

Simulacija izgaranja vodika

Ivić, Martina

Master's thesis / Diplomski rad

2024

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Rijeka, Faculty of Engineering / Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:190:218142>

Rights / Prava: [Attribution 4.0 International](#)/[Imenovanje 4.0 međunarodna](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-09-01**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the University of Rijeka, Faculty of Engineering](#)



SVEUČILIŠTE U RIJECI

TEHNIČKI FAKULTET

Diplomski sveučilišni studij strojarstva

Diplomski rad

SIMULACIJA IZGARANJA VODIKA

Rijeka, srpanj 2024.

Martina Ivić

0069086540

SVEUČILIŠTE U RIJECI

TEHNIČKI FAKULTET

Diplomski sveučilišni studij strojarstva

Diplomski rad

SIMULACIJA IZGARANJA VODIKA

Mentor: Prof. dr. sc. Lado Kranjčević

Komentorica: dr. sc. Marta Alvir

Rijeka, srpanj 2024.

Martina Ivić

0069086540

Rijeka, 20. ožujka 2024.

Zavod: **Zavod za mehaniku fluida i računalno inženjerstvo**
Predmet: **Dinamika fluida**
Grana: **2.15.04 mehanika fluida**

ZADATAK ZA DIPLOMSKI RAD

Pristupnik: **Martina Ivić (0069086540)**
Studij: Sveučilišni diplomski studij strojarstva
Modul: Računarska mehanika i inženjerstvo

Zadatak: **Simulacija izgaranja vodika**

Opis zadatka:

Koristiti softver OpenFOAM za simulaciju izgaranja vodika unutar geometrije oblika mikrocilindra. Zadatak uključuje postavljanje simulacijskog okruženja, definiranje geometrije i parametara za 2D i 3D slučajeve. Provesti seriju simulacija varirajući masene protoke smjese vodika i analizirati kako promjene u masenom protoku utječu na proces izgaranja. Potrebno je usporediti rezultate 2D i 3D simulacija, identificirati ključne razlike i zaključiti o prednostima i nedostacima svake dimenzionalnosti u kontekstu simulacije izgaranja vodika. Završni rad treba sadržavati detaljan opis postupka simulacije, usporedbu rezultata i zaključak temeljen na analizi.

Rad mora biti napisan prema Uputama za pisanje diplomskih / završnih radova koje su objavljene na mrežnim stranicama studija.

Zadatak uručen pristupniku: 20. ožujka 2024.

Mentor:

Predsjednik povjerenstva za
diplomski ispit:

prof. dr. sc. Lado Kranjčević

izv. prof. dr. sc. Igor Bonefačić

dr. sc. Marta Alvir (komentor)

Izjava o samostalnoj izradi rada

Izjavljujem da sam samostalno izradila diplomski rad pod nazivom "Simulacija izgaranja vodika".

Rijeka, srpanj 2024.

Martina Ivić

Zahvala

Zahvaljujem svojoj komentorici dr. sc. Marti Alvir na savjetima i vodstvu prilikom izrade ovog rada. Posebno zahvaljujem obitelji i Mateu na neizmjerljivoj podršci tijekom studiranja.

Sadržaj

1	UVOD	1
2	SIMULACIJA IZGARANJA VODIKA	3
2.1	Vodik	3
2.2	Numeričke simulacije	4
2.2.1	Princip rada	4
2.2.2	Modeliranje turbulencije	5
2.2.3	<i>OpenFOAM</i>	6
2.2.4	<i>ANSYS Fluent</i>	7
3	MATEMATIČKI MODEL TURBULENTNOG IZGARANJA	8
3.1	Svojstva plinovitih smjesa	8
3.2	Jednadžbe očuvanja za fluid	9
3.2.1	Jednadžba kontinuiteta	9
3.2.2	Jednadžba očuvanja količine gibanja	10
3.2.3	Jednadžba očuvanja mase kemijskih vrsta	10
3.2.4	Jednadžba očuvanja energije fluida	11
3.3	Jednadžbe očuvanja za kruto tijelo	12
3.4	Međusobno djelovanje fluida i krutog tijela	12
3.5	Izgaranje prethodno izmiješanih plinova	13
3.6	RNG $k-\varepsilon$ turbulentni model	14
3.7	EDC model izgaranja	16
4	NUMERIČKA SIMULACIJA PROCESA IZGARANJA	18

4.1	Ulazni podaci	18
4.2	Izrada geometrije i numeričke mreže	19
4.3	Postavljanje <i>OpenFOAM</i> slučaja	20
4.3.1	Direktorij <i>0</i>	20
4.3.2	Direktorij <i>chemkin</i>	22
4.3.3	Direktorij <i>constant</i>	24
4.3.4	Direktorij <i>system</i>	25
4.4	Pokretanje simulacije	26
5	REZULTATI <i>OpenFOAM</i> SIMULACIJA	28
5.1	Usporedba 2D i 3D modela za različite masene protoke	28
5.2	Produkti	35
6	SIMULACIJA IZGARANJA KORISTEĆI <i>ANSYS FLUENT</i>	38
6.1	Postavke simulacije	38
6.2	Usporedba <i>ANSYS Fluent</i> i <i>OpenFOAM</i> rezultata	38
6.3	Usporedba s rezultatima iz literature	42
7	ZAKLJUČAK	44
	Bibliografija	45
	Popis slika	47
	Popis tablica	49
	Sažetak	50

1 UVOD

Važan i često korišten proces u inženjerstvu je izgaranje goriva, a koristi se za razne svrhe, primjerice kod klasičnih motora s unutarnjim izgaranjem, u komorama izgaranja elektrana, plinskim turbinama, bojlerima, pećima ili raketnim motorima. Zbog važnosti i široke primjene procesa izgaranja, potrebno je moći predvidjeti temperaturu, oblik i veličinu plamena te emisiju štetnih plinova kako bi se postojeći sustavi optimizirali. Zbog toga što je obuhvaćeno turbulentno strujanje fluida, prijenos topline, kemijske reakcije te ostali fizikalni i kemijski procesi, proces izgaranja smatra se kompleksnim i zahtjevnim za promatranje. Postoji više vrsta izgaranja, a neki od tih procesa su izgaranje plinovitih i tekućih goriva, izgaranje raspršenih čestica (engl. *spray combustion*) te izgaranje krutih i usitnjenih goriva [1].

Zbog sve većih zahtjeva za korištenjem čiste energije, kao alternativa fosilnim gorivima se predlaže vodik zbog svojih svojstava, a s obzirom na veliki interes za vodik kao gorivo budućnosti, razvoj sigurnih i efikasnih sustava za izgaranje je neophodan.

Računarska dinamika fluida (engl. *Computational Fluid Dynamics* - CFD), predstavlja analizu sustava na temelju računalnih simulacija. Spomenuti sustavi uključuju strujanje fluida, prijenos topline i s time povezane pojave kao što su kemijske reakcije. Za provođenje simulacija koriste se različiti matematički modeli i numeričke metode kako bi se sustavi mogli analizirati u prostoru i vremenu. Numeričke simulacije pružaju široke mogućnosti primjene u industrijskim i znanstvenim problemima. Neka od područja u kojima se koristi CFD analiza su aerodinamika letjelica i vozila, motori s unutarnjim izgaranjem i plinske turbine, hidrodinamika brodova, kemijsko i procesno inženjerstvo, inženjerstvo okoliša te u biomedicini. CFD simulacije su alat koji omogućava proučavanje različitih procesa, a zatim i njihovo optimiziranje. Zbog aktualnosti teme vodika kao goriva i moguće široke primjene izgaranja, rezultati numeričkih simulacija izgaranja vodika su predstavljeni u velikom broju znanstvenih članaka. Simulacijama je moguće analizirati karakteristike promatranih procesa, kao što su efikasnost izgaranja, karakteristike ispušnih plinova, temperatura stijenke komore izgaranja te temperatura i brzina plamena, bez provođenja skupih

eksperimentalnih ispitivanja.

Zadatak ovog diplomskog rada je postaviti numeričku simulaciju procesa izgaranja vodika sa zrakom koristeći *open-source* softver *OpenFOAM*. Geometrija unutar koje se odvija proces izgaranja je oblika mikrocilindra čije su dimenzije definirane prema članku autora Pashchenko, D. [2], a koriste se i drugim znanstvenim radovima [3], [4]. Potrebno je provesti proračun za dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu domenu zbog značajnog utjecaja dimenzionalnosti na rezultate [2]. Također, potrebno je provesti simulacije za različite masene protoke na ulazu u domenu. Prva vrijednost masenog protoka koji će biti zadan, uzeta je iz prethodno navedenih članaka, a druga vrijednost masenog protoka je iznos dvostruko manji od prve vrijednosti. Nakon provođenja numeričkih simulacija, potrebno je usporediti razlike kod rezultata 2D i 3D domene te opisati utjecaj masenog protoka na rezultate. Prvenstveno će se promatrati razlike u brzini strujanja plinova, u obliku plamena, maksimalnim postignutim temperaturama te prostornoj raspodjeli masenog udjela vodika u domeni. Prije definiranja rubnih uvjeta i postavki numeričkih simulacija, u radu će biti navedeni izrazi kojima je opisan matematički model turbulentnog izgaranja. Nadalje, osim rezultata simulacija dobivenih u *OpenFOAM*-u, bit će prikazane postavke simulacije i rješenja dobivena koristeći studentsku verziju softvera *ANSYS Fluent 2024*.

2 SIMULACIJA IZGARANJA VODIKA

2.1 Vodik

Vodik ima pozitivniji utjecaj na okoliš od klasičnih fosilnih goriva, a postoji velik broj opcija za korištenje njegove energije [5]. Korištenjem vodika moguće je znatno smanjiti emisije stakleničkih plinova te koristiti ga za skladištenje viška energije dobivene iz obnovljivih izvora. Privlačnost vodika kao goriva je u njegovoj velikoj ogrjevnoj moći te u činjenici da izgaranjem čistog vodika kao nusprodukt nastaje voda [6]. Zbog velikog raspona zapaljivosti i niske energije zapaljenja, njegovo korištenje predstavlja veću opasnost od opasnosti korištenja benzina ili prirodnog plina [7]. Odabrana fizikalna svojstva vodika navedena su u tablici 2.1.

Tablica 2.1 Fizikalna svojstva vodika [8]

1	specifični toplinski kapacitet	14,199 kJ/kgK
2	koef. toplinske provodljivosti	0,1805 W/mK
3	gustoća pri 0°C i 101325 Pa	0,08988 g/L
4	molekularna težina	2,016 g/mol
5	minimalna energija zapaljenja	0,019 mJ
6	granice zapaljivosti u zraku	4,0 – 77,0 vol.%
7	temperatura plamena u zraku	2318 K

Klasifikacija vodika prema boji temeljena je na vrsti proizvodnog procesa i vrsti energije korištene pri proizvodnji vodika što utječe na troškove i emisije plinova. Neke od vrsta vodika su:

- Sivi vodik koji nastaje iz fosilnih goriva kao što su prirodni plin i ugljen koji uzrokuju visoke emisije CO₂ u procesima. Ova vrsta vodika je česti nusproizvod drugih kemijskih procesa, a upotrebljava se uglavnom u petrokemijskoj industriji i proizvodnji amonijaka.
- Plavi vodik je vrsta koja se također proizvodi iz fosilnih goriva, a emisije su niže nego kod sivog vodika zbog korištenja CCS (engl. *Carbon Capture and Storage*) tehnologije koja dovodi do većih troškova.
- Tirkizni vodik proizveden je pirolizom fosilnih goriva, odnosno metana, a produkt pirolize

je čvrsti ugljik koji se može koristiti u daljnim proizvodnim procesima, čime se umanjuje trošak proizvodnje vodika.

- Zeleni vodik je vrsta dobivena elektrolizom koristeći električnu struju iz obnovljivih izvora energije, pri čemu nema izravnih emisija štetnih plinova.
- Ljubičasti vodik također se dobiva elektrolizom vode, ali koristeći električnu struju proizvedenu u nuklearnim elektranama [9].

Konvencionalni načini za proizvodnju vodika su reformiranje prirodnog plina vodenom parom, parcijalna oksidacija ugljikovodika, rasplinjavanje ugljena ili koksa, vodik iz metanola te elektroliza vode koja je najjednostavniji postupak sa stupnjem iskoristivosti do 85%, dok se u nekonvencionalne načine ubrajaju fotoelektrokemijski, termokemijski i fotobiološki postupak.

Vodik se može upotrijebiti kao pogonsko gorivo u motorima s unutarnjim izgaranjem te mlaznim i raketnim motorima umjesto fosilnih goriva. Također se koristi za izgaranje u gorivim člancima, odnosno ćelijama koje se najčešće upotrebljavaju u automobilskoj industriji. Gorivi članci iz kemijske energije goriva proizvode električnu struju, vodu i toplinu, a njihova iskoristivost iznosi od 35 do 60% [10].

2.2 Numeričke simulacije

2.2.1 Princip rada

Za rješavanje problema strujanja fluida, koriste se CFD kodovi strukturirani na način da obuhvaćaju tri glavna elementa, a to su pretprocesiranje, rješavanje i postprocesiranje.

Pretprocesiranje podrazumijeva zadavanje promatranog problema CFD programu, a obuhvaća definiranje geometrije, odnosno numeričke domene, zatim podjelu domene na velik broj malih, nepreklapajućih poddomena što se naziva generiranje numeričke mreže ćelija (kontrolnih volumena ili elemenata). U pretprocesiranje se još ubraja i odabir fizikalnih i kemijskih pojava koje je po-

trebno modelirati, zatim definiranje karakteristika fluida te specificiranje rubnih uvjeta u ćelijama koje dodiruju rubove domene. U centroidu svake ćelije mreže se računa i zapisuje vrijednost veličina, primjerice brzine, tlaka i temperature. Točnost rješenja simulacije ovisi o kvaliteti numeričke mreže i uglavnom vrijedi da se s većim brojem elemenata mreže dobiva točnije rješenje, ali se i produljuje vrijeme trajanja proračuna.

Rješavači (engl. *solvers*) u računarskoj dinamici fluida koriste numeričke metode za rješavanje jednadžbi očuvanja, a najčešće se koristi metoda konačnih volumena (engl. *finite volume method*). Diskretizacijom jednadžbi metodom konačnih volumena se jednadžbe pretvaraju u oblik razumljiv računalu. Za diskretizaciju jednadžbi očuvanja se koriste različite numeričke sheme, čime se pretvaraju u sustave algebarskih jednadžbi koji se zatim mogu riješiti iterativnim ili direktnim metodama.

Postprocesiranje obuhvaća vizualizaciju podataka i dobivenih rješenja numeričke simulacije. Moguće je, pomoću alata, vizualizirati numeričku domenu i mrežu, plotove vektora i kontura rezultata, te strujnice. Također je moguće izraditi animacije rezultata nestacionarnih numeričkih simulacija [1].

2.2.2 Modeliranje turbulencije

Rješavanjem Navier-Stokes jednadžbi se u potpunosti može predvidjeti strujanje kod laminarnog strujanja, dok kod turbulentnog strujanja nastaju vrtložne strukture raznih veličina s nepredvidivim i brzim oscilacijama koje računalno nije moguće riješiti Navier-Stokes jednadžbama [11]. Zbog važnosti turbulencija pri strujanju i raznih efekata koje uzrokuju u inženjerskim problemima, razvijeni su pristupi za modeliranje turbulencija koji se mogu podijeliti u tri kategorije:

- DNS (engl. *Direct Numerical Simulations*) predstavlja potpuno rješavanje Navier Stokesovih jednadžbi i jednadžbi očuvanja i ravnoteže u vremenu i trodimenzionalnom prostoru, bez korištenja turbulentnih modela. Ovakvi proračuni su precizni, ali iznimno zahtjevni što se tiče računalnih resursa, stoga se trenutno ne koriste za industrijske proračune strujanja.

- LES (engl. *Large Eddy Simulation*) je pristup u kojem se modeliraju male vrtložne strukture, dok se vrtlozi velikih dimenzija računaju numerički što značajno smanjuje računalni napor u odnosu na DNS simulacije. Ovaj princip se može koristiti kod složenijih geometrija i strujanja s većim Reynoldsovim brojem nego što je moguće pri korištenju DNS-a.
- RANS (engl. *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) simulacije temelje se na Reynoldsovim usrednjenjima u vremenu te se modeliraju turbulencije svih veličina zbog čega je ovaj pristup najmanje računalno zahtjevan i koristi se kod većine inženjerskih problema [12]. Kao posljedica navedenih pojednostavljenja, tj. zbog novonastalih nepoznanica u sustavu jednadžbi, jednadžbe sada zahtijevaju dodatne modele za "zatvaranje" sustava RANS jednadžbi. Primjer često korištenih modela su $k - \varepsilon$ i $k - \omega$ s dvije nove transportne jednadžbe ili RSM turbulentni model.

2.2.3 *OpenFOAM*

Open Source Field Operation and Manipulation, odnosno *OpenFOAM*, je *open-source* softverski paket za računarsku dinamiku fluida koji se koristi za izradu numeričkih simulacija raznih fizikalnih procesa. *OpenFOAM* je temeljen na C++ programskom jeziku te nudi izbor od nekoliko desetaka rješavača, a u svaki od njih je implementiran specifičan matematički model. Zbog velikog izbora, važno je odabrati odgovarajući rješavač kako bi se osiguralo dobivanje točnog rješenja simuliranog problema [13]. Osnovne mape za definiranje postavki simulacije su *0*, *constant* i *system*. Uređivanje datoteka u kojima se definiraju postavke slučaja, vrši se putem odabranog tekstualnog editora. Naredbe, primjerice za generiranje ili provjeru mreže i pokretanje simulacije, se zadaju putem komandne linije. *OpenFOAM* koristi metodu konačnih volumena (FVM), te podržava paralelno računanje. Također, integriran je s vizualizacijskim alatom *Paraview* koji olakšava analizu i prikaz rezultata simulacija.

2.2.4 ANSYS Fluent

ANSYS Fluent je komercijalni softverski paket korišten u CFD-u. Vrlo je robustan pri rješavanju modela strujanja fluida, prijenosa topline, kemijskih reakcija i ostalih fizikalnih pojava zbog čega je često korišten u industriji. Kao i *OpenFOAM*, nudi velik broj modela turbulencije. Prednost *Fluent*-a je integracija s *ANSYS* alatima za izradu geometrije kao što su *SpaceClaim* i *Design Modeler* te integracija s modulom *ANSYS Meshing* pomoću kojeg se, na prilično jednostavan način, mogu izraditi numeričke mreže vrlo složenih geometrija. Za postavljanje parametara problema, pokretanje rješavanja te za pregled rezultata, koristi se sofisticirano korisničko sučelje. *ANSYS Fluent* sadrži i velik broj alata za postprocesiranje, odnosno vizualizaciju rezultata pomoću grafova, kontura, animacija i ostalih opcija.

3 MATEMATIČKI MODEL TURBULENTNOG IZGARANJA

3.1 Svojstva plinovitih smjesa

U ovom odlomku navedena su neka od osnovnih svojstava plinovitih smjesa koja je potrebno razumjeti s obzirom da će se promatrati izgaranje plinovite smjese više kemijskih vrsta. Maseni udio kemijske vrste k u smjesi se definira pomoću izraza 3.1

$$Y_k = \frac{m_k}{m_1 + m_2 + m_3 + \dots + m_N} = \frac{m_k}{m_{\text{total}}} \quad (3.1)$$

gdje $m_1 \dots m_N$ [kg] predstavljaju masu pojedine vrste u smjesi, a m_{total} [kg] predstavlja ukupnu masu smjese, te vrijedi:

$$\sum_{k=1}^N Y_k = 1 \quad (3.2)$$

Molekularna ili molarna masa smjese $(MW)_{\text{mix}}$ računa se iz izraza 3.3

$$\frac{1}{(MW)_{\text{mix}}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{(MW)_k} \quad (3.3)$$

gdje je $(MW)_k$ [g/mol] molekularna masa kemijske vrste k .

Gustoća kemijske vrste je definirana izrazom:

$$\rho_k = \frac{p_k}{R_u / (MW)_k T} \quad (3.4)$$

gdje je p_k [Pa] tlak vrste k , T [K] temperatura, a R_u opća plinska konstanta koja iznosi:

$$R_u = 8314 \text{ [J/kmolK]} \quad (3.5)$$

Gustoća smjese ρ se sada može izračunati pomoću izraza 3.6.

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (3.6)$$

Specifična entalpija vrsta h_k definirana je izrazom 3.7

$$h_k = \int_{T_0}^T c_{pk} dT + \Delta h_0^k \quad (3.7)$$

gdje c_{pk} [J/kgK] predstavlja specifični toplinski kapacitet vrsta pri konstantnom tlaku, a Δh_0^k [J/kg] predstavlja entalpiju nastajanja vrsta k pri standardnim uvjetima tlaka i temperature.

Pomoću izraza 3.8, sada se može izračunati specifična entalpije smjese plinova h_{mix} :

$$h_{\text{mix}} = \sum_{k=1}^N Y_k h_k \quad (3.8)$$

3.2 Jednadžbe očuvanja za fluid

3.2.1 Jednadžba kontinuiteta

Jednadžbu kontinuiteta, odnosno jednadžbu očuvanja mase može se prikazati izrazom 3.9

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (3.9)$$

gdje t [s] označava vrijeme, u_i [m/s] komponentu brzine te ρ [kg/m³] predstavlja gustoću fluida koja kod izgaranja nije konstantna vrijednost, već ovisi o tlaku, temperaturi i koncentraciji kemijskih vrsta. Prvi član s lijeve strane jednadžbe predstavlja promjenu gustoće u vremenu, dok drugi član predstavlja protok mase izvan granica elementa te se naziva konvektivnim članom.

3.2.2 Jednadžba očuvanja količine gibanja

Jednadžba očuvanja količine gibanja koja opisuje polja brzina pri strujanju je prikazana izrazom 3.10

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + F_i \quad (3.10)$$

gdje F_i [N] predstavlja silu na tijelo u koju je uključeno i gravitacijsko djelovanje, p [Pa] tlak, τ_{ij} predstavlja tenzor viskoznog naprezanja (engl. *viscous stress tensor*) kojeg je moguće opisati izrazom 3.11.

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (3.11)$$

gdje je μ [Pa s] dinamički viskozitet fluida, a δ_{ij} Kroneckerov simbol.

Drugi Newtonov zakon govori da promjena količine gibanja čestice fluida je jednaka sumi svih sila koje djeluju na tu česticu. Postoje dvije vrste sila, a to su sile koje djeluju na površinama te se u njih ubrajaju sile tlaka, viskozne sile i gravitacijska sila i sile koje djeluju na tijelo, a u njih se ubrajaju centrifugalna, Coriolisova i elektromagnetska sila.

3.2.3 Jednadžba očuvanja mase kemijskih vrsta

Prva transportna jednadžba koja je karakteristična za strujanje uz odvijanje reakcije je jednadžba očuvanja mase kemijskih vrsta k i prikazana je izrazom 3.12

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (3.12)$$

gdje je Y_k [kg/kg] maseni udio kemijske vrste k u smjesi, a D_k [m²/s] difuzijski koeficijent vrsta. $\dot{\omega}_k$ [kg/m³s] predstavlja volumetrijsku brzinu stvaranja ili nestajanja vrsta zbog kemijskih reakcija, odnosno predstavlja izvor ili ponor u svim transportnim jednadžbama vrsta. Prvi član s lijeve

strane jednadžbe 3.12 predstavlja promjenu mase vrsta k , drugi član predstavlja smanjenje mase vrsta k zbog konvekcije. Prvi član s desne strane predstavlja povećanje mase vrsta k zbog difuzije. Uobičajena je praksa da se za sve kemijske vrste pretpostavi ista vrijednost difuzijskog koeficijenta što značajno olakšava proračune izgaranja:

$$D_k = D \quad (3.13)$$

3.2.4 Jednadžba očuvanja energije fluida

Prilikom izgaranja, kemijska energija se oslobađa u toplinsku energiju zbog čega je potrebno izračunati konačnu vrijednost entalpije. Modeli laminarnog izgaranja ne zahtijevaju rješavanje transportne jednadžbe za entalpiju, već se temperatura dobiva drugim metodama, dok ju je za preostale modele izgaranja potrebno riješiti, a moguće ju je prikazati izrazom 3.14

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{1}{Sc_k} - \frac{1}{\sigma_h} \right) \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial p}{\partial t} + S_{\text{rad}} \quad (3.14)$$

gdje h [J/kg] predstavlja specifičnu entalpiju smjese, h_k [J/kg] specifičnu entalpiju kemijskih vrsta. Prandtlov broj smjese je označen s σ_h te je definiran izrazom 3.15, dok je Schmidtov broj kemijskih vrsta označen s Sc_k i definiran je izrazom 3.16. S_{rad} je izvorni član jednadžbe i označava dobitak ili gubitak radijacije.

Prvi član s lijeve strane jednadžbe 3.14 predstavlja promjenu entalpije, a drugi član predstavlja smanjenje entalpije zbog konvekcije. S desne strane, prvi član jednadžbe je povećanje entalpije kroz difuziju entalpije. Drugi član je povećanje entalpije kroz difuziju koncentracije kemijskih vrsta. Treći član predstavlja povećanje entalpije zbog djelovanja tlaka. Posljednji član u jednadžbi predstavlja povećanje entalpije zbog prijenosa topline radijacijom.

$$\sigma_h = \frac{c_p \mu}{k} \quad (3.15)$$

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k} \quad (3.16)$$

U izrazu 3.15, c_p [J/kgK] je specifični toplinski kapacitet pri konstantnom tlaku, dok je k [W/mK] koeficijent toplinske vodljivosti.

3.3 Jednadžbe očuvanja za kruto tijelo

Za područje krutog tijela unutar domene, potrebno je riješiti samo jednadžbu očuvanja energije prikazanu izrazom 3.17

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (3.17)$$

gdje je h [J/kg] specifična entalpija, ρ [kg/m³] gustoća, a α [m²/s] toplinska difuzivnost krutog tijela koja se računa kao omjer toplinske provodljivosti κ [W/mK] i specifičnog toplinskog kapaciteta c_p [J/kgK] materijala, prema izrazu 3.18.

$$\alpha = \frac{\kappa}{c_p} \quad (3.18)$$

3.4 Međusobno djelovanje fluida i krutog tijela

Na površini dodira fluida i krutog tijela (engl. *solid*), njihove temperature T_f i T_s [K] moraju biti jednake:

$$T_f = T_s \quad (3.19)$$

Toplinski tok Q [W] koji ulazi u jednu zonu, tj. regiju domene, mora biti jednak toplinskom toku koji izlazi iz druge zone domene, stoga vrijedi izraz 3.20. U slučaju prikazanom u ovom radu, toplina će sa fluida prelaziti na kruto tijelo.

$$Q_f = -Q_s \quad (3.20)$$

Izraz 3.20, ukoliko se zanemari utjecaj zračenja, može se zapisati pomoću izraza 3.21

$$\kappa_f \frac{d}{dn} T_f = -\kappa_s \frac{d}{dn} T_s \quad (3.21)$$

gdje n predstavlja smjer normale na površinu dodira, a κ_f i κ_s [W/mK] su koeficijenti toplinske vodljivosti fluida i krutog tijela [17].

3.5 Izgaranje prethodno izmiješanih plinova

Kod izgaranja prethodno izmiješanih plinova (engl. *premixed combustion*), gorivo i zrak su izmiješani prije zapaljenja. Tijekom izgaranja, fronta plamena se širi određenom brzinom, a iza sebe ostavlja produkte nastale izgaranjem. Za formulaciju modela izgaranja prethodno izmiješanih plinova se koristi varijabla napredovanja reakcije (engl. *reaction progress variable*) c koja je definirana pomoću izraza 3.22

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} \quad (3.22)$$

gdje je T_u [K] početna temperatura smjese, tj. temperatura neizgorenog plina, T_b [K] temperatura izgorenog plina, a T [K] temperatura plamena unutar područja izgaranja.

Varijabla napredovanja reakcije se također može definirati na način:

$$c = \frac{Y_F - Y_F^u}{Y_F^b - Y_F^u} \quad (3.23)$$

gdje su Y_F , Y_F^u i Y_F^b lokalni, neizgoreni i izgoreni maseni udjeli goriva u smjesi.

Prema navedenim izrazima, može se zaključiti da varijabla napredovanja reakcije iznosi 0 u području smjese neizgorenih plinova, dok u području potpuno izgorene smjese plinova iznosi 1. U jednadžbi očuvanja mase kemijskih vrsta 3.12, potrebno je maseni udio kemijske vrste u smjesi Y_k zamijeniti varijablom napredovanja reakcije c , nakon čega se transportna jednadžba definira prema izrazu 3.24.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega} \quad (3.24)$$

Stehiometrijski omjer zraka i goriva predstavlja omjer za potpuno izgaranje goriva na temelju kojeg je moguće izračunati minimalnu potrebnu količinu zraka za potpuno izgaranje. Stehiometrijski omjer zraka i goriva računa se prema izrazu 3.25

$$(A/F)_{st} = \frac{m_{air}}{m_{fuel}} \text{ [kg zraka/kg goriva]} \quad (3.25)$$

gdje su m_{air} i m_{fuel} [kg] masa zraka i masa goriva.

Omjer ekvivalencije (engl. *equivalence ratio*) se definira pomoću izraza 3.26.

$$\phi = \frac{(A/F)_{st}}{(A/F)_{stvarno}} \quad (3.26)$$

Ukoliko je omjer ekvivalencije jednak 1, smjesa je stehiometrijska, odnosno ima dovoljnu količinu kisika za potpuno izgaranje goriva. Ukoliko je omjer ekvivalencije manji od 1, smjesa je siromašna gorivom, a ako je veći od 1, smjesa je bogata gorivom.

3.6 RNG k - ε turbulentni model

Jednadžbe RNG (*Renormalization Group*) k - ε turbulentnog modela za strujanja s visokim Reynoldsovim brojem, mogu se prikazati pomoću transportnih jednadžbi 3.27 za turbulentnu kinetičku energiju k [m^2/s^2] i 3.28 za disipaciju turbulentne kinetičke energije ε [m^2/s^3] [14]

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \varepsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2\varepsilon}^* \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.28)$$

gdje je ρ [kg/m³] gustoća, u_i [m/s] komponente brzine, μ [Pa s] dinamički viskozitet, μ_t [Pa s] turbulentna viskoznost, σ_k i σ_ε Prandtlovi brojevi za k i ε . P_k [kg/ms³] predstavlja nastajanje turbulentne kinetičke energije.

Nadalje, vrijede izrazi:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.29)$$

$$C_{2\varepsilon}^* = C_{2\varepsilon} + \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta \eta^3} \quad (3.30)$$

$$\eta = \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{2S_{ij} \cdot S_{ij}} \quad (3.31)$$

gdje η predstavlja parametar naprezanja te je konstanta β izračunata iz eksperimentalnih podataka. Transportna jednačica za ε u standardnoj verziji k - ε modela je jedan od glavnih razloga ograničenja točnosti rješenja strujanja kod kojih se javlja velika brzina deformacije. Zbog navedenog, jednačica za ε u RNG modelu sadrži korekcijsku konstantu $C_{1\varepsilon}$.

Vrijednosti konstanti modela iznose:

$$C_\mu = 0,0845 \quad (3.32)$$

$$\sigma_k = \sigma_\varepsilon = 0,7194 \quad (3.33)$$

$$C_{1\varepsilon} = 1,42 \quad (3.34)$$

$$C_{2\varepsilon} = 1,68 \quad (3.35)$$

$$\eta_0 = 4,38 \quad (3.36)$$

$$\beta = 0,012 \quad (3.37)$$

3.7 EDC model izgaranja

Modeli izgaranja opisuju način međusobnog utjecaja reakcija i strujanja fluida te se za izračun brzine izgaranja, uzimaju u obzir miješanje i kinetički podaci o reakciji. Pri modeliranju sustava u kojem se odvijaju reakcije, važno je upotrijebiti odgovarajući mehanizam miješanja kemijskih vrsta kako bi reaktanti bili u dodiru i time izazvali kemijsku reakciju.

Eddy dissipation concept, skraćeno EDC, je model turbulentnog izgaranja, temeljen na *Eddy dissipation* modelu, koji modelira interakciju izgaranja i turbulencije te uvažava pretpostavku da se fluid dijeli na zone reakcije i okolne zone koje ne reagiraju. Reakcija se događa u sitnim strukturama strujanja gdje se odvija disipacija energije. Model razdvaja fluid u reaktivne zone nazvane sitne strukture (engl. *fine structures*) i u zone u kojima se ne odvijaju reakcije, odnosno okolinu (engl. *surroundings*) [15].

[2] Maseni udio sitnih struktura γ_λ definiran je izrazom 3.38

$$\gamma_\lambda = 2,13 \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (3.38)$$

gdje je ν [m²/s] kinematička viskoznost, k [m²/s²] predstavlja turbulentnu kinetičku energiju, ε [m²/s³] je disipacija kinetičke energije.

Prosječno vrijeme zadržavanja fluida u sitnim strukturama τ^* može se definirati pomoću izraza 3.39

$$\tau^* = 0,41 \left(\frac{V}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.39)$$

Srednja brzina reakcije elemenata $\bar{\omega}_i$ prikazana je izrazom 3.40

$$\bar{\omega}_i = \frac{\bar{\rho}(\gamma_\lambda)^2}{\tau^*} \cdot \frac{Y_i^* - \tilde{Y}_i}{1 - \gamma_\lambda^3} \quad (3.40)$$

gdje je Y_i^* maseni udio elementa u sitnim strukturama, \tilde{Y}_i prosječni maseni udio elementa između sitnih struktura i okoline, $\bar{\rho}$ prosječna gustoća fluida. Prosječni maseni udio elementa \tilde{Y}_i određen je koristeći izraz 3.41.

$$\tilde{Y}_i = \gamma_\lambda^3 \cdot Y_i^* + (1 - \gamma_\lambda^3) \cdot Y_i^0 \quad (3.41)$$

Promjena Y_i^* tijekom vremena ovisi o odabranom mehanizmu reakcija koji uključuje više kemijskih reakcija, od kojih svaka ima svoju konstantu brzine. Konstanta brzine kemijske reakcije definirana je izrazom 3.42

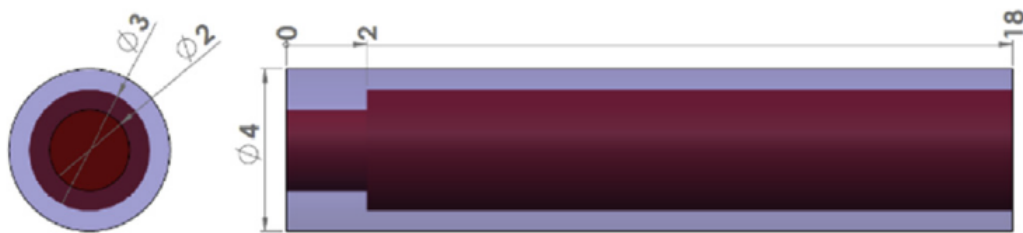
$$k_f = AT^\alpha \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right) \quad (3.42)$$

gdje A predstavlja preteksponecijalnu konstantu, α predstavlja temperaturni eksponent kojim se utječe na promjenu A ovisno o temperaturi, dok E_a [J/kmol] predstavlja energiju aktivacije, odnosno minimalnu potrebnu energiju za početak odvijanja reakcije. Navedene konstante specifične su za pojedinu kemijsku reakciju te ih se koristi za zapis brzina reakcija u CHEMKIN formatu. R_u [J/kmolK] je opća plinska konstanta, a T [K] apsolutna temperatura. Izraz 3.42 još se naziva Arrheniusovom jednačinom.

4 NUMERIČKA SIMULACIJA PROCESA IZGARANJA

4.1 Ulazni podaci

Simulacija izgaranja smjese goriva i zraka odvija se u komori izgaranja cilindričnog oblika malih dimenzija koje su definirane na dvodimenzionalnom presjeku geometrije kako je prikazano na slici 4.1.



Slika 4.1 Dimenzije mikrocilindra [3]

Smjesa goriva i zraka u domenu ulazi prethodno izmiješana u stehiometrijskom omjeru, na temelju čega su kasnije izračunati maseni udjeli vodika, kisika i dušika. Spomenute vrijednosti masenih udjela, maseni protok smjese na ulazu u domenu i početna temperatura zapisane su u tablici 4.2. Zadane su dvije vrijednosti masenog protoka (puni i smanjeni) kako bi se analizirao utjecaj smanjenja masenog protoka na rezultate numeričke simulacije.

Tablica 4.2 Rubni uvjeti

1	puni maseni protok	$1,8551 \cdot 10^{-5}$ kg/s
2	smanjeni maseni protok	$9,2755 \cdot 10^{-5}$ kg/s
3	maseni udio H_2	0,028301
4	maseni udio O_2	0,22641
5	maseni udio N_2	0,745289
6	ulazna temperatura plinova	300 K

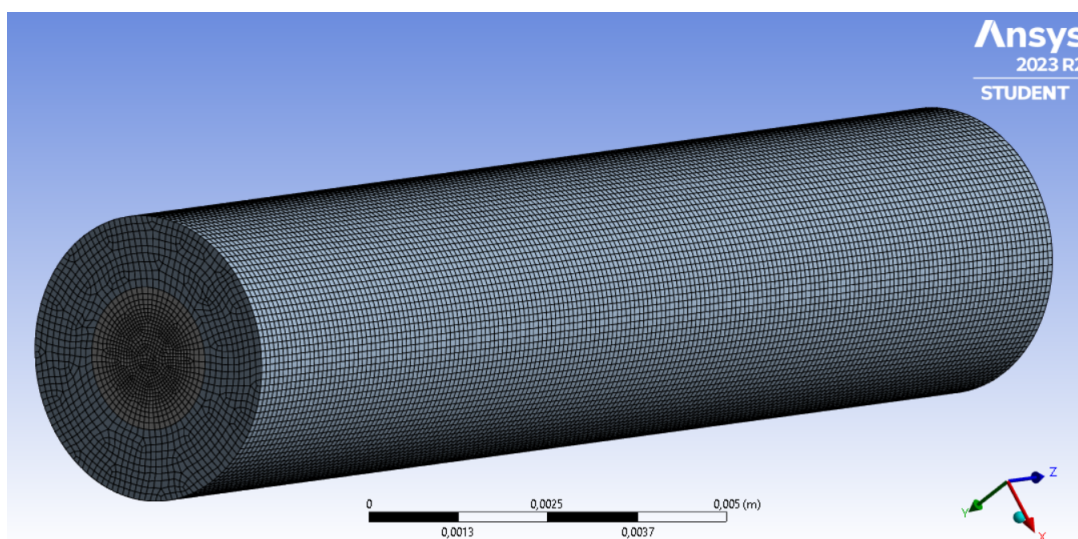
U tablici 4.3 navedene su vrijednosti toplinskih svojstava čelika koji je korišten kao materijal mikrocilindra. Vrijednosti su određene prema članku autora Wan, J. i dr. [16].

Tablica 4.3 Toplinska svojstva čelika

1	specifični toplinski kapacitet c_p	503 J/kgK
2	koef. toplinske provodljivosti λ	12 W/mK
3	gustoća ρ	8000 kg/m ³
4	emisijski koeficijent zračenja ε	0,85

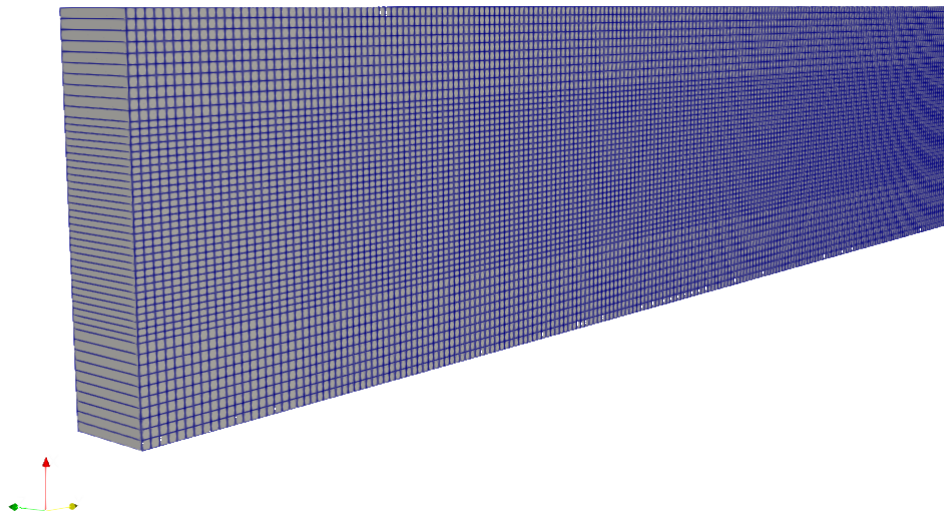
4.2 Izrada geometrije i numeričke mreže

3D model mikrocilindra izrađen je u *Design Modeler*-u, a nakon izrade, model je potrebno omrežiti. Numerička mreža je generirana koristeći *ANSYS Meshing* na način da se definira željena veličina ćelije uz korištenje *MultiZone* opcije koja generira mrežu s elementima heksaedarskog oblika. Definirane su površine kod 3D domene, odnosno rubovi kod 2D domene, koje predstavljaju ulazni presjek u domenu (*inlet*) te izlazni presjek domene (*outlet*). Na označenim presjecima se pri postavljanju simulacije definiraju rubni uvjeti. Numerička mreža za 3D domenu sastoji se od 332100 elemenata te je prikazana na slici 4.2. Mrežu je potrebno eksportirati iz *ANSYS*-a kao .msh datoteku, te ju konvertirati naredbom *fluentMeshToFoam* kako bi se mogla koristiti u *OpenFOAM*-u.



Slika 4.2 Numerička mreža za 3D domenu

Postavke mreže za 2D domenu su definirane u *blockMeshDict*-u, a naredbom *blockMesh* se generira mreža. 2D numerička mreža se sastoji od 6000 elemenata te je po dubini domene zadan 1 element kako je prikazano slikom 4.3. Za obje mreže je potrebno pokrenuti naredbu *splitMeshRegions* kako bi se domena razdvojila na *gas* i *solid* područja.



Slika 4.3 Numerička mreža za 2D domenu

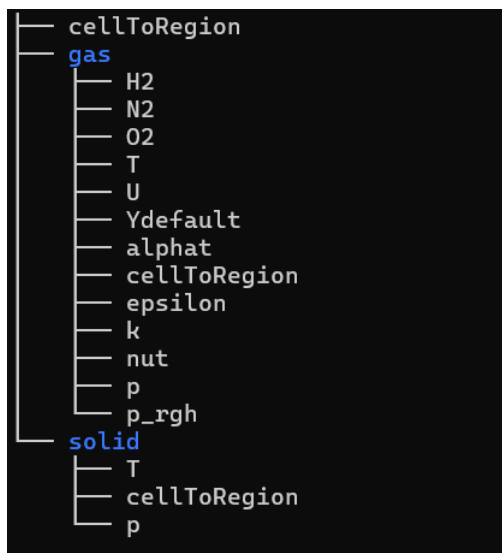
4.3 Postavljanje *OpenFOAM* slučaja

Za simulaciju problema se koristi rješavač *chtMultiRegionFoam* predviđen za strujanja fluida i prijenos topline u sustavima s više zona, primjerice zonom fluida i zonom krute stijenke. Na temelju *OpenFOAM* tutorijala naziva *reverseBurner* je izrađena simulacija izgaranja prikazana u ovom radu.

4.3.1 Direktorij *0*

Unutar mape *0* postavljeni su početni i rubni uvjeti na zadanim površinama. U ovom slučaju su definirani *inlet* i *outlet* kao ulaz i izlaz domene, zatim zidovi cilindra *walls*, te *adiabatic_walls*

tj. zidovi cilindra na ulaznom i izlaznom presjeku, a također je zadan uvjet na površinama dodira zone fluida i zone stijenke, odnosno zidova cilindra (*gas* i *solid*). Stablo strukture direktorija *0* prikazano je na slici 4.4.



Slika 4.4 Struktura foldera *0*

Kemijski elementi koji čine smjesu vodika i zraka su vodik, kisik i dušik, te su njihovi maseni udjeli na *inlet*-u definirani u datotekama *H2*, *O2* i *N2*. Maseni udio vodika u smjesi iznosi 0,028301, kisika 0,22641 i dušika 0,745289. Da bi se simulacija ispravno pokrenula, potrebno je u datoteci *Ydefault* definirati masene udjele produkata izgaranja u početnom trenutku, koji tada iznose 0.

T datoteka u direktoriju *gas* definira početnu temperaturu smjese plinova, te ona na uzlazu u domenu iznosi 300 K, a unutar cijele domene iznosi 1500 K kako bi se osiguralo zapaljenje smjese vodika i zraka.

U datoteci *U* zadaju se početni i rubni uvjeti za brzine strujanja, a u ovom slučaju je definiran maseni protok smjese na *inletu* koji iznosi $1,8551 \cdot 10^{-5}$ kg/s. Navedena vrijednost smatra se punim iznosom masenog protoka. S obzirom da je potrebno provesti simulacije za različite vrijednosti masenog protoka, druga vrijednost protoka koja je zadana iznosi $9,2755 \cdot 10^{-6}$ kg/s, odnosno dvostruko manje od prve vrijednosti protoka.

Vrijednosti ϵ i k izračunate su koristeći *CFD Online* kalkulator.

Postavke tlaka su definirane u p i p_rgh datotekama.

Datoteke *cellToRegion* nastaju nakon generiranja mreže i razdvajanja domene po zonama, te njih nije potrebno mijenjati.

Slijedi prikaz dijela *0/solid/T* datoteke gdje je definiran rubni uvjet prijenosa topline konvekcijom i zračenjem sa zida tj. cilindra na okolinu. Vrijednost koeficijenta prijelaza topline konvekcijom h uzeta je iz članka [4].

```
walls
{
    type            externalWallHeatFluxTemperature;
    kappaMethod     solidThermo;
    mode            coefficient;
    h               uniform 10; // W/m2K
    emissivity      0.85;
    Ta              $internalField;
    value           $internalField;
}
```

4.3.2 Direktorij *chemkin*

U ovom radu, svaki od četiri promatrana slučaja sadrži još i direktorij *chemkin* u kojem se nalaze datoteke vezane za odvijanje kemijskih reakcija. Sadržaj direktorija *chemkin* prikazan je na slici 4.5.



Slika 4.5 Struktura foldera *chemkin*

Korišteni mehanizam reakcija sadrži 9 kemijskih vrsta i 19 reakcija (engl. *9 species and 19 steps*).

U tablici 4.4 navedene su jednađbe kemijskih reakcija kojima je opisan proces izgaranja vodika. Oznaka "M" u jednađbama predstavlja treće tijelo koje može biti bilo koja kemijska vrsta prisutna u sustavu.

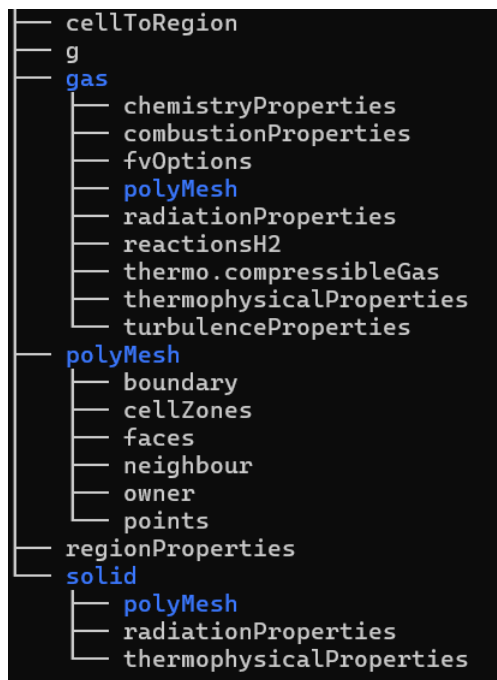
Tablica 4.4 Kemijske reakcije

1	$H_2 + O_2 = OH + OH$
2	$H_2 + OH = H_2O + H$
3	$H + O_2 = OH + O$
4	$O + H_2 = OH + H$
5	$H + O_2 + M = HO_2 + M$
6	$H + O_2 + O_2 = HO_2 + O_2$
7	$H + O_2 + N_2 = HO_2 + N_2$
8	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$
9	$H + HO_2 = OH + OH$
10	$O + HO_2 = O_2 + OH$
11	$OH + OH = O + H_2O$
12	$H_2 + M = H + H + M$
13	$O_2 + M = O + O + M$
14	$H + OH + M = H_2O + M$
15	$HO_2 + H = H_2 + O_2$
16	$HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$
17	$H_2O_2 + M = OH + OH + M$
18	$H_2O_2 + H = H_2 + HO_2$
19	$H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$

Da bi se definirala svojstva sudionika reakcija i same reakcije, koriste se podaci u *chemkin* formatu. Naredbom *chemkinToFoam*, datoteke se prije pokretanja simulacije pretvaraju u format koji je čitljiv za *OpenFOAM* i spremaju u folder *constant*. Spomenute reakcije i pripadajući koeficijenti Arrheniusove jednađbe koji definiraju brzinu reakcija, zapisani su u *chem.inp* datoteku. Termodinamički podaci kemijskih vrsta zapisani su u datoteku *therm.dat*, a transportna svojstva vrsta nalaze se u datoteci *transportProperties*.

4.3.3 Direktorij *constant*

Direktorij *constant* sadrži datoteke kojima su definirana fizikalna svojstva, model turbulencije, svojstva zone fluida (*gas*) i zone zida mikrocilindra (*solid*), a njegova struktura prikazana je na slici 4.6.



Slika 4.6 Struktura foldera *constant*

Datoteka *chemistryProperties* definira solver kemijskih reakcija te početni vremenski korak za rješavanje.

U datoteci *combustionProperties*, odabrani model izgaranja je prethodno opisani EDC (*Eddy Dissipation Concept*). Odabrana verzija EDC modela je v2005 koja pretpostavlja da se reakcije mogu odvijati i izvan samih zona reakcija.

polymesh je direktorij koji sadrži podatke o numeričkoj mreži.

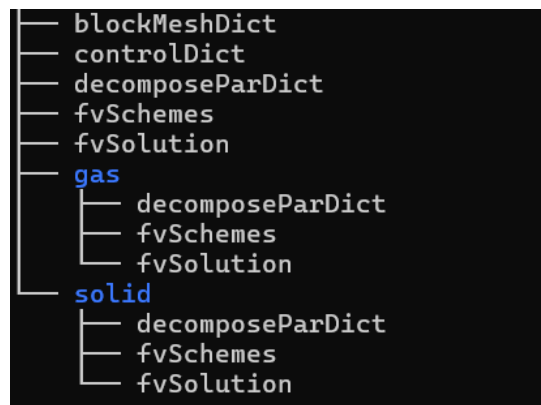
Datoteka *radiationProperties* definira svojstva zračenja, a datoteka *g* definira gravitacijsko ubrzanje, ali u ovom slučaju navedeno nije uključeno u simulaciju.

Datoteke *reactionsH2* i *thermo.compressibleGas* nastaju nakon konverzije *chemkin* datoteka.

U datotekama *gas/thermophysicalProperties* i *solid/thermophysicalProperties* su definirana toplinska i fizikalna svojstva materijala, odnosno fluida i stijenke, a u *turbulenceProperties* je definiran odabrani turbulentni model *RNGkEpsilon*.

4.3.4 Direktorij *system*

U direktoriju *system* sadržane su postavke rješavanja simulacija kao što su veličina vremenskog koraka ili broja iteracija, metode diskretizacije jednačbi te podjela numeričke domene kod paralelnog rješavanja. Struktura *system* foldera prikazana je na slici 4.7.



Slika 4.7 Struktura foldera *system*

blockMeshDict datoteka je korištena jedino u simulacijama s dvodimenzionalnom numeričkom domenom, a u njoj su definirane postavke mreže.

S obzirom da se simulacija rješava kao tranzijentna, za kontrolu vremenskog koraka se koristi Courantov broj (*maxCo*) koji je definiran u datoteci *controlDict* i iznosi 0,5.

Simulacija je paralelizirana koristeći velik broj procesora zadan u *decomposeParDict*-u. Dvodimenzionalna domena je podijeljena na 96, a trodimenzionalna na 144 procesora koristeći metodu *scotch*. Broj korištenih procesora zadan je pomoću *slurm* skripte.

Kako bi rješenje bilo robusnije, za $div(\phi, U)$ se u datoteci *fvSchemes* postavlja *Gauss upwind* metoda, a relaksacijski faktori i postavke rješavača definirane su u *fvSolution*.

4.4 Pokretanje simulacije

Svaki direktorij promatranih slučajeva sadrži datoteku *slurm_script.sh* pomoću koje se pokreće simulacija. Rješavanje ove simulacije se, zbog složenosti i dugotrajnog proračunskog vremena, provodi na superračunalu Bura kako bi se simulacija uspjela riješiti u realnom vremenu. Slijedi prikaz slurm skripte kojom se izvršava niz naredbi i pokretanje simulacije za slučaj izgaranja u dvodimenzionalnoj domeni.

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=multiRegion
#SBATCH --time=20-00:00:00
#SBATCH --nodes=4
#SBATCH --ntasks-per-node=24
#SBATCH --output=multiRfoam-%j.out
#SBATCH --partition=computes_thin

# set solver
solver=chtMultiRegionFoam

# chemkin conversion
chemkinToFoam chemkin/chem.inp chemkin/therm.dat\\
chemkin/transportProperties constant/gas/reactionsH2\\
constant/gas/thermo.compressibleGas

# modify decomposeParDict and decompose
sed -i "s/numberOfSubdomains.*[0-9][0-9]*;/numberOfSubdomains\\
$SLURM_NTASKS;/g" system/decomposeParDict
sed -i "s/numberOfSubdomains.*[0-9][0-9]*;/numberOfSubdomains\\
$SLURM_NTASKS;/g" system/gas/decomposeParDict
sed -i "s/numberOfSubdomains.*[0-9][0-9]*;/numberOfSubdomains\\
```

```

$SLURM_NTASKS;/g" system/solid/decomposeParDict
decomposePar -allRegions -fileHandler collated > log.decomposePar

# run case
mpirun -np $SLURM_NTASKS $solver -parallel -fileHandler\\
collated > log.LOGGIT 2>&1

# reconstruct case results
reconstructPar -allRegions -newTimes

# remove processors
rm -rf processor*

```

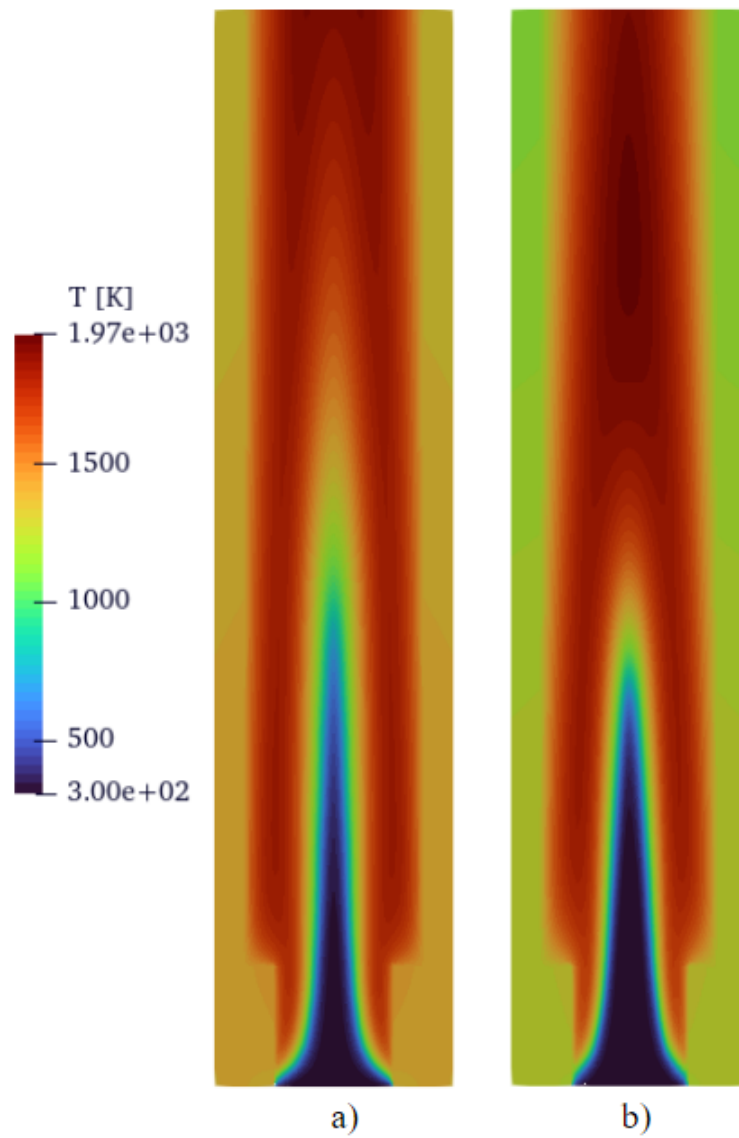
Rješavač *chtMultiRegionFoam* funkcioniра na način da se rješenje јednadžbe svake varijable koja karakterizira sustav koristi za rješavanje sljedeće јednadžbe. Na taj način se opisuje međusobno djelovanje fluida i stijenke, tj. јednadžbe koje opisuju fluid se rješavaju korištenjem temperature krutog tijela dobivene iz prethodne iteracije kako bi se definirali rubni uvjeti za temperaturu fluida, a zatim se јednadžba za krutinu rješava korištenjem temperature fluida iz prethodne iteracije da bi se definirao rubni uvjet za temperaturu krutine. Ova strategija postupno dobivenog rješenja se naziva iteracijskom, te se provodi do konvergencije ili zaustavljanja proračuna na odabran način [17].

5 REZULTATI *OpenFOAM* SIMULACIJA

Slijedi prikaz i usporedba rezultata simulacija za dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu domenu s punim i smanjenim iznosom protoka. Iako je model riješen tranzijentnim solverom, nakon 0.5 s, rezultati su se ustalili, stoga se dobiveno rješenje smatra stacionarnim. Rješenja za 3D model prikazana su na ravnini simetrije domene. Za vizualizaciju rezultata korišten je *open-source* alat *Paraview*.

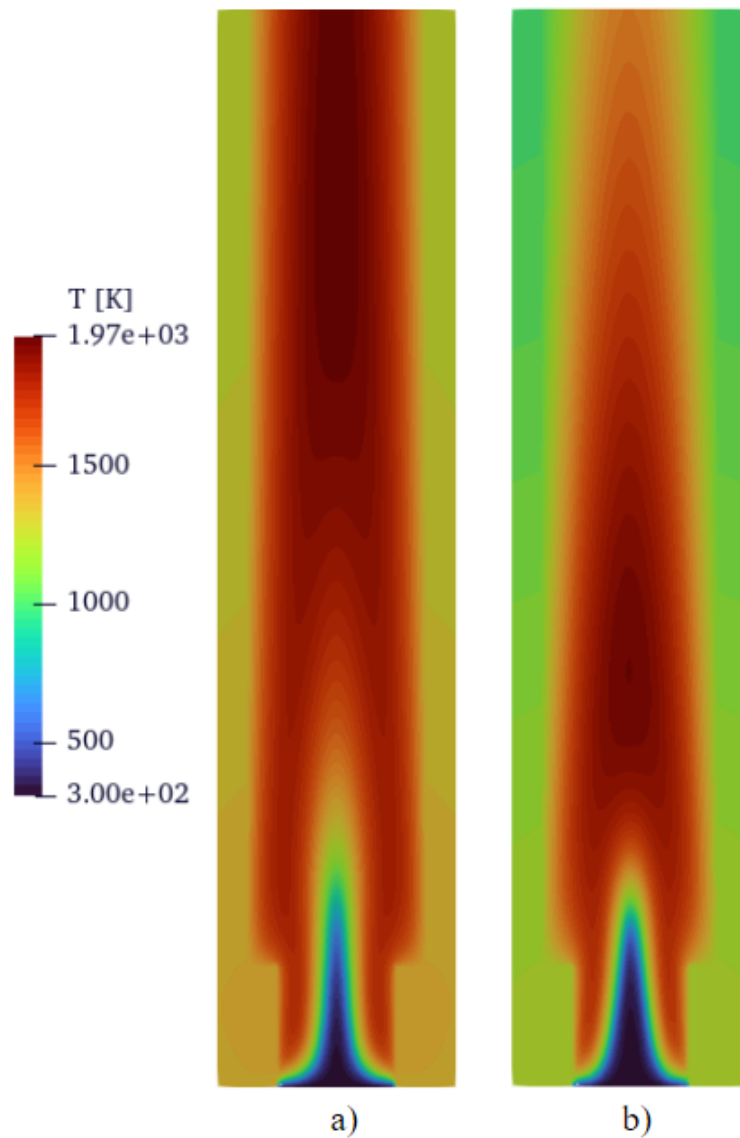
5.1 Usporedba 2D i 3D modela za različite masene protoke

Na slici 5.8 je prikaz kontura temperature u Kelvinima pri korištenju punog masenog protoka plinova na ulazu u domenu kako bi se usporedio utjecaj dimenzionalnosti domene na temperature unutar mikrocilindra te na njegovoj stijenci.



Slika 5.8 Konture temperatura kod punog masenog protoka: a) 2D; b) 3D

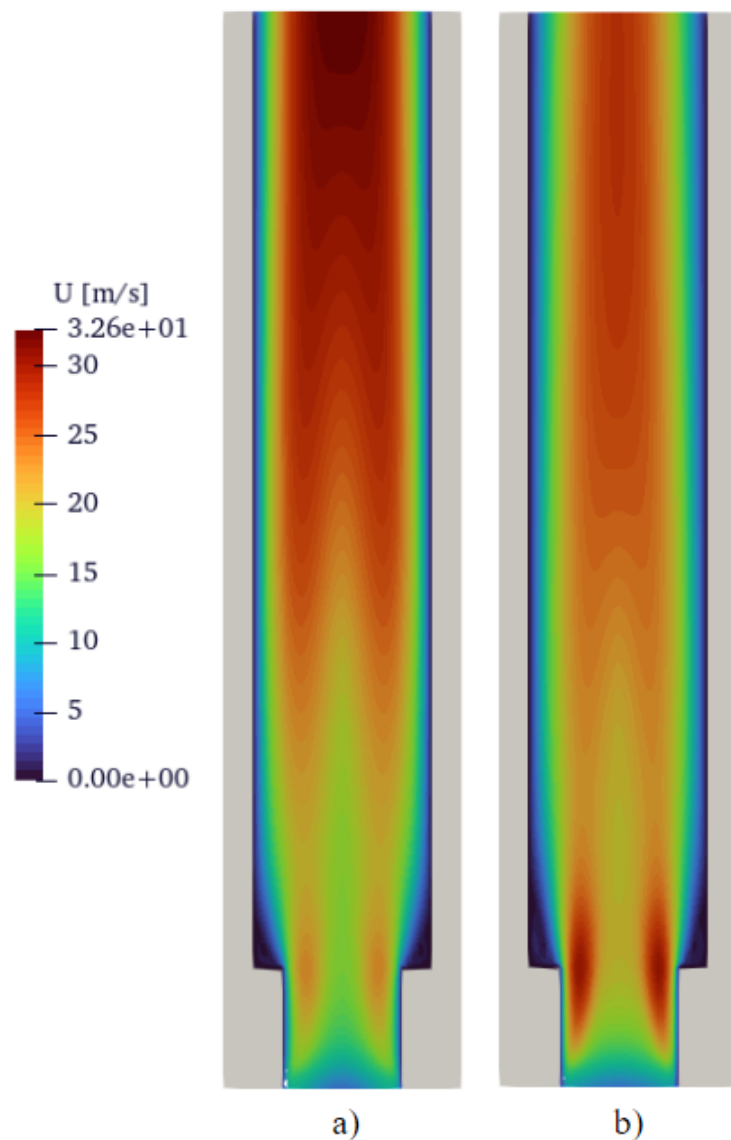
Na slici 5.9 su uspoređeni rezultati za 2D i 3D domenu kod smanjenog masenog protoka.



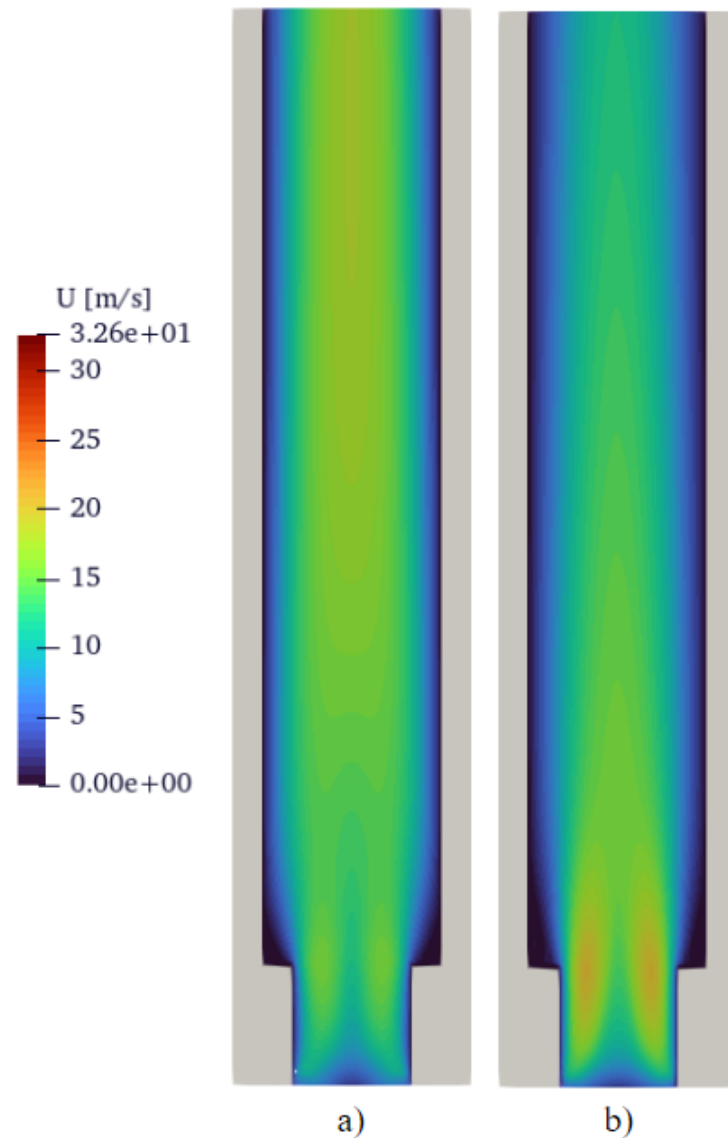
Slika 5.9 Konture temperatura kod smanjenog masenog protoka: a) 2D; b) 3D

Za obje vrijednosti masenog protoka vrijedi da se najviša temperatura 3D modela razvije bliže *inletu* nego u 2D modelu. Također vrijedi da je temperatura stijenke mikrocilindra 3D modela za približno 200 K niža u odnosu na temperaturu stijenke 2D modela. Najniža temperatura svih modela je ulazna temperatura smjese vodika i zraka, a najviša temperatura, u iznosu od 1972 K, je postignuta nakon zapaljenja smjese u 2D slučaju sa smanjenim masenim protokom.

U analizi utjecaja masenog protoka na raspodjelu temperatura, može se uočiti da, kod modela s punim iznosom masenog protoka, područje maksimalne temperature plamena se nalazi bliže *outletu*. Ova pojava se može objasniti većom ulaznom brzinom smjese koja uzrokuje teže i kasnije zapaljenje reaktanata. Vrijednost masenog protoka ne utječe na maksimalnu temperaturu plamena. Slijedi prikaz kontura brzina plinova unutar mikrocilindra.



Slika 5.10 Konture brzina za puni protok: a) 2D; b) 3D

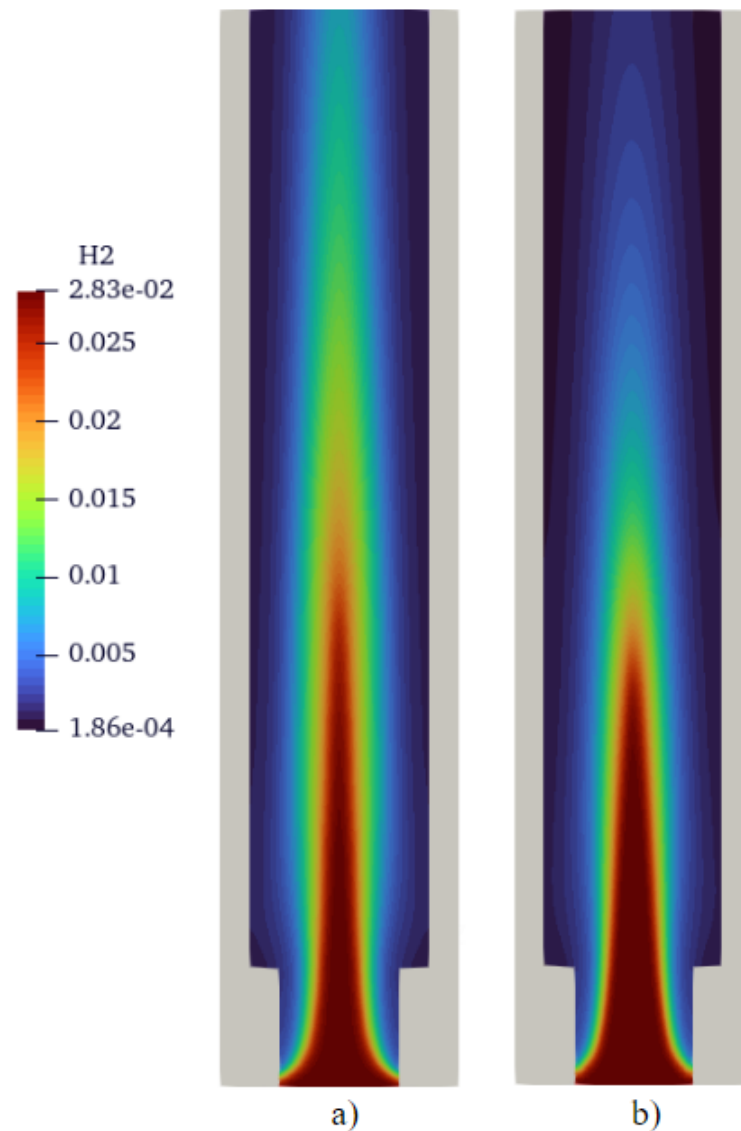


Slika 5.11 Konture brzina za smanjeni protok: a) 2D; b) 3D

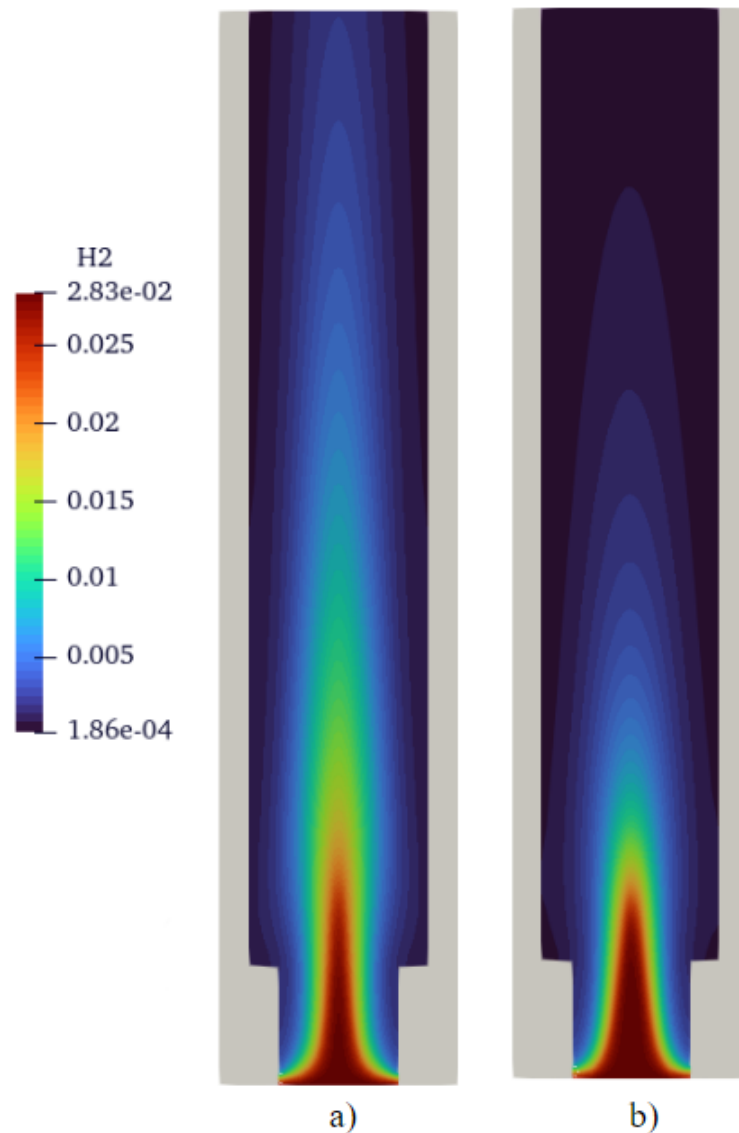
Slika 5.10 prikazuje konture brzina u m/s za puni maseni protok, a slika 5.11 za smanjeni maseni protok kako bi se usporedio utjecaj domene i masenog protoka na brzinu plinova. Iznosi maksimalne brzine su dvostruko manji u slučajevima smanjenog iznosa masenog protoka. Brzina strujanja u blizini stijenke iznosi 0 m/s za sve slučajeve, što odgovara prethodno zadanom *no-slip* uvjetu. Usporedbom kontura brzina i kontura temperatura danih na slikama 5.9 i 5.8, može se za-

ključiti da u područjima s višom temperaturom, plinovi imaju veću brzinu strujanja. Na prijelazu s užeg na širi dio mikrocilindra, također se javlja povećanje brzine strujanja.

Raspodjela masenih udjela vodika H_2 za slučaj s punim masenim protokom, prikazana je slikom 5.12, a na slici 5.13 su prikazane konture za slučaj smanjenog masenog protoka.



Slika 5.12 Maseni udio vodika za puni maseni protok: a) 2D; b) 3D

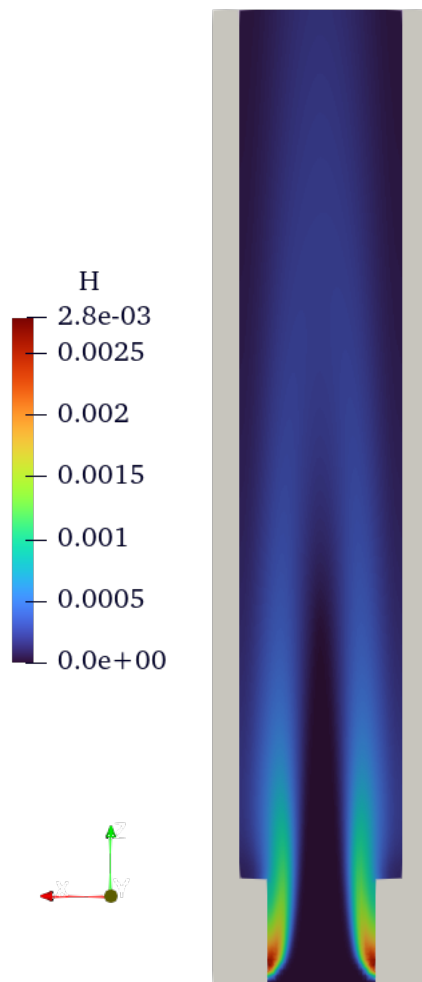


Slika 5.13 Maseni udio vodika za smanjeni maseni protok: a) 2D; b) 3D

Kod slučajeve s 2D domenom, oblik raspodjele masenog udjela vodika je više izdužen u aksijalnom smjeru mikrocilindra što ukazuje na značajan utjecaj dimenzionalnosti domene na rezultate. Uspoređujući slučajeve s punim i smanjenim iznosom masenog protoka, može se vidjeti kako kod slučaja s manjim protokom, zbog manje brzine ulaska smjese u domenu, vodik izgara bliže ulaznom presjeku. Izgaranjem se smanjuje maseni udio čistog vodika. Kod punog iznosa protoka,

veliki maseni udio vodika dopijeva čak do središta mikrocilindra po njegovoj visini. Maseni udjeli vodika za 2D i 3D slučaj za isti maseni protok se podudaraju u blizini *inleta* s obzirom da na tom području još nije došlo do izgaranja, a udaljavanjem dolazi do odstupanja. Ove značajne razlike između rezultata 2D i 3D geometrija može se objasniti time što se miješanje i difuzija kemijskih vrsta ne odvija u isključivo dvije dimenzije, već je potrebno uračunati i utjecaj treće dimenzije.

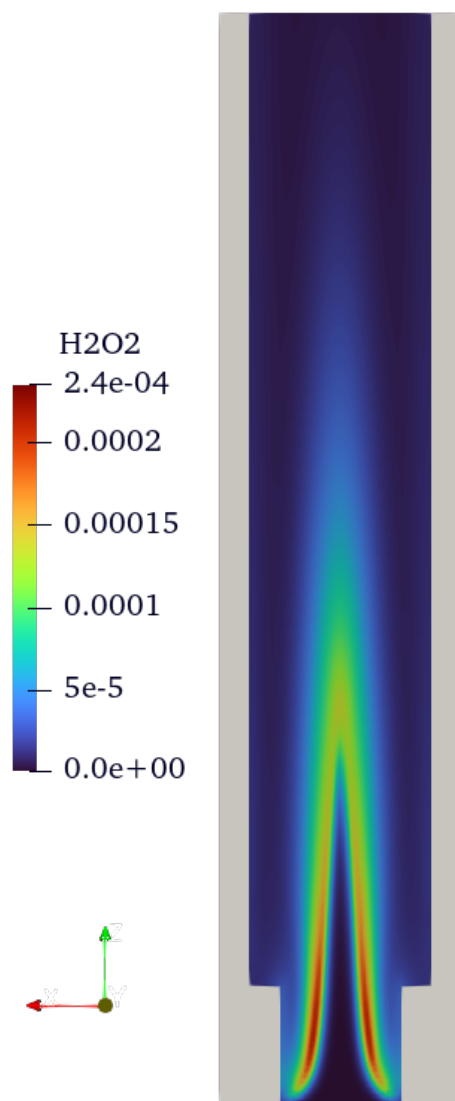
5.2 Produkti



Slika 5.14 Konture masenog udjela H

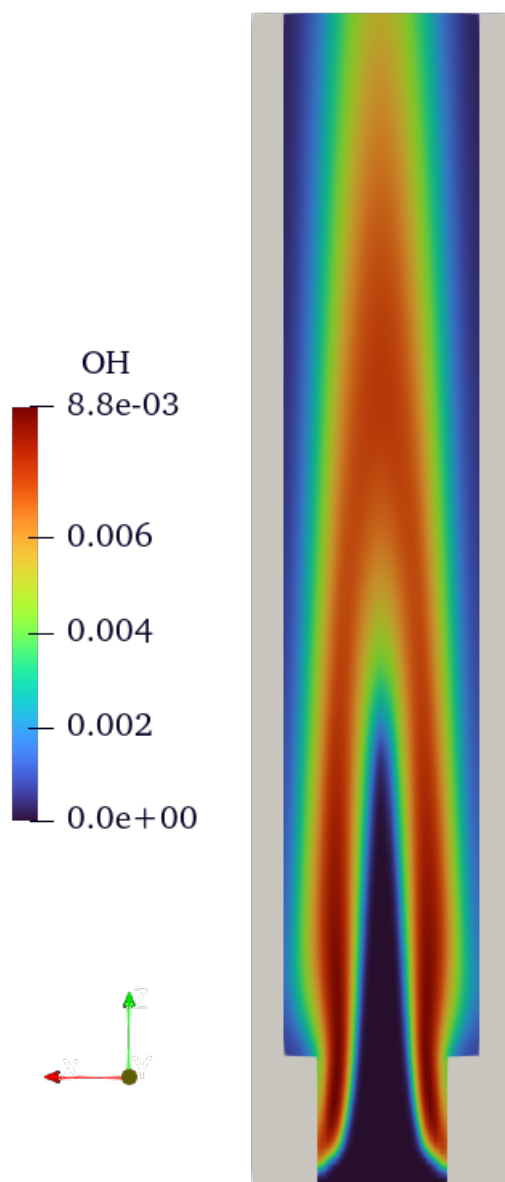
Kao rezultati, prikazane su konture masenih udjela za neke od novonastalih spojeva prilikom izgaranja za slučaj trodimenzionalne domene i punog iznosa masenog protoka.

Na slici 5.14 je prikazana raspodjela masenog udjela atoma vodika. Reaktivnost atoma vodika i tendencija formiranja stabilnijih spojeva ili molekula očituje se u tome što se najveći maseni udio nalazi u blizini *inlet*-a, a zatim se vrlo brzo smanjuje.



Slika 5.15 Konture masenog udjela H_2O_2

Slike 5.15 i 5.16 prikazuju konture masenog udjela vodikova peroksida H_2O_2 i hidroksida OH .
Spojevi i elementi koji također nastaju u reakcijama su H_2O , HO_2 i O .



Slika 5.16 Konture masenog udjela OH

6 SIMULACIJA IZGARANJA KORISTEĆI ANSYS FLUENT

6.1 Postavke simulacije

U ovom poglavlju cilj je postaviti simulaciju izgaranja koristeći softver *ANSYS Fluent* kako bi se dobiveni rezultati usporedili s rezultatima numeričkih simulacija u *OpenFOAM*-u. Provedena je jedna numerička simulacija izgaranja vodika sa zrakom za trodimenzionalnu domenu na istoj numeričkoj mreži kao u slučaju rješavanja s *OpenFOAM*-om.

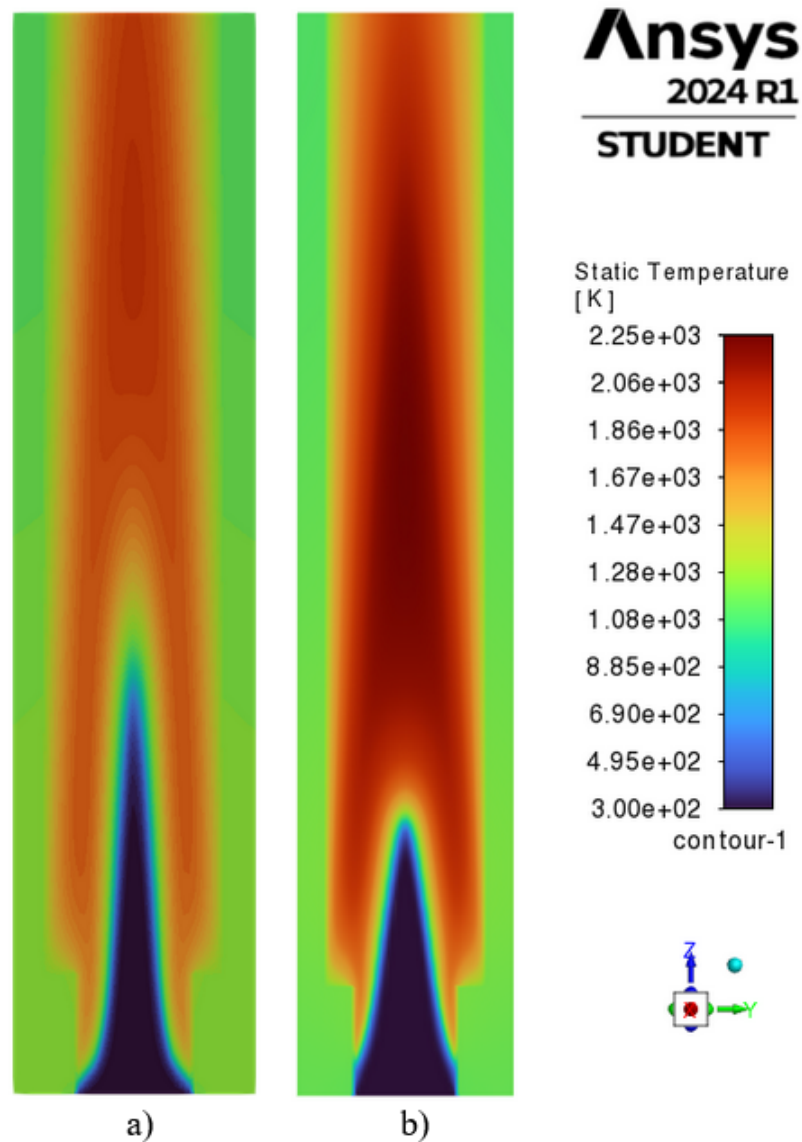
Korišten je puni maseni protok koji iznosi $1,8551 \cdot 10^{-5}$ kg/s te maseni udjeli goriva i zraka u smjesi imaju iste vrijednosti kao u tablici 4.2 s navedenim rubnim uvjetima. Ulazna temperaturna smjese plinova također iznosi 300 K.

Vrijednosti svojstava čelika su izmijenjene u postavkama materijala u *Fluent*-u kako bi odgovarale vrijednostima navedenim u tablici 4.3.

6.2 Usporedba ANSYS Fluent i OpenFOAM rezultata

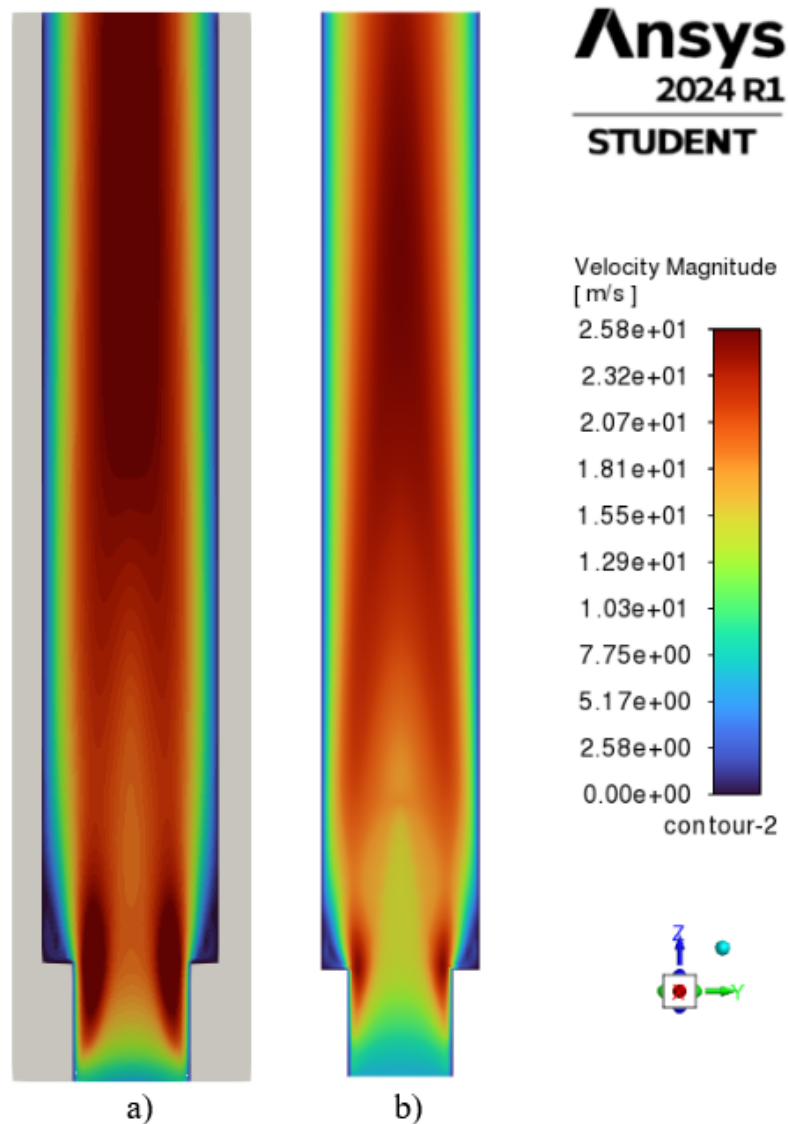
Slijedi prikaz rezultata dobivenih rješavanjem simulacije korištenjem *ANSYS Fluent*-a u usporedbi s rezultatima simulacije u *OpenFOAM*-u. Rješenja su prikazana na središnjem presjeku domene te su rješenja simulacija skalirana na isti raspon vrijednosti kako bi se lakše uočile razlike.

Na slici 6.17 je prikazano rješenje, odnosno konture temperatura unutar mikrocilindra i temperature stijenke mikrocilindra. Maksimalna temperatura izgaranja iznosi 2251 K, što je značajno više od maksimalne temperature dobivene rješavanjem u *OpenFOAM*-u koja iznosi 1972 K. Temperature same stijenke mikrocilindra imaju prilično slične vrijednosti, a oblik plamena je značajno različit kod prikazanih slučajeva zbog razlike u prostornoj raspodjeli hladne smjese plinova na ulazu u domenu.



Slika 6.17 Konture temperatura: a) *OpenFOAM*; b) *ANSYS Fluent*

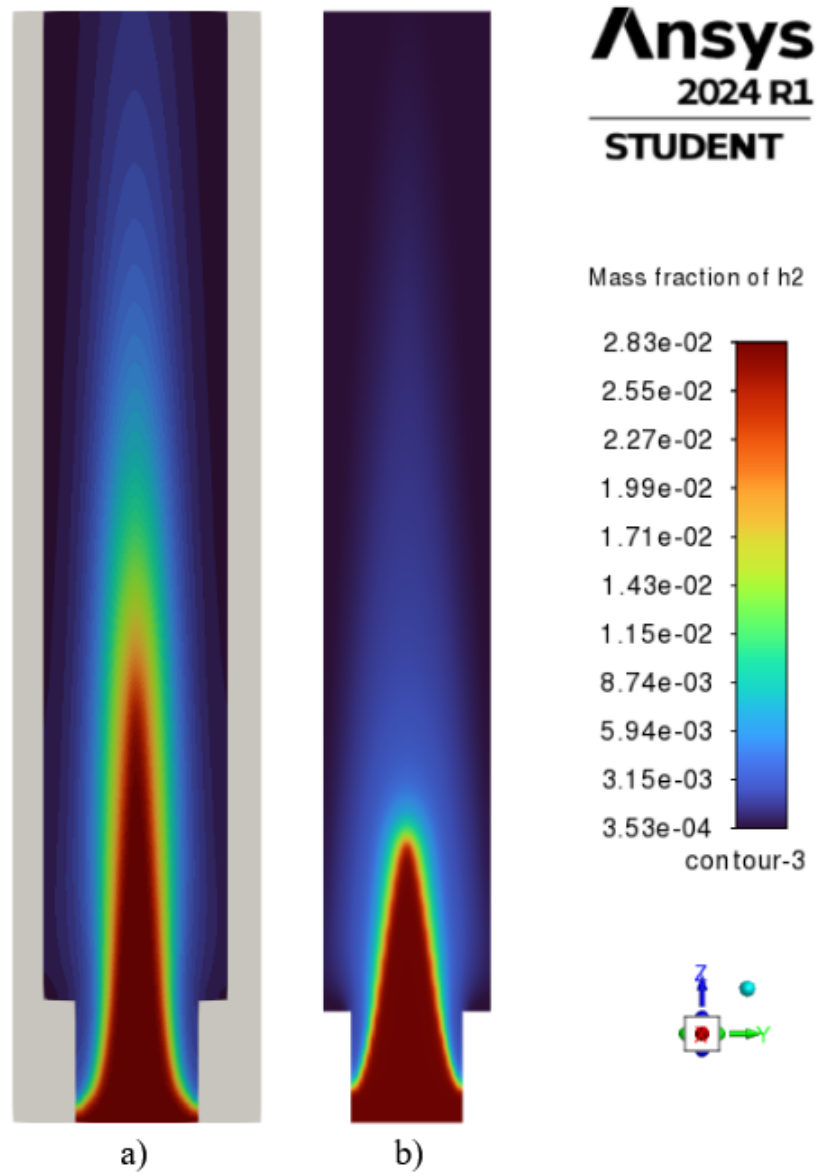
Konture brzina na središnjem presjeku domene mikrocilindra su prikazane na slici 6.18. Veće brzine javljaju se u slučaju rezultata iz *OpenFOAM*-a gdje maksimalna brzina strujanja fluida iznosi 32.6 m/s. Područje veće brzine u mikrocilindru u oba slučaja je na prijelazu iz dijela domene s manjim promjerom u dio s većim promjerom.



Slika 6.18 Konture brzina: a) *OpenFOAM*; b) *ANSYS Fluent*

Na poslijetku, na slici 6.19 je prikazana usporedba kontura raspodjele masenog udjela vodika u smjesi za *OpenFOAM* i *ANSYS Fluent* rješenja. Najveća koncentracija vodika nalazi se u mlazu neizgorenih plinova koji ulaze u domenu, nakon čega se koncentracija čistog vodika u smjesi plinova smanjuje zbog izgaranja. Oblik mlaza neizgorene smjese goriva i zraka uvelike se razlikuje za uspoređene slučajeve, a ovisi o modelu difuzije kemijskih vrsta u smjesi plinova što je potrebno

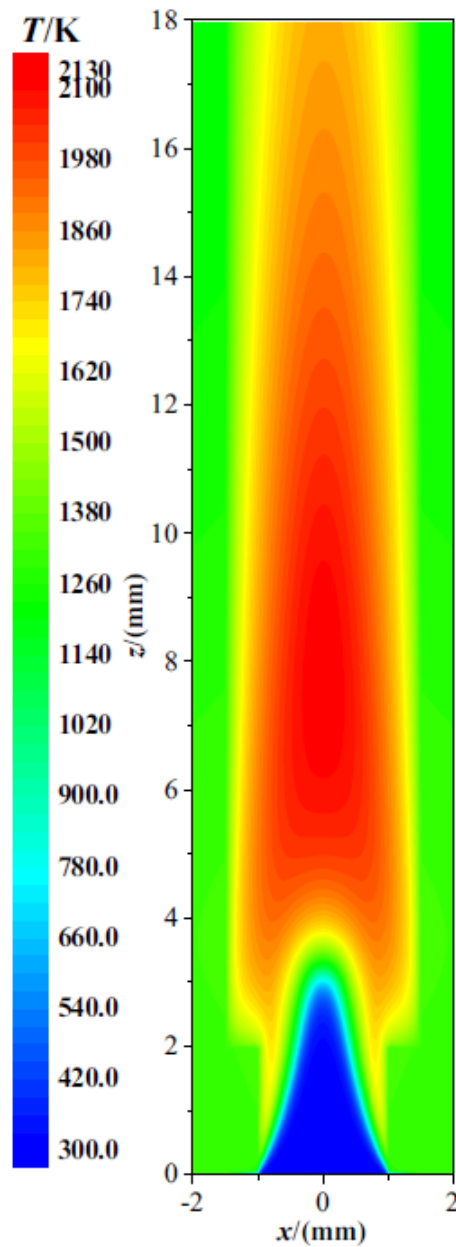
dodatno istražiti kako bi se rezultati uskladili.



Slika 6.19 Konture masenog udjela vodika: a) *OpenFOAM*; b) *ANSYS Fluent*

6.3 Usporedba s rezultatima iz literature

Rezultati numeričkih simulacija prikazani u literaturi na kojoj se temelje provedene simulacije izgaranja, mogu se usporediti s rezultatima dobivenim u ovom radu.



Slika 6.20 Konture temperatura [4]

Slika 6.20 preuzeta je iz spomenute literature, odnosno iz članka autora Jiaqiang, E. i dr. [4], a prikazuje konture temperatura za puni maseni protok smjese vodika i zraka te je za dobivanje rješenja korišten *ANSYS Fluent*. Promatrajući područje maksimalne temperature izgaranja te raspodjelu temperatura općenito, rezultati dobiveni koristeći *ANSYS Fluent* u ovom radu, prikazani na slici 6.17, se bolje podudaraju s rezultatima u literaturi, u odnosu na rezultate dobivene koristeći *OpenFOAM*.

7 ZAKLJUČAK

Numeričkim modeliranjem je ispitano izgaranje smjese vodika i zraka za dvije vrste geometrije, dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu te za dva različita masena protoka kako bi se odredio utjecaj na temperaturu plinova i stijenke cilindra, brzinu i maseni udio vodika u numeričkoj domeni.

Nakon provedenih numeričkih simulacija turbulentnog procesa izgaranja goriva sa zrakom, rezultati pokazuju značajne razlike između dvodimenzionalnog i trodimenzionalnog modela mikrocilindra za modele s punim i smanjenim iznosom protoka. Vrijednosti temperatura se kod svih slučajeva podudaraju u području kod ulaznog presjeka domene, ali se udaljavanjem od ulaznog presjeka značajno razlikuju. Trodimenzionalni model razvija najvišu temperaturu bliže ulazu te je temperatura stijenke niža nego kod dvodimenzionalnog modela. Smanjenje masenog protoka ne izaziva smanjenje maksimalne temperature plamena, ali utječe na brzinu plinova i područje formiranja plamena. Prikazani su i maseni udjeli produkata izgaranja, što dodatno doprinosi razumijevanju procesa unutar simulirane domene.

Usporedba rezultata između *ANSYS Fluent*-a i *OpenFOAM*-a simulacija slučaja s 3D domenom i punim masenim protokom, pokazala je značajne razlike u maksimalnim temperaturama izgaranja unutar mikrocilindra, gdje *ANSYS Fluent* postiže temperaturu od 2251 K, što je znatno više od 1972 K dobivenih u *OpenFOAM*-u. Temperature stijenke mikrocilindra se podudaraju, a oblik plamena značajno se razlikuje zbog načina difuzije kemijskih vrsta.

Za dobivanje boljih rezultata u nastavku istraživanja izgaranja vodika sa zrakom pomoću numeričkih simulacija, potrebno je poboljšati kvalitetu numeričke mreže i koristiti diskretizacijske metode višeg reda točnosti te dodatno proučiti termofizičke modele kako bi se što uspješnije definirao promatrani proces izgaranja.

Bibliografija

- [1] Versteeg, H. K.; Malalasekera, W.: "An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method", Pearson Education Limited, Harlow, 2007.
- [2] Pashchenko, D.: "Comparative analysis of hydrogen/air combustion CFD-modeling for 3D and 2D computational domain of micro-cylindrical combustor", International Journal of Hydrogen Energy, 42(49), 29545-29556., 2017.
- [3] Yilmaz, H. i dr.: "Effect of different turbulence models on combustion and emission characteristics of hydrogen/air flames", International Journal of Hydrogen Energy, 42(40), pp.25744-25755., 2017.
- [4] Jiaqiang, E. i dr.: "Effects of inlet pressure on wall temperature and exergy efficiency of the micro-cylindrical combustor with a step", Applied Energy, 175, pp.337-345., 2016.
- [5] Midilli, A.; and Dincer, I.: "Hydrogen as a renewable and sustainable solution in reducing global fossil fuel consumption", International Journal of Hydrogen Energy, 33(16), pp.4209-4222., 2008.
- [6] Saravanan, N. i dr.: "An experimental investigation on hydrogen as a dual fuel for diesel engine system with exhaust gas recirculation technique", Renewable Energy, Elsevier, vol. 33(3), pages 422-427., 2008.
- [7] Cowl, D. A.; Jo, Y.-D.: "The hazards and risks of hydrogen", Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 20(2), 158–164., 2007.
- [8] Pagliaro, M.; Konstandopoulos, A. G.: "Solar hydrogen: fuel of the future", Royal Society of Chemistry., 2012.
- [9] Ajanovic, A.; Sayer, M.; Haas, R.: "The economics and the environmental benignity of different colors of hydrogen", International Journal of Hydrogen Energy, 47(57), pp.24136-24154., 2022.

Bibliografija

- [10] "Vodik i gorivne ćelije", materijali za predavanja, Izvori energije, Tehnički fakultet u Rijeci, 2022.
- [11] "Ahmed body", materijali za vježbe, Računarska dinamika fluida, Tehnički fakultet u Rijeci, 2024.
- [12] Kranjčević, L.: "Mehanika fluida, skripta za studente", Tehnički fakultet, Rijeka, 2020.
- [13] Marić, T.; Hopken, J.; Mooney, K. G.: "The OpenFOAM technology primer, version OpenFOAM-v2012", 2021.
- [14] "RNG k-epsilon model", s Interneta, pristupljeno 14.6.2024.,
https://www.cfd-online.com/Wiki/RNG_k-epsilon_model
- [15] Borujeni, M. M.; Norouzi, H. R.: "How to simulate combustion of a flame using OpenFOAM", Center of Engineering and Multiscale Modeling of Fluid Flow, 2020.
- [16] Wan, J. i dr.: "Flame-anchoring mechanisms of a micro cavity-combustor for premixed H₂/air flame", Chemical Engineering Journal, 275, pp.17-26., 2015.
- [17] "chtMultiRegionFoam", s Interneta, pristupljeno 14.6.2024.,
https://openfoamwiki.net/index.php/ChtMultiRegionFoam#Solution_Strategy

Popis slika

4.1	Dimenzije mikrocilindra [3]	18
4.2	Numerička mreža za 3D domenu	19
4.3	Numerička mreža za 2D domenu	20
4.4	Struktura foldera <i>0</i>	21
4.5	Struktura foldera <i>chemkin</i>	22
4.6	Struktura foldera <i>constant</i>	24
4.7	Struktura foldera <i>system</i>	25
5.8	Konture temperatura kod punog masenog protoka: a) 2D; b) 3D	29
5.9	Konture temperatura kod smanjenog masenog protoka: a) 2D; b) 3D	30
5.10	Konture brzina za puni protok: a) 2D; b) 3D	31
5.11	Konture brzina za smanjeni protok: a) 2D; b) 3D	32
5.12	Maseni udio vodika za puni maseni protok: a) 2D; b) 3D	33
5.13	Maseni udio vodika za smanjeni maseni protok: a) 2D; b) 3D	34
5.14	Konture masenog udjela H	35
5.15	Konture masenog udjela H ₂ O ₂	36
5.16	Konture masenog udjela OH	37

Popis slika

6.17	Konture temperatura: a) <i>OpenFOAM</i> ; b) <i>ANSYS Fluent</i>	39
6.18	Konture brzina: a) <i>OpenFOAM</i> ; b) <i>ANSYS Fluent</i>	40
6.19	Konture masenog udjela vodika: a) <i>OpenFOAM</i> ; b) <i>ANSYS Fluent</i>	41
6.20	Konture temperatura [4]	42

Popis tablica

2.1	Fizikalna svojstva vodika [8]	3
4.2	Rubni uvjeti	18
4.3	Toplinska svojstva čelika	19
4.4	Kemijske reakcije	23

Sažetak

U ovom radu prikazan je postupak izrade numeričke simulacije procesa izgaranja vodika sa zrakom u komori izgaranja oblika cilindra sitnih dimenzija, odnosno mikrocilindru, koristeći CFD softvere *OpenFOAM* i *ANSYS Fluent*. Analizirani su rezultati dobiveni za 2D i 3D numeričku domenu te za provedene simulacije s dvije različite vrijednosti masenog protoka smjese. Pokazano je da dimenzionalnost domene značajno utječe na promatrane rezultate raspodjele temperatura fluida, brzina i masenog udjela vodika u domeni. Temperatura stijenke cilindra je manja kod slučajeva s 3D domenom u odnosu na temperaturu kod 2D domene. Nadalje je zaključeno da smanjenje masenog protoka ne utječe na maksimalnu postignutu temperaturu, ali utječe na mjesto formiranja plamena.

Ključne riječi — **OpenFOAM, numerička simulacija, izgaranje, vodik**

Abstract

This thesis presents the process of creating a numerical simulation of hydrogen and air combustion in a small-scale cylinder combustion chamber, that is micro-cylinder, using CFD software *OpenFOAM* and *ANSYS Fluent*. The results obtained for 2D and 3D numerical domains and simulations with two different mass flow rate values of the mixture were analyzed. It was shown that the dimensionality of the domain significantly affects the observed results of fluid temperature distribution, velocities, and hydrogen mass fraction within the domain. The cylinder wall temperature is lower in cases with a 3D domain compared to the temperature in the 2D domain. Furthermore, it was concluded that a reduction in mass flow rate does not affect the maximum achieved temperature but does influence the flame formation location.

Keywords — **OpenFOAM, numerical simulation, combustion, hydrogen**