,81 \cdot 10^3 T e^{-20820/T} k_{3f} = 7,1 \cdot 10^7 e^{-450/T} \qquad k_{3b} = 1,7 \cdot 10^8 e^{-24560/T}$$
(4.155)

Prema (4.154) NO_x raste s povećanjem koncentracije kisika u gorivoj smjesi. Jednadžba (4.151) predstavlja proizvodnju dušikovog oksida iz atmosferskog dušika, međutim kako je energija aktivacije polazne reakcije k_{1f} velika, značajnija proizvodnja termalnog NO_x započet će tek iznad 1800 K. S druge strane energija aktivacije polazne reakcije k_{2f} je manja i za siromašne gorive smjese može se pretpostaviti kvazi-stacionarno stanje između polazne i povratne reakcije (4.152) koje iznosi:

$$\frac{d[NO_{t}]}{dt} = 2[O] \left\{ \frac{k_{1f} [N_{2}] - \frac{k_{1b} k_{2b} [NO]^{2}}{k_{2f} [O_{2}]}}{1 + \frac{k_{1b} [NO]}{k_{2f} [O_{2}] + k_{3f} [OH]}} \right\}$$
(4.156)

Slobodni radikali [O] i [OH] u izrazu (4.156) računaju se tzv. metodom djelomične ravnoteže iz poznatih koncentracija [O₂], prema [75]:

$$[O] = 36,64 \{T [O_2]\}^{1/2} e^{-27123/T}, [kmol/m^3]$$
(4.157)

odnosno [H₂O], prema [76,77]:

$$[OH] = 212,9 \ T^{-0.57} \{ [O] [H_2 O] \}^{1/2} e^{-4595/T}, [kmol/m^3]$$
(4.158)

Porast koncentracije termalnog dušikovog oksida, $\omega_{NO,t}$ iz jednadžbe očuvanja (4.148) jednak je:

$$\omega_{\text{NO},t} = M_{\text{NO}} \frac{d[\text{NO}_t]}{dt}$$
(4.159)

4.6.2. Trenutni ili promptni NO_x

Trenutni NO_x nastaje reakcijama neizgorenih ugljikovodika i atmosferskog dušika. Ne sudjeluje značajnije u emisijama NO_x pri izgaranju ugljena i biomase. Međutim, u određenim okolnostima (bogate gorive smjese s manjim temperaturama plamena i bržim prostrujavanjem kroz ložište) udio trenutnog NO_x može biti velik. Odgovorne kemijske reakcije za nastajanje promptnog NO_x glase:

$$CH + N_2 \rightleftharpoons HCN + N$$
(4.160a) $CH_2 + N_2 \rightleftharpoons HCN + NH$ (4.160b) $N + O_2 \rightleftharpoons NO + O$ (4.160c) $HCN + OH \rightleftharpoons CN + H_2O$ (4.160d) $CN + O_2 \rightleftharpoons NO + CO$ (4.160e)

Smatra se da radikali metilidin (CH) i metilen (CH₂) najviše pridonose stvaranju promptnog NO_x. Promjenu koncentracije promptnog dušikovog oksida definirao je *DeSoete* [78] i s mjerenjima uskladio *Backmier et al.* [79], prema izrazu:

$$\frac{d\left[NO_{p}\right]}{dt} = f k_{p} \left[O_{2}\right]^{a} \left[N_{2}\right] \left[C_{x}H_{y}O_{z}\right] e^{-E/RT}$$
(4.161)

gdje je f - korekcijski faktor koji ovisi o vrsti goriva te o pretičku zraka, λ . Promptni NO_p direktno je proporcionalan koncentracijama atmosferskog dušika i goriva dok je nelinearni utjecaj koncentracije kisika korigiran empirijskom vrijednošću a. Energija aktivacije iznosi E=303,5 kJ/kmol, a konstanta brzine kemijske reakcije iznosi:

$$k_p = 6,4 \cdot 10^6 \left(\frac{RT}{p}\right)^{a+1}$$
(4.162)

Promjena koncentracije promptnog dušikovog oksida, $\omega_{NO,p}$, iz jednadžbe očuvanja (4.148) jednaka je:

$$\omega_{\text{NO},p} = M_{\text{NO}} \frac{d\left[\text{NO}_{p}\right]}{dt}$$
(4.163)

Kod izgaranja ugljene prašine i biomase u letu udio nastalog promptnog NO_x u odnosu na ukupni iznosi oko 5% te je u ovom radu zanemaren.

4.6.3. NO_x iz goriva

Maseni udio dušika u sastavu krutih i tekućih goriva kreće se od 0,3 do 2% [73]. Dušik iz goriva najznačajniji je izvor emisija NO_x s udjelom od 75 do 95% u ukupnim emisijama NO_x kod izgaranja ugljena i biomase u letu [80]. Razlog tome je malen udio promptnog NO_x kod izgaranja siromašne smjese ($\lambda > 1$) pri čemu ne zaostaje značajnija količina neizgorenih ugljikovodika u plinovima izgaranja, odnosno, velika energija aktivacije u reakcijama s termalnim NO_x (T > 1800 K). Dušik iz goriva se prilikom izgaranja prvo veže u međuprodukte
kao što su cijanovodik (HCN) i amonijak (NH₃), a ovi oksidacijom stvaraju dušikov oksid (NO) ili redukcijom atmosferski (N₂) dušik. Očuvanje mase HCN i NH₃ definirano je izrazima (4.149) i (4.150).

Kod ugljena i biomase dušik je prisutan i u volatilima i u koksnom ostatku. Dušik iz koksnog ostatka i volatila može stvarati HCN odnosno NH_3 (shema **A**) ili NO (shema **B**) kako je prikazano na slikama 4.10. i 4.11.



Slika 4.10. Reakcije dušika iz goriva s međuproduktom HCN



Slika 4.11. Reakcije dušika iz goriva s međuproduktom NH₃

Koksni ostatak i volatili sudjeluju u proizvodnji međuprodukata cijanovodika ($\omega_{HCN,k}$ i $\omega_{HCN,\nu}$) ili amonijaka ($\omega_{NH3,k}$ i $\omega_{NH3,\nu}$). S druge strane cijanovodik i amonijak reagiraju s kisikom ili dušikovim oksidom prema:

$\text{HCN} + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO} + \dots$	(4.164a)
$HCN + NO \rightarrow N_2 +$	(4.164b)

- $NH_3 + O_2 \rightarrow NO + \dots \tag{4.164c}$
- $NH_3 + NO \rightarrow N_2 + \dots \tag{4.164d}$

Brzine odvijanja reakcija \Re u [s⁻¹] (4.164a – 4.164d) izmjerio je *DeSoete* [78]:

$$\Re_{\text{NO,HCN}} = 10^{10} X_{\text{HCN}} \left(X_{\text{O}_2} \right)^a e^{-280452/RT}$$
(4.165a)

$$\Re_{N_2, HCN} = 3 \cdot 10^{12} X_{HCN} X_{NO} e^{-251151/RT}$$
(4.165b)

$$\Re_{\text{NO,NH}_3} = 4 \cdot 10^6 X_{\text{NH}_3} \left(X_{\text{O}_2} \right)^a e^{-133950/RT}$$
(4.165c)

$$\Re_{N_2, NH_3} = 1.8 \cdot 10^8 X_{NH_3} X_{NO} e^{-113000/RT}$$
(4.165d)

Molni udio *i*-tog sudionika u smjesi X_i definiran prema (4.5) i može se pisati kao:

$$X_i = \frac{Y_i}{M_i} \overline{M} = \frac{Y_i}{M_i} \frac{\rho RT}{p} \,. \tag{4.166}$$

Brzina trošenja HCN odvijanjem reakcija (4.164a) i (4.164b) odnosno i NH₃ odvijenjem reakcija (4.164c) i (4.164d), jednaka je:

$$\omega_{-\text{HCN}} = \omega_{\text{NO,HCN}} + \omega_{\text{N}_2,\text{HCN}} = -\left(\Re_{\text{NO,HCN}} + \Re_{\text{N}_2,\text{HCN}}\right) \frac{M_{\text{HCN}}p}{RT}$$
(4.167)

$$\omega_{-\rm NH_3} = \omega_{\rm NO, NH_3} + \omega_{\rm N_2, NH_3} = -\left(\Re_{\rm NO, NH_3} + \Re_{\rm N_2, NH_3}\right) \frac{M_{\rm NH_3}p}{RT}$$
(4.168)

Bilance cijanovodika i amonijaka za reakcije prikazane na slici 4.5. i slici 4.6. glase:

$$\omega_{\text{HCN}} = \omega_{\text{HCN},k} + \omega_{\text{HCN},\nu} + \omega_{-\text{HCN}} =$$

$$= \frac{M_{\text{HCN}}}{M_{\text{N}}V} \Big[S_k Y_{\text{N},k} + S_{\nu} Y_{\text{N},\nu} \Big] - \Big(\Re_{\text{NO,HCN}} + \Re_{\text{N}_2,\text{HCN}} \Big) \frac{M_{\text{HCN}} p}{RT}$$

$$\omega_{\text{NH}_3} = \omega_{\text{NH}_3,k} + \omega_{\text{NH}_3,\nu} + \omega_{-\text{NH}_3} =$$
(4.169)

$$= \frac{M_{\rm NH_3}}{M_{\rm N}V} \Big[S_k Y_{\rm N,k} + S_{\nu} Y_{\rm N,\nu} \Big] - \Big(\Re_{\rm NO,NH_3} + \Re_{\rm N_2,NH_3} \Big) \frac{M_{\rm NH_3} p}{RT}$$
(4.170)

Gdje je:

 S_k - brzina izgaranja koksnog ostatka [kg/s],

 S_v - brzina stvaranja volatila [kg/s],

 $Y_{N,k}$ - Maseni udio dušika u koksnom ostatku [kg/kg],

 $Y_{N,v}$ - Maseni udio dušika u volatilima [kg/kg],

V - Volumen ćelije [m³].

Dušikov oksid nastaje reakcijom dušika iz koksnog ostatka (**B**), (slika 4.10) i (slika 4.11) te iz cijanovodika i amonijaka prema reakcijama (4.164a) i (4.164c) te brzinama (4.165a) i (4.165c):

$$\omega_{+\mathrm{NO}} = \omega_{\mathrm{NO},k} + \omega_{\mathrm{NO},\mathrm{HCN}} + \omega_{\mathrm{NO},\mathrm{NH}_{3}} = \frac{M_{\mathrm{NO}}}{M_{\mathrm{N}}V} S_{k}Y_{\mathrm{N},k} + \frac{M_{\mathrm{NO}}p}{RT} \left(\Re_{\mathrm{NO},\mathrm{HCN}} + \Re_{\mathrm{NO},\mathrm{NH}_{3}}\right)$$
(4.171)

Dušikov oksid se troši redukcijom na površini čestica koksnog ostatka prema:

$$\omega_{-NO,k} = -230 \ C_P \ A_{por} \ e^{-142740/RT} \underbrace{Y_{NO} \ \rho \ R \ T}_{P_{NO} \times M_{NO}}$$
(4.172)

Gdje je C_P [kg/m³] koncentracija gorivih čestica u jedinici prostora, A_{por} [m²/kg] je površina pora u gorivim česticama. Za vrijednost specifične površine pora čestica uzeto je 5000 m²/kg, [81]. Dušikov oksid se također troši u reakcijama s cijanovodikom (4.164b) i amonijakom (4.164d) brzinama (4.165b) i (4.165d):

$$\omega_{-\text{NO,HCN}\&\text{NH}_3} = -\frac{M_{\text{NO}}p}{RT} \left(\Re_{\text{N}_2,\text{HCN}} + \Re_{\text{N}_2,\text{NH}_3} \right)$$
(4.173)

Promjena koncentracije dušikovog oksida iz goriva, $\omega_{NO,g}$, iz (4.148) jednaka je:

$$\mathcal{O}_{\text{NO,g}} = \mathcal{O}_{+\text{NO}} + \mathcal{O}_{-\text{NO,k}} + \mathcal{O}_{-\text{NO,HCN&NH}_3} =
 = \frac{M_{\text{NO}}}{M_{\text{N}}V} S_k Y_{\text{N,k}} - 230 \ C_p \ A_{por} \ e^{-142740/RT} \underbrace{Y_{\text{NO}} \rho \ R \ T}_{p_{\text{NO}} \times M_{\text{NO}}} +
 + \frac{M_{\text{NO}} p}{RT} \Big(\Re_{\text{NO,HCN}} + \Re_{\text{NO,NH}_3} - \Re_{\text{N}_2,\text{HCN}} - \Re_{\text{N}_2,\text{NH}_3} \Big)$$
(4.174)

Smanjenje NO_x emisija moguće je postići: pravilnom konstrukcijom ložišta i plamenika te pravilnim upravljanjem procesa izgaranja kao npr. recirkulacijom dimnih plinova, stupnjevanim dovođenjem zraka, sekundarnim strujama zraka ili dodavanjem prirodnog plina za dogorijevanje. Tu su i postupci pročišćavanja dimnih plinova korištenjem selektivne katalitičke redukcije SCR (engl. *Selective Catalytic Reduction*) ili nekatalitičke redukcije SNCR (engl. *Selective Non-Catalytic Reduction*), aktivnim ugljenom, itd. Gornja granica dozvoljenih emisija NO_x u klasi velikih uređaja za loženje na biomasu, u Hrvatskoj i u zemljama EU, iznosi 200-400 mg/m_n³, te za klasu srednjih uređaja za loženje na biomasu, iznosi 500 mg/m_n³ tj. 300 mg/m_n³ za vrtložno izgaranje [82].

4.7. Modeliranje SO_x emisija

Prlikom izgaranja krutog goriva poput ugljena i biomase modeliranje SO_x polutanata odvija se u dvije faze. Dio sumpora iz goriva oslobađa se u plinovitu fazu tijekom devolatilizacije u obliku H₂S, COS, SO₂ i CS₂ dok se ostatak zadržava u koksnom ostatku i oksidira u kasnijoj fazi. U plinovitoj smjesi bogatoj kisikom dominantni spojevi sumpora su SO, SO₂ i SO₃ dok su pri nižim koncentracijama kisika prisutni i H₂S i SH a udio SO₃ postaje zanemarljiv. Kod goriva s nižim udjelom sumpora može se pretpostaviti otpuštanje sumpora uglavnom u obliku H₂S, brzinom koju je moguće odrediti slično kao i kod brzine otpuštanja dušika vezanog u gorivu. Sumpor vezan u koksnom ostatku oslobađa se direktno, u obliku SO₂ i to brzinom jednakom izgaranju koksnog ostatka. S obzirom na navedeno, moguće je postaviti set jednadžbi očuvanja za H₂S, SO, SO₂, SO₃ i SH kojima je, po ovom modelu, definirano izgaranje sumpora iz ugljena i biomase:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_{SO_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i Y_{SO_2} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_{SO_2}}{\partial x_i} \right) + \omega_{SO_2}$$
(4.175)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{S}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho u_{i} Y_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{S}} \right) = \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho D \frac{\partial Y_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{S}}}{\partial x_{i}} \right) + \omega_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{S}}$$
(4.176)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_{\text{SO}_3} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i Y_{\text{SO}_3} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_{\text{SO}_3}}{\partial x_i} \right) + \omega_{\text{SO}_3}$$
(4.177)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{\rm SO}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_{\rm SO}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial Y_{\rm SO}}{\partial x_i}\right) + \omega_{\rm SO}$$
(4.178)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{\rm SH}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_{\rm SH}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial Y_{\rm SH}}{\partial x_i}\right) + \omega_{\rm SH}$$
(4.179)

Detaljan mehanizam reakcije oksidacije sumpora prema [83] sastoji se od 20 reverzibilnih reakcija i uključuje 12 kemijskih spojeva (S, S₂, SH, SO, SO₂, H₂S, H, H₂, OH, H₂O, O i O₂). Međutim, tako detaljan mehanizam uglavnom nije praktičan za primjenu pri numeričkom modeliranju izgaranja stoga je tendencija da se smanji broj reakcija i kemijskih spojeva koji u njima sudjeluju do mjere u kojoj su predviđene koncentracije značajnijih spojeva još uvijek prihvatljive. Uslijed navedenog, prihvaćen je mehanizam sastavljen od 8 reverzibilnih reakcija prikazanih u tablici 4.3.

Reakcija	Konstanta brzine reakcije
$H_2S + H \underset{k_{1b}}{\overset{k_{1f}}{\underset{k_{1b}}{\Longrightarrow}}} SH + H_2$	$k_{1f} = 1,819702 \cdot 10^7 \text{ e}^{-7484,3/RT}$ $k_{1b} = 9,375623 \cdot 10^6 \text{ e}^{-62536,6/RT}$
$OH + H_2S \underset{k_{2b}}{\overset{k_{2f}}{\longleftrightarrow}} H_2O + SH$	$k_{2f} = 1,380385 \cdot 10^2 \text{ e}^{-3742,15/RT}$ $k_{2b} = 3,104557 \cdot 10^7 \text{ e}^{-121854,3/RT}$
$SO + OH \rightleftharpoons_{k_{3b}}^{k_{3f}} H + SO_2$	$k_{3f} = 1,62181 \cdot 10^8 \text{ e}^{-2565,926/RT}$ $k_{3b} = 7,691299 \cdot 10^9 \text{ e}^{-118702,3/RT}$
$SH + O \underset{k_{4b}}{\overset{k_{4f}}{\underset{k_{4b}}{\overset{\sum}{\overset{\sum}{\overset{\sum}{\overset{\sum}{\overset{\sum}{\overset{\sum}{\overset{\sum}{\overset$	$k_{4f} = 3,548135 \cdot 10^8 \text{ e}^{-2687,316/RT}$ $k_{4b} = 2,985385 \cdot 10^9 \text{ e}^{-169460/RT}$
$O + H_2 S \xrightarrow{k_{5f}}_{k_{5b}} SH + OH$	$k_{5f} = 4,365162 \cdot 10^3 \text{ e}^{-13804,93/RT}$ $k_{5b} = 9,885528 \cdot 10^8 \text{ e}^{-60359,96/RT}$
$SO + O_2 \xrightarrow[k_{6b}]{k_{6b}} SO_2 + O$	$k_{6f} = 4,466832 \cdot 10^5 \text{ e}^{-27032,22/RT}$ $k_{6b} = 1,663412 \cdot 10^6 \text{ e}^{-76136,43/RT}$
$\mathbf{H} + \mathbf{S}\mathbf{H} + \mathbf{M} \underset{k_{7b}}{\overset{k_{7f}}{\longleftrightarrow}} \mathbf{H}_{2}\mathbf{S} + \mathbf{M}$	$k_{7f} = 1,096478 \cdot 10^9$ $k_{7b} = 8,669613 \cdot 10^{14} e^{-381946,3/RT}$
$SO + O + M \rightleftharpoons_{k_{8b}}^{k_{8f}} SO_2 + M$	$k_{8f} = 8,709647 \cdot 10^{15} T^{-1,8}$ $k_{8b} = 1,905464 \cdot 10^{14} e^{-520736,5/RT}$

* Konstante brzina odvijanja kemijskih reakcija su u $[m^3/mol \cdot s]$ osim k_{7f} i k_{8f} koje su u $[m^6/mol^2 \cdot s]$.

Tablica 4.3. Reducirani mehanizam oksidacije sumpora [84]

Koncentracije slobodnih radikala [O] i [OH] računaju se metodom djelomične ravnoteže iz izraza (4.157) i (4.158). Kao diluent uzima se N_2 .

Kod temperatura ispod 1500 K reducirani mehanizam se u usporedbi s detaljnim mehanizmom podudara u predviđenim vrijednostima koncentracija SO_2 dok su koncentracije H_2S obično nešto više. Pri višim temperaturama i koncentracije SO_2 i koncentracije H_2S se podudaraju u oba mehanizma. Značajnija odstupanja su, međutim, uočljiva pri koncentracijama SO i SH.

Osim navedenih, dodane su još dvije reakcije prema [85] kojima se u proračun uključuje i SO3:

$$SO_2 + O + M \underset{k_{9b}}{\overset{k_{9f}}{\Longrightarrow}} SO_3 + M$$
 (4.180)

gdje je:

M = argon, dušik i kisik, $k_{9f} = 3,63 \cdot 10^8 e^{+4185,85/RT} [m^6/mol^2 \cdot s],$ $k_{9b} = 7,41 \cdot 10^{14} e^{-346123,75/RT} [m^3/mol \cdot s].$

$$SO_3 + O \underset{k_{10b}}{\overset{k_{10f}}{\Longrightarrow}} SO_2 + O_2$$
(4.181)

Gdje je: $k_{10f} = 1, 2 \cdot 10^6 \text{ e}^{-39765, 575/RT} \text{ [m}^3/\text{mol} \cdot \text{s]}.$

Konstanta brzine, k_{10b} , povratne reakcije (4.181) određuje se iz konstante ravnoteže za tu reakciju.

Kao što je već navedeno, pretpostavka je da se sumpor iz goriva oslobađa u obliku H_2S i SO_2 , dijelom prilikom devolatilizacije a dijelom izgaranjem koksnog ostatka. Produkcija SO_2 i H_2S iz volatila vezana je uz brzinu devolatilizacije,

$$\omega_{\nu,SO_2} = \frac{S_{\nu} Y_{S,\nu} M_{SO_2}}{M_S V}, \qquad (4.182)$$

$$\omega_{\nu,\mathrm{H}_{2}\mathrm{S}} = \frac{S_{\nu}Y_{\mathrm{S},\nu}M_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{S}}}{M_{\mathrm{S}}V},$$
(4.183)

gdje je: S_v – brzina stvaranja volatila [kg/s],

 $Y_{S,v}$ – maseni udio sumpora u volatilima, V – volumen ćelije [m³],

dok se sumpor vezan u koksnom ostatku oslobađa u obliku SO_2 i vezan je uz brzinu izgaranja koksnog ostatka:

$$\omega_{k,SO_2} = \frac{S_k Y_{S,k} M_{SO_2}}{M_S V}, \tag{4.184}$$

gdje je:

 S_k – brzina izgaranja koksnog ostatka [kg/s], $Y_{S,k}$ – maseni udio sumpora u koksnom ostatku,

V – volumen ćelije [m³].

Maseni udio sumpora u volatilima, $Y_{S,v}$ i maseni udio sumpora u koksnom ostaku, $Y_{S,k}$, određuju se kako slijedi:

$$Y_{v,\text{daf}} + Y_{k,\text{daf}} = 1, \tag{4.185}$$

gdje su $Y_{v,daf}$ i $Y_{k,daf}$ maseni udjeli volatila i koksnog ostatka u krutom gorivu određeni tehničkom analizom goriva (engl. *Fuel Proximate analysis*) na suhoj osnovi bez pepela (engl. *Dry and Ash Free basis* - DAF). Pretpostavka je da se 50% sumpora na masenoj osnovi oslobodi zajedno s volatilima a 50% s koksnim ostatkom [42]:

$$\frac{Y_{\nu,\text{daf}} \cdot Y_{\text{S},\nu}}{Y_{k,\text{daf}} \cdot Y_{\text{S},k}} = 1.$$
(4.186)

Nadalje slijedi:

$$Y_{\mathrm{S,daf}} = \left(Y_{\nu,\mathrm{daf}} \cdot Y_{\mathrm{S},\nu}\right) + \left(Y_{k,\mathrm{daf}} \cdot Y_{\mathrm{S},k}\right),\tag{4.187}$$

gdje je $Y_{S,daf}$ udio sumpora u gorivu na suhoj osnovi bez pepela, određen elementarnom analizom goriva (engl. *Fuel Ultimate analysis*). Konačno, iz (4.186) i (4.187) može se odrediti maseni udio sumpora u volatilima i koksnom ostatku:

$$Y_{\rm S,\nu} = \frac{Y_{\rm S,daf}}{2 \cdot Y_{\nu,daf}},$$
(4.188)

$$Y_{S,k} = Y_{S,v} \frac{Y_{v,daf}}{Y_{k,daf}}.$$
(4.189)

Ukupni nastali SO₂, otpušten iz volatila i koksnog ostatka, $\omega_{SO_2} = \omega_{v,SO_2} + \omega_{k,SO_2}$, prema izrazima (4.182) i (4.184), čini izvorni član u jednadžbi očuvanja (4.175). Također, produkcija H₂S iz izraza (4.183) čini izvorni član u jednadžbi očuvanja (4.176).

4.8. Matematički model turbulentnog reaktivnog strujanja

Korišteni matematički model turbulentnog reaktivnog strujanja opisan je sljedećim parcijalnim diferencijalnim jednadžbama:

- Jednadžba očuvanja mase (kontinuiteta):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_i \right) = \overline{S}_m. \tag{4.17}$$

- Jednadžbe očuvanja količine gibanja (Navier-Stokesove jednadžbe):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j \right) = -\frac{\partial \overline{p}_{eff}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu_{eff} - \mu_{\nu} \right) \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} I_{ij} \right] + \overline{\rho} g_i + \overline{S}_{F,i}.$$
(4.26)

- Jednadžba očuvanja energije:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{H} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{eff}}{\Pr} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_i} \right) + \bar{S}_{H,R} + \bar{S}_{H,DF}.$$
(4.28)

- Jednadžba očuvanja turbulentne kinetičke energije:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} k \widetilde{u}_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_i}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \overline{\rho} \varepsilon .$$
(4.34)

- Jednadžba očuvanja turbulentne disipacije:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \varepsilon \widetilde{u}_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_i}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \overline{\rho} C_1 S_{ij} \varepsilon - \overline{\rho} C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v\varepsilon}}.$$
(4.35)

- Jednadžba očuvanja mase sastojka:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_{Y,k}} \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \overline{M}_k \omega_k + \overline{S}_{m,k} .$$
(4.29)

Sustav jednadžbi je određen definiranjem odgovarajućih rubnih uvjeta koji ovise o analiziranom problemu (slika 4.12). Rubni uvjeti se koriste za definiranje polja strujanja i polja temperatura na ulazu i izlazu iz domene te na stijenkama modela .



Slika 4.12. Korišteni rubni uvjeti

4.8.1. Ulazni rubni uvjet konstantnog masenog protoka

Prilikom definiranja rubnog uvjeta konstantnog masenog protoka potrebno je definirati sljedeće ulazne vrijednosti:

- maseni protok,
- temperaturu fluida,
- masene udjele pojedinih kemijskih spojeva,
- smjer strujanja fluida i
- parametre turbulencije.

Na temelju zadanog masenog protoka \dot{m} računa se ulazna brzina na svakoj graničnoj plohi površine A rubnog konačnog volumena, prema izrazu:

$$u_n = \frac{\dot{m}}{\rho A} \,. \tag{4.190}$$

Gustoća fluida u izrazu (4.190) računa se iz jednadžbe stanja idealnog plina preko zadane temperature fluida te tlaka koji se ekstrapolira iz graničnih konačnih volumena. Sa svakom iteracijom izračunata brzina se korigira da bi se održao zadani maseni protok. Pri proračunu tokova svih varijabli na ulazu u domenu, koristi se izračunata brzina u_n uz ulaznu vrijednost odgovarajuće varijable. Na primjer, ulazni maseni tok je ρu_n , tok turbulentne kinetičke energije dan je kao $\rho k u_n$, itd. Ti se tokovi koriste kao rubni uvjeti za pripadajuće jednadžbe očuvanja.

Smjer strujanja fluida zadan je koristeći lokalni cilindrični koordinatni (slika 4.13). Smjer strujanja određen je radijalnom, aksijalnom i tangencijalnom komponentom.



Slika 4.13. lokalni cilindrični koordinatni sustav

Parametri turbulencije na ulazu u domenu zadani su preko intenziteta turbulencije I_t koji je definiran kao omjer efektivne vrijednosti, RMS (engl. *Root Mean Square*) fluktuacije brzine u' i srednje vrijednosti brzine na ulazu te se može aproksimirati prema slijedećem izrazu [42]:

$$I_{t} = \frac{u'}{\overline{u}} \cong 0,16 \cdot (Re)^{-1/8}.$$
(4.191)

4.8.2. Rubni uvjet izlaznog tlaka

Prilikom definiranja rubnog uvjeta izlaznog tlaka potrebno je zadati vrijednost statičkog tlaka na izlazu iz domene.

Osim statičkog tlaka, zadaju se i vrijednosti ostalih skalarnih veličina (temperature, intenziteta turbulencije te udjela kemijskih sastojaka) koje se uzimaju u obzir u slučaju povrata struje fluida u domenu. U tom slučaju se zadani statički tlak uzima kao apsolutni tlak a smjer povratnog strujanja je u smjeru normale na rubnu plohu.

4.8.3. Rubni uvjet krute stijenke

Rubni uvjet krute stijenke koristi se kao granični sloj između čvrstog tijela (u ovom slučaju stijenki ložišta) i fluida. Na čvrstoj stijenci zadan je tzv. *no-slip* rubni uvjet (komponente brzine na stijenci jednake su nuli).

$$u_x = u_y = u_z = 0. (4.192)$$

Toplina izmijenjena konvekcijom između krute stijenke i fluida određuje se preko lokalnih vrijednosti polja strujanja određenih korištenjem *standardnih funkcija zida* [44]. Funkcije zida su skup poluempirijskih izraza i funkcija koje povezuju vrijednosti varijabli unutar konačnih volumena uz krutu stijenku s pripadajućim vrijednostima na stijenci. Za zadanu konstantnu temperaturu krute stijenke toplinski tok između zida i rubnog konačnog volumena računa se po izrazu:

$$q_{zid} = -\frac{\mu}{\Pr} \frac{c_p \left(T_p - T_{zid}\right)}{\Delta y_p} \cdot A_{zid} \qquad \text{za} \qquad y^+ < 11,63$$
(4.193)

$$q_{zid} = -\frac{\rho c_p C_{\mu}^{1/4} k_p^{1/2} (T_p - T_{zid})}{T^+} \cdot A_{zid} \quad za \qquad y^+ > 11,63.$$
(4.194)

Veličine s indeksom "P" odnose se na vrijednosti u centru graničnog konačnog volumena. Površina A_{zid} je površina plohe konačnog volumena koja graniči sa zidom. Bezdimenzijska temperatura dana je izrazom:

$$T^{+} = \Pr_{t} \cdot \left[u^{+} + P \right]. \tag{4.195}$$

Gdje je Pr_t turbulentni Prandtlov broj (Pr_t \approx 0,9) i *P* funkcija definirana izrazom:

$$P = 9,24 \cdot \left[\left(\frac{\Pr}{\Pr_{t}} \right)^{3/4} - 1 \right] \left(1 + 0,28 \cdot e^{-0,007 \frac{\Pr}{\Pr_{t}}} \right).$$
(4.196)

Toplina izmijenjena zračenjem za model sivog difuznog zida obrađena je u poglavlju 4.5.3.

4.8.4. Rubni uvjet periodičnosti

Rubni uvjet periodičnosti bez pada tlaka ili ciklički rubni uvjet koristi se kada je promatrana domena zajedno s očekivanim poljem strujanja i temperaturnim poljem periodičke prirode (slika 4.14). Periodički rubni uvjet pretpostavlja da je tok svih varijabli na izlaznoj periodičkoj rubnoj plohi jednak toku na ulaznoj periodičkoj plohi ($\Phi_{ul} = \Phi_{iz}$).



Slika 4.14. Upotreba periodičkog rubnog uvjeta za definiranje vrtložnog gibanja unutar cilindrične domene

5. NUMERIČKI MODEL

gdje je:

5.1. Diskretizacija jednadžbi očuvanja

Programski paket FLUENT, korišten u ovom radu, koristi metodu konačnih volumena [86,87] kao numeričku metodu za pretvorbu jednadžbi očuvanja u algebarski oblik koji je rješiv iteracijskim postupcima.

Promatrana domena dijeli se na konačan broj konačnih volumena čime se vrši diskretizacija prostora. Integracijom jednadžbi očuvanja na svakom konačnom volumenu, konstruiraju se algebarske jednadžbe diskretnih zavisnih varijabli tj. diskretizacijske jednadžbe očuvanja za svaki konačni volumen. Diskretizacijske jednadžbe se lineariziraju čime se dobiva sustav jednadžbi čijim se rješavanjem dobivaju vrijednosti traženih zavisnih varijabli.

Jednadžba očuvanja generalnog skalara Φ pri stacionarnom strujanju fluida glasi:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \Phi u_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) + S_{\phi}, \qquad (5.1)$$

gdje je Γ_{Φ} difuzivnost skalara Φ a S_{Φ} izvor ili ponor istog skalara. Opisana parcijalna diferencijalna jednadžba je diferencijalna jednadžba drugog reda čiji članovi redom opisuju: transport skalara Φ konvekcijom, transport skalara Φ difuzijom te produkciju ili destrukciju skalara Φ unutar promatrane domene.

Jednadžba očuvanja (5.1) u integralnom obliku za proizvoljni konačni volumen V dana je izrazom:

$$\oint \rho \Phi u_i \cdot dA_i = \oint \Gamma_{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \cdot dA_i + \int_V S_{\Phi} \cdot dV , \qquad (5.2)$$

Jednadžba oblika (5.2) diskretizira se za svaki konačni volumen unutar promatrane domene:

$$\sum_{f}^{N_{f}} \rho_{f} \vec{u}_{f} \Phi_{f} \cdot \vec{A}_{f} = \sum_{f}^{N_{f}} \Gamma_{\Phi} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_{i}} \right)_{f} \cdot \vec{A}_{f} + S_{\Phi} V , \qquad (5.3)$$

 $\begin{array}{ll} N_f & -\text{broj ploha konačnog volumena,} \\ \Phi_f & -\text{vrijednost skalara } \Phi \text{ na promatranoj plohi } f, \\ \rho_f \vec{u}_f \cdot \vec{A}_f & -\text{maseni fluks kroz promatranu plohu } f, \\ \vec{A}_f & -\text{vektor površine promatrane plohe } (\vec{A}_f = A_f \cdot \vec{n}), \\ V & -\text{volumen konačnog volumena,} \\ (\partial \Phi / \partial x_i)_f & -\text{gradijent skalara } \Phi \text{ na promatranoj plohi } f. \end{array}$

Vrijednost skalara Φ_f na plohi nije poznata unaprijed već ju je potrebno aproksimirati pomoću poznatih vrijednosti iz središta konačnog volumena. Aproksimacija se vrši korištenjem *Upwind* sheme drugog reda točnosti opisane u nastavku.

5.1.1. Upwind shema drugog reda točnosti

Upwind shemu drugog reda točnosti dobije se razvojem funkcije Φ u Taylorov red oko centra konačnog volumena, uz odbacivanje članova višeg reda. Korištenjem ove sheme vrijednost skalara Φ_f na plohi između dva promatrana konačna volumena definirana je izrazom:

$$\boldsymbol{\Phi}_{f} = \boldsymbol{\Phi} + \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}}{\partial x_{i}} \left(\vec{x}_{f} - \vec{x}_{p} \right), \tag{5.4}$$

gdje je:

 $\Phi \qquad - \text{vrijednost skalara u centru uzvodnog konačnog volumena,}$ $(\partial \Phi / \partial x_i)_f \qquad - \text{gradijent skalara u centru uzvodnog konačnog volumena,}$ $(<math>\vec{x}_f - \vec{x}_p$) \qquad - \text{vektor spojnice težišta plohe i centra uzvodnog konačnog volumena.}

Ovakva formulacija vrijednosti generalnog skalara Φ na granici konačnih volumena zahtijeva računanje gradijenta skalara u svakom konačnom volumenu. Gradijent se računa preko Gaussovog teorema divergencije koji u diskretnom obliku glasi:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}}{\partial x_i} = \frac{1}{V_P} \sum_{j=1}^{N_f} \left(\frac{\boldsymbol{\Phi}_P + \boldsymbol{\Phi}_{N_j}}{2} \right) \vec{\boldsymbol{S}}_j , \qquad (5.5)$$

gdje je:

 V_P – volumen promatranog konačnog volumena,

- broj ploha koje zatvaraju konačni volumen, N_f

 Φ_P – vrijednost skalara u centru uzvodnog konačnog volumena,

 Φ_{Ni} – vrijednost skalara u centru *j*-tog susjednog konačnog volumena.

5.2. Linearni oblik diskretizacije

Diskretizacijom se integralni oblici jednadžbi očuvanja transformiraju u sustave algebarskih jednadžbi. Sustav jednadžbi generalnog skalara Φ moguće je napisati sljedećim izrazom:

$$a_{P} \Phi_{P} = \sum_{j=1}^{n} a_{N_{j}} \Phi_{N_{j}} + R_{P} , \qquad (5.6)$$

gdje P označava promatrani konačni volumen kojega u potpunosti okružuje n susjednih konačnih volumena N_i . Broj susjednih volumena ovisi o vrsti mreže ali je uglavnom jednak broju ploha koje zatvaraju promatrani volumen. S obzirom na velik broj algebarskih jednadžbi oblika (5.6), rješenje je moguće dobiti rješavačima baziranim na iteracijskim metodama. Za rješavanje gornjeg linearnog sustava FLUENT koristi Gauss-Seidelov iteracijski implicitni rješavač.

5.3. Povezivanje tlaka i brzine

Rezultirajući algebarski oblik jednadžbe očuvanja količine gibanja prema (5.6) glasi:

$$a_{P}\vec{U}_{P} = \sum_{j=1}^{n} a_{N_{j}}\vec{U}_{N_{j}} + S + \sum_{j=1}^{n} p_{f_{j}}\vec{S}_{j} , \qquad (5.7)$$

gdje je p_{f_j} vrijednost tlaka na plohi a \vec{S}_j vektor površine plohe između promatranog konačnog volumena i njegovog *j*-tog susjeda.

Sustav jednadžbi (5.7) moguće je riješiti ako je poznato polje tlaka. Polje tlaka je u pravilu nepoznato te ga je potrebno pretpostaviti u ranijoj fazi računanja. Zbog netočno pretpostavljenog polja tlaka, rezultirajuće polje brzina neće zadovoljiti jednadžbu kontinuiteta, te je potrebno uvesti algoritam korekcije izračunatih polja varijabli. U ovom radu je, prema preporuci literature [42] za složena turbulentna strujanja, korišten SIMPLE algoritam.

5.3.1. SIMPLE algoritam

Poluimplicitna metoda za proračun polja strujanja, SIMPLE (engl. *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) [86] sastoji se od postupka pretpostavke polja tlaka i korekcije polja tlaka. Uvođenje pretpostavljenog polja tlaka p^* u sustavu algebarskih jednadžbi (5.7) rezultira poljem brzina \vec{U}^* . Ovakav algebarski sustav moguće je zapisati sljedećim izrazom:

$$a_{P}\vec{U}_{P}^{*} = \sum_{j=1}^{n} a_{N_{j}}\vec{U}_{N_{j}}^{*} + S + \sum_{j=1}^{n} p_{f_{j}}^{*}\vec{S}_{j} .$$
(5.8)

Pretpostavljeno polje tlaka (p^*) i brzina (\vec{U}^*) razlikuju se od stvarnih vrijednosti za vrijednost pripadajućih korekcija:

$$p = p^* + p' \tag{5.9}$$

$$\vec{U} = \vec{U}^* + \vec{U}'.$$
(5.10)

Uvrštavanjem izraza (5.9) i (5.10) u algebarske jednadžbe (5.7) i (5.8) te njihovom kombinacijom, dobije se:

$$a_{p}\vec{U}_{p}' = \sum_{j=1}^{n} a_{N_{j}}\vec{U}_{N_{j}}' + \sum_{j=1}^{n} p_{f_{j}}'\vec{S}_{j} .$$
(5.11)

Odbacivanjem prvog člana s desne strane, izraz (5.11) prelazi u izraz korekcije polja brzina što je ujedno i glavna značajka SIMPLE algoritma:

$$\vec{U}_{P}' = \sum_{j=1}^{n} p_{f_{j}}' \frac{\vec{S}_{j}}{a_{P}}.$$
(5.12)

Vrijednosti svih korekcija su u konačnom konvergiranom rezultatu jednaki nuli tj. $p = p^*$ i $\vec{U} = \vec{U}^*$. Uvrštavanjem izraza (5.10) i (5.12) u jednadžbu kontinuiteta u diskretiziranom obliku dobije se izraz za korekciju tlaka:

$$a_{P}p'_{P} = \sum_{j=1}^{n} a_{N_{j}}p'_{N_{j}} + F_{P}^{*}, \qquad (5.13)$$

gdje je F_p^* maseni fluks u promatrani konačni volumen izračunat preko pretpostavljenog polja brzina \vec{U}^* .

Jedan ciklus SIMPLE familije algoritama prikazan je u blok dijagramu na slici 5.1.



Slika 5.1. Blok dijagram ciklusa SIMPLE familije algoritama

6. VERIFIKACIJA I PRIKAZ REZULTATA NUMERIČKOG MODELA IZGARANJA

Krajnji je cilj numeričkih modela turbulentnog izgaranja dobivanje vjerodostojnih rezultata kojima se mogu predvidjeti efekti različitih režima na radne karakteristike i produkte izgaranja u industrijskim ložištima. Time se podrazumijeva potreba točnog poznavanja fizikalnih pojava za ispravno modeliranje turbulentnog izgaranja, izmjenu topline zračenjem i konvekcijom, prijenosa čestica goriva (s popratnim pojavama volatilizacije, raspršivanja, zračenja, itd.), miješanja i izgaranja sa zrakom u ložištu. Rezultate dobivene računarskim simulacijama izgaranja potrebno je, kako bi se utvrdila razina vjerodostojnosti, usporediti s mjerenjima. Mjerenjima je potrebno utvrditi detaljne informacije o:

- 1. geometriji ložišta i plamenika,
- 2. profilima brzina s intenzitetima turbulencije, masenim protocima, sastavima i temperaturama svih struja koje ulaze u ložište,
- 3. karakteristikama goriva temperatura, ogrjevna vrijednost, elementarni sastav, udjeli volatila i koksnog ostatka, pepela i vlage, oblik i distribucija veličina čestica goriva,
- 4. rubnim uvjetima temperature i toplinski tokovi, faktori apsorpcije, emisije i refleksije stijenki ložišta,

i koje služe za ispravno postavljanje početnih i rubnih uvjeta u računarskom software-u. Nadalje, mjerenjima se moraju pribaviti i podaci koji će poslužiti za usporedbu s računalnim rješenjima:

- 1. lokalne vrijednosti vektora brzina, temperatura i sastava dimnih plinova za više položaja u ložištu (na području plamena, na izlazu iz plamenika te duž smjera strujanja fluida),
- 2. vektori brzina gorivih čestica, brzina razvijanja volatila, brzina izgaranja volatila i koksnog ostatka,
- 3. lokalne temperature stijenki ložišta.

Jedno od ložišta opremljeno mjernom aparaturom za dobivanje dovoljnog broja podataka radi provjere valjanosti numeričkih modela je horizontalno ložište IFRF (*International Flame Research Foundation*) snage 2,4 MW.

6.1. IFRF ispitno ložište

Da bi se dobila potvrda valjanosti izabranog modela turbulencije i izgaranja čestica goriva u letu, rezultati numeričkog modela uspoređeni su s mjerenjima na IFRF ložištu [88,89]. Geometrija IFRF ložišta prikazana je na slici 6.1. U literaturi su dostupna mjerenja kojima su utvrđeni profili temperatura, brzina, molnih udjela kisika, ugljičnog monoksida i ugljičnog dioksida te koncentracija dušikovog oksida u nekoliko karakterističnih presjeka.

Prethodno osušeni ugljen koji se koristio u mjerenjima je Göttelborn hvBp ugljen sa svojstvima danim u tablici 6.1. Količina ugljene prašine koja se dovodi ložištu ekvivalentna je toplinskom učinu od 2,36 MW. Pretičak zraka za izgaranje iznosi $\lambda = 1,22$, a maseni protoci, temperature i brzine primarnog i sekundarnog zraka dani su u tablici 6.2.

Profili aksijalne i tangencijalne komponente sekundarnog (vrtložnog) zraka dane su u funkciji polumjera dovodnog voda sekundarnog zraka (0,07 < r < 0,117 m):

$$u_{ax}(r) = -89,24 + r(3208,61 - r \cdot 18655,45)$$
(6.1a)

$$u_{t}(r) = -256,28 + r(6397,52 - r \cdot 32734,43)$$
(6.1b)

U literaturi [88] dani su rezultati mjerenja temperature plamena, aksijalnih i tangencijalnih komponenti brzina strujanja kao i mjerenja koncentracije CO₂, O₂, CO, NO u šest presjeka IFRF-No.1 ložišta.









Vrsta	Göttelborn hvBp
Gustoća	1000 kg/m^3
Temperatura volatilizacije	773 K (500 °C)
Veličina čestica	Rosin-Rammler distribucija
Maksimalni promjer	300 µm
Minimalni promjer	1 μm
Srednji promjer	45 μm
Faktor raspršenja	1,36
Tohnički	Volatili – 54,3%
I CHINCKI sastav	Koksni ostatak – 37,4%
uglieno	Vlaga – 0%
ugijena	Pepeo – 8,3%
	Ugljik – 80,36%
Elementarni	Vodik – 5,08%
sastav ugljena	Kisik – 12,17%
(DAF)	Dušik – 1,45%
	Sumpor – 0,94%
Donja ogrjevna moć (u DAF)	32,32 MJ/kg

Tablica 6.1. Svojstva ugljena za IFRF ložište, [88]

Primarni zrak i ugljena prašina				
Maseni protok ugljena	263 kg/h			
Maseni protok zraka	421 kg/h			
Temperatura	343 K			
Aksijalna brzina	23,02 m/s			
Intenzitet turbulencije	10%			
Karakteristična duljina	6,5 mm			
Sekunda	arni zrak			
Maseni protok	2684 kg/h			
Temperatura	573 K			
Srednja aksijalna brzina	43,83 m/s, izraz (6.1a)			
Srednja tangencijalna brzina	49,42 m/s, izraz (6.1b)			
Intenzitet turbulencije	20%			
Karakteristična duljina	2,35 cm			

Tablica 6.2. Rubni uvjeti IFRF ložišta, [88]

Na slici 6.2 definirani su temperaturni rubni uvjeti na stijenkama IFRF ložišta. Temperatura na trima stijenkama ložišta zadana je kao funkcija položaja u *xyz* sustavu, a na ostalim je stijenkama konstantna, [88,89].



Slika 6.2. Rubni uvjeti IFRF ložišta, [88]

6.2. Model izgaranja ugljene prašine u letu

Proces izgaranja krutog goriva u letu odvija se u fazama. S obzirom da je gorivo korišteno pri eksperimentalnim ispitivanjima prethodno osušeno te ne sadrži vlagu, faza sušenja u ložištu može se preskočiti. Faza devolatilizacije karakterizirana je otpuštanjem lakih plinova (CO, CO₂, H₂O, H₂ i dr.) te lakših i težih ugljikovodika.

Ugljen
$$\rightarrow$$
 Volatili iz ugljena + Koksni ostatak (6.2)

Model otpuštanja volatila opisan je u potpoglavlju 5.4.3 a brzina otpuštanja volatila iz čestica biomase i ugljena definirana je izrazom (5.113) i (5.115) gdje su vrijednosti predeksponencijalnih faktora i energije aktivacije $A_{vol} = 2 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$ i $E_{vol} = 1,14 \cdot 10^8 \text{ J/kmol}$, prema [88]. Radi pojednostavljenja, volatili otpušteni iz goriva predstavljeni su molekulom ugljikovodika oblika $C_xH_yO_zN_m$. Izgaranje volatila tako je definirano sljedećim reakcijama:

$$C_{2,803}H_{4,236}O_{0,634}N_{0,142} + 2,46 O_2 \rightarrow 2,17 CO + 0,633 CO_2 + 2,118 H_2O + 0,071 N_2$$
(6.3)

$$CO + 0.5 O_2 \rightarrow CO_2 \tag{6.4}$$

Molekula ugljikovodika u prvoj reakciji predstavlja pseudovolatil čiji je sastav određen iz tehničke i elementarne analize goriva, tablica 6.1 i čija standardna entalpija formacije iznosi $(\Delta h_f^0)_{vol} = -1.8434 \cdot 10^7$ J/kmol. Izračun sastava i entalpije formacije pseudovolatila detaljno je

opisan u poglavlju 6.6. Stehiometrijski koeficijenti u reakcijama određeni su iz bilanci masa pojedinih sastojaka. Omjer CO/CO₂ uzet je a priori 3,428 iz eksperimentalnih mjerenja prema [88]. Izgaranje u plinovitoj fazi opisano je kombinacijom laminarnoga Arrheniusovog i EDM modela objašnjena u potpoglavlju 4.3.2. Brzina reakcije izgaranja volatila (reakcija 6.3) definirana izrazima (4.64) i (4.65) određena je empirijskim konstantama $\beta_1 = 4$ i $\beta_2 = 0.5$, te izrazom (4.68) gdje su uzete vrijednosti predeksponencijalnog faktora $A = 4,41\cdot10^{11}$ s⁻¹ i energije aktivacije $E = 1,2553\cdot10^8$ J/kmol, [88]. Pošto je reakcija oksidacije ugljičnog monoksida u ugljični dioksid relativno spora reakcija (reakcija 6.4), za vrijednosti konstanti uzeto je $\beta_1 = 2$ i $\beta_2 = 10^{20}$, te $A = 2,5\cdot10^8$ s⁻¹ i $E = 6,6948\cdot10^7$ J/kmol [88], čime je postignuto da brzinom reakcije dominira kemijska kinetika.

Izgaranje koksnog ostatka kojeg čini ugljik, $C_{(s)}$, definirano je reakcijom koja se odvija na površini čestice:

$$C_{(s)} + 0.5 O_2 \rightarrow CO, \tag{6.5}$$

prema *Kinetics/Diffusion-Limited Rate* modelu, kako je definirano u potpoglavlju 4.4.3. Vrijednosti koeficijenata C_1 , C_2 , i *E* kojima je definirana molekularna difuzija kisika na površinu čestice, izraz (4.122) i kinetička brzina reakcije na površini čestice, izraz (4.123), uzete su prema [63]: $C_1 = 5 \cdot 10^{12} \text{ kg/m}^2 \text{sPa}$, $C_2 = 6.7 \text{ kg/m}^2 \text{sPa}$ i $E = 1,138 \cdot 10^8 \text{ J/kmol}$.

Numeričke simulacije provedene su komercijalnim softwareom FLUENT v6.3.26. Upotrebljena je diskretizacijska *Upwind* shema drugog reda točnosti. Povezivanje tlaka i brzine izvršeno je SIMPLE algoritmom. Čestice goriva modelirane su modelom diskretne faze opisane u poglavlju 4.4. Jednadžbe očuvanja za kontinuiranu fazu u Eulerovom referentnom sustavu i jednadžbe očuvanja za diskretnu fazu u Lagrangeovom referentnom sustavu naizmjence se računaju do konvergencije. Međusobni utjecaj tih dviju faza definiran je preko izvornih članova u jednadžbama očuvanja mase, količine gibanja i energije.

6.3. Validacija modela izgaranja ugljena u letu

Na slikama 6.3-6.10 dan je prikaz profila brzina u presjecima ložišta na udaljenosti z = 0 m; 0,25 m; 0,5 m i 0,85 m od plamenika.



Slika 6.3. Profil aksijalne brzine strujanja na z = 0 m od plamenika









Slika 6.7. Profil tangencijalne brzine strujanja na z = 0 m od plamenika



Slika 6.9. Profil tangencijalne brzine strujanja na z = 0,5 m od plamenika



Slika 6.6. Profil aksijalne brzine strujanja na z = 0.85 m od plamenika



Slika 6.8. Profil tangencijalne brzine strujanja na z = 0.25 m od plamenika



Slika 6.10. Profil tangencijalne brzine strujanja na z = 0.85 m od plamenika

Usprkos izrazito turbulentnom strujanju u samom grlu plamenika tj. u zoni recirkulacije, vidljivo je zadovoljavajuće poklapanje modela turbulencije s izmjerenim vrijednostima aksijalnih i tangencijalnih brzina, prema [88]. U samoj blizini plamenika, uz samu os ložišta, odabrani model turbulencije u određenoj mjeri precjenjuje aksijalne brzine, međutim trend je u radijalnom smjeru zadržan. Slično je i sa tangencijalnim brzinama gdje je trend u radijalnom smjeru, također dosta dobro predviđen, dok je uz samu os, gdje je utjecaj turbulencije najveći, poklapanje s rezultatima mjerenja nešto lošije.

Na slikama 6.11-6.16 dan je prikaz profila temperatura u presjecima ložišta z = 0 m; 0,25 m; 0,5 m; 0,85 m; 1,25 m i 1,95 m.





Slika 6.11. Profil temperatura na z = 0 m od plamenika



Slika 6.13. Profil temperatura na z = 0,5 m od plamenika



Slika 6.15. Profil temperatura na z = 1,25 m od plamenika

Slika 6.12. Profil temperatura na z = 0,25 m od plamenika



Slika 6.14. Profil temperatura na z = 0,85 m od plamenika



Slika 6.16. Profil temperatura na z = 1,95 m od plamenika

I u slučaju temperaturnog polja, izrazito turbulentno strujanje u zoni recirkulacije ima utjecaj na rezultate numeričkog modela kojim je dobivena nešto veća maksimalna temperatura plamena u IFRF ložištu (oko 2200 K) od očekivane koja se kreće oko 2000 K. Već od z = 0,5 m plamenika pa dalje (slika 6.13-6.16), predviđene temperature se dobro poklapaju s mjerenjima.

U nastavku su uspoređeni profili molnih udjela ugljik-dioksida i ugljik-monoksida dobiveni numeričkom metodom u presjecima ložišta z = 0 m; 0,25 m; 0,5 m; 0,85 m; 1,25 m i 1,95 m s rezultatima mjerenja [88]. Usporedbe su dane na slikama 6.17-6.22 te 6.23-6.28.



Slika 6.17. Volumni udio ugljik-dioksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0 m od plamenika



Slika 6.19. Volumni udio ugljik-dioksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,5 m od plamenika



Slika 6.21. Volumni udio ugljik-dioksida u suhim plinovima izgaranja na z = 1,25 m od plamenika



Slika 6.18. Volumni udio ugljik-dioksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0.25 m od plamenika



Slika 6.20. Volumni udio ugljik-dioksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0.85 m od plamenika



Slika 6.22. Volumni udio ugljik-dioksida u suhim plinovima izgaranja na z = 1,95 m od plamenika



Slika 6.23. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0 m od plamenika



Slika 6.25. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,5 m od plamenika







Slika 6.24. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,25 m od plamenika



Slika 6.26. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,85 m od plamenika





Kao posljedica turbulentnog strujanja u zoni recirkulacije, ovdje je također uočljivo određeno odstupanje modela od izmjerenih vrijednosti udjela CO i CO₂ u presjecima z = 0 m i z = 0,25 m dok u ostalim presjecima numerički model dobro prati trend promjena u aksijalnom i radijalnom smjeru.

Kod modeliranja emisije dušikovog oksida (NO) u obzir su uzeti mehanizmi termalnog NO i NO iz goriva. Jedan dio dušika iz goriva nalazi se u koksnom ostatku (50%) a drugi dio u volatilima (50%). Dušik iz goriva može proizvesti izravno dušikov oksid ili jedan od međuprodukata,

amonijak (NH₃) ili cijanovodik (HCN). Pretpostavljeno je, prema [42], da dušik iz volatila prvo reagira u HCN i NH₃ i to u omjeru 9:1, dok dušik iz koksnog ostatka reagira izravno u NO bez međuprodukata. Faktor konverzije dušika iz volatila uzet je 100%, dok je faktor konverzije dušika iz koksnog ostatka uzet 40%, pošto se većina dušika iz koksnog ostatka transformira u N₂,[78]. Tako modelirane koncentracije dušikovog oksida u produktima izgaranja, izražene u ppm, dane su na slikama 6.29-6.34.



Slika 6.29. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0 m od plamenika



Slika 6.31. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,5 m od plamenika











Slika 6.32. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,85 m od plamenika



Slika 6.34. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 1,95 m od plamenika

Kod koncentracija NO vidljiva su dobra poklapanja rezultata s izmjerenim vrijednostima, osim u predjelu samog plamenika. U tom području je uslijed velikih gradijenata temperature i brzina strujanja moguće uočiti određena odstupanja kao npr. u presjecima z = 0 m i z = 0,25 m. Na udaljenosti z = 0,85 m od plamenika i dalje, krivulja predviđenih vrijednosti dobro prati rezulate mjerenja. Predviđene vrijednosti koncentracija NO u najudaljenijem presjeku gdje je vršeno mjerenje (z = 1,95 m) veće su za oko 15-20% od izmjerenih. Razlozi odstupanja mogu biti nepoznavanje detaljne geometrije plamenika i osjetljivost NO modela na faktore konverzije koji se u nedostatku informacija, nagađaju.

Rezultati dobiveni korištenim modelom izgaranja pokazuju prihvatljiva poklapanja s izmjerenim vrijednostima osim u samoj blizini plamenika gdje su odstupanja nešto veća. Veća točnost bi se, vjerojatno, postigla korištenjem nekih od složenijih modela turbulencije kao npr. RSM modela turbulencije (engl. *Reynolds stress model*) koji bi detaljnije opisao turbulentna vrtloženja u zoni recirkulacije i modelom izgaranja koji bi uzimao u obzir kompletan mehanizam izgaranja (EDC model) koji ni do danas nije u potpunosti poznat i koji bi uključivao nekoliko stotina kemijskih reakcija. Takav model bi, također, znatno produljio vrijeme trajanja proračuna. Nadalje, potrebno je imati u vidu da predviđeni rezultati ne ovise samo o modelima turbulencije i izgaranja već i o ostalim modelima i pretpostavkama te o definiciji graničnih uvjeta. Pritom je teško razlikovati koji i u kolikoj mjeri, svaki od navedenih faktora, ima utjecaj na konačan rezultat. S obzirom na dobivene rezultate, pokazalo se opravdano korištenje prikazanog modela turbulentnog izgaranja pri modeliranju ložišta peći na kruta goriva u letu gdje se čestice goriva mogu opisati kao sfere.

6.4. AUCR laboratorijsko ložište

Prikazani i provjereni matematički model izgaranja krutog goriva u letu korišten je zatim prilikom verifikacije razvijenog modela strujanja cilindričnih čestica biomase. Izvršeno je uspoređivanje rezultata dobivenih numeričkim simulacijama s dostupnim rezultatima eksperimentalnih mjerenja prilikom izgaranja smjese ugljena i biomase. Za eksperimentalna ispitivanja korišten je AUCR reaktor (*Automatski upravljani cijevni reaktor*) tj. laboratorijsko ložište za izgaranje krutog goriva u letu nominalne snage 20 kW, konstruirano i instalirano na Mašinskom fakultetu Univerziteta u Sarajevu. Radi se o fleksibilnom ložištu u pogledu podešavanja željene temperature izgaranja, opterećenja, kao i promjene raspodjele zraka za izgaranje. Na postrojenju se ispituju karakteristike izgaranja različitih tipova ugljena i njihovih mješavina s posebnim naglaskom na ugljene koji se spaljuju u postojećim termoelektranama u BiH.

Na slici 6.35 prikazano je spomenuto laboratorijsko ložište a na slici 6.36 dana je njegova shema. Ono se sastoji iz centralne vertikalne cijevi načinjene iz porozne alumino-silikatne keramike u kojoj se odvija izgaranje. Duljina keramičke cijevi je 2900 mm a promjer 230/200 mm i sastoji se iz 15 međusobno spojenih dijelova. Zadan profil temperature stijenke ložišta do maksimalno 1560°C održava se pomoću SiC grijača maksimalne snage 70 kW, raspoređenih u četiri zone. Temperatura stijenki ložišta mjeri se WIKA Pt10%Rh-1600°C termoparovima i regulira Siemens Simatic PLC uređajima u svakoj od četiri grijane zone (slika 6.37 i 6.38). Zrak za izgaranje dijeli se nakon ventilatora na primarnu struju, kojom se ujedno dovodi i gorivo, te sekundarnu i tercijarnu struju zraka te se dovodi do plamenika smještenog na vrhu ložišta (slika 6.39). I. Bonefačić, doktorska disertacija, Analiza utjecaja oblika i veličine čestica biomase pri izgaranju.



Slika 6.35. Laboratorijsko ložište Mašinskog fakulteta Univerziteta u Sarajevu



Slika 6.36. Shematski prikaz laboratorijskog ložišta, [91]

I. Bonefačić, doktorska disertacija, Analiza utjecaja oblika i veličine čestica biomase pri izgaranju.



Slika 6.37. WIKA Pt10%Rh-1600°C termoparovi raspoređeni u četiri grijane zone



Slika 6.38. Kontrolni ormar sa Siemens Simatic PLC uređajima i TESTO analizator dimnih plinova



Slika 6.39. Plamenik laboratorijskog ložišta s dovodima primarnog, sekundarnog i tercijarnog zraka

S obzirom na geometriju ložišta i karakteristike izgaranja modelirana je četvrtina ložišta i pritom je korišten periodički rubni uvjet bez pada tlaka kako je objašnjeno u podpoglavlju 4.8.4. Računalna domena umrežena je specijaliziranim softwareom GAMBIT v2.4.6 sa 120 000 kontrolnih volumena koristeći 3D nestrukturiranu mrežu, slika 6.40. Plamenik je modeliran zasebno da bi se na ulazu u ložište dobio što točniji profil strujanja te je diskretiziran s 470 000 kontrolnih volumena. Detaljan nacrt plamenika dan je u prilogu P4.



Slika 6.40. Model ložišta i plamenika

6.5. Tijek ispitivanja izgaranja smjese ugljena i biomasa u letu

Ispitivano gorivo sastoji se iz smjese smeđeg ugljena "Kakanj" i piljevine smreke u masenom omjeru 80:20. Uzorak biomase (piljevina smreke) korištene u radu, uzet je iz pilane smještene u šumskom području u blizini Tuzle, BiH dok je uzorak ugljena uzet s deponija termoelektrane "Kakanj", BiH. Gorivo je prethodno osušeno, grijanjem na oko 105°C, na približno w = 0% te je potom usitnjeno na odgovarajuću veličinu čestica na laboratorijskom mlinu. Sastav ugljena i biomase korištenih kao gorivo određen je tehničkom i elementarnom analizom i dan je u tablici 6.3. U tablici 6.4 prikazana je distribucija veličina čestica ispitnog goriva nakon usitnjavanja određena granulometrijom koristeći sita s veličinama otvora od 45 µm, 100 µm, 200 µm i 500 µm. Tehnička i elementarna analiza goriva kao i granulometrija vršene su u laboratoriju TE "Kakanj", Odjeljenje za ugalj, boksit i kruta biogoriva, BiH.

Tijekom ispitivanja, stijenke ložišta su zagrijavane na ispitnu temperaturu brzinom od 150°C/h. Temperatura u ložištu se održava grijačima maksimalne snage 70kW raspoređenim u četiri grijane zone kojima upravlja PLC i tiristorske jedinice spojene na digitalne izlaze PLC-a. Kompletan reaktor se prirodno hladi od okoline, tako da i pri najmanjoj ispitnoj temperaturi u ložištu (960°C), grijači prema instrukcijama PLC-a uključivanjem/isključivanjem/doziranjem električne energije balansiraju sve temperaturne promjene u ložištu (lokalna temperatura izgaranja čestica goriva, gubici prema okolini), održavajući stijenke a time i uvjete u ložištu na točno zadanoj temperaturi.

Kontrola i nadgledanje temperaturnog polja u sve četiri grijane zone tijekom vremena postignuta je preko LCD-a na kontrolnom ormaru PLC uređaja (slika 6.38). Kada je postignuta zadana temperatura ložišta, započinje dovod goriva i zraka te time i proces izgaranja. U svim ispitivanim slučajevima toplinsko opterećenje bilo je oko 5 kW_{th}. Temperature pri kojima je vršeno ispitivanje odgovaraju temperaturama u zoni izgaranja tj. temperaturi plamena u realnim

uvjetima ložišta termoelektrane "Kakanj". Zadana temperaturna polja bila su redom: 960°C, 1140°C, 1250°C, 1400°C i 1550°C te je na svakoj od zadanih vrijednosti ispitan slučaj izgaranja s izračunatim faktorom pretička zraka $\lambda = 1,1$ i $\lambda = 1,2$, osim pri temperaturama od 960°C i 1550°C kada je ispitan samo slučaj za faktor pretička zraka $\lambda = 1,2$. Faktor pretička zraka izračunat je, poznavajući sastav goriva, iz teorijske minimalne količine kisika, tj. zraka za potpuno izgaranje (izrazi 2.20 i 2.21). Protok primarnog zraka, kojim se ujedno i dovodilo gorivo u ložište, držan je na konstantnoj vrijednosti od 1,5 m³/h u svim ispitnim režimima kao i protok goriva od 1 kg/h. Protok sekundarnog i tercijarnog zraka distribuiran je u omjeru 2,6:1 i varirao je ovisno o zadanom faktoru pretička zraka za izgaranje. Radni parametri ispitivanog ložišta za pojedine režime rada dani su u prilogu P5. Emisije plinova na izlazu iz ložišta mjerene su TESTO 350 analizatorom dimnih plinova s ugrađenom TESTO 339 suhom jedinicom za pripremu plinova. Temperatura dimnih plinova na mjestu gdje je vršeno mjerenje iznosila je između 145°C i 180°C ovisno o promatranom slučaju. Mjerenja su provedena sedam puta tijekom svakog od ispitnih režima da bi se izbjegle slučajne pogreške. Mjerna pogreška procijenjena je na 18 ppm (2.8%) za NO emisije i na 59 ppm (2.6%) za SO₂ emisije.

Osnovni procesi i parametri koji su se mjerili i analizirali pri ispitnim režimima:

- Ispitna temperatura: t_F , [°C],
- Potrošnja goriva: *m_g*, [kg/h],
- Protok ukupne i pojedinačnih struja zraka: V_Z, V_{prim}, V_{sec/terc}, [l/min],
- Analiza dimnih plinova po komponentama: O₂, CO, CO₂, NO, NO₂ i SO₂.

Pored toga, pri ispitnim režimima se mjere i evidentiraju još i:

- Temperatura okolnog zraka: *t*_o [°C],
- Temperatura dimnih plinova na izlazu iz reaktora: t_{dp} [°C],
- Temperatura rashladne vode dimnih plinova (ulaz/izlaz) t_{ulv}/t_{izv} [°C],
- Potlak dimnih plinova na izlazu iz reaktora, p_{ν} .

Rezultati mjerenja dani su u prilogu P5.

	Ugljen "Kakanj"	Biomasa (piljevina smreke)
Teh. analiza. [%]-ar		
Vlaga	11,30	11,20
Pepeo	41,43	0,26
Volatili	25,88	75,48
Koksni ostatak	21,39	13,06
Elem. analiza. [%]-ar		
ugljik	35,11	38,91
vodik	2,78	7,36
kisik	7,03	41,61
sumpor	2,28	0,33
dušik	0,96	0,33
Ogr. vr. [kJ/kg]-ar		
Gornja	13 490	17 386
Donja	12657	15612

Tablica 6.3. Sastav goriva

Gorivo	Ukupno [%]	>500 μm	200-500 μm	100-200 μm	45-100 μm	<45 μm
Ugljen	100	0	18,2	28,0	17,4	36,4
Biomasa	100	0	67,5	26,7	4,2	1,6

Tablica 6.4. Distribucija veličina čestica ispitanog goriva, maseni udio [%]

6.5.1. Mjerna oprema

U toku izvođenja eksperimenata na laboratorijskom postrojenju AUCR na Mašinskom fakultetu u Sarajevu korišteni su mjerni instrumenti kako je prikazano u tablici 6.5.

r.br.	Mjerni instrument	Mjerna veličina
1	Termoparovi WIKA Pt10%Rh-Pt 1600°C	Temperatura stijenki ložišta
2	Termometar NiCr-Ni 1000°C	Temperatura dimnih plinova
2	Termometer Checktern 1	Temperatura okolnog zraka,
3	Termometar Checktemp 1	stijenki dimovodnog kanala
4	Protokomjer NOVODIREKT 140 l/min	Protok primarnog zraka
3	Protokomjer NOVODIREKT 280 l/min	Protok sek./terc. zraka
4	Analizator plinova TESTO 350	Udio O ₂ ; CO; NO; SO ₂
5	Senzor tlaka SENSORTECHNICKS-	Miarania potlaka u ložištu
5	BTEL5001	wijerenje poliaka u lozistu
6	Digitalna vaga NAHITA 5041	Vaganje uzorka goriva

Tablica 6.5. Mjerni instrumenti korišteni u eksperimentu

<u>Termoparovi WIKA Pt10%Rh-Pt 1600 °C</u> služe za mjerenje temperature stijenki ložišta: Ovi su termoparovi povezani u mjerno-regulacijskom krugu za doziranje snage električnih grijača. Radi se o termoparovima Pt10%Rh-Pt, Tip S, Klasa 2. To je klasa preciznih termoparova sa mogućnošću mjerenja izrazito visokih temperatura i do 1600 °C. Termoparovi su tvornički baždareni prije isporuke. Granična greška senzora, tj. devijacija za ove termoparove je standardizirana prema tablici 6.6.

Tip	Termopar	Standard za devijaciju	Klasa	Temperaturni raspon	Granična devijacija
c	S Pt10%Rh-Pt	DIN EN 60584	2	$0 - 600 ^{\circ}\mathrm{C}$	± 1,5 °C
2		Part 2	2	600 – 1600 °C	$\pm 0,0025 \cdot t$

Tablica 6.6. Granična devijacija za termoparove WIKA korištene u eksperimentu

<u>*Termometar NiCr-Ni 1000 °C*</u> integriran je u sondu analizatora plinova i pomoću njega je kontrolirana temperatura dimnih plinova na mjestu uzimanja uzorka za analizu dimnih plinova. Maksimalna radna temperatura ovog termometra je 1000 °C, a točnost ± 0.5 °C.

<u>*Termometri Checktemp 1*</u>: U toku eksperimenata na postrojenju AUCR termometar *Checktemp 1* je služio za brzu kontrolu temperature okolnog zraka, rashladne vode, kao i temperatura metalnih površina postrojenja AUCR. Mjerno područje je od -50 °C do +150 °C. Točnost je $\pm 0,1$ °C.

<u>*Protokomjeri NOVODIREKT:*</u> Koriste se na postrojenju AUCR na liniji dobave zraka za izgaranje, za kontrolu protoka primarnog zraka, odnosno sekundarne/tercijarne struje zraka. To je tzv. V-tip protokomjera sa ručno upravljanim ventilom integriranim u instrumentu i sa direktnim očitanjem protoka zraka na skali instrumenta. Standardna točnost instrumenta je $\pm 5\%$.

Maksimalni radni tlak je 10 bar, a temperatura 121 °C. Instrumenti su tvornički baždareni prije isporuke.

<u>Analizator plinova TESTO 350</u>: Služi za mjerenje sadržaja O_2 u %, kao i sadržaja CO, NO, NO₂ i SO₂ u ppm, u dimnim plinovuma. Karakteristike pojedinih komponenti uređaja TESTO 350 dane su u tablici 6.7. Uređaj ne mjeri direktno CO₂, već ga preračunava na osnovu sadržaja O₂ i CO_{2max} za testirano gorivo.

	O ₂	CO ₂	СО	NO	SO ₂
Mjerno područje	0-21 %	0-CO _{2max}	0-10000 ppm	0-3000 ppm	0-5000 ppm
			±20 ppm do	±5 ppm do	±20 ppm do
			400 ppm	100 ppm	400 ppm
	± 5% do	± 5% do	±5% do		
Tochost	± 0,2 %	± 0,2 %	2000 ppm	2000 ppm	3000 ppm
			±10% do	±10% do	±10% do
			10000 ppm	3000 ppm	5000 ppm

Tablica 6.7. Tehnički podaci o senzorima analizatora plinova TESTO 350

<u>Senzor tlaka SENSORTECHNICS tipa BTEL5001</u>: Radi se o diferencijalnom transmiteru tlaka karakterističnom po mogućnosti registriranja vrlo malih razlika tlaka u rasponu od 0-1 mbar (0-100 Pa). Priključen je u PID regulacijskom krugu mjerenja, s frekventnim ventilatorom dimnih plinova. Odziv mjerenja je 1 ms, zadavanje i očitanje vrijednosti je digitalno preko LCD displeja na upravljačkom ormaru.

<u>Digitalna vaga NAHITA</u>: Radi se o vagi sa mjernim opsegom od 0 - 5000 g i točnosti 2 g. Vaga je tijekom eksperimenta služila za vaganje uzorka goriva koji prolazi kroz dozator radi prethodnog utvrđivanja karakteristike doziranja.

6.5.2. Nesigurnosti mjerenja

Budući da nije moguće ukloniti sve neželjene čimbenike koji djeluju na mjerenje, uz svaku izmjerenu veličinu potrebno je razmotriti i moguće pogreške mjerenja, odnosno mjernu nesigurnost. Pogreška mjerenja uključuje dvije sastavnice, *slučajne* i *sustavne* pogreške. Slučajne pogreške nastaju iz nepredvidivih ili slučajnih vremenskih ili prostornih promjena utjecajnih veličina, a manifestiraju se kao različiti rezultati dobiveni ponovljenim mjerenjima iste veličine u istim uvjetima. Sustavne pogreške su najčešće rezultat nesavršenih mjernih instrumenata i konstantnih i/ili predvidivih čimbenika okoline, a manifestiraju se stalnim i/ili predvidivim odstupanjem rezultata izmjerenih prilikom više ponovljenih mjerenja iste veličine u istim uvjetima. Zbog pogrešaka mjerenja niti jedan izmjereni rezultat nije opravdano prihvatiti sa sigurnošću. Postoji međunarodni dogovor za određivanje mjerne nesigurnosti i to prema smjernicama donešenim od Zajedničkog odbora za upute u mjeriteljstvu (u daljnjem tekstu JCGM). Sukladno njima, nesigurnost mjerenja također uključuje dvije sastavnice, nesigurnost tipa-A i nesigurnost tipa-B koje se određuju različitim računskim postupcima. Iako je nesigurnost tipa-A najčešće rezultat slučajnih pogrešaka, a nesigurnost tipa-B sustavnih pogrešaka, prema JCGM, ne bi trebalo određene pogreške poistovjećivati s određenim tipovima nesigurnosti.

Kod svih mjernih instrumenata za mjerenje parametara procesa na postrojenju AUCR vrši se direktno očitavanje mjerne veličine, pa su standardne devijacije preporučene od strane

proizvođača ovih mjernih uređaja. Kada se radi o mjerenju emisija, točnost rezultata mjerenja diktirana je velikim brojem faktora od kojih su karakteristična slučajna djelovanja na koja je vrlo teško ili gotovo nemoguće utjecati. Slučajna djelovanja kod mjerenja emisija posljedica su promjenjivosti distribucije toka i sastava dimnih plinova, a što je uzrokovano turbulentnom prirodom strujanja u ložištu, koja je opet posljedica nehomogenosti smjese zraka i goriva koja dolazi s plamenika, odnosno neuniformnih polja brzina i temperatura u toj zoni. Ova slučajna djelovanja diktiraju pojavu različitih vrijednosti mjerene veličine - emisije izražene u ppm, kod svakog opetovanog opažanja u nizu, pa je u ovom slučaju neophodno primijeniti tzv. *procjenu nesigurnosti mjerenja tipa-A*.

Mjerenje udjela polutanata NO i SO₂ u dimnim plinovima vršeno je u prosjeku svakih 5 min u periodu ispitnog režima od 45 min. Znači, vršeno je opetovano opažanje mjernih vrijednosti, zbog gore spomenutog variranja rezultata mjerenja pod prividno istim uvjetima. Izmjerene vrijednosti u ppm se potom preračunavaju u emisije u mg/m_n³. Te emisije su u stvari linearne funkcije mjernih vrijednosti Y_{NO} i Y_{SO_2} u ppm, npr:

$$e_{\rm NO} = \rho_{\rm NO} \cdot Y_{\rm NO},\tag{6.6}$$

gdje je ρ_{NO} gustoća u normalnim uvjetima, koja je konstantna veličina, a Y_{NO} izmjereni udio u ppm. Pošto se radi o linearnoj ovisnosti e_{NO} i Y_{NO} u izrazu (6.6), vrši se usrednjavanje veličine e_{NO} :

$$e_{\rm NO} = f(\overline{Y}_{\rm NO}) \tag{6.7}$$

gdje je \overline{Y}_{NO} aritmetička sredina ili prosjek *n* neovisnih određivanja veličine Y_{NO} , pa je:

$$e_{\rm NO} = \rho_{\rm NO} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{N} Y_{\rm NO,i}}{n}$$
(6.8)

Shodno izrazu (6.8), izvršeno je usrednjavanje izmjerenih vrijednosti emisija u ppm, te je određena emisija u mg/m_n^3 , koja je potom svedena na referentnu vrijednost sadržaja O_2 u dimnim plinovima prema izrazu:

$$e_{\text{NO,ref}} = e_{\text{NO}} \cdot \frac{21 - O_{2,ref}}{21 - O_2} , \qquad (6.9)$$

gdje je $O_{2,ref}$ propisani referentni sadržaj kisika na koji se emisija preračunava, dok je O_2 izmjerena vrijednost masenog udjela kisika u dimnim plinovima.

Pojedinačna opažanja vrijednosti, $Y_{NO,i}$, kao što je već rečeno, razlikuju se zbog slučajnih promjena utjecajnih veličina tj. slučajnih djelovanja. *Eksperimentalna varijanca* tih opažanja, koja daje procjenu varijance razdiobe vjerojatnosti veličine NO, dana je izrazom:

$$s^{2}(Y_{\rm NO}) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (Y_{\rm NO,i} - \overline{Y}_{\rm NO})^{2}$$
(6.10)

Pozitivni drugi korijen eksperimentalne varijance iz izraza (6.10) naziva se *eksperimentalno* standardno odstupanje, $s(Y_{NO})$ i opisuje promjenjivost opaženih vrijednosti Y_{NO} , odnosno

rasipanje oko njihove aritmetičke sredine \overline{Y}_{NO} . Međutim, kada bi se mjerenje iste veličine u istim uvjetima ponovilo na više uzoraka, aritmetičke sredine tih uzoraka ne bi bile iste. Pretpostavlja se da bi učestalost tih aritmetičkih sredina pratila normalnu raspodjelu a aritmetička sredina takve raspodjele bi najbolje reprezentirala stvarnu vrijednost mjerene veličine. Standardno odstupanje u takvoj distribuciji bilo bi manje što su pojedinačni uzorci veći i što je mjerena pojava manje varijabilna. Budući da nije ekonomično provoditi mjerenje na većem broju uzoraka, prilikom zaključivanja o stvarnoj vrijednosti mjerene veličine i određivanju stvarnog odstupanja od izmjerene veličine, potrebno je standardno odstupanje dobiveno na uzorku mjerenja $s(Y_{NO})$ korigirati s obzirom na broj mjerenja n (veličinu uzorka):

$$s^{2}(\bar{Y}_{\rm NO}) = \frac{s^{2}(Y_{\rm NO})}{n}$$
(6.11)

Eksperimentalna varijanca srednje vrijednost $s^2(\bar{Y}_{NO})$ i *eksperimentalno standardno odstupanje aritmetičke sredine* $s(\bar{Y}_{NO})$ koje je jednako pozitivnom drugom korijenu iz $s^2(\bar{Y}_{NO})$ određuju mjeru koliko dobro \bar{Y}_{NO} procjenjuje očekivanu veličinu Y_{NO} i oboje se mogu upotrijebiti kao mjera nesigurnosti srednje vrijednosti \bar{Y}_{NO} . Veličina $s(\bar{Y}_{NO})$ se skraćeno zove *standardna nesigurnost tipa-A*. Na temelju standardne pogreške aritmetičke sredine moguće je procijeniti stvarnu vrijednost mjerene veličine s određenom pouzdanosti a raspon unutar kojeg se očekuje da se ona nalazi naziva se granice pouzdanosti. Najčešće granice pouzdanosti koje se zahtijevaju pri zaključivanju su 68%, 95% ili 99%. Za granicu pouzdanosti od 95% procjenjena vrijednost mjerene veličine nalazi se unutar raspona koji je jednak aritmetička sredina uzorka ± 1,96 standardnih pogrešaka aritmetičke sredine, a za 99% aritmetička sredina uzorka ± 2,58 pogrešaka aritmetičke sredine. Proračun standardne nesigurnosti mjerenja dat je na primjeru mjerenja emisije NO.

$Y_{\text{NO},i}$, ppm	606	596	521	671	575	631	629
$\overline{Y}_{ m NO}$, ppm	604						
$s^2(Y_{\rm NO})$				2273			
$s(Y_{\rm NO})$				47,7			
$s^2(\overline{Y}_{\rm NO})$				325			
$s(\overline{Y}_{NO})$	18						

Tablica 6.8. Standardna nesigurnost mjerenja emisije NO za režim K80S20 – 1140°C, $\lambda = 1,1$

Kao što se vidi iz tablice 6.8, standardna nesigurnost mjerenja iskazana opetovanim opažanjem mjerene veličine za ovaj konkretan slučaj iznosi 18 ppm, što daje odstupanje od $\pm 2,8\%$ u odnosu na srednju aritmetičku vrijednost mjerne veličine.

Nesigurnost tipa-B određuje se temeljem prijašnjih mjernih podataka, iskustva s tvarima ili instrumentima, proizvođačkih specifikacija, podataka iz priručnika i sl. Moguće ju je odrediti statistički ukoliko je poznata raspodjela veličine (npr. pravokutna ili trokutasta raspodjela) ali i bilo kojim logičnim matematičkim pristupom.

Za veličine s jednolikom(pravokutnom) vjerojatnosnom razdiobom u intervalu širine $2\Delta x$ u čijem centru leži rezultat mjerenja \overline{x} veličine X (sve vrijednosti te veličine leže u okolini $\pm \Delta x$ oko rezultata mjerenja) standardno odstupanje osnovnog skupa je:

$$s(x) = \frac{\Delta x}{\sqrt{3}} \tag{6.12}$$

Vjerojatnost da vrijednost *x* izmjerene veličine leži unutar intervala $\Delta x / \sqrt{3}$ je 58% (slika 6.41). što je ujedno i *standardna nesigurnost tipa-B*.



Slika 6.41. Pravokutna razdioba mjerenih veličina

6.6. Model izgaranja smjese ugljene prašine i biomase u letu

Faza devolatilizacije karakterizirana je otpuštanjem lakih plinova (CO, CO₂, H₂O, H₂ i dr.) te lakših i težih ugljikovodika iz biomase i ugljena što je prikazano sljedećim reakcijama.

Biomasa
$$\rightarrow$$
 Volatili iz biomase + Koksni ostatak (6.13)

Ugljen
$$\rightarrow$$
 Volatili iz ugljena + Koksni ostatak (6.14)

Model otpuštanja volatila opisan je u potpoglavlju 4.4.3 a brzina otpuštanja volatila iz čestica biomase i ugljena definirana je izrazom (4.113) i (4.115) gdje su vrijednosti predeksponencijalnih faktora i energije aktivacije dani u tablici 6.9. Za biomasu su interpolacijom izračunati prividni kinetički parametri za veličine čestica od 150 μ m i 300 μ m iz dostupnih vrijednosti karakterističih veličina čestica iz literature, prema [92]. Prividni kinetički parametri su u tom radu dobiveni eksperimentalno za biomasu porijeklom od drva crnogorice sličnog udjela celuloze, hemiceluloze i lignina (0,5-0,27-0,23) kao kod smreke, za različite veličine čestica od 17 μ m do 2,5 mm.

Biomasa	Izvor	Izraz	Ugljen	Izvor	Izraz
$(300 \ \mu m):$ $A_{2} = 742 \ s^{-1}$	[02]	(4 113)	$A_1 = 2,0.10^5 \text{ s}^{-1}$ $E_1 = 1.046.10^8 \text{ J/kmol}$	[60]	(4.115a)
$E_1 = 2,83 \cdot 10^7 \text{ J/kmol}$	[92]	(4.113)	$\alpha_1 = 0,3$	[00]	(4.11 <i>3a)</i>
(150 μm):			$A_2 = 1,3 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$		
$A_1 = 19427 \text{ s}^{-1}$	[92]	(4.113)	$E_2 = 1,674 \cdot 10^7 \text{ J/kmol}$	[60]	(4.115b)
$E_1 = 3,94 \cdot 10^{\circ} \text{ J/kmol}$			$\alpha_2 = 1,0$		

Tablica 6 () Darametri	modela	devol	tilizad	iio
aunca 0.3	7. Falament	mouera	uevoia	unzac	٦JC

Volatili otpušteni iz goriva zamijenjeni su molekulom pseudovolatila tj. složenog ugljikovodika općenitog oblika $C_xH_yO_zS_mN_n$. Molekula pseudovolatila određuje se iz tehničke i elementarne analize goriva, tablica 6.3, kako je opisano u nastavku.

Iz poznate tehničke i elementarne analize zaprimljenog goriva (AR - *as received*) odredi se maseni udio elemenata u osušenom gorivu bez pepela (DAF), prema:

$$Y_{i,DAF} = \frac{Y_{i,AR}}{1 - Y_w - Y_a}.$$
(6.15)

Nadalje, slijedi izračun masenog udjela ugljika u volatilima koji se dobije oduzimanjem udjela koksnog ostatka na bazi osušenog goriva bez pepela, $Y_{c(s),DAF}$ od ukupnog udjela ugljika, $Y_{c,DAF}$:

$$Y_{c,vol(DAF)} = Y_{c,DAF} - Y_{C(s),DAF},$$
(6.16)

gdje je:

$$Y_{C(s),DAF} = \frac{Y_{C(s)}}{1 - Y_w - Y_a}.$$
(6.17)

Maseni udio ostalih elemenata u volatilima izračunava se po sljedećem izrazu:

$$Y_{i,vol(DAF)} = \frac{Y_{i,DAF}}{\sum_{i} Y_{i,DAF} - Y_{C(s),DAF}},$$
(6.18)

Iz izračunatih masenih udjela elemenata u volatilima, dijeljenjem s njihovim relativnim atomskim masama $(A_{r,i})$ dobije se broj atoma dotičnog elementa u molekuli pseudovolatila:

$$n_i = \frac{Y_{i,vol(DAF)}}{A_{r,i}}.$$
(6.19)

U tablici 6.10 i 6.11 izračunate su vrijednosti masenih udjela elemenata i broj atoma u molekulama pseudovolatila za biomasu i ugljen na temelju tehničke i elementarne analize goriva iz tablice 6.3 prema opisanom postupku.

	Zaprimljeno	Osušeno gorivo	Volatili,	Broj atoma u molekuli
	gorivo, $Y_{i,AR}$	bez pepela, $Y_{i,DAF}$	$Y_{i,vol,DAF}$	pseudovolatila, n _i
Koksni ostatak, $Y_{C(s)}$	0,1306	0,1475	-	-
Vlaga, Y_w	0,1120	-	-	-
Pepeo, Y_a	0,0026	-	-	-
Ugljik, <i>Y</i> _c	0,3891	0,4395	0,3425	2,851
Vodik, Y_h	0,0736	0,0831	0,0975	9,674
Kisik, Y _o	0,4161	0,4700	0,5513	3,446
Sumpor, <i>Y</i> _s	0,0033	0,0037	0,0044	0,014
Dušik, Y_n	0,0033	0,0037	0,0044	0,032
				M_{vol} = 100 kg/kmol

Tablica 6.10. Izračun broja atoma u molekuli pseudovolatila biomase

	Zaprimljeno	Osušeno gorivo	Volatili,	Broj atoma u molekuli
	gorivo, $Y_{i,AR}$	bez pepela, $Y_{i,DAF}$	$Y_{i,vol,DAF}$	pseudovolatila, <i>n_i</i>
Koksni ostatak, $Y_{C(s)}$	0,2139	0,4525	-	-
Vlaga, Y_w	0,1131	-	-	-
Pepeo, Y_a	0,4143	-	-	-
Ugljik, Y _c	0,3511	0,7239	0,5124	4,267
Vodik, Y_h	0,0278	0,0588	0,1039	10,304
Kisik, Yo	0,0703	0,1487	0,2626	1,641
Sumpor, <i>Y</i> _s	0,0228	0,0483	0,0852	0,266
Dušik, <i>Y</i> _n	0,0096	0,0203	0,0359	0,256
				$M_{vol} = 100$ kg/kmol

Tablica 6.11. Izračun broja atoma u molekuli pseudovolatila ugljena

Izgaranje smjese pseudovolatila biomase i ugljena definirano je sa sljedeće tri reakcije:

$$C_{2,851}H_{9,674}O_{3,446}S_{0,014}N_{0,032} + 2,457 O_2 \rightarrow 2,207 CO + 0,644 CO_2 + 4,837 H_2O + 0,014 SO_2 + 0,016 N_2$$
(6.20)

$$C_{4,267}H_{10,304}O_{1,641}S_{0,266}N_{0,256} + 4,636 O_2 \rightarrow 3,303 CO + 0,964 CO_2 + 5,152 H_2O + 0,266 SO_2 + 0,128 N_2$$
(6.21)

$$CO + 0.5 O_2 \rightarrow CO_2 \tag{6.22}$$

Stehiometrijski koeficijenti u reakcijama određeni su iz bilanci masa pojedinih sastojaka:

$$C_{x}H_{y}O_{z}S_{m}N_{n} + \left(\frac{(2+\alpha)x}{(2+2\alpha)} + \frac{y}{4} + m - \frac{z}{2}\right)O_{2} \rightarrow$$

$$\frac{x}{(1+\alpha)}CO_{2} + \frac{\alpha \cdot x}{(1+\alpha)}CO_{2} + \frac{y}{2}H_{2}O_{2} + mSO_{2} + \frac{n}{2}N_{2} \qquad (6.23)$$

Omjer CO/CO₂ u reakcijama otpuštanja volatila pretpostavljen je i iznosi $\alpha = 3,428$, prema eksperimentalnim mjerenjima iz literature, prema [89].

Za molekulu pseudovolatila potrebno je izračunati i standardnu entalpiju formacije $(\Delta h_f^0)_{vol}$ da bi bilo moguće izračunati ukupnu specifičnu entalpiju u jednadžbi očuvanja energije prema izrazu 4.9. Ona se izračunava preko bilance energije pri potpunom izgaranju molekule volatila uz poznate standardne entalpije formacija nastalih spojeva (tablica 6.12).

Kem. Spoj	Standardna entalpija formacije ($arDelta h^0_f$), J/kmol
CO ₂	$-3,935324 \cdot 10^{8}$
N_2	0,000000
O_2	0,000000
$H_2O_{(g)}$	$-2,418379 \cdot 10^{8}$
SO ₂	$-2,968300 \cdot 10^{8}$

Tablica 6.12	. Standardne	entalpije	formacija
--------------	--------------	-----------	-----------
Reakcije potpunog izgaranja molekula pseudovolatila biomase i ugljena su:

$$C_{2,851}H_{9,674}O_{3,446}S_{0,014}N_{0,032} + 3,561 O_2 \rightarrow 2,851 CO_2 + 4,837 H_2O + 0,014 SO_2 + 0,016 N_2$$

$$C_{4,267}H_{10,304}O_{1,641}S_{0,266}N_{0,256} + 6,288 O_2 \rightarrow 4,267 CO_2 + 5,152 H_2O + 0,266 SO_2 + 0,128 N_2$$

Iz kojih se računaju standarne entalpije formacija:

$$\left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{vol,BM} = 2,851 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{CO_{2}} + 4,837 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{H_{2}O_{(g)}} + 0,014 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{SO_{2}} + 0,016 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{N_{2}} - 3,561 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{O_{2}} + H_{d,vol(BM)} \cdot M_{vol(BM)}$$

$$(6.24)$$

$$\left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{vol,K} = 4,267 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{CO_{2}} + 5,152 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{H_{2}O_{(g)}} + 0,266 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{SO_{2}} + 0,128 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{N_{2}} - 6,288 \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{O_{2}} + H_{d,vol(K)} \cdot M_{vol(K)}$$

$$(6.25)$$

Molarne mase pseudovolatila, M_{vol} , izračunate kao $\sum (Y_i \cdot M_i)$ (tablica 6.10 i 6.11) iznose 100 kg/kmol za biomasu i za ugljen. Donja ogrjevna moć volatila, $H_{d,vol}$ biomase i ugljena računa se iz poznate ogrjevne moći goriva (tablica 6.3) i izračunatog udjela koksnog ostatka u osušenom gorivu bez pepela (tablica 6.10 i 6.11):

$$H_{d,vol} = \frac{H_{d,DAF} - Y_{C(s),DAF} \cdot H_{d,C(s)}}{1 - Y_{C(s),DAF}},$$
(6.26)

gdje je $H_{d,DAF}$ ogrjevna moć osušenog goriva bez pepela:

$$H_{d,DAF} = \frac{H_{d,AR}}{1 - Y_w - Y_a},$$
(6.27)

dok je ogrjevna moć koksnog ostatka tj. ugljena u krutom stanju, $H_{d,C(s)} = 32900 \text{ kJ/kg}$. Iz navedenog slijedi za biomasu i za ugljen:

$$\begin{split} H_{d,DAF(BM)} &= \frac{H_{d,AR}}{1 - Y_w - Y_a} = \frac{1,5612 \cdot 10^7}{1 - 0,1120 - 0,0026} = 1,7633 \cdot 10^7 \text{ J/kg}, \\ H_{d,vol(BM)} &= \frac{1,7633 \cdot 10^7 - 0,1475 \cdot 3,29 \cdot 10^7}{1 - 0,1475} = 1,4991 \cdot 10^7 \text{ J/kg}, \\ H_{d,DAF(K)} &= \frac{H_{d,AR}}{1 - Y_w - Y_a} = \frac{1,2657 \cdot 10^7}{1 - 0,1130 - 0,4143} = 2,6776 \cdot 10^7 \text{ J/kg}, \end{split}$$

$$H_{d,vol(K)} = \frac{2,6776 \cdot 10^7 - 0,4525 \cdot 3,29 \cdot 10^7}{1 - 0,4525} = 2,1715 \cdot 10^7 \text{ J/kg}.$$

Uvrštavanjem izračunatih donjih ogrjevnih moći volatila biomase i ugljena te entalpija formacije spojeva koji sudjeluju u reakciji iz tablice 6.12 u izraze (6.24) i (6.25) dobiju se standardne entalpije formacija pseudovolatila:

$$\left(\Delta h_f^0\right)_{vol,BM} = -7,952801 \cdot 10^8 \text{ J/kmol},$$

$$\left(\Delta h_f^0\right)_{vol,K} = -8,230545 \cdot 10^8 \text{ J/kmol}.$$

Izgaranje u plinovitoj fazi modelirano je kombinacijom laminarnoga Arrheniusovog i EDM modela (potpoglavlje 4.3.2). Brzine reakcija izgaranja volatila biomase i ugljena (reakcije 6.20 i 6.21) definirane su, pritom, izrazima (4.64) i (4.65) s empirijskim konstantama $\beta_1 = 4$ i $\beta_2 = 0.5$, te izrazom (4.68) gdje su uzete vrijednosti predeksponencijalnog faktora $A = 4,41\cdot10^{11}$ s⁻¹ i energije aktivacije $E = 1,2553\cdot10^8$ J/kmol [88]. Za reakciju oksidacije ugljičnog monoksida u ugljični dioksid (reakcija 6.22), za vrijednosti konstanti uzeto je $\beta_1 = 2$ i $\beta_2 = 10^{20}$, te $A = 2,5\cdot10^8$ s⁻¹ i $E = 6,6948\cdot10^7$ J/kmol [88].

Izgaranje koksnog ostatka kojeg čini ugljik, C(s), definirano je reakcijom na površini čestice:

$$C_{(s)} + 0.5 O_2 \rightarrow CO.$$
 (6.28)

Prema *Kinetics/Diffusion-Limited Rate* modelu (potpoglavlje 4.4.3.), vrijednosti koeficijenata C_1 , C_2 , i *E* kojima je definirana molekularna difuzija kisika na površinu čestice, izraz (4.122) i kinetička brzina reakcije na površini čestice, izraz (4.123), uzete su prema [63]: $C_1 = 5 \cdot 10^{12}$ kg/m²sPa, $C_2 = 6.7$ kg/m²sPa i $E = 1.138 \cdot 10^8$ J/kmol.

6.7. Validacija modela izgaranja smjese ugljena i biomase u letu

Pri proračunu putanje diskretne faze oblik čestica ugljena pojednostavljen je sferom dok je za čestice biomase razvijen model kojim se pretpostavlja cilindrični oblik čestice. Oblik cilindra s omjerom duljine i promjera, L/d = 10 uzet je kao pojednostavljenje na temelju stvarnog oblika čestica biomase vidljivog na makrofotografiji uzorka goriva, slika 6.42.



Slika 6.42. Oblik i veličina čestica biomase

Definirane su četiri ulazne struje čestica s obzirom na njihovu veličinu prema vrijednostima u tablici 6.4:

- 1) Struja čestica ugljena promjera 40 µm;
- 2) Struja čestica ugljena promjera 150 µm;
- 3) Struja čestica biomase duljine 150 μm;
- 4) Struja čestica biomase duljine 300 μ m.

Svaka od struja definirana je sa 50 trajektorija tj. putanja reprezentativnih čestica otpuštenih iz 20 točaka na ulaznom rubnom uvjetu čineći ukupno 1000 putanja za svaku od definiranih veličina čestica. Svakih 50 iteracija trajektorije se iznova računaju čime su uključeni slučajni efekti turbulencije kako je opisano u potpoglavlju 4.4.2.

Razvijeni model uspoređen je sa dva primjenjiva modela dostupna u korištenom računalnom software-u FLUENT od kojih jedan pri proračunu trajektorije uzima u obzir faktor oblika čestice dok drugi pretpostavlja savršeno sfernu česticu (potpoglavlje 4.4.1.). Razlika u proračunatim putanjama čestica biomase definiranih kao cilindar duljine 150 µm i 300 µm ili kao sfera volumena jednakog čestici, vidi se na slici 6.43.



Slika 6.43a. Izračunate putanje čestica biomase modelirane oblikom cilindra duljine 150 μ m i 300 μ m (primjer za slučaj izgaranja pri temperaturi od 1673 K i λ = 1,2)



Slika 6.43b. Izračunate putanje čestica biomase modelirane oblikom sfere volumena jednakog čestici (primjer za slučaj izgaranja pri temperaturi od 1673 K i $\lambda = 1,2$)



Slika 6.44. Izračunato polje brzina stvaranja volatila iz čestica biomase opisanih cilindrom i sferom (primjer za slučaj izgaranja pri temperaturi od 1673 K i $\lambda = 1,2$)

Sa slika 6.43a i 6.43b vidljivo je znatno veće raspršenje čestica biomase pri ulasku u ložište kod modela koji za njihov oblik pretpostavlja cilindar, što je pogotovo izraženo kod većih dimenzija čestica. Razlike u izračunatim putanjama čestica, između prikazanih modela, dovodi i do razlike u brzini stvaranja volatila i njihovim koncentracijama unutar ložišta (slika 6.44) te kao posljedica, izračunatom sastavu dimnih plinova. Za očekivati bi bilo da razlika postoji i u polju temperatura, međutim, zbog samog postupka ispitivanja gdje je temperatura u ložištu strogo kontrolirana i držana konstantnom, ta razlika nije značajna. Rezultati i usporedba s izmjerenim rezultatima na laboratorijskom ložištu za sve ispitne režime dani su na slikama 6.45-6.51. Na

dijagramima je u legendi s "Fluent-1" označen model nesferične čestice s faktorom oblika $\phi = 0.6$ [22], dok je s "Fluent-2" označen model sferične čestice prema [52].



Slika 6.45. Udio kisika i ugljik-dioksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda = 1,2$



Slika 6.46. Udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda=1,2$



Slika 6.47. Udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda=1,1$

Sa dijagrama 6.46 i 6.47 pri korištenju razvijenog modela strujanja cilindričnih čestica vidljivo je poboljšanje u predviđenim vrijednostima udjela CO u dimnim plinovima pri nižim ispitnim temperaturama ($T = 1140^{\circ}$ C - 1400°C) odnosu na standardne modele. Tek na najvišoj temperaturi ($T = 1550^{\circ}$ C), gdje su brzine zagrijavanja čestica najbrže a time i procesi otpuštanja volatila i reakcije izgaranja, model strujanja sfernih čestica približava se po predviđenim vrijednostima razvijenom modelu. Očekivani pad udjela ugljičnog monoksida s porastom faktora pretička zraka kao posljedica potpunijeg izgaranja vidljiv je ako se usporede oba dijagrama. Moguće je uočiti i pad udjela CO pri temperaturama ispod 1250°C gdje se, prema modelu, javlja povećani udio neizgorenih čestica goriva. Isto je moguće uočiti pri oba zadana faktora pretička. Posljedica je i porast udjela kisika u dimnim plinovima (slika 6.45).

Na slikama 6.45-6.47 uočljiva su znatna odstupanja od izmjerenih rezultata za udjele O₂, CO₂ i CO u dimnim plinovima pri najnižoj ispitnoj temperaturi od 960°C. Takav rezultat se djelomično može pripisati nedovoljno točnim modelima kojima se opisuju procesi devolatilizacije i izgaranja pri nižim temperaturama gdje se ti procesi odvijaju sporije. Spomenuti modeli ovise o vrsti i sastavu goriva, stoga bi pri modeliranju izgaranja, tada trebalo primijeniti neke od složenijih modela devolatilizacije. Takvi modeli zahtjevaju detaljnije poznavanje strukture goriva i točan sastav volatila i to prvenstveno biomase a do takvih eksperimentalnih podataka je vrlo teško doći.

NO i SO₂ emisije izmjerene su i modelirane u ppm, pretvorene u mg/m_n³ te normalizirane na 6% O₂ u suhim plinovima izgaranja. I u ovom slučaju su, kao i kod modeliranja IFRF ložišta, pri modeliranju emisije dušikovog oksida (NO) u obzir uzeti mehanizmi termalnog NO i NO iz goriva. Jedan dio dušika iz goriva nalazi se u koksnom ostatku (50%) a drugi dio u volatilima (50%). Pretpostavljeno je, prema [42], da dušik iz volatila prvo reagira u HCN i NH₃ i to u omjeru 9:1, dok dušik iz koksnog ostatka reagira izravno u NO bez međuprodukata. Faktor konverzije dušika iz volatila uzet je 100%, dok je faktor konverzije dušika iz koksnog ostatka uzet 20%, pošto se većina dušika iz koksnog ostatka transformira u N₂.

Na slici 6.48 prikazane su izračunate vrijednosti koncentracija dušik-monoksida za sve ispitne temperature pri faktoru pretička zraka $\lambda = 1,2$ i uspoređene sa izmjerenim vrijednostima. Sa dijagrama je vidljiv porast koncentracije NO pri višim procesnim temperaturama (1550°C) kao rezultat termalnog NO koji se prema Zeldovichevom mehanizmu u značajnoj mjeri formira tek iznad 1400°C. Također, ako se usporede vrijednosti koncentracije dušik-monoksida na slikama 6.48. i 6.49. moguće je primijetiti pad koncentracije kao posljedica smanjenja faktora pretička zraka.



Slika 6.48. Udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda=1,2$



Slika 6.49. Udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda=1,1$

Predviđene koncentracije NO nešto su niže od izmjernih, međutim, dobro prate trend promjene s temperaturom i to kod svih uspoređenih modela što je vjerojatno posljedica poznatog polja temperatura. I u ovom je slučaju moguće uočiti nešto bolje rezultate postignute modelom biomase koji uzima u obzir cilindričan oblik čestica. Vrijednosti koje daje sferični model znatno su niže od izmjerenih što je vjerojatno posljedica izgaranja nedovoljno raspršene smjese goriva, uslijed čega se stvara zona izgaranja siromašna kisikom u kojoj dušik iz goriva ima tendenciju stvaranja molekularnog N₂.

Rezultati dobiveni korištenim modelom izgaranja pokazuju prihvatljiva poklapanja s izmjerenim vrijednostima u laboratorijskim uvjetima za temperature ložišta iznad 1100°C, osim vrijednosti SO₂. Izmjerene emisije sumpor-dioksida (slike 6.50 i 6.51) osjetno su manje nego vrijednosti koje daje model. Mogući razlog prevelikom udjelu SO₂ je proces desulfacije koji u modelu nije uzet u obzir. Uzrok procesu desulfacije u ložištu mogao bi biti veliki udio pepela u smeđem ugljenu Kakanj i istovremeno velikom udjelu CaO u pepelu od oko 12%. Na slici 6.52 prikazan je odnos između stupnja vezivanja sumpora, S_b , definiranog kao udio SO₂ koji se trenutačno veže

u ložištu sa bazičnim oksidima iz pepela (pretežno CaO) i temperature u ložištu za ispitivano gorivo.





Slika 6.50. Udio sumpor-dioksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda=1,2$

Slika 6.51. Udio sumpor-dioksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda = 1,1$



Slika 6.52. Stupanj vezivanja sumpora, *Sb*, kao funkcije procesne temperature pri izgaranju mješavine smeđeg ugljena Kakanj i biomase u različitim omjerima pri $\lambda = 1,2, [93]$

Lako se može uočiti pad vrijednosti stupnja vezivanja sumpora s porastom temperature. Razlog tome je već poznati fenomen da se SO₂ lakše veže s česticama CaO pri nižim temperaturama, te s druge strane, nestabilnost CaSO₄ pri višim temperaturama kao produkta reakcije desulfacije $(2SO_2+2CaO+O_2 \rightarrow 2CaSO_4)$. S druge strane je, također, kod predviđenih vrijednosti koncentracija SO₂, vidljivo poklapanje rezultata sva tri modela diskretne faze, bez obzira na oblik čestice. Takav rezultat se mogao i predvidjeti s obzirom da sva količina sumpora iz goriva potječe iz ugljena čije su čestice aproksimirane sferom u sva tri slučaja.

6.8. Utjecaj geometrije čestica na izgaranje

6.8.1. Utjecaj geometrije na otpuštanje i izgaranje volatila

Oblik i geometrija čestica neupitno utječe na brzinu i smjer strujanja unutar ložišta te ju je stoga potrebno uzeti u obzir prilikom modeliranja izgaranja biomase u letu. Postojeći modeli sfernih čestica mogu se uspješno koristiti u nekim slučajevima kao npr. kod izgaranja kapljevitog goriva

ili izgaranja ugljene prašine koja se može aproksimirati sferom. Kako geometrija čestica biomase utječe na strujanje čestica a time i na otpuštanje volatila koji zatim izgaraju u kontinuiranoj fazi, može se uočiti na sljedećim slikama (slika 6.53a-6.53d). Na njima je dan prikaz proračunatih putanja čestica biomase cilindričnog oblika, različitih dimenzija te istog volumena. Usporedno je dan prikaz polja brzina stvaranja volatila iz tih čestica. Uspoređene su čestice biomase s različitim faktorima oblika, tj. omjerima duljine i promjera čestice (L/D) pri temperaturi stjenke ložišta T = 1673 K i faktoru pretička zraka $\lambda = 1,2$. Za usporedbu je na prvoj slici prikazan i profil za slučaj sferne čestice biomase istog volumena.



Slika 6.53a. Model strujanja sfernih čestica ekvivalentnog promjera $d_{ekv} = 74 \ \mu\text{m}$, pri $T = 1673 \ \text{K}$ i $\lambda = 1,2$



Slika 6.53b. Model strujanja cilindričnih čestica faktora oblika L/D = 3 ($L = 135 \mu m$), pri T = 1673 K i $\lambda = 1,2$



Slika 6.53c. Model strujanja cilindričnih čestica faktora oblika L/D = 10 ($L = 300 \mu m$), pri T = 1673 K i $\lambda = 1,2$



Slika 6.53d. Model strujanja cilindričnih čestica faktora oblika L/D = 22 ($L = 538 \mu m$), pri T = 1673 K i $\lambda = 1,2$

Područja većeg intenziteta otpuštanja volatila izraženija su kod čestica manjeg omjera L/D zbog veće koncentracije čestica u tom području. Kod većih omjera L/D, koncentracija čestica je u centralnom dijelu ložišta znatno manja kao posljedica većeg raspršenja čestica biomase te je zbog toga i područje otpuštanja volatila znatno šire. Također, s porastom omjera L/D raste i površina čestica, kako je prikazano na slici 6.54, preko koje se izmjenjuje toplina s kontinuiranom fazom prema izrazu 4.98.



Slika 6.54. Porast površine cilindričnih čestica s porastom omjera L/D

Veća površina dovodi do nešto bržeg zagrijavanja čestica a time i do ranijeg otpuštanja volatila. Zbog, općenito gledano, malih dimenzija čestica kod kojih je provođenje topline moguće zanemariti, te visokih temperatura unutar ložišta, brzine zagrijavanja čestica su vrlo velike te je time utjecaj njihove površine na početak stvaranja volatila, kao i na brzinu stvaranja volatila relativno mali.

Razlika u brzini otpuštanja volatila čestica modeliranih različitim modelima, dovodi do razlike u nastalom polju temperatura prilikom izgaranja volatila (slika 6.55). Po modelu cilindričnih čestica, kako je već rečeno, volatili se otpuštaju ranije nego kod modela sfernih čestica te i njihovo izgaranje počinje ranije.



Slika 6.55. Promjena temperature uzduž osi ložišta (T = 1673 K i $\lambda = 1,2$)

Maksimalna temperatura plamena je zbog veće raspršenosti čestica nešto niža te je plamen kraći i širi. Suprotno tome, izgaranje volatila kod modela sfernih čestica odvija se u zoni sa smjesom bogatom gorivom što je uzrok većih koncentracija ugljičnog monoksida u tom području (slika 6.56). Izgaranjem u bogatijoj smjesi, uz poznatu činjenicu da to više pogoduje formaciji molekularnog N_2 iz dušika u gorivu nego formaciji NO, mogu se objasniti i koncentracije dušikovog monoksida koje su niže za slučaj modela sfernih čestica (slika 6.57).



Slika 6.56. Maseni udio CO uzduž osi ložišta (T = 1673 K i $\lambda = 1,2$)



Slika 6.57. Maseni udio NO uzduž osi ložišta (T = 1673 K i $\lambda = 1,2$)

Utjecaj temperature na početak i brzinu stvaranja volatila prikazan je na slijedećim slikama gdje je dana usporedba profila brzina stvaranja volatila cilindričnih čestica biomase iste geometrije (L/D = 10) pri različitim temperaturama stijenki ložišta (slika 6.58). Kao i prema očekivanjima, više temperature u ložištu uvjetuju nešto raniji početak devolatilizacije koja se pritom odvija intenzivnije.



Slika 6.58. Utjecaj temperature na otpuštanje volatila cilindričnih čestica, $L_1 = 150 \,\mu\text{m}$ i $L_2 = 300 \,\mu\text{m}$ (L/D = 10)

6.8.2. Utjecaj geometrije na izgaranje koksnog ostatka

Na slijedeća dva dijagrama (slika 6.59) prikazan je stupanj konverzije koksnog ostatka ugljena i biomase prilikom izgaranja u ložištu pri različitim temperaturnim režimima. Koksni ostatak biomase cilindričnog oblika zbog većeg omjera površine i volumena u odnosu na čestice ugljena izgara ranije, usprkos većem udjelu volatila u biomasi. Stoga je i stupanj konverzije koksnog ostatka do temperature 1673 K znatno veći kod biomase nego kod ugljena kao što je i vidljivo na slici 6.59 za cilindrični model.



Slika 6.59. Stupanj konverzije koksnog ostatka

Sferni model čestica biomase ovisnost površine o promjeni geometrije čestice istoga volumena zanemaruje kao i utjecaj geometrije na promjene smjera strujanja. Kako je brzina izgaranja čestice vezana uz njezinu površinu (izraz 4.120), čestice biomase sfernog oblika, čija je površina manja u odnosu na cilindar istog volumena, izgaraju znatno sporije te izgaranje započinje kasnije u odnosu na čestice cilindričnog oblika. Također, veće raspršenje čestica cilindričnog oblika produljuje vrijeme njenog boravka unutar ložišta u odnosu na sferne čestice. To dovodi do opadanja stupnja konverzije koksnog ostatka biomase modeliranog sferom s porastom temperature jer se preostali kisik troši na izgaranje čestica ugljena čiji se stupanj konverzije znatno povećava s porastom temperature (slika 6.59-sferni model).

Važno je napomenuti da je utjecaj oblika čestica biomase na sveukupni proces izgaranja znatno veći prilikom otpuštanja i izgaranja volatila nego kod izgaranja koksnog ostatka. Posljedica je to velikog udjela volatila u biomasi od oko 85%. Kod ugljena taj je udio manji i za promatrani ugljen iznosi oko 30%. Ukupni stupanj konverzije goriva tako je, prema oba uspoređena modela strujanja čestica, preko 90% osim pri najnižoj ispitnoj temperaturi od 1233 K gdje iznosi oko 85%.

7. ZAKLJUČAK

U doktorskoj disertaciji razvijen je model izgaranja krutog goriva u letu s posebnim osvrtom na modeliranje strujanja čestica biomase nepravilnog oblika. Čestice biomase opisane su oblikom cilindra što u ovom slučaju odgovara njihovom stvarnom obliku za razliku od postojećih modela koji čestice opisuju kao sfere. Uslijed sila koje na njih djeluju, putanje čestica nepravilnog oblika poput cilindra razlikuju se od putanja sferičnih čestica što direktno utječe na proces izgaranja te time i na predviđen sastav dimnih plinova.

U radu je obuhvaćena termodinamička analiza prijelaza topline i prijenosa tvari pri izgaranju smjese smeđeg ugljena "Kakanj" i biomase (piljevina smreke) u ložištu procesne peći. Numeričkim simulacijama utvrđen je značaj modeliranja veličine i oblika čestica biomase pri izgaranju u letu. Model je uspoređen s dosadašnjim modelima koji čestice opisuju kao sferične. Proračuni su izvršeni na Intel Pentium® Dual-Core E5200 računalu koristeći specijelizirani programski paket za rješavanje problema prijelaza topline i dinamike fluida FLUENT. Trodimenzijska računalna domena je diskretizirana metodom konačnih volumena koristeći generator mreže GAMBIT koji se nalazi u sklopu programskog paketa FLUENT.

Općenito, numerički se modeli biraju na temelju njihove prilagodljivosti računarskim programima i numeričkim modelima i podmodelima s kojima se kombiniraju. Osim što moraju proizvesti fizikalno smislene rezultate, numerički modeli moraju biti efikasni i brzi u pogledu računalnih zahtjeva. Stoga, određeni numerički model ne mora biti najbolji za dani problem, već može predstavljati jedini prihvatljivi kompromis između oprečnih zahtjeva.

Model izgaranja smjese ugljena i biomase u letu sačinjava niz podmodela koji opisuju fizikalne i kemijske procese od trenutka ulaska čestice goriva u ložište do izgaranja koksnog ostatka i eventualnog izlaska izgorene čestice pepela iz ložišta.

Otpuštanje volatila iz čestica ugljena opisano je *Two Competing Rates* modelom dok je otpuštanje volatila iz čestica biomase, zbog nedostatka potrebnih podataka opisana nešto jednostavnijim *Single Rate* modelom.

Sam procesa izgaranja volatila modeliran je EDM/*Finite-Rate* modelom kao kompromis između jednostavnijeg EDM modela i složenog EDC modela koji uključuje kompletan mehanizam reakcija izgaranja i sastoji se od nekoliko stotina kemijskih reakcija. EDM model pogodan je za implementaciju u računarske programe i pruža solidne rezultate za širi raspon problema strujanja s kemijskim reakcijama. Osnovni nedostatak tog modela je pretpostavka beskonačnih brzina kemijskih reakcija što je uklonjeno u kombinaciji s *Finite-Rate* modelom koji za osnovne reakcije uključuje i Arrheniusovu kemijsku kinetiku. Osnovne kemijske reakcije izgaranja volatila porijeklom iz ugljena i biomase formulirane su uz pojednostavljenje da se, pritom nastali složeni ugljikovodici, mogu opisati općenitom formulom oblika $C_xH_vO_rS_mN_n$.

Opravdanim se, također, pokazalo i korištenje realističnog k- ε modela turbulencije koji dovoljno dobro opisuje turbulentno strujanje i vrtložne tokove unutar ložišta.

Kako se u ložištu prilikom izgaranja, značajan dio topline izmijeni zračenjem između čestica goriva i stijenki ložišta bilo je neophodno u matematički model uključiti i model zračenja. Zbog specifične geometrije ložišta to je učinjeno modelom diskretnih ordinata koji ujedno nudi i mogućnost modeliranja efekata zračenja nesivih plinova poput CO_2 i H_2O .

Pored procesa koji se odvijaju u plinovitoj (kontinuiranoj) fazi bilo je potrebno uzeti u obzir i procese na granici krute (diskretne) i plinovite faze. Njihov međusobni utjecaj (prijenos mase, količine gibanja i energije) modeliran je po Euler-Lagrangeovom pristupu uz pretpostavku da se

mlaz goriva može promatrati kao skup izgaranja pojedinačnih čestica koje su ili idealnog sfernog oblika (čestice ugljena) ili oblika cilindra (čestice biomase). Posebna pažnja je, pritom, posvećena modeliranju strujanja cilindričnih čestica biomase. Razvijeni model, osim postojećih sila na sfernu česticu, korigira silu otpora strujanju i uključuje silu uzgona na česticu u turbulentnoj struji. Model strujanja je, preko korisnički definiranih funkcija (UDF) pisanih u programskom jeziku C, uključen u korišteni software FLUENT.

Za model izgaranja čestica odabran je *Kinetics/Diffusion-Limited Rate* model koji uzima u obzir i brzinu oksidacije na površini čestice i brzinu difuzije kisika prema površini čestice te uzima sporiju od dviju brzina kao relevantnu.

U postprocesingu se, na temelju izračunatog polja brzina, temperatura i koncentracija spojeva, računaju koncentracije polutanata NO i SO₂.

Kako numeričko modeliranje posjeduje veliki broj ograničenja, pogotovo kada je riječ o kompleksnijim inženjerskim problemima kakvo je turbulentno strujanje s transportom i izgaranjem krutih čestica goriva u letu, potrebno je osigurati mjerenja kojima će se utvrditi razina vjerodostojnosti pojedinih numeričkih pristupa i modela. Problem numeričkog modeliranja je veliki broj ulaznih parametara o kojima ovise konačna rješenja. Potrebno je stoga detaljno poznavati prirodu modeliranog procesa sa svim početnim i rubnim uvjetima. Razvojem snažnih računala i stabilnih računalnih programa i modela, numeričko će modeliranje biti u stanju smanjiti potrebu za mjerenjima ali će eksperimentalna metoda još uvijek ostati neprikosnoveni alat za promatranje i kvantificiranje procesa izgaranja. Stoga je ovaj matemetički model izgaranja verificiran usporedbom dobivenih numeričkih rezultata s eksperimentalnim rezultatima iz relevantne literature (IFRF testno ložište) kako bi se dobila potvrda valjanosti odabranog modela turbulentnog izgaranja goriva u letu, te naknadno i usporedbom s dostupnim mjerenjima na AUCR laboratorijskom ložištu Mašinskog fakulteta Univerziteta u Sarajevu, kao potvrda valjanosti razvijenog modela strujanja cilindričnih čestica biomase.

Ispitivanja su provedena u nekoliko režima rada AUCR laboratorijskog ložišta. Kontrolom temperature stjenke preko električnih grijača održavano je konstantno temperaturno polje unutar ložišta u svakom od ispitnih režima. Istovremeno, regulacijom dobave sekundarnog i tercijarnog zraka postignut je željeni faktor pretička zraka za izgaranje izračunat. Na izlazu iz ložišta, u dimovodnoj cijevi, mjereni su udjeli O₂, CO₂, CO, NO i SO₂.

Prihvatljiva podudarnost rezultata uočena je i prilikom usporedbe s mjerenjima na testnom IFRF ložištu i prilikom usporedbe razvijenog modela strujanja cilindričnih čestica na AUCR laboratorijskom ložištu. Razvijeni model koji čestice biomase opisuje kao cilindre pokazao se, pri predviđanju koncentracija ugljik-monoksida i dušik-monoksida u dimnim plinovima izgaranja, točnijim od postojećih modela koji taj oblik opisuju sferom. S obzirom da je ispitivanje provedeno koristeći smjesu ugljena i biomase u omjeru mase 80:20 za pretpostaviti je da bi ta razlika bila i veća ukoliko bi se kao gorivo koristila smjesa s većim udjelom biomase ili pak čista biomasa.

Model je naknadno upotrebljen za analizu utjecaja geometrije čestice na procese izgaranja. Pokazalo se da geometrija ima značajan utjecaj na početak i brzinu stvaranja volatila kao i na izgaranje koksnog ostatka. Veći omjer duljine i promjera cilindra kojim je opisana čestica dovodi do povećanog raspršenja goriva nakon ulaska u domenu. Time se zona devolatilizacije proširuje, proces se ubrzava te je i mješanje volatila sa zrakom bolje. Izgaranje čestica modeliranih sferom dovodi do znatno slabijeg raspršenja te je koncentracija čestica u području osi ložišta povećana. Rezultat je izgaranje volatila u području siromašnom oksidantom što utječe na polje temperatura i koncentracija produkata izgaranja a dalje i na izgaranje samog koksnog ostatka.

Iz navedenog se može zaključiti da je teza postavljena na početku rada u potpunosti potvrđena te da je pri modeliranju izgaranja biomase u letu neophodno uključiti modele strujanja koji uzimaju u obzir stvarni oblik čestica goriva.

Razvojem računala rastu i mogućnosti primjene numeričkog modeliranja, tako da bi modeli koji su do jučer imali samo teorijsku osnovu ili bili primjenjivani samo na uzak krug problema, uskoro mogli biti korišteni pri simulacijama složenih procesa kao što su izgaranje u turbulentnoj struji. Primjer takvog modela je RSM model turbulentnog strujanja ili EDC model izgaranja koji uzima u obzir kompletan mehanizam reakcija koji ni do danas nije za izgaranje biomase sasvim poznat i uključivao bi nekoliko stotina kemijskih reakcija. Međutim, treba imati u vidu da predviđeni rezultati ne ovise samo o modelima turbulencije i izgaranja već i o ostalim modelima i pretpostavkama te o definiciji graničnih uvjeta. Pritom je teško razlikovati koji i u kolikoj mjeri, svaki od navedenih faktora, ima utjecaj na konačan rezultat. Spomenuti modeli ovise, naravno, i o vrsti i sastavu goriva, stoga bi pri modeliranju izgaranja u takvim slučajevima trebalo primijeniti i neke od složenijih modela devolatilizacije. Takvi modeli zahtjevaju detaljnije poznavanje strukture goriva i točan sastav volatila i to prvenstveno biomase čija složena struktura i sastav uvelike variraju ovisno o njenom tipu i porijeklu.

Znanstveni je doprinos ovoga rada u razvijenome matematičkom modelu strujanja i izgaranja cilindričnih čestica kojim je moguće točnije opisati proces izgaranja biomase u letu, predvidjeti raspodjelu temperatura i polja vektora brzina unutar ložišta i predvidjeti koncentracije produkata izgaranja biomase, nego što je to moguće s postojećim modelima strujanja koji čestice opisuju isključivo kao sfere. Rezultati dobiveni razvijenim modelom uspoređeni su s dostupnim rezultatima mjerenja na laboratorijskome ložištu AUCR (*Automatski upravljani cijevni reaktor*) postavljenom na Mašinskome fakultetu Univerziteta u Sarajevu, te je dobiveno zadovoljavajuće poklapanje. Razvijeni matematički model strujanja i izgaranja cilindričnih čestica biomase u letu predstavlja korak naprijed ka rješavanju problema optimizacije geometrije ložišta i parametara izgaranja s ciljem postizanja bolje efikasnosti pretvorbe kemijske energije u toplinsku, kao i zadovoljavanja ekoloških normi u vidu smanjenja emisije polutanata.

POPIS LITERATURE

- [1] Schneider, D.R., Duić, N., Bogdan, Ž., *Mapping the potential for decentralized energy generation based on renewable energy sources in the Republic of Croatia*, Vol. 32(9), 2007., 1731-1744.
- [2] Lu, H., *Experimental and modeling investigations of biomass particle combustion*, PhD Thesis, Department Chemical Engineering, Brigham Young University, December 2006.
- [3] Truelove, J.S., *The modelling of flow and combustion in swirled, pulverized-coal burners*, Symposium (International) on Combustion, Vol. 20(1), 1985., 523-530.
- [4] Choi, S., Kruger, C.H., *Modeling coal particle behavior under simultaneous devolatilization and combustion*, Combustion and Flame, Vol. 61(2), 1985., 131-144.
- [5] Jamaluddin, A.S., Truelove, J.S., Wall, T.F., *Modeling of coal devolatilization and its effect on combustion calculations*, Combustion and Flame, Vol. 62(1), 1985., 85-89.
- [6] Lixing, Z., Wenyi, L., Jian, Z., Zuolan, W., *Numerical modeling of three-dimensional flow field and two-dimensional coal combustion in a cylindrical combustor of co-flow jets with large velocity difference*, Symposium (International) on Combustion, Vol. 21(1), 1988., 257-264.
- [7] Abbas, T., Costen, P., Lockwood, F.C., Romo-Millares, C.A., *The effect of particle size* on NO formation in a large-scale pulverized coal-fired laboratory furnace: *Measurements and modeling*, Combustion and Flame, Vol. 93(3), 1993., 316-326.
- [8] Williams, A., Pourkashanian, M., Bish, P., Norman, J., *Modelling of coal combustion in low-NO_x p.f. flames*, Fuel, Vol. 73(7), 1994., 1006-1019.
- [9] Di Blasi, C., *Modeling and simulation of combustion processes of charring and noncharring solid fuels*, Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 19(1), 1993., 71-104.
- [10] Chan, W.C.R., Kelbon, M., Krieger, B.B., *Modelling and experimental verification of physical and chemical processes during pyrolysis of a large biomass particle*, Fuel, Vol. 64(11), 1985., 1505-1513.
- [11] Gradon, L., Grzybowski, P., Pilacinski, W., Analysis of motion and deposition of fibrous particles on a single filter element, Chemical Engineering Science, 43(6), 1988., 1253-1259.
- [12] Higashitani, K., Inada, N., Ochi, T., *Floc breakup along centerline of contractile flow to orifice*, Colloids and Surfaces, 56, 1991., 13-23.
- [13] Fan, F. G., Ahmadi, G., *Wall deposition of small ellipsoids from turbulent air flows-a Brownian dynamics simulation*, Journal Aerosol Science, 31(10), 2000., 1205-1229.
- [14] Blaser, S., Forces on the surface of small ellipsoidal particles immersed in a linear flow *field*, Chemical Engineering Science, 57, 2002., 515-526.
- [15] Yin, C., Rosendahl, L., Kær, S.K., Sørensen, H., *Modelling the motion of cylindrical particles in a nonuniform flow*, Chemical Engineering Science 58, 2003., 3489-3498.
- [16] Mandø, M., Yin, C., Sørensen, H., Rosendahl, L., On the modelling of motion of nonspherical particles in two-phase flow, 6th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2007, Leipzig, Germany, July 9-13, 2007.

- [17] Van de Weerdhof, M.W., *Modeling the pyrolysis process of biomass particles*, PhD Thesis, Eindhoven University of Technology, Department of mechanical engineering, Section Combustion Technology, 2010.
- [18] Janse, A.M.C., Westerhout, R.W.J., Prins, W., *Modelling of flash pyrolysis of a single wood particle*, Chemical Engineering and Processing 39, 2000., 239-252.
- [19] Peters B., Bruch, C., *Drying and pyrolysis of wood particles: experiments and simulation*, Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 70, 2003., 233-250.
- [20] Porteiro, J., Miguez, J.L., Granada, E., Moran, J.C., *Mathematical modelling of the combustion of a single wood particle*, Fuel Processing Technology 87, 2006., 169-175.
- [21] Backreedy, R.I., Fletcher, L.M., Jones, J.M., Ma, L., Pourkashanian, M., Williams, A., *Co-firing pulverised coal and biomass:a modeling approach*, Proceedings of the Combustion Institute 30, 2005., 2955-2964.
- [22] Haider, A., Levenspiel, O., *Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles*, Powder Technology 58, 1989., 63-70.
- [23] Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R. W., *Combustion*, Springer, Heidelberg, 1996.; 2nd edition, 1999., 3rd edition, 2001.
- [24] Glazer, A. N., Nikaido, H., *Microbial Biotechnology: Fundamentals of applied microbiology.*, Second Edition, Cambridge University Press, 2007.
- [25] Baxter, L. L., IEA Bioenergy Task 19 meeting, Goldcoast, Australia, 2000.
- [26] Bellais, M., *Modelling of the Pyrolysis of Large Wood Particles*, Ph.D. Thesis, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 2007.
- [27] Horttanainen, M.V.A., Saastamoinen, J. J., Sarkomaa, P.J., *Ignition front propagation in packed beds of wood particles*, IFRF Combustion Journal, Article Number 200003, May 2000.
- [28] Fredlund, B., *Modelling of Heat and Mass Transfer in Wood Structures During Fire*, Fire Safety Journal 20, 1993., 39-69.
- [29] Larfeldt, J., Leckner, B., Melaaen, M.C., *Modelling and measurements of drying and pyrolysis of large wood particles*, In A.V. Bridgwater, editor, Progress in Thermochemical Biomass Conversion, Black-well Science, Oxford, 2000., 1046-1060.
- [30] Branca, C., Di Blasi, C., *Global kinetics of wood char devolatilization and combustion*, Energy & Fuels 17, 2003., 1609-1615.
- [31] Zhou, H., Jensen, A.D., Glarborg, P., Jensen, P.A., Kavaliauskas, A., *Numerical modeling* of straw combustion in a fixed bed, Fuel, Vol. 84, 2005., 389-403.
- [32] Demirbas, A., *Combustion characteristics of different biomass fuels*, Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 30, 2004., 219-230.
- [33] Shafizadeh, F., DeGroot, W.F., *Combustion characteristics of cellulosic fuels. Thermal* uses and properties of Carbohydrates and lignins, Academic Press, New York, 1976., 1-17.
- [34] Skreiberg, Ø. *Theoretical and Experimental Studies on Emissions from Wood Combustion*, PhD thesis, Norwegian University of Science and Technology, ITEV report 97:03, 1997.

- [35] Hajaligol, M.R., Howard, J.B., Longwell, J.P., Peters, W.A., *Product compositions and kinetics for rapid pyrolysis of cellulose*, Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development 21(3), 1982., 457-465.
- [36] Nunn, T.R., Howard, J.B., Longwell, J.P., Peters, W.A., *Product compositions and kinetics in the rapid pyrolysis of milled wood lignin*, Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development 24(3), 1985., 844-852.
- [37] Nunn, T.R., Howard, J.B., Longwell, J.P., Peters, W.A., *Product compositions and kinetics in the rapid pyrolysis of sweet gum hardwood*, Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development 24(3), 1985., 836-844.
- [38] De Jong, W., Pirone, A., Wojtowicz, M.A., *Pyrolysis of Miscanthus Giganteus and wood pellets: TG-FIR analysis and reaction kinetics*, Fuel 82(9), 2003., 1139-1147.
- [39] Di Blasi, C., Signorelli, G., Di Russo, C., Rea, G., Product distribution from pyrolysis of wood and agricultural residues, Industrial & Engineering Chemistry Research 38(6), 1999., 2216-2224.
- [40] Hirschfelder, J.O., et. al., *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York, 1964.
- [41] Schneider, D. R., *Istraživanje mogućnosti redukcije SO₃ pri izgaranju teškog loživog ulja*, PhD thesis, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 2002.
- [42] FLUENT 6.3 User's Guide, FLUENT Inc., September 29, 2006.
- [43] Hinze, J.O., *Turbulence*, McGraw-Hill Publishing Co., New York, 1975.
- [44] Launder, B.E., Spalding, D.B., *Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, London, 1972.
- [45] Jones, W.P., Whitelaw, J.H., *Calculation methods for reacting turbulent flows: A review,* Combustion and Flame, Vol. 48, 1982., 1-26.
- [46] Wilcox, D.C., *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries, Inc., La Canada, CA, 1993.
- [47] Shih, T.H., Liou, W.W., Shabbir, A., Yang, Z., Zhu, J., A New k-ε Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows - Model Development and Validation, Computers Fluids, Vol. 24(3), 1995., 227-238.
- [48] Kim, S.E., Choudhury, D., Patel, B., Computations of Complex Turbulent Flows Using the Commercial Code, Proceedings of the ICASE/LaRC/AFOSR Symposium on Modeling Complex Turbulent Flows, Hampton, Virginia, 1997.
- [49] Poinsot, T., Veynante, D., *Theoretical and Numerical Combustion*, R.T. Edwards, Inc. Philadelphia, PA, USA, 2001.
- [50] Magnussen, B.F., Hjertager, B.H., *On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion*, 16th Symposium on Combustion, The Combustion Institute, 1976.
- [51] Eaton, A.M, Smoot, L.D., Hill, S.C., Eatough, C.N., *Components, Formulations, Solutions, Evaluation, and Application of Comprehensive Combustion Models*, Progress in Energy and Combustion Science 25, 1999., 387-436.
- [52] Morsi, S.A., Alexander, A.J., *An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems*, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 55, 1972., 193-208.

- [53] Chhabra, R.P., Agarwal, L., Sinha, N.K., *Drag on non-spherical particles: an evaluation of available methods*, Powder Tecnology 101, 1999., 288-295.
- [54] Ganser, G.H., A rational approach to drag prediction of spherical and non-spherical particles, Powder Technology. Vol. 77, 1993., 143-152.
- [55] Hoerner, S. F., *Fluid-dynamics drag*, New York, Hoerner Fluid Dynamics, Published by the author, 1965.
- [56] Ranz, W.E., Marshall Jr., W.R., *Evaporation from Drops*, Part I. Chemical Engineering Progress, Vol. 48, 1952., 141-146.
- [57] Ranz, W.E., Marshall Jr., W.R., *Evaporation from Drops*, Part II. Chemical Engineering Progress, Vol. 48, 1952., 173-180.
- [58] Zahirovic, S., Scharler, R., Obernberger, I., Advanced CFD modelling of pulversed biomass combustion, Science in Thermal and Chemical Biomass Conversion, AV Bridgwater and DGB Boocock (Eds.) CPL Press, Newbury Berks (UK), 2006., 267-283.
- [59] Badzioch, S., Hawksley, P.G.W., *Kinetics of Thermal Decomposition of Pulverized Coal Particles*, Ind. Eng. Chem. Process Design and Development 9, 1970., 521-530.
- [60] Kobayashi, H., Howard, J.B., Sarofim, A.F., *Coal Devolatilization at High Temperatures*, In 16th Symp. (International) on Combustion, The Combustion Institute, 1976.
- [61] Baum, M.M, Street, P.J., *Predicting the Combustion Behavior of Coal Particles*, Combust. Sci. Tech., 3(5), 1971., 231-243.
- [62] Field, M.A., *Rate of Combustion Of Size-Graded Fractions of Char from a Low Rank Coal between 1200 K-2000 K*, Combustion and Flame, 13, 1969., 237-252.
- [63] *Combustion Modeling Case Studies*, Fluent Software Training, Combustion, 2005.
- [64] Boyd, R.K., Kent, J.H., *Three-dimensional furnace computer modeling*, In 21st Symp. (International) on Combustion, The Combustion Institute, 1986., 265-274.
- [65] Cheng, P., Two-Dimensional Radiating Method, AIAA Journal, Vol. 2, 1964., 1662-1664.
- [66] Siegel, R., Howell, J.R., *Thermal Radiation Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington D.C., 1992.
- [67] Chui, E.H., Raithby, G.D., *Computation of Radiant Heat Transfer on a Non-Orthogonal Mesh Using the Finite-Volume Method*, Numerical Heat Transfer, Part B, Vol. 23, 1993., 269-288.
- [68] Raithby, G.D., Chui, E.H., A Finite-Volume Method for Predicting a Radiant Heat Transfer in Enclosures with Participating Media, Journal of Heat Transfer, Vol. 112, 1990., 415-423.
- [69] Murthy, J.Y., Mathur, S.R., A Finite Volume Method For Radiative Heat Transfer Using Unstructured Meshes, AIAA-98-0860, 1998.
- [70] Coppalle, A., Vervisch, P., *Total Emissivities of High-Temperature Flames*, Combustion and Flame, Vol. 49, 1983., 101-108.
- [71] Smith, T.F., Shen, Z.F., Friedman, J.N, *Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model*, Journal of Heat Transfer, Vol. 104, 1982., 602-608.
- [72] Denison, M.K., Webb, B.W., A Spectral Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary RTE Solvers, Journal of Heat Transfer, Vol. 115, 1993., 1002-1012.
- [73] Glassman, I., Yetter, R.A., Combustion, 4th edition, Academic Press, Elsevier, Inc. 2008.

- [74] Hanson, R.K., Salimian, S., *Survey of Rate Constants in H/N/O Systems*, Combustion Chemistry, Springer-Verlag, New York, 1984.
- [75] Warnatz, J., *NO_x Formation in High Temperature Processes*, University of Stuttgart, Germany, 2001.
- [76] Baulch, D.L. et al. *Evaluated Kinetic Data for Combustion Modelling*, Journal of Physical and Chemical Reference Data, 21(3), 1992.
- [77] Westbrook, C., Dryer, F., *Chemical Kinetic Modelling of Hydrocarbon Combustion*, Progress in Energy and Combustion Science, 1984.
- [78] DeSoete, G.G., Overall Reaction Rates of NO and N₂ Formation from Fuel Nitrogen, 15th International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, 1975., 1093-1102.
- [79] Backmier, F., Eberius, K.H., Just, T., Combustion Science and Technology 7, 1973., 77.
- [80] Poinsot, T., Veynante, D., *Theoretical and Numerical Combustion*, R.T. Edwards, Inc. Philadelphia, PA, USA, 2001.
- [81] Lorenz, H., Carrea, E., Tamura, M., Haas, J., *The role of char surface structure development in pulverized fuel combustion*, Fuel 79, 2000., 1161-1172.
- [82] *Uredba o graničnim vrijednostima emisija onečišćujućih tvari u zrak iz stacionarnih izvora*, Narodne novine br.21, 2007.
- [83] Kramlich, J.C., *The Fate and Behavior of Fuel-Sulfur in Combustion Systems*, PhD thesis, Washington State University, Washington, USA, 1980.
- [84] Perera, S.A.L., Schowalter, D.G., *A SO_x Formation Model for Industrial CFD Applications*, Clearwater Coal Technology Conference, 2006.
- [85] Hunter, S.C., *Formation of SO₃ in gas turbines*, Transactions of the ASME 104, 1982., 44-51.
- [86] Patankar, S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere, New York, 1994.
- [87] Versteeg, H.K., Malalasekera, W., An Introduction to Computational Fluid Dynamics, the Finite Volume Method, Longman Group Ltd., Essex, 1995.
- [88] Vascellari, M., Cau, G., Sviluppo e validazione di Modellistica di processi di Gassificazione e combustione con Ricircolo dei prodotti in diverse Tipologie di reattori, Report RSE/2009/157, Ente per le Nuove tecnologie, l'Energia e l'Ambiente - ENEA, 2009.
- [89] Peters, A.A., Weber, R., *Mathematical Modeling of a 2,4 MW Swirling Pulverized Coal Flame*, Combustion Science and Technology 122, 1997., 131-182.
- [90] Weber, R., Dugue, J., Sayre, A., Peters, A.A., Visser, B.M., *Measurements and Computations of Quarl Zone Fluid and Chemistry in a Swirling Pulverized Coal Flame*, Technical Report IFRF doc. F36/v/20, International Flame Research Foundation, 1992.
- [91] Kazagić, A., Smajević, I., *Experimental investigation of ash behavior and emissions during combustion of Bosnian coal and biomass*, Energy 32, 2007., 2006-2016.
- [92] Blondeau, J., Jeanmart, H., *Biomass pyrolysis in pulverized-fuel boilers: Derivation of apparent kinetic parameters for inclusion in CFD codes*, Proceedings of the Combustion Institute 33, 2011., 1787-1794.

- [93] Kazagić, A., Smajević, I., Synergy effects of co-firing wooden biomass with Bosnian coal, Energy 34, 2009., 699-707.
- [94] Hostikka, S., McGrattan, K., *Large Eddy Simulation of Wood Combustion*, International Interflam Conference, 9th Proceedings, vol.1, 2001., 17-19.
- [95] Murphy, J.J, Shaddix, C.R., *Combustion kinetics of coal chars in oxygen-enriched environments*, Combustion and Flame 144, 2006., 710-729.
- [96] Bryden, K.M., Ragland, K.W., Ruthland, C.J., *Modeling thermally thick pyrolysis of wood*, Biomass and Bioenergy, Vol.22, 2002., 41-53.
- [97] Belosevic, S., Sijercic, M., Oka, S., Tucakovic, D., *Three-dimensional modeling of utility boiler pulverized coal tangentially fired furnace*, International Journal of Heat and Mass Transfer 49, 2006., 3371-3378.
- [98] Hankalin, V., Ahonen, T., Raiko, R., *On thermal properties of a pyrolysing wood particle*, Finnish-Swedish Flame Days, Naantali, Finland, Jan. 2009.
- [99] Mill, C.J., *Pyrolysis of Fine Coal Particles at High Heating Rate and Pressure*, PhD Thesis, University of New South Wales, Sydney, Australia, 2000.

POPIS OZNAKA I SIMBOLA

a	– Koeficijent polinoma interpolacije [-]
a	– Koeficijent temperaturne vodljivosti [m ² /s]
Α	– Površina [m ²]
A_i	– Predeksponencijalni faktor [1/s]
a_{ε}	– faktor utjecaja emisivnosti [-]
b_{ε}	– Temperaturni koeficijent polinoma [-]
С	– Molna koncentracija [kmol/m ³]
C_p	– Specifični toplinski kapacitet pri konstantnom tlaku [J/kg K]
Ċ	– Koeficijent modela turbulencije [-]
С	– Integracijska konstanta [-]
C_L	– Koeficijent sile uzgona [-]
C_D	– Koeficijent otpora strujanju [-]
C_{sw}	– Koeficijent bubrenja čestice [-]
d	– promjer [m]
D	- Koeficijent difuzije $[m^2/s]$
Ε	– Energija [J]
Ε	– Emisija zračenja [W/m ³]
E_a	– Energija aktivacije [J/kmol]
f	– Udio u smjesi [-]
Ĵč	– Faktor raspršenja zračenja čestice [-]
F	- Sila po jedinici mase $[m/s^2]$
G	– Gibbsova slobodna energija [J]
G_k	– Produkcija turbulentne kinetičke energije [J/m ³ s]
h	– Specifična entalpija [J/kg]
Η	– Ukupna specifična entalpija [J/kg]
H_d	– Donja ogrjevna moć [J/kg]
H_{g}	– Gornja ogrjevna moć [J/kg]
H_{lat}	– Latentna toplina stvaranja volatila [J/kg]
Ι	– Intenzitet zračenja [W/m ²]
J	- Difuzijski tok [kg/m ² s]
Κ	– Konstanta kemijske ravnoteže [varira]
k	– Konstanta brzine kemijske reakcije [varira]
k	– Turbulentna kinetička energija [J/kg]
k_s	– Visina neravnina stijenke [m]
k_s^+	– Bezdimenzijska visina neravnina stijenke [-]
l	– Karakteristična veličina vrtloga [m]
l	– Količina zraka za izgaranje [kg/kg], [m _n ³ /kg]
L	– Duljina [m]
т	– Masa [kg]
ṁ	– Maseni protok [kg/s]
М	– Molna masa [kmol/kg]
n	– Količina tvari [kmol]
n	– Koeficijent loma zračenja [-]
Ν	– Atomski broj [-]
Ν	– Broj segmenata podjele [-]
N_f	– Broj ploha konačnog volumena [-]

N_I	– Broj sivih plinova [-]
$N_{\rm S}$	– Ukupan broj sastojaka u smjesi plinova [-]
p	– Tlak [Pa]
p_i	– Parcijalni tlak [Pa]
ģ	– Specifični toplinski tok [J/m ² s]
\hat{O}	– Toplina [J]
ò	– Toplinski tok [I/s]
Q	
r	- Polumjer [m] Uniformano distribuiran služejni broj
r	- Uniformino distribuiran siucajni broj
S	- Specificita entropija [J/Kg K]
S ₹	– Duijina puta [iii] Valtor amioro zračanio [1]
S	- vektor sinjera zračenja [-]
S C	- izvorni cian jednadzbe ocuvanja
$S_{i,j}$	- Tenzor brzine deformacije [1/s]
1	- Temperatura [K]
1	- vnjenie [s]
u, v, w	- Brzina [m/s]
u V	- Bezaimenzijska brzina [-]
V V	- volumen [m] Kaližina vlažnih nlinava izagovanja [kmal/ka]
V_{vl}	- Kolicina vlaznih plinova izgaranja [kmol/kg]
V _s	- Koncina sunni piniova izgaranja [kinoi/kg]
X V	- Koordinata pravokutnog koordinatnog sustava [III]
Λ V	- Monin udio [kinol/kinol]
1 .,+	- Mascill uulo [Kg/Kg] Pazdimanziiska udalianast od stijanka zida []
y a	- Dezumenzijska udaljenost od sujenke zida [-] Napadni kut [rad]
a	- Koeficijent apsorncije [1/m]
a	- Koeficijent prijelaza topline konvekcijom $[W/m^2 K]$
a.	- Koeficijent prijelaza topinie konvekcijoli [w/m K] - Koeficijent apsorpcije i-tog sivog plina [s^2/kg]
α_l	– Faktor utiecaja emisivnosti [-]
R_{ε}	– Empirijske konstante modela izgaranja [-]
р Г	- Difuzivnost [kg/m s]
δ	– Deblijna graničnog sloja [m]
с Е	– Keficijent emisije [-]
E E	- Turbulentna disipacija $[m^2/s^3]$
6	– Kolmogorova duliina vrtloga [m]
ζ	– Normalno distribuiran slučaini broi [-]
, n	– Eksponent kemiiske reakcije [-]
n	– Faktor iskoristivosti [-]
θ	– Polarni kut [rad]
κ	– Katmanova konstanta [-]
λ	– Koeficiient toplinske vodljivosti [W/m K]
λ	– Pretičak zraka [-]
μ	– Dinamička viskoznost [Pa·s]
μ μ	– Kemijski potencijal [J/mol ²]
v	– Kinematska viskoznost [m ² /s]
v	– Stehiometrijski koeficijent [-]
П	– Coleov parametar [-]
ρ	– Gustoća [kg/m ³]
R	– Brzina odvijanja kemijske reakcije [varira]

- σ_{ij} Tenzor naprezanja [N/m²]
- $\sigma_{\check{c}}$ Ekvivalentni faktor raspršenja zračenja čestice [1/m]
- σ_s Koeficijent raspršenja zračenja [1/m]
- τ Tangencijalno naprezanje [N/m²]
- τ_e Vrijeme trajanja turbulentnog vrtloga [s]
- τ_i Vrijeme zakašnjenja paljenja [s]
- τ_{ij} Tenzor viskoznih naprezanja [N/m²]
- τ_L Lagrangeovo vrijeme integracije [s]
- τ_p Karakteristično vrijeme plamena [s]
- τ_{pr} Vrijeme prolaska čestice kroz vrtlog [s]
- τ_{rel} Vrijeme relaksacije čestice [s]
- ϕ Faktor oblika [-]
- Φ Azimutni kut [rad]
- Φ, ϕ Skalar [-]
- Φ Fazna funkcija [-]
- ω Kutna brzina [rad/s]
- ω Promjena koncentracije kemijskog spoja [kg/m³s]
- Ω Prostorni kut [srad]
- Ω_{ij} Tenzor brzine deformacije [1/s]

Donji indeksi

0	– Početno stanje
b	– Povratna reakcija
Č	– Diskretna faza (čestica goriva)
f	– Polazna reakcija
f	– Ploha konačnog volumena
g	– Gorivo
Η	– Entalpija
i,j,k	– Indeksi
izl	– Izlazno stanje
k	– Koksni ostatak
max	– Maksimum
min	– Minimum
Ν	 Susjedni konačni volumen
р	– Promptni NO _x
Р	– Produkt kemijske reakcije
Р	 Promatrani konačni volumen
r	– Kemijska reakcija
R	– Reaktant kemijske reakcije
R	– Zračenje
ref	 Referentno stanje
t	– Termalni NO _x
t	– Turbulencija
uk	– Ukupno
ul	– Ulazno stanje
v	– Volatili
Z.	– Zrak

Gornji indeksi

- 0 Standardno stanje
- *b* Izgoreno
- *m* Srednja vrijednost
- *u* Neizgoreno

Bezdimenzijske značajke

- Da Damköhlerov broj
- Ka Karlovitzev broj
- Le Lewisov broj
- Nu Nusseltov broj
- Pe Pecletov broj
- Pr Prandtlov broj
- Re Reynoldsov broj
- Sc Schmidtov broj
- σ_t Turbulentni Prandtl-Schmidtov broj

Konstante

- g Ubrzanje sile gravitacije [m/s²]
- $I_{i,j}$ Jedinični tenzor [-]
- $\tilde{N_L}$ Avogadrov broj [-]
- *R* Opća plinska konstanta [J/kmol K]
- σ Stefan-Boltzmannova konstanta [W/m² K⁴]

POPIS SLIKA

Slika 1.1 Omjer površina nesferičnih i sferičnih čestica istog volumena kao	
funkcija omjera dimenzija nesferičnih čestica	3
Slika 1.2. Izračunata putanja cilindrične čestice i rezultirajuće polje brzina strujanja fluida	6
Slika 1.3. Utjecaj veličine čestica na otpuštanje volatila u funkciji vremena	7
Slika 1.4. Gubitak mase čestica različitog polumjera u funkciji vremena	7
Slika 1.5. Utjecaj oblika čestice biomase na zagrijavanje i otpuštanje volatila	8
Slika 1.6. Predviđene putanje čestica smjese ugljena i biomase	9
Slika 2.1. Adijabatska temperatura izgaranja za odabrani ugljen i biomasu prema	16
Slika 3.1. Kemijska struktura celuloze	19
Slika 3.2. Kemijska struktura nekih tipičnih hemiceluloza	20
Slika 3.3. Najčešći monomeri lignina	20
Slika 3.4. Model kemijske strukture lignina	21
Slika 3.5. Faze izgaranja čestice biomase manjih dimenzija kod kontinuirane dobave zraka	22
Slika 3.6. Mogući mehanizam degradacije celuloze pirolizom	24
Slika 3.7. Termogravimetrijska analiza četiri vrste drva	25
Slika 3.8. Režimi izgaranja koksnog ostatka	27
Slika 3.9. Utjecaj oblika i veličine čestica na vrijeme pretvorbe i udjele koksnog ostatka, katrana i lakih plinova	t
tijekom pirolize biomase	28
Slika 4.1. Vremenske fluktuacije i vremenska srednja vrijednost kod turbulentnog strujanja	32
Slika 4.2. Profil brzina turbulentnog graničnog sloja	39
Slika 4.3. Ovisnost konstante zakona stijenke o neravninama krute stijenke	40
Slika 4.4. Napadni kut i aerodinamičke sile na cilindričnu česticu	47
Slika 4.5. Izmjena topline, mase i količine gibanja između diskretne i kontinuirane faze	55
Slika 4.6. Prikaz fazne funkcije	57
Slika 4.7. Izmjena topline zračenjam	57
Slika 4.8. Diskretizacija sfere	58
Slika 4.9. Rubni uvjet sivog difuznog zida	61
Slika 4.10. Reakcije dušika iz goriva s međuproduktom HCN	65
Slika 4.11. Reakcije dušika iz goriva s međuproduktom NH ₃	65
Slika 4.12. Korišteni rubni uvjeti	71
Slika 4.13. lokalni cilindrični koordinatni sustav	72
Slika 4.14. Upotreba periodičkog rubnog uvjeta za definiranje vrtložnog gibanja unutar cilindrične domene	74
Slika 5.1. Blok dijagram ciklusa SIMPLE familije algoritama	78
Slika 6.1a. Geometrija IFRF-No.1 ložišta	80
Slika 6.1b. Geometrija plamenika IFRF ložišta	80
Slika 6.2. Rubni uvjeti IFRF ložišta	82
Slika 6.3. Profil aksijalne brzine strujanja na $z = 0$ m od plamenika	83
Slika 6.4. Profil aksijalne brzine strujanja na $z = 0,25$ m od plamenika	83
Slika 6.5. Profil aksijalne brzine strujanja na $z = 0,5$ m od plamenika	84
Slika 6.6. Profil aksijalne brzine strujanja na z = 0,85 m od plamenika	84
Slika 6.7. Profil tangencijalne brzine strujanja na $z = 0$ m od plamenika	84
Slika 6.8. Profil tangencijalne brzine strujanja na $z = 0,25$ m od plamenika	84
Slika 6.9. Profil tangencijalne brzine strujanja na $z = 0.5$ m od plamenika	84
Slika 6.10. Profil tangencijalne brzine strujanja na $z = 0.85$ m od plamenika	84
Slika 6.11. Profil temperatura na $z = 0$ m od plamenika	85
Slika 6 12. Profil temperatura na $z = 0.25$ m od plamenika	85
Slika 6 13. Profil temperatura na $z = 0.5$ m od plamenika	85
Slika 6.14. Profil temperatura na $z = 0.85$ m od plamenika	05
Slika 6.15. Profil temperatura na $z = 0.05$ m od plamenika	05
Slika 6.16. Profil temperatura na $\zeta = 1.25$ m od planicilika	0J 05
Sinka 0.10. From temperatura na $\zeta = 1.75$ ili 00 plantenika	0.J 0 <i>6</i>
Siika 6.18. Volumnii udio ugljik-dioksida u sunini piniovima izgaranja na z = 0.05 m od plamenika	80
Siika 6.10. Volumni uulo ugijik-uloksida u suliini piinovima izgaranja na z = 0.5 m od plamenika	00
siika 0.19. voluinini uuto ugijik-utoksida u sunim piinovima izgaranja na z = 0,5 m od piamenika	06
siika 0.20. voluinini uulo ugijik-uloksida u sunim piinovima izgaranja na Z = 0,85 m od piamenika Slika 6.21. Volumni udio ugliik diokoida u subim plinovima izgaranja na Z = 1.25 m od piamenika	80
siika 0.21. voluinini uulo ugijik-uloksida u sunim piinovima izgaranja na Z = 1,25 m od plamenika	80
siika 0.22. voluinni uulo ugijik-uloksida u sunim piinovima izgaranja na z = 1,95 m od plamenika	80

Slika 6.23. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na $z = 0$ m od plamenika	87
Slika 6.24. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,25 m od plamenika	87
Slika 6.25. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,5 m od plamenika	87
Slika 6.26. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,85 m od plamenika	87
Slika 6.27. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 1,25 m od plamenika	87
Slika 6.28. Volumni udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 1,95 m od plamenika	87
Slika 6.29. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0 m od plamenika	88
Slika 6.30. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,25 m od plamenika	88
Slika 6.31. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,5 m od plamenika	88
Slika 6.32. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 0,85 m od plamenika	88
Slika 6.33. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 1,25 m od plamenika	88
Slika 6.34. Volumni udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja na z = 1,95 m od plamenika	88
Slika 6.35. Laboratorijsko ložište Mašinskog fakulteta Univerziteta u Šarajevu	90
Slika 6.36. Shematski prikaz laboratorijskog ložišta	90
Slika 6.37. WIKA Pt10%Rh-1600°C termoparovi raspoređeni u četiri grijane zone	91
Slika 6.38. Kontrolni ormar sa Siemens Simatic PLC uređajima i TESTO analizator dimnih plinova	91
Slika 6.39. Plamenik laboratorijskog ložišta s dovodima primarnog, sekundarnog i tercijarnog zraka	91
Slika 6.40. Model ložišta i plamenika	92
Slika 6.41. Pravokutna razdioba mierenih veličina	98
Slika 6.42. Oblik i veličina čestica biomase	. 102
Slika 6.43a. Izračunate putanje čestica biomase modelirane oblikom cilindra dulijne 150 um i 300 um	. 103
Slika 6.43b. Izračunate putanje čestica biomase modelirane oblikom sfere volumena jednakog čestici	. 104
Slika 6.44. Izračunato polie brzina stvarania volatila iz čestica biomase opisanih cilindrom i sferom	. 104
Slika 6.45. Udio kisika i ugliik-dioksida u suhim plinovima izgarania pri $\lambda = 1.2$	105
Slika 6.46. Udio uglijk-monoksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda = 1.2$. 105
Slika 6.47. Udio ugljik-monoksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda = 1.1$	105
Slika 6 48. Udio dušik-monoksida u subim plinovima izgaranja pri $\lambda = 1.2$	106
Slika 6.49. Udio dušik-monoksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda = 1.1$. 106
Slika 6 50. Udio sumpor-dioksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda = 1.2$	107
Slika 6.51. Udio sumpor dioksida u suhim plinovima izgaranja pri $\lambda = 1.1$	107
Slika 6 52. Stupani vezivania sumpora <i>Sb</i> kao funkcije procesne temperature	107
Slika 6 53a Model strujanja sfernih čestica ekvivalentnog promiera $d_{\lambda} = 74 \mu\text{m}$ pri $T = 1673 \text{K}$ i $\lambda = 1.2$	108
Slika 6.53b Model strujanja cilindričnih čestica faktora oblika $L/D = 3$ ($L = 135$ µm) pri $T = 1673$ K i $\lambda = 1.2$	108
Slika 6.550. Model strujanja cilindričnih čestica faktora oblika $L/D = 10$ ($L = 300 \text{ µm}$), pri $T = 1673 \text{ K}$ i $\lambda = 1.2$ Slika 6.530. Model strujanja cilindričnih čestica faktora oblika $L/D = 10$ ($L = 300 \text{ µm}$), pri $T = 1673 \text{ K}$ i $\lambda = 1.2$	100
Slika 6.530. Model strujanja cilindričnih čestica faktora oblika $L/D = 22$ ($L = 538$ µm), pri $T = 1673$ K i $\lambda = 1.2$.	109
Slika 6.54. Porast površine cilindričnih čestica s porastom omiera I/D	110
Slika 6.55. Promiena temperature uzduž osi ložišta $(T - 1673 \text{ K i } 2 - 12)$	110
Slika 6.56. Maseni udio CO uzduž osi ložišta $(T - 1673 \text{ K i } 2 - 1.2)$	111
Slika 6.57. Maseni udio NO uzduž osi ložišta $(T - 1673 \text{ K i } \lambda - 1.2)$	111
Slika 6.58. Utiecaj temperature na otnuštanje volatila cilindričnih čestica $L = 150 \text{ µm}$ i $L = 300 \text{ µm}$ $(L/D = 10)$	112
Slika 6.50. Stupani konverzije koksnog ostatka	112
	. 113

POPIS TABLICA

Tablica 1.1. Usporedba karakteristika biomase i ugljena	2
Tablica 3.1. Izmjereni sastav plinovitih produkata pirolize biomase	
Tablica 4.1. Koeficijenti standardnog $k-\varepsilon$ modela turbulencije	
Tablica 4.2. Koeficijenti realističnog $k-\varepsilon$ modela turbulencije	
Tablica 4.3. Reducirani mehanizam oksidacije sumpora	
Tablica 6.1. Svojstva ugljena za IFRF ložište	81
Tablica 6.2. Rubni uvjeti IFRF ložišta	81
Tablica 6.3. Sastav goriva	
Tablica 6.4. Distribucija veličina čestica ispitanog goriva, maseni udio [%]	
Tablica 6.5. Mjerni instrumenti korišteni u eksperimentu	
Tablica 6.6. Granična devijacija za termoparove WIKA korištene u eksperimentu	
Tablica 6.7. Tehnički podaci o senzorima analizatora plinova TESTO 350	
Tablica 6.8. Standardna nesigurnost mjerenja emisije NO za režim K80S20 – 1140°C, $\lambda = 1,1$	
Tablica 6.9. Parametri modela devolatilizacije	
Tablica 6.10. Izračun broja atoma u molekuli pseudovolatila biomase	

Tablica 6.11. Izračun broja atoma u molekuli pseudovolatila ugljena	100
Tablica 6.12. Standardne entalpije formacija	100

POPIS PRILOGA

Prilog P1. Koeficijenti polinoma za izračun specifičnog toplinskog kapaciteta	132
Prilog P2. Izvorni kôd	133
Prilog P3. Fizikalna svojstva goriva	136
Prilog P4. Nacrt plamenika	137
Prilog P5 Rezultati mierenia	138
r mog r or rezultur injerenju	100

PRILOZI

Prilog P1. Koeficijenti polinoma za izračun specifičnog toplinskog kapaciteta

 $c_{p,i} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4$ [J/kgK]

Spoj	Temp.int	erval [K]	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
CO	300	1000	968,38959	0,44878768	-1,1522170E-03	1,6568820E-06	-7,3463688E-10
	1000	5000	897,93047	0,42823159	-1,6713920E-04	3,0234433E-08	-2,0513697E-12
CO_2	300	1000	429,92876	1,87447350	-1,9664850E-03	1,2972513E-06	-3,9999562E-10
	1000	5000	841,37645	0,59323915	-2,4151675E-04	4,5227268E-08	-3,1531304E-12
N_2	300	1000	979,04298	0,41796390	-1,1762790E-03	1,6743942E-06	-7,2562945E-10
	1000	5000	868,62291	0,44162954	-1,6872294E-04	2,9967875E-08	-2,0043857E-12
O ₂	300	1000	834,82635	0,29295801	-1,4956369E-04	3,4138852E-07	-2,2783585E-10
	1000	5000	960,75228	0,15941258	-3,2708852E-05	4,6127634E-09	-2,9528327E-13
SO ₂	300	1000	377,85870	1,05164440	-8,9638195E-04	4,3205361E-07	-1,1391317E-10
	1000	5000	681,95091	0,25678391	-1,0647790E-04	2,0458964E-08	-1,4541688E-12
H_2O	300	1000	1563,07650	1,60375440	-2,9327839E-03	3,2161007E-06	-1,1568266E-09
	1000	5000	1233,23350	1,41052330	-4,0291411E-04	5,5427718E-08	-2,9498240E-12

*Izvor: [42]

Spoj	Temp.interval [K]		a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
Volatili	282	3000	524,0	1,840	-3,760E-04	-	-
*Izvor:[04	1						

*Izvor:[94]

Kruta faza	Temp.int	erval [K]	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
Ugljen ¹	273	1273	768,63	0,4890	-	-	-
	1500	3000	1500,00	-	-	-	-
Biomasa ²	273	523	540,20	2,6000	-	-	-
	523	673	3294,70	-2,6667	-	-	-
	673	1083	1089,60	0,6098	-	-	-
	1083	3000	1750,00	-	-	-	-

*Izvor: 1) [97] 2) [98]

Prilog P2. Izvorni kôd

```
#include "udf.h"
#include "dpm.h"
#include "surf.h"
/* P USER REAL(p,0) - AOA - Napadni kut */
/* P_USER_REAL(p,1) - x-komponenta vektora rel. brzine */
/* P_USER_REAL(p,2) - y-komponenta vektora rel. brzine */
/* P_USER_REAL(p,3) - z-komponenta vektora rel. brzine */
/* P_USER_REAL(p,4) - x-komponenta vektora osi čestice */
/* P_USER_REAL(p,5) - y-komponenta vektora osi čestice */
/* P_USER_REAL(p,6) - z-komponenta vektora osi čestice */
DEFINE_DPM_DRAG(F_str_cilindar, Re, p)
{
     real K1, K2, Sf, CD, Drag, K3, A_eff, AOA, dn, d_ekv, L_c, D_c;
     real AR=RP_Get_Real("biomasa/ar");
     L_c=P_DIAM(p) *pow((2*AR*AR/3),(1./3.));
     D_c=L_c/AR;
     /* Čestice biomase (cilindar) */
     if (0==strcmp(p->injection->name, "injection-200") || (0==strcmp(p-
     >injection->name, "injection-100")))
     {
         Sf=pow(18/AR,(1./3.))/(2+1/AR);
         AOA=P_USER_REAL(p,0)*M_PI/180.;
         d_ekv=P_DIAM(p);
         A_eff=M_PI*pow(D_c, 2)/4*sqrt(pow(cos(AOA), 2)+pow(4*AR/M_PI, 2)*pow(
         sin(AOA),2));
         dn=2*sqrt(A_eff/M_PI);
         K1=1./(dn/(3*d ekv)+2.0/3.0*pow(Sf,-0.5));
         K2=pow(10,(1.8148*pow(-log10(Sf),0.5743)));
         K3=Re*K1*K2/100.;
         CD=24/K3*(1+0.1118*pow(K3,0.6567))+0.4305/(1+3305/K3);
         CD=CD*K2;
         Drag=18*CD*Re/24;
     }
     else Drag=SphereDragCoeff(Re); /* Čestice ugljena (sfera) */
    return(Drag);
}
DEFINE_DPM_DRAG(F_str_Haider, Re, p)
{
     real b1, b2, b3, b4, Sf, CD, Drag;
    Sf=0.6; /* Faktor oblika */
     /* Čestice biomase (sfera-faktor oblika=0.62) */
     if (0==strcmp(p->injection->name, "injection-200") || (0==strcmp(p-
         >injection->name, "injection-100")))
     {
         b1=exp(2.3288-6.4581*Sf+2.4486*pow(Sf,2));
         b2=0.0964+0.5565*Sf;
         b3=exp(4.905-13.8944*Sf+18.4222*pow(Sf,2)-10.2599*pow(Sf,3));
         b4=exp(1.4681+12.2584*Sf-20.7322*pow(Sf,2)+15.8855*pow(Sf,3));
         CD=24/Re*(1+b1*pow(Re,b2))+b3*Re/(b4+Re);
         Drag=18*CD*Re/24;
     }
```

```
else Drag=SphereDragCoeff(Re); /* Čestice ugljena (sfera) */
    return(Drag);
}
DEFINE_DPM_SCALAR_UPDATE(rel_brzina,c,t,initialize,p)
{
     real R_brz, AOA;
    real R_v[3], R_brz_vekt[3], P_z_os[3];
     AOA=(90.-P_USER_REAL(p,0))*M_PI/180.;
     /* Vektor osi čestice */
    P_z_os[0]=P_USER_REAL(p,3);
     P_z_os[1]=P_USER_REAL(p, 4);
    P_z_os[2]=P_USER_REAL(p, 5);
     /* Vektor relativne brzine čestice */
     R_v[0] = C_u(c, t) - (P_VEL(p)[0]);
     R_v[1] = C_V(c, t) - (P_VEL(p)[1]);
     R_v[2] = C_W(c, t) - (P_VEL(p)[2]);
    R_brz_vekt[0] = ABS(R_v[0]);
     R_brz_vekt[1] = ABS(R_v[1]);
    R_brz_vekt[2] = ABS(R_v[2]);
     /* Magnituda vektora */
    R_brz=NV_MAG(R_v);
    P\_USER\_REAL(p,1)=R\_v[0];
     P_USER_REAL(p, 2) = R_v[1];
    P\_USER\_REAL(p,3)=R\_v[2];
     /* Izračun napadnog kuta */
    AOA=acos(NV_DOT(R_brz_vekt,P_z_os)/(MAX(NV_MAG(R_brz_vekt),DPM_SMALL)));
    P_USER_REAL(p, 0) = AOA*180./M_PI;
}
DEFINE_DPM_BODY_FORCE(F_uzgon, p, i)
{
     real F_uzgon, A_eff2, mag_vekt, L_c, D_c;
    real P_z_os[3], Vekt1[3], Vekt2[3], R_v[3];
    real AR=RP_Get_Real("biomasa/ar");
    real k_lift=RP_Get_Real("biomasa/lift_koef");
    real AOA=P USER REAL(p,0);
     cell t c=RP CELL(&p->cCell);
    Thread *t=RP THREAD(&p->cCell);
     /* Čestice biomase (cilindar) */
     if (0==strcmp(p->injection->name, "injection-200") || (0==strcmp(p-
          >injection->name, "injection-100")))
     {
         L_c=P_DIAM(p) * pow((2*AR*AR/3), (1./3.));
         D_c=L_c/AR;
         A_eff2=M_PI*pow(D_c,2)/4*sqrt(pow(cos(AOA),2)+pow(4*AR/M_PI,2)*pow
          (sin(AOA),2));
          /* Vektor osi čestice */
          P_z_os[0] = P_USER_REAL(p, 3);
```

```
P_z_os[1]=P_USER_REAL(p, 4);
    P_z_os[2] = P_USER_REAL(p, 5);
    /* Vektor relativne brzine čestice */
    R_v[0] = P_USER_REAL(p, 1);
    R_v[1]=P_USER_REAL(p,2);
    R_v[2]=P_USER_REAL(p,3);
    NV_CROSS(Vekt1,P_z_os,R_v);
    NV_CROSS(Vekt2,Vekt1,R_v);
    mag_vekt=0.5*(k_lift*C_R(c,t)*A_eff2)/P_MASS(p)*(NV_DOT(P_z_os,R
    _v)/NV_MAG(R_v));
    /* komponente vektora sile uzgona */
    if (i==0) F_uzgon=mag_vekt*Vekt2[0];
    if (i==1) F_uzgon=mag_vekt*Vekt2[1];
    if (i==2) F_uzgon=mag_vekt*Vekt2[2];
}
else F_uzgon=0.0; /* Čestice ugljena (sfera) */
return F_uzgon;
```

}

Prilog P3. Fizikalna svojstva goriva

	BIOMASA		UGLJEN		
$d_{\check{c}}$	150 μm; 300 μm		$d_{\check{c}}$	40 μm; 150 μm	
$ ho_{\check{c},0}$	400 kg/m^3	[94]	$ ho_{\check{c},0}$	1200 kg/m^3	[95]
$ ho_k$	120 kg/m^3	[94]	ρ_k	700 kg/m^3	[95]
$\lambda_{\check{c}}$	$\begin{array}{r} -0,617 + 3,8 \cdot 10^{-3} \cdot T - 4 \cdot 10^{-6} \cdot T^{2} \\ \text{W/mK} (T \le 663 \text{ K}) \\ 4,429 \cdot 10^{-2} + 1,477 \cdot 10^{-4} \cdot T^{-4} \\ \text{W/mK} (T > 663) \end{array}$	[98]	$\lambda_{\check{c}}$	0,23 W/mK $(T \le 750 \text{ K})$ -2,32 + 3,4·10 ⁻³ ·T W/mK (T > 750 K)	[99]
C_{sw}	0,8	(5.109)	C_{sw}	1,0	(5.109)
T_{v}	282 K		T_{v}	282 K	
$A_{1,300 \mu \mathrm{m}} \ E_{1,300 \mu \mathrm{m}}$	742 s ⁻¹ 2,83 \cdot 10 ⁷ J/kmol	[92]	$egin{array}{c} A_1 \ E_1 \ lpha_1 \ lpha_1 \end{array}$	2,0·10 ⁵ s ⁻¹ 1,046·10 ⁸ J/kmol 0,3	[60]
$A_{1,150 \mu \mathrm{m}} \ E_{1,150 \mu \mathrm{m}}$	19427 s ⁻¹ 3,94·10 ⁷ J/kmol	[92]	$egin{array}{c} A_2 \ E_2 \ lpha_2 \ lpha_2 \end{array}$	1,3·10 ⁴ s ⁻¹ 1,674·10 ⁷ J/kmol 1,0	[60]
$egin{array}{c} eta_1 \ eta_2 \end{array}$	4 0,5	[88]	$egin{array}{c} eta_1 \ eta_2 \end{array}$	4 0,5	[88]
Α	$4,41\cdot10^{11}$ s ⁻¹	[88]	Α	$4,41\cdot10^{11}$ s ⁻¹	[88]
E	$1,2553.10^{8} \text{ J/kmol}$	[88]	Ε	1,2553·10 ⁸ J/kmol	[88]
C_1	$5 \cdot 10^{-12} \text{ kg/m}^2 \text{sPa}$	[63]	C_1	$5 \cdot 10^{-12}$ kg/m ² sPa	[63]
C_2	6,7 kg/m ² sPa	[63]	C_2	6,7 kg/m ² sPa	[63]
E	$1,138 \cdot 10^8$ J/kmol	[63]	E	1,138·10 ⁸ J/kmol	[63]
3	0,9	[63,96]	З	0,9	[63,96]




Prilog P5. Rezultati mjerenja

ISPITNO GORIVO	K80-S20		
ISPITNI REŽIM	960 °C		
Naziv parametra	Oznaka	Vrijednost	Jedinica
ULAZNI PARAMETRI PRO	DCESA		
Vrijeme trajanja opitnog režima na jednoj temperaturi	t _{or}	45	min
Protok goriva	m_g	1	kg/h
Koeficijent viška zraka za sagorijevanje	λ	1,2	-
Protok zraka za sagorijevanje – dotok sa puhaljke	V_z	83	l/min
Protok zraka primara	V _{prim}	25	l/min
Protok zraka sekundara/tercijara	V _{sec/terc}	58	l/min
Protok dimnih plinova pri normalnim uvjetima	V	5,5	m_n^3/h
TEMPERATURE I PRITISAK			
Vanjska temperatura zraka	t_z	4	°С
Temperatura u laboratoriji na udaljenosti 2 m od	t_o	6,3	°С
AUCR			
Temperatura plašta reaktora u pojasu grijane zone I	t_p	26,5	°С
Ulazna temperatura rashladne vode	t _{ulv}	8	°С
Izlazna temperatura rashladne vode	t _{izv}	17,6	°С
Podtlak u reaktoru	p_v	20	Pa
PARAMETRI DIMNIH PLINOVA			
Koeficijent viška zraka u dimovodnoj cijevi	λ_{dp}	1,4	-
Sadržaj O ₂	O_2	6	%
Sadržaj CO ₂	CO_2	13,7	%
Sadržaj CO	CO	66	ррт
Sadržaj NO	NO	359	ррт
Sadržaj NO ₂	NO_2	3	ррт
Sadržaj SO ₂	SO_2	565	ррт
EMISIJE POLUTANATA SVEDENE NA 6% O ₂			
Emisija NO	E_{NO}	480,8	mg/m_n^3
Emisija NO ₂	E_{NO_2}	6,16	mg/m_n^3
Emisija SO ₂	E_{SO_2}	1614,29	mg/m_n^3

ISPITNO GORIVO		K80-S20	
ISPITNI REŽIM	1140 °C		
Naziv parametra	Oznaka	Vrijednost	Jedinica
ULAZNI PARAMETRI PR	OCESA		
Vrijeme trajanja opitnog režima na jednoj	t _{or}	45	min
temperaturi			
Protok goriva		1	kg/h
Koeficijent viška zraka za sagorijevanje	λ	1,2 / 1,1	-
Protok zraka za sagorijevanje – dotok sa puhaljke	V_z	83 / 76	l/min
Protok zraka primara	V _{prim}	25/25	l/min
Protok zraka sekundara/tercijara	V _{sec/terc}	58/51	l/min
Protok dimnih plinova pri normalnim uvjetima	V	5,5/5,0	m_n^3/h
TEMPERATURE I PRITISAK			
Vanjska temperatura zraka	t_z	4	°С
Temperatura u laboratoriji na udaljenosti 2 m od	to	6,5	°С
AUCR			
Temperatura plašta reaktora u pojasu grijne zone I	t_p	33	°С
Ulazna temperatura rashladne vode	t _{ulv}	8	°С
Izlazna temperatura rashladne vode	t_{izv}	20,2	°С
Podtlak u reaktoru	p_v	20	Pa
PARAMETRI DIMNIH PL	INOVA		
Koeficijent viška zraka u dimovodnoj cijevi	λ_{dp}	1,43 / 1,28	-
Sadržaj O ₂	O_2	6,3 / 4,5	%
Sadržaj CO ₂	CO_2	13,4 / 15,1	%
Sadržaj CO	CO	87/89	ррт
Sadržaj NO	NO	629 / 604	ррт
Sadržaj NO ₂	NO_2	18/10	ррт
Sadržaj SO ₂	SO_2	913 / 1114	ррт
EMISIJE POLUTANATA SVEDENE NA 6% O ₂			
Emisija NO	E_{NO}	860 / 735	mg/m_n^3
Emisija NO ₂	E_{NO_2}	37/19	mg/m_n^3
Emisija SO ₂	E_{SO_2}	2662 / 2893	mg/m_n^3

ISPITNO GORIVO	K80-S20		
ISPITNI REŽIM	1250 °C		
Naziv parametra	Oznaka	Vrijednost	Jedinica
ULAZNI PARAMETRI PR	OCESA	Ÿ	
Vrijeme trajanja opitnog režima na jednoj	t _{or}	45	min
temperaturi			
Protok goriva	m_g	1	kg/h
Koeficijent viška zraka za sagorijevanje	λ	1,2 / 1,1	-
Protok zraka za sagorijevanje – dotok sa puhaljke	V_z	83 / 76	l/min
Protok zraka primara	V _{prim}	25/25	l/min
Protok zraka sekundara/tercijara	V _{sec/terc}	58/51	l/min
Protok dimnih plinova pri normalnim uvjetima	V	5,5/5,0	m_n^3/h
TEMPERATURE I PRITISAK			
Vanjska temperatura zraka	t_z	4	°С
Temperatura u laboratoriji na udaljenosti 2 m od	to	4,7	°С
AUCR			
Temperatura plašta reaktora u pojasu grijne zone I	t_p	35	°С
Ulazna temperatura rashladne vode	t_{ulv}	8	°С
Izlazna temperatura rashladne vode	t_{izv}	23,1	°С
Podtlak u reaktoru	p_v	20	Pa
PARAMETRI DIMNIH PL	INOVA		
Koeficijent viška zraka u dimovodnoj cijevi	λ_{dp}	1,40 / 1,30	-
Sadržaj O_2	O_2	6,0/4,9	%
Sadržaj CO ₂	CO_2	13,8/14,7	%
Sadržaj CO	CO	134 / 148	ррт
Sadržaj NO	NO	690/680	ррт
Sadržaj NO ₂	NO_2	22 / 18	ррт
Sadržaj SO ₂	SO_2	1029/1252	ррт
EMISIJE POLUTANATA SVEDE	ENE NA 69	% O ₂	
Emisija NO	E_{NO}	924 / 849	mg/m_n^3
Emisija NO ₂	E_{NO2}	45/34	mg/m_n^3
Emisija SO ₂	E_{SO_2}	2940/3332	mg/m_n^3

ISPITNO GORIVO	K80-S20		
ISPITNI REŽIM	1400 °C		
Naziv parametra	Oznaka	Vrijednost	Jedinica
ULAZNI PARAMETRI PR	OCESA		
Vrijeme trajanja opitnog režima na jednoj	t _{or}	45	min
temperaturi			
Protok goriva	m_g	1	kg/h
Koeficijent viška zraka za sagorijevanje	λ	1,2 / 1,1	-
Protok zraka za sagorijevanje – dotok sa puhaljke	V_z	83 / 76	l/min
Protok zraka primara	V_{prim}	25/25	l/min
Protok zraka sekundara/tercijara	V _{sec/terc}	58/51	l/min
Protok dimnih plinova pri normalnim uvjetima	V	5,5/5,0	m_n^3/h
TEMPERATURE I PRITISAK			
Vanjska temperatura zraka	t_z	9	°С
Temperatura u laboratoriji na udaljenosti 2 m od	to	8,5	°С
AUCR			
Temperatura plašta reaktora u pojasu grijne zone I		40	°С
Ulazna temperatura rashladne vode	t_{ulv}	9	°С
Izlazna temperatura rashladne vode	t_{izv}	29	°С
Podtlak u reaktoru	p_v	20	Pa
PARAMETRI DIMNIH PLINOVA			
Koeficijent viška zraka izmjeren u dimovodnoj cijevi	λ_{dp}	1,28 / 1,23	-
Sadržaj O ₂	O_2	4,6/3,9	%
Sadržaj CO ₂	CO_2	15,0715,6	%
Sadržaj CO	CO	121 / 128	ррт
Sadržaj NO	NO	769 / 750	ррт
Sadržaj NO ₂	NO_2	19/17	ррт
Sadržaj SO ₂	SO_2	1034 / 1066	ррт
REFERENTNE EMISIJE POLUTANATA	SVEDEN	E NA 6% O ₂	
Emisija NO	E_{NO}	942 / 881	mg/m_n^3
Emisija NO ₂	E_{NO2}	35/31	mg/m_n^3
Emisija SO ₂	E_{SO_2}	2702 / 2672	mg/m_n^3

ISPITNO GORIVO	K80-S20		
ISPITNI REŽIM	1550 °C		
Naziv parametra	Oznaka	Vrijednost	Jedinica
ULAZNI PARAMETRI PR	OCESA	*	
Vrijeme trajanja opitnog režima na jednoj	t _{or}	45	min
temperaturi			
Protok goriva	m_g	1	kg/h
Koeficijent viška zraka za sagorijevanje	λ	1,2	-
Protok zraka za sagorijevanje – dotok sa puhaljke	V_z	83	l/min
Protok zraka primara	V_{prim}	25	l/min
Protok zraka sekundara/tercijara	V _{sec/terc}	58	l/min
Protok dimnih plinova pri normalnim uvjetima	V	5,5	m_n^3/h
TEMPERATURE I PRITISAK			
Vanjska temperatura zraka	t_z	9	°С
Temperatura u laboratoriji na udaljenosti 2 m od	t_o	10,3	°С
AUCR			
Temperatura plašta reaktora u pojasu grijne zone I	t_p	48	°С
Ulazna temperatura rashladne vode	t _{ulv}	9	°С
Izlazna temperatura rashladne vode	t_{izv}	34	°С
Podtlak u reaktoru	p_{v}	30	Pa
PARAMETRI DIMNIH PL	INOVA		
Koeficijent viška zraka u dimovodnoj cijevi	λ_{dp}	1,16	-
Sadržaj O_2	O_2	2,8	%
Sadržaj CO ₂	CO_2	16,6	%
Sadržaj CO	CO	113	ррт
Sadržaj NO	NO	1051	ррт
Sadržaj NO ₂	NO_2	24	ррт
Sadržaj SO ₂	SO_2	1368	ррт
REFERENTNE EMISIJE POLUTANATA	SVEDEN	E NA 6% O ₂	
Emisija NO	E_{NO}	1160,1	mg/m_n^3
Emisija NO ₂	E_{NO2}	40,6	mg/m_n^3
Emisija SO ₂	$\overline{E_{SO_2}}$	3221,35	mg/m_n^3

KRATAK ŽIVOTOPIS

Mr.sc. Igor Bonefačić, dipl.ing. rođen je 13. studenog 1974. u Rijeci. Nakon završene osnovne škole u Rijeci, upisuje Gimnaziju Andrije Mohorovičića, smjer matematika i informatika, gdje je i maturirao 1993.g. s vrlo dobrim uspjehom. Nakon završene srednje škole upisuje Tehnički fakultet Sveučilišta u Rijeci. Diplomirao je 1999.g. izradom diplomskog rada pod naslovom *Hidrostatski prigon viličara* pod mentorstvom v. pred. mr. sc. Željka Orlića. Iste godine upisuje poslijediplomski studij na Tehničkom fakultetu u Rijeci, smjer termoenergetika. U ožujku 2000. zapošljava se kao pripravnik u brodogradilištu "3. MAJ" Rijeka. Nakon polaganja pripravničkog ispita, postavljen je na mjesto inženjera specijaliste za obradu limova i izradu elemenata trupa gdje radi do veljače 2001.g. kada se zapošljava se na Tehničkom fakultetu kao znanstveni novak na znanstvenom projektu *Primjena obnovljivih izvora energije u priobalnom području*. Od 2006.g. radi na znanstvenom projektu *Istraživanje i razvoj komponenata i sustava obnovljivih izvora energije*, čiji je voditelj red. prof. dr. sc. Bernard Franković. Tijekom 2008.g. izabran je u suradničko zvanje asistent.

Od ljetnog semestra akademske godine 2000./2001.g. uključen je u nastavne aktivnosti Zavoda za termodinamiku i energetiku Tehničkog fakulteta Sveučilišta u Rijeci. Tijekom 2007. g. održava vježbe iz kolegija *Nauka o toplini I i Nauka o toplini II* na sveučilišnom studiju strojarstva, *Termodinamika BG* na sveučilišnom studiju brodogradnje, *Termodinamika i energetika* i *Energija i energetski procesi* na sveučilišnom studiju elektrotehnike, zatim, iz kolegija *Toplina* na stručnom preddiplomskom studiju strojarstva i brodogradnje.

Igor Bonefačić, dipl. ing. strojarstva je 29. lipnja 2005. godine na Tehničkom fakultetu Sveučilišta u Rijeci obranio magistarski rad pod naslovom: *Termodinamička analiza prijelaza topline i prijenosa tvari u ložištu procesne peći*, na poslijediplomskom znanstvenom studiju, smjer termoenergetika te je time stekao titulu magistra znanosti. U svom magistarskom radu analizirao je utjecaje različitih parametara na proces izgaranja u ložištu peći na teško loživo ulje koristeći numeričke metode. 2008. godine prijavljuje temu doktorske disertacije pod nazivom "Analiza utjecaja veličine i oblika čestica na izgaranje biomase" na Tehničkom fakultetu Sveučilišta u Rijeci.

Suradnik je istraživačkog tima na tehnologijskom istraživačko-razvojnom projektu *Vjetroturbina u optimiziranoj sapnici* čiji je voditelj red. prof. dr. sc. Ivan Viličić. U okviru rada na navedenom projektu učestvovao je pri izradi tehničke dokumentacije pri izradi prototipa vjetroturbine u optimiziranoj sapnici, te pri izradi radioničke dokumentacije za izradu komponenata vjetroturbine te je trenutno uključen u ispitivanje prototipa u realnim uvjetima rada. U razdoblju od 2005. do 2009. godine, u suradnji s poduzećem BIMONT d.d., aktivno sudjeluje u eksperimentalnom ispitivanju vjetroturbine u optimiziranoj sapnici postavljenoj na prostoru BIMONT-a na Kukuljanovu.

U svojstvu autora i koautora objavio je 7 znanstvenih radova i jedan je trenutno u pripremi. Služi se engleskim jezikom u govoru i pismu. Oženjen je i otac jednog djeteta.

PODACI O AUTORU I DOKTORSKOJ DISERTACIJI

1. AUTOR

Ime i prezime:

Datum i mjesto rođenja: Naziv fakulteta, studija i godina završetka dodiplomskog studija: Naziv fakulteta, smjera i godina završetka poslijediplomskog studija:

Sadašnje zaposlenje:

2. DOKTORSKA DISERTACIJA

Naslov:

Broj stranica, slika, tablica i bibliografskih podataka: Znanstveno polje i grana: Voditelj rada: Fakultet na kojem je obranjen:

3. OBRANA I OCJENA

Datum prijave teme: Datum predaje rada: Datum prihvaćanja ocjene rada:

Sastav povjerenstva za ocjenu:

Datum obrane:

Sastav povjerenstva za obranu:

Datum promocije:

Igor Bonefačić

13. studeni 1974., Rijeka

Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet, 1999.

Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet, termoenergetika, 2005.

Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet

Analiza utjecaja oblika i veličine čestica biomase pri izgaranju

143, 95, 17, 99 Strojarstvo, Procesno energetsko strojarstvo Red.prof.dr.sc. Bernard Franković, dipl.ing. Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet

19. prosinca 2007. 20. ožujka 2012. 25. svibnja 2012.

Red.prof.dr.sc. Zmagosalv Prelec, dipl.ing. Red.prof.dr.sc. Bernard Franković, dipl.ing. Red.prof.dr.sc. Vladimir Medica, dipl.ing. Red.prof.dr.sc. Željko Bogdan, dipl.ing. Red.prof.dr.sc. Anica Trp, dipl.ing.

17. srpnja 2012.

Red.prof.dr.sc. Zmagosalv Prelec, dipl.ing. Red.prof.dr.sc. Bernard Franković, dipl.ing. Red.prof.dr.sc. Vladimir Medica, dipl.ing. Red.prof.dr.sc. Željko Bogdan, dipl.ing. Red.prof.dr.sc. Anica Trp, dipl.ing. Oznaka: DD

Tek.broj:

ANALIZA UTJECAJA OBLIKA I VELIČINE ČESTICA BIOMASE PRI IZGARANJU Igor Bonefačić

Sveučilište u Rijeci Tehnički fakultet Hrvatska

Ključne riječi: Izgaranje u letu, biomasa, ložište, oblik čestica, prijelaz topline, prijenos tvari, numerički model

Sažetak:

U disertaciji je prikazana numerička analiza procesa izgaranja smjese ugljena i biomase u letu. Razvijen je trodimenzijski model izgaranja koji pri određivanju putanja čestica biomase uzima u obzir njen cilindrični oblik. Takav pristup pokazuje točnije rezultate od dosadašnjih modela koji su oblik čestice biomase smatrali sfernim što je dokazano i usporedbom s dostupnim mjerenjima. Mjerenja su vršena na laboratorijskom ložištu s kontroliranom temperaturom stjenke. Analiza je pokazala da utjecaj oblika čestice na proces izgaranja raste s porastom njene veličine. Također, pokazalo se da geometrija cilindričnih čestica značajno utječe na otpuštanje volatila te potom i na izgaranje.

Rad nije objavljen.

Mentor:	Red. prof. dr. sc. Bernard Franković, dipl. ing.
Komentor:	Red. prof. dr. sc. Vladimir Medica, dipl. ing.
Povjerenstvo za ocjenu	 Red. prof. dr. sc. Zmagosalv Prelec, dipl. ing. Red. prof. dr. sc. Bernard Franković, dipl. ing Red. prof. dr. sc. Vladimir Medica, dipl. ing. Red. prof. dr. sc. Željko Bogdan, dipl. ing. Red. prof. dr. sc. Anica Trp, dipl. ing.
Povjerenstvo za obranu	 Red. prof. dr. sc. Zmagosalv Prelec, dipl. ing. Red. prof. dr. sc. Bernard Franković, dipl. ing Red. prof. dr. sc. Vladimir Medica, dipl. ing. Red. prof. dr. sc. Željko Bogdan, dipl. ing. Red. prof. dr. sc. Anica Trp, dipl. ing.

Datum obrane: 17.07.2012.

Datum promocije:

Rad je pohranjen na Tehničkom fakultetu Sveučilišta u Rijeci.

(143, 95, 17, 99, hrvatski jezik)

No:

ANALYSIS OF PARTICLE SHAPE AND SIZE INFLUENCE ON BIOMASS COMBUSTION

Igor Bonefačić

University of Rijeka Faculty of Engineering Croatia

Key words: Pulverized combustion, biomass, furnace, particle shape, heat transfer, mass transfer, numerical model

Summary:

Numerical analysis of co-firing pulverized coal and biomass is explored in the thesis.

3D-model of combustion in laboratory furnace was created where the shape of biomass particles was estimated as cylinder. Developed model shows better agreement with experimental data than the existing models which estimates particles as spheres. Experimental measurements were conducted on laboratory furnace with controllable wall temperature. Analysis of the results shows that the influence of the particle size increases with the size of the particle. Also, the geometry of the cylindrical particles strongly influences the process of devolatilization and subsequently the combustion.

This thesis has not been published.

Mentor:	D. Sc. B. ME. Bernard Franković, Prof.
Comentor:	D. Sc. B. ME. Vladimir Medica, Prof.
Advisors:	 D. Sc. B. ME. Zmagoslav Prelec, Prof. D. Sc. B. ME. Bernard Franković, Prof. D. Sc. B. ME. Vladimir Medica, Prof. D. Sc. B. ME. Željko Bogdan, Prof. D. Sc. B. ME. Anica Trp, Prof.
Reviewers:	 D. Sc. B. ME. Zmagoslav Prelec, Prof. D. Sc. B. ME. Bernard Franković, Prof. D. Sc. B. ME. Vladimir Medica, Prof. D. Sc. B. ME. Željko Bogdan, Prof. D. Sc. B. ME. Anica Trp, Prof.

Presentation: 17.07.2012.

Degree conferred:

This thesis is disposed in the library of the University of Rijeka, Faculty of Engineering. (143, 95, 17, 99, croatian language)