

MASTEROPPGÅVE

for

Student Erlend Liavåg Grotle

Våren 2008

Modellering av NO_x frå forbrenning

Modeling of NO_x from combustion

Bakgrunn og formål

Ved Institutt for energi- og prosesssteknikk, NTNU, og den samarbeidande avdelinga ved SINTEF Energiforskning AS har det i mange år vore ein stor aktivitet knytt til modellering og numerisk simulering av turbulente strøymingar med og utan kjemiske reaksjonar. Metodane og modellane som er utvikla gjennom denne forskingsaktiviteten, har vorte nytta i ei rad industrielle problemstillingar.

Det meste av energibruken i verda går gjennom forbrenning, og mykje av luftforureining og anna foureining kjem frå forbrenning. Nitrogenoksid (NO_x) er ein viktig del av dette. For å redusere danning av NO_x og anna foureining, vert brennarar laga meir og meir med forblanda forbrenning. Dette gjev problem med flammestabilitet og støy. Strøymingsbiletet er svært viktig for alle desse sidene ved forbrenning. I ein numerisk modell vil det være avgjerande for resultatet at strøyming og samvirket mellom strøyming og forbrenning er godt modellert.

Det langsiktige målet med prosjektet er å kunne rekne detaljert på korleis flammer oppfører seg, korleis og kor mykje foureiningar som vert danna i strøymingar med forbrenning. Dette vil være eit hjelpemiddel når ein skal konstruere nytt eller forbetre eksisterande forbrenningsutstyr. Oppgåva er ei videreføring av tidligare arbeid ved instituttet med liknande problemstillingar, og spesielt av prosjektoppgåva frå hausten 2007.

I oppgåva skal kandidaten:

- setje seg meir inn i teori og modellar for turbulens, turbulent forbrenning og kjemiske reaksjonar som er nytta i Spider og alternativ til disse modellane.
- bruke Spider for å rekne på turbulent forbrenning med rask kjemi og med detaljert kjemi. Brennartilfelle, evt. med variantar, skal drøftast og avtalast med rettleiarane.
- samanlikne resultat med måledata og/eller andre sine resultat og drøfte dei.

Ein framdriftsplan (*Planlagde aktivitetar med tidsplan for framdrift*) for heile oppgåva skal leggst fram for faglærer/rettleiar(ar) for kommentarar innan 14 dagar etter at oppgåveteksten er utlevert.

Oppgåvesvaret skal redigerast mest mogleg som ein forskingsrapport med innhaldsliste, eit samandrag på norsk, konklusjon, litteraturliste, etc. Kandidaten skal leggje vekt på å gjøre rapporten lettseleg og oversiktleg. Det er viktig at naudsynte tilvisingar mellom stadar som svarar til kvarandre i tekst, tabellar og figurar, er gitt begge stadar. Når arbeidet skal vurderast, vert det lagt stor vekt på at resultata er godt gjennomarbeidde, at dei er oversiktleg framstilte (grafisk, tabellarisk), og at dei er utførleg drøfta.

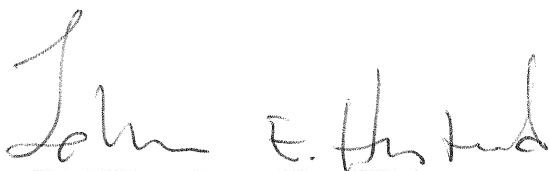
Det er ein føresetnad at kandidaten på eige initiativ opprettar eit tilfredsstillande kontakt-tilhøve med faglærer og rettleiar(ar).

I samsvar med "Utfyllende reglar til studieforskrifta for teknologistudiet/sivilingeniørstudiet" ved NTNU § 20, tingar instituttet seg rett til å nytte alle resultat til undervisnings- og forskingsføremål, og dessutan til publikasjonar.

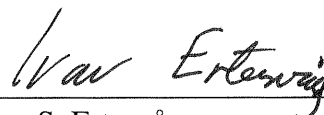
Sluttrapporten for oppgåva skal leverast innbunden i 3 komplette eksemplar med eit "lausblad" med konsentrert samandrag med forfattarnamn og oppgåvetittel for eventuell referering i tidsskrift (maksimum éi maskinskriven side med dobbel linjeavstand. Fleire kopier av rapporten ut over dette, til evt. medrettleiarar/kontaktpersonar skal avtalast med, og evt. leverast direkte til dei det gjeld. Til faglærer/instituttet skal det også leverast ein komplett kopi av rapporten på CD-ROM i Word-format eller tilsvarande. Programkoden som er nytta skal også leverast på CD/DVD til faglærer.

Sluttrapporten skal leverast inn til instituttet *innan 10. juni 2008*.

Institutt for energi- og prosessteknikk, 16.januar 2008



Johan E. Hustad
Instituttleiar



Ivar S. Ertesvåg
Faglærer/rettleiar

Medrettleiarar/kontaktperson:
Kjell Erik Rian
Bjørn Lilleberg

Samandrag

Føremålet med denne oppgåva har vore å setje seg inn i modellering av turbulent forbrenning og nytte teori i praksis ved simulering med dataprogrammet SPIDER. Rett modellering er viktig sidan både turbulens og forbrenning har innverknad på danninga av NO_x . Saman utgjer dei eit komplisert fagfelt. Det har lenge vore forska på desse emna, og i dag eksisterer det fleire modellar. Turbulensen påverkar forbrenninga sidan den står for mykje av blandinga.

Det vert presentert fleire grunnlikningar som er nytta i modelleringa. Teorien presentert omhandlar hovudsakleg k - ε -modellen og Magnussen sin EDC-modell for turbulent forbrenning. Likningane som inngår i modellane er diskretisert og implementert i programmet SPIDER, som vert presentert i oppgåva. CFD-koda nyttar kurvelineære, ikkje-ortogonale koordinatar og kan rekne på komplekse geometriar.

Dei viktigaste NO_x -mekanismane er presentert, og nokre metodar for å redusere utslipp er nemnde i rapporten.

Det er gjort simuleringar av to turbulente diffusjonsflammer, og resultata er samanlikna med måledata. Den eine er omtala som “H3-flamma”, og har ei brenselblanding med 50-50 % hydrogen og nitrogen. Den andre har ei blanding med CH_4 , H_2 og N_2 i brensløst. Fleire variantar av k - ε -modellen er samanlikna. Magnussen sin EDC-modell er nytta som forbrenningsmodell. Det er testa ulike grid for å få ei tilnærma nettverkuavhengig løysing. Målingar, og metodar på korleis dette har vorte gjort for metanflamma, er og snakka om i siste kapitlet.

For begge flammene er det gjort simuleringar med detaljert kjemi. Dette er naudsynt for å få informasjon om danninga av NO_x . Resultata synte at metan-flamma ga større avvik frå målingar. Det vart freista å betre modellen ved å justere blandingsraten i EDC-modellen. Resultat synte at simulering med detaljert kjemi stiller høgare krav til oppløysing på nettverket.

NO -verdiar frå simuleringane er samanlikna med måledata for metan-flamma. Resultata er utførleg drøfta.

Summary

The objective of this master thesis has been to learn more about the theory of modeling turbulent combustion, and to use theory in practice by simulating flames with the computing program SPIDER. Realistic models are important, since both turbulence and combustion influence NO_x -formation. Together they form a complicated special field. A lot of research work on these topics has been done, and today there are several models. The turbulence has influence on combustion, since it stands for much of the mixing of reactants and products.

Several basic equations are presented. The theory is mainly dealing with the k - ε -model and the EDC-model by Magnussen for turbulent combustion. All equations are discretized and implemented in SPIDER, and are presented in the thesis. The CFD-code use curvilinear non-orthogonal coordinates, and can perform numerical calculation of flow with, or without, combustion in complex geometries.

The most important mechanisms of NO_x -formation are presented, and some methods concerning reduction of NO_x are mentioned.

Two turbulent diffusion flames are simulated, and the results are compared with measurements. One of the flames, the “H3-flame”, has a 50-50 % mixture fuel of hydrogen and nitrogen. The other one has a mixture of methane, hydrogen and nitrogen. Several variants of the k - ε -model are compared. The EDC-model by Magnussen is used in the modeling of combustion. Different grids are tested in order to find one that can give grid-independent solutions. Measurements for the methane-flame, and methods on how to perform these, are also discussed in the last chapter.

Both flames have been simulated with detailed chemistry included. This is necessary to get information about the NO_x -formation. The results showed that the methane-flame gave greater deviations compared to measurements. The model was improved by adjusting a variable in the EDC-model. Results from simulations with detailed chemistry showed that a finer grid is needed compared to infinite fast chemistry.

NO -values from the simulation are compared with measured data for the methane-flame. The results are thoroughly discussed.

Forord

Utslepp av nitrogenoksid er eit omfattande problem. Lenge har ein vore klar over negative konsekvensar forbundet med dette, og i seinare tid er det skjedd mykje for å redusere utsleppa. Numerisk simulering av forbrenning kan hjelpe til med å forme utstyr i industrien. Dette stiller krav til simuleringsverktøy, og det pågår stadig forbetringar av turbulens- og forbrenningsmodellar.

Mange emne rommar simulering av turbulent forbrenning. Ein må ha kjennskap til strøymingsteknikk, termodynamikk, varme- og forbrenningsteknikk, programmering og numerisk modellering, saman med fleire emne innanfor desse fagfelt. Mykje av denne tida med masteroppgåva har gått med til feilsøking og problem-relaterte oppgåver. Mellom anna har det vore kompilararar som ikkje verkar, eller manglande lisensar. Dette, saman med den opphavlege problemstillinga, har gjort denne tida veldig lærerik.

Rettleiarane mine har vore Ivar Ståle Ertesvåg, Kjell Erik Rian og Bjørn Lilleberg. Eg vil rette stor takk til desse for å ha gjeve gode svar på mange spørsmål.

Stor takk til Ole Martin Hansen og Eugen Uthaug for hjelp med installasjonar og praktiske ting. Eg vil og takke Bjørn Lindi saman med andre som har gjort det mogleg å få nytte kapasitet på tungreknemaskinene, Norgrid, Stallo og Njord.

Til slutt vil eg takke alle ved instituttet som har gjort det mogleg å gjennomføre oppgåva.

Institutt for energi- og prosesseteknikk
Noregs teknisk-naturvitskaplege universitet (NTNU)
Trondheim, juni 2008

Erlend Liavåg Grotle

*Me sjå ei sol, som sender oss dag
og jamstødt søker og spretter.
Det gjenger kvart år med same lag,
med vår og sumar og vetter.
Kor lenge gjekk det vel so som no?
Kor lenge skal det vel ganga so?*

(Ivar Aasen)

Innhald

Samandrag	i
Summary	iii
Forord	v
Figurar	xi
Symbolliste	xv
1 Innleiing	1
1.1 Motivasjon for oppgåva	1
1.2 Turbulent forbrenning	1
1.2.1 Tidlegare arbeid	2
1.3 Bidrag	3
1.4 Oppbygnad av rapporten	4
2 Teoretisk grunnlag	5
2.1 Grunnlikningar	5
2.1.1 Konservering av masse	5
2.1.2 Konservering av rørslemengd	6
2.1.3 Konservering av energi	7
2.1.4 Generalisert transportlikning	8
2.2 Termodynamiske eigenskapar	8
2.3 Transportkoeffisientar	9
2.4 Kjemiske reaksjonar	10
2.5 Turbulensmodellering	11
2.5.1 Oppdeling og midling	11
2.5.2 Turbulensviskositet	13
2.5.3 Reynoldsspenningar	14
2.5.4 Gradientmodell for turbulensfluksar	15
2.5.5 k - ε -modell	16
2.5.6 Likning for reynoldsspenningane	20
2.5.7 Reynoldstal for turbulens	21
2.6 Modellering av turbulent forbrenning	22
2.6.1 Eddy Dissipation Concept	22

2.6.2	Blandingsfraksjon	31
3	Programsystemet SPIDER	33
3.1	Koordinatsystem	33
3.2	Diskretisering ved endeleg volummetode	34
3.2.1	Diskretisering av diffusive ledd	37
3.2.2	Diskretisering av konvekktive ledd	37
3.3	Løysingsalgoritme for ikkje-forskyvd nettverk	41
3.4	Grenseverdiar	43
3.4.1	Innløp	43
3.4.2	Utløp	43
3.4.3	Symmetri	43
3.4.4	Veggflate	43
3.4.5	Trykkbehandling	44
4	NO_x-mekanismar	45
4.1	Danning av NO _x	45
4.1.1	Termisk NO (Zeldovich-mekanismen)	45
4.1.2	Prompt NO (Fenimore-NO)	46
4.1.3	N ₂ O-mekanismen	48
4.1.4	Brensel-NO	49
4.1.5	NNH-mekanismen	51
4.1.6	Oksidasjon av NO	52
4.2	Reduksjon av NO _x	53
4.2.1	Primærmetodar	53
4.2.2	Sekundærmetodar	54
5	Numerisk simulering av to turbulente diffusjonsflammer	57
5.1	Skildring av brennaren og eksperimentelle data	58
5.1.1	CH ₄ /H ₂ /N ₂ diffusjonsflamme	58
5.1.2	Turbulent hydrogen jet-flamme	59
5.2	Modellering med CFD-programmet SPIDER	61
5.2.1	Grenseverdiar	61
5.2.2	Test av grid	67
5.2.3	Konstantar i <i>k-ε</i> -modellen	77
5.3	Modellering av NO _x frå forbrenning	94
5.3.1	Innleiing	94
5.3.2	Simulering med detaljert kjemisk kinetikk - H ₃ -flamma	95
5.3.3	Simulering med detaljert kjemisk kinetikk - CH ₄ -flamma	111
5.3.4	Verknad av finare oppløysing på nettverket	139
5.3.5	Endring av blandingsraten i reaktormodellen	158
5.3.6	Modellering av NO _x	174
5.4	Drøfting og samanlikning av H ₃ - og CH ₄ /H ₂ /N ₂ -flamma	186

Innhald	ix
5.5 Oppsummering	189
6 Konklusjon og vidare arbeid	191
6.1 Konklusjon	191
6.2 Vidare arbeid	192
Litteratur	193

Figurar

2.1	Energikaskade	24
2.2	Skjematisk finstruktur-reaktor	27
2.3	Blandekammer, definisjon av blandingsfraksjon	32
3.1	(a) Nettverk i det fysiske rom. (b) Nettverk i det numeriske rom.	34
3.2	To-dimensjonalt kontrollvolum	38
3.3	Andre ordens oppstrømsdifferansiering	40
4.1	Hovudstega for prompt NO og danning av NO i brenselnitrogen-mekanismen. Figuren er henta frå [18].	48
4.2	Oksidasjon av HCN i ei $H_2/O_2/Ar$ -flamme med tilsett HCN. Figuren er henta frå [18].	50
4.3	Reaksjonsdiagram for $NO \rightarrow HCN \rightarrow N_2$ -mekanismen. Figuren er henta frå [18].	50
4.4	Oksidasjon av NH_3 [18].	51
5.1	Brennar for målingar [6].	60
5.2	Simulering av 2 meter langt røyr. Fart og turbulensenergi.	63
5.3	Simulering av 2 meter langt røyr. Dissipasjon av turbulensenergi, ϵ	64
5.4	Samanlikning røyrlengder. Fart i x-retning, U.	64
5.5	Ulike innløpsverdiar. Fart i x-retning, U.	65
5.6	Ulike innløpsverdiar testa med rask kjemi.	66
5.7	Test av grid - tal på celler.	68
5.8	Test av grid. Fart i x-retning.	70
5.9	Test av grid. Fart i x-retning.	71
5.10	Test av grid. Turbulensenergi.	72
5.11	Test av grid. Turbulensenergi.	73
5.12	Test av grid. Temperatur.	74
5.13	Test av grid. Temperatur.	75
5.14	Konstantar i $k-\epsilon$ -modellen - CH_4 -flamme. Fart i x-retning.	79
5.15	Konstantar i $k-\epsilon$ -modellen - CH_4 -flamme. Fart i x-retning.	80
5.16	Konstantar i $k-\epsilon$ -modellen - CH_4 -flamme. Fart i x-retning.	81
5.17	Konstantar i $k-\epsilon$ -modellen - CH_4 -flamme. Turbulensenergi.	82
5.18	Konstantar i $k-\epsilon$ -modellen - CH_4 -flamme. Turbulensenergi.	83
5.19	Konstantar i $k-\epsilon$ -modellen - CH_4 -flamme. Turbulensenergi.	84
5.20	Produksjon og dissipasjon av turbulensenergi.	86

5.21	Grid for modellering av H3-flamma. 120x50 celler.	88
5.22	Konstantar i k - ε -modellen - H3-flamma.	89
5.23	Konstantar i k - ε -modellen - H3-flamma.	90
5.24	Konstantar i k - ε -modellen - H3-flamma.	91
5.25	Konstantar i k - ε -modellen - H3-flamma.	92
5.26	Konturplott av temperatur og massefraksjon av OH nær dysa - H3-flamma. Horisontal akse gjev akseretninga i meter. Vertikal akse er radiell retning i meter.	96
5.27	Aksielt profil for temperaturen - H3-flamma.	97
5.28	Gridlinjer gjennom nodepunkta. Konturplott av Y_{OH} nær dysa - H3-flamma.	98
5.29	Samanlikning detaljert og rask kjemi ved $x/d = 5$ - H3-flamma. . . .	100
5.30	Samanlikning detaljert og rask kjemi ved $x/d = 20$ - H3-flamma. . . .	101
5.31	Samanlikning detaljert og rask kjemi ved $x/d = 40$ - H3-flamma. . . .	102
5.32	Samanlikning detaljert og rask kjemi ved $x/d = 60$ - H3-flamma. . . .	103
5.33	Samanlikning detaljert og rask kjemi - H3-flamma. Temperatur. . . .	104
5.34	Samanlikning detaljert og rask kjemi - H3-flamma. Temperatur. . . .	105
5.35	Samanlikning detaljert og rask kjemi - H3-flamma. Massefraksjon av OH.	106
5.36	Samanlikning detaljert og rask kjemi - H3-flamma. Massefraksjon av H_2	107
5.37	Samanlikning med måldata - H3-flamma. Massefraksjon av H_2	108
5.38	Samanlikning med måldata - H3-flamma. Massefraksjon av H_2O ved $x/d = 80$	109
5.39	Konturplott av temperatur og massefraksjon av OH - CH_4 -flamma. . .	112
5.40	Konturplott nær dysa - CH_4 -flamma.	113
5.41	Aksielle profil (ved $r = 0$) - CH_4 -flamma.	114
5.42	Samanlikning av verdier ved $x/d = 5$ - CH_4 -flamma.	117
5.43	Samanlikning av verdier ved $x/d = 10$ - CH_4 -flamma.	118
5.44	Samanlikning av verdier ved $x/d = 20$ - CH_4 -flamma.	119
5.45	Samanlikning av verdier ved $x/d = 40$ - CH_4 -flamma.	120
5.46	Samanlikning av verdier ved $x/d = 60$ - CH_4 -flamma.	121
5.47	Samanlikning av verdier ved $x/d = 80$ - CH_4 -flamma.	122
5.48	Samanlikning av verdier ved $x/d = 5$ - CH_4 -flamma.	123
5.49	Samanlikning av verdier ved $x/d = 10$ - CH_4 -flamma.	124
5.50	Samanlikning av verdier ved $x/d = 20$ - CH_4 -flamma.	125
5.51	Samanlikning av verdier ved $x/d = 40$ - CH_4 -flamma.	126
5.52	Samanlikning av verdier ved $x/d = 60$ - CH_4 -flamma.	127
5.53	Samanlikning av verdier ved $x/d = 80$ - CH_4 -flamma.	128
5.54	Samanlikning av verdier - CH_4 -flamma. Massefraksjon av OH.	129
5.55	Samanlikning av verdier - CH_4 -flamma. Massefraksjon av OH.	130
5.56	Samanlikning av verdier - CH_4 -flamma. Massefraksjon av OH.	131
5.57	Samanlikning av verdier ved $x/d = 5$ - CH_4 -flamma.	132

5.58	Samanlikning av verdier ved $x/d = 10$ - CH ₄ -flamma.	133
5.59	Samanlikning av verdier ved $x/d = 20$ - CH ₄ -flamma.	134
5.60	Samanlikning av verdier ved $x/d = 40$ - CH ₄ -flamma.	135
5.61	Samanlikning av verdier ved $x/d = 60$ - CH ₄ -flamma.	136
5.62	Samanlikning av verdier ved $x/d = 80$ - CH ₄ -flamma.	137
5.63	Verknad av finare oppløysing. Konturplott av grid 1 nær dysa.	141
5.64	Verknad av finare oppløysing. Konturplott av grid 2 nær dysa.	142
5.65	Verknad av finare oppløysing. Konturplott av grid 3 nær dysa.	143
5.66	Verknad av finare oppløysing. Konturplott av grid 4 nær dysa.	144
5.67	Verknad av finare oppløysing. Konturplott av alle grida nær dysa. Dei med finare oppløysing er lagt over dei som er grovare.	145
5.68	Verknad av finare oppløysing. Samanlikning av verdier ved $x/d = 5$.	146
5.69	Verknad av finare oppløysing. Samanlikning av verdier ved $x/d = 10$	147
5.70	Verknad av finare oppløysing. Samanlikning av temperatur.	148
5.71	Verknad av finare oppløysing. Vektorplott av farta ved utløpet.	150
5.72	Verknad av finare oppløysing. Vektorplott av grid 1 nær dysa.	151
5.73	Grid med 75x57 celler.	152
5.74	Samanlikning av tre grid med same område, men ulikt tal på celler. Fart i x-retning ved $x/d = 5$ og 10.	153
5.75	Samanlikning av tre grid med same område, men ulikt tal på celler. Fart i x-retning ved $x/d = 20$ og 40.	154
5.76	Samanlikning av tre grid med same område, men ulikt tal på celler. Temperatur ved $x/d = 5$ og 10.	155
5.77	Samanlikning av tre grid med same område, men ulikt tal på celler. Temperatur ved $x/d = 20$ og 40.	156
5.78	Samanlikning av τ^* for H ₃ - og CH ₄ -flamma ved $x = 0,02$ m.	159
5.79	Samanlikning av verdier for H ₃ - og CH ₄ -flamma ved $x = 0,02$ m. . .	160
5.80	Samanlikning av ulike blandingsrater. Konturplott av temperatur frå grid med 65x30 celler.	162
5.81	Samanlikning av ulike blandingsrater. Massefraksjon av OH frå grid med 65x30 celler.	163
5.82	Samanlikning av ulike blandingsrater. Konturplott av temperatur frå grid med 75x57 celler.	164
5.83	Samanlikning av ulike blandingsrater. Massefraksjon av OH frå grid med 75x57 celler.	165
5.84	Samanlikning av ulike blandingsrater, der $v_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Fart i x-retning ved $x/d = 5$ og $x/d = 10$	167
5.85	Samanlikning av ulike blandingsrater, der $v_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Fart i x-retning ved $x/d = 20$ og $x/d = 40$	168
5.86	Samanlikning av ulike blandingsrater, der $v_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Fart i x-retning ved $x/d = 60$ og $x/d = 80$	169
5.87	Samanlikning av ulike blandingsrater, der $v_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Temperatur ved $x/d = 5$ og $x/d = 10$	170

5.88	Samanlikning av ulike blandingsrater, der $\nu_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Temperatur ved $x/d = 20$ og $x/d = 40$	171
5.89	Samanlikning av ulike blandingsrater, der $\nu_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Temperatur ved $x/d = 60$ og $x/d = 80$	172
5.90	Samanlikning av NO, T, O ₂ og OH ved $x/d = 5$	175
5.91	Samanlikning av H ₂ og CH ₄ ved $x/d = 5$	176
5.92	Samanlikning av NO, T, O ₂ og OH ved $x/d = 10$	177
5.93	Samanlikning av H ₂ og CH ₄ ved $x/d = 10$	178
5.94	Samanlikning av NO, T, O ₂ og OH ved $x/d = 20$	179
5.95	Samanlikning av H ₂ og CH ₄ ved $x/d = 20$	180
5.96	Samanlikning av NO, T, O ₂ og OH ved $x/d = 40$	181
5.97	Samanlikning av H ₂ og CH ₄ ved $x/d = 40$	182
5.98	Samanlikning av NO, T, O ₂ og OH ved $x/d = 60$	183
5.99	Samanlikning av NO, T, O ₂ og OH ved $x/d = 80$	184
5.100	Vektorplott av farta, og konturplott av Y_{O_2} - H ₃ - og CH ₄ -flamma. . . .	187

Symbolliste

Latinske bokstavar

$[A]$	konsentrasjon av stoff A
A_k	stoff A_k
A_ℓ	konstant i Arrhenius-likninga
\mathbf{A}	arealvektor
$b_{1/2}$	halvbreidd
C_1, C_2	konstantar i likninga for reynoldsspenningane
C_{D1}, C_{D2}	konstantar i EDC modellen
$C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$	konstantar i k - ε -modellen
C_μ	konstant i k - ε -modellen
C'_μ	konstant i likninga for reynoldsspenningane
C_L, C_D	konstantar i k - ε -modellen
$c_{p,k}$	varmekapasitet åt stoff k
c_i	molkonsentrasjon av stoff k
D	diffusjonskoeffisient
D_{ij}	diffusjonsledd i likninga for reynoldsspenningane
D_k	diffusjonsledd i likninga for k
D_ε	diffusjonsledd i likninga for ε
d	diameter
$E_{a\ell}$	aktiveringsenergi for reaksjon ℓ
f	ytre krefter som massekrefter, blandingsfraksjon
G^{ij}	geometrisk diffusjonskoeffisient
h	entalpi
$h_{f,k}^\circ$	danningsentalpi for stoff k
I	vekselverknad mellom trykk og tettleik i likninga for reynoldsspenningane, turbulensintensitet
J	Jakobideterminanten
\mathbf{J}	transportvektor
$j_{k,j}$	massefluks for stoff k i x_j -retning

k	turbulens kinetisk energi
k_ℓ	reaksjonskonstant for reaksjon ℓ
L, ℓ	turbulent lengdeskala
ℓ	middel fri veglengde i Prandtls blandingsvegmodell, reaksjon
Le	lewistal
Ma	machtal
M_{tot}	total masse i EDC modellen
M_k	molmasse for stoff k
m	masse
\dot{m}	massestraum
N_R	totalt tal på reaksjonslikningar
N_s	totalt tal på stoffkomponenter i ei blanding
\mathbf{n}	normalvektor
P_{ij}	produksjonsledd i likninga for reynoldsspenningane
P_k	produksjonsledd i likninga for k
P_ε	produksjonsledd i likninga for ε
Pr	prandtltalet
p	trykk
p'	trykkorreksjon
p_k	partialtrykk åt stoff k
\dot{Q}	strålingsledd i energilikninga
Q_ε	nedbrytingsledd i likninga for ε
q	dissipasjon av turbulensenergi i kaskademodellen
q_j	varmefluks per areal i x_j -retning
q_n	dissipasjon for energinivå n i kaskademodellen
R	gasskonstant på massebasis
Re	reynoldstalet
Re_T	turbulensreynoldstal
R_k	kjemisk reaksjonsrate/produksjonsrate
R_u	universell gasskonstant
r	radius
S_1, S_2	koeffisientar i kjeldeleddet
S	generelt kjeldeledd
Sc	schmidttalet
s	buelengde
T	temperatur i Kelvin
T_b	bakgrunnstemperatur for strålingsmodell
T°	referansetilstand for temperatur

t	tid
U	fart i x -retning, middelfart i x -retning
\mathbf{U}	fartsvektor
u	fart
u_s	senterlinjefart
u'	turbulente fluktuasjoner i Reynolds-midla likningar, turbulent fartsskala i Prandtls blandingsvegmodell
u''	turbulente fluktuasjoner i Favre-midla likningar, turbulent fartsskala
V	volum, fart i y -retning
v	fart i y -retning
w	overføring i kaskademodell
X_k	molfraksjon for stoff k
Y_k	massefraksjon for stoff k
$x, y, z/x_i$	kartesiske koordinataks

Greske bokstavar

α, α_t	molekylær og turbulent termisk diffusivitet
α_p	relaksasjonsfaktor
β_ℓ	konstant i Arrhenius-likninga
γ	intermittensfaktor i EDC modellen
Γ	generell diffusjonskoeffisient
δ	differanse
δ_{ij}, δ_k^j	Kronecker-delta; $=1$ når $i = j/k$; $=0$ når $i \neq j/k$
ε	dissipasjonsledd i likninga for turbulens kinetisk energi
ε_{ij}	dissipasjonsledd i likninga for reynoldsspenningane
κ	total absorpsjonskoeffisient
λ	termisk konduktivitet
μ, μ_t	molekylær og turbulent dynamisk viskositet
μ_B	bulkviskositet
ν, ν_t	molekylær og turbulent dynamisk viskositet
$\nu'_{k\ell}, \nu''_{k\ell}$	støkiometriske koeffisientar for stoff k i likning ℓ
ν_r	blandingsrate
ξ^i	kurvelineære ikkje-ortogonale koordinataks
ρ	tettleik
σ	molekylært prandltal

σ_{ij}	total spenningstensor
σ_b	Stefan Boltzmanns konstant, $5,669 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	konstanter i k - ε -modellen
σ_m	karakteristisk molekyldiameter
$\sigma_{\varphi,t}$	turbulens prandtl-/schmidt-tal for φ
τ^*	tidsskala for finstrukturen
τ_{ij}	viskøs spenningstensor
Φ	brenseloverskotstal
Φ_{ij}	omfordelingsledd i likninga for reynoldsspenningane, viskøs dissipasjon
φ	generell fysisk storleik
χ	andel finstruktur som reagerer
ω	tøyingsfart
Ω_μ^*	kollisjonsintegral

Høge merketeikn

$/, //$	fluktuerande verdi ved Reynolds- og Favre-midling, reaktantar og produkt, turbulensskalaer
$-, \sim$	middelverdi, massemidla middelverdi
$*$	finstruktur i EDC
$*$	verdi ved førre tidsskritt
\circ	referansetilstand
\circ	omgjevnader til finstruktur-reaktor i EDC
i	retning

Lave merketeikn

1	retning
2	retning
B	Bilger
b	samla kjeldeledd i den diskretiserte likninga
bl	blanding
br	brensel
C	karbon
eff	effektiv
eq	jamvekt
FS	finstruktur

f	foroverreaksjon
H	hydrogen
i, j, k, l	koordinatretningar, indeksar
k	nemning for stoff
min	minste verdi
NO	ikkje-ortogonal
nb	nabopunkt i nettverk
nn	flate på kontrollvolum
oks	oksidant
omg	omgjevnader til finstrukturen
O	ortogonal, oksygen
P	node i nettverk
par	parallelt
pr	produkt
prod	produkt
R	reaktor i EDC-modellen
rad	stråling
res	resirkulert
t	turbulens, turbulent
turb	turbulent
tot	total mengde
w	vegg

1 Innleiing

1.1 Motivasjon for oppgåva

Mykje av energibruken i verda går gjennom forbrenning. Dette er ei viktig kjelde til utslepp av ei rekkje stoff. NO_x er ein fellesnemnar for NO (nitrogenmonoksid) og NO_2 (nitrogendioksid), og bidreg hovudsakleg til fotokjemisk smog, sur nedbør og bakkenært ozon. NO_x kan og verka som gjødsel og skapa overgjødsling. Utslepp av NO_x frå fly er eit aukande problem, då stratosfærisk ozon (O_3) vert nedbrote i ein katalytisk reaksjon [34] (s. 552). Ei nedbryting av stratosfærisk ozon vil gjere det lettare for ultrafiolette strålar å trenge inn i atmosfæren.

I mange land er kol og biomasse den største energikjelda. Ved forbrenning av desse er nitrogen bunde i brensllet hovudårsak til danning og utslepp, medan ved forbrenning av olje og gass er det høge temperaturar som hovudsakleg bidreg til danning av NO_x . I Noreg er kjeldene til utslepp av nitrogenoksid først og fremst forbrenning av fossilt brensel i industri, offshore oljeaktivitetar og mobile kjelder på land og til havs. Gjennom Gøteborg-protokollen har ein rekkje land inngått ein avtale om reduksjon av NO_x , og Noreg har forplikta seg å redusere utslepp med 20 prosent fram mot 2010 i høve 2005 [14].

Fleire metodar er i bruk for å redusere utslepp av NO_x . I industrien har det vorte meir vanleg med forblanda forbrenning for å redusere flammetemperaturen. Problemet med slik forblanda forbrenning kan vere ustabilitet i flamma og støy. Ved SINTEF Energiforskning og Institutt for energi- og prosessteknikk ved NTNU, har det i ein årrekkje vore mykje aktivitet kring NO_x , og det er utvikla fleire numeriske modellar som kan simulere turbulent strøyming med og utan kjemiske reaksjonar.

1.2 Turbulent forbrenning

Turbulent strøyming er kaotisk og tilfeldig. Storleikar som trykk og fart fluktuerer i tid og rom, og det oppstår kvervel-liknande rørsler i strøyminga. Denne eigenskapen kjem av at høvet mellom impuls krefter og viskøse krefter er stort. Viskositeten åt eit fluid er proposjonal med skjerkreftene, og seier noko om motstanden fluidet gjer mot strøyminga. Ein kan til dømes lett røre seg gjennom luft, som har låg viskositet.

Vatn har omlag 50 gongar høgare viskositet, og det er difor “seigare”. Om dei viskøse kreftene er store nok, kan dei glatte ut variasjonar, og dermed gjere strøyminga lami-nær. For strøyming i eit røyr er det kritiske høvet mellom impuls og viskøse krefter omlag 2800. I denne oppgåva strøymer uforblanda brensel ut av ein jet med høg fart, og vert blanda med luft som har omlag 140 gongar mindre fart. Då vert impulskreftene relativt store. Sidan det er gassar, er viskositeten låg. Då vert det danna turbulens som følgje av dette høvet.

Turbulensen er noko ein ikkje kjem utanom i industrielle samanhengar, og den er hel-ler ikkje uønska. Problemet er å kunne forutsjå strøyminga. Forbrenning inneber at forholda ligg til rette for ein reaksjon mellom brensel og oksidant. For at desse skal reagere må mellom anna molekyla vere nære nok i ei viss tid, og at dei må bere høg nok energi for reaksjon. Sagt litt annleis så må reaktantar blandast og varmt produkt må “bringast tilbake” for å gje reaktantane den energien dei treng. Turbulensen hjelper til med denne miksinga, då storleikar i strøyminga fluktuerer.

Sidan turbulensen er ein viktig faktor i forbrenningsteknikk, ønskjer ein å modellere strøyminga. Det finst modellar for turbulent forbrenning som byggjer på føresetnaden om at forebrenninga skjer der turbulensen blandar saman stoffa. *Kvervel-modellar* er ein fellesnemnar for modellar der ein tenkjer seg at turbulensen i strøyminga bryt ned kvervlar til mindre kvervlar. Til slutt er dei så små at blandinga skjer på eit molekylært nivå. Magnussen sin EDC-modell er ein slik modell. Den føreset at reaksjonane skjer i områda der kvervlane har vorte små nok til at reaktantar og produkt vert blanda molekylært.

1.2.1 Tidlegare arbeid

For bruk av modellar som EDC, er det viktig med rett modellering av turbulensen. Fleire har freista å finne ein modell som er god nok, og som kan vere generell. Prandtl (1925) utvikla ein algebraisk modell, der han tenkte seg at “ballar” av fluid rører seg på tvers av strøyminga, med dei same rørslene som kvervlane danna av turbulensen [7] (s. 40). Modellen er enkel, og analogien til kinetisk gassteori er tydeleg. Han innførte turbulensviskositet, som er proposjonal med produktet av fartsfluktuasjonen åt balla-ne og veglengda dei vandrar. Modellen vert kalla ein *null-likningsmodell*, sidan der ikkje inngår turbulens-storleikar i transportlikningane. Problemet med modellen er at forbrenningsmodellar, som til dømes EDC, treng slike storleikar.

Så tidleg som i 1895 sette Reynolds opp ei likning for turbulensenergi. Likninga inne-heldt mange ukjende ledd som måtte modellerast. Kolmogorov (1942) har ein modell med ei likning for turbulensenergi, og òg for karakteristisk frekvens [7] (s. 46). Prandtl (1945) laga ei modell-likning for turbulensenergi, Rotta (1951) presenterte ein modell med likningar for reynoldsspenningane og òg for ein lengdeskala.

På slutten av 1960-talet fekk vi datamaskiner som forandra arbeidet åt forskarane, sidan modellar no kunne testast meir effektivt. Frå 1970 og utover kom det mange publikasjonar. På den tida var det hovudsakleg modellar med òi likning for turbulens-energi, og òi for ein lengdeskala-variabel. Desse var k - ε -modellar, der ε var gjeve i eit uttrykk med karakteristisk lengdeskala for turbulensen (sjå [7] s. 50-53). Viktige namn i denne perioden er Jones, Launder og Spalding, saman med andre. Mykje av arbeidet frå 1970-talet har vist seg å vere eit tidsskilje på vegen fram til i dag. Ut av dette kjem det ei likning for ε , saman med likninga for k . Kombinasjonen med desse to vert nytta den dag i dag, men ofte vert modellen tilpassa kvart individuelle tilfelle.

Omtrent samstundes med utviklinga av turbulensmodellar på 1970-talet, vart det og utvikla forbrenningsmodellar. Spalding (1976) utvikla ein modell, kalla “Eddy Breakup” modell, med tanke på både forblanda og uforblanda forbrenning. Første versjon av Magnussen sin “Eddy Dissipation Concept” vart publisert av Magnussen og Hjertager i 1976. Denne modellen har Spalding sin modell som bakgrunn, men skil seg noko frå den. Seinare har og denne modellen vorte forandra og modifisert. I prinsippet skal denne gjelde for både forblanda og uforblanda forbrenning. I starten var modellen nytta saman med føresetnaden om uendeleg rask kjemi. Modellen vart etterkvart utvikla med tanke på mellom anna detaljert kjemisk kinetikk og sløkking.

1.3 Bidrag

Realistisk modellering av forbrenning avheng av mange faktorar. Mellom anna må nettverket ha stor nok oppløysing. Det kan heller ikkje vere for stort då dette gjev lang reknetid. Ein anna føresetnad er at turbulensmodellen er tilpassa det enkelte tilfelle. Ein del av denne rapporten byggjer på arbeidet åt Skottene [32], [31] og Grotle [12]. Det er lagt vekt på godt samsvar med målingar i modellane der det er simulert med detaljert kjemi. Føremålet har vore å lage modellar som gjev same mengd NO i røykgassen.

Hovudbidrag i denne rapporten er:

- Simuleringar av to turbulente diffusjonsflammer med rask og detaljert kjemi.
- H₃-flamma og metan-flamma er samanlikna.
- Det er freista å verifisere EDC-modellen med detaljert kjemisk kinetikk ved å samanlikne rask og detaljert kjemi for begge flammene.
- Det er utført studie som skal gje nærare innsyn i k - ε -modellen, saman med EDC-modellen.
- Det er simulert med fleire typar nettverk.

- Fleire variantar av k - ε -modellen er testa med rask kjemi.
- Verknaden av oppløysinga ved utløpet av dysa er undersøkt.
- Justeringar av ein storleik i EDC-modellen er gjennomført.
- Det er presentert NO-verdiar, saman med andre storleikar som kan ha innverknad på resultatet. Resultata er drøfta med utgangspunkt i teorien for danninga av NO_x .
- Alle resultat er utførleg drøfta.

1.4 Oppbygnad av rapporten

I kapittel 2 er det gjennomgått grunnleggande teori for simuleringane. All teori byggjer på føresetnaden om fluidet som eit kontinuum. Det er presentert transportlikningar for ulike storleikar. Balansane uttrykkjer konservering av masse, impuls og energi. Kapitlet omhandlar turbulens- og forbrenningsmodellering. Anna grunnleggande teori, som til dømes termodynamiske samanhengar, er presentert her.

Kapittel 3 tek for seg simuleringsprogrammet SPIDER og noko av teorien. Programmet kan simulere strøyming med og utan forbrenning i komplekse geometriar. Hovudsakleg er det gjort greie for diskretisering av transportlikningane i denne delen.

I kapittel 4 vert det presentert dei viktigaste mekanismane for danning av NO_x . Det er synt nokre metodar for å redusere utslepp.

Kapittel 5 omhandlar simulering av to turbulente jetflammer, og teorien frå dei tidlegare kapitla er prøvd ut i praksis. Resultat frå ei rekkje simuleringar er drøfta med utgangspunkt i teorien. Detaljert kjemi er samanlikna med rask kjemi, og begge flammene er samanlikna med kvarandre, for å finne årsak til avvika.

Til slutt i rapporten følgjer det ein konklusjon og tilråding for vidare arbeid.

2 Teoretisk grunnlag

Eit fluid består av ei mengd molekyl. Avstanden mellom molekyla er stor samanlikna med utstrekninga åt kvart enkelt, og dei rører seg fritt i forhold til kvarandre. “Tettleiken åt eit fluid” er eit uttrykk som ofte vert nytta. Sidan mengda av molekyl kan variere innanfor eit gjeve volum, vil tettleiken og variere mykje. For eit tilstrekkelig stort volum kan ein sjå vekk frå at mengda molekyl varierer, men då kan og opphopingar av partiklar i fluidet verte tekne med. Eit volum som er akkurat stort nok til at variasjonen av molekyl kan neglisjerast, men lite nok til at opphopingar av partiklar i fluidet ikkje førekjem, er framleis veldig lite. I praktiske tilfelle ser ein på volum mykje større enn dette, slik at tettleiken og andre eigenskapar ved fluidet varierer som ein punktfunksjon.

Om eigenskapane til fluidet varierer jamnt nok til at dei er deriverbare, vert fluidet kalla eit *kontinuum* [37] (s. 7). Vidare i rapporten er det gjort slike føresetnader, og dette er bakgrunnen for likningane som vert tekne med her.

2.1 Grunnlikningar

I dette avsnittet vert ulike grunnlikningar presentert. Desse er konservering av masse, rørslemengd og energi. Alle likningane er skrevne med kartesisk tensornotasjon (sjå [7], s. 220).

2.1.1 Konservering av masse

Kontinuitetslikninga uttrykkjer at masse ikkje forsvinn eller oppstår. Dette er gjeldande om ein neglisjerer endring i masse på grunn av endring i energi, også i kjemiske reaksjonar. Likninga for ei einfase blanding vert

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0. \quad (2.1)$$

Her er ρ tettleik, og u_j den kartesiske fartskomponenten i x_j -retning. Om tettleiken er konstant vert likning (2.1)

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0. \quad (2.2)$$

For eit stoff k i ei einfase blanding har vi

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(-j_{k,j}) + R_k \quad (2.3)$$

Om ein set $\rho_k = \rho Y_k$ får ein likninga for massefraksjonen Y_k

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(-j_{k,j}) + R_k. \quad (2.4)$$

Her er R_k reaksjonsraten åt stoff k . Massediffusjon, $j_{k,j}$, har tre bidrag [21] (s. 158):

1. “Vanleg diffusjon”, som er massediffusjon på grunn av konsentrasjonsgradientar.
2. *Termodiffusjon*, eller *Soret-effekt*, er massediffusjon med ein temperaturgradient.
3. *Trykkdiffusjon* er massediffusjon som følge av ein trykkgradient.

Termodiffusjon er viktig for lette komponentar og ved låge temperaturar. Dette bidraget er difor ofte neglisjert ved forbrenning. Det vert også bidraget frå trykkdiffusjon [21] (s. 59, 158). Ser ein vekk ifrå desse to siste bidraga kan ein modellere den diffusive fluksen ved Ficks lov

$$-j_{k,j} = \rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}. \quad (2.5)$$

Her er D ein diffusjonskoeffisient. Eigentleg varierer denne frå stoff til stoff, men denne forenklinga gjer likningane mykje meir handterlege. Ulempa med forenklinga er at i gassblandingar, der stoffa har stor spreiding i molvekt, vert ikkje den store variasjonen i diffusjon teke med [11] (s. 15).

2.1.2 Konservering av rørslemengd

Likninga for rørslemengd (impuls eller *driv*) byggjer på *Euler si lov om rørsle* for eit kontinuum, og er analogt til Newton si 2. lov for ein punktmasse [11] (s. 8). På generell form for einfasestrøyming vert likninga slik [7] (s. 203)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij}) + \rho f_i, \quad (2.6)$$

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}. \quad (2.7)$$

Med (2.7) kan ein skrive om (2.6) til

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij}) + \rho f_i. \quad (2.8)$$

Her er f_i fjernkraftakselerasjon i x_i -retning, som til dømes ved gravitasjon eller elektromagnetiske krefter. For eit newtonsk fluid med dynamisk viskositet, μ , er den totale spenningstensoren

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\mu_B - \frac{2}{3}\mu \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (2.9)$$

Her er μ_B bulkviskositet. Med Stokes-hypotesen set vi $\mu_B = 0$ (sjå [7] s. 203).

2.1.3 Konservering av energi

Termodynamikkens første hovudsetning seier at energi ikkje kan forsvinne eller oppstå, berre verte omdanna og transportert. Transportlikninga for statisk entalpi kan skrivast på forma [7]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) = \frac{\partial p}{\partial t} + \underbrace{u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}}_I + \underbrace{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\Phi_{ij}} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \dot{Q} + \rho \sum_k Y_k f_{k,i} V_{k,i}. \quad (2.10)$$

Om fjernkraftakselerasjonen, $f_{k,i}$, er lik for alle stoff kan ein stryke siste ledd i likninga på høgare side [7] (s. 208). Her er Φ_{ij} viskøs dissipasjon, og \dot{Q} er indre kjelder der mellom anna strålingsvarme er inkludert. For låge machtal, $Ma^2 \ll 1$, kan ledda Φ_{ij} og I neglisjerast [11] (s. 19).

Diffusiv varmekraft, q_j , som inngår i energilikninga har tre bidrag [7] (s. 215)

1. Varmefluks som følgje av temperaturgradientar (konduksjon eller molekylær termisk diffusjon). Dette leddet vert modellert ved Fouriers lov.

2. Energiflukt som følgje av massediffusjon. Innan dette bidraget vert ikkje termodiffusjon og trykkdiffusjon teke med (sjå avsnitt 2.1.1).
3. Varmeflukt som følgje av konsentrasjonsgradientar (*Dufour-effekt*). Dette bidraget vert ikkje teke med her då det truleg har lite å seie.

Om ein tek med bidrag 1 og 2, og modellerer energiflukt som følgje av massediffusjon ved Ficks lov, får ein

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho D \sum_k h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}. \quad (2.11)$$

I likninga er λ eit konduktivt varmeovergangstal og T er temperatur. Ei vanleg forenkling er å setje lewistalet (Le) lik 1. Dette saman med andre føresetnader og omskriving av likningar gjev ei forenkla entalpilikning (sjå [7] s. 215-216, [23] s. 14 og avsnitt 2.2 nedanfor)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_k} \right) + \dot{Q}. \quad (2.12)$$

2.1.4 Generalisert transportlikning

Likningane som er gjennomgått over kan generaliserast og gjelde for ein vilkårleg, skalar storleik, φ

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varphi)}_{\text{transient ledd}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varphi u_j)}_{\text{konvektivt ledd}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right)}_{\text{diffusivt ledd}} + \underbrace{S_\varphi}_{\text{kjeldeledd}}. \quad (2.13)$$

I kjeldeleddet, S_φ , inngår alt som ikkje er teke med i dei andre ledda, og kalla eit “oppsamlingsledd”.

2.2 Termodynamiske eigenskapar

For ei ideell blanding med N_s stoff er entalpi gjeve som

$$h = \sum_{k=1}^{N_s} h_k Y_k. \quad (2.14)$$

Entalpi er generelt ein funksjon av trykk og temperatur, $h = h(T, p)$. Differensialet til spesifikk entalpi for eit reint stoff k kan skrivast [24] (s. 542)

$$dh_k = \underbrace{\left(\frac{\partial h_k}{\partial T}\right)_p}_{c_{p,k}} dT + \left(\frac{\partial h_k}{\partial p}\right)_T dp. \quad (2.15)$$

For ein ideell gass, eller ved konstant trykk, er entalpi funksjon av temperaturen åleine, $h_k = h_k(T)$, som gjev $dh_k = c_{p,k} dT$. Integrerer ein likninga frå ein referansetilstand, får ein likninga for entalpi h_k

$$h_k(T) = h_{f,k}^\circ + \int_{T^\circ}^T c_{p,k} dT. \quad (2.16)$$

Her er $c_{p,k}$ spesifikk varmekapasitet og $h_{f,k}^\circ$ er *danningsentalpi* til stoff k ved ein referansetilstand T° .

I SPIDER vert transportlikningar for \tilde{h}_k løyste. Samanhengar mellom $c_{p,k}$, h_k og T finn ein frå tilpassa polynom som baserar seg på empiriske data [11] (s. 18). Einfase strøyming med kjemiske reaksjonar gjer at ein treng to uavhengige tilstandsvariable for å finne den lokale, termodynamiske tilstanden. Her trengs det ei kopling mellom ρ , p og T . Tilstandslikninga for ein ideell gass vert rekna for å vere ein god nok approksimasjon [11] (s. 18):

$$p = \rho RT. \quad (2.17)$$

Her er gasskonstanten $R = R_u/M$ og R_u den universelle gasskonstanten. Den totale molvekta åt ei blanding med N_S stoff, M , er gjeve som $M = \sum_{k=1}^{N_S} Y_k/M_k$, der M_k er molvekta åt eit stoff k og Y_k er massefraksjonen.

2.3 Transportkoeffisientar

I likningane over inngår mellom anna den molekylære viskositeten μ , konduktivt varmeovergangstal λ og diffusjonskoeffisienten D . Ein kan med god nøyaktigheit modellere transportkoeffisientar ved *Chapman-Enskog* [11] (s. 16). Viskositeten åt eit stoff k vert då

$$\mu_k = \frac{5}{16} \left(\frac{\sqrt{\pi M_k \sigma_b T}}{\pi \sigma_m^2 \Omega_\mu^*} \right). \quad (2.18)$$

Her er σ_b Boltzmanns konstant og σ_m er karakteristisk molekylidiameter. Ω_μ^* er kollisjonsintegral og vert bestemt empirisk.

Schmidttalet gjev høvet mellom rørslemengd-diffusivitet (viskositet) og masse-diffusivitet [7] (s. 241), $S_c = \mu/\rho D$. Prandtltalet gjev høvet mellom viskositet og termisk diffusivitet, $P_r = \mu/(\lambda/c_p)$. Lewistalet, $L_e = S_c/P_r$, er nær lik èin og dette gjev at schmidttalet er lik prandtltalet. Då kan ein rekne ut D og λ direkte frå μ .

2.4 Kjemiske reaksjonar

Likningane over er eit resultat av fysiske lover for eit strøymande fluid med føresetnaden om at det kan sjåast på som eit kontinuum. Når det gjeld kjemiske reaksjonar som kan finne stad mellom ulike komponentar i fluidet, er lovene som gjeld her uavhengige av om strøyminga er laminær eller turbulent. Derimot er desse prosessane funksjonar av den lokale tilstanden, slik at dei fysiske prosessane vil berre påverke kjemiske reaksjonar indirekte ved endring av tilstandsvariable, og/eller ved at strøyminga endrar blandingsvilkår og opphaldstider.

Globale reaksjonar er ei forenkling der ein reknar på føresetnaden om at brensløt reagerer direkte med oksidanten, O_2 . Dette er greit når ein vil vete noko om energibalansen til dømes, men denne reaksjonen er ein sum av mange mellomsteg eller elementærreaksjonar. For eit system av N_R kjemiske reaksjonar med N_S stoff A_k kan reaksjonslikningane skrivast på generell form [7] (s. 27)

$$\sum_{k=1}^{N_S} v'_{k\ell} A_k \longrightarrow \sum_{k=1}^{N_S} v''_{k\ell} A_k, \quad \ell = 1, \dots, N_R, \quad (2.19)$$

der $v'_{k\ell}$ og $v''_{k\ell}$ er støkiometriske koeffisientar for reaktantar (') og produkt (") i reaksjon ℓ .

Reaksjonsraten åt stoff k i eit system med N_R delreaksjonar, er gjeve ved [7] (s. 28)

$$R_k = M_k \sum_{\ell=1}^{N_R} \left\{ (v''_{k\ell} - v'_{k\ell}) \cdot k_\ell \prod_{i=1}^{N_S} c_i^{v'_{i\ell}} \right\}, \quad (2.20)$$

der c_i er konsentrasjonen åt stoff k .

Reaksjonskoeffisienten k_ℓ for reaksjon ℓ kan vere gjeven av Arrhenius-uttrykkjet [7] (s. 28)

$$k_\ell = k_\ell(T) = A_\ell T^{\beta_\ell} \exp\left(-\frac{E_{a\ell}}{R_u T}\right), \quad (2.21)$$

der A_ℓ , β_ℓ og $E_{a\ell}$ er konstanter for kvar reaksjon ℓ . $E_{a\ell}$ er aktiveringsenergi og R_u den universelle gasskonstanten.

2.5 Turbulensmodellering

Det finst mange definisjonar på kva turbulens er, men det kan vere vanskeleg å finne ein som er bra. Ein kan greie seg utan ein presis definisjon og heller lage seg gode bileter på kva som skjer, slik ein kan lage realistiske modellar. Turbulens er eit fenomen knytt til strøyminga og ikkje fluidet [7] (s. 19). Ein får god blanding/spreiing, turbulent rørsla er difor sterkt diffusiv. Turbulente *lengdeskaler* åt kvervlane i denne rørsla strekkjer seg frå små til dei større - skilnaden kan vere på fleire tiarpotensar.

Turbulent strøyming skil seg frå laminær ved at det førekjem raske fluktuasjonar i fart, tettleik, temperatur og samansetning [11] (s. 29). Strøyminga får desse eigenskapane ved høge reynoldstal, som vil seie at høvet mellom tregleiks- og viskøse krefter er stort. Turbulent strøyming er særskilt viktig innanfor forbrenning fordi det gjev gode blandingsforhold: Brensel og oksidant må blandast godt før reaksjonen kan finne stad, og varmt produkt må blandast med reaktantar for å halde riktig temperatur for forbrenning.

2.5.1 Oppdeling og midling

For praktiske formål kan ein ikkje løyse transportlikningane når dei ulike storleikane *fluktuerar*. Forsøk på å simulere diskretiserte likningar ved slike forhold vil krevje enorme dataressursar, sidan nettverket nødvendigvis måtte vere fint nok til å fange opp alle variasjonane. Dette gjev grunnlag for å måtte forenkle, ved å dele opp storleikar og skilje ut middelveidiar. Ved å utleie likningar for desse kan ein nytte eit grovare nettverk i simuleringane enn om alle detaljar var med.

Reynolds-opptdeling

Fluktuerande storleikar kan delast opp ved Reynolds-opptdeling. Her vert dei delt inn i ein middelveid og avviket frå denne middelveiden [7] (s. 34)

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi'. \quad (2.22)$$

Ein kan midle storleikar på ulike måtar. Ved tidsmidling (sjå [7] s. 35) må ein passe på at tida ein midlar over, Δt , er stor nok til at avvik frå middelveidien vert fanga opp. Den må heller ikkje vere så stor at den fangar opp variasjonar i middelveidien. Sjå meir om midling i [7] s. 35. Om ein set inn $\bar{\varphi} + \varphi'$ inn i transportlikningane for φ , midlar desse igjen og skriv om likningane litt, får ein likningar med middelveidiar (sjå [7] s. 36, 223-229).

Favre-oppdeling

I likningane for turbulent strøyming er ofte tettleiken sett konstant. I forbrenning vil denne variere mykje og reynoldsmidling er ikkje nok. Ved Favre-oppdeling trekkjer ein ρ inn i middelveidien. Oppdelinga vert definert slik [7] (s. 223)

$$\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi'', \quad (2.23)$$

der middelveidien er gjeve ved

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho\varphi}}{\bar{\rho}}. \quad (2.24)$$

Her er φ'' avvik frå middelveidien, $\tilde{\varphi}$. Om ein innfører dette i konserveringslikningane kjem det fram nye likningar som inneheld nye, ukjende ledd [7] (s. 223-229).

Kontinuitetslikninga

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j) = 0, \quad (2.25)$$

der $\bar{\rho}\tilde{u}_j = \overline{\rho u_j}$.

Likninga for rørslemengd

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) + \bar{\rho} f_i. \quad (2.26)$$

Her er fluktuasjonar av ρ tekne med i \tilde{u}_j . Likninga inneheld nye storleikar, $\overline{\rho u_i'' u_j''}$. Desse vert kalla *masse-vegne reynoldsspenningar*. At dei er masse-vegne kjem av at variasjon i tettleik er teke med.

Likninga for massefraksjon

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{Y}_k\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}D\frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho u_j'' Y_k''}\right) \\ + \bar{R}_k + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(D \cdot \rho \frac{\partial Y_k''}{\partial x_j}\right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Det siste leddet i likninga vert ofte neglisjert. Her er tettleiken midla på vanleg måte. Diffusjonsleddet er her forenkla til å gjelde ved Ficks lov. Fluktusjonar for D er ikkje tekne med, men diffusjonskoeffisienten kan ha gradientar. Den midla reaksjonsraten, \bar{R}_k , er vanskeleg å uttrykke då den ofte er gjeve ved Arrhenius-uttrykket (sjå likning 2.21), som inneheld ein eksponentialfunksjon med temperaturen som variabel. Modellering av den midla reaksjonsraten vert snakka meir om i delen om forbrenning (kapittel 2.6).

Entalpilikninga

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{h}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\frac{\mu}{\sigma}\frac{\partial\tilde{h}}{\partial x_j} - \overline{\rho u_j'' h''}\right) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu}{\sigma}\rho\frac{\partial h''}{\partial x_j}\right). \quad (2.28)$$

Det siste leddet vert ofte neglisjert. Her kjem det fram storleikar, $-\overline{\rho u_j'' h''}$, som er masse-vegne *reynoldsfluksar*. Desse er ukjende og må modellerast.

2.5.2 Turbulensviskositet

I turbulent strøyming er praktisk å innføre ei effektiv spenning som gjev analogien mellom turbulent og molekylær rørsle. Denne spenninga kan sjåast på ein sum av viskøs og turbulent spenning. Same tenkjemåte vert brukt for viskositeten, og ein innfører difor *turbulensviskositet* [7] (s. 38)

$$\tau_{\text{eff}} = \tau + \tau_{\text{turb}} \quad ; \quad \mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_{\text{turb}}. \quad (2.29)$$

Den effektive spenninga kan her setjast inn i likning (2.26) i parantesen i neste siste ledd på høgre side. Då liknar denne likninga mykje på likning (2.8).

Turbulensviskositeten er enklast å setje konstant, gjerne 100-500 gongar den molekylære viskositeten. Den vert oftast modellert.

Prandtl sin blandingsvegmodell

Denne modellen tek utgangspunkt i kinetisk gassteori, og ein tenkjer seg “ballar” av fluid som rører seg på tvers i ei turbulent strøyming. Om ein ball følgjer ein fartskomponent, u_1 , i x-retning vert avviket i x-retning u'' , og i y-retning vil avviket v'' gje rørsle på tvers (sjå [7] s. 40).

I kinetisk gassteori er den molekylære viskositeten eit produkt av middelfart for molekyla og ei middel fri veglengde, $\mu \sim \rho \bar{\ell} \bar{v}$. Turbulensviskositeten kan modellerast på same måte. Ein tenkjer seg då at avviket, v'' , gjeld over ei karakteristisk lengd, ℓ'' . Då er $\mu_t \sim \bar{\rho} \ell'' v''$.

Ein kan vise at avvika i x- og y-retning er omlag like store. Ein kjem fram til at turbulensviskositeten kan uttrykkjast som [7] (s. 41)

$$\mu_t = \bar{\rho} \ell^2 \left| \frac{d\tilde{u}}{dy} \right|. \quad (2.30)$$

Lengda ℓ'' vil i praktiske tilfelle vere ein turbulent lengdeskala for dei store kvervlane. I Prandtl sin modell kan ein sjå på ℓ som ein blandingsveg for ballane som vert transportert. ℓ'' og ℓ er ikkje identiske.

2.5.3 Reynoldsspenningar

Frå likningane over (avsnitt 2.5.1) ser ein storleikar som er nye og ukjende. Likningane som kjem fram ved Reynolds-oppdeling og midling vert omtala som *Reynolds-midla likningar*. Dei *Favre-midla likningane* kjem fram ved å innføre Favre-oppdeling og så midle dei på vanleg måte. Frå no av vert dei masse-vegne reynoldsspenningane, $-\overline{\rho u_i'' u_j''}$, berre omtala som reynoldsspenningar. Sidan det er fleire ukjende enn likningar, får ein ikkje løyst dei. Dette er på engelsk omtala som “the closure problem”, sidan likningane ikkje er “lukka”. Det finst fleire modellar som freistar å løyse dette ved å modellere spenningane.

Reynoldsspenningane er konvektiv transport av rørslemengd med dei turbulente rørsle- ne, men i dei midla likningane kan dei reknast som diffusive ledd [7] (s. 37). Spenning er fluks av rørslemengd og dette ser ein av reynoldsspenningane, der $(\bar{\rho} u_i'')$ er rørslemengd og $u_j''(\bar{\rho} u_i'')$ er fluks av rørslemengd. Reynoldsspenning og *turbulensspenning* er to ord for same ting.

For eit todimensjonalt tilfelle med berre ein gradient er den viskøse spenninga

$$\tau = \tau_{12} = \mu \frac{du_1}{dx_2}. \quad (2.31)$$

Reynoldsspenningar kan modellerast som viskøs spenning ved å nytte innføringa av turbulensviskositet over. Turbulensspenning vert då

$$\tau_{12,t} = -\overline{\rho u_1'' u_2''} = \mu_t \frac{du_1}{dx_2}. \quad (2.32)$$

Prandtl sin blandingsvegmodell gjev eit algebraisk uttrykk for reynoldsspenningane. Spenning er fluks av rørslemengd, og her er rørslemengd i x-retning ($\bar{\rho} u''$). Med eit avvik i y-retning gjev det spenninga $\tau_{\text{turb}} \sim v''(\bar{\rho} u'')$. Modellen vert då

$$\tau_t = -\overline{\rho u'' v''} = \bar{\rho} \ell^2 \left| \frac{d\tilde{u}_1}{dx_2} \right| \frac{d\tilde{u}_1}{dx_2}. \quad (2.33)$$

Absoluttverdi-teiknet skal sørge for rett forteikn.

Ein generell modell for reynoldsspenningane er gjevne ved å føresete transport med gradientar [7] (s. 55)

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} \tilde{k} + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \right) \delta_{ij}. \quad (2.34)$$

Her er k *turbulensenergi* og vert snakka meir om i neste avsnitt. Analogien til viskøs spenning er tydeleg utifrå likninga. I staden for ein generell modell kan ein løyse egne likningar for reynoldsspenningane (sjå avsnitt 2.5.6).

2.5.4 Gradientmodell for turbulensfluksar

På same måte som ein modellerer reynoldsspenningar med ein turbulensviskositet, kan ein innføre turbulensdiffusivitet for å modellere turbulente skalarfluksar [7] (s. 81). Ein generell modell vert då

$$-\overline{\rho u_j'' \varphi''} = \bar{\rho} \alpha_t \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial x_j} = \frac{\mu_t}{\sigma_{\varphi,t}} \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial x_j}. \quad (2.35)$$

Her er $\sigma_{\varphi,t}$ eit turbulensprandltal om skalaren er entalpi, medan det er turbulensschmidtital om φ er massefraksjon. Dei vert vanlegvis sett til 0,7, men kan og variere og vere ulike. I denne oppgåva er 0,5 nytta. Turbulensviskositeten må modellerast.

2.5.5 k - ε -modell

Ein måte å løyse dei midla transportlikningane er å modellere reynoldsspenningane ved å løyse transportlikningar med andre storleikar. Dette kan vere èi eller fleire likningar der storleiken ein ser på er ein turbulens-storleik. Rørslemengd eller energi er ikkje ein slik. Om ein løyser *ei* transportlikning for til dømes turbulensenergien, k , som inngår i likning (2.36), kallar ein modellen ein *ein-likningsmodell*. Prandtl sin blandingsvegmodell, som er ein algebraisk modell, er eit døme på ein *null-likningsmodell*.

k -likninga

Favre-midla turbulensenergi er definert som [7] (s. 230)

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i'' u_i''} = \frac{1}{2} \frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\rho u_i'' u_i''}. \quad (2.36)$$

Likninga for k vert utleia ved å ta utgangspunkt i likninga for rørslemengd (2.8). Ein multipliserer likninga med u_i'' , innfører Favre-oppdeling og til slutt vert likninga som kjem fram midla og ordna. Den masse-vegne likninga for turbulensenergien vert då

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}k\tilde{u}_j) = & \underbrace{-\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}_{\bar{\rho}P_k} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ij} u_i'' - \frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i'' u_j''} - \overline{p' u_j''} \right)}_{\bar{\rho}D_k} \\ & - \underbrace{\overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}}_i + \underbrace{\overline{p'} \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}}_{ii} - \underbrace{\overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}}}_{\bar{\rho}\varepsilon}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Masse-vegen turbulensenergi, k , er her notert utan merketeikn, men er altså Favre-midla. Her er $\bar{\rho}P_k$ eit produksjonsledd, $\bar{\rho}D_k$ er diffusjonsledd og $\bar{\rho}\varepsilon$ er dissipasjonsledd. Storleiken ε som vert brukt i modellen er ikkje dissipasjon direkte, men uttrykkjer energioverføring frå store til mindre kvervlar [7] (s. 48). Ledda i og ii forsvinn om tett-leiken er konstant, men ofte vert dei neglisjerte elles også. Alle ledda som er merka er ukjende og må modellerast.

Produksjonsleddet er reynoldsspenningar multiplisert med ein fartsgradient. Med likning (2.34) vert dette

$$\bar{\rho}P_k = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho}k + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}. \quad (2.38)$$

Diffusjonsleddet er ein sum av molekylær diffusjon og turbulensdiffusjon. Det vert modellert med ein gradientmodell

$$\bar{\rho} D_k = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]. \quad (2.39)$$

Turbulensviskositeten kan modellerast ved å nytte definisjonen av molekylær viskositet, som ved Prandtl sin blandingsvegmodell. Set ein $\ell''' = L$, og sidan $u' \sim \sqrt{k}$, får ein

$$\mu_t = C_L \bar{\rho} L \sqrt{k}, \quad (2.40)$$

der C_L er ein konstant talverdi, og L er ein *blandingsveg* eller karakteristisk lengdeskala for dei store kvervlane. Prandtl sin modell kan og brukast til å finne eit uttrykk for ε . Det vert vist i [7] (s. 52), og resultatet er gjeve som

$$\varepsilon = C_D \frac{k^{3/2}}{L} \quad (2.41)$$

Dei to konstantane, C_D og C_L , er ikkje uavhengige, og produktet av dei to kan setjast til ein verdi på omlag 0,08 - 0,11. Eine av dei kan setjast lik 1. Set ein saman likning (2.40) og (2.41) kan ein uttrykkje turbulensviskositeten som

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (2.42)$$

Her er $C_\mu = C_D \cdot C_L$.

Til no har ein sett på bruk av k -likninga åleine, altså ein ein-likningsmodell. Om ein nyttar denne modellen, vert likning (2.40) og (2.41) tekne i bruk. Då må dei to konstantane, C_D og C_L , ha riktige verdier. Om ein tek i bruk likning (2.42) må ε modellerast. Dette kan ein gjere ved å utleie ei likning for ε utifrå rørslemengdelikninga og kontinuitetslikninga.

k - ε -modellen

Innfører ein likninga for ε vert modellen ein to-likningsmodell. Likninga for ε er gjeve ved [7] (s. 53-54)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \varepsilon \tilde{u}_j) = \bar{\rho} D_\varepsilon + \bar{\rho} P_\varepsilon - \bar{\rho} Q_\varepsilon. \quad (2.43)$$

Diffusjonsleddet, $\bar{\rho} D_\varepsilon$, vert modellert ved ein gradientmodell

$$\bar{\rho} D_\varepsilon = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right]. \quad (2.44)$$

Produksjon og nedbryting av ε , P_ε og Q_ε , set ein proposjonalt med produksjon og nedbryting av k . Dei må multipliserast med ε/k for å gje rett dimensjon:

$$P_\varepsilon = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k \quad (2.45)$$

og

$$Q_\varepsilon = C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon. \quad (2.46)$$

Av likninga ser ein at om P_k aukar må P_ε auke. Det vil seie at veksten av turbulensenergi må verte avgrensa av ε , elles ville k vekse over alle grenser. Det same høvet gjeld for nedbryting av k og ε i den siste likninga.

Den mest brukte versjonen av modellen vart publisert av Launder og Spalding i 1974. Saman med konstantane gjevne der vert modellen sett på som ein “standard” [7] (s. 54):

σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_μ
1,0	1,3	1,44	1,92	0,09

Tabell 2.1: Konstanter i k - ε -modellen.

I modellen vert turbulensviskositeten løyst i likning (2.42). Reynoldsspenningane er gjevne frå likning (2.34), og dei andre storleikane vert løyste frå likningane over.

Det finst fleire versjonar av denne modellen, og ofte vert konstantane forandra og optimalisert.

Rund-jet/plan-jet-anomalien

Konstantane som er nytta i ein standard modell gjev omlag rett utvikling av grensesjiktet for halvbreidda av ein plan jet [7] (s. 68). Ein *plan jet* har eit utløp der utstrekninga i den tredje retninga er stor i forhold til dei to andre retningane. *Halvbreidda* er avstanden frå senterlinja til dit farta er halvparten så stor som senterlinjefarta. Spreiinga kan uttrykkast som $b_{1/2}/x_1$, der $b_{1/2}$ er halvbreidda og x_1 er posisjonen i akseretninga.

Spreiinga for ein rund jet har vist seg å vere overestimert med heile 40 % [30]. Dette mishøvet vert kalla *rund-jet/plan-jet-anomalien*. Det kan forklarast ved å tenkje på kvervlar generert av turbulensen. Ein stad i strøyminga vil positive krefter som verkar normalt på desse kvervlane strekkje dei, og danne “pølser” i retninga åt middelstrau-men. Som ein konsekvens av at “pølsene” vert strekt, minkar storleiken på kvervlane. For at rørslemengda skal vere bevart, må farta på rotasjonane verte større. Om kraft-påverknaden er slik at kvervlane minkar, vert raten av reduksjon i tids- og lengdeskala forsterka. Dette aukar dissipasjonen og reduserer turbulensviskositeten i regionar der kvervlane vert strekte.

I to-dimensjonal strøyming vert ikkje kvervlane strekte. Difor er den effektive viskositeten høgare hjå ein plan jet, og spreinga vert lågare for ein rund jet. Standard k - ε -modell gjev omlag $b_{1/2}/x_1 = 0,10$ og $b_{1/2}/x_1 = 0,12$ for ein plan og rund jet. Målingar har gjeve ei spreing på 0,105 og 0,085 for dei to [7] (s. 78). Ein ser då at spreinga for ein rund jet vert overestimert ved bruk av standard konstantverdiar.

Konstantane i k - ε -modellen inngår i uttrykket for produksjon og nedbryting av ε . Om $C_{\varepsilon 1}$, i likning (2.45), vert justert opp, aukar det produksjonen av ε . Ei auke i ε vil gje lågare turbulensviskositet, og dermed mindre spreing. Likeins vil ein reduksjon i $C_{\varepsilon 2}$ gje mindre nedbryting av ε (likning 2.46), og difor lågare turbulensviskositet. Ofte er kombinasjonen $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,83$, eller $C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, nytta i staden for standard verdiar. Kanskje endå betre er det å uttrykke ein av dei som funksjon av ein annan storleik. Dette kan vere ein enkel, lineær variasjon i akseretninga, til dømes.

Mange ulike uttrykk har vorte testa opp gjennom tidene. Launder med fleire [3] har testa seks ulike turbulensmodellar, der to av dei er modifiserte k - ε -modellar. Der er C_{μ} og $C_{\varepsilon 2}$ funksjon av gradienten åt senterlinjefarta. Sjeldan er det noko fysisk forklaring som ligg til grunn for bruk av desse uttrykka. Dei gjev berre konstantane som funksjon av ein eller anna storleik, slik at konstanten vert endra nedover i strøyminga. I [3] er ein av konklusjonane at det trengs fleire eksperiment for å finne ut meir om kva varierende tettleik har å seie for modellane. Pope [30] freistar å inkludere eit ekstra ledd i ε -likninga, der strekkinga av kvervlane skal gje eit positivt bidrag til ε . Leddet inneheld endå ein konstant, $C_{\varepsilon 3}$, med verdi lik 0,79. I prosjektoppgåva åt M. Skottene [31] vert verdien 0,5 nytta.

2.5.6 Likning for reynoldsspenningane

Til no har turbulensviskositeten vorte modellert analogt med den molekylære ved hjelp av algebraiske uttrykk. Skilnaden mellom dei er at den molekylære er ein stoff- eller materialeegenskap ved fluidet [7] (s. 93), medan turbulensviskositeten er ein funksjon av strøyminga. Avgrensinga av modellen for reynoldsspenningane (sjå likning 2.34) vert μ_t som her skal representere spenningar i fleire retningar. Turbulensviskositeten vil ikkje gje like gode verdiar for spenningar i ulike retningar, som i tilfelle der mange reynoldsspenningar er rekna med.

Ein annan måte å modellere reynoldsspenningane er å utleie transportlikningar for dei. Utleiing av den masse-vegne likninga er vist i [7] (s. 231-232). Alle ledd i likninga er og skrivne ut der. Fleire av ledda er ukjende og må modellerast. Desse ledda er turbulensdiffusjon, omfordeling, Φ_{ij} og dissipasjon. Ein modell med fullstendig lukka likningar er gjeve i [11] (s. 37). Denne er omtala som *Reynolds-stress-equation model* (RSM), og er gjeve ved

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j'' u_k}) - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + C'_\mu \bar{\rho} k \frac{k}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k} \right] = \bar{\rho} (P_{ij} + \Phi_{ij} + \varepsilon_{ij}). \quad (2.47)$$

Her er P_{ij} produksjonsledd. Når $i = j$ uttrykkjer P_{ij} overføring av mekanisk energi frå middelstraumen til turbulensen. Når $i \neq j$, gjev dette leddet produksjon av korrelasjon. Leddet består av berre kjende storleikar og er gjeve ved

$$\bar{\rho} P_{ij} = -\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_k} - \bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_k}. \quad (2.48)$$

I likninga for turbulensenergien vert produksjonsleddet sett til $P_k = (1/2)P_{ii}$ når ein nyttar likninga for reynoldsspenningane.

Siste ledd på venstre side er sum av molekylær og turbulent diffusjon, D_{ij} . Modellkonstanten, C'_μ , må vere i samsvar med omfordelingsmodellen (sjå nedanfor) og er difor ein funksjon av modellkonstantane der. Det vil seie at C'_μ ikkje treng å vere lik C_μ i k - ε -modellen. I modellen er k/ε nytta som karakteristisk tidsskala for turbulensen.

Siste leddet på høgre side i likning (2.47) er dissipasjon av turbulensspenningar. Det er vanleg å nytte ein *isotrop* modell, som vil seie at dissipasjonen er lik for alle normal-spenningar [7] (s. 100). Då vert dissipasjonstensoren

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij}. \quad (2.49)$$

Omfordelingsleddet er ein korrelasjon mellom trykk og tøyning. Om ein ser på strøyming nær ein vegg må ein ha med eit bidrag som dempar fluktuasjonar normalt på veggen, sidan trykkfluktuasjonar vert reflekterte. Dei tre bidraga vert då

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ij,2} + \Phi_{ij,w}, \quad (2.50)$$

der dei to første kan modellerast som [7] (s. 101):

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ij,2} = -C_1 \frac{\varepsilon}{k} \left(\widetilde{u_i'' u_j''} - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right) - C_2 \left(P_{ij} - \frac{1}{3} P_{kk} \delta_{ij} \right). \quad (2.51)$$

Eit uttrykk for $\Phi_{ij,w}$ er gjeve i [11] (s. 37).

Så langt har ein tre nye modellkonstantar, og ein høveleg verdi for dei er gjeve i tabell 2.2:

C_1	C_2	C'_μ
1,8	0,6	0,065

Tabell 2.2: Konstantar i reynoldsspenningliknings-modellen.

For turbulensfluksane vert ein gradientmodell brukt som i k - ε -modellen. Eit alternativ er å utleie likningar for turbulensfluksane, men det vert ikkje teke med her.

2.5.7 Reynoldstal for turbulens

Generelt gjev reynoldstalet høvet mellom tregleiks- og viskøse krefter. Eit reynoldstal for turbulensen kan definerast på same måte. For turbulensen vil tregleikskreftene vere proposjonale med produktet, $u' \ell'$, der ℓ' er ein karakteristisk lengdeskala og u' er fartsfluktuasjon. Vanlegvis vert ℓ' nytta for lengdeskalaen åt dei “store” kvervlane [7] (s. 122 og 139). Reynoldstalet for denne lengdeskalaen vert

$$Re_{\ell'} = \frac{u' \ell'}{\nu}. \quad (2.52)$$

Ved å innføre turbulensviskositet, vert reynoldstalet høvet mellom turbulensviskositet og molekylær viskositet:

$$Re_t = \frac{v_t}{\nu}. \quad (2.53)$$

Reynoldstalet gjev høvet mellom konvektiv transport med turbulensen og molekylær diffusjon [7] (s. 139).

I modellar der ε inngår, er det vanleg å definere eit reynoldstal,

$$Re_T = \frac{k^2}{\nu \varepsilon}. \quad (2.54)$$

For ein standard k - ε -modell er $v_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$. Då har vi at $Re_t = C_\mu \cdot Re_T$. Reynoldstalet i likning (2.54) vert nytta i modellar der turbulensen er svak. For simuleringane gjort i siste del av rapporten er reynoldstalet lågt, og Re_T vert nytta som mål på kor sterk turbulensen er. Der er Re_T i storleikssorden 0 til omlag 800.

2.6 Modellering av turbulent forbrenning

Som tidlegare nemnt kan det by på vanskar å modellere den midla reaksjonsraten som kjem fram i likningane for massefraksjon. Eit anna aspekt ved forbrenning er at tetleiken varierer, og at det er store skilnader i lengdeskalaer. Fleire modellar eksisterar for å løyse desse problema. Ofte skil ein mellom modellar for forblanda og uforblanda flamar. Her vert det snakka om *middelverdi-modellar*, der middelverdi-likningane, snakka om tidlegare, vert utgangspunktet. Felles for slike modellar er at dei freistar å finne uttrykk for dei ukjende storleikane som inngår i likningane. Rekkjeutvikla Arrhenius-uttrykk, til dømes, går under slike modellar. Kvervel-modellar, som EBU (“Eddy Breakup model”) og Magnussen sin EDC (“Eddy Dissipation Concept”), ser på korleis store kvervlar vert brotne ned til mindre, og korleis ein kan uttrykkje tilstanden i dei aller minste ved tilstanden i middelstraumen. Modellar med føreskriven sannsynstettleik er og mykje brukt. Dei to sistnemnde typane er dei mest brukte modellane ved numerisk simulering.

I det følgjande vert det snakka om Magnussen sin EDC-modell. Det er teke med teori for både rask og detaljert kjemi.

2.6.1 Eddy Dissipation Concept

Denne modellen uttrykkjer reaksjonsraten empirisk, basert på at kjemiske reaksjonar førekjem i *finstrukturen*. Dette er området der dissipasjonen er størst, der det vert overført mest energi til varme og kvervlane er minst. For at ein reaksjon skal kunne skje

må reaktantar vere blanda molekylært, og varmt reaksjonsprodukt må blandast høveleg med reaktantane slik at dei får rett temperatur for tenning. Slik molekylær blanding skjer i dette området.

Modellen byggjer på Spalding sin “Eddy Breakup model” og vart presentert av Magnussen og Hjertager i 1976. Den har sidan vorte arbeidd med gjennom mange år i forsking-miljøet ved Sintef Energiforsking og NTNU. Modellen gjev ein samanheng mellom middelstraumen og finstrukturen (dei minste kvervlane). Finstrukturen er modellert som ein reaktor der dei kjemiske reaksjonane skjer, og ein massebalanse av denne gjev eit uttrykk for reaksjonsraten.

Kaskademodell

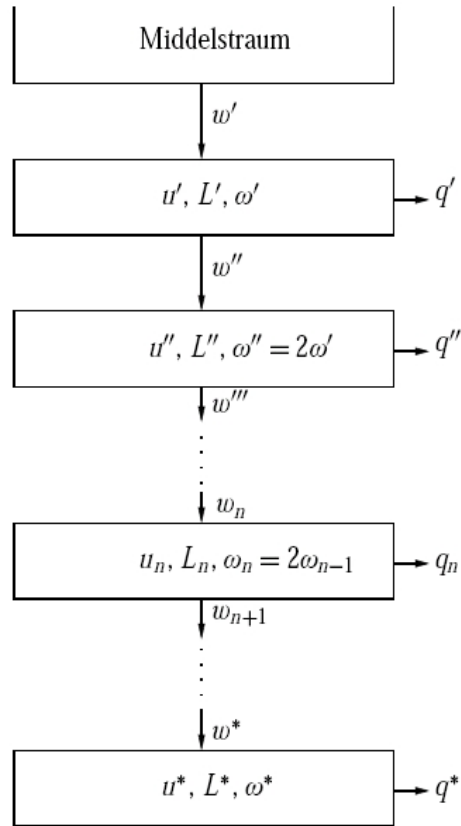
Frå middelstrøyminga vert det overført mekanisk energi til dei store kvervlane, som igjen overfører energi til mindre kvervlar. Dei største kvervlane har mest energi og tregleikskraftene er størst hjå dei. Dei minste kvervlane har større frekvens, men viskøse krefter “et” dei opp, og meste av energien går over til energi i form av varme. Figur 2.1 syner ei oversikt over modellen [7] (s. 173).

Mekanisk energi, w' , vert overført frå middelstraumen til første nivå i turbulensstrukturen. På dette nivået er dei store og energirike kvervlane, og det er her at ein reknar dei midla likningane for å vere gjeldande. Første nivået vert karakterisert ved ein lengdeskala L' , fartsskala u' og frekvens, $\omega' = u'/L'$, der L' er utvekslingslengd. Dissipasjon av turbulensenergi, q' , representerer overføring frå mekanisk energi til varme ved første nivået. Neste nivået har karakteristisk fartsskala u'' , lengdeskala L'' og frekvens $\omega'' = 2\omega'$. Slik held det fram til n -te nivå og til slutt til nivået der storleiksorden kan karakteriserast ved Kolmogorov-skalaene. Her er karakteristisk fartsskala u^* , lengdeskala L^* og frekvens ω^* . Summen av $q' + q'' + \dots + q^*$ er dissipasjon av turbulensenergi for heile spekteret. Overføringa av energi frå første nivå til neste må vere summen av energien som går over til varme for dei neste nivåa. Altså er $w'' = q'' + q''' + \dots + q^*$, slik at dissipasjonen er $\varepsilon = q' + w''$. Om ein reknar lokal jamvekt er $w' = P_k$, der P_k er produksjon av turbulensenergi og inngår i k -likninga. På denne måten finn ein samanheng mellom dei ulike nivåa, og modellen kan skrivast som [7] (s. 174), [17]

$$w'' = \frac{3}{2}C_{D1}\omega'2u''^2 \quad \text{og} \quad q' = C_{D2}\nu\omega'^2, \quad (2.55)$$

der C_{D1} og C_{D2} er modellkonstantar. Om ein føreset at uttrykka over er like for alle nivå, og set inn $\omega_n = 2\omega_{n-1}$, får ein

$$w_n = \frac{3}{2}C_{D1}\omega_n u_n^2 \quad \text{og} \quad q_n = C_{D2}\nu\omega_n^2, \quad (2.56)$$



Figur 2.1: Energikaskade

og balansen er gjeven som $w_n = q_n + w_{n+1}$.

Det kan gjerast tilnærmingar i modellen. Dissipasjonen frå dei øvste nivåa er liten, $q_n \ll w_n$, og for små n er $w_n \approx w_{n+1}$. Uttrykka over vert noko forandra (sjå [7] s. 174).

Ein energibalanse for det siste nivået gjev $w^* = q^*$, og vi får

$$w^* = \frac{3}{2} C_{D1} \omega^* u^{*2} \quad \text{og} \quad q^* = C_{D2} \nu \omega^{*2}. \quad (2.57)$$

Høvelege verdier for modellkonstantane er $C_{D1} = 0,134$ og $C_{D2} = 0,5$ [7] (s. 174), [11] (s. 42).

For høge reynoldstal er $\varepsilon \approx w''$, sidan $q' \ll w''$, og $\varepsilon = (4/3)q^*$. Dette gjev samanheng mellom dissipasjonen og karakteristiske storleikar for middelstraumen og dei minste kvervlane

$$\varepsilon = w'' = \frac{3}{2} C_{D1} \frac{u'^3}{L'}, \quad (2.58)$$

$$\varepsilon = \frac{4}{3} q^* = \frac{4}{3} C_{D2} \nu \frac{u^{*2}}{L^{*2}}. \quad (2.59)$$

For det siste nivået vert

$$\varepsilon = \frac{4}{3} q^* = \frac{4}{3} w^* = 2 C_{D1} \frac{u^{*3}}{L^*}. \quad (2.60)$$

Dei to siste likningane gjev reynoldstalet for det nedste nivået

$$Re^* = \frac{u^* L^*}{\nu} = \frac{2 C_{D2}}{3 C_{D1}}, \quad (2.61)$$

der dei karakteristiske skalaene for det nedste nivået er

$$L^* = \frac{2}{3} \left(\frac{3 C_{D2}^3}{C_{D1}^2} \right)^{1/4} \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad (2.62)$$

$$u^* = \left(\frac{C_{D2}}{3 C_{D1}^2} \right)^{1/4} (\nu \varepsilon)^{1/4}. \quad (2.63)$$

For meir om kaskademodellen, sjå [7] (s. 172-176) og [17].

Finstrukturen

Rundt om i den turbulente strøyminga finn ein regionar med finstruktur. Ein kan tenkje seg desse strukturane som fleire strekte kvervel-trådar, der lengda på trådane er mykje større enn storleikane i dei to andre retningane. Desse kvervlane har same storleiksorden som Kolmogorov sine mikroskalaer [26] (s. 3). På det nedste nivået vert det meste av energien omgjort til varme. Ein kan difor føresete at ulike stoff vert blanda molekylært her, sidan dissipasjon er eit resultat av interaksjon mellom molekyla.

Om ein ser på energioverføringa til finstrukturen, kan høvet mellom massen her og den totale massen modellerast slik [26] (s. 3), [7] (s. 177)

$$\frac{M_{FS}}{M_{tot}} = \gamma^* = \left(\frac{u^*}{u'}\right)^3 = \left(\frac{3C_{D2}}{4C_{D1}^2}\right)^{3/4} \left(\frac{\nu\varepsilon}{k^2}\right)^{3/4} = 9,8 Re_T^{-3/4}, \quad (2.64)$$

der M_{FS} er masse finstruktur og M_{tot} er total masse (sjå reaktormodell).

Om ein kan føresete at energien i regionane med finstruktur er tilnærma konstant, vert høvet mellom massen i desse regionane og den totale massen [26] (s. 4)

$$\frac{M_{FSR}}{M_{tot}} = \gamma_\lambda = \frac{u^*}{u'}, \quad (2.65)$$

som saman med likning (2.64) gjev

$$\gamma_\lambda = 2,1 Re_T^{-1/4}. \quad (2.66)$$

γ^* og γ_λ er sannsynet for å finne finstruktur eller regionar med finstruktur i eit punkt. M_{FSR} er massen til regionane med finstruktur.

Masseutveksling, \dot{M} , mellom finstruktur og omgjevnader, dividert på massen til finstrukturen, vert modellert som [7] (s. 177)

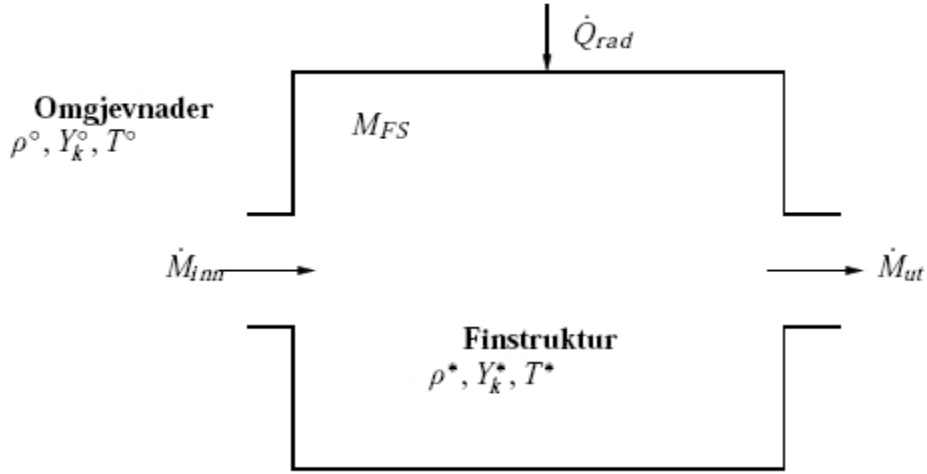
$$\frac{\dot{M}}{M_{FS}} = \dot{m}^* = 2 \frac{u^*}{L^*} = \left(\frac{3}{C_{D2}}\right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{1/2} = 2,5 \left(\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{1/2}. \quad (2.67)$$

Masseutveksling mellom finstruktur og omgjevnader, dividert på den totale massen, vert då

$$\dot{m} = \dot{m}^* \gamma^* = \frac{3}{4C_{D1}} \left(\frac{12C_{D2}}{C_{D1}^2}\right)^{1/4} \left(\frac{\nu\varepsilon}{k^2}\right)^{1/4} \frac{\varepsilon}{k} = 24 \left(\frac{\nu\varepsilon}{k^2}\right)^{1/4} \frac{\varepsilon}{k}. \quad (2.68)$$

Opphaldstida i finstrukturen er

$$\tau^* = \frac{1}{\dot{m}^*}. \quad (2.69)$$



Figur 2.2: Skjematisk finstruktur-reaktor

Reaktormodell

I modellen åt Magnussen vert finstrukturen sett på som ein velblanda reaktor (figur 2.2). Ein slik reaktor har konstant kontrollvolum, men masse kryssar grensene kontinuerleg. Reaktoren er ideell og homogen, som inneber at komponentane vert perfekt blanda idet dei kryssar kontrollvolumgrensa [34] (s. 189). Massen i reaktoren er M_{FS} . Massestraumen inn og ut er \dot{M}_{inn} og \dot{M}_{ut} . Merketeiknet $*$ viser til tilstanden i reaktoren medan $^\circ$ er tilstanden i omgjevnader.

Massebalansen for eit stoff k i ein stasjonær reaktor vert

$$\underbrace{\dot{M}_{inn} Y_k^\circ}_{\text{masse } k \text{ inn}} - \underbrace{\dot{M}_{ut} Y_k^*}_{\text{masse } k \text{ ut}} = \underbrace{-R_k^* \frac{M_{FS}}{\rho^*}}_{\text{masse } k \text{ reagert}}, \quad (2.70)$$

der R_k^* er reaksjonsrate for stoff k . Volum finstruktur er M_{FS}/ρ^* . For ein stasjonær reaktor er $\dot{M}_{inn} = \dot{M}_{ut} = \dot{M}$. Om ein nyttar at $\dot{m}^* = \dot{M}/M_{FS}$ frå likning (2.67) kan reaksjonsraten skrivast som

$$-R_k^* = \rho^* \dot{m}^* (Y_k^\circ - Y_k^*). \quad (2.71)$$

Likninga gjeld i tilfelle der stoff k vert forbrukt i reaktoren. Det vil seie at positive R_k^* gjev at det vert produsert stoff k , og når den er positiv gjev likninga at det er meir av stoff k i straumen ut av reaktoren enn inn frå omgjevnaden.

Ein kan no finne eit uttrykk for reagert masse av stoff k per tids- og volumeining for det totale systemet (finstruktur og omgjevnad) [7] (s. 180):

$$\bar{R}_k = \left(R_k^* \frac{M_{FS}}{\rho^*} \right) \left(\frac{M_{tot}}{\bar{\rho}} \right)^{-1} = \frac{\bar{\rho}}{\rho^*} \gamma^* R_k^*. \quad (2.72)$$

Likninga gjeld berre om all finstrukturen reagerer, noko som ikkje alltid er tilfelle. Berre ein del, χ , av finstrukturen reagerer ($0 \leq \chi \leq 1$), slik at likninga kan skrivast

$$\bar{R}_k = \frac{\bar{\rho}}{\rho^*} \chi \gamma^* R_k^*. \quad (2.73)$$

Med $\dot{m} = \gamma^* \dot{m}^*$ og likning (2.71) kan reaksjonsraten skrivast som

$$\bar{R}_k = \bar{\rho} \dot{m} \chi (Y_k^\circ - Y_k^*). \quad (2.74)$$

For at ein skal finne \bar{R}_k må ein kunne uttrykkje den ved middelerdiar, sidan desse vert brukte i simuleringane. I dette tilfellet kan ein masse-vegen storleik, $\tilde{\varphi}$, skrivast [7] (s. 181)

$$\tilde{\varphi} = \frac{M_R}{M_{tot}} \varphi^* + \frac{M_{omg}}{M_{tot}} \varphi^\circ = \gamma^* \chi \varphi^* + (1 - \gamma^* \chi) \varphi^\circ, \quad (2.75)$$

der M_R er masse finstruktur som reagerer og $M_{omg} = M_{tot} - M_R$.

Masse-vegen massefraksjon for stoff k vert då

$$\tilde{Y}_k = \gamma^* \chi Y_k^* + (1 - \gamma^* \chi) Y_k^\circ. \quad (2.76)$$

Sett ein inn for Y_k° i likning (2.71) og (2.74) gjev det reaksjonsratene

$$-R_k^* = \frac{\rho^* \dot{m}^*}{1 - \gamma^* \chi} (\tilde{Y}_k - Y_k^*), \quad (2.77)$$

$$-\bar{R}_k = \frac{\bar{\rho} \dot{m} \chi}{1 - \gamma^* \chi} (\tilde{Y}_k - Y_k^*). \quad (2.78)$$

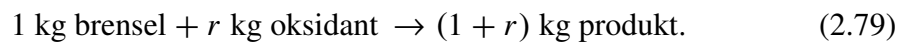
No gjenstår berre å finne noko ein kan setje inn for χ og Y_k^* . Det er to måtar å finne Y_k^* på:

- Ein kan føresete at reaksjonane er uendeleg raske. Då kan ein rekne ut Y_k^* frå ei enkel reaksjonslikning.

- Ved å rekne detaljert kjemi. Her må reaksjonsmekanismer kopleast mot modellen.

Rask kjemi

Med uendeleg rask kjemi føreset ein at opphaldstida er lang nok til at det vert jamvekt i finstrukturen [11] (s. 43), eller at ein oppnår jamvekt uendeleg raskt. Ved ein slik føresetnad vert \bar{R}_k styrt av blandingsraten og turbulensen. Tilfellet vert då ein global, støkiometrisk reaksjon



Magnussen modellerer andelen reagerande finstruktur som

$$\chi = \chi_1 \cdot \chi_2 \cdot \chi_3, \quad (2.80)$$

der χ_1 er sannsynet for at reaktantane finn saman. Dette bidraget vert modellert

$$\chi_1 = \frac{\left(\tilde{Y}_{min} + \tilde{Y}_{pr}/(1+r) \right)^2}{\left(\tilde{Y}_{br} + \tilde{Y}_{pr}/(1+r) \right) \left(\tilde{Y}_{oks}/r + \tilde{Y}_{pr}/(1+r) \right)}, \quad (2.81)$$

$$\tilde{Y}_{min} = \min \left(\tilde{Y}_{br}, \frac{1}{r} \tilde{Y}_{oks} \right). \quad (2.82)$$

χ_2 uttrykkjer grad av oppvarming med produktet

$$\chi_2 = \min \left\{ \frac{1}{\gamma_\lambda} \cdot \frac{\tilde{Y}_{pr}/(1+r)}{\tilde{Y}_{pr}/(1+r) + \tilde{Y}_{min}}, 1 \right\}, \quad (2.83)$$

og χ_3 avgrensar reaksjonen når det er lite reaktantar

$$\chi_3 = \frac{1}{\gamma_\lambda} \min \left\{ \frac{\gamma_\lambda \left(\tilde{Y}_{pr}/(1+r) + \tilde{Y}_{min} \right)}{\tilde{Y}_{min}}, 1 \right\}. \quad (2.84)$$

No kan ein skrive eit forenkla uttrykk for reaksjonsraten [7] (s. 188):

$$\bar{R}_{br} = -\frac{\bar{\rho}\dot{m}\chi}{1-\gamma^*\chi}\tilde{Y}_{min}, \quad (2.85)$$

$$\bar{R}_{oks} = r\bar{R}_{br}, \quad (2.86)$$

$$\bar{R}_{pr} = -(1+r)\bar{R}_{br}. \quad (2.87)$$

Føresetnaden om rask kjemi er akseptabel så lenge ein ser på brensel, oksidant og produkt som samla. Skal ein til dømes finne alle stoff som inngår i produktet er ikkje denne tilstrekkeleg. For fleire reaksjonar enn reaksjonslikning (2.79) må brensel, oksidant og produkt identifiserast for kvar (del-)reaksjon.

Detaljert kjemi

Ved detaljert kjemi må ein rekne ut \bar{R}_k frå kjemisk kinetikk. I praktiske tilfelle er oftast hovudreaksjonen ein sum av veldig mange delreaksjonar, og for å rekne på detaljert kjemi må modellen ha informasjon om reaksjonsmekanismar.

Ved slike utrekningar vert finstrukturen sett på som ein homogen reaktor med konstant trykk. Om strålingsvarme vert neglisjert kan reaktoren reknast adiabatisk. Då vert likningssystemet [15], [23] (s. 35)

$$\begin{aligned} \frac{dh}{dt} &= 0 \\ \frac{dp}{dt} &= 0 \\ \frac{dY_k^*}{dt} &= \frac{R_k^*}{\rho^*} + \nu_r \left(Y_k^\circ - Y_k^* \right), \end{aligned} \quad (2.88)$$

der ν_r er blandingsrate i reaktoren. Likninga over vert integrert frå $t = t_0$ til $t = t_0 + \Delta t$.

Reaktortype vert bestemt ved val av ν_r og Δt . Om ein føreset at reaktoren er stasjonær med blandingsrate $\nu_r = 1/\tau^*$, er dette ein velblanda reaktor med opphaldstid τ^* . Ein får stasjonær tilstand ved å setje $\Delta t = \infty$.

Likning 2.67 og 2.69 gjev opphaldstida uttrykt ved ε og ν . Meir dissipasjon av turbulensenergi gjev mindre opphaldstid. For ei laminær flamme, der det ikkje er turbulens og dermed ingen dissipasjon av k , ville opphaldstida gå mot uendeleg i modellen.

Meir opphaldstid gjev mindre blandingsrate. Går opphaldstida mot uendeleg, er endringa av Y_k^* gjevne av reaksjonsraten åt stoff k i finstrukturen. Går opphaldstida mot null, vert det siste leddet på høgre side i likning (2.88) mykje større enn reaksjonsraten.

Med føresetnadane om stasjonær tilstand kjem det fram eit likningssystem med N_S likningar

$$\frac{Y_k^* - Y_k^\circ}{\tau^*} = \frac{R_k^*}{\rho^*}, \quad k = 1, \dots, N_S. \quad (2.89)$$

Om vi set $\tau^* = 1/\nu_r$, og løyser ut Y_k^* , vert likninga

$$Y_k^* = Y_k^\circ + \frac{R_k^*}{\rho^* \nu_r}, \quad k = 1, \dots, N_S. \quad (2.90)$$

Ved detaljert kjemi finn ein reaksjonsratene for finstrukturen frå likning (2.20) og Arrhenius-uttrykkjet (2.21). Likningane (2.88) gjev massefraksjonen åt stoff k i finstrukturen. I SPIDER vert det totale likningssystemet som kjem fram løyst med programpakken LIMEX til ei stasjonær løysing er nådd [11] (s. 63). Ein finn deretter dei midla reaksjonsratene frå likning (2.78).

I SPIDER vert χ sett lik 1, sidan den kjemiske kinetikken avgjer om det vert reaksjon. Om det vert rekna på ein velblanda reaktor, vert Δt sett til eit høgt tal, slik at likning (2.88) kan reknast stasjonær. Likning (2.69), saman med likning (2.73), gjev eit uttrykk for den midla reaksjonsraten åt stoff k , uttrykt ved blandingsraten:

$$\bar{R}_k = \bar{m} \frac{\bar{\rho}}{\rho^*} \frac{R_k^*}{\nu_r}. \quad (2.91)$$

Ein anna måte er å redusere kjemien ved at ein føreset likevekt for nokre reaksjonar og at ei mengd stoff ikkje endrar seg over tid. På denne måten kan ein redusere over hundre reaksjonar til berre nokre få som må takast med i utrekningane. Då kan verdiane for ulike tilstandar setjast opp i tabellar. Dermed delar ein opp problemet og lettar reknetyngda. ILDM er skildra i [11].

2.6.2 Blandingsfraksjon

Blandingsfraksjonen kan definerast ved å sjå på ein eigenskap av to straumar som vert blanda i eit kammer:

Her kan innløp 1 vere straum med brensel og innløp 2 kan vere ein luftstraum. Dei kjem ut av kammeret i ein straum der dei er blanda saman. Felles for 1,2 og 3 er at dei har eigenskapen, φ .

Om φ er ein konserverte skalar, kan blandingsfraksjonen skrivast på forma [7]



Figur 2.3: Blandekammer, definisjon av blandingsfraksjon

$$f = \frac{\varphi_{bl} - \varphi_2}{\varphi_1 - \varphi_2}. \quad (2.92)$$

Med konserverte skalar meiner vi at det ikkje vert meir eller mindre av eigenskapen - den er konserverte. Entalpi, til dømes, er ein konserverte skalar om ikkje entalpilikninga inneheld eit kjeldeledd.

Same uttrykket over kan nyttast når ein ser på massefraksjonen åt eit grunnstoff, Y_k . Blandingsfraksjonen er då gjeve som

$$f_k = \frac{Y_{k,bl} - Y_{k,2}}{Y_{k,1} - Y_{k,2}}. \quad (2.93)$$

I SPIDER er det føresete same diffusjonskoeffisient for alle stoffa. Om denne ikkje hadde vore den same, ville stoffa ha vorte spreidde ulikt. Dette er og tilfellet i verkelege flammer, og blandingsfraksjonen utrekna frå massefraksjonen åt eit grunnstoff vil ikkje vere den same åt eit anna. I SPIDER skal altså blandingsfraksjonen verte den same om ein reknar ut frå C eller H, føresete at dei finst i straumane av figuren over.

Eit alternativ om ikkje diffusjonskoeffisienten ha vore den same, kunne vore å ha rekna ut blandingsfraksjonen som ein lineær kombinasjon av dei ulike grunnstoffa. Bilger [4] har ein versjon som vert nytta her:

$$f_B = \frac{2Y_C/M_C + \frac{1}{2}Y_H/M_H + (Y_{O,coflow} - Y_O)/M_O}{2Y_{C,jet}/M_C + \frac{1}{2}Y_{H,jet}/M_H + Y_{O,coflow}/M_O}. \quad (2.94)$$

Her er Y_k massefraksjonen åt eit grunnstoff i brenseljeten, eller i straumen rundt jeten ($k = O, H$ og C).

3 Programsystemet SPIDER

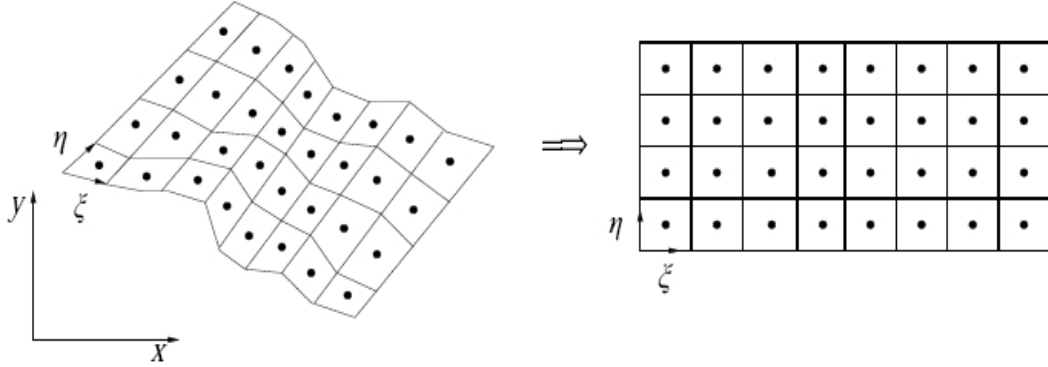
CFD-koden SPIDER er eit numerisk simuleringsverktøy for strøyming med og utan kjemiske reaksjonar. Programmet nyttar kurvelineære, ikkje-ortogonale koordinatar som gjer det mogleg å rekne på komplekse geometriar. Det var Morten C. Melaaen som implementerte strøymingdelen i si doktoravhandling [28]. Seinare vart forbrenningsdelen implementert av Inge R. Gran [11]. SPIDER er stadig under utvikling ved instituttet. Denne oppgåva nyttar hovudsakleg materiale frå Melaaen og Gran sine avhandlingar.

3.1 Koordinatsystem

Komplekse geometriar kan uttrykkjast som funksjon av x og y i eit rettvinkla koordinatsystem, men det kan vere vanskeleg å uttrykkje gridlinjene som funksjon av x og y . I kurvelineære, ikkje-ortogonale koordinatsystem kan aksane følgje geometrien ein ser på. Figur 3.1a på neste side syner eit kurvelineært, ikkje-ortogonalt koordinatsystem som følgjer eit diskretisert område [28] (s. 21). Gridlinjene kryssar kvarandre med vilkårlige vinklar, og koordinatane $(\xi^i) = (\xi, \eta, \zeta)$ kan følgje straumlinjene langs komplekse geometriar. I midten av cellene ligg den skalare noda. Av figuren ser ein at det må eksistere ein funksjonssamanheng mellom dei to koordinatsystema, der funksjonane $\xi^i(x^i)$ og $x^i(\xi^i)$ kjem fram. Analytiske funksjonar mellom desse eksisterer berre for enkle geometriar, som sylinder- og kulekoordinatar. Ein fordel med kurvelineære koordinatar er at grensene følgjer overflata til $\xi^i = \text{konstant}$. Då kan ein spesifisere grid-linjene først langs geometrien og deretter setje inn noder.

Når ein nyttar kurvelineære koordinatar kan ein gjere utrekningar både i det fysiske og det numeriske rom. Figur 3.1b syner gridsystemet i det numeriske rom. I SPIDER vert likningane integrert langs ei celle i det fysiske rom, men etterpå vert koordinatane transformert til det numeriske rom for å lettare kunne implementerast i eit dataprogram. Figur 3.1 syner tankegangen. Transformasjon av koordinatane er ikkje teke med her, men kan lesast om i [28] (s. 22-29).

Tilvekst i buelengda åt ei kurvelineær linje kan uttrykkjast



Figur 3.1: (a) Nettverk i det fysiske rom. (b) Nettverk i det numeriske rom.

$$\delta s^i = \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi^i} \right| \delta \xi^i = J_{ii} \cdot \delta \xi^i. \quad (3.1)$$

Likninga skal ikkje summerast over i . \mathbf{x} er ein kartesisk vektor og J_{ii} er jakobideterminanten.

3.2 Diskretisering ved endeleg volummetode

Diskretisering av likningane vert gjort ved endeleg volummetode. Metoden går ut på å dele opp nettverket ein ser på inn i små kontrollvolum. Inni kvart kontrollvolum er der ei node som gjev middelveien inne i volumet etter utrekningane. Poenget med metoden er ikkje å gje ei numerisk tilnærming av konserveringslikningane i nodene, men heller reflektere bevaringsprinsippet i likningane på eit makroskopisk nivå [28] (s. 29).

Først integrerer ein den generelle transportlikninga (likning 2.13) over eit generelt tredimensjonalt kontrollvolum i det fysiske rom:

$$\int_{\delta V} \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} dV + \int_{\delta V} \nabla \cdot \mathbf{J} dV = \int_{\delta V} S dV, \quad (3.2)$$

der det er innført ein generell transportvektor, \mathbf{J} :

$$\mathbf{J} = \rho \mathbf{U} \varphi - \Gamma \nabla \varphi. \quad (3.3)$$

$\mathbf{U} = u_j$ er fartsvektor.

Ved bruk av Gauss divergens teorem kan ein integrere det andre leddet over flatene rundt kontrollvolumet:

$$\int_{\delta V} \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} dV + \int_{\delta A} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{A} = \int_{\delta V} S dV. \quad (3.4)$$

Integrasjon av likninga gjev

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \delta V_P + \mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_e - \mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_w + \mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_n - \mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_s + \mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_t - \mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_b = \bar{S}_P, \quad (3.5)$$

der det transiente leddet kan diskretiserast med implisitt Euler. Dette gjev

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} = \frac{\rho_P \varphi_P - \rho_P^\circ \varphi_P^\circ}{\delta t}. \quad (3.6)$$

Merketeikna e, w, n, s, t og b viser til flatene på kontrollvolumet i tre dimensjonar (east, west, north, south, top and bottom). ρ_P og φ_P viser til storleikar i noda, P , medan $^\circ$ refererer til verdiar ved førre tidssteg.

Leddets $\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_{nn}$ etter integrasjonen vert [28] (s. 30)

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_{nn} = \int_{A_{nn}} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{A} = (\rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{A}^{(i)} \varphi - \Gamma \mathbf{A}^{(i)} \cdot \nabla \varphi)_{nn}, \quad (3.7)$$

der nn viser til flata på kontrollvolumet i dei ulike retningane. Merkteiknet (i) viser til retninga åt \mathbf{A} : Om nn er e eller w vert $i = 1$, om nn er lik n eller s er $i = 2$, og for t eller b er $i = 3$.

Koordinattransformasjon [28] (s. 22-29) gjev ein generell transportvektor i det fysiske rom [28] (s. 31)

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_{nn} = \left(\rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{A}^{(i)} \varphi - \Gamma A_k^i \frac{\partial \varphi}{\partial x^k} \right)_{nn} = \left(\rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{A}^{(i)} \varphi - \Gamma \frac{A_k^i A_k^j}{J} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^j} \right)_{nn}. \quad (3.8)$$

Det siste leddet kan skrivast meir kompakt ved å setje

$$G^{ij} = \frac{A_k^i A_k^j}{J} = \frac{\mathbf{A}^{(i)} \cdot \mathbf{A}^{(j)}}{J}. \quad (3.9)$$

G^{ij} er ein geometrisk diffusjonskoeffisient.

Kjeldeleddet i likning (3.5) må lineariserast [28] (s. 32):

$$\bar{S}_P = \int_{\delta V} S dV = \bar{S}_{1P} + \bar{S}_{2P} \cdot \varphi_P, \quad (3.10)$$

der \bar{S}_{1P} er ein konstant i kjeldeleddet, og \bar{S}_{2P} er ein koeffisient. \bar{S}_{2P} må vere negativ for å unngå numerisk ustabilitet.

Ein kan no setje opp den diskretiserte likninga på generell form [28] (s. 32), [13]:

$$a_P \varphi_P = \sum_{nb} a_{nb} \varphi_{nb} + b, \quad (3.11)$$

der

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} + a_P^\circ + a_f - \bar{S}_{2P}, \quad (3.12)$$

$$b = b_{NO} + a_P^\circ \varphi_P^\circ + \bar{S}_{1P}, \quad (3.13)$$

$$a_P^\circ = \frac{\rho_P^\circ \delta V_P}{\delta t}, \quad (3.14)$$

$$a_f = \frac{\rho_P - \rho_P^\circ}{\delta t} \delta V_P + F_e - F_w + F_n - F_s + F_t - F_b, \quad (3.15)$$

$$b_{NO} = \left[\Gamma G^{12} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^2} + \Gamma G^{13} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^3} \right]_w^e + \left[\Gamma G^{21} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^1} + \Gamma G^{23} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^3} \right]_s^n + \left[\Gamma G^{31} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^1} + \Gamma G^{32} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^2} \right]_b^t, \quad (3.16)$$

$$F_{nn} = \left(\rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{A}^{(i)} \right)_{nn}. \quad (3.17)$$

Leddet b_{NO} fell vekk om nettverket er ortogonalt. Merketeknet nb viser til nabo-noder som omringar P .

3.2.1 Diskretisering av diffusive ledd

Diffusive ledd vert diskretisert med sentraldifferansar. Eit to-dimensjonalt kontrollvolum er synt i figur 3.2 [23] (s. 43). Ein føreset lineært profil for φ , og for grenseflata e vert den primære fluksen diskretisert [28] (s. 33)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \xi^1} = \frac{\varphi_E - \varphi_P}{\delta \xi^1}. \quad (3.18)$$

Dei sekundære fluksane på same flata vert

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \xi^2} = \frac{\varphi_{(e,n)} - \varphi_{(e,s)}}{\delta \xi^2}, \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \xi^3} = \frac{\varphi_{(e,t)} - \varphi_{(e,b)}}{\delta \xi^3}. \quad (3.20)$$

Likeins for dei andre flatene. Verdiane i hjørna på kontrollvolumet er ukjende og kjem fram ved interpolasjon i det fysiske rom

$$\varphi_e = \varphi_P(1 - f_{1P}) + \varphi_E f_{1P}, \quad (3.21)$$

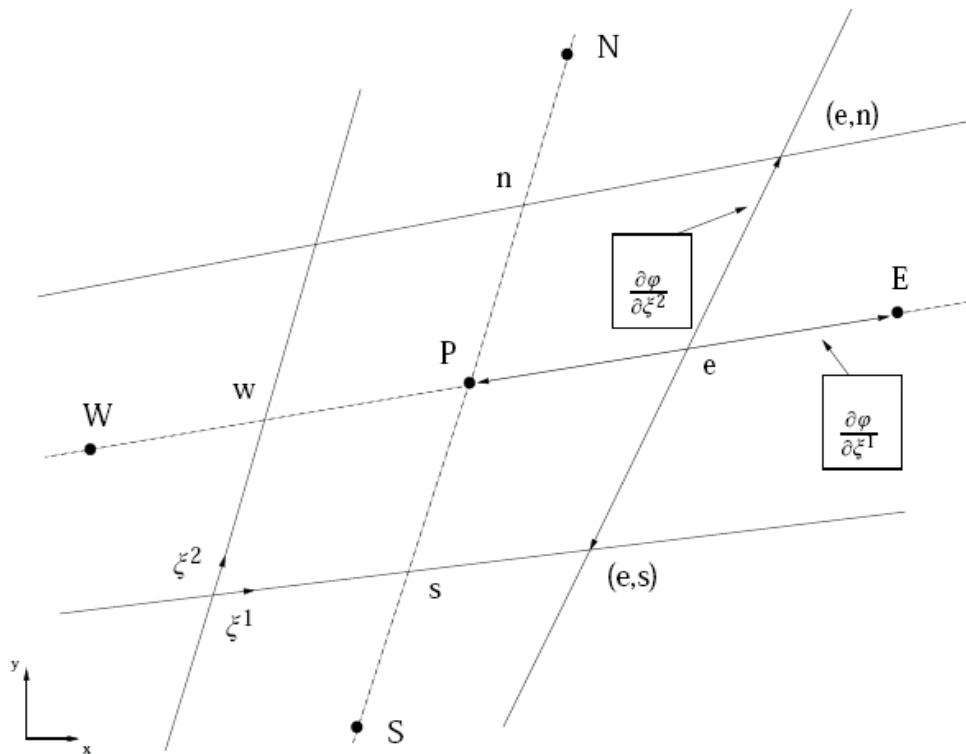
der

$$f_{1P} = \frac{\overline{Pe}}{\overline{PE}}. \quad (3.22)$$

Det vert likeins i dei andre retningane. For å finne til dømes $\varphi_{(e,n)}$ må likning (3.21) nyttast tre gongar.

3.2.2 Diskretisering av konvektive ledd

Ved diskretisering av diffusive ledd vert det føreset at φ varierer lineært. For konvektiv fluks gjev føresetnaden stabil løysing berre for låge peclettal (Pe). Ved bruk av eit oppstraumsskjema kan ein få stabil løysing. I eit første ordens oppstraumsskjema vert verdien på kontrollvolumgrensa sett lik verdien i den førre noda på same linje. Dette er ikkje alltid nøyaktig nok, og i tillegg kan ein få *numerisk diffusjon*. Dette er eit fenomen som oppstår når straumlinjene ikkje er normalt på gridlinjene, og avhengige variable har gradientar ($\neq 0$) i retning normalt på straumen. Eit alternativ kan vere å



Figur 3.2: To-dimensjonalt kontrollvolum

nytte oppstrømsskjema av høgare orden, men ofte gjev det problem med konvergens og ustabilitet, og at løysingsalgoritmen vert meir kompleks [28] (s. 34).

I SPIDER vert det nytta anten potenslovskjema (POW), som er ein variant av første orden oppstrømsskjema, eller eit andre ordens oppstrømsdifferanseskjema [11] (s. 60).

Potenslovskjema (POW)

Potenslovskjema er ei kurvetilpassing til den eksakte løysinga for ei ein-dimensjonal, stasjonær strøyming med diffusjon og konveksjon utan kjelder og konstant diffusivitet [28] (s. 36). Skjemaet er ein kombinasjon av sentraldifferansiering og første ordens oppstrømsskjema. Ved låge peclettal vert dei konvektive ledda diskretiserte med sentraldifferansiering, og følgjeleg er potenslovskjema av andre ordens nøyaktigheit. Ved høge peclettal reduserer ein det til oppstrømsskjema av første ordens nøyaktigheit.

Fluksen som verkar på kontrollvolumgrensa består av ein ortogonal fluks, $\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_{nn,O}$, og ein ikkje-ortogonal, $\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_{nn,NO}$. Desse vert omtala som primær og sekundær fluks. Det totale bidraget er summen av desse.

Ved potenslovskjema kan den ortogonale fluksen skrivast

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_{e,O} = A(P_e)D_e(\varphi_P - \varphi_E) + F_e\varphi_P, \quad (3.23)$$

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}|_{w,O} = A(-P_w)D_w(\varphi_W - \varphi_P) + F_w\varphi_P, \quad (3.24)$$

der

$$A(P) = \max \left[0, (1 - 0, 1|P|)^5 \right] + \max [0, -P], \quad (3.25)$$

$$P_{nn} = \frac{F_{nn}}{D_{nn}}, \quad (3.26)$$

$$D_{nn} = \left(\frac{\Gamma G^{ii}}{\delta \zeta^i} \right)_{nn}. \quad (3.27)$$

Over er $\max []$ det største av uttrykka inne i klammene. Same likningane kjem fram for fluks i η - og ζ -retningane. Set ein desse fluksane inn i likning (3.5) får ein nye koeffisientar:

$$a_E = D_e A(P_e), \quad (3.28)$$

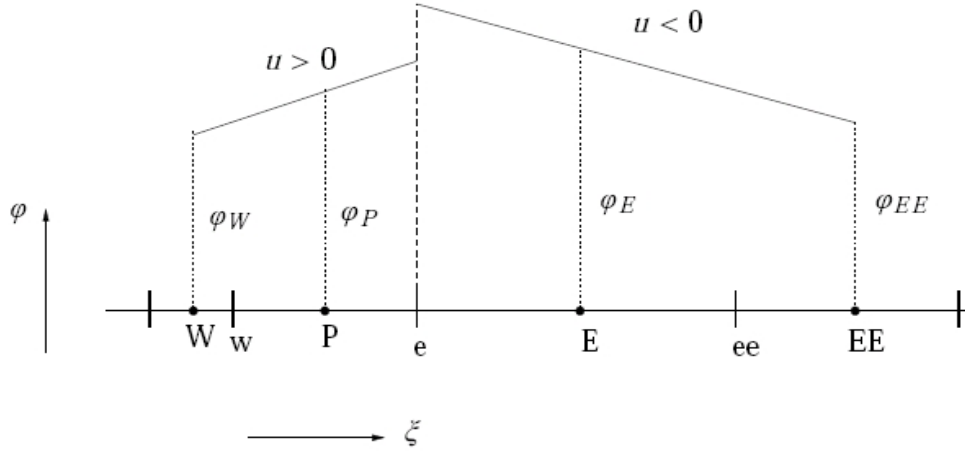
$$a_W = D_w A(-P_w), \quad (3.29)$$

og likeins vert det i dei to andre retningane. Liknande koeffisientar kjem fram for dei andre nabonodene (N, S, T og B).

Andre ordens oppstraumsdifferanseskjema (SOU)

Sidan første ordens oppstraumsskjema kan gje unøyaktige løysingar ved høge peclettal treng ein eit betre alternativ. Andre ordens oppstraumsdifferanseskjema kan nyttast både i det fysiske og numeriske rom. Figur 3.3 syner tankegangen. Verdien ved kontrollvolumgrensa er gjeven ved ekstrapolasjon av dei to nærmaste nabonodene oppstraums [28] (s. 37).

$$\varphi_e = \begin{cases} \varphi_E + (\varphi_E - \varphi_{EE}) \frac{\overline{eE}}{\overline{E_{EE}}}, & F_e < 0. \\ \varphi_P + (\varphi_P - \varphi_W) \frac{Pe}{WP}, & F_e > 0. \end{cases} \quad (3.30)$$



Figur 3.3: Andre ordens oppstrømsdifferansiering

Likninga gjeld for både forskyvd og ikkje-forskyvd nettverk, men uttrykka ein får ved dette skjema er ulike for dei to typene nettverk. I det følgjande vert berre skjema for ikkje-forskyvd teke med. Likning (3.30) vert då redusert til

$$\varphi_e = \begin{cases} \varphi_E + (\varphi_E - \varphi_{EE})f_{1E}, & F_e < 0. \\ \varphi_P + (\varphi_P - \varphi_W)(1 - f_{1W}), & F_e > 0. \end{cases} \quad (3.31)$$

Dette, saman med sentraldifferansiering for dei diffusive ledda, gjev koeffisientane åt primærfluksen [28] (s. 38)

$$a_E = \max[0, -F_e](1 + f_{1E}) + \max[0, -F_w]f_{1P} + D_e, \quad (3.32)$$

$$a_W = \max[0, F_w](2 - f_{1WW}) + \max[0, F_e](1 - f_{1W}) + D_w, \quad (3.33)$$

$$a_{EE} = -\max[0, -F_e]f_{1E}, \quad (3.34)$$

$$a_{WW} = -\max[0, F_w](1 - f_{1WW}). \quad (3.35)$$

Dette vert likeins i η - og ζ -retningane. Her er nabonodene, $_{nb}$, i likning (3.11) E , W , N , S , T , B , EE , WW , NN , SS , TT og BB .

For å unngå negative koeffisientar kan ein leggje nodene som ligg lengst unna P inn i kjeldeleddet og behandle dei eksplisitt. Då vert kjeldeleddet

$$\Delta b = a_{EE}(\varphi_{EE} - \varphi_P) + a_{WW}(\varphi_{WW} - \varphi_P) + a_{NN}(\varphi_{NN} - \varphi_P) + a_{SS}(\varphi_{SS} - \varphi_P) + a_{TT}(\varphi_{TT} - \varphi_P) + a_{BB}(\varphi_{BB} - \varphi_P). \quad (3.36)$$

No er nabonodene, $_{nb}$, i likning (3.11) E , W , N , S , T og B . På denne måten er alle koeffisientane positive gjennom iterasjonen.

3.3 Løysingsalgoritme for ikkje-forskyvd nettverk

I likningane for bevaring av rørslemengd (2.6, 2.8 og 2.26) inngår det konvektive ledd som er ulineære. I desse, saman med likninga for bevaring av masse, finn ein att dei same fartskomponentane. Likningane er difor kopla. Det største problemet er trykket som inngår i likningane, og at ein ikkje har ei transportlikning for det. Sidan trykk- og fartsprofil oftast er ukjende kan dette føre til problem. Om både trykk og fart er definert i nodene i eit ordinært kontrollvolum, kan eit ulineært trykkfelt virke som eit uniformt trykkfelt i rørslemengdelikningane [13] (s. 135-137).

For å unngå divergens og ustabilitet kan ein nytte eit forskyvd nettverk der ein lagrar skalare storleikar i nodene, medan fartskomponentar er gjevne på kontrollvolumgrensa. Ein kan seie at dette er eit nytt nettverk der det nye er lagt opp på det første, men nodene til det øvste ligg på grensene til det nedste. I SPIDER kan ein velje mellom forskyvd og ikkje-forskyvd nettverk. I det følgjande vert det snakka om det sistnemnde, sidan dette er nytta i simuleringane her.

I ikkje-forskyvd nettverk er dei kartesiske fartskomponentane lagra i dei skalare node-ne. Dette kan gjerast ved å velje fart som avhengig variabel i rørslemengdelikningane [28] (s. 46). På denne måten kan likningane formast om til ei transportlikning for skalare storleikar. For å finne konvektiv fluks på kontrollvolumgrensa trengst det ein anna type interpolasjon. Det er nødvendig med ei nær kopling mellom trykk og fart for å nytte ikkje-forskyvd nettverk. Dette oppnår ein ved Rhie og Chow interpolasjonsmetode.

Løysingsalgoritmen nytta her er SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). Dette er ein populær algoritme for korreksjon av trykk. Ein gjettar fart og trykk og korrigerer dei, slik at rørslemengdelikninga saman med kontinuitet er oppfylt.

SIMPLE-algoritmen for SPIDER følgjer her [11] (s. 61-62):

1. Gjettar startverdiar for alle variable.
2. Oppdaterer grenseverdiar.
3. Løyser dei diskretiserte impulslikningane.

4. Finn den konvektive fluksen på kontrollvolumgrensene ved Rhie og Chow interpolasjon.
5. Løyer diskretiserte likningar for korreksjon av trykk.
6. Korrigerer trykk, massestraum og dei kartesiske fartskomponentane.
7. Løyer k -likninga eller likninga for reynoldsspenningane.
8. Løyer ε -likninga.
9. Løyer transportlikningar åt andre skalare storleikar.
10. Reknar ut temperatur, trykk og tettleik.
11. Brukar dei nye verdiane som startvariable og gjentek punkt 2-10 til konvergens er nådd.

Det kjem fram eit sett med lineære, algebraiske likningar. I denne oppgåva vert dei løyste i ei trediodagonal matrisealgoritme (TDMA). Denne er forklart i [13] (s. 143).

Trykk-korreksjon er gjeve ved $p = p^* + p'$, der p er ny verdi og p' er korreksjon. På grunn av tilnærmingar gjort i dei diskretiserte likningane for trykk- og farts-korreksjon, kan ofte p' få ein for stor verdi. Ein innfører difor ein underrelaksasjonsfaktor, α_p , slik at likninga for korrigert trykk vert

$$p = p^* + \alpha_p p'. \quad (3.37)$$

I steg 9 og 10 i algoritmen vert EDC-modellen kopla inn:

9.
 - a) Løyer transportlikningar for midla entalpi.
 - b) Løyer likningar for midla massefraksjon.
10.
 - a) Om strålingsvarme vert neglisjert er entalpi for finstrukturen og området utanfor (omgjevnadane) den same.
 - b) Reknar ut tilstanden i finstrukturen basert på rask, detaljert eller redusert kjemi (sjå avsnitt 2.6.1).
 - c) Finn samansetninga åt fluidet i omgjevnadane (likning 2.76).
 - d) Finn temperatur i omgjevnadane ved Newton iterasjon (likning 2.14 til 2.17).
 - e) Reknar ut tettleik frå tilstandslikninga (2.17).
 - f) Finn molekylær viskositet frå likning (2.18).
 - g) Likning (2.75) gjev midla temperatur, tettleik og viskositet frå finstrukturen og omgjevnadane.

3.4 Grenseverdier

Dei diskretiserte likningane kan nyttast på alle indre kontrollvolum ein ser på i området. Ved grensene er dei diskretiserte likningane avhengige av grenseverdier. Det er to hovudgrupper spesifiserte verdier [28] (s. 89):

- φ vert spesifisert på grensa.
- Fluksen \dot{Q} vert spesifisert.

3.4.1 Innløp

På grensa til innløpet vert φ spesifisert. Ein finn vanlegvis verdier frå eksperimentelle data, analyser eller estimering. Då set ein ei node på grensa og handsamar grensa som eit kontrollvolum utan tjukkeleik.

3.4.2 Utløp

Det er vanleg å føresete at den diffusive fluksen i straumvis retning er null på grensa $\dot{Q}_{diff} = 0$, slik at fluksen berre er konvektiv. Dette gjev at gradientar i straumen er null på grensa. Det finst og metodar der ein ekstrapolerar fram ein verdi frå den førre noda (oppstraumsdifferansiering).

3.4.3 Symmetri

På symmetrigrensa er fartskomponenten normalt på grensa, og at gradienten $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$ parallelt med grensa er lik null. I dei skalare transportlikningane er både diffusiv og konvektiv fluks lik null. Dette gjev null konvektiv fluks på grensa [28] (s. 95).

3.4.4 Veggflate

For ein ugjennomtrengelig vegg der vektoren, \mathbf{n} , er normalt på veggen, er konvektiv fluks $\mathbf{n} \cdot \mathbf{U} = 0$. Heft-krefter gjev at farta U at fluidet heilt nær veggen må vere lik farta U_w på sjølve veggen. Dette gjev grunnlag for å spesifisere grenseverdien.

For turbulent strøyming er handsaming av grenseverdier mykje meir komplisert enn ved laminær. Dette kjem av at gradientane $\frac{\partial \varphi}{\partial n}$ \dot{Q} middelstorleikar er så store nær ei slik flate, og ein treng difor vegglover her. Farta normalt på veggen vert sett til null nær

veggen, diffusiviteten sett ein lik viskositeten, μ , på veggen. Dette reduserer transportfluksen til berre diffusiv fluks, der fartsgradientar parallelt med veggen inngår. Veggspenninga er lik

$$\tau_w = \pm \mu \frac{\partial \mathbf{U}_{par}}{\partial n^i}. \quad (3.38)$$

I tillegg til dette må k - ε -modellen modifierast. I det turbulente grensesjiktet heilt nær veggen føreset ein balanse mellom produksjon og dissipasjon av turbulensenergi. Ei alternativ vegglov for dissipasjonen er gjeven [7] (s. 75)

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\kappa \delta n}. \quad (3.39)$$

3.4.5 Trykkbehandling

Trykkgradientar som inngår i rørslemengdelikningane vert diskretisert med sentraldifferansiering i dei indre kontrollvoluma. Ved bruk av ikkje-forskyvd nettverk treng ein trykket på kontrollvolumgrensa for rekne ut trykkgradienten. I SPIDER reknar ein ut trykkgradienten med einsidig, andre ordens differansiering.

Likninga for korreksjon av trykk treng òn grenseverdi. Anten er trykket eller farta kjent. Om trykket er kjent vert p' lik null, og ein løyser likninga for korreksjon av trykk som om φ er kjend på grensa.

4 NO_x-mekanismar

Gjennom dei siste femti-seksti åra har ein vorte klar over problematikken rundt NO_x. Mellom anna er det ei vesentleg årsak til danning av fotokjemisk smog og ozon. Seinare har ein sett at NO_x reagerer med ozon i stratosfæren og bryt ned skjoldet vår mot UV-strålar. Reduksjon av NO_x har difor vorte eit viktig emne når det gjeld forbrenning og utslepp. For å effektivt redusere utslepp må ein kjenne til dei ulike NO_x-mekanismane, og interaksjon mellom den kjemiske kinetikken og fluidodynamikken. I dag kjenner ein til mange reaksjonsvegar for danning og nedbryting av NO_x, og reaksjonskoeffisientane åt fleire av elementærreaksjonane er kjende [18] (s. 287).

I dette kapitlet vert det litt om ulike mekanismar for danning og reduksjon av NO_x.

4.1 Danning av NO_x

NO_x er ein fellesnemnar for NO og NO₂. Det er hovudsakleg fire mekanismar for danning av NO_x [21] (s. 237): Den termiske mekanismen, eller *Zeldovich*-NO, gjer seg gjeldande over ein viss temperatur. I tillegg er det prompt NO, N₂O-mekanismen og brenselnitrogen-mekanismen. Den siste er gjeldande om ein ser på brensel som innheld nitrogen. Kol og biomasse er døme på brensel som vil gje mykje NO_x i forbrenning. I seinare tid har det vorte oppdaga stadig nye moglegheiter for endå ei rute der NNH er involvert [34] (s. 168), [2]. I det følgjande vert det snakka om desse mekanismane.

4.1.1 Termisk NO (Zeldovich-mekanismen)

Det var Y. B. Zeldovich som postulerte denne mekanismen i 1946. Tre delreaksjonar formar termisk NO [34] (s. 168):





Namnet “termisk” kjem av at den første delreaksjonen (4.1) mot høgre (foroverreaksjonen) har høg aktiveringsenergi på grunn av den sterke bindinga i N₂-molekylet [21] (s. 238). Foroverreaksjonen (4.1) er rask nok berre ved høge temperaturar, og er difor den ratebestemmande reaksjonen i mekanismen. Ofte omtalar ein den siste saman med dei to første som ein *utvida Zeldovich mekanisme*. Det kjem av at den siste reaksjonen ikkje treng å vere kopla med dei to første om fullstendig forbrenning er nådd før NO-danning har vorte monaleg. Om dette er tilfelle kan ein føresete likevekt for N₂, O₂, O og OH, og *kvasi stasjonær* tilstand for N-atoma. Det vil seie at foroverreaksjonen (4.1) går så mykje saktare enn dei andre, at det vert forbrukt like mykje N som det vert danna N. Då kan ein forenkla reaksjonsraten åt NO til

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = 2 k_{1,f} [\text{O}]_{\text{eq}} [\text{N}_2]_{\text{eq}}, \quad (4.4)$$

der $k_{1,f}$ er reaksjonskoeffisienten åt foroverreaksjonen (4.1). $[A]$ er konsentrasjonen åt stoff A.

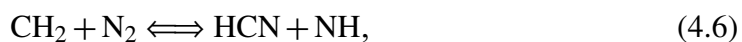
I somme tilfelle er ikkje føresetnaden om jamvekt for O nøyaktig nok. Konsentrasjonen kan ha verdiar mykje høgare enn jamvektverdien, noko som vil gje meir NO [34] (s. 169). For temperaturar under 1700 K er ratekoeffisienten, $k_{1,f}$, så liten at Zeldovich-mekanismen ikkje gjer seg gjeldande.

4.1.2 Prompt NO (Fenimore-NO)

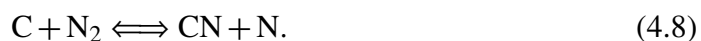
Denne mekanismen vart postulert av Fenimore (1979). Han oppdaga ved målingar på laminære, flate flammar at NO-konsentrasjonen ikkje minka sjølv om termisk NO ikkje var gjeldande på den delen av flammen. Namnet kjem av at mekanismen danner NO veldig raskt nær flammesona [21] (s. 240). Fenimore-mekanismen er mykje meir komplisert enn Zeldovich. Dette kjem av at hydrokarbon radikal er involvert i mekanismen, som vert danna gjennom kompliserte reaksjonsvegar ved flammefronten. Eksperiment syner at det hovudsakleg er CH og CH₂ av radikal som er med og danner NO [18] (s. 290). Det er desse radikala som set i gang mekanismen. Dei reagerer med nitrogen og danner komponentar av amin eller cyanid, som vidare reagerer med andre og danner NO.

Om ein ser vekk ifrå danninga av hydrokarbon radikal kan reaksjonar som set i gang mekanismen skrivast [18] (s. 290)





og



Reaksjon (4.6) og (4.7) vert ikkje sett på som så viktige, og i [18] vert dei ikkje rekna med.

Av reaksjonane (4.5 og 4.8), er det (4.5) som hovudsakleg bidreg. Denne er og den ratebestemmande i sekvensen.

For brenseloverskotstal opp til 1,2 følgjer omdanninga frå hydrogencyanid (HCN) til NO følgjande kjede av reaksjonar [34] (s. 170)



For brenseloverskotstal over 1,2 vert kjemien mykje meir kompleks. Sekvensen over vil ikkje gå så raskt, og NO vert omdanna tilbake til HCN. Dette hindrar produksjonen av NO.

Generelt er prompt-NO viktig for rike blandingar og ved låge temperaturar (omtrent 1000 K) [21] (s. 243). For nitrogen-innhaldig brensel vert nitrogenet raskt omdanna til HCN eller ammoniakk (NH₃). Vidare følgjer sekvensane prompt-NO mekanismen, som vist i figur 4.1.

4.1.4 Brensel-NO

Ei viktig kjelde til utslepp av NO er forbrenning av brensel som inneheld kjemisk bunde nitrogen. Kol og biomasse er døme på dette. Sidan mykje av verda sin energiproduksjon kjem frå kolkraftanlegg, er dette særskild viktig. Kol, og brensel som stammar frå kol, inneheld 0,5-2,0 prosent masse nitrogen [18] (s. 298). Målingar syner at produksjon av NO ved denne mekanismen er veldig avhengig av støkiometri og temperatur, og startnivået av nitrogen i brensel-luft blandinga. Omdanninga skjer først ved at dei nitrogeninnhaldige komponentane fordampar gjennom ein gassifiserings prosess, kalla pyrolyse. Omdanninga til ammoniakk (NH_3) og hydrogencyanid (HCN) skjer veldig raskt og er difor ikkje den ratebestemmande reaksjonen i mekanismen.

Forsøk med ei propan-luft flamme, der 2400 ppm $\text{CH}_3\text{-NH}_2$ (metylamin) er tilsett, kan brukast som modell for omdanning av brensel-nitrogen til NO [21] (s. 244). Ved oksygenrike forhold ($\Phi < 1,0$) vil omtrent 2/3 av brensel-nitrogenet oksiderast til NO. Resten vert omdanna til N_2 . Ved brenselrike forhold ($\Phi > 1,0$) minkar mengda NO, men det vert danna HCN og NH_3 som vidare vert oksidert til NO i atmosfæra. Ved $\Phi = 1,4$ er omdanning til N_2 på eit maksimum, og dermed summen av forureinande komponentar på eit minimum.

Oksidasjon av HCN og NH_3 er viktig for danninga av NO. I det følgjande vert det snakka litt om oksidasjon av desse, saman med ein anna mekanisme for danning av NO.

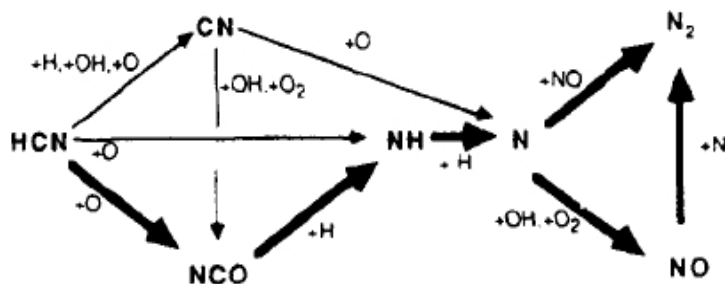
Oksidasjon av HCN

Eit viktig aspekt ved prompt NO og NO frå brensel-nitrogen er oksidasjon av HCN . Ulike eksperiment har gjeve informasjon om kva reaksjonar som danner NO gjennom denne mekanismen. Hovudsakleg reagerer HCN med O-, OH- eller H-radikal.

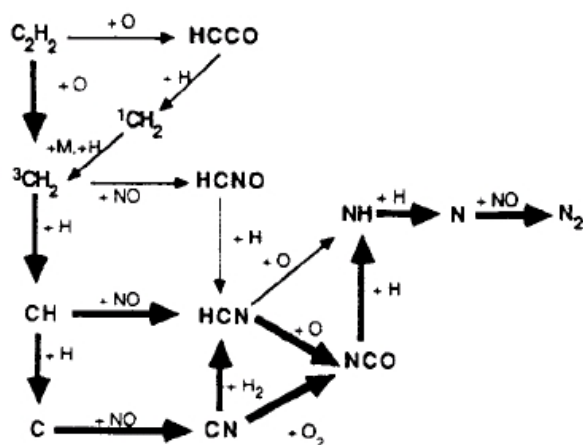
Figur 4.2 syner ruta for mekanismen der HCN vert omdanna til NO og N_2 . Dei tjukke pilene syner dei mest dominerande reaksjonsvegane. Sensivitetsanalyser har synt at den første og siste reaksjonen i den utvida Zeldovich-mekanismen er ratebestemmande for danning av NO og N_2 [23] (s. 65).

$\text{NO} \longrightarrow \text{HCN} \longrightarrow \text{N}_2$ - mekanismen

I brenselrik forbrenning kan NO reagere med frie radikal av hydrokarbon (CH_i), vidare leie til danning av HCN , og så til N_2 . At NO kan verke som oksidant i ein reaksjon med slike radikal, kan gje grunnlag for reduksjon av NO. Døme på det er ein “reburning”-prosess, der brenselrik forbrenning gjev frie radikal som reagerer med NO. Figur 4.3 syner reaksjonsvegar åt denne mekanismen, der dei tjukke pilene er dei mest domine-



Figur 4.2: Oksidasjon av HCN i ei H₂/O₂/Ar-flamme med tilsett HCN. Figuren er henta frå [18].

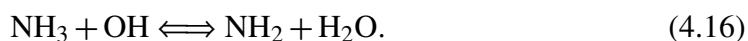


Figur 4.3: Reaksjonsdiagram for NO → HCN → N₂-mekanismen. Figuren er henta frå [18].

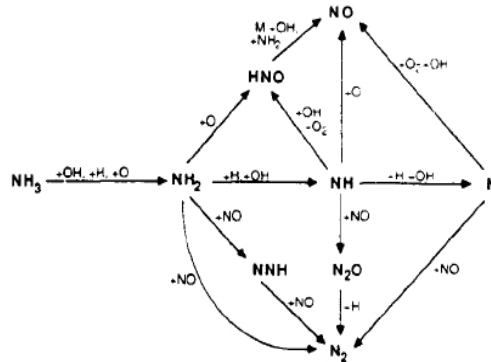
rande reaksjonsvegane.

Oksidasjon av NH₃

NH₃ reagerer anten med radikala O, OH eller H. Figur 4.4 syner reaksjonsvegane. Den viktigaste reaksjonen der ammoniakk vert omdanna til NH₂ er



Ved oksygenrike tilstandar er reaksjon med O-radikal dominerande, medan ved brenselrike tilstandar vil reaksjon med H-radikal vere eit viktig bidrag til danning av NH₂ [18] (s. 305-306).



Figur 4.4: Oksidasjon av NH_3 [18].

Kvart frie radikal, NH_i , kan følgje ein av to mekanismar vidare:

- Oksidasjon som fører til produksjon av NO.
- Reaksjon med NO som fører til danning av molekylært nitrogen, N_2 .

4.1.5 NNH-mekanismen

Denne mekanismen for danning av NO har vist seg å vere gjeldande i flammesoner der ein finn mykje H og O, som ved flammefronten [20] (s. 1097). Oppdaginga av denne er forholdsvis ny, og det gjenstår enno å finne ut meir. Rutene i mekanismen ser ut til å vere først ein reaksjon mellom H-radikal og N_2



I områder med høg konsentrasjon av frie H-atom (brenselrikt) kan denne gje store mengder NNH. I [20] vert det utleidd ein ratekoeffisient med høg verdi for reaksjonen



Om reaksjon (4.18) er gjeldande skulle den gje større produksjonsrate av NO i kalde ($< 2000 \text{ K}$), brenselrike flammer enn berre frå reaksjon



i Zeldovich-mekanismen.

I tillegg til reaksjon (4.18) er det to reaksjonar som er gjeldande ved oksidasjon av NNH [20] (s. 1102):



og

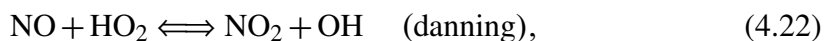


Reaksjon (4.21) syner at denne mekanismen verkar saman med N₂O-mekanismen.

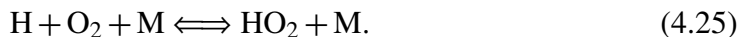
Danning av NO gjennom oksidasjon av NNH har vist seg å dominere ved hydrogenforbrenning, kor det er kort opphaldstid og låge temperaturar [32] (s. 31).

4.1.6 Oksidasjon av NO

I atmosfæra vil NO til slutt oksidere og danne NO₂, som er ein viktig årsak til sur nedbør og fotokjemisk smog. Og mange typar forbrenningsprosessar gjev utslepp av NO_x i form av NO₂. Elementærreaksjonane involvert før utslepp av produkta i atmosfæren er gjevne [34] (s. 171)



der HO₂-radikal vert danna i reaksjonen



HO₂-radikal vert danna i områder med låge temperaturar. Ein får NO₂ når NO diffunderer eller vert transportert inn i regionar med mykje HO₂. Reaksjonane (4.23) og (4.24) har høg aktiveringsenergi og motverkar danning av NO₂ i regionar med høg temperatur.

4.2 Reduksjon av NO_x

Fleire metodar eksisterer for å redusere utslepp. Forbrenning med høg temperatur er ei viktig årsak, og følgeleg ønskjer ein å redusere den. I industrien ser ein difor auke i bruk av forblanda forbrenning for å redusere flammtemperaturen.

Det er vanleg å skilje mellom primær- og sekundærmetodar ved reduksjon av NO_x. Primærmetodar går direkte på forbrenninga, og kva som kan gjerast for å redusere utslepp der. Sekundærmetodar går på å reinse røykgassen.

4.2.1 Primærmetodar

Det er i dag mange primærmetodar for reduksjon av NO_x. Kanskje mest vanleg er senking av temperaturen. Temperaturkontroll er ikkje enkelt, sidan mindre temperatur gjev mindre verknadsgrad. I andre metodar nyttar ein forbrenning med rik brenselblanding og deretter oksygenrik forbrenning. Primærmetodar er noko som sjeldan vert teke i bruk når forbrenningsutstyret er gammalt. Dette kjem av at det er dyrare å modifisere eit eksisterande anlegg framfor å byggje nye brennarar med låge utslepp. I det følgjande vert det snakka om nokre metodar.

Temperaturkontroll

I industriell samanheng er det vanleg å tilsetje ein inert gass til brensel eller oksidant. Noko av energien går då med til å varme opp denne komponenten, og følgeleg vil ikkje flammtemperaturen verte så høg. Ein slik inert gass kan vere vanndamp. Problemet med metoden er at for store mengder inert gass kan gje uforbrent brensel i røykgassen. I tillegg vil dette auke massestraumen åt produktet. Dette gjev eit ekstra tap om ikkje den ekstra energistraumen kan nyttast. Aukande mengde av injisert vatn reduserer NO_x gradvis, heilt til massestraum vatn er omlag like stor som massestraum brensel. Etter dette aukar mengda CO og uforbrent brensel raskt [21].

Ein annan måte er resirkulasjon av røykgass (FGR eller EGR) [34] (s. 563). Då vert røykgass tilsett og blanda med reaktantar i forbrenningssona [23] (s. 68). Meininga er å auke varmekapasiteten åt røykgassen for ein gjeven mengde varme avgjeve. Ein reduserer då flammtemperaturen.

Ofte vert lufta forvarma i forbrenning for å auke verknadsgraden. Ved å redusere mengde forvarma luft kan ein redusere NO_x-utslepp.

Stegvis forbrenning

I forbrenning med brenselrik forebrenning først og deretter oksygenrik, eller omvendt, med oksygenrik blanding først, kan ein redusere NO_x. Med brenselrik blanding først er eit brenseloverskotstal på omlag $\Phi = 1,4$ nytta i forbrenninga. Dette gjev minimum danning av komponentane NO_x + HCN + NH₃ [21]. Etterpå vert uforbrent brensel, som CO og H₂, forbrent i eit oksygenrikt område der NO_x-produksjonen framleis er låg: Nitrogen vert ikkje omdanna til NO på grunn av den låge temperaturen som følgje av auka stråling og konvektiv varmeovergang. Miksinga av uforbrent brensel og oksidant må skje raskt elles vert for store mengder varme fjerna mellom stega [34]. Ein kan redusere NO i eit tredje steg om det er overskot av luft i det andre steget. Den globale reaksjonen for dette vert då $\text{NO} + \text{CH}_i \rightarrow \text{prod.}$ Siste steget vert omtala som *reburn*.

Redusere tilførsel av luft

Danning av termisk NO_x har ein maksimalverdi ved blandingsforhold som ligg litt over på den oksygenrike sida av støkiometrisk blanding. Ei metode går ut på å redusere luft tilført, slik at blandinga nærmar seg støkiometriske høve. Problemet med denne metoden er auken av uforbrent brensel etterkvart som blandinga vert meir brenselrik.

Lav-NO_x brennarar

Lav-NO_x brennarar i industrien nyttar ofte stegvis forbrenning, med brenselfattig-brenselrik eller brenselrik-brenselfattig forbrenning. Andre metodar går på å nytte keramiske avstøypingar der ein aukar strålingsvarmen avgjeve, slik at temperaturen vert redusert [34]. Det er vanleg med forblanda forbrenning i slikt utstyr.

Forblanda forbrenning er særst vanleg i industrien, til dømes i gassturbinar. Fordelen er at NO_x-utsleppa er lågare ved brenselfattig forbrenning. Termisk NO vert redusert på grunn av redusert temperatur. I tillegg er prompt-NO gjeldande berre i brenselrike områder. Forbrenning under slike forhold gjev ein del utfordringar, som stabilitet og støy, og fare for aukande utslepp av CO. Ved brenselfattig forbrenning vert raten av CO omdanna til CO₂ redusert. Problem med stabilitet kjem av trykkfluktuasjonar i forbrenningskammeret.

4.2.2 Sekundærmetodar

Om ikkje modifikasjonar av forbrenninga er tilstrekkeleg, kan ei handsaming av produktet etter forbrenning gje mindre utslepp. Det er to metodar som er vanleg, der ein får NO til å reagere etter forbrenninga.

Selektiv reaksjon utan katalysator (SNCR)

Her vert ein nitrogen-innhaldig komponent tilsett eksosgassen, anten ammoniakk eller urea. Ved denne metoden vert det ikkje nytta ei katalytisk overflate for omdanning av NO til N_2 . Temperatur er her ein kritisk variabel, og må liggje relativt høgt for effektiv reduksjon. Om ammoniakk vert nytta i prosessen, vert metoden omtala som *thermal de- NO_x* . Då reagerer ammoniakk (NH_3) med OH til NH_2 . NO reagerer med NH_2 og det vert danna vatn og N_2 , eller eventuelt N_2H som vidare gjev N_2 [21] (s. 254).

Selektiv katalytisk reaksjon (SCR)

Her vert det nytta ei katalytisk overflate saman med ammoniakk for å redusere NO til N_2 . Temperaturvindauget for effektiv reduksjon kjem an på katalysatoren, men verkar i området frå 480 K til 780 K [34] (s. 582). Fordelen med denne framfor SNCR er at det kan gje større reduksjon av NO, og at temperaturen treng ikkje vere så høg. Bruk av SCR er forbundet med høge kostnader på grunn av investeringskostnader, saman med skifte av katalysator.

5 Numerisk simulering av to turbulente diffusjonsflammer

Denne delen omhandlar modellering av to enkle diffusjonsflammer. Begge to er omhandla i “TNF Workshop” [1], og godt dokumenterte måledata kan lastast ned frå nettsida. For den eine flamma er det nytta CH_4 , H_2 og N_2 i brensllet. Denne vert omtala som CH_4 -flamma gjennom denne delen. Den andre er H_3 -flamma, som vart studert i prosjektoppgåva [12]. Desse to egner seg for samanlikning, sidan same brennaren er nytta for begge. Det er hovudsakleg CH_4 -flamma som er studert, men og H_3 -flamma for å få eit godt grunnlag for samanlikning. I alle simuleringane er det nytta ein k - ε -modell for modellering av turbulens, saman med Magnussen sin EDC-forbrenningsmodell. Det er CFD-koda, SPIDER, som er nytta i simuleringane (sjå kapittel 3). Føremålet har vore å modellere brennaren så rett som mogleg, då med tanke på samanlikning med måledata. For å få informasjon om NO_x i røykgassen, er det gjort fleire simuleringar med detaljert kjemisk kinetikk inkludert i EDC-modellen. Resultatet er samanlikna med målingar, og dette gjev grunnlaget for diskusjonen her.

Diffusjonsflammer som er enkle og godt dokumenterte, eignar seg til å studere samspelet mellom turbulens og kjemisk kinetikk. Geometrien bør vere så enkel som mogleg slik den kan modellerast realistisk. Eit av hovudaspekta ved flammene som er prøvd ut i “TNF Workshop”, er at dei kan nyttast til forbetring og verifisering av modellar for turbulent forbrenning. Rett modellering er viktig, sidan modellen mellom anna skal kunne føreseia mengda NO_x som vert danna i ei verkeleg flamme.

I det følgjande vert først flammene med måledata presenterte. Deretter vert det gjort greie for bruk av grenseverdiar, og det vert presentert fleire data som er samanlikna for ei flamme. Det viste seg at val av grenseverdiar vart meir avgjerande for resultatet med kjemisk kinetikk, enn for uendeleg rask kjemi. Fleire typar grid er prøvd ut, for å finne eit som er så grovt som det kan vere. Ein litt meir inngåande studie i modellering av turbulens vart gjort, der ulike verdiar for modellkonstantane vart prøvd ut. Mellom anna vart konstantane justert som funksjon av avstanden frå utløpet i akseretninga.

5.1 Skildring av brennaren og eksperimentelle data

Brennaren som er nytta for begge flammene er skildra på nettsida åt TNF [1], saman med i det tilhøyrande dokumentet for TNF 3 (første del). Den har eit røyr på 35 cm der brensljet kjem ut i “friluft”. Ei dyse med med brukardefinert storleik omringar jet-røyrret, og tilfører tørr luft til nedre del av flamma. Brennaren kan justerast horisontalt og vertikalt for måling ved ulike posisjonar. I utløpet av jeten er kanten på dysa spissa. Det går ikkje heilt klart fram om denne er spissa frå både luft- og brenselsida. Indre diameter på jeten er 8 mm. Diameter på dysa som omringar jeten er 140 mm.

5.1.1 CH₄/H₂/N₂ diffusjonsflamme

Denne flamma er eit viktig bidrag til dataarkivet, sidan kjemisk kinetikk for metan er kombinert med enkel brenner-geometri. “Bluff-body”-brennarar har ein meir komplisert geometri, og er difor vanskeleg å modellere. CH₄-flamma fungerer som ein logisk kombinasjon av enkle hydrogenflammar og meir kompliserte brennarar, som “bluff-body” eller pilot-flammar, med metan som brensel.

Brensljet er ei blanding av 22,1% CH₄, 33,2% H₂ og 44,7% N₂, på volumbasis. Hydrogen er tilsett for å stabilisere flamma utan å endre den enkle geometrien på brennaren. Tilsetjing av N₂ var naudsynt for å få gode målingar. Dette vil og gjere at mindre varme går vekk i form av stråling, og det vert enklare å modellere. Farta på jeten i utløpet er 42,2 m/s ($\pm 0,5$ m/s). Reynoldstalet er 15200 [1] (TNF 3 - Proceedings). Lufta som strøymar inn rundt jeten har ei fart på 0,3 m/s. Både luft og brensel har temperatur på 292 K. Støkiometrisk blandingsfraksjon er 0,167 og adiabatisk flammetemperatur er 2130 K. Trykk i omgjevnadane er 990 mbar.

Måledata

Det er gjort fleire målingar av denne flamma. Sidan målingar for både fart og skalare storleikar er godt dokumentert, eignar den seg for modellering. Tidlegare har flamma vore testa og målt ved DLR Stuttgart [35]. Der vart det målt skalare storleikar med ulike laser-teknikkar: (1) Punktvis, spontan Raman/Rayleigh-spreiing, målt med enkel puls. Dette er for måling av temperatur og massefraksjon åt dei viktigaste stoffa (CH₄, H₂, O₂, N₂, H₂O, CO₂ og CO). (2) Rayleigh-spreiing i 2D for å bestemme momentan temperaturfordeling. (3) Laser-indusert fluorescens i 2D (PLIF) for måling av OH, CH og NO.

Raman spektroskopi har mange nytteområde, mellom anna for å kjenne att eit molekyl. I prinsippet vert ein laserstråle sendt gjennom flamma, der lyset frå laseren verkar saman med fononer, eller andre delar av systemet som stimulerer laserlyset. Lyskvantar

i laseren endrar energien sin, og vert reflektert av ein spegel og sendt tilbake. Endringa i energien seier noko om kva for molekyl som er møtt på vegen. Lysspreiinga inneheld fleire typar signal som må separerast. Mellom anna inneheld Rayleigh-spreiinga bølgjelengder som gjev informasjon om OH, CH og NO. Ved bruk av PLIF vert det sendt ut lys frå ei kjelde, som typisk er ein laser. Når kjelda treff mediet, som er fluorescens, vil lyset kolorere mediet og det vert sendt ut lysstrålar - mediet fluorescenserer. Signala vert fanga opp, og gjev informasjon om dei ulike eigenskapane ved mediet.

Sidan flamma har vorte sett på som interessant i forhold til samanlikning med CFD-analyser, er det seinare gjort målingar ved Sandia National Laboratories. Her vart det gjort målingar av skalare storleikar, mellom anna massefraksjonar av OH, NO og CO, målt med laser-indusert fluorescens (LIF). Det er målingane frå Sandia som er nytta i denne delen, då dei ligg tilgjengelege på nettsida åt TNF [1]. Resultat med aksielle profil frå $x/d = 2,5$ til $x/d = 120$, saman med radielle profil ved $x/d = 5, 10, 20, 40, 60$ og 80 , er tilgjengelege. Ein anna fordel med denne serien er at det er rekna ut Favre-midla massefraksjonar for alle storleikar. Måleseriane frå DLR og Sandia er samanlikna og drøfta i [36]. Resultata syner at målingane frå begge seriane samsvarer bra, og er innanfor dei estimerte usikkerheitene. Mellom anna er massefraksjon av CO noko for låg ved DLR. Dette kjem av at målingane med LIF ved Sandia er meir nøyaktige enn Raman, som vart nytta tidlegare.

Måling av fart er utført ved universitetet i Darmstadt, med laser-Doppler-anemometri (LDA). Denne metoda nyttar fleire laserstrålar, og lyset vert reflektert frå partiklar og registrert i ein mottaker. Med denne vert både storleik og retning på farta målt. Frå [1] kan det lastast ned radielle profil for dei same aksielle posisjonane som dei skalare storleikane. I tillegg er det gjort målingar for fart nær dysa, ved $x/d = 0$, noko som er ein stor fordel for å fastslå grenseverdier.

Det er noko usikkerheit i målingar, då spesielt for nokre skalare storleikar nær dysa. Systematisk usikkerheit for målingar ved Sandia er størst for Y_{CO} , Y_{NO} og Y_{H_2} , der NO og CO (LIF) ligg på rundt 10-20 prosent. Den romlege oppløysinga nytta ved Sandia er noko grov. Dette gjer at målingar nær dysa, der flammesona er tynn, ikkje vert nøyaktige nok. Verdien på dei målte gradientane, nivået av fluktuasjonar og maksimalverdiane på skalarane, som T, OH og NO, er venta å vere for låge der [36] (s. 329). I denne rapporten er usikkerheit knytt til målingar mykje mindre enn avviket mellom simulerte verdier og målingane. Usikkerheita i målingane er difor føresete å vere innanfor dei rammene som gjer at simulerte verdier kan samanliknast med målingar.

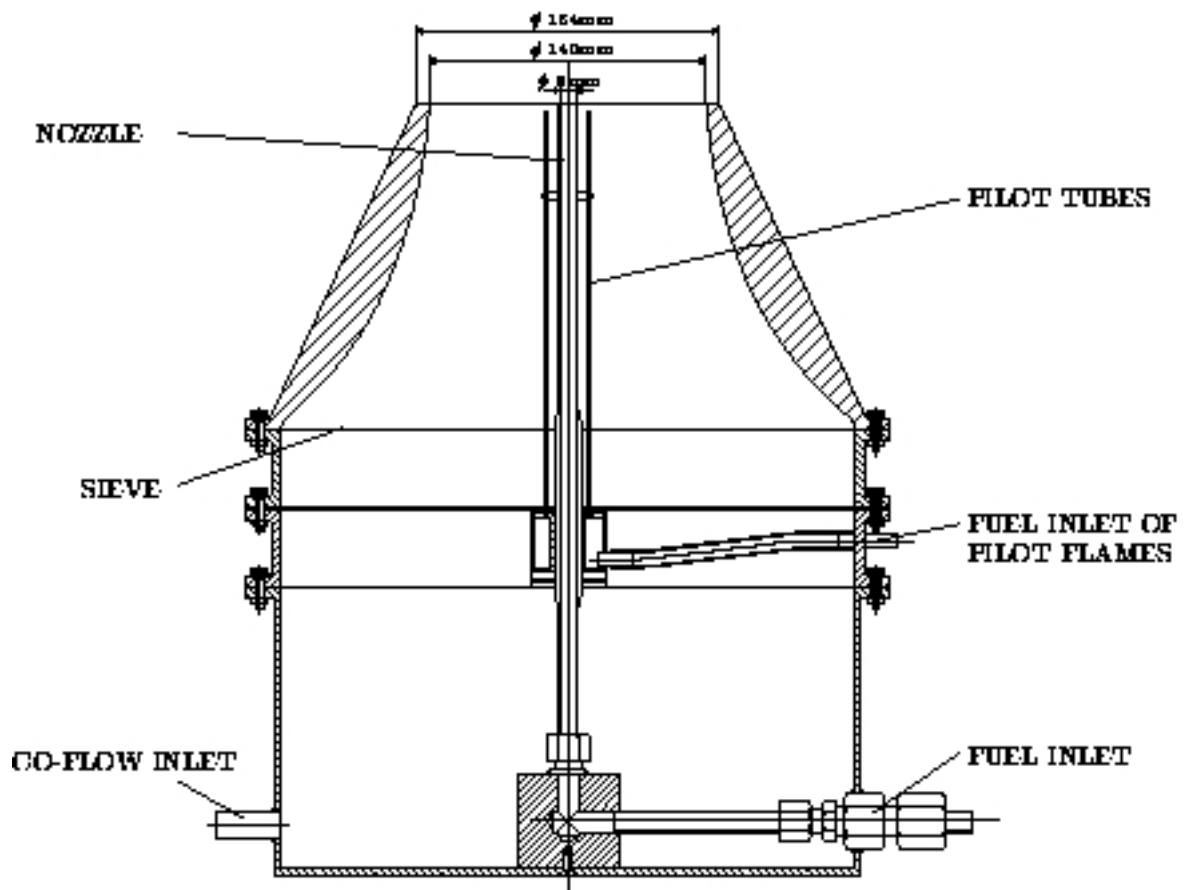
5.1.2 Turbulent hydrogen jet-flamme

Denne flamma stammar og frå TNF, der den vert omtala som “H3”-flamme [1] (TNF2). I prosjektoppgåva [12] vart denne studert med tanke på numerisk nøyaktigheit, og delvis med tanke på turbulensmodellering. Den er og handsama i [32] og [31], med

fokus på ulike reaksjonsmekanismer. I denne oppgåva er den i hovudsak nytta for samanlikning med CH_4 -flamma.

Brenslet er ei blanding av hydrogen og nitrogen i høvet 50/50 på volumbasis. Tilsetjing av nitrogen gjer at meir energi vert “teke vare på” og overført til produktet. Då er verknaden av strålingsvarme vekk frå flamma mindre. Dette er ei enkel flamme som er stabil og godt dokumentert. Geometrien på brennaren er den same som for CH_4 -flamma. Brenslet kjem ut av jeten med ei fart på 34,8 m/s, medan lufta har farta 0,2 m/s. Temperatur og trykk er på 300 K og 1 bar for begge gassane. Alt dette gjer at brenselstraumen har eit reynoldstal på 10000 i utløpet. Eit teikning av brennaren er synt i figur 5.1.

Det er færre måleseriar for H_3 enn CH_4 -flamma. Mellom anna er det ikkje tilgjengeleg målingar for NO og OH nær dysa. Radielle profil for fart, temperatur og nokre stoff, ved $x/d = 5, 20, 40, 60$ og 80, kan lastast ned frå [6].



Figur 5.1: Brennar for målingar [6].

5.2 Modellering med CFD-programmet SPIDER

Om modellen vi nyttar er representativ, avheng av ein del faktorar. I SPIDER kan det gjerast mange justeringar for å få best mogleg resultat. Mellom anna kan det inkludera stråling i modellen, konstantar i k - ε -modellen kan tilpassast og innløpsverdiar kan veljast. Skal alle desse kombinerast og gje eit godt resultat trengs det kunnskap om forbrenningsmodellering, kunnskap om programmet og mykje anna. Det er til dømes ikkje mykje vits i å justere konstantar i k - ε -modellen, til å nesten ikkje avvike frå målingar, om gridet ein nyttar er for grovt. Då kan resultatet verte dårlegare med eit finare grid med dei same konstantane. Ved simulering med detaljert kjemi er tilpassing av grid vanskelegare, sidan det bør vere fint nok til å få med flammesona, men heller ikkje for fint på grunn av reknetid. Dette viste seg å vere problematisk for CH_4 -flamma, sidan gridet måtte vere særst fint nær dysa. For å få vite noko om mengda NO_x som vert produsert, må området ein ser på vere stort nok til å fange opp alt. I kapittel 4 vart det snakka om danning av NO_x , og hovudsakleg vert det danna der kor temperaturen er høg nok. Eit område bør altså romme heile flamma og endå litt til.

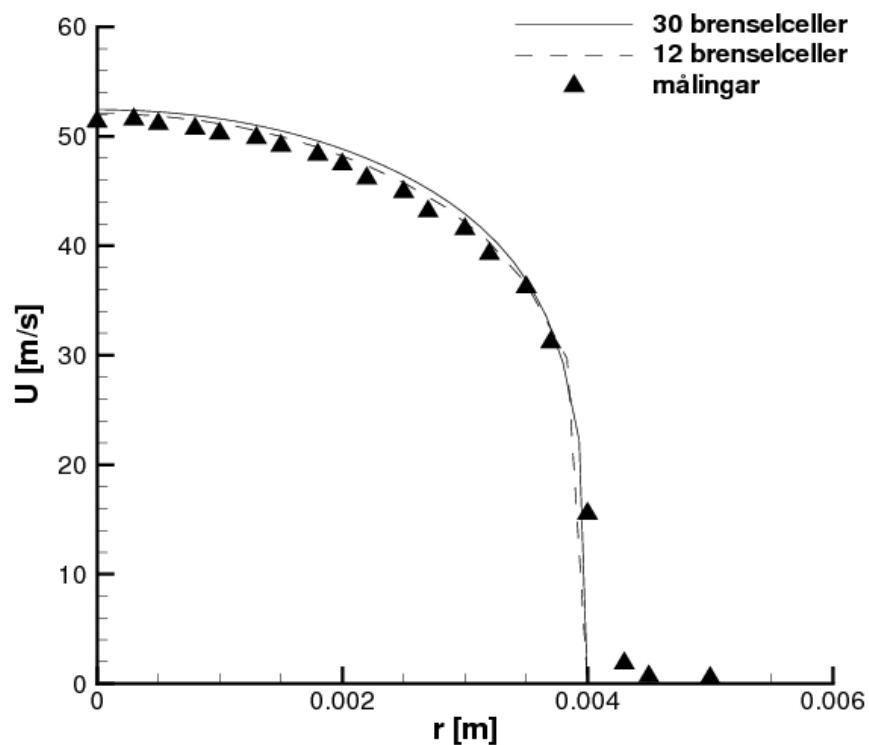
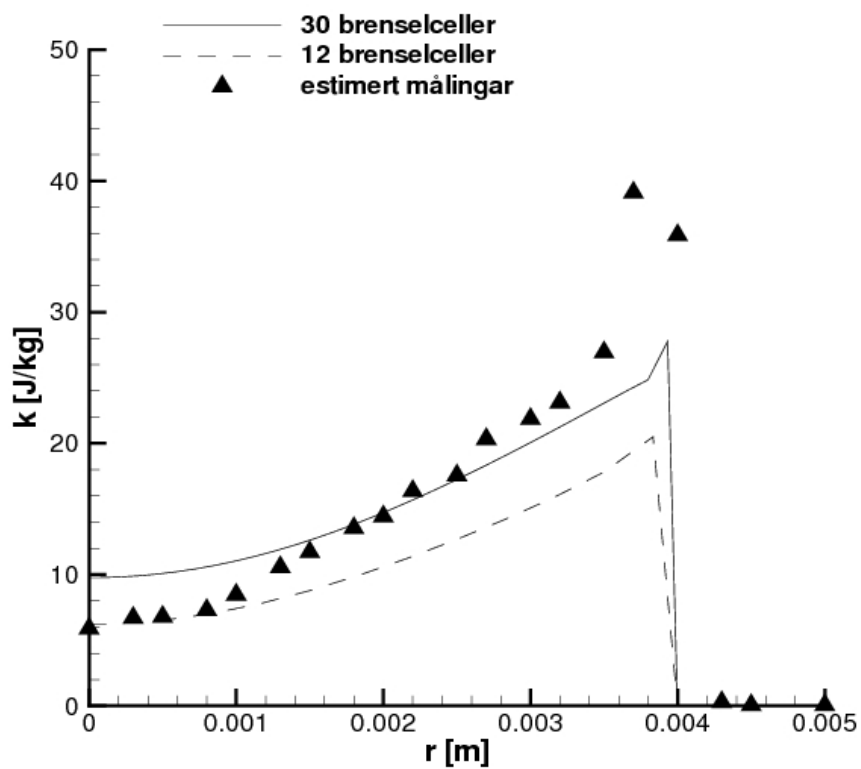
I modelleringa vert, med nokre unntak, grensecellene åt brensllet plassert saman med luftcellene utan ein kant. Det vart testa med nokre overgangsceller for å sjå på verknaden av dette med detaljert kjemi.

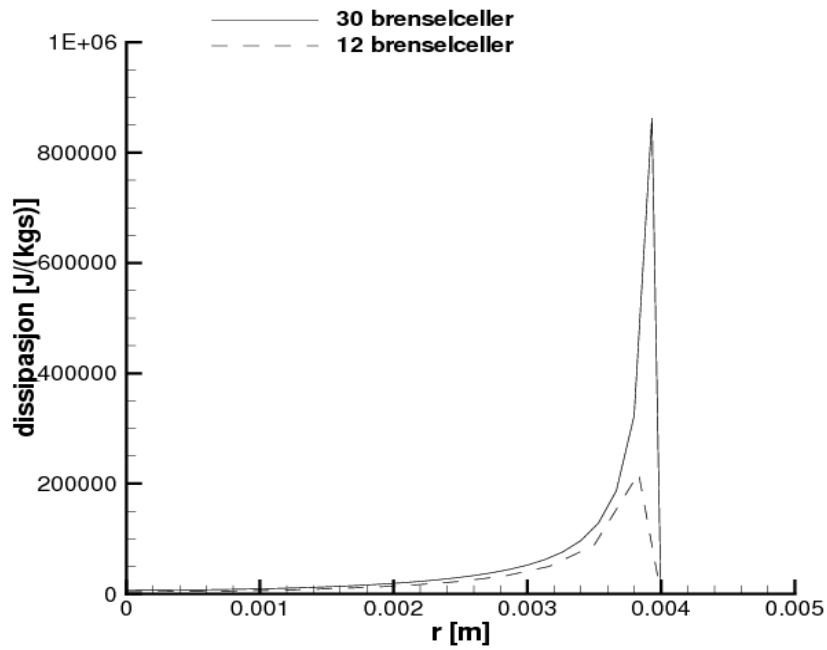
5.2.1 Grenseverdiar

Frå data-arkivet [1] finst det målingar radielt ved $x/d = 0$ for fart, U , Favre-midla fartsfluktuasjon, $(\widetilde{u''^2})^{1/2}$, fart i r-retning, V , og Favre-midla spenningar, $\widetilde{u''v''}$. Dette er nyttig då dei gjev grenseverdiane til simuleringane. For å studere verknaden av grenseverdiar meir inngåande, var det ønskeleg å sjå på strøyminga i eit jetrøyr, nett som i prosjektet [12]. For å gjere reknetida mindre vart det implementert ei rutine som tek verdiane frå enden av røyrret, $x = x_{max}$, og set dei inn i starten av området. Denne prosessen vert repetert til ein får ut verdiar for ønska lengd. Til dømes om røret som skal simulerast er 2 meter, og området går frå $x = 0$ til $x = 0,01$ m, må syklusen repeterast 200 gongar. For kvar nye globale iterasjon, så vert iterasjonar i SIMPLE-algoritmen færre. Reknetida vert mykje mindre samanlikna med det som vart gjort i [12]. Det eksisterer allereie sykliske grenser i SPIDER, som fungerer omtrent på same måte. Årsaka til at dette ikkje vart nytta, var at det ikkje var skikkeleg implementert i programmet. Om utløpet av jeten i brennaren skulle ha 15 grenseceller, vart det laga eit "røyr" med 15 celler i r-retning med lengd som tilsvarer radius, her 0,004 m. Lengda vart bestemt av talet på celler som var naudsynt. Som oftast var $x = 0,01$ m høveleg lengd på området. Verdiane i utløpet vart deretter samanlikna med målingar ved $x/d = 0$ (for CH_4 -flamma), og dei vart avlesne ved den posisjonen som tilsvarte radius, r , i nodepunktet. Verdiane som vart avlesne vart skrevne inn i programmet, der

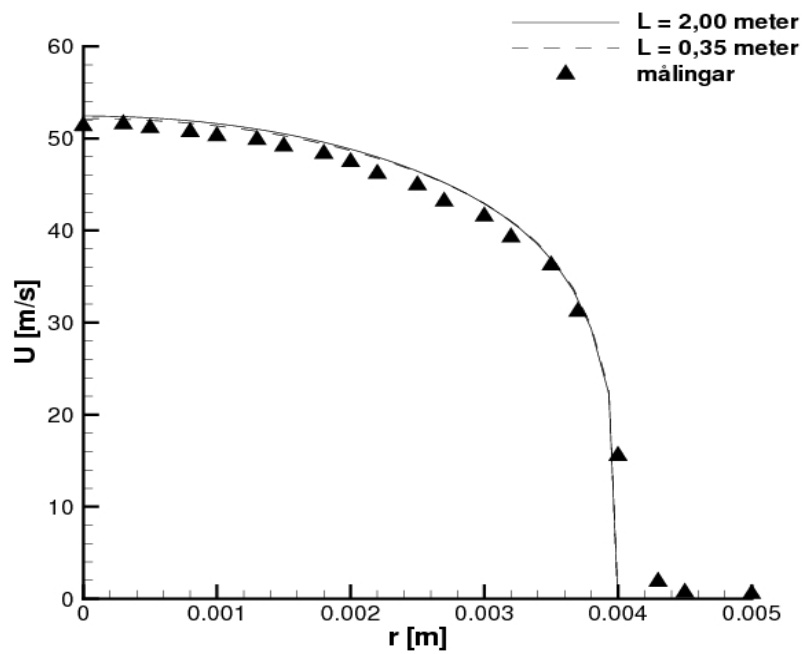
ulike grenseceller for brensløst fekk sine verdiar.

Sidan målingar ikkje seier noko om turbulensenergien, k , eller dissipasjon av turbulensenergi, ε , må desse finnast på annan måte. Eit høveleg estimat for turbulensenergien er $k \approx \widetilde{u'^2}$ [7] (s. 144). Dette vart mest nytta som ein indikasjon på om verdiane frå simuleringar var rette. Flamma vart simulert med verdiar frå enden av røret, verdiar av k frå estimat, saman med verdiar frå simulering med fleire celler. Maksimalt tal på celler som vart testa i r-retning var 30 grenseceller. Figur 5.2 og 5.3 syner resultat for to ulike grid. For dissipasjonen er ikkje målingar synt, og for turbulensenergien er det synt eit overslag utifrå fluktuasjonen. Simuleringane er gjort med standard k - ε -modell. I figur 5.4 vert to lengder samanlikna, der $L = 0,35$ m er lengda på jeten vi ser på. Figuren syner at strøyminga er tilnærma fullt utvikla ved denne lengda, nett som den skulle vere.

(a) Fart i x-retning, U .(b) Turbulensenergi, k .**Figur 5.2:** Simulering av 2 meter langt røyr. Fart og turbulensenergi.



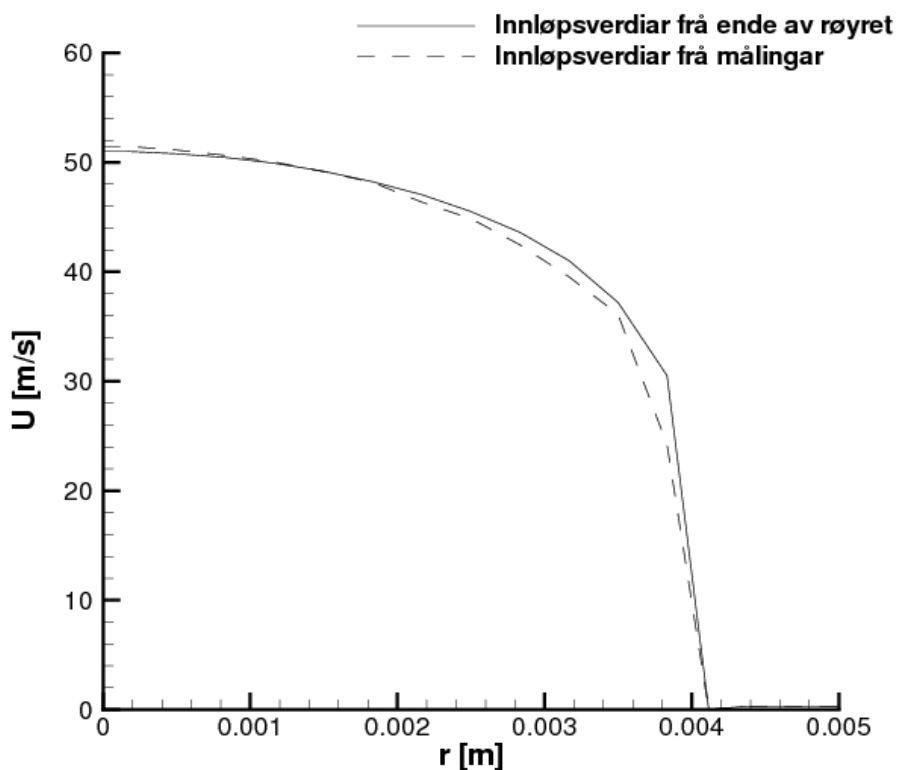
Figur 5.3: Simulering av 2 meter langt røyr. Dissipasjon av turbulensenergi, ε .



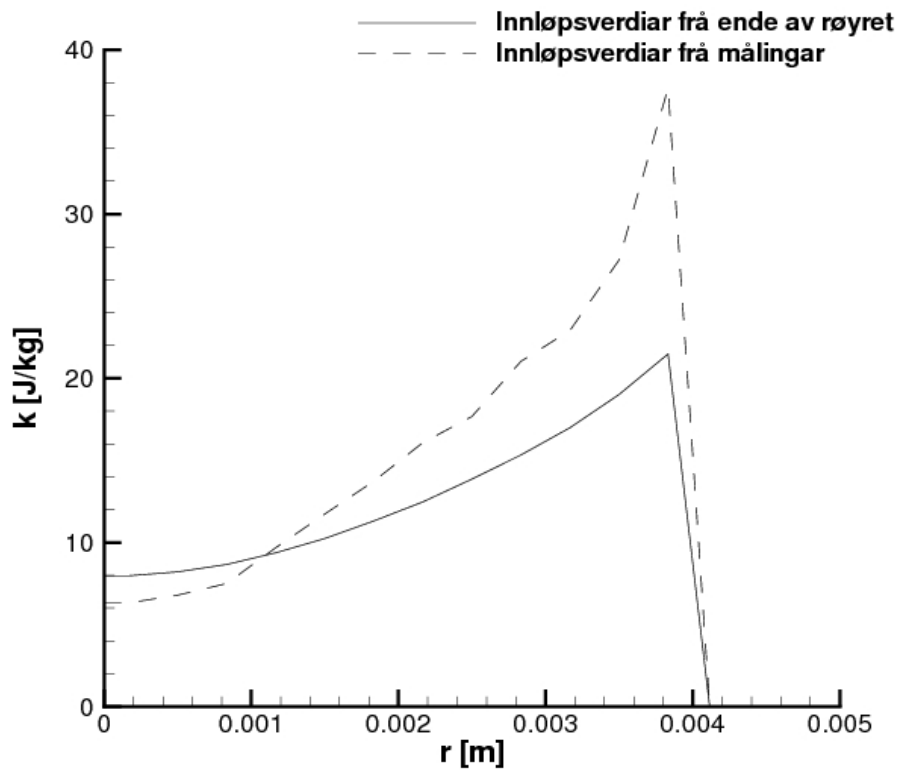
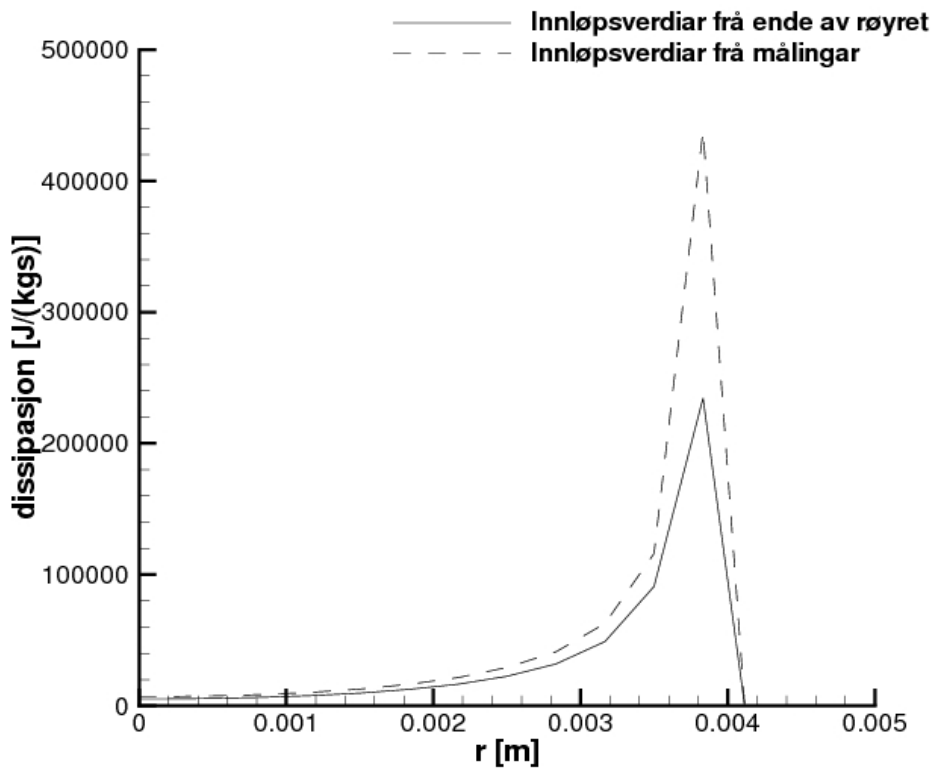
Figur 5.4: Samanlikning røryr lengder. Fart i x-retning, U .

Resultata frå simuleringar av eit “rør” syner at farta stemmer bra med målingar. Dissipasjonen får høgare verdi til fleire celler vi nyttar i radiell retning. Dette er som venta, då dissipasjonen når sin maksimalverdi heilt inntil veggen. For turbulensenergien vert ikkje avviket så stort mellom dei ulike grida. Turbulensenergien når sin maksimalverdi lengre frå veggen enn ε [7] (s. 70-76). Avviket mellom simulert k og estimert k frå målingane er stort. Det er mogleg at estimatet er unøyaktig.

Det er testa innløpsverdiar både frå enden av røret og måleverdiar. For måleverdiar vil det seie med den estimerte verdien for k utifrå $\widetilde{u'^2}$, og ein noko høgare dissipasjon. Verdiane skal i prinsippet gje eit meir realistisk resultat. Figur 5.5 og 5.6 syner nokre verdiar som vart nytta som innløp i brennaren. Hovudsakleg har verdiane frå målingane vorte nytta, det vil seie, målte verdiar for U og estimert k . Dissipasjonen av k vart nytta som den med stipla linje i figur 5.6b. Seinare i denne delen vert det sett nærare på kva ulike innløpsverdiar har å seie for resultata ved simulering der kjemisk kinetikk er inkludert.



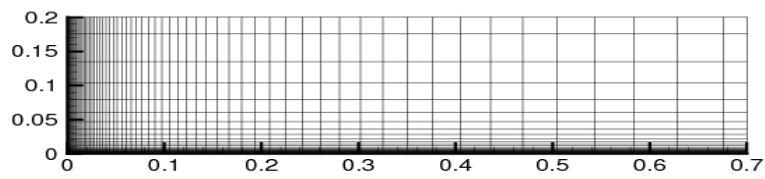
Figur 5.5: Ulike innløpsverdiar. Fart i x-retning, U .

(a) Turbulensenergi, k .(b) Dissipasjon av turbulensenergi, ϵ .**Figur 5.6:** Ulike innløpsverdier testa med rask kjemi.

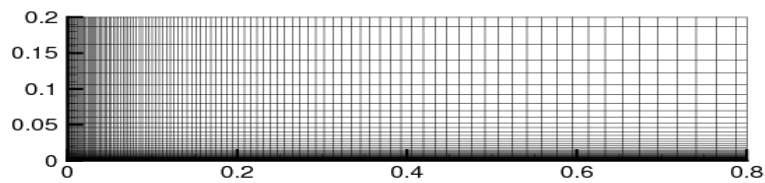
5.2.2 Test av grid

Denne delen omhandlar test av nokre grid med fokus på mengd celler. Ved simulering med detaljert kjemi er det ønskeleg med så grovt grid så mogleg, sidan reknetida er mykje lengre enn med uendeleg rask kjemi. I heile oppgåva har det vorte testa mange grid, med ulik mengde celler, ulik strekking og meir. I denne delen er alle simuleringane gjort med rask kjemi, og det har mellom anna vore meininga å finne eit grid som ikkje er for fint. Dette kan vere i tilfeller der det er ønska å sjå på verknaden av ein modifisert k - ε -modell, eller samanlikning av ulike grenseverdiane. Ulike versjonar av k - ε -modellen vert testa seinare i rapporten, men her er konstantane $C_\mu = 0,009$, $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ nytta. Grenseverdiane er omlag dei same som i avsnitt 5.2.1.

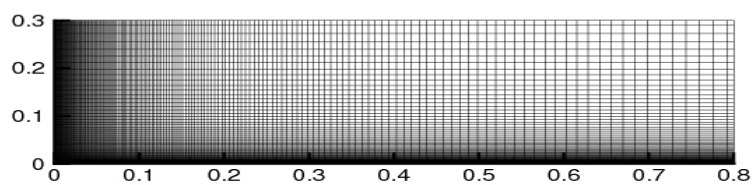
Dei tre grida som er samanlikna med måledata er synt i figur 5.7. I radiell retning (r) er det 0,2 m for dei to grovaste grida, og det er 0,8 m i akseretninga (x) for dei to finaste. Det er nytta 10 grenseceller som utløp åt jeten for det grovast gridet, og 15 celler for dei i figur 5.7b og c. Talet på grenseceller ved utløpet av dysa vil vere bestemt av kor mykje ein kan strekkje gridet i radiell retning, det vil seie, det kjem an på tal på celler totalt i r-retninga. Gridet i figur 5.7c er særst fint, og det vil ta for lang tid å bruke ved simulering med detaljert kjemi. Gridet i figur 5.7a er så grovt at det eignar seg best til å sjekke verknad av diverse justeringar i programmet. Tecplot 360, som er nytta for plotting av figurar, gjev gridlinjer som går gjennom nodepunkta og ikkje langs veggen på celle. Dette må ein vere klar over ved studie av figurane.



(a) 65x30.



(b) 110x50.



(c) 200x90.

Figur 5.7: Test av grid - tal på celler.

Resultat

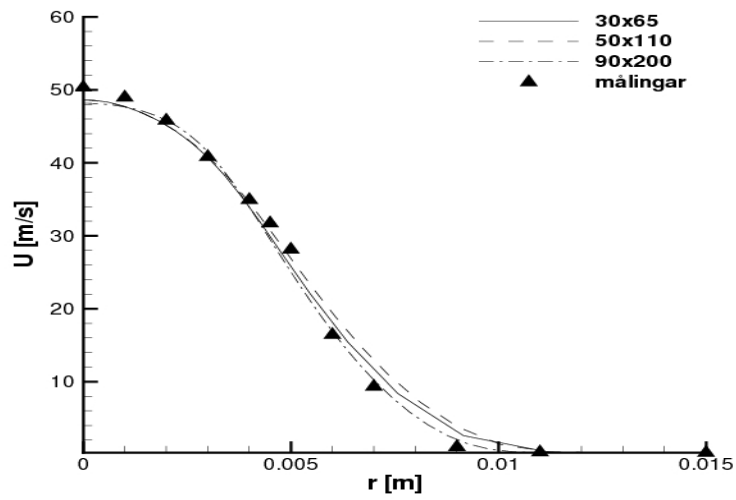
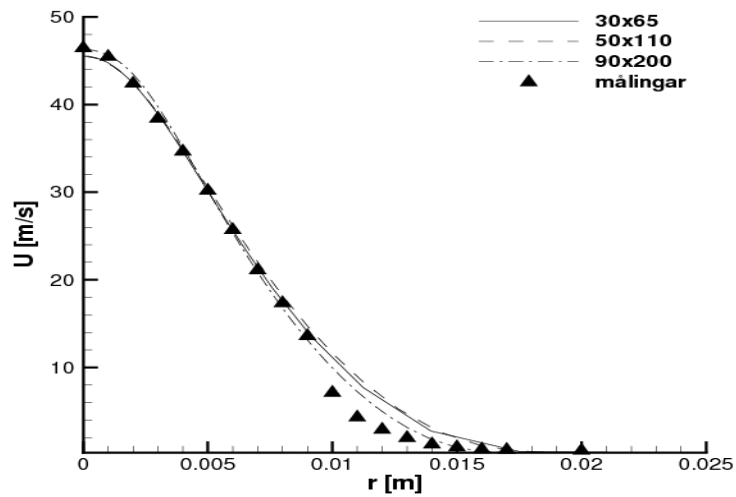
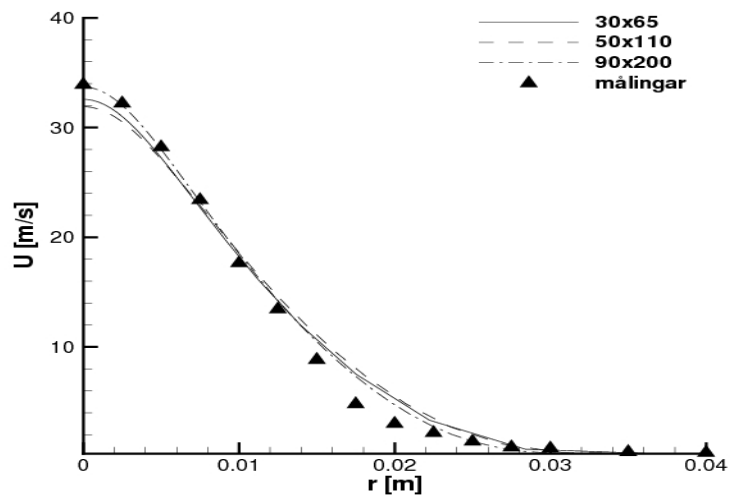
For dei ulike grida er U , k og T samanlikna. Resultatet for farta er synt i figur 5.8 og 5.9. Det er samanlikna verdiar ved posisjonane $x/d = 5, 10, 20, 40, 60$ og 80 . Det er noko skilnad i spreinga hjå dei tre grida. Avviket mellom dei er størst nær utløpet åt jeten. Frå $x/d = 40$ og utover er det noko avvik nær $r = 0$, medan spreinga er omtrent lik for dei tre. Det finaste gridet ligg stort sett nærare måleverdiane enn dei to andre. Ved $x/d = 10$ og 20 er det eit tydeleg avvik mellom alle grida og målingar for $r > 0,01$ m. Ved $x/d = 40$ er det grovaste gridet nærare måleverdiar i senteret. Ved dei tre siste aksielle posisjonane (figur 5.9a, b og c) er avviket mellom det grovaste (figur 5.7a) og dei to finaste (figur 5.7a og b) større nær $r = 0$.

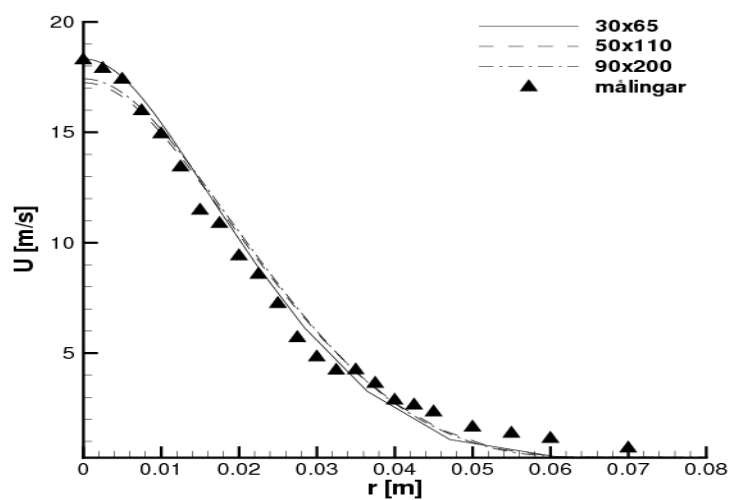
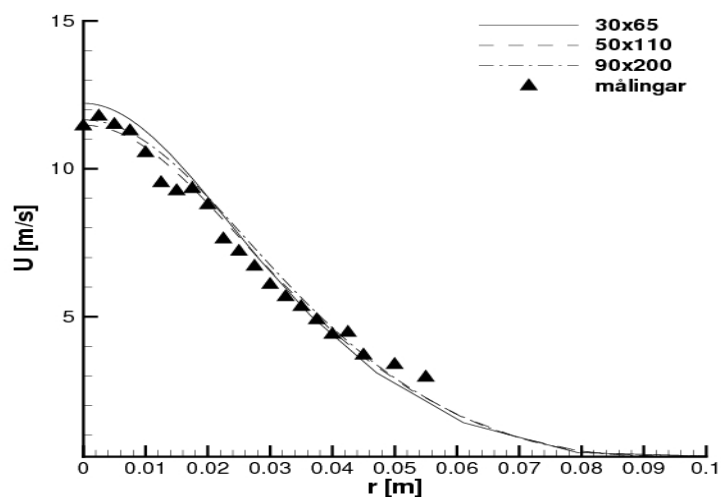
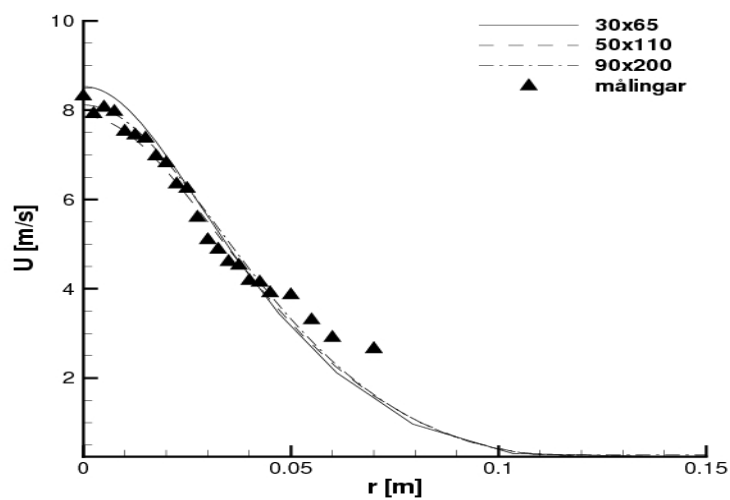
Figur 5.10 og 5.11 syner samanlikning av turbulensenergi for dei ulike grida. For målingane ved $x/d = 40, 60$ og 80 er det stor spreing i verdiane, og det er litt vanskeleg å samanlikne. Nær utløpet, ved $x/d = 5$ og 10 , er det størst skilnad mellom det finaste og dei to grovaste nær $r = 0$. Ved dei same aksielle posisjonane vert verdiane spreidde frå omlag $r = 0,005$ m og utover. Ved $x/d = 10$ er avviket frå målingar meir utprega nær $r = 0$ og for $r > 0,009$ m. Ved $x/d = 20$ er avviket mellom dei tre størst der k når sin maksimalverdi. Spesielt ligg verdiane åt det finaste gridet ein del høgare enn dei to andre. Avviket mellom måleverdiar og simuleringar er framleis større lenger ute i radiell retning ($r > 0,015$ m). Ved $x/d = 40, 60$ og 80 er skilnaden mellom grida mindre over heile r . Unntaket er ved $x/d = 80$, der det finaste gridet er noko høgare enn dei to andre nær $r = 0$. Avviket frå målingane er ikkje store for nokon av grida, men det er litt vanskeleg å tyde måleverdiane, spesielt nær $r = 0$.

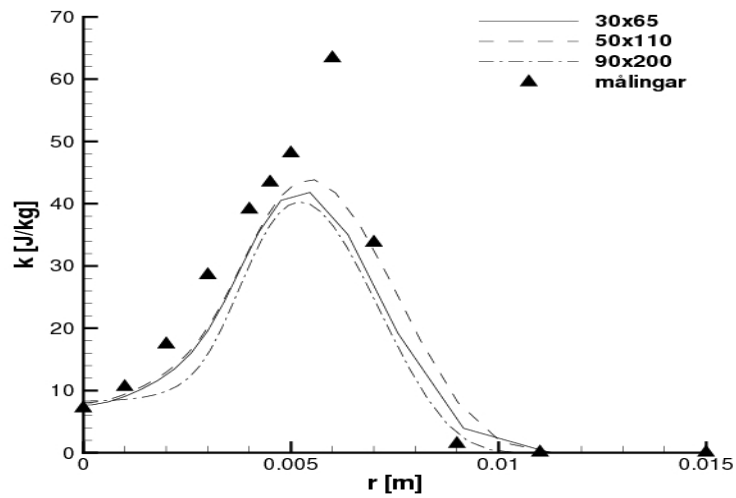
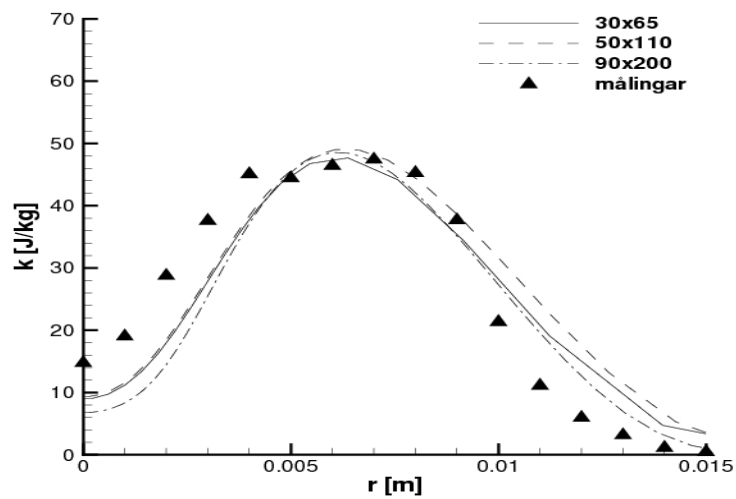
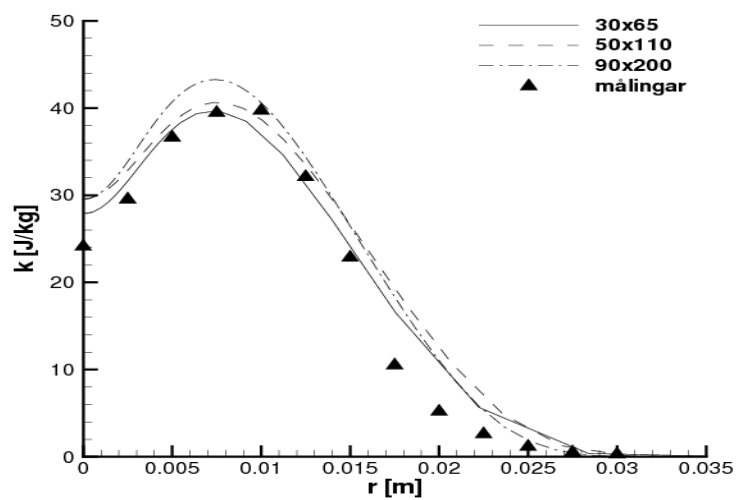
For temperaturen (figur 5.12 og 5.13) er skilnaden mellom dei tre grida størst nærast utløpet av jeten. Unntaket er ved $x/d = 80$, der det er noko skilnad nær $r = 0$. Avvik mellom måleverdiar og alle grida er store lenger frå dysa. Ved $x/d = 20$ er skilnaden mellom dei tre større for $r > 0,029$ m. Nærare dysa skil det finaste (200x90) seg ein god del frå dei to andre, då spesielt etter at temperaturen har nådd sin maksimalverdi. Her ligg det finaste gridet litt nærare måleverdiane, men framleis er avviket tydeleg.

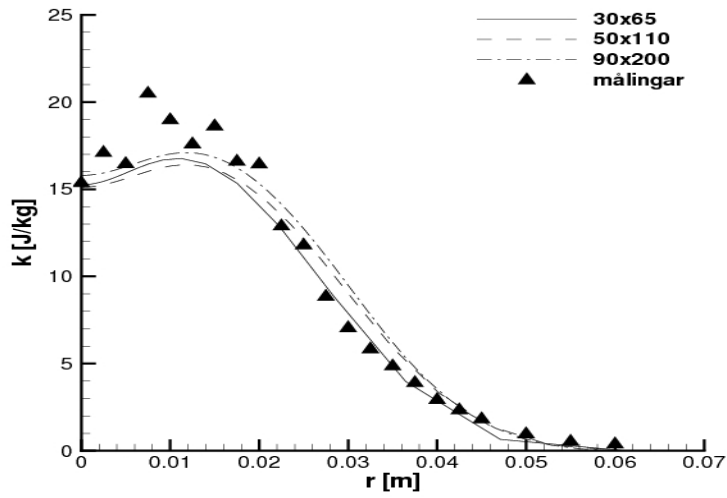
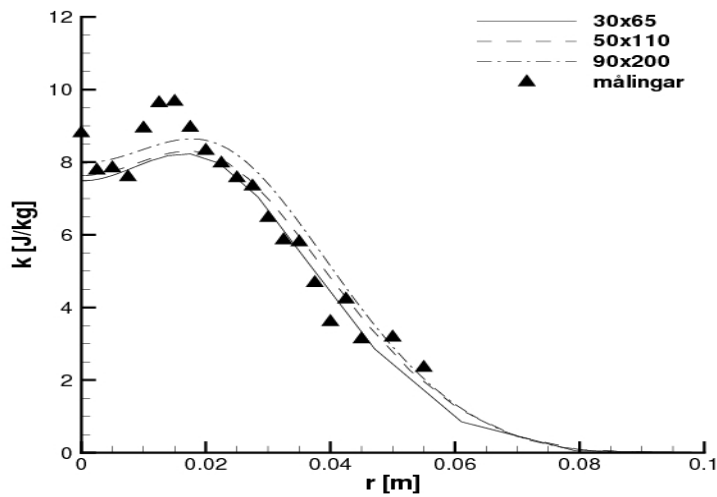
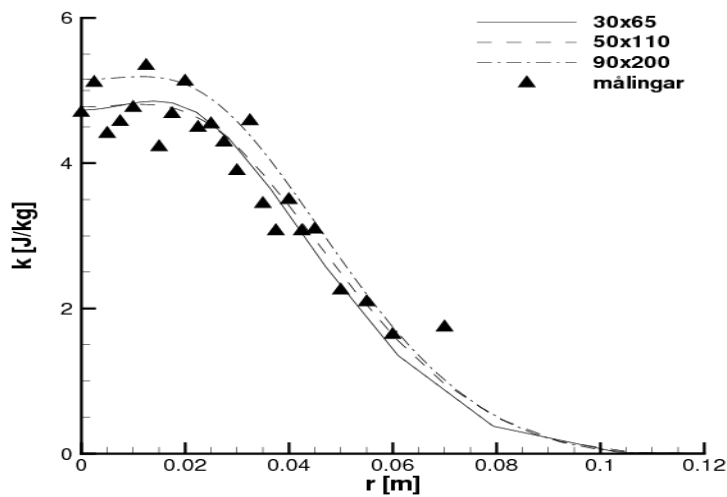
Drøfting

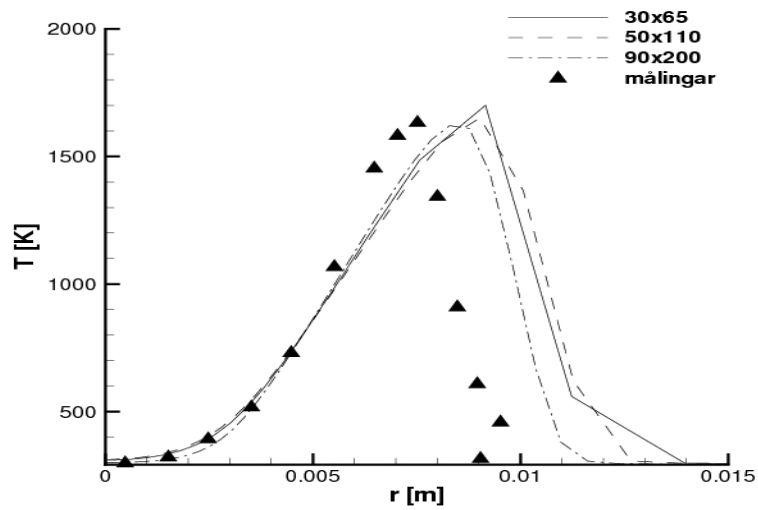
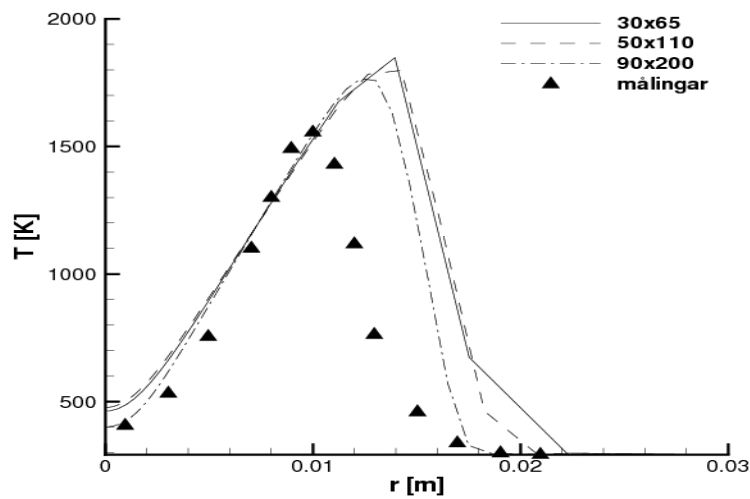
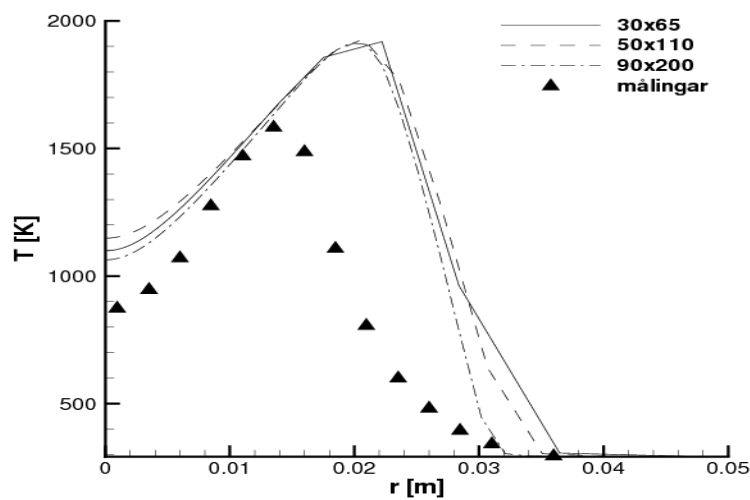
Ved $r = 0$, nær utløpet av dysa, vert farta kraftig oppbremsa, og den negative gradienten er difor stor. Figur 5.8a og b syner at det er liten skilnad mellom grida nær dysa. Ved $x/d = 5$ og 10 er det tett nok med celler, sjølv for det grovaste gridet, sidan gridlinjene er strekt mot $x = 0$. At denne skilnaden vert større og større fram til $x/d = 40$, tyder på at det vert lengre mellom gridlinjene, spesielt for det grovaste. Ved denne posisjonen er absoluttverdien av gradienten endå stor, men gridet vert fortare for grovt for 65x30.

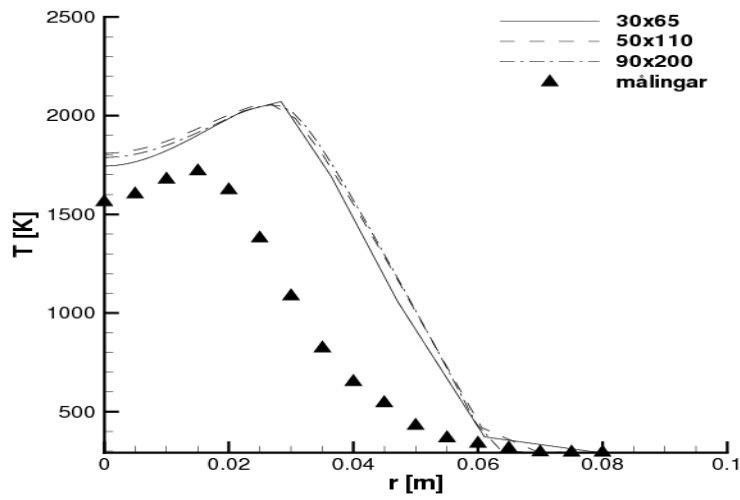
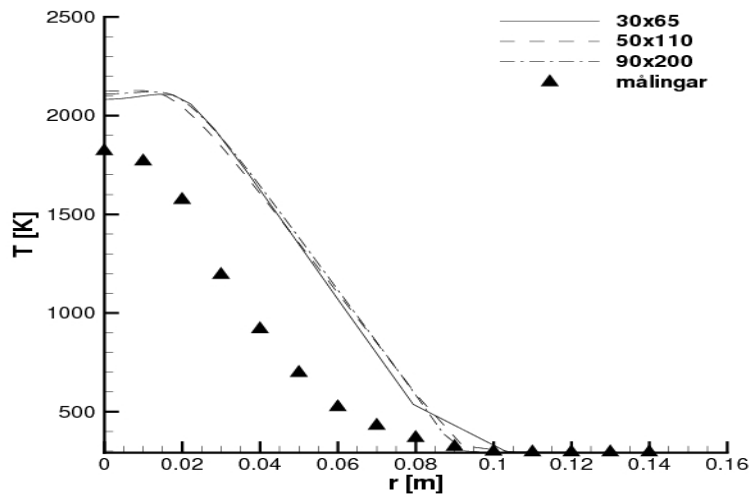
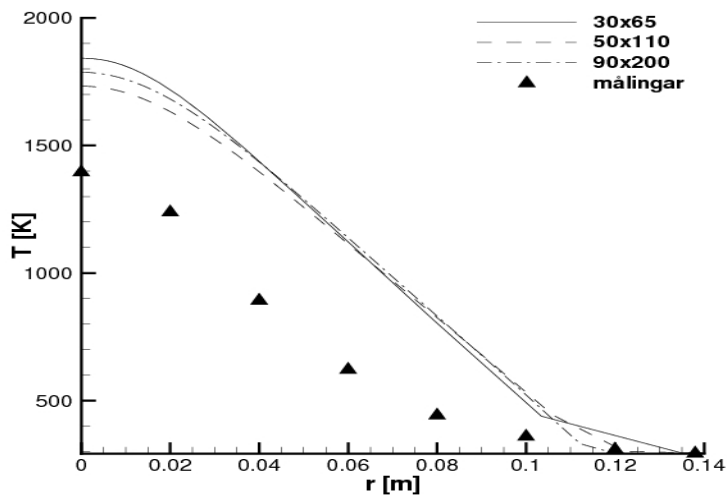
(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.(c) $x/d = 20$.**Figur 5.8:** Test av grid. Fart i x-retning.

(a) $x/d = 40$.(b) $x/d = 60$.(c) $x/d = 80$.**Figur 5.9:** Test av grid. Fart i x-retning.

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.(c) $x/d = 20$.**Figur 5.10:** Test av grid. Turbulensenergi.

(a) $x/d = 40$.(b) $x/d = 60$.(c) $x/d = 80$.**Figur 5.11:** Test av grid. Turbulensenergi.

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.(c) $x/d = 20$.**Figur 5.12:** Test av grid. Temperatur.

(a) $x/d = 40$.(b) $x/d = 60$.(c) $x/d = 80$.**Figur 5.13:** Test av grid. Temperatur.

Ved $x/d = 5$ kan vi sjå av figur 5.10a at det er stor skilnad mellom grida for omlag $r > 0,004$ m. I blandingssjiktet mellom lufta og brenslaget vert det generert mykje turbulens. Toppen vert nådd ved omlag $r = 0,005$ m nær dysa. Avviket mellom grida her viser att på farta (figur 5.8a), som nett kan kome av avviket i k . Det er verdt å merke seg at det grovaste og det finaste gridet ligg nærast kvarandre, medan 110x50 ligg lengst unna dei. Dette kan kome av dei er strekt ulikt, og at gridet, 65x30, er finare akkurat her. Avviket frå målingar er noko større for k enn U . Dette kan kome av at estimatet av k , frå måleverdien, er noko unøyaktig. Samstundes ser vi og at skilnaden mellom grida er generelt større for k enn U . Det er vanskeleg å tyde kva for grid som gjev best samsvar med målingar for k .

For $x/d > 40$ er skilnadane i rørslemengda, som var store nær utløpet av dysa, tilnærma utjamna. Avvika som er mellom grida lenger ute, syner skilnaden i grovheita: Det finaste har dei høgaste verdiane, medan det grovaste har dei minste. 110x50 ligg midt imellom dei. Avviket frå målingar som ein finn ved $x/d = 10$ og 20, for $r > 0,009$ m, kan vere eit resultat av for dårleg modellering av turbulensen.

Heilt inne ved dysa når temperaturen sin toppverdi nær $r = 0,005$ m, ikkje langt frå radiusen åt dysa. Kurva åt temperaturen er bratt på begge sider av maksimalverdien. For alle grida er det like tett med grid fram til $r = 0,004$ m. Etter dette vert det lenger og lenger mellom linjene. Avstanden mellom dei veks raskare for det grove gridet, sidan det er mest strekt. Avviket mellom grida vert mindre utover i akseretninga, sidan gradienten vert mindre her, og ved $x/d = 40$ er det liten skilnad mellom grida. Generelt er skilnaden særstor mellom målt og simulert temperatur. Sidan skilnaden er så mykje større enn skilnaden på grida seg imellom, må avvika skuldast noko anna enn oppløysing.

Det finaste gridet gjev betre samsvar med målingar nokre stader. Det er for usikkert å fastslå at skilnaden mellom dei berre kjem av talet på celler. Det grovaste gridet kunne nok og ha vore tilpassa betre, utan å gje det fleire celler. For k og T vil det spele ei stor rolle kva for eit av grida vi vel. Skilnaden mellom 200x90 og måleverdiar for T er likevel så stor at heller ikkje dette gridet gjev eit godt resultat. Vidare i oppgåva er det finaste gridet nytta, til dømes, ved tilpassing av turbulensmodellen. Det grovaste vart mest nytta for å sjå på verknaden av diverse justeringar. Alt i alt er ikkje skilnaden så stor mellom grida, og det grovaste gjev gode resultat med tanke på kor grovt det er. Konvergens med uendeleg rask kjemi tek ein halv time på tungreknemaskina Stallo med det grove gridet. Det finaste tek eit par døgn.

5.2.3 Konstanter i k - ε -modellen

Bruk av k - ε -modellen, med $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, vert omtala som ein “standard modell”. Det har vist seg at denne modellen ikkje er like god i alle tilfeller, som til dømes for ein rund jet. Det er kjent at modellen med konstantane over gjev for mykje spreining av rørslemengd, og dette er og tilfellet her. Samanlikning av H₃-flamma og CH₄-flamma syner at modellen ikkje gjev like gode resultat for begge. Forbrenningsmodellen som vert nytta her byggjer på føresetnaden om at turbulensen blandar saman reaktantar, og at varmt produkt vert blanda saman med reaktantar, slik at dei kan få nok energi til å reagere. Rett modellering av turbulensen er difor viktig.

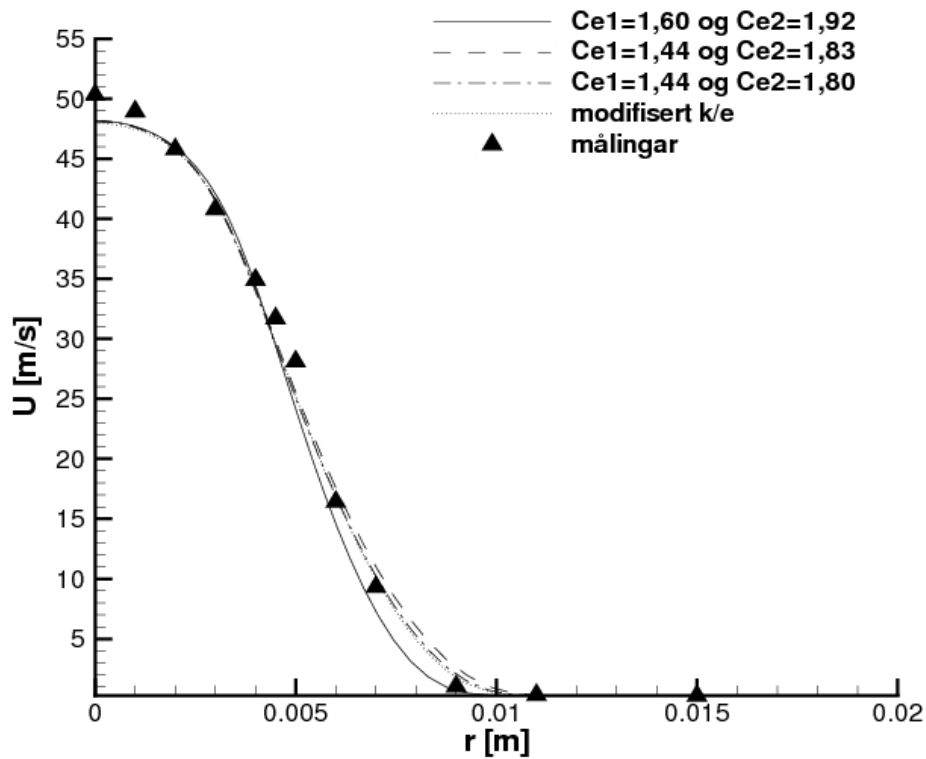
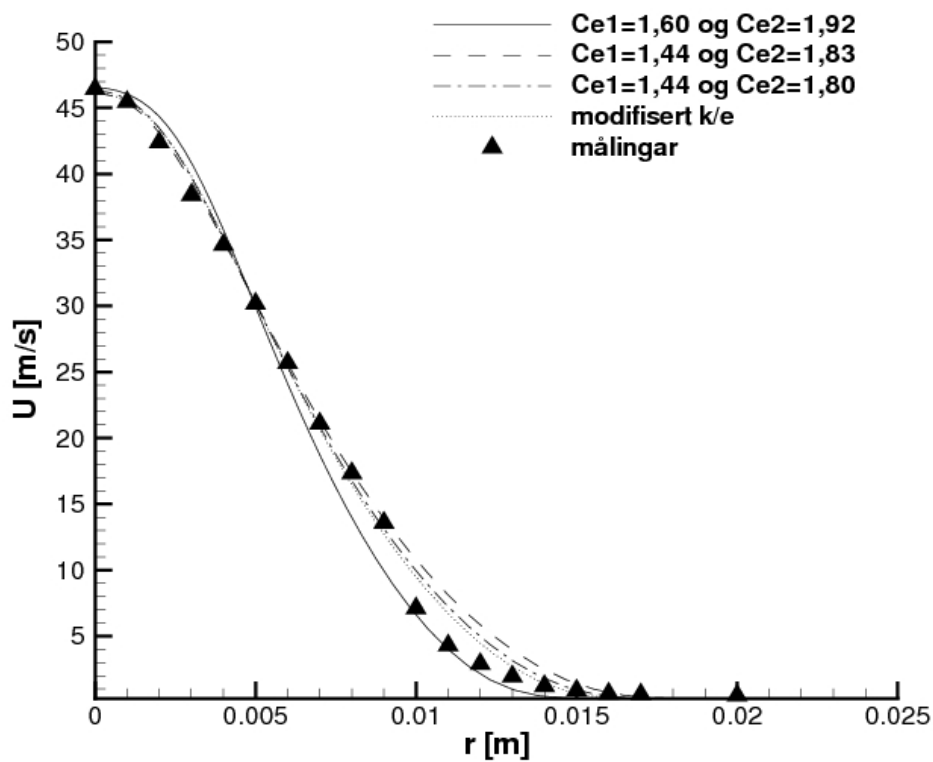
I denne delen er det testa ulike verdiar for konstantane i k - ε -modellen. Verdiar frå simuleringane er samanlikna med måledata, noko som vert gjort for begge flammene. Føremålet med denne delen har ikkje vore å finne ein generell modell, men heller syne at modellen må tilpassast det einskilte tilfellet. For meir om kvifor spreinga vert overestimert med standard k - ε -modell sjå avsnitt 2.5.5.

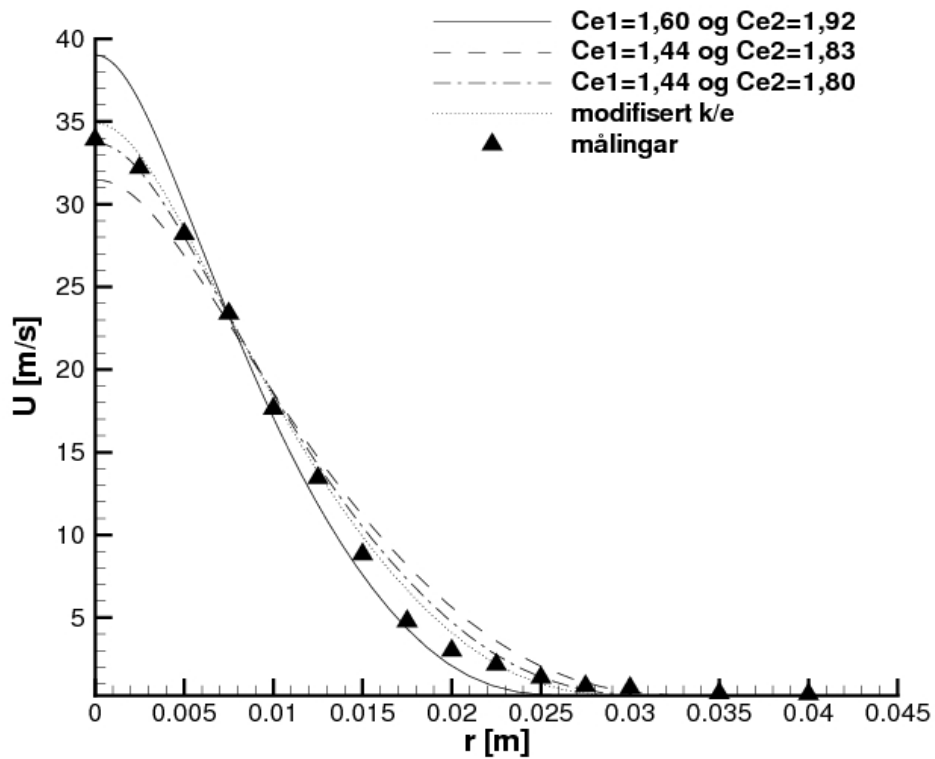
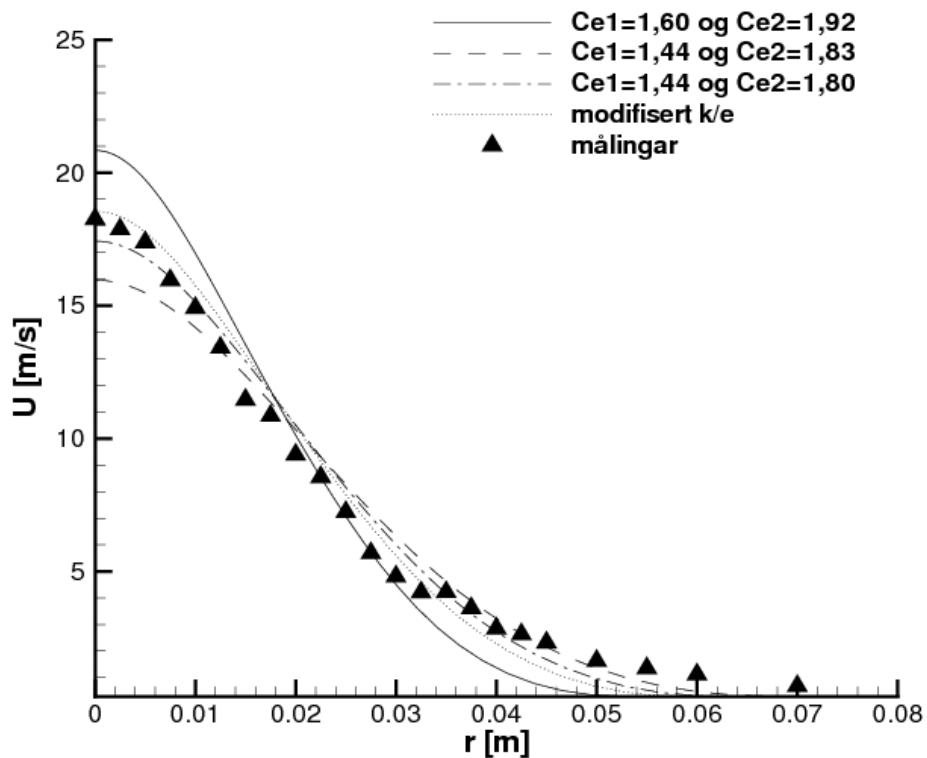
Resultat - CH₄-flamma

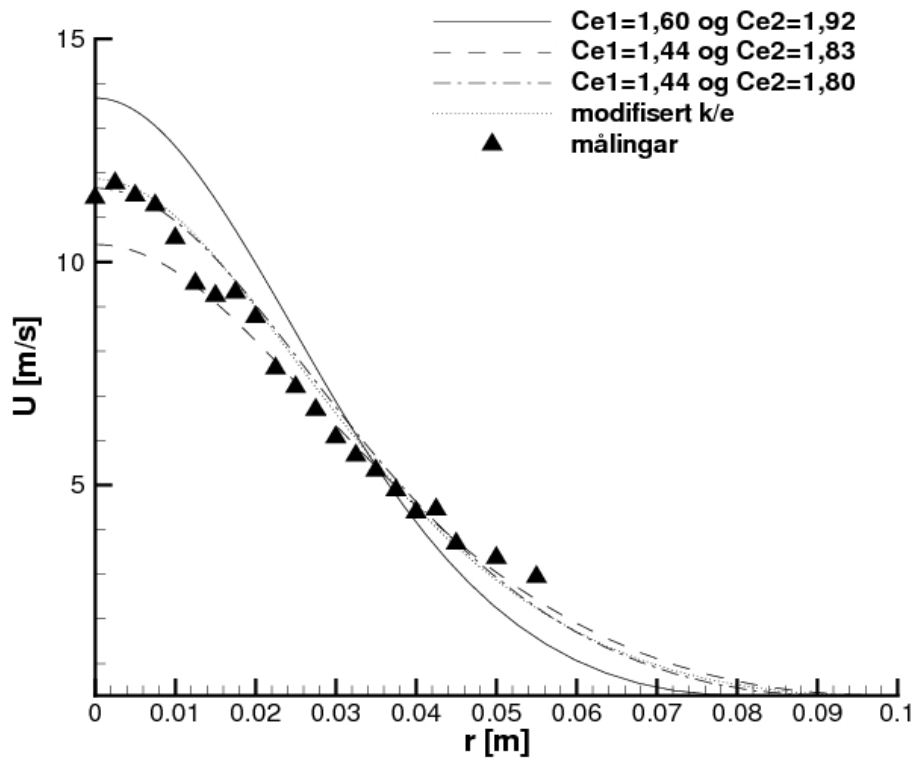
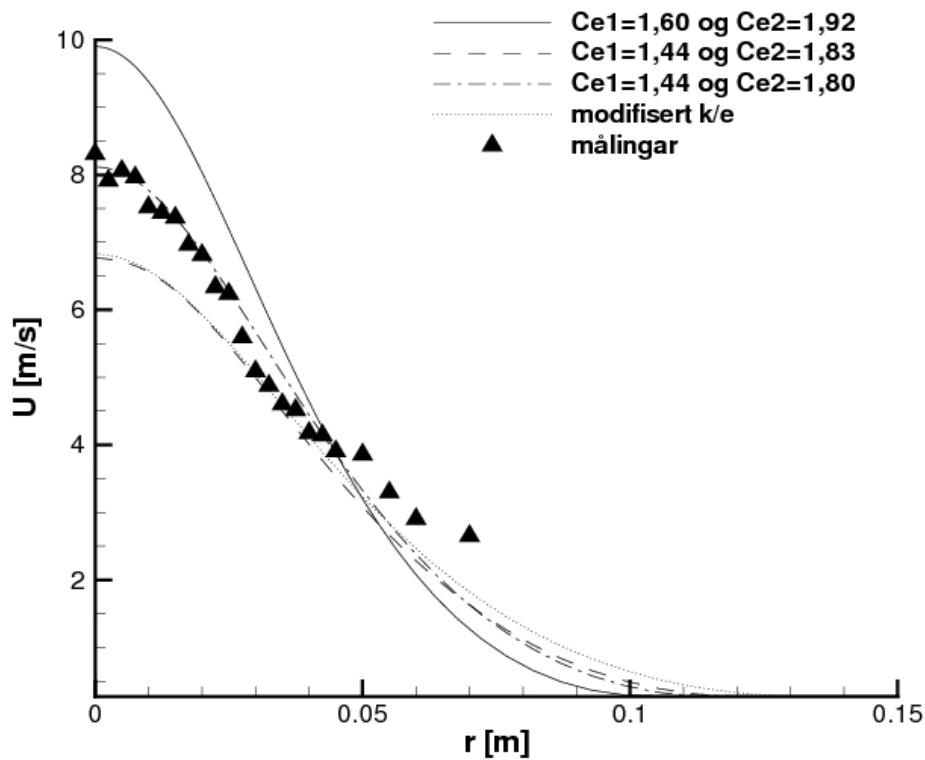
I denne delen vart det testa kombinasjonane $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,83$, $C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$ og $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$. I tillegg er det prøvd ut ein modifikasjon der $C_{\varepsilon 2}$ varierar lineært i akseretninga. Standard k - ε -modell er ikkje teken med her, sidan den gjev mykje større spreining enn modellane over (sjå mellom anna [12]). I alle simuleringar er det nytta turbulensprandtl- og turbulensschmidt-tal, σ_h og σ_Y , lik 0,5, som er vanleg ved desse modifikasjonane. 0,7 vert som regel nytta for standardmodellen [33] (s. 1005). Resultata syner at $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ gjev best resultat av dei tre kombinasjonane, men at resultatet kan verte betre der $C_{\varepsilon 2}$ varierar. Tilfellet der $C_{\varepsilon 2}$ varierar vert frå no berre omtala som *modifisert k - ε* . Då er $C_{\varepsilon 2} = 1,75$ frå $x/d = 0$ fram til og med $x/d = 40$. Frå denne posisjonen og fram til $x/d = 50$ så aukar verdien lineært til $C_{\varepsilon 2} = 2,00$. Frå $x/d = 50$ og til enden av området er $C_{\varepsilon 2} = 2,00$. $C_{\varepsilon 1}$ er lik 1,44 i denne modellen. Alle simuleringar i denne delen er utført med rask kjemi, og føremålet har vore å finne ein eller to modellar som eignar seg godt. Eitt par varianter som viser seg å vere bra, vert testa i neste kapitlet med detaljert kjemi. Gridet frå figur 5.7c vart nytta for testing av CH₄-flamma.

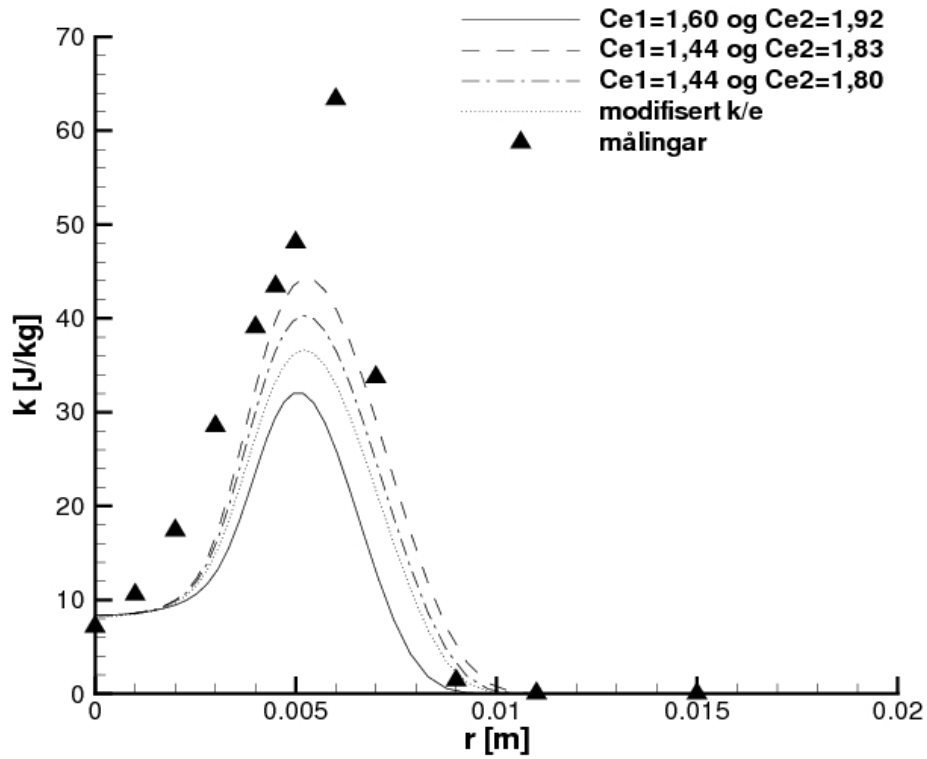
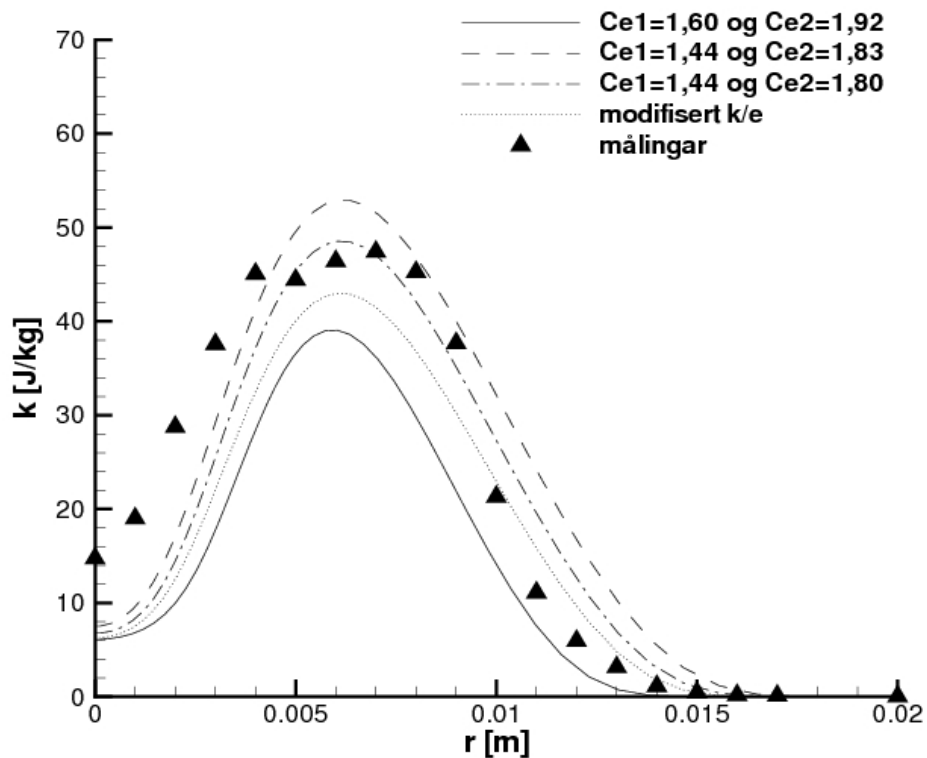
Figur 5.14 - 5.16 syner samanlikning av farta i x -retning for $x/d = 5, 10, 20, 40, 60$ og 80 . Ved $x/d = 5$ er senterlinjefarta noko lågare enn målingane, men alle konstantane gjev omlag like resultat for simuleringane. Ved $x/d = 10$ er kan ein sjå at kombinasjonen med heil linje skil seg noko frå resten. Det er $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ saman med modifisert k - ε som gjev best resultat frå $r = 0$ fram til 0,009 m, der $C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$ treff måleverdiar best utover i radiell retning. Dette er likeins for $x/d = 20$, der spreinga vert noko for stor med $C_{\varepsilon 2} = 1,83$, $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ og

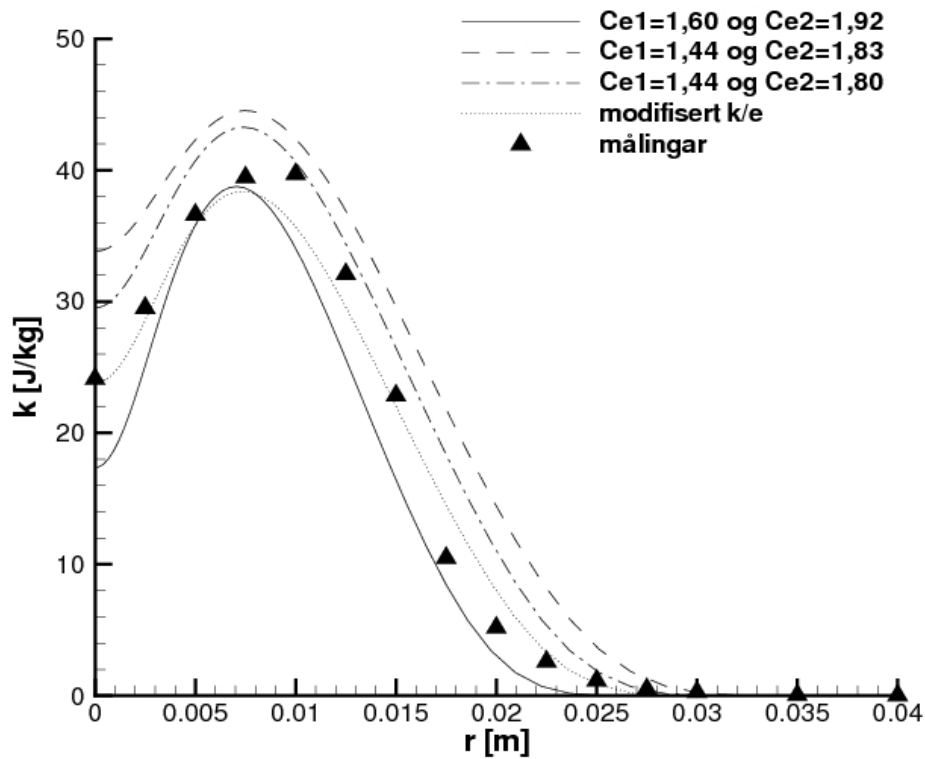
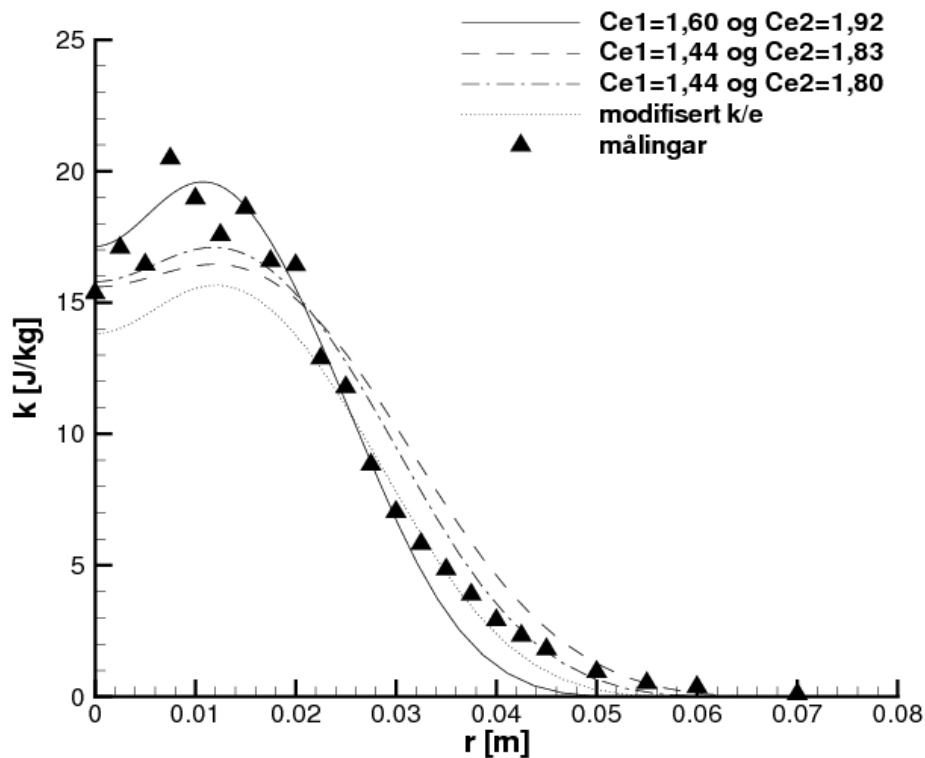
modifisert k - ε , men størst for den med stipla linje. Senterlinjefarta er generelt for høg ved bruk av $C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, men spreinga stemmer bra lenger ute i radiell retning. Ein kan sjå at modifisert k - ε gjev litt betre verdiar med tanke på spreining, enn $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,83$. Dette gjeld spesielt ved $x/d = 20$. Ved $x/d = 60$ er måle-verdiar noko spreidd, men jamnt over er det $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ og modifisert k - ε som gjev best resultat. Ved $x/d = 80$ er det $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ som treff best med målingar, då spesielt nær $r = 0$.

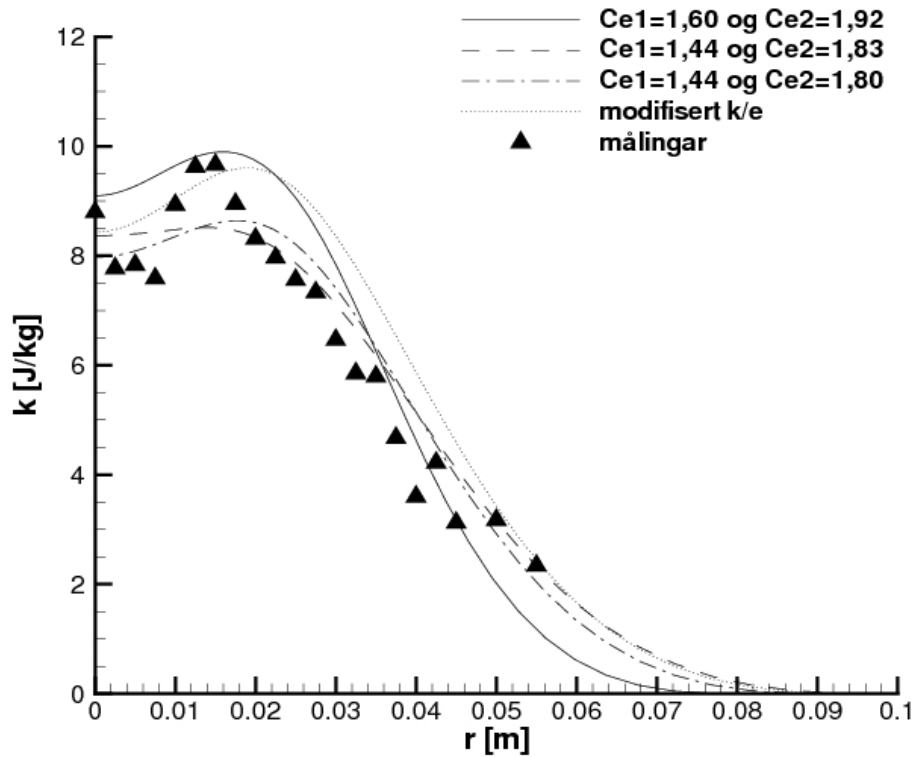
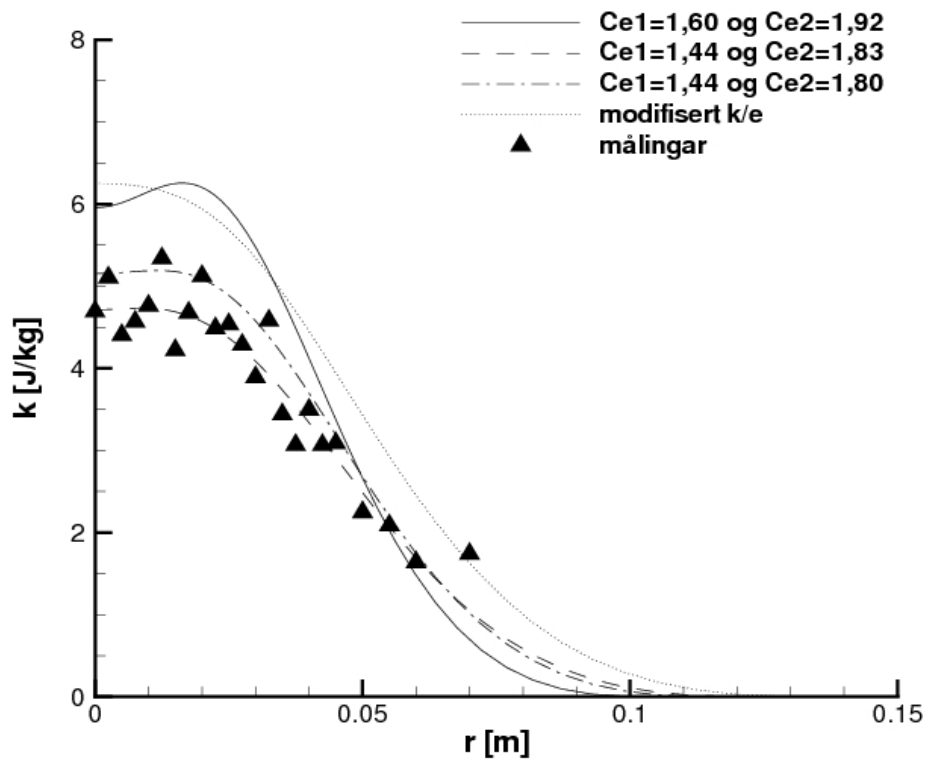
(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.**Figur 5.14:** Konstanter i $k-\epsilon$ -modellen - CH_4 -flamma. Fart i x-retning.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.**Figur 5.15:** Konstanter i k - ϵ -modellen - CH_4 -flamma. Fart i x-retning.

(a) $x/d = 60$.(b) $x/d = 80$.**Figur 5.16:** Konstanter i $k-\epsilon$ -modellen - CH_4 -flamma. Fart i x-retning.

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.**Figur 5.17:** Konstanter i k - ϵ -modellen - CH_4 -flamma. Turbulensenergi.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.**Figur 5.18:** Konstanter i k - ε -modellen - CH_4 -flamma. Turbulensenergi.

(a) $x/d = 60$.(b) $x/d = 80$.**Figur 5.19:** Konstanter i k - ϵ -modellen - CH_4 -flamma. Turbulensenergi.

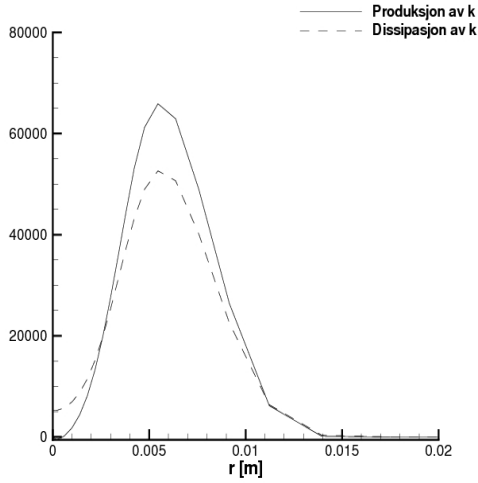
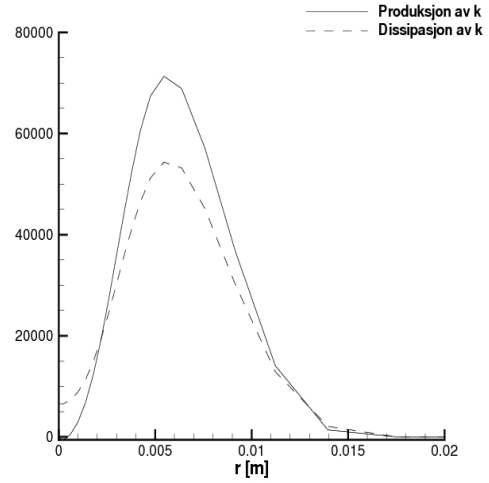
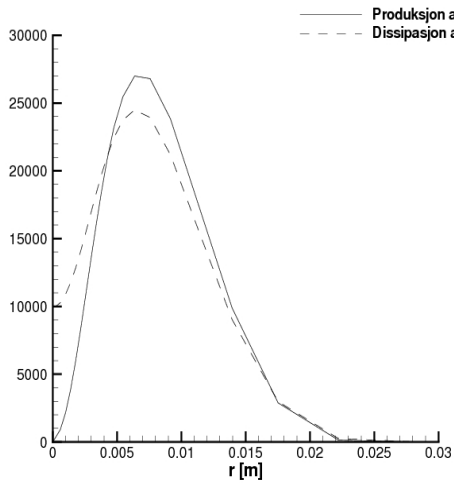
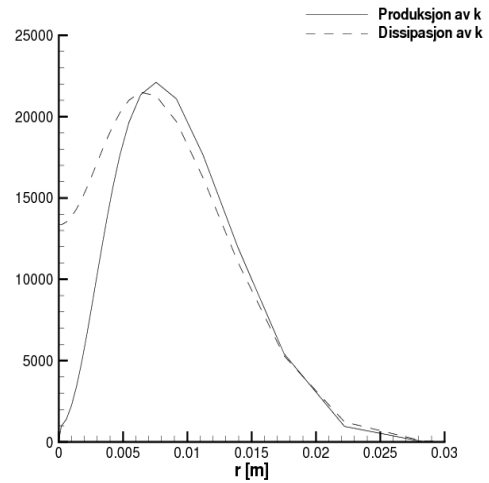
Figur 5.17 - 5.19 syner samanlikning av turbulensenergi for dei ulike modellane. Skilnaden mellom modellane, og skilnaden mellom simulering og målingar, er generelt større her. Ved $x/d = 5$ er målingane noko høgare enn dei simulerte verdiane. Kombinasjonen med $C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$ gjev mest avvik frå målingar, medan $C_{\varepsilon 2} = 1,83$ gjev best verdiar av dei tre. Ved $x/d = 10$ er skilnaden mellom modellane mykje det same, men her gjev $C_{\varepsilon 2} = 1,83$ for høge verdiar i høve målingane. Nær $r = 0$ er skilnaden mellom målingar og simuleringar størst. Ved maksimalverdien åt k gjev $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ best resultat, men denne overestimerer k for $r > 0,01$ m. Ved $x/d = 20$ gjev modifisert k - ε best samsvar med målingar, medan $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ gjev for høge verdiar. Ved $x/d = 40$ er målingane for $r < 0,025$ m noko spreidde, men for r høgare enn dette gjev modifisert k - ε best resultat. Ved $x/d = 60$ og $x/d = 80$ kan vi sjå at modifisert k - ε skil seg ein del frå målingar, då spesielt for den siste posisjonen.

Generelt gjev $C_{\varepsilon 1} = 1,92$ lågare k enn dei andre, med unntak for dei tre siste aksielle posisjonane der modellen gjev høgare verdiar for låge r . Denne modellen gjev og for låge verdiar i høve målingane, med unntak av nær dysa. Der nærmar $C_{\varepsilon 1} = 1,92$ seg måleverdiar der k nærmar seg ein minimumverdi for store r .

Drøfting - CH₄-flamma

Resultata syner tydeleg korleis middelfarta samverkar med turbulensenergien generert av dei "store" kvervlane. Ved $x/d = 20$ er turbulensenergien mykje for låg for modellen med $C_{\varepsilon 1} = 1,60$, som resulterer i at senterfarta ved same posisjon vert for høg. Der er altså ikkje nok turbulensviskositet til å spreie rørslemengda. Ei endring av den første konstanten, $C_{\varepsilon 1}$, ser ut til å ha stor verknad nær senterlinja, då farta vert noko for høg her og spreinga mindre. Ein auke i verdien åt denne gjev kjeldeleddet i ε -likninga høgare verdi, medan reduksjon av $C_{\varepsilon 2}$ gjer at kjeldeleddet minkar. For den første konstanten har ei endring størst verknad på kjeldeleddet når produksjonen av turbulensenergi, P_k , er størst. Om likningane for k og ε vert rekna som stasjonære, kan P_k setjast $P_k \approx \varepsilon$ [7] (s. 144). Då kan ein sjå vekk i frå kjeldeleddet i k -likninga, medan kjeldeleddet i ε -likninga vert $(C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 2}) \frac{\varepsilon}{k} \rho \varepsilon$. Differansen mellom dei to konstantane vert -0,32 for $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, -0,36 for $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ og -0,39 for $C_{\varepsilon 2} = 1,83$. Ein ser då at kjeldeleddet i ε -likninga vert eit slukledd, der $C_{\varepsilon 2} = 1,83$ gjev mest sluk av ε . Dette gjev mest turbulensenergi av dei tre, og difor mest spreing.

I SPIDER er ikkje likningane rekna som stasjonære, slik at det ikkje er vilkårleg kva for ein konstant vi vel å justere. Figur 5.20 syner samanlikning av produksjon og dissipasjon av k , ved to ulike aksielle posisjonar. Simuleringane er gjort med gridet i figur 5.7a. Nær senterlinja, ved $x/d = 10$, er det ikkje særleg stor skilnad i produksjon av k for dei to modellane. Ved $x/d = 20$ er det tydeleg utifrå figuren at modellen med $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ har meir produksjon av k . Figurane syner og at ε veks raskare med denne modellen, noko den bør gjere for å bremse produksjonen av k .

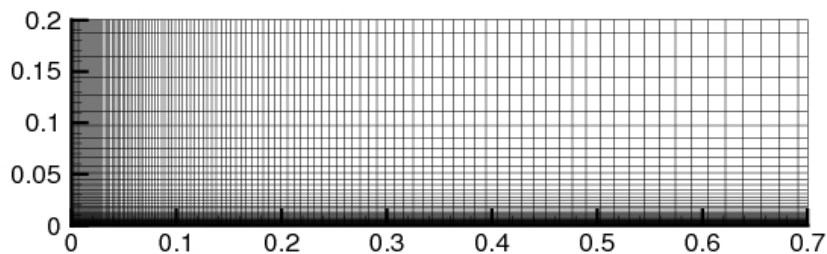
(a) $C_{\epsilon 1} = 1,60$ og $C_{\epsilon 2} = 1,92$. Ved $x/d = 10$.(b) $C_{\epsilon 1} = 1,44$ og $C_{\epsilon 2} = 1,80$. Ved $x/d = 10$.(c) $C_{\epsilon 1} = 1,60$ og $C_{\epsilon 2} = 1,92$. Ved $x/d = 20$.(d) $C_{\epsilon 1} = 1,44$ og $C_{\epsilon 2} = 1,80$. Ved $x/d = 20$.**Figur 5.20:** Produksjon og dissipasjon av turbulensenergi.

Figur 5.15a synte at ei oppjustering av $C_{\varepsilon 1}$ ga for lite spreining nær senterlinja, medan reduksjon av $C_{\varepsilon 2}$ ikkje ga så mykje mindre spreining her. Tabell 5.1 syner samanlikning av nokre verdiar for dei to modellane.

Tabell 5.1: Verdiar for ulike storleikar med to sett konstantar i k - ε -modellen. Senterlinja ($r = 0$) ved $x/d = 20$.

	$C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$	$C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$
ρ	0,26	0,23
P_k	10000	13300
ε	10	1000
k	19	28
P_ε	2188	157320
Q_ε	2,63	14786
μ_t	0,8709	0,0162

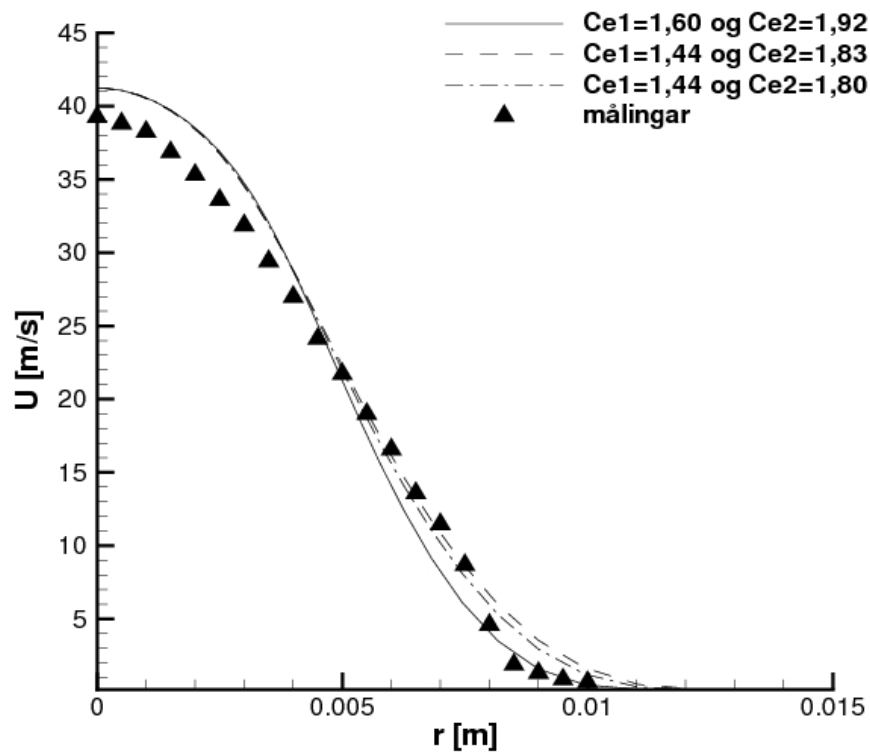
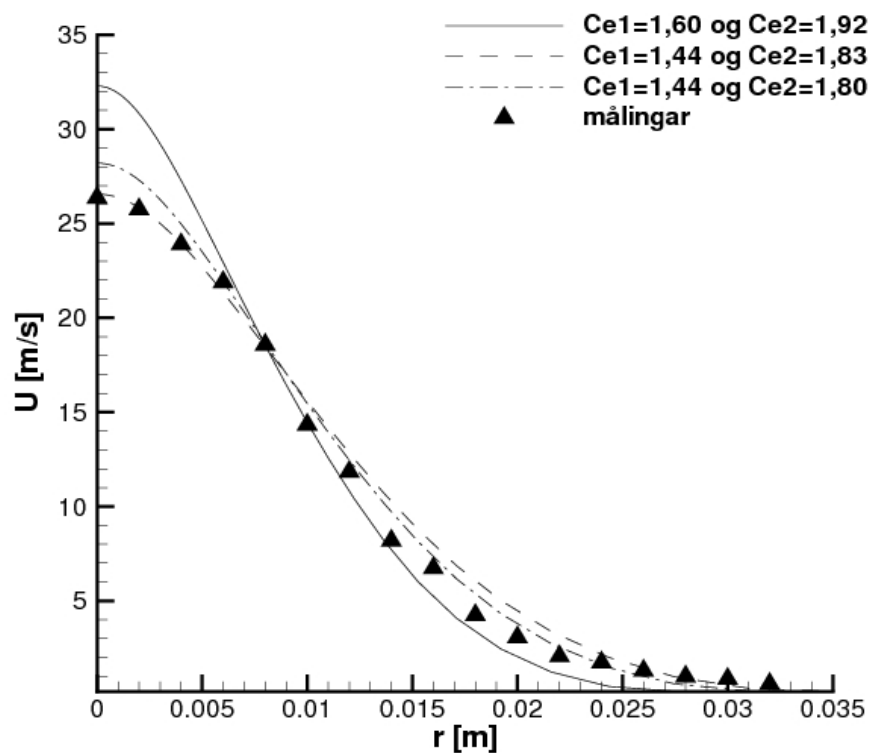
Med bakgrunn i drøftinga som er gjort over, vart modellkonstantane $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ nytta vidare i dei fleste simuleringane. Årsaka er at dette paret gjev best resultat med tanke på fart og turbulensenergi. Denne modellen gjev eit realistisk fartsfelt, men turbulensenergien har nokre større avvik frå målingane.

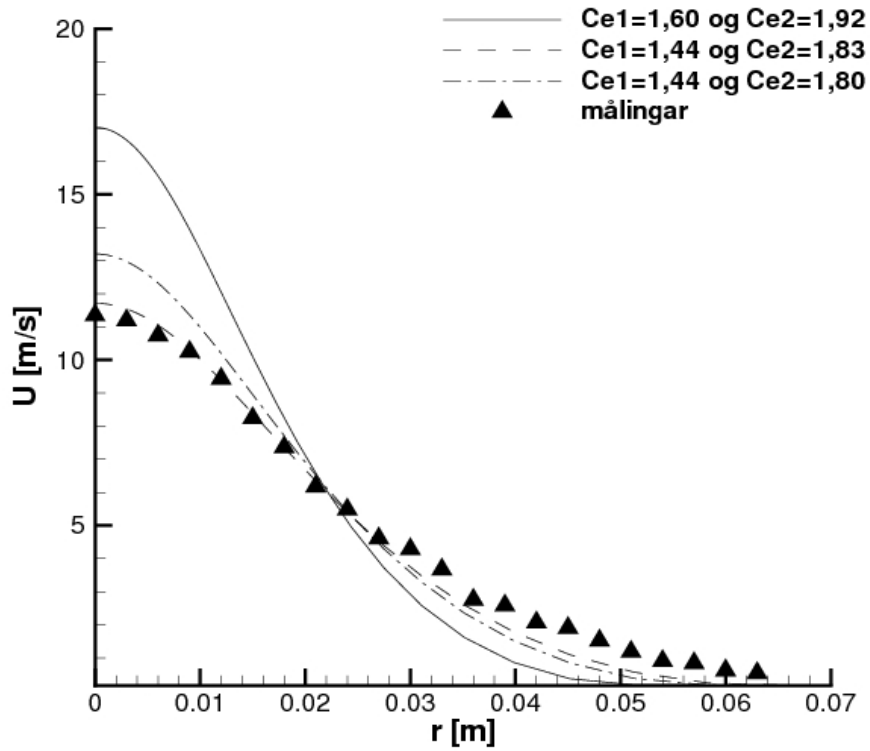
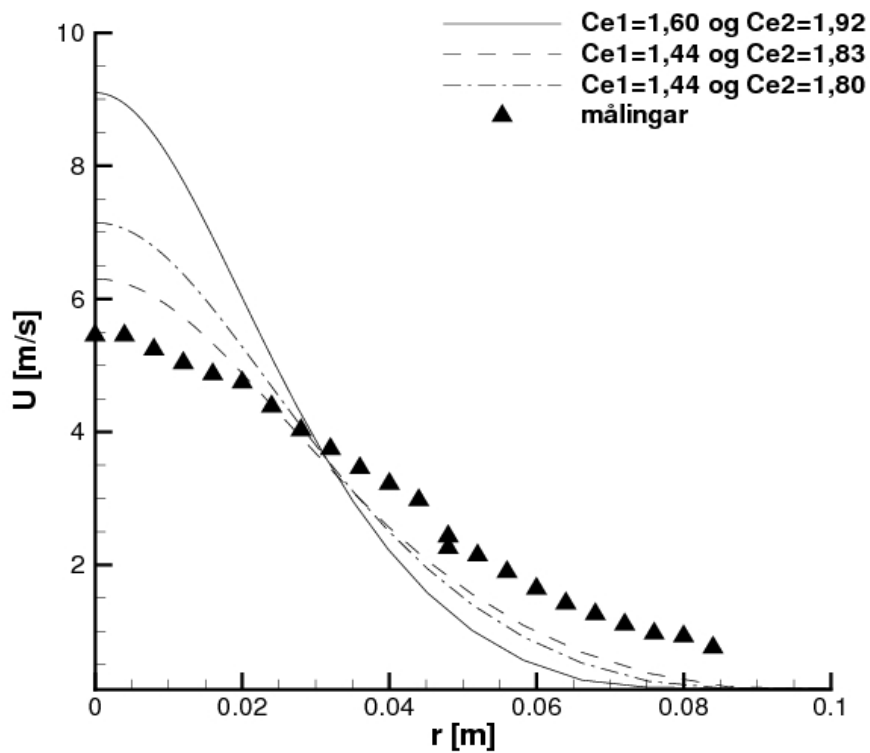


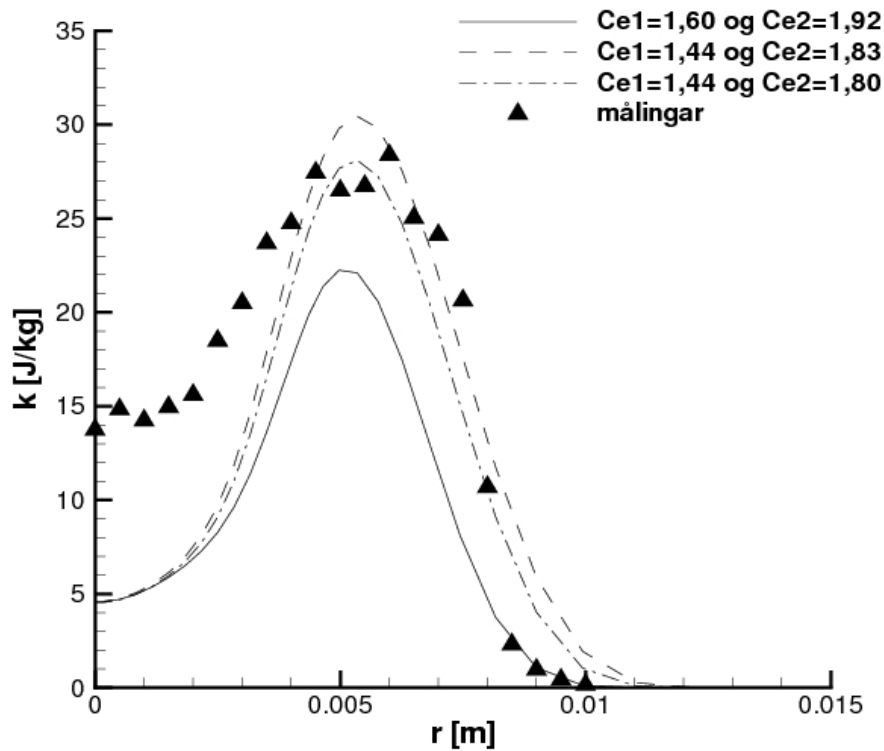
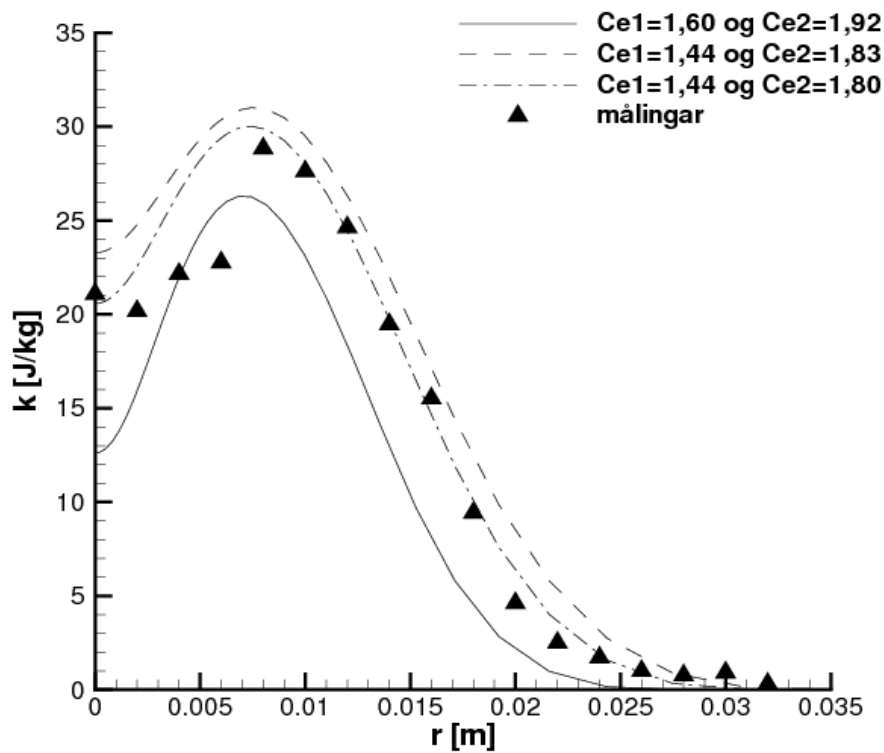
Figur 5.21: Grid for modellering av H3-flamma. 120x50 celler.

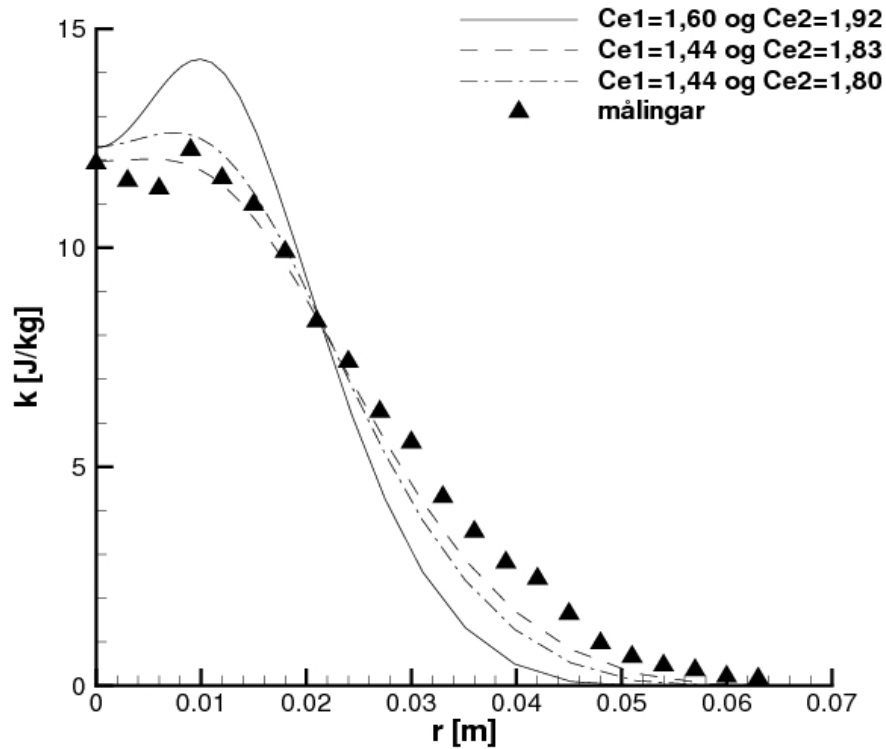
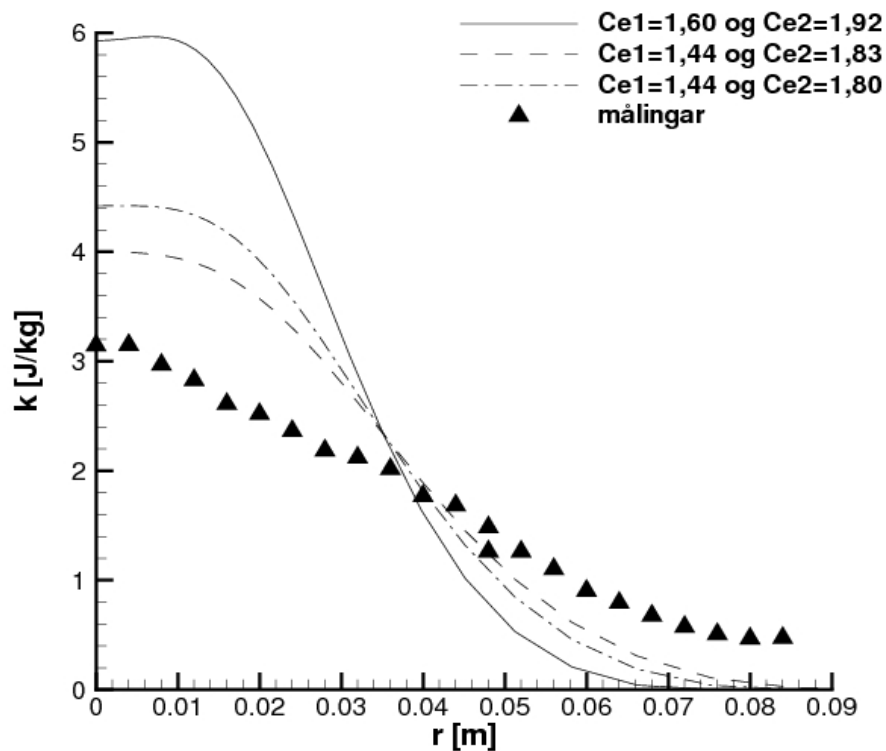
Resultat og drøfting - H3-flamma

For H3-flamma vart det testa kombinasjonane $C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,83$ og $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$. Test av turbulensmodell vart og gjort i [12]. Der vart verdiane $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,83$ nytta i dei fleste simuleringane. Figur 5.21 syner gridet. Der er 120x50 celler, med 12 grenseceller, nett som i prosjekt-oppgåva. Resultat for fart i x-retning er synt i figur 5.22 og 5.23, og turbulensenergien i figur 5.24 og 5.25. Nett som for CH₄-flamma vert senterfarta mykje for høg ved bruk av $C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, ved $x/d = 20$. Rørslemengda vert ikkje spreidd så mykje i senter som hjå dei to andre modellane. Lenger ute, ved $r > 0,01$ m, spreier denne modellen meir enn inne ved senterlinja. Jamnt over er det verdiane $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,83$ som gjev best resultat, med tanke på farta. Ved $x/d = 60$ er skilnaden frå målingar stor for alle tre modellane, men spesielt for $C_{\varepsilon 2} = 1,92$.

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 20$.**Figur 5.22:** Konstanter i k - ϵ -modellen - H3-flamma.

(a) $x/d = 40$.(b) $x/d = 60$.**Figur 5.23:** Konstanter i k - ε -modellen - H3-flamma.

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 20$.**Figur 5.24:** Konstanter i k - ϵ -modellen - H3-flamma.

(a) $x/d = 40$.(b) $x/d = 60$.**Figur 5.25:** Konstanter i k - ε -modellen - H3-flamma.

Turbulensenergien er og her for låg ved $x/d = 20$ langs senterlinja. Ved $x/d = 5$ gjev alle modellane ein del lågare verdiar enn målingar ved $r = 0$. Her er det ikkje stor skilnad på modellane før lenger ute i radiell retning. Generelt gjev modellen med heil linje lågare k enn dei andre. Ved $x/d = 60$ er skilnaden frå målingar stor, nett som for farta. Dette avviket var ikkje så stort ved same posisjonen for CH_4 -flamma, noko som kan tyde på at modellen ikkje er like god når farta har vorte så lita. For H_3 -flamma er rørslemengda mindre frå start av, og ved $x/d = 60$ er farta omlag 6 m/s i senter, medan CH_4 -flamma har det dobbelte. Det kan tenkjast at ein standard modell ikkje lenger overestimerer spreinga når impuls kreftene ikkje lenger er så dominerande. For denne flamma ville det då vere betre med konstantar som varierar nedover i strøyminga. Dette er ikkje teke med her, men truleg ville ein kombinasjon av dei som er testa, og ein standard modell lenger nedstraums, gje betre resultat.

Sidan modellen med $C_{\epsilon 1} = 1,44$ og $C_{\epsilon 2} = 1,83$ ser ut til å gje best resultat av dei tre, er denne nytta vidare for samanlikning med CH_4 -flamma.

5.3 Modellering av NO_x frå forbrenning

5.3.1 Innleiing

Som tidlegare nemnt må det inkluderast kjemisk kinetikk i simuleringane for å modellere NO_x i produktet. I avsnitt 2.6 står det noko om teorien for bruk av EDC med detaljert kjemi. I tidlegare simuleringar, med uendeleg rask kjemi, vert det føresete at den globale reaksjonen skjer umiddelbart etter at kriteria for molekylær blanding i EDC-modellen er oppfylt. I den verkelege verda vert stoff omforma, i ei kjede av reaksjonar, før stoffa i det endelege produktet vert danna. Detaljert kjemisk kinetikk er det som skjer “inne i” den globale reaksjonen. Skilnaden mellom rask og detaljert skal vere tydeleg for skalare storleikar, som temperatur og massefraksjonane åt ulike stoff. Ei årsak til at temperaturfeltet ikkje vil vere likeins, er at alle delreaksjonar i verkelegheita ikkje skjer på same stad i tid og rom: Eit stoff som er produkt av ein delreaksjon, kan ha flytta på seg før det reagerer i neste. Såleis vil temperaturfeltet vere noko “på etterskot” i høve simuleringar med rask kjemi. Med “etterskot” er det meint at temperaturen, for ein posisjon med rask kjemi, kan finnast att lenger nedstraums med detaljert. Spesifikk varmekapasitet er heller ikkje den same, sidan samansetnaden av stoff er annleis.

Tettleiken vert endra på grunn av endring i temperaturen, og farta vert noko ulik, sidan tettleiken inngår i likningane der. Ved rask kjemi er det eit viss sannsyn for at stoffa som er i finstrukturen reagerer. Med detaljert kjemi vert det inkludert ein reaksjonsmekanisme, og i kvar celle vert det bestemt om reaksjon skal finne stad utifrå kjemiske og turbulente tidsskalaer. I kvar celle vert det ein slags “konkurranse” mellom kjemiske reaksjonar og lokal miksing med turbulensen [33] (s. 1007).

Målet med denne delen har vore å få resultat som gjev godt samsvar med målingar, då spesielt med tanke på NO_x . For å gjere dette har det vorte samanlikna to diffusjonsflammer, testa ulike grid, justert turbulensstorleikar og diverse anna. Simulering av CH_4 -flamma med detaljert kjemi synte at det var stor skilnad frå simulering med rask kjemi. Det var vanskeleg å modellere denne flamma, i motsetnad til H_3 -flamma, som ga betre resultat utan for mange justeringar.

I heile delen er Magnussen sin EDC-modell nytta, og det er simulert med ein k - ε -modell med ulike konstantar. Der ikkje anna er sagt, er det nytta $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ for CH_4 -flamma. For H_3 -flamma er det nytta $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,83$ i alle utrekningane. I alle konturplotta synt i avsnitt 5.3, så er horisontal akse akseretninga i meter. Den vertikale aksa er radiell retning med same lengdeining.

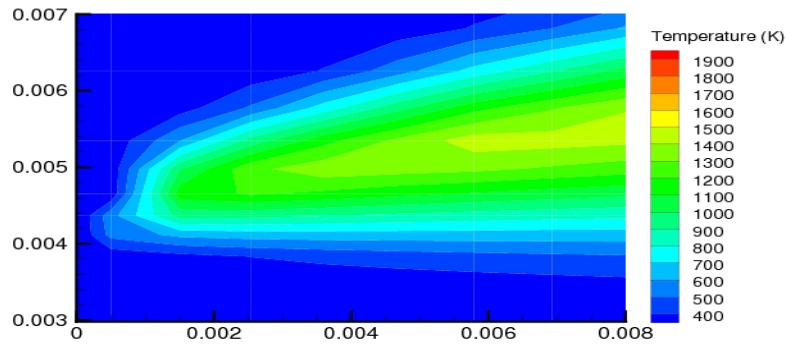
5.3.2 Simulering med detaljert kjemisk kinetikk - H3-flamma

For samanlikning av dei to flammene, er det nytta omlag same gridet. Dette er gridet synt i figur 5.21. Einaste skilnaden er innløpsverdiar, modellkonstanter og nokre andre justerbare variable. Sidan same brennaren er nytta for dei to ved målingar, er det naturleg å samanlikne dei utan for mange skilnader. Flammene er samanlikna ved å først presentere temperaturfeltet frå simulering med rask og detaljert kjemi. Deretter er det synt konturplott av Y_{OH} for informasjon om flammesona. For CH_4 -flamma vart det nytta innløpsverdiar henta frå enden av “røyrret” (sjå avsnitt 5.1).

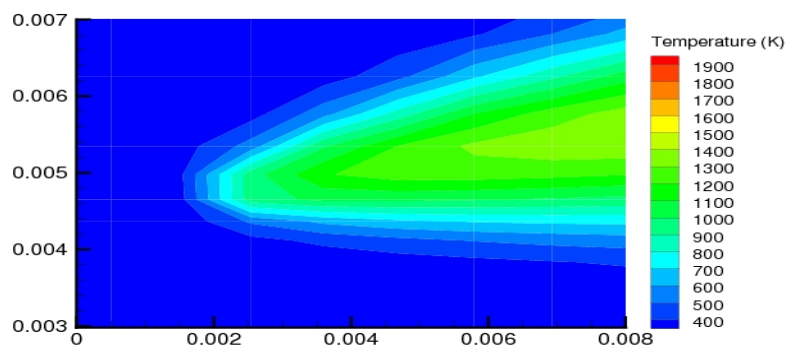
Resultat

Figur 5.26 syner konturplott av temperatur og massefraksjon av OH for H3-flamma. Det er tydeleg at temperaturfeltet ikkje er det same. For simuleringa med detaljert kjemi er temperaturen forskyvd nedover i straumretninga. Figur 5.27 gjev temperaturen som funksjon av akseretninga, ved omlag $r = 0,0048$ m. Figur 5.27a syner korleis temperaturen frå detaljert kjemi er lågare heile vegen fram til maksimalverdien. Etterpå er den noko høgare. Sidan profilet har omlag same form, kan det tyde på at flamma er lyfta litt frå utløpet av dysa. Dette er noko den ikkje skal gjere, i følgje TNF Workshop [1]. Det er likevel vanskeleg å fastslå dette utifrå simuleringane med rask kjemi, sidan temperaturfeltet ikkje gjev nok informasjon om kor flammesona er. Figur 5.27b syner at temperaturen får ei merkbar stigning ved omlag $x = 0,0005$ m med rask kjemi, medan den kjem ved omlag $x = 0,0015$ m med detaljert kjemi. Dette er ein skilnad på 1 mm. Sidan det ikkje finst målingar i akseretninga for skalare storleikar, er det vanskeleg å fastslå om flamma er forskyvd med detaljert eller ikkje.

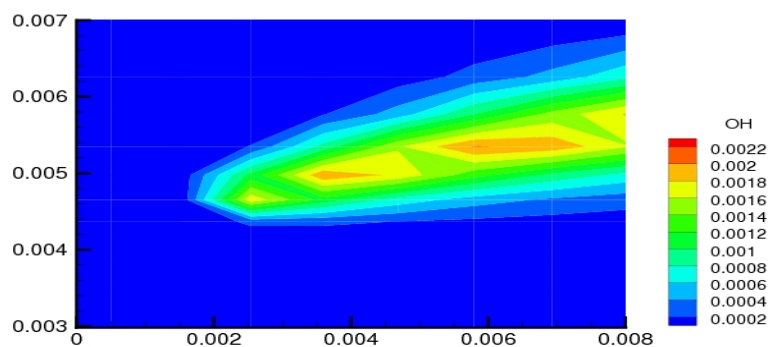
Figur 5.26c syner massefraksjon av OH nær utløpet av dysa. Denne gjev god informasjon om kvar flammesona er, sidan OH-verdien er høgast i dette området. For ei liknande flamme vert lyftehøgda estimert til å vere der Y_{OH} når 600 ppm (på massebasis) [33] (s. 1015). På figuren er dette ved $x \approx 0,0016$ m. Av figuren kan det tyde på at nettverket ikkje er fint nok til å fange opp den tynne flammesona nær dysa. Dette kan sjåast av “øyane” med ekstra store mengder OH, som kjem fram med noko mellomrom. Årsaka til at flammesona er så tynn inne ved utløpet, er at rørslemengda er så stor her, og fleire reaktantar vert flytta nedstraums, anten dei er samanblanda eller ikkje. Det må leggjast til at figurane lett kan lure ein, og i dette tilfellet er sona der “øyane” oppstår vel innafor grensa for kvar flammesona er. Figur 5.28 syner konturplott av Y_{OH} med gridlinjer. Den viser tydeleg to “øyar” ved $x = 0,004$ og $x = 0,006$ m, der variasjonen er noko ufysikalsk. Mest truleg skal den eigentleg vere jamnare imellom dei, og eit ikkje-ortogonalt grid hadde vore betre i dette området. Det vert snakka meir om grid i delen som tek for seg CH_4 -flamma.



(a) Uendeleg rask kjemi - temperatur.

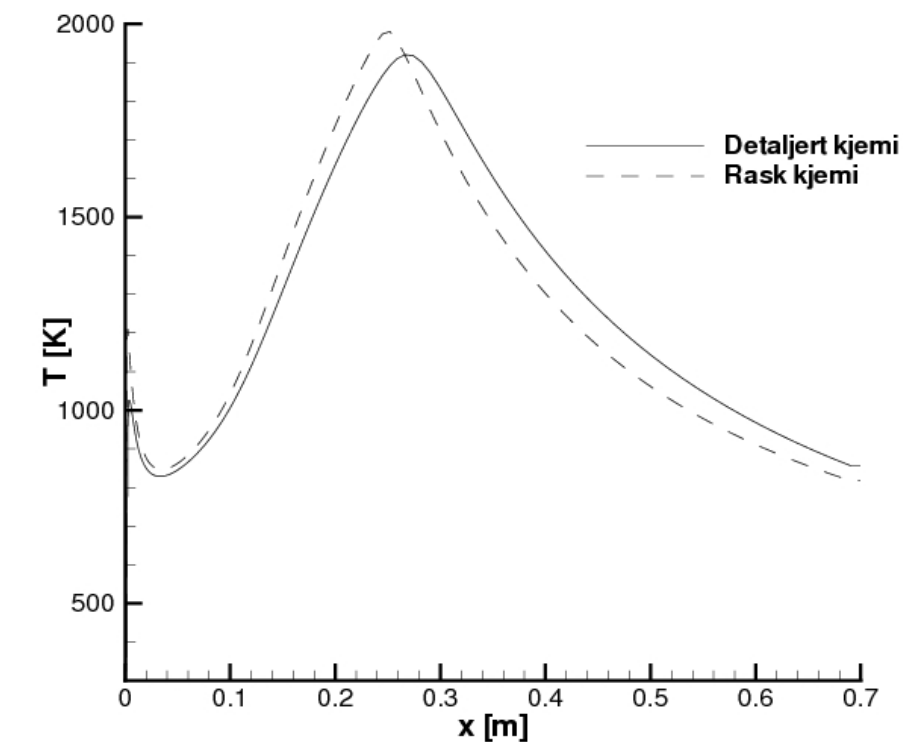
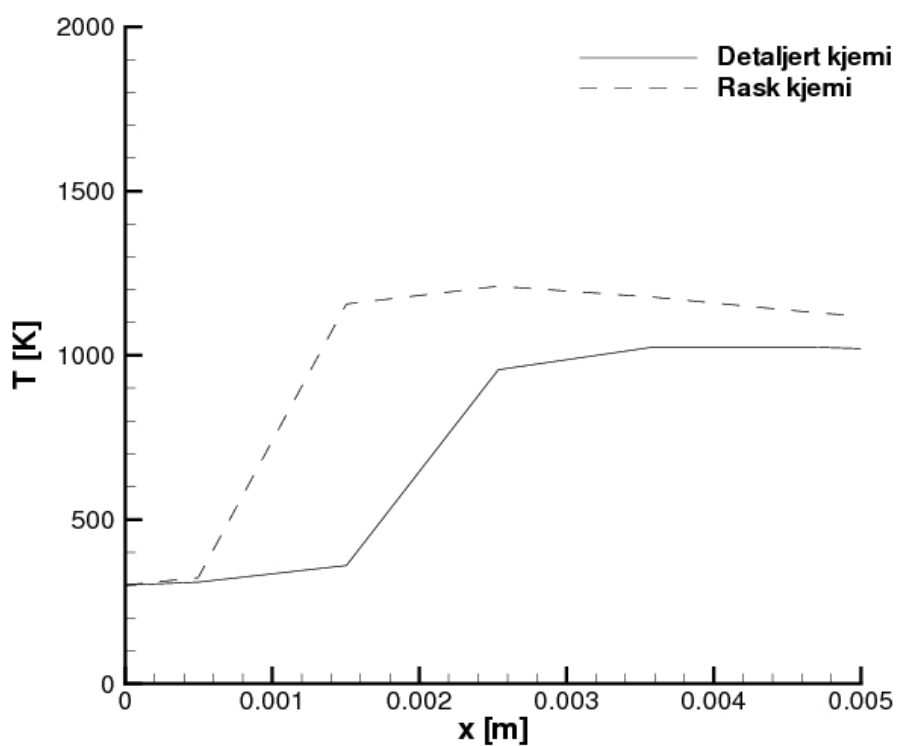


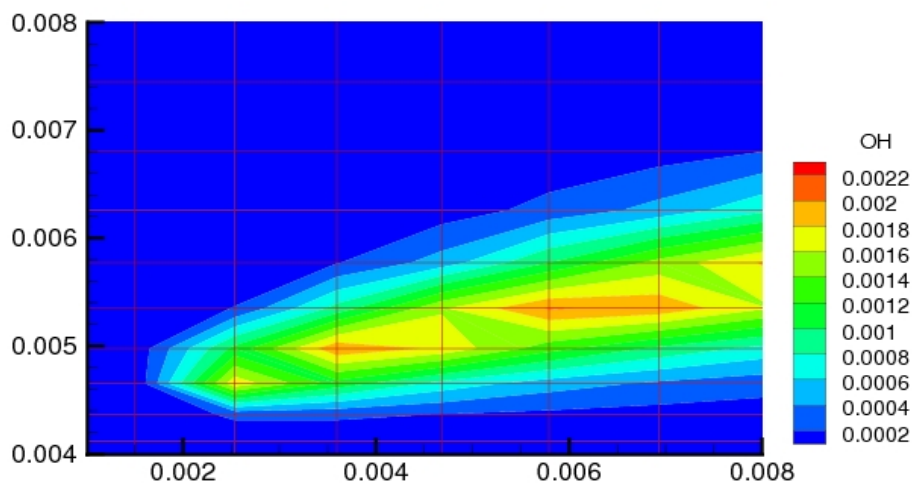
(b) Detaljert kjemi - temperatur.



(c) Detaljert kjemi - massefraksjon av OH.

Figur 5.26: Konturplott av temperatur og massefraksjon av OH nær dysa - H₃-flamma. Horizontal akse gjev akseretninga i meter. Vertikal akse er radiell retning i meter.

(a) Heile området ($r = 0,0048$ m).(b) Nær utløpet av dysa ($r = 0,0048$ m).**Figur 5.27:** Aksielt profil for temperaturen - H3-flamma.



Figur 5.28: Gridlinjer gjennom nodepunktene. Konturplott av Y_{OH} nær dysa - H3-flamma.

I det følgende er det sammenlikna verdier frå simuleringar med måleverdier. Figurane 5.29 - 5.32 syner fart og turbulensenergi for nokre aksielle posisjonar. For farta er det liten skilnad ved $x/d = 5$. Lenger ute i akseretninga, ved $x/d = 60$, ser vi at spreininga er noko mindre med detaljert kjemi. Skilnaden mellom rask og detaljert kjemi er stor nær senterlinja. Det er og avviket frå målingar, spesielt med detaljert kjemi. For turbulensenergien er det liten skilnad mellom detaljert og rask, med unntak av inne ved $r = 0$ ved $x/d = 20$ og $x/d = 60$. Ved $x/d = 60$ er skilnaden mellom simulering og måling ganske stor, noko som truleg er på grunn av turbulensmodellen.

For temperaturen (figur 5.33 og 5.34), er det noko skilnad mellom rask og detaljert kjemi, spesielt ved $x/d = 60$. Ved $x/d = 5$ er det liten skilnad på simuleringane. Avviket frå målingane vert stort i området der flamma byrjar. Nær dysa har ikkje temperaturen spreidd seg så mykje frå flammesona og inn til senter. Men ved $x/d = 20$ har temperaturen fått eit lyft inne ved $r = 0$, og likeins har avviket frå målingane vorte større.

Ved denne posisjonen er temperaturen med detaljert kjemi noko lågare enn rask, og gjev betre samsvar med målingar. Avviket er likevel stort. Ved $x/d = 40$ har tempera-

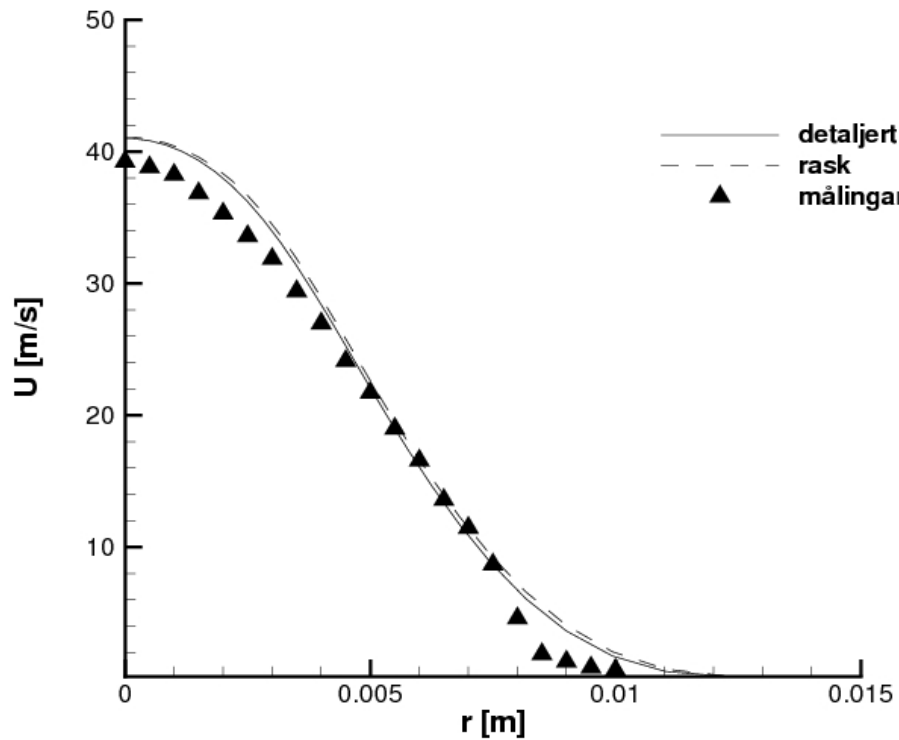
turen maksimalverdi i senter, og avviket mellom detaljert og rask er veksande i dette området. Temperaturprofilen er noko mindre spreidd i radiell retning med detaljert kjemi.

Ved $x/d = 60$ (figur 5.34b) er avviket frå målingar stort, og skilnaden mellom rask og detaljert er større her. Inne ved senter ligg detaljert omlag 100 K høgare enn rask. Skilnaden mellom detaljert og målingar er omlag 250 K. For farta ligg detaljert omlag 1 m/s høgare enn rask, medan skilnaden mellom målingar og detaljert er omlag 1,5 m/s. At skilnaden mellom detaljert og rask er såpass liten, tyder på at brenslet reagerer raskt. Då er reaksjonane styrt meir av blandinga, og simulering med rask kjemi gjev mindre avvik frå målingar, enn om brenslet hadde reagert seinare.

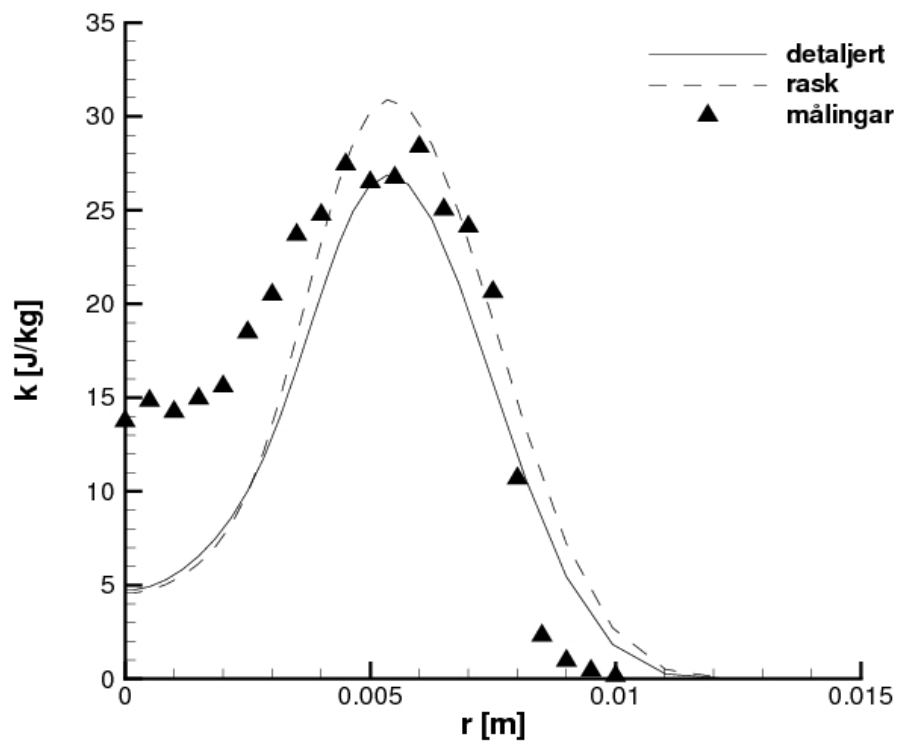
Y_{OH} i figur 5.35a er noko ulik måleverdiar. Profilen frå simuleringane er forskyvd utover i r-retning. Maksimalverdien er ulik, og for detaljert ligg den noko lenger ute i radiell retning enn målingar. Dette kan og sjåast for temperaturen i figur 5.33b. Uti frå OH-profilen ser det ut som at flammesona er noko tynnare enn den skal vere. Det er vanskeleg å tyde dette skikkeleg. Ved $x/d = 60$ ligg maksimalverdien at Y_{OH} nær $r = 0$. Verdien frå simuleringane er mykje for liten i høve målingar. Dette syner at flammesona er noko kortare i simuleringane enn den skal vere.

Figur 5.36 og 5.37 syner massefraksjonen at H_2 for nokre aksielle posisjonar. Ved $x/d = 40$ er verdien frå simuleringane mykje lågare enn måledata. Frå $x/d = 60$ og utover er $Y_{\text{H}_2} \approx 0$, medan målingane framleis er $Y_{\text{H}_2} \approx 3e^{-5}$ nær senterlinja ved $x/d = 80$. Brenslet vert brukt opp tidleg i jeten, og overforbruket startar truleg før $x/d = 20$. Som venta har rask noko lågare verdi ved $x/d = 20$, då brenselomsetnaden er noko på etterskot med detaljert kjemi.

Figur 5.38 gjev massefraksjonen av H_2O ved siste måleposisjonen. Verdien frå simuleringane er høgare enn målingar.

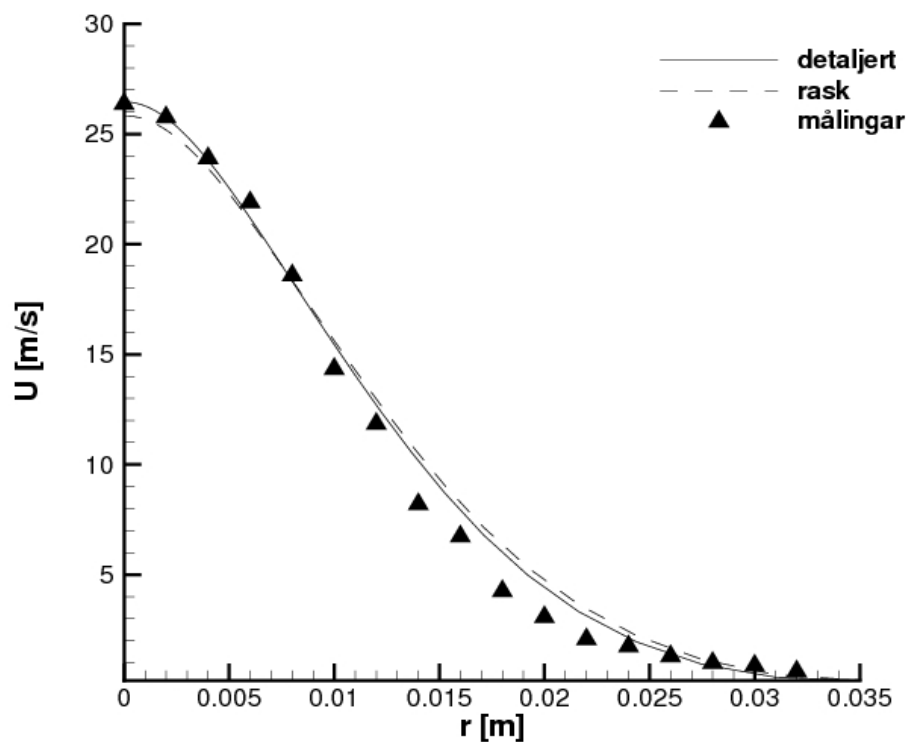


(a) Fart i x-retning.

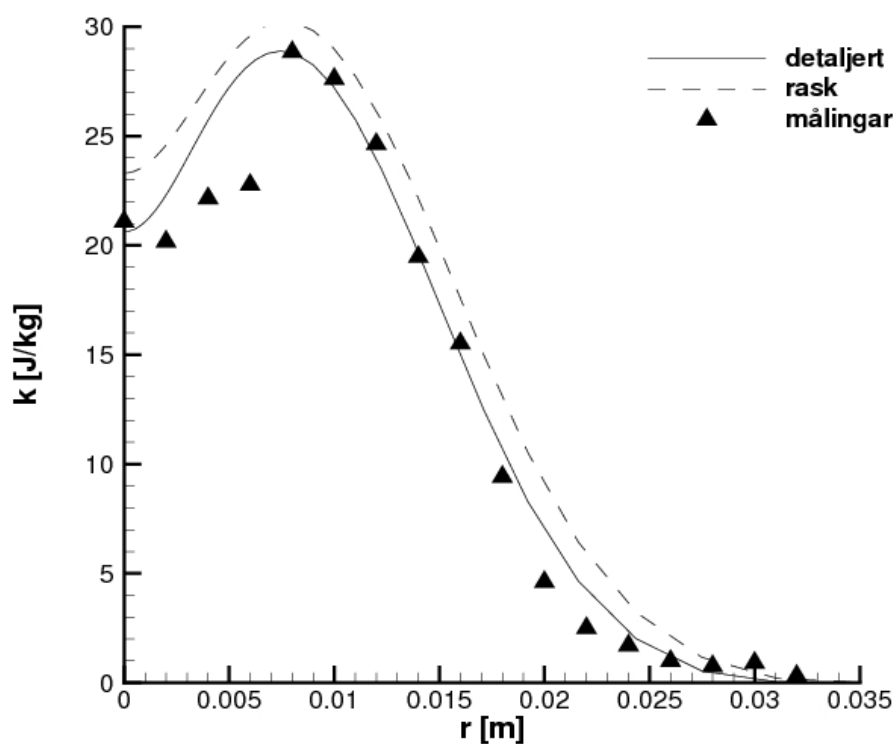


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.29: Samanlikning detaljert og rask kjemi ved $x/d = 5$ - H3-flamma.

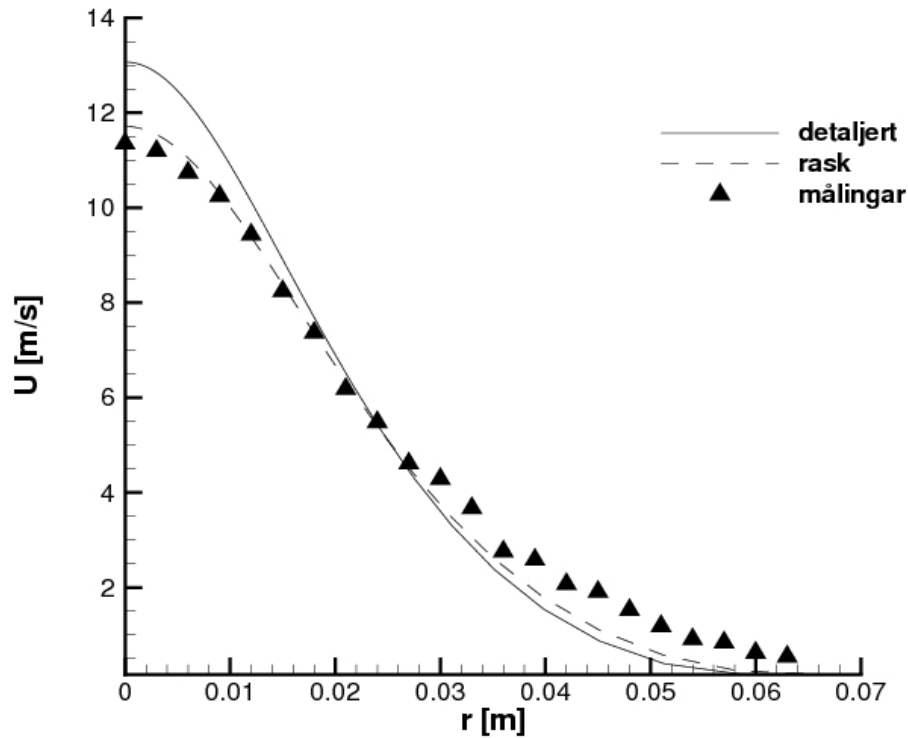


(a) Fart i x-retning.

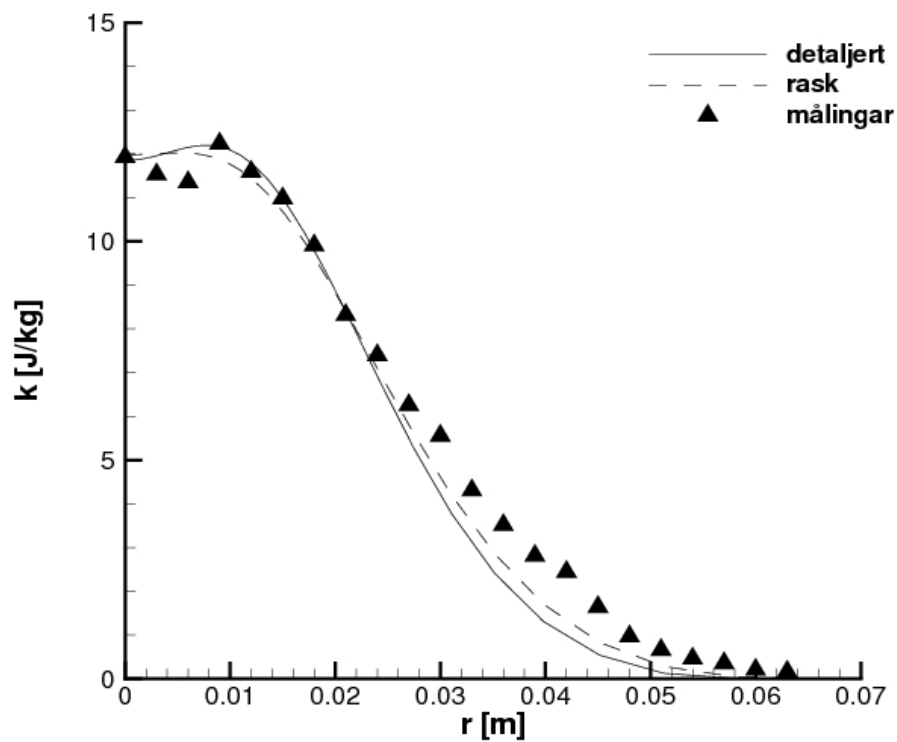


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.30: Samanlikning detaljert og rask kjemi ved $x/d = 20$ - H3-flamma.

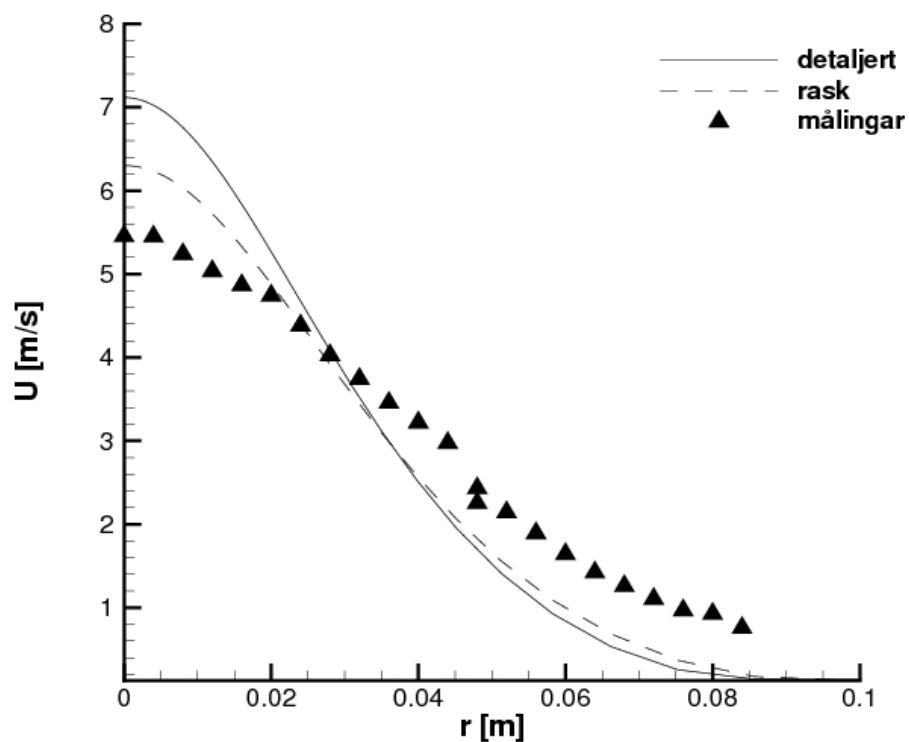


(a) Fart i x-retning.

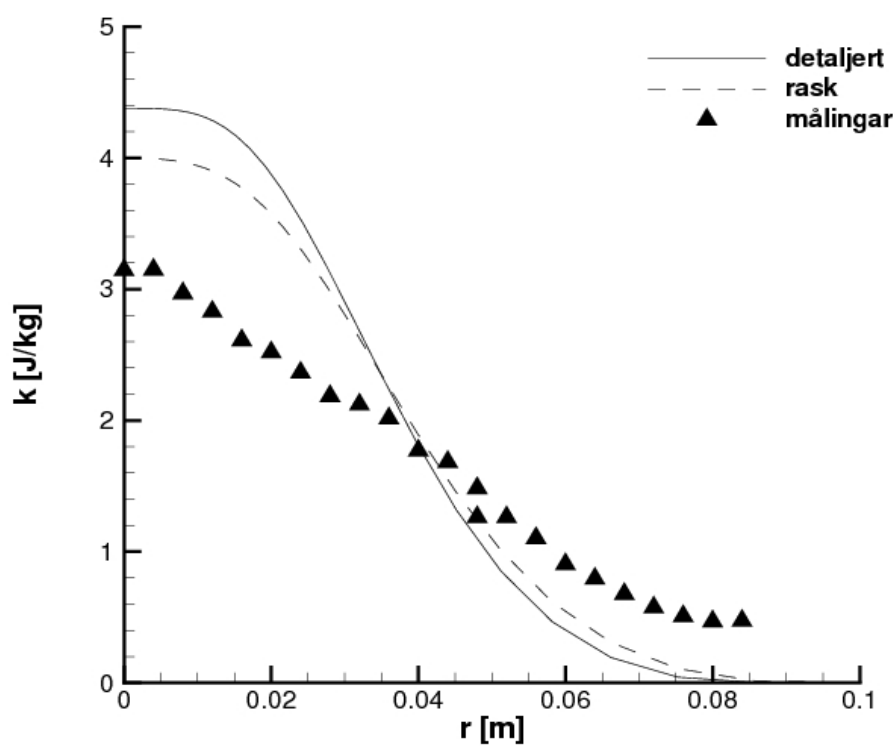


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.31: Samanlikning detaljert og rask kjemi ved $x/d = 40$ - H3-flamma.

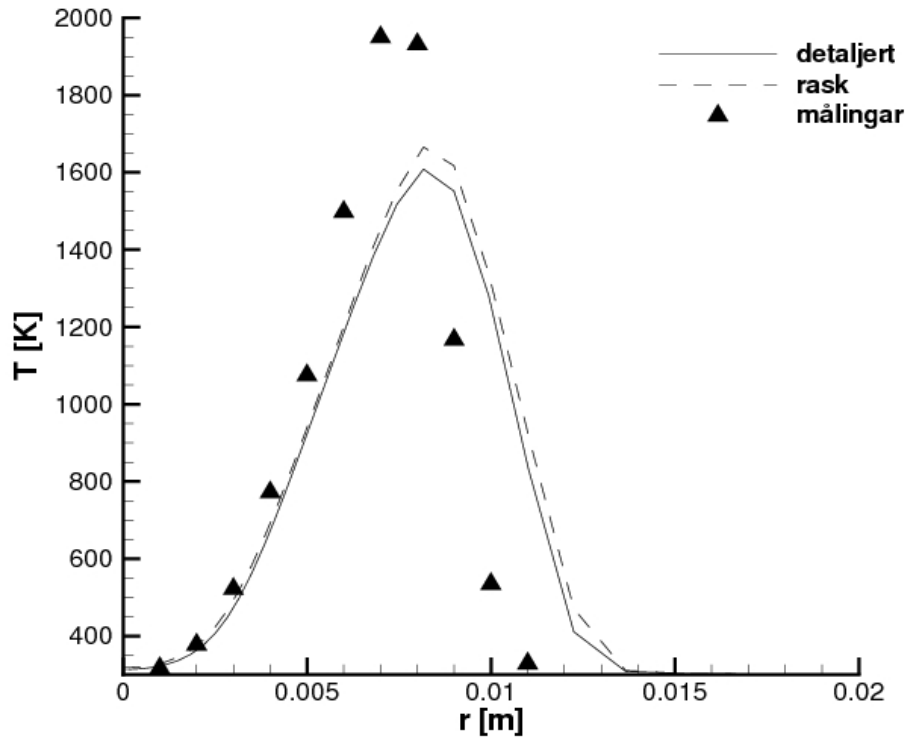
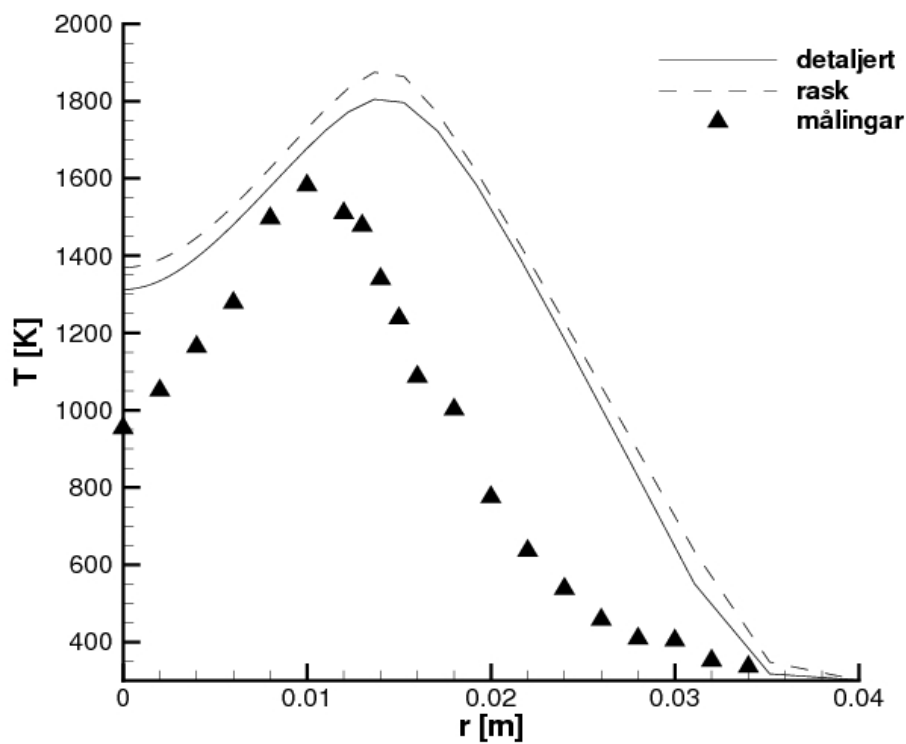


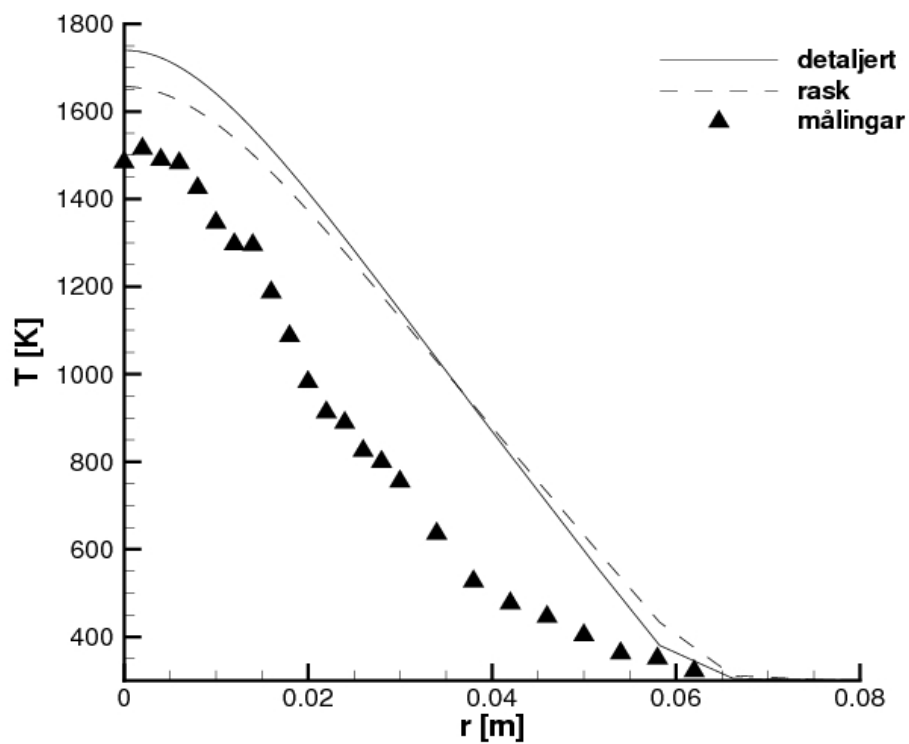
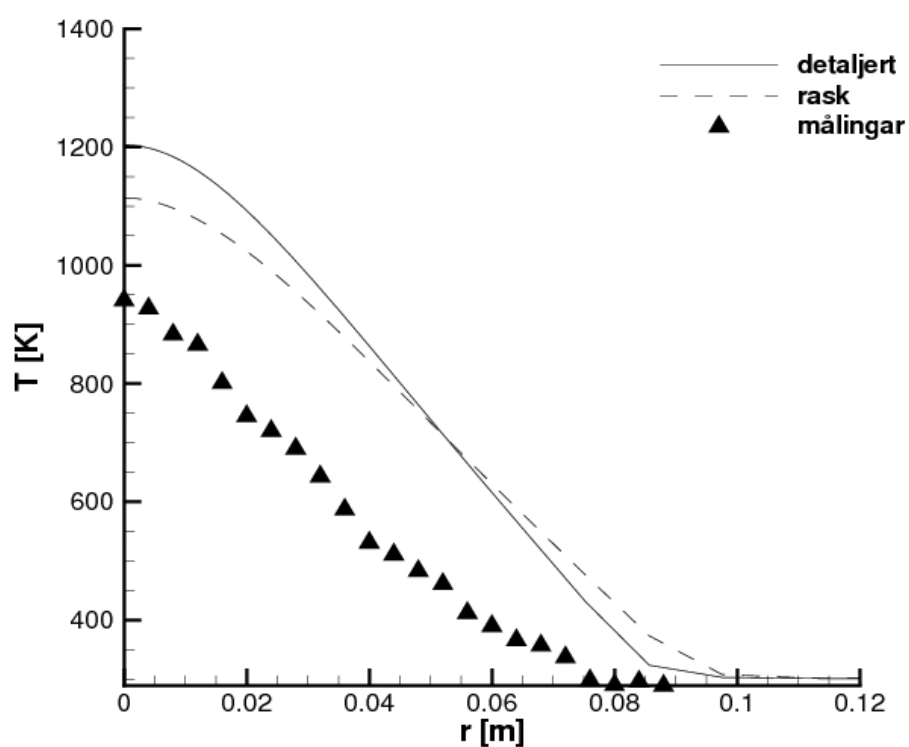
(a) Fart i x-retning.

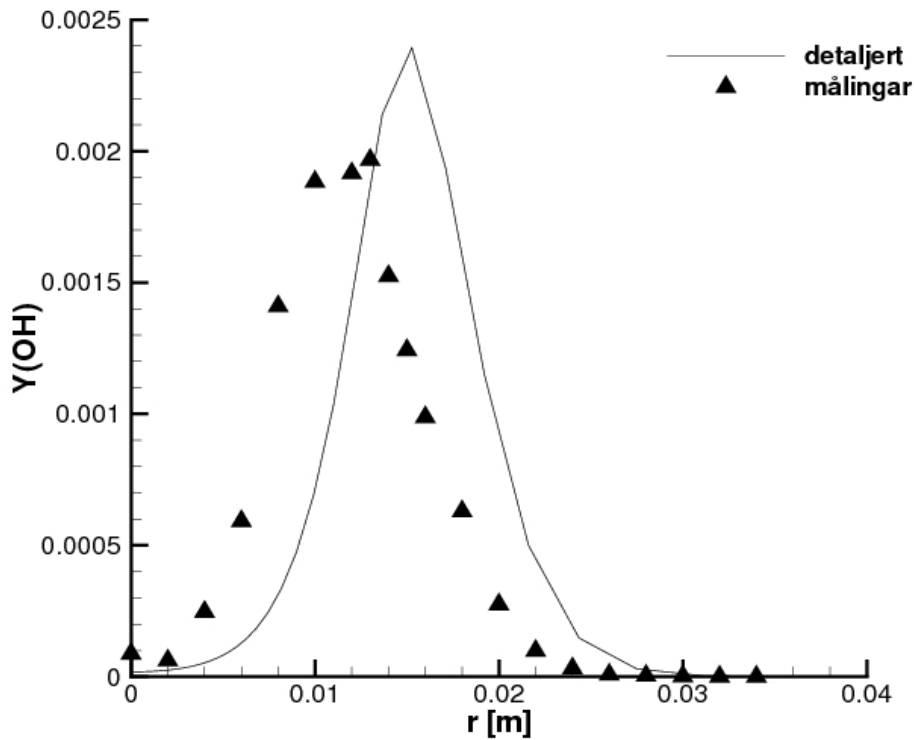
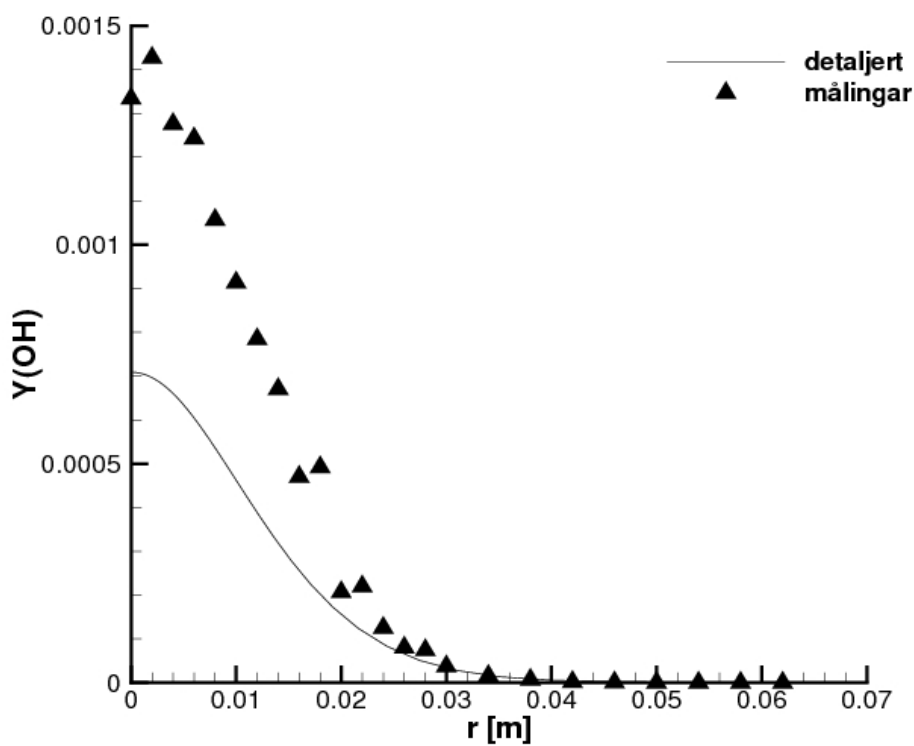


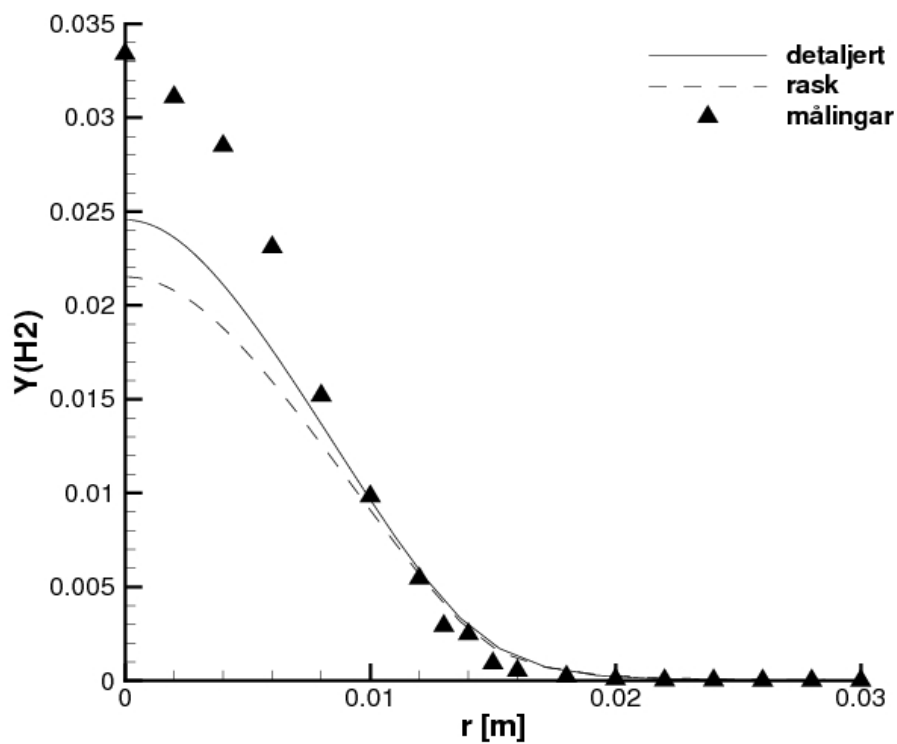
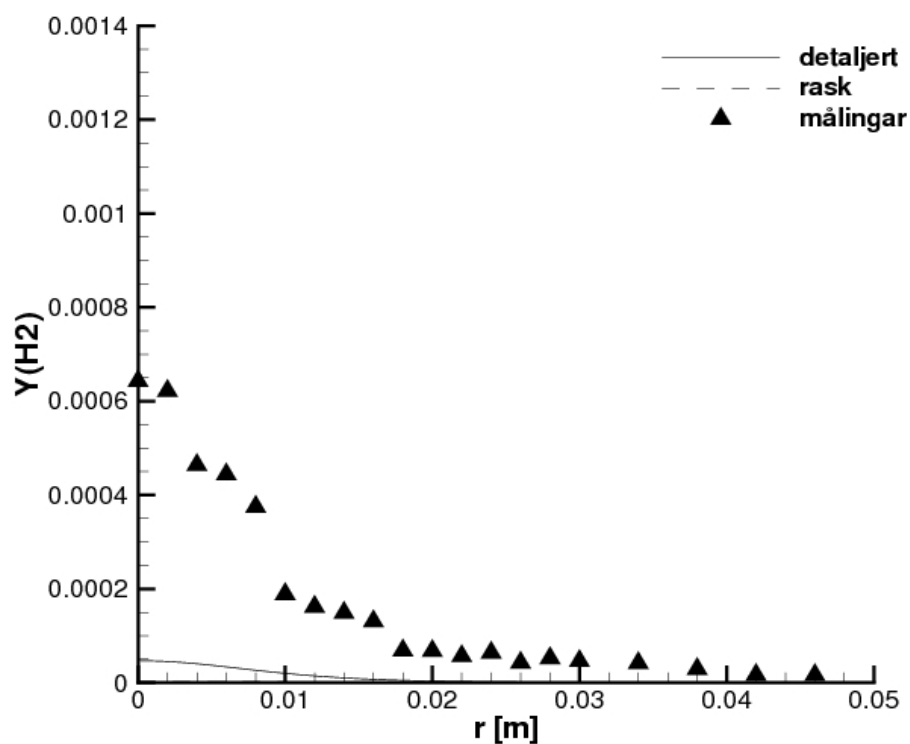
(b) Turbulensenergi.

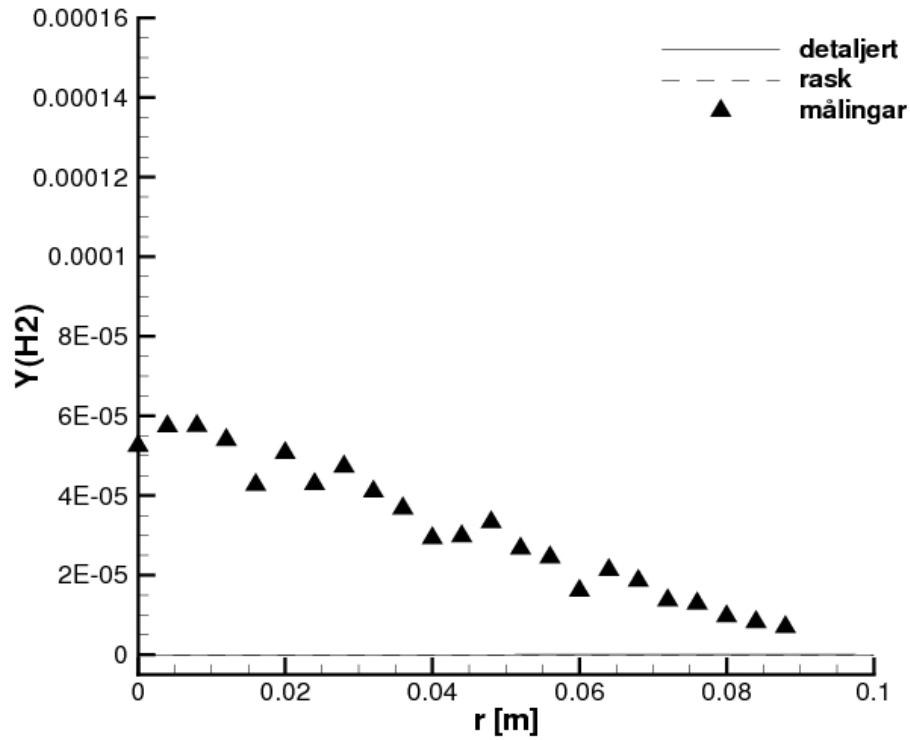
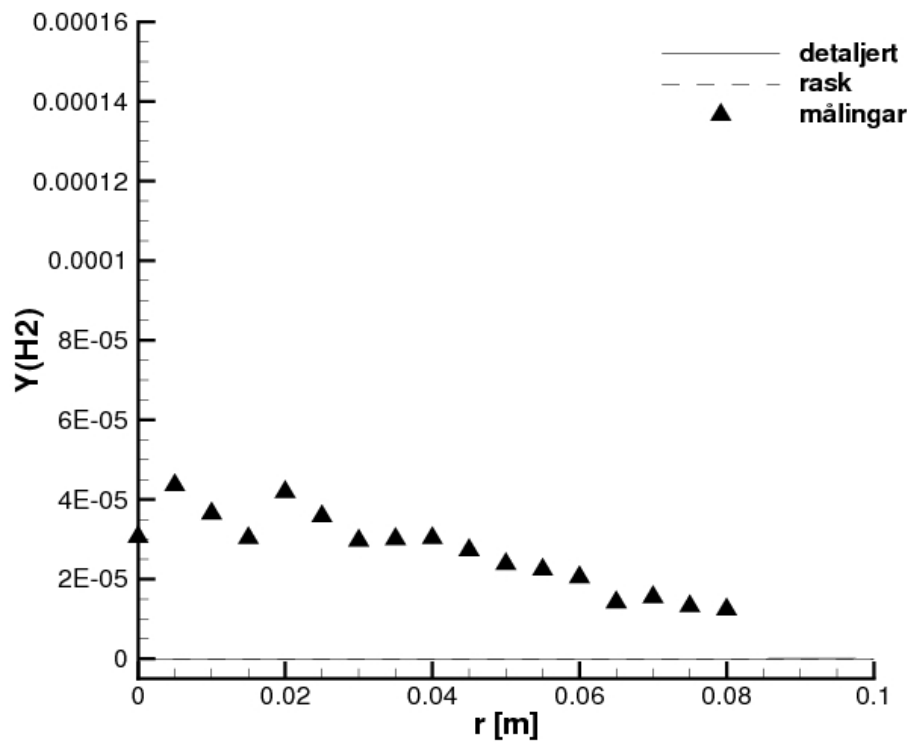
Figur 5.32: Samanlikning detaljert og rask kjemi ved $x/d = 60$ - H3-flamma.

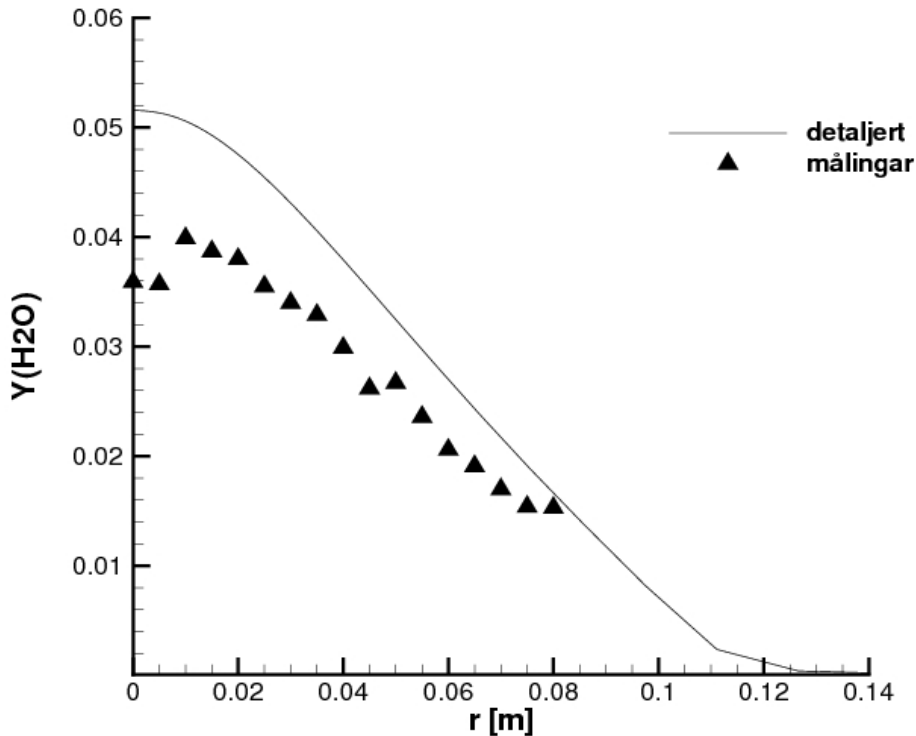
(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 20$.**Figur 5.33:** Samanlikning detaljert og rask kjemi - H3-flamma. Temperatur.

(a) $x/d = 40$.(b) $x/d = 60$.**Figur 5.34:** Samanlikning detaljert og rask kjemi - H3-flamma. Temperatur.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.**Figur 5.35:** Samanlikning detaljert og rask kjemi - H3-flamma. Massefraksjon av OH.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.**Figur 5.36:** Samanlikning detaljert og rask kjemi - H3-flamma. Massefraksjon av H_2 .

(a) $x/d = 60$.(b) $x/d = 80$.**Figur 5.37:** Samanlikning med måledata - H3-flamma. Massefraksjon av H_2 .



Figur 5.38: Samanlikning med måledata - H3-flamma. Massefraksjon av H_2O ved $x/d = 80$.

Drøfting

Avvika mellom verdiar frå simulering og måledata er store for temperaturen - på det meste omlag 400-500 K. Hydrogen vert raskt omsett i forbrenninga, og difor er føresetnaden om uendeleg rask kjemi bra i høve detaljert. Ved utløpet av dysa er det vanskeleg å fange opp flammesona. Dette gjer at temperaturen er noko lågare for simuleringane, og detaljert noko lågare enn rask som følgje av at den totale energiomsetnaden er noko på etterskot.

Ved detaljert kjemi er det vanskeleg å fange opp flammesona nær dysa. Brenslet vert omsett gjennom ei rekkje delreaksjonar, og nokre av dei er avhengig av at tynnare sjikt, med konsentrasjonar av ulike stoff, vert fanga opp av nettverket. Simulering med detaljert kjemi stiller høgare krav til nettverket, spesielt nær dysa. I starten er flammesona veldig tynn i høve tjukna lenger nedstraums. Dette kjem av at rørslemengda er så stor, og opphaldstida i finstrukturen er lita grunna høg ε (sjå likning 2.67 og 2.69). Dessutan vert reaktantar flytta fortare nedstraums i dette området.

Brensløt som ikkje vert omsett nær dysa, vert omsett lenger nedstraums. Det som er vanskelegare å forklare, er kvifor temperaturen vert så mykje lågare for målingar enn simulering, med både rask og detaljert. Dette er tilfelle langt nedstraums. I starten er temperaturen noko lågare med detaljert enn rask langs heile radiusen, men lenger nedstraums ser det ut til at detaljert har noko meir energimengde i strøyminga. Avviket i temperatur syner og att på CH_4 -flamma, og dette vert difor meir utførleg drøfta seinare i rapporten.

Temperaturen verkar inn på strøyminga og farta ved at tettheten endrar seg. Om gassen får eit lyft i temperaturen veldig raskt i eit lokalt område, og dette gjev ein skarp negativ gradient i radiell retning, så vil gassen ekspandere raskt og den termiske energien brer seg. Om ein slik gradient gjev ein aukande fartsgradient i radiell retning, kan rørslemengda i akseretninga generere meir turbulens.

Generelt vil ein lettare gass verte raskare spreidd. Ein tyngre gass genererer meir turbulens for så å verte spreidd, og dette skjer altså lenger nedstraums. Om ikkje flammesona kjem med i starten, så vil heller ikkje temperaturen verte så høg som den skal. Gassen får difor for høg tettheit.

Ved $x/d = 60$ er det større avvik i turbulensenergi mellom måling, rask og detaljert. Truleg er dette eit resultat av turbulensmodellen, som ikkje gjev rett forhold for strøyminga så langt nedstraums. For detaljert er gradienten større i store delar av området. Dette skulle vanlegvis gje meir spreiding av farta for detaljert enn rask, men i dette tilfellet er farta mindre spreidd. k -likninga og likninga for rørslemengd er kopla gjennom turbulensviskositeten, μ_t . Aukar den, så aukar diffusjonsleddet i impulslikninga. Kanskje har dette avviket i k ein verknad på U lenger nedstraums.

Elles er resultatene gode for fart og turbulensenergi. Meir usikkert er det kvifor temperatur gjev så store avvik. I simuleringane her er det nytta GRI-Mech 3.0. Andre simuleringar har vist at reaksjonsmekanismer noko å seie for resultatet [32]. Men og der gjev simuleringane for høge verdier.

5.3.3 Simulering med detaljert kjemisk kinetikk - CH_4 -flamma

For denne flamma er det først gjort samanlikningar med H_3 -flamma, med likeins grid (figur 5.21). Sidan det viste seg å vere vanskelegare å få betre resultat med denne, vert det seinare presentert fleire simuleringar med ulike justeringar. Fordelen med denne flamma er at der finst fleire tilgjengelege måledata, og det er målt ved fleire posisjonar i akseretninga.

Grenseverdiane nytta for samanlikning med H_3 -flamma er henta frå enden av “røyret” (sjå avsnitt 5.2.1). Det er tolv grenseceller ved utløpet av dysa, og verdiane på U , k og ε er gjevne i figur 5.2 og 5.3. Det er nytta nøyaktig same grenseverdier for rask og detaljert. Modellkonstantane vart sett til $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 1} = 1,80$ i desse simuleringane.

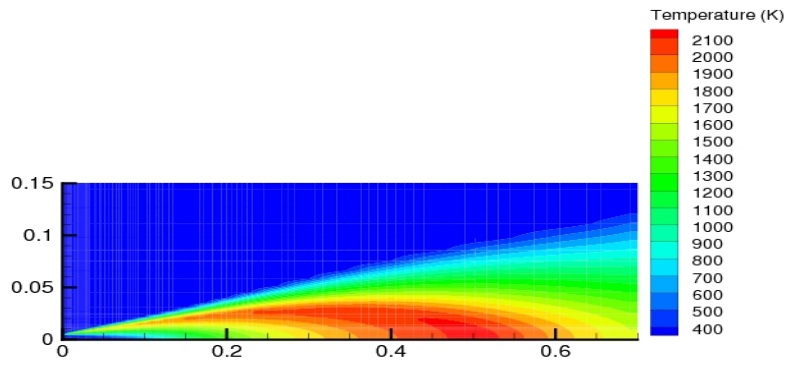
Resultat

Figur 5.39 syner konturplott av flammen i området det er simulert på. Det er teke vekk noko av området i r -retning på figuren, sidan temperaturen var som i omgjevnadane. Figur 5.40 syner T og Y_{OH} nærare utløpet av dysa. Det er tydeleg at nettverket ikkje fangar opp flammesona nær dysa. To “øyar” er synlege før den meir kontinuerlege delen av flammesona kjem fram. Fargekodane i figur 5.40c syner eit skilje der $Y_{\text{OH}} > 0,0006$, som er omlag der flammesona byrjar.

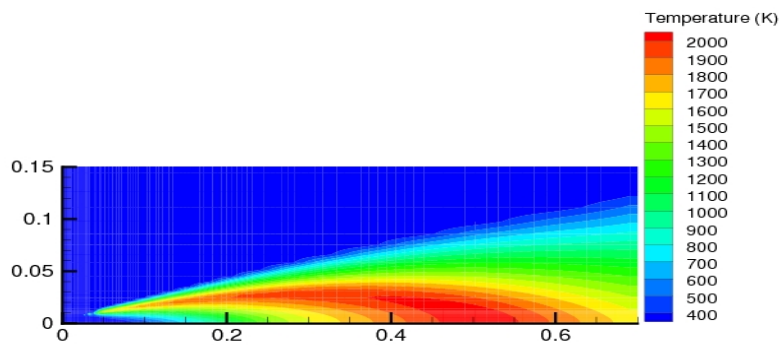
For temperaturen (figur 5.39 og figur 5.40 - a og b) er det klar skilnad mellom rask og detaljert. Ved rask kjemi ligg flamma omlag heilt inne ved dysa. Flamma i denne måleserien skal gjere det ([1], [35], [36]). Dette vart og stadfesta av Wolfgang Meier [27]. Før $x = 0,004$ m er det ujamn variasjon i temperaturen.

Figur 5.41a syner temperaturen i akseretninga ved $r = 0$. Det er tydeleg korleis temperaturen med detaljert er “på etterskot” i høve rask kjemi. Skilnaden mellom dei, i posisjonen der $T = 2000$ K, er $x \approx 5,08$ cm. Dette er ein del meir enn for H_3 -flamma. Figur 5.40c syner at Y_{OH} vert større enn 0,0006 først ved $x \approx 0,04$ m. Det er tydeleg at detaljert kjemi har noko mindre verdier enn for rask, og meir samanfallande med måleverdier. Dette kan tyde på at flamma ikkje er lyfta, men at flammesona ikkje har kome med i starten.

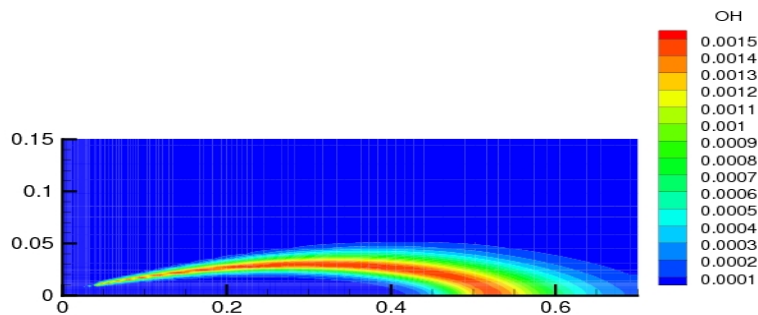
Nett som for H_3 -flamma kan det sjå ut som at verdiane frå detaljert kjemi er noko forskyvd. Før ein slik føresetnad vert gjort, må det vere sikkert at verdiane er på etterskot. Figur 5.41b syner massefraksjon av OH i akseretninga. Den viser at $Y_{\text{OH}} \approx 600$ ppm på ved $x \approx 0,46$ m for både målingar og simulering. Lenger ute i r -retninga får simuleringane ein mykje høgare maksimalverdi enn målingane, noko som kan sjåast att på temperaturen. Før $Y_{\text{OH}} = 600$ ppm så er det nesten ikkje noko OH i simuleringane, medan verdien frå målingane er aukande heile vegen før $Y_{\text{OH}} = 0,0006$ vert nådd.



(a) Uendeleg rask kjemi - temperatur.

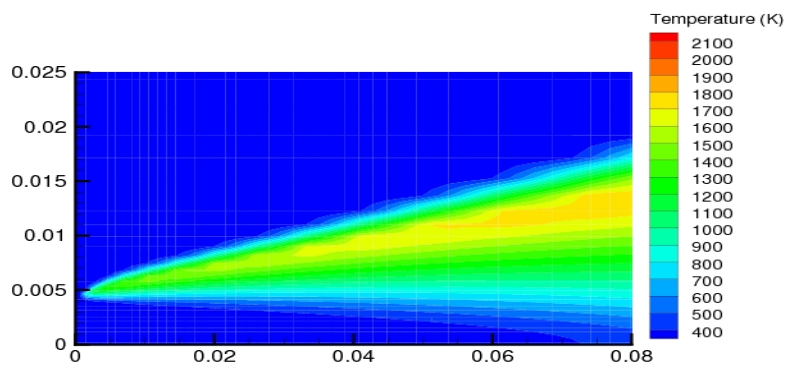


(b) Detaljert kjemi - temperatur.

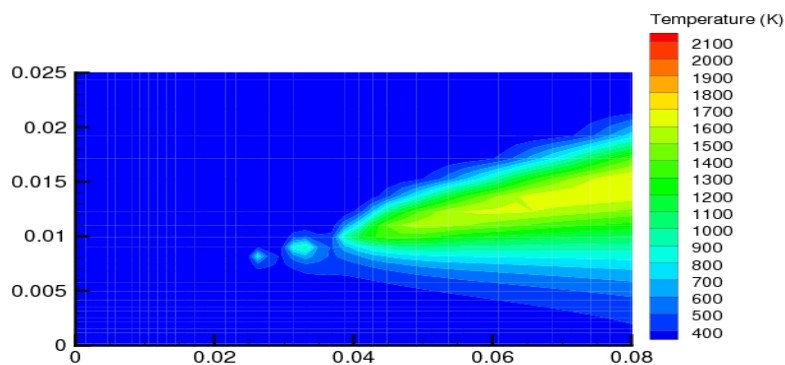


(c) Detaljert kjemi - massefraksjon av OH.

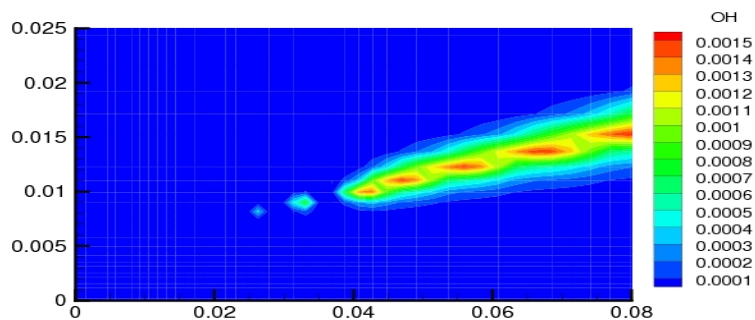
Figur 5.39: Konturplott av temperatur og massefraksjon av OH - CH₄-flamma.



(a) Uendeleg rask kjemi - temperatur.

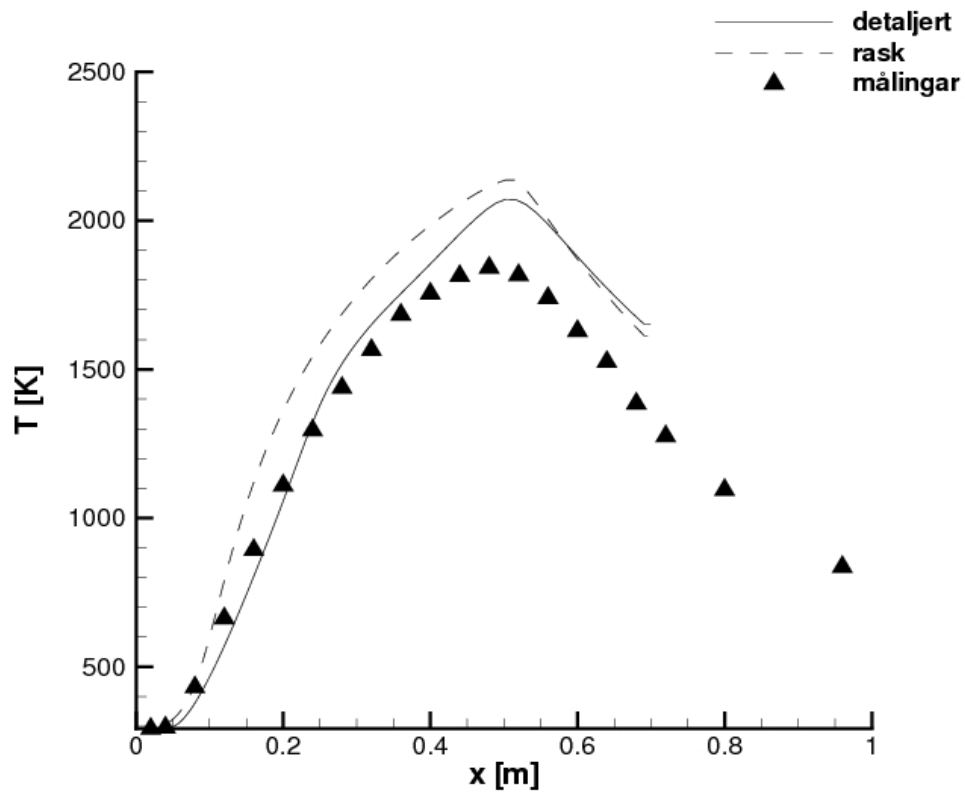


(b) Detaljert kjemi - temperatur.

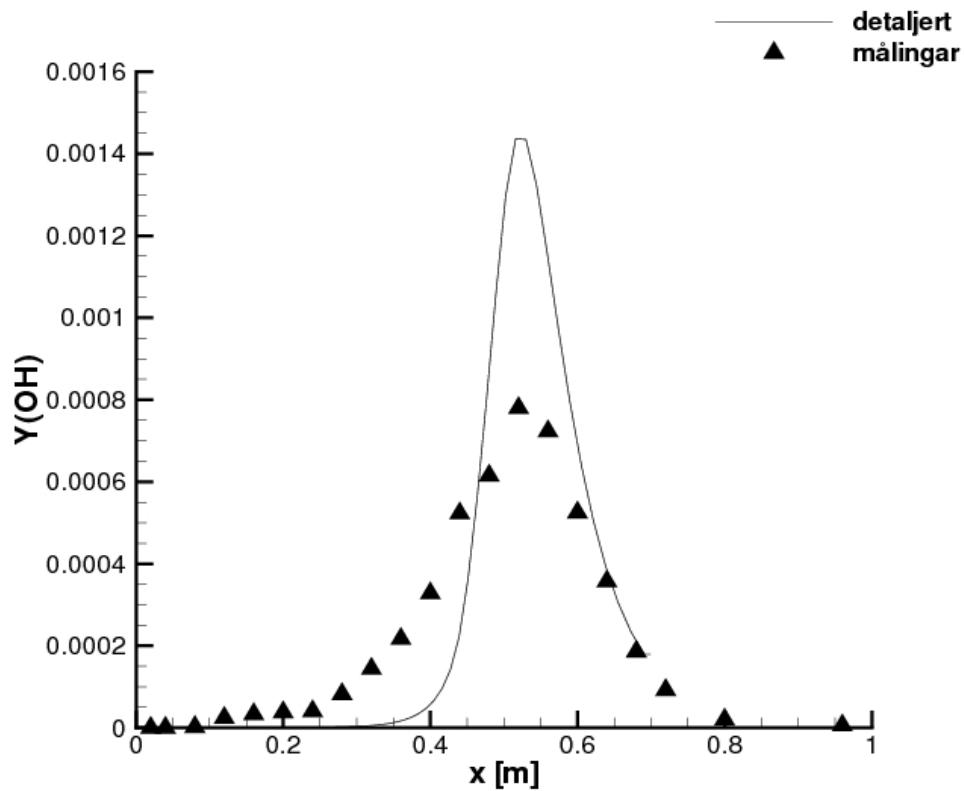


(c) Detaljert kjemi - massefraksjonen av OH.

Figur 5.40: Konturplott nær dysa - CH_4 -flamma.



(a) Temperatur.



(b) Massefraksjon av OH.

Figur 5.41: Aksielle profil (ved $r = 0$) - CH_4 -flamma.

Det kan sjå ut som at flammesona er noko tynnare i senter, og at OH vert raskare forbrukt når føresetnaden for reaksjon er der. Nett som for temperaturen, så ser det ikkje ut til at flamma er lyfta noko, sidan posisjonen der $Y_{\text{OH}} = 0,0006$ er omlag den same for simulering og måling. Skilnaden i temperaur mellom måling og detaljert (figur 5.41a) er liten før $x = 0,4$ m, trass i det tydelege avviket for OH-verdien.

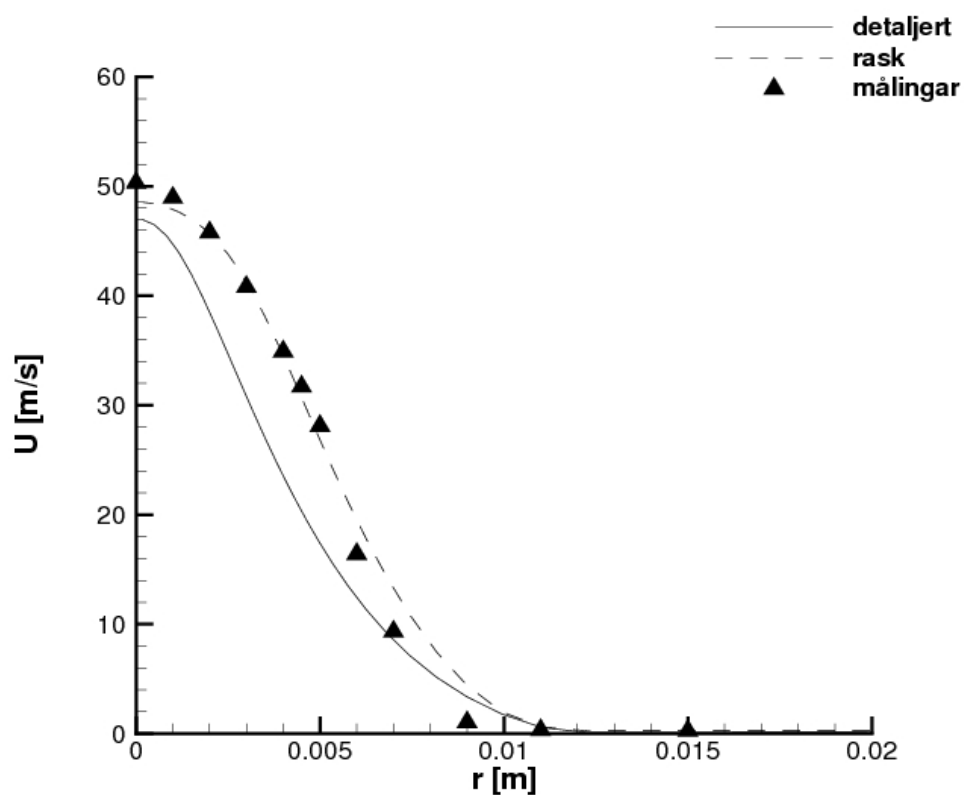
I det følgjande er det presentert resultat for nokre posisjonar i akseretninga. Figur 5.42 - 5.47 syner fart og turbulensenergi. Fram til $x/d = 20$ er det eit tydeleg avvik mellom måling og simulering, spesielt inne ved senterlinja, for U og k . Rask og målingar ligg omlag 13 m/s høgare enn detaljert for farta. For turbulensenergien er skilnad mellom detaljert og rask/måling stor fram mot $x/d = 60$. Spreiinga vert raskt overestimert frå utløpet av dysa med detaljert. Ved $x/d = 40$ har skilnaden mellom rask og detaljert vorte mykje mindre for farta, og ved $x/d = 80$ er dei nesten samanfallande. Det er verdt å merke seg skilnaden mellom $x/d = 5$ og $x/d = 10$ for turbulensenergien: I simuleringa med detaljert kjemi vert den kraftig redusert, og går frå å vere høgare enn målingar nærare senter til å verte mykje mindre. Denne veksande skilnaden held fram til $x/d = 20$. Den altfor låge turbulensenergien verkar ikkje inn på fartsfeltet ser det ut til, sidan farta vert meir og meir samanfallande for rask og detaljert.

Figur 5.48 - 5.53 syner temperatur og tettleik. For temperaturen er skilnaden mellom rask og detaljert stor inne ved dysa, mellom 1000 og 1200 K på det meste. Rask kjemi ligg nærast målingar her. Til lengre vekk frå utløpet, til mindre avvik er det mellom rask og detaljert. Avviket frå målingar derimot er veksande. Ved $x/d = 80$ er skilnaden omlag 600 K på det meste. Av profila er det tydeleg at temperaturen frå simuleringane er meir spreidd utover i radiell retning. Ved $x/d = 20$ er verdien på detaljert kjemi lågare enn målingar fram til ein viss radius, medan verdier frå rask er høgare heile vegen. Tettleiken følgjer skilnaden i temperatur slik den skal: Høgare temperatur gjev mindre tettleik, gassen ekspanderer og vert "lettare".

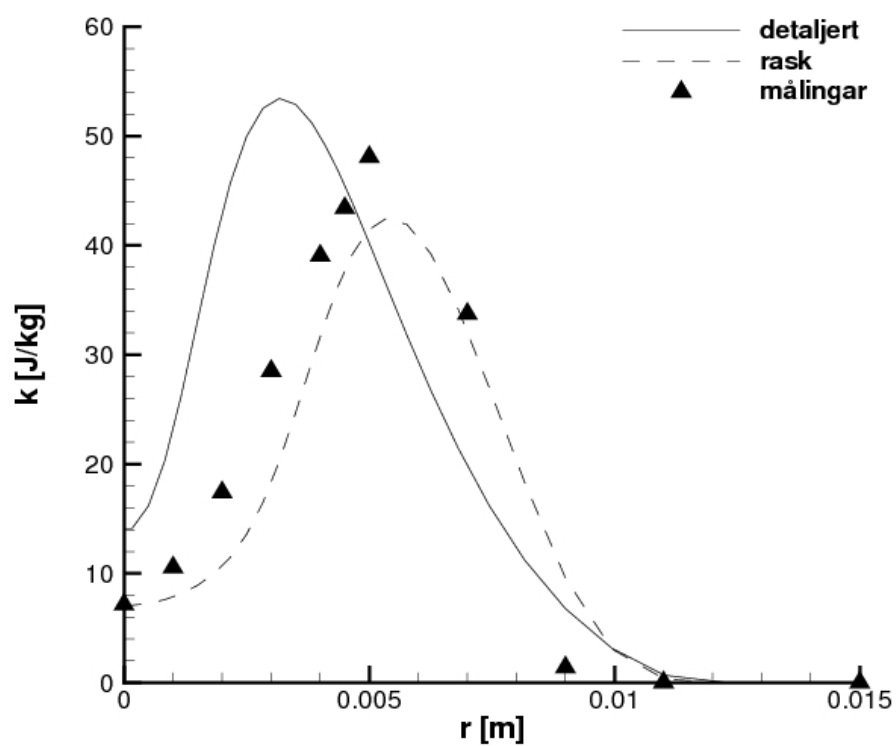
Figur 5.54 - 5.56 syner Y_{OH} . Inne ved dysa er maksimalverdien av OH lenger ute i radiell retning enn for målingane. Her er massefraksjonen noko mindre, men lenger ute i akseretninga veks den, og vert større enn måleverdiane. Fram mot $x/d = 40$ er skilnaden i maksimalverdiane mellom målingar og detaljert veksande, og maksimalverdien er noko lenger ute i radiell retning enn målingar. Etter $x/d = 40$ kjem toppane nærare kvarandre.

Figur 5.57 - 5.62 syner massefraksjonen av hydrogen og metan for ulike posisjonar. Figur 5.57 syner målingar og rask ved $x/d = 5$, medan for detaljert er det plotta frå lenger inn mot dysa. Av figuren er det tydeleg at ved detaljert vert både hydrogen og metan spreidd raskare i radiell retning, enn måling og rask. Ved $x/d = 10$ har mengda metan minka noko raskare for detaljert enn dei andre. Både hydrogen og metan er meir spreidd i dette området. Det ser ut til at det er noko meir metan ved rask enn målingar her, og kanskje litt meir hydrogen og. Ved $x/d = 20$ er det tydeleg at mengda med hydrogen har minka ein del ved rask, og det ser ut til å ha minka meir enn ved detaljert.

Her er det noko meir metan ved rask enn målingar, medan detaljert har noko mindre. Ved $x/d = 40$ har mengda med metan og hydrogen vorte mykje redusert ved detaljert. Framleis er det meir brensel ved rask her enn målingar, og skilnaden er større enn lenger oppstraum. Ved $x/d = 60$ er det framleis igjen brensel ved rask, medan mengda ved detaljert er nær null. Skilnaden mellom rask og detaljert er stor frå $x/d = 20$.

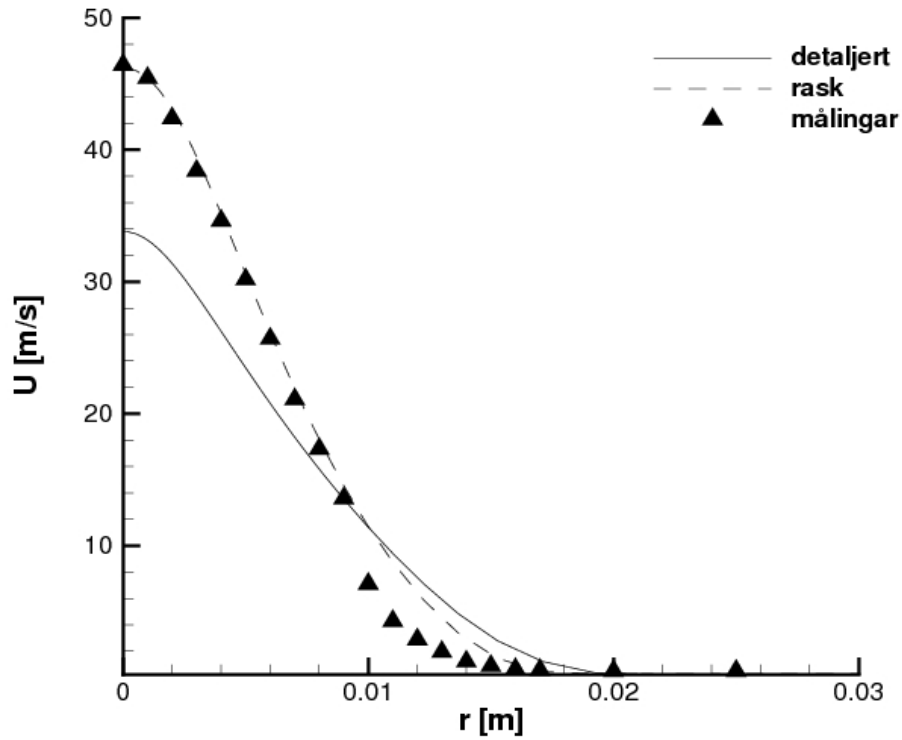


(a) Fart i x-retning.

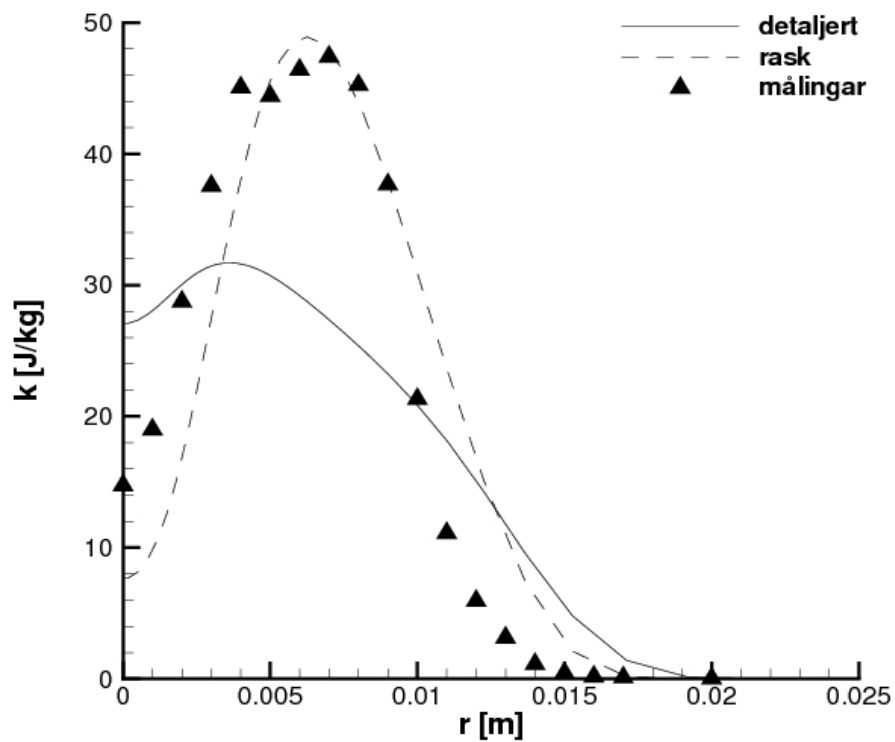


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.42: Samanlikning av verdier ved $x/d = 5$ - CH_4 -flamma.

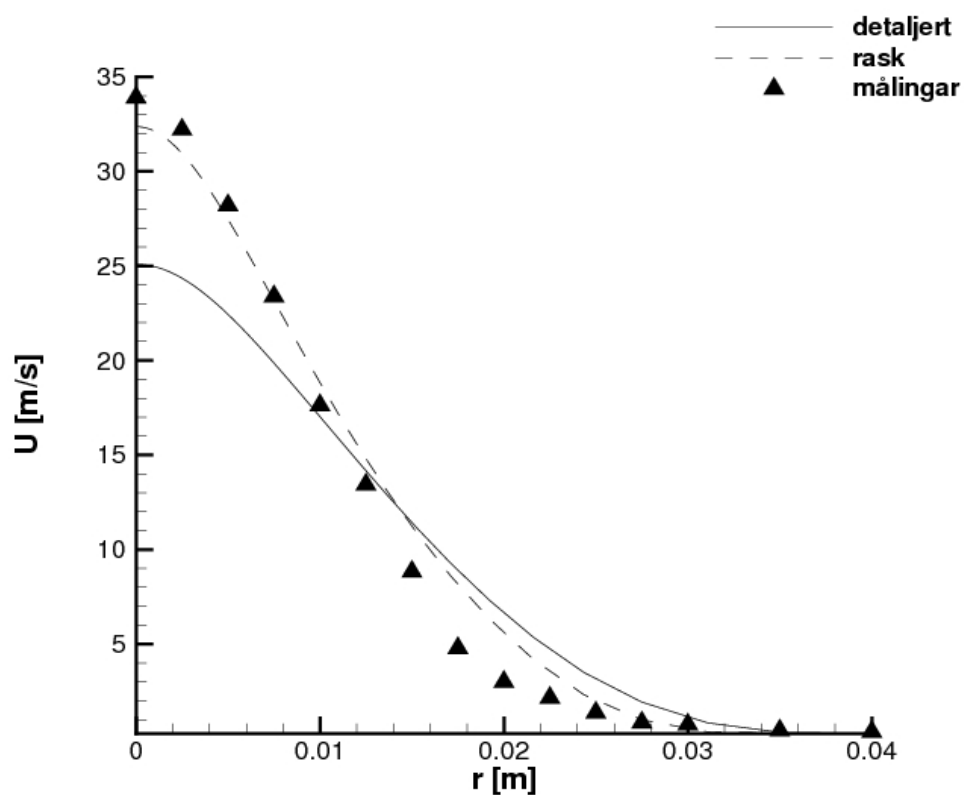


(a) Fart i x-retning.

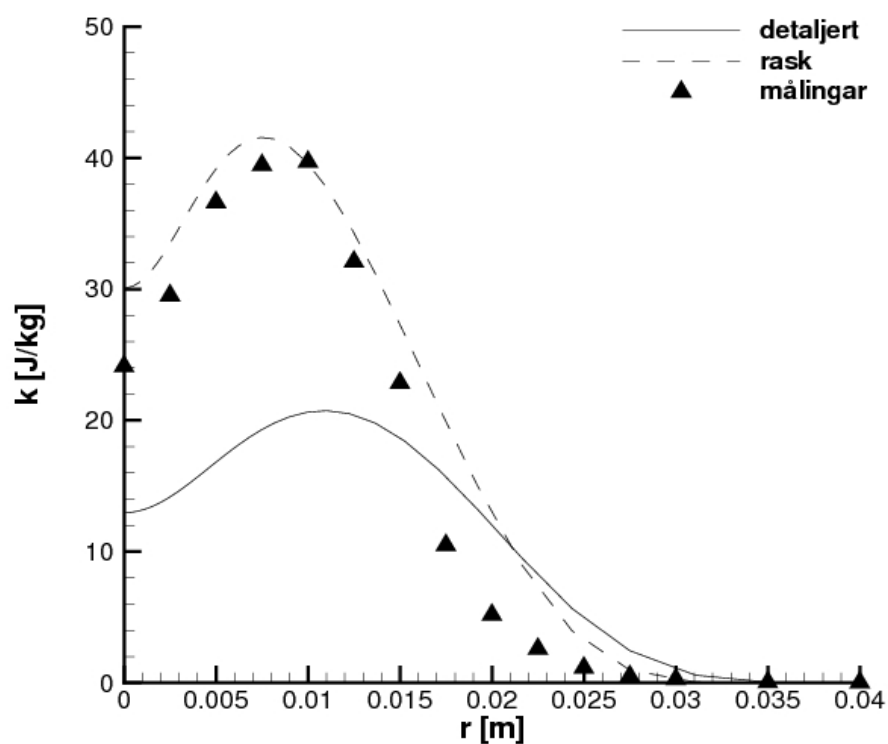


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.43: Samanlikning av verdiar ved $x/d = 10$ - CH_4 -flamma.

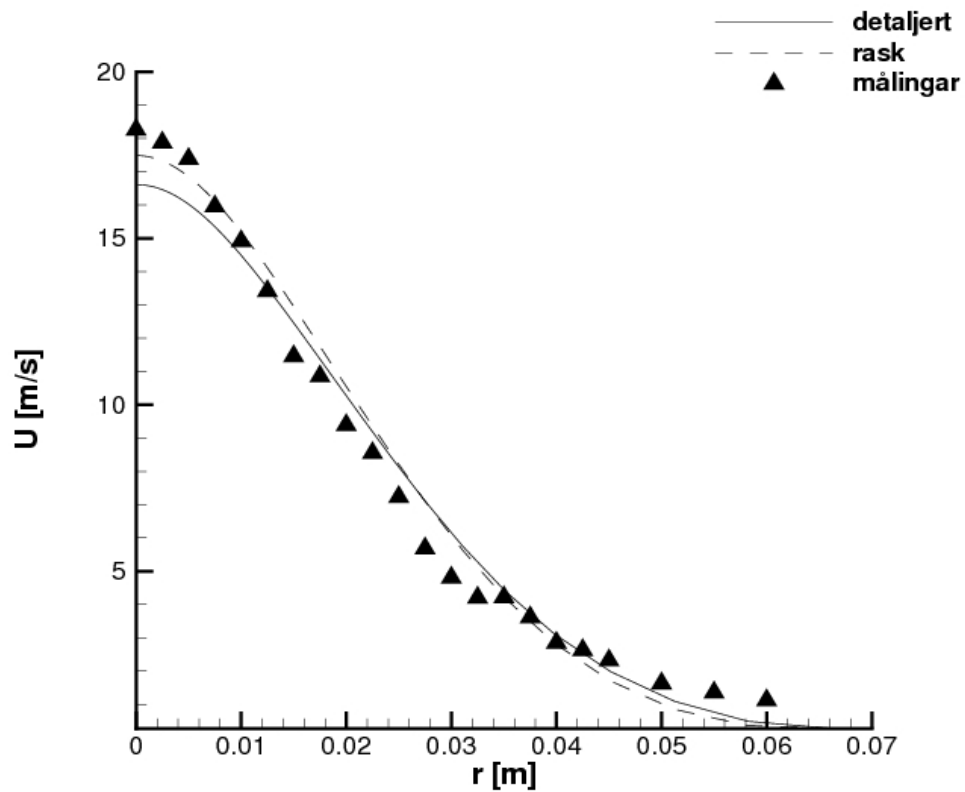


(a) Fart i x-retning.

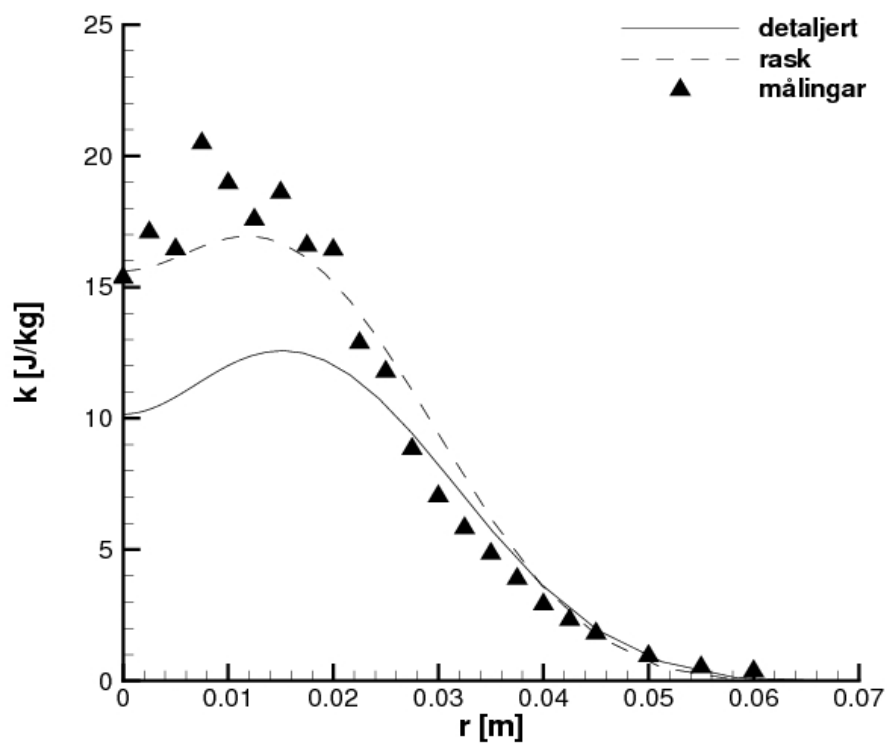


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.44: Samanlikning av verdiar ved $x/d = 20$ - CH_4 -flamma.

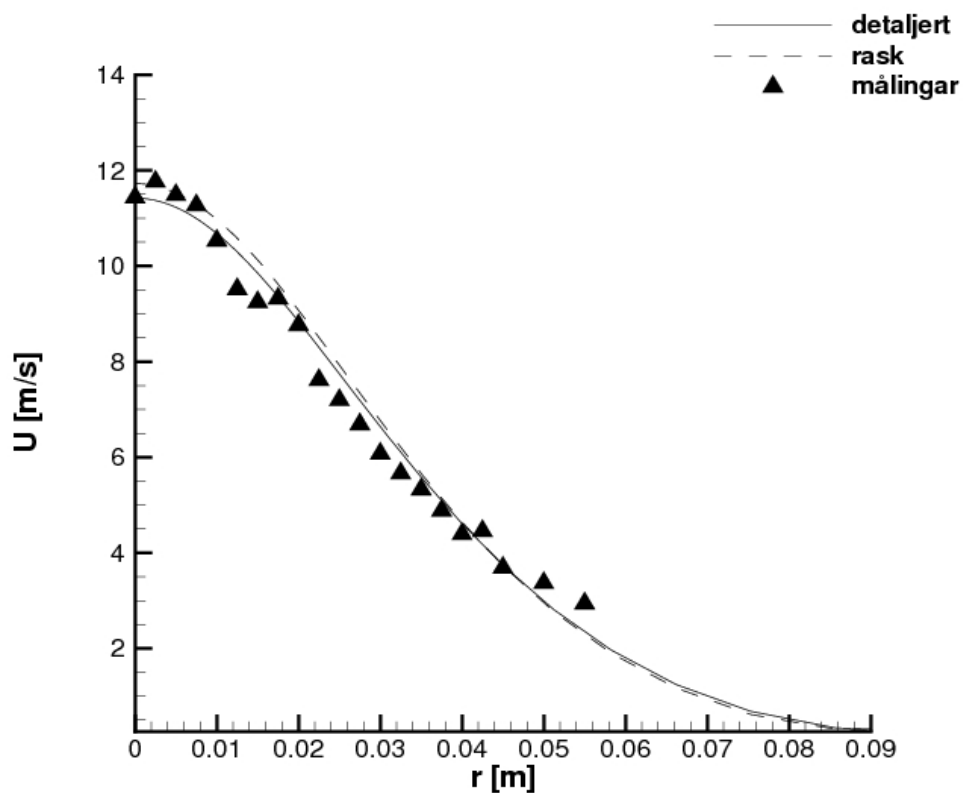


(a) Fart i x-retning.

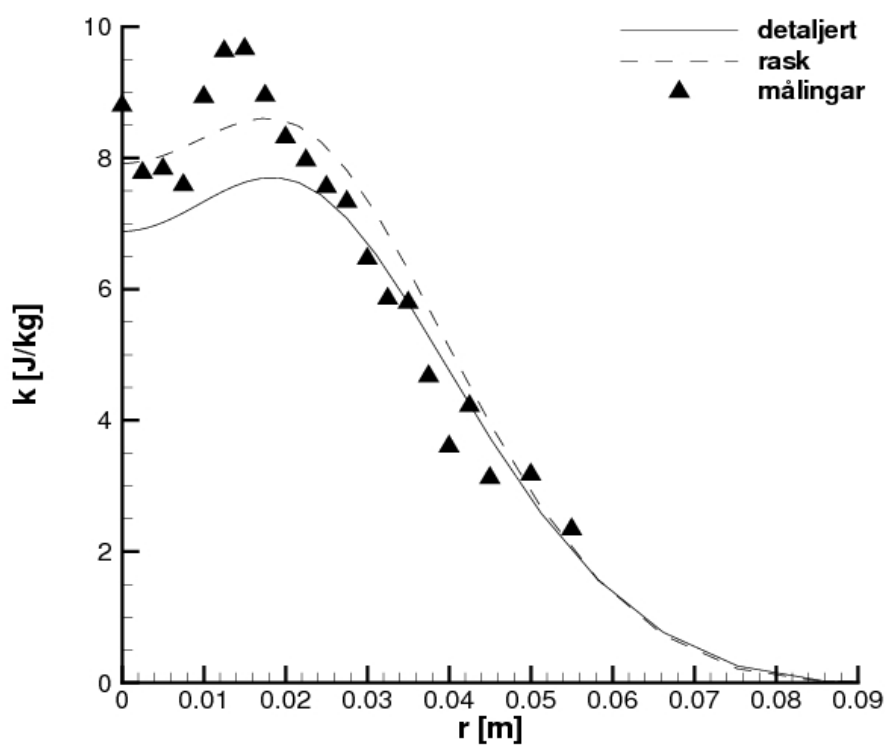


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.45: Samanlikning av verdier ved $x/d = 40$ - CH_4 -flamma.

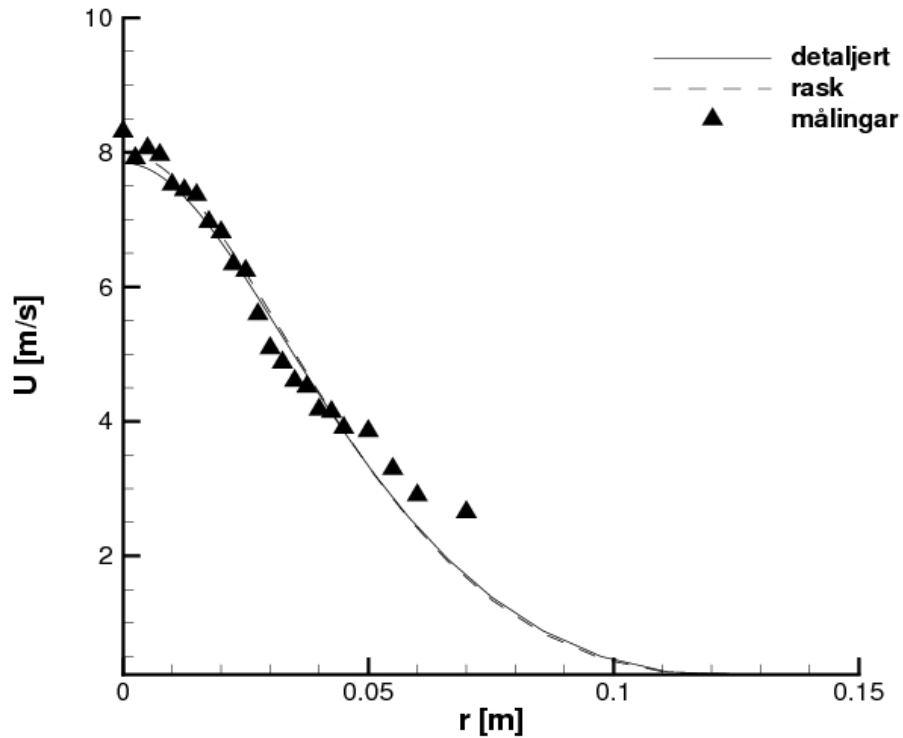


(a) Fart i x-retning.

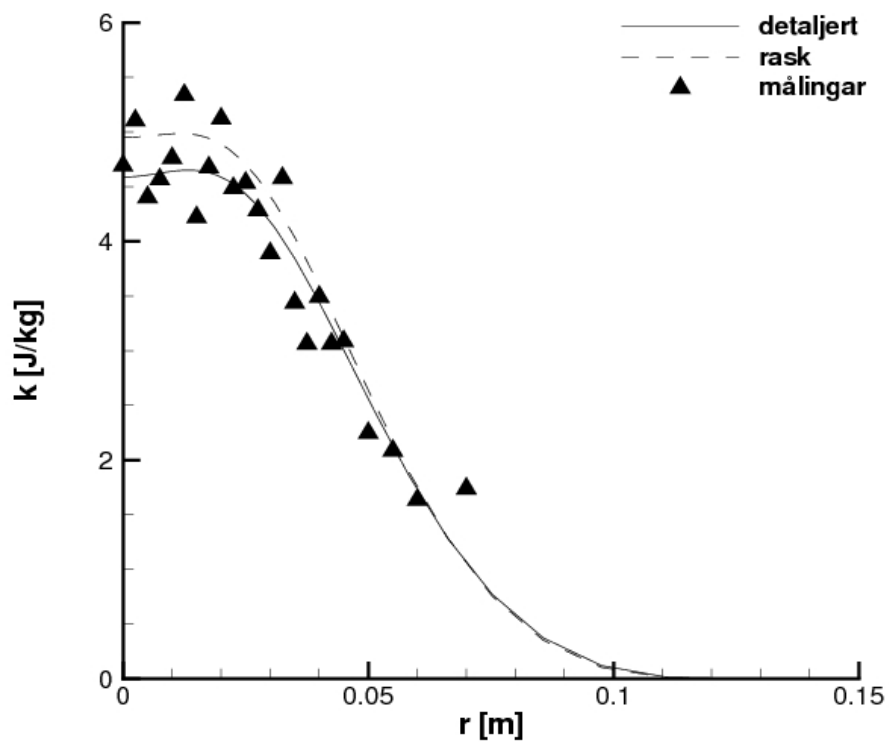


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.46: Samanlikning av verdiar ved $x/d = 60$ - CH_4 -flamma.

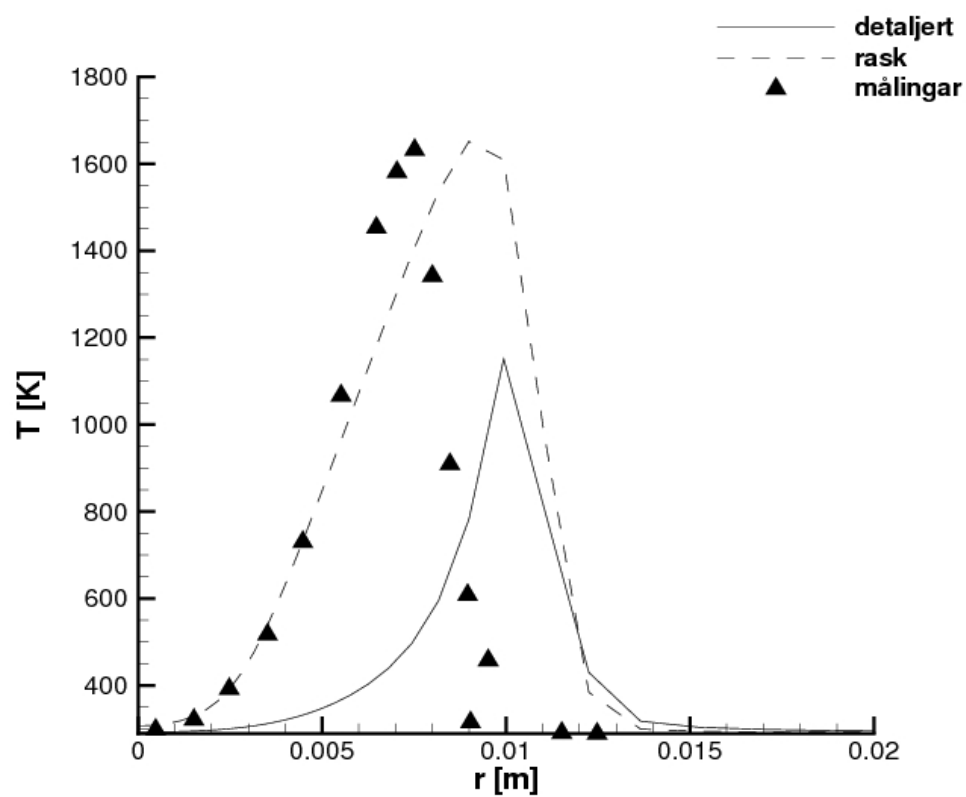


(a) Fart i x-retning.

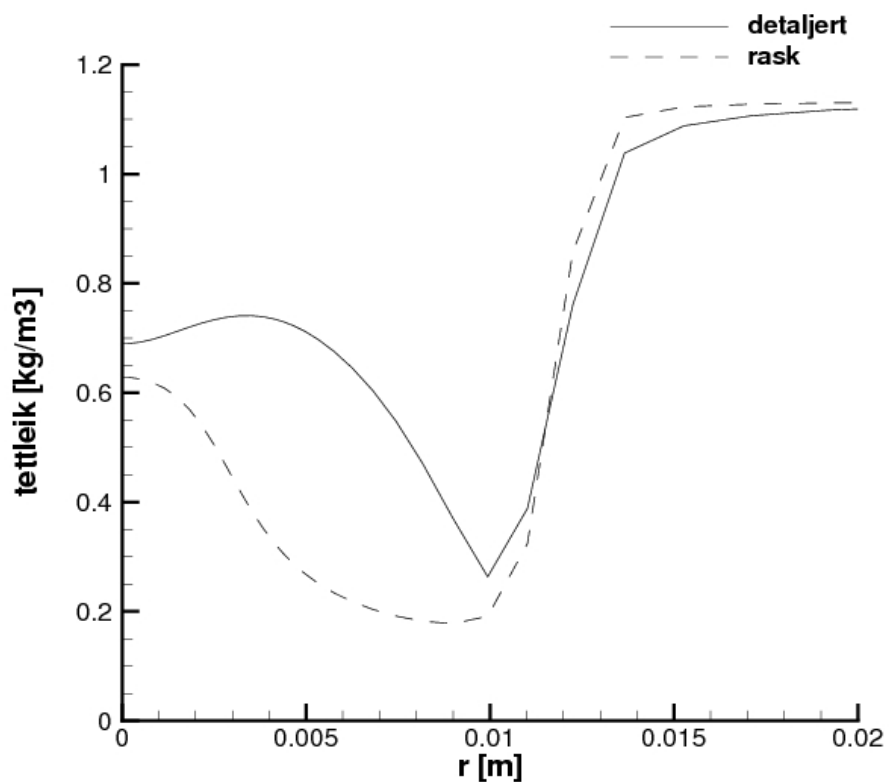


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.47: Samanlikning av verdier ved $x/d = 80$ - CH_4 -flamma.

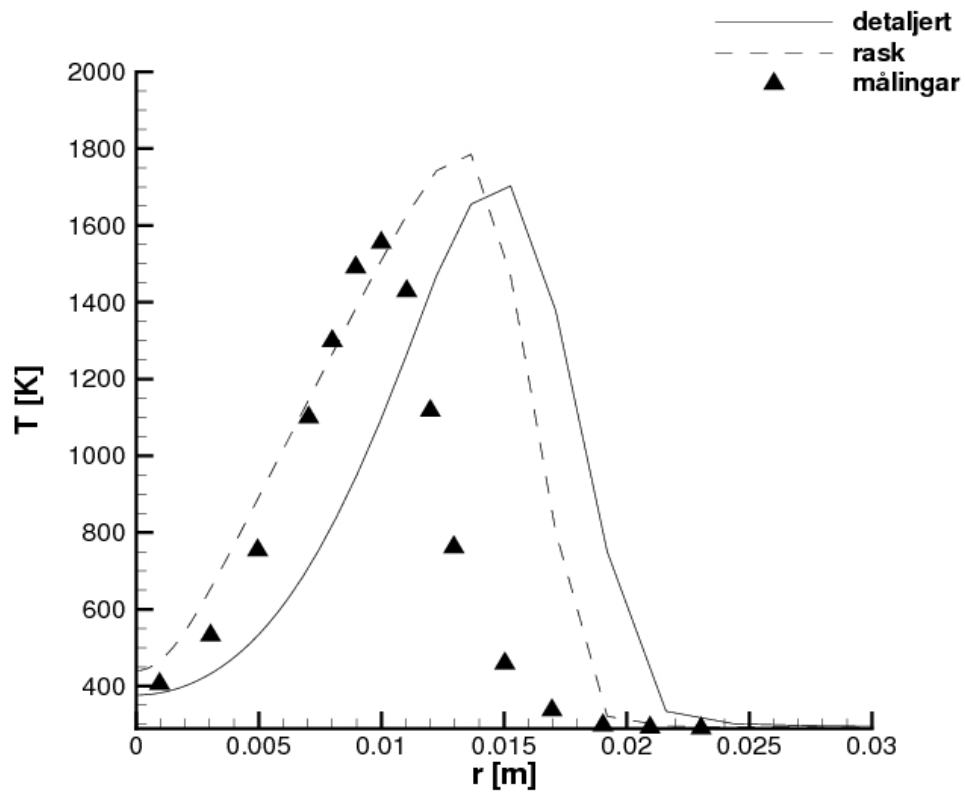


(a) Temperatur.

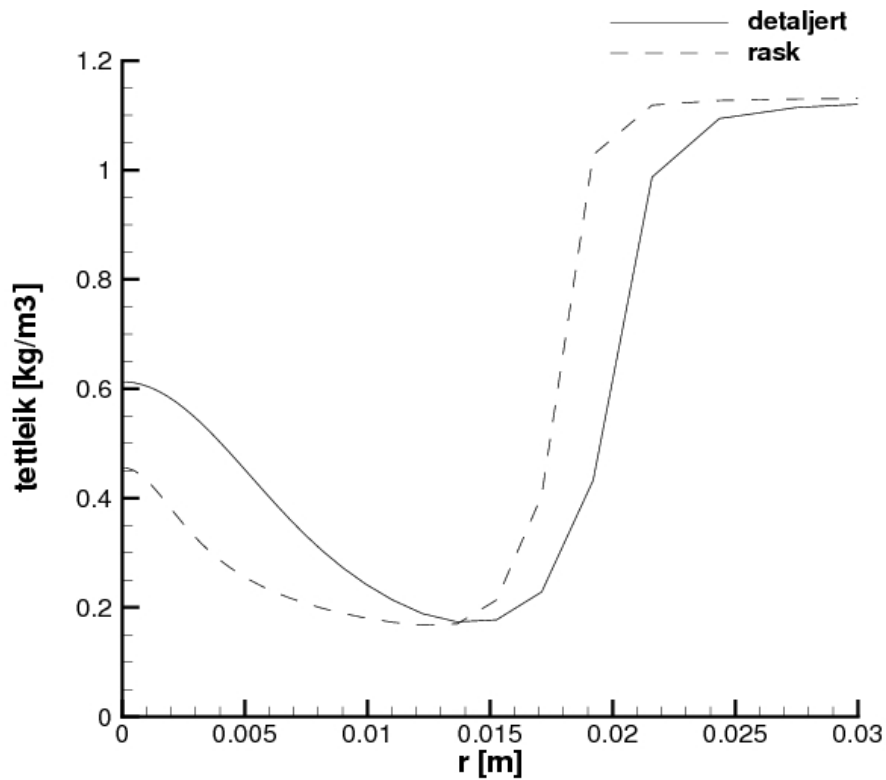


(b) Tettleik.

Figur 5.48: Samanlikning av verdier ved $x/d = 5$ - CH_4 -flamma.

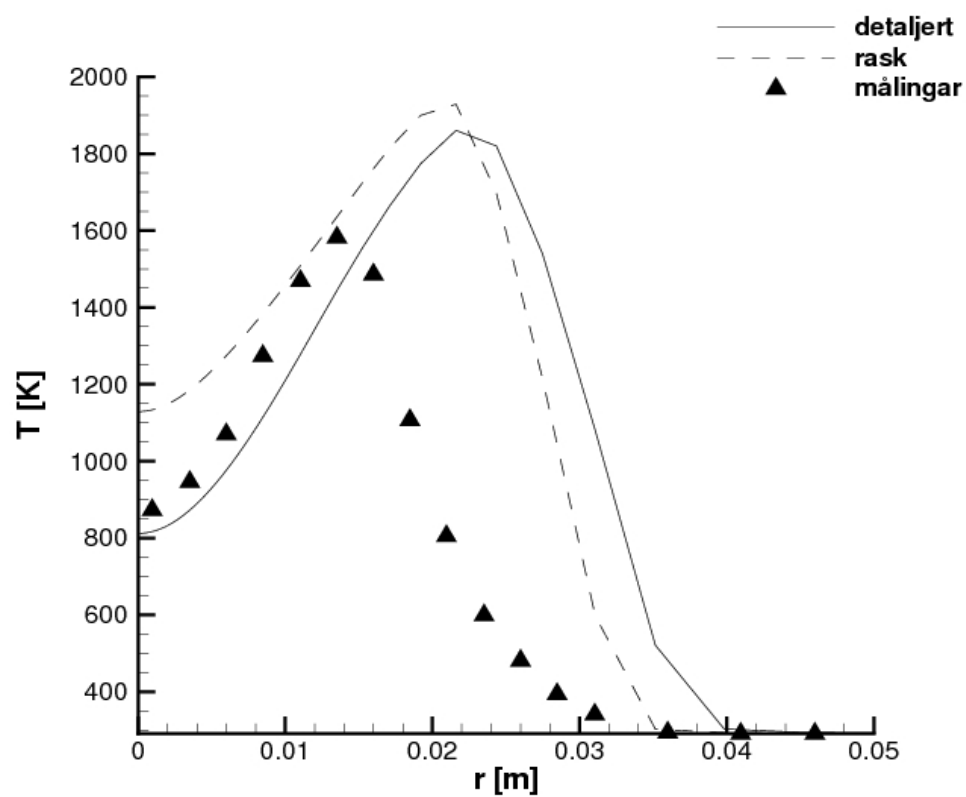


(a) Temperatur.

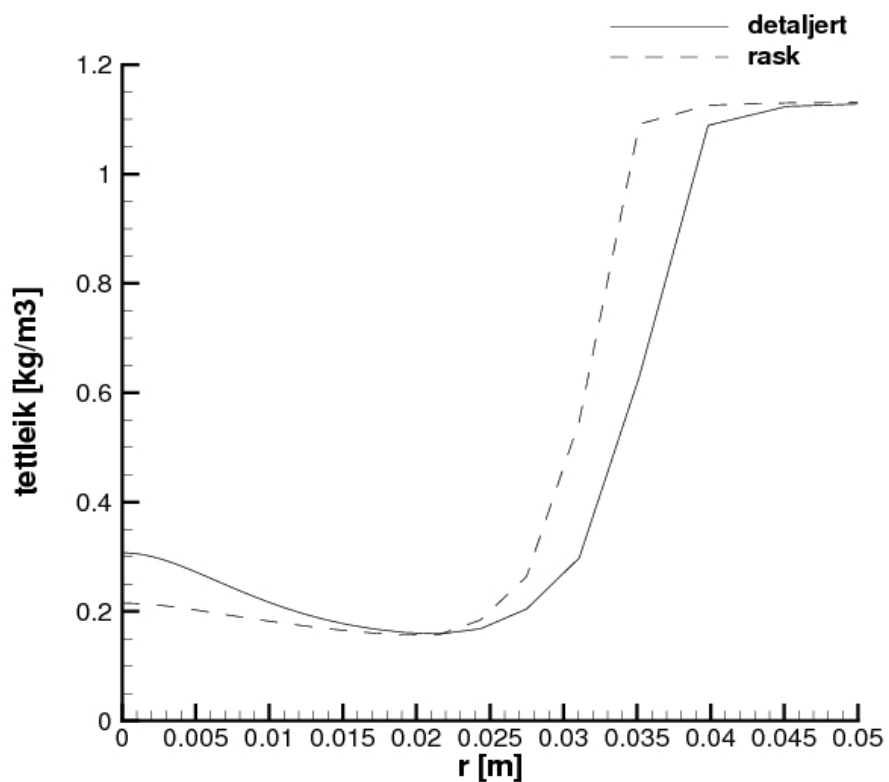


(b) Tettleik.

Figur 5.49: Samanlikning av verdier ved $x/d = 10$ - CH_4 -flamma.

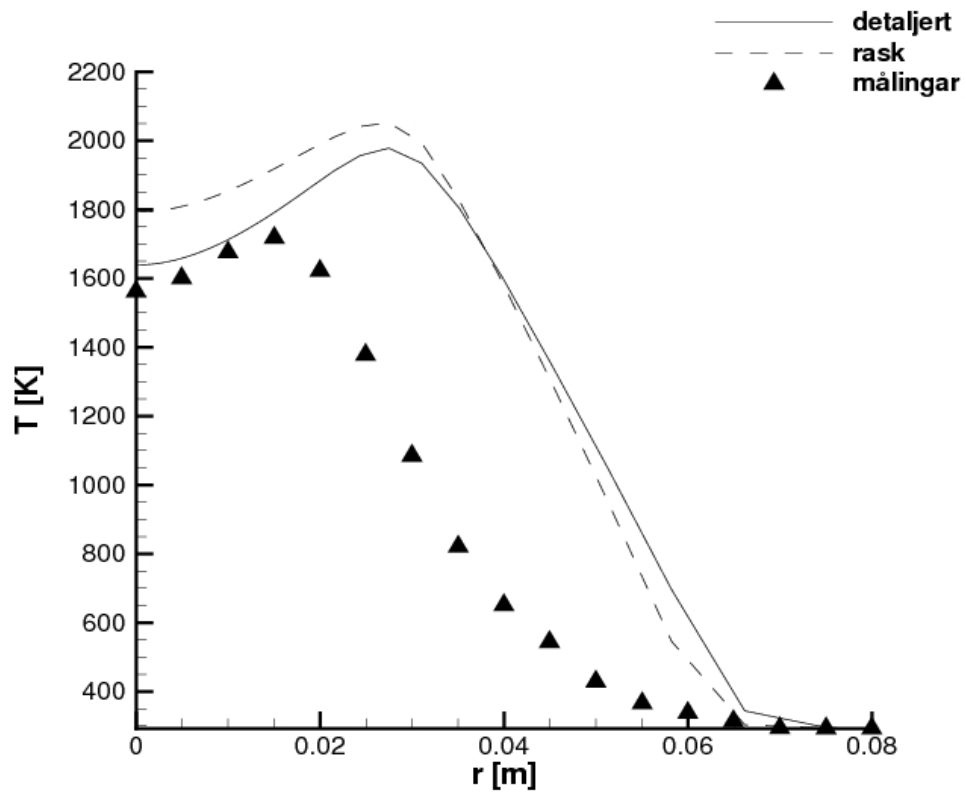


(a) Temperatur.

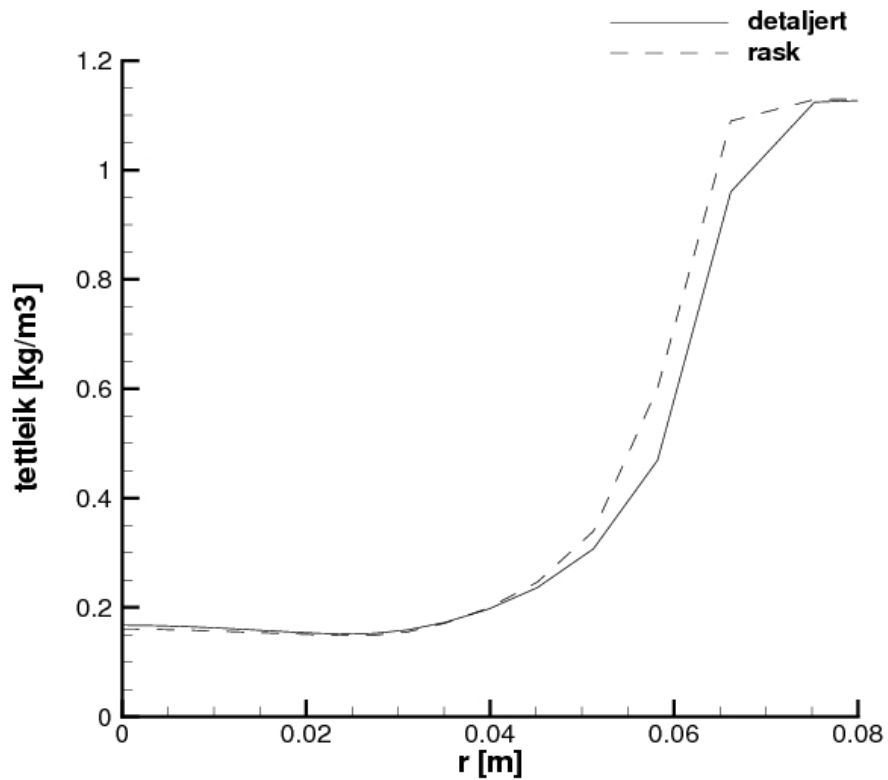


(b) Tettleik.

Figur 5.50: Samanlikning av verdiar ved $x/d = 20$ - CH_4 -flamma.

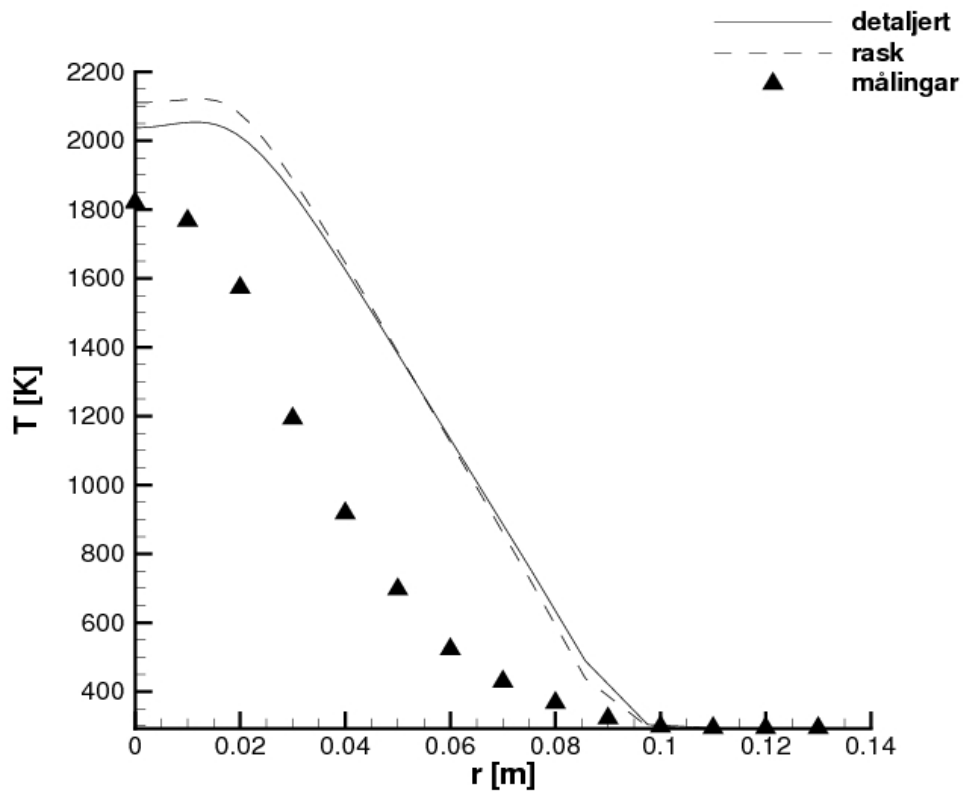


(a) Temperatur.

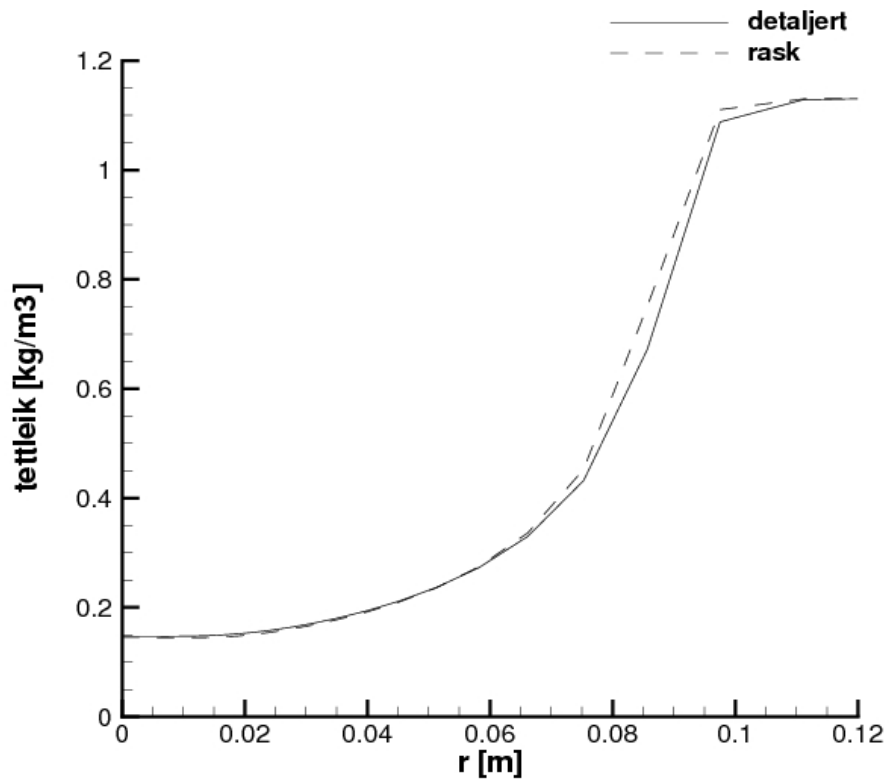


(b) Tettleik.

Figur 5.51: Samanlikning av verdier ved $x/d = 40$ - CH_4 -flamma.

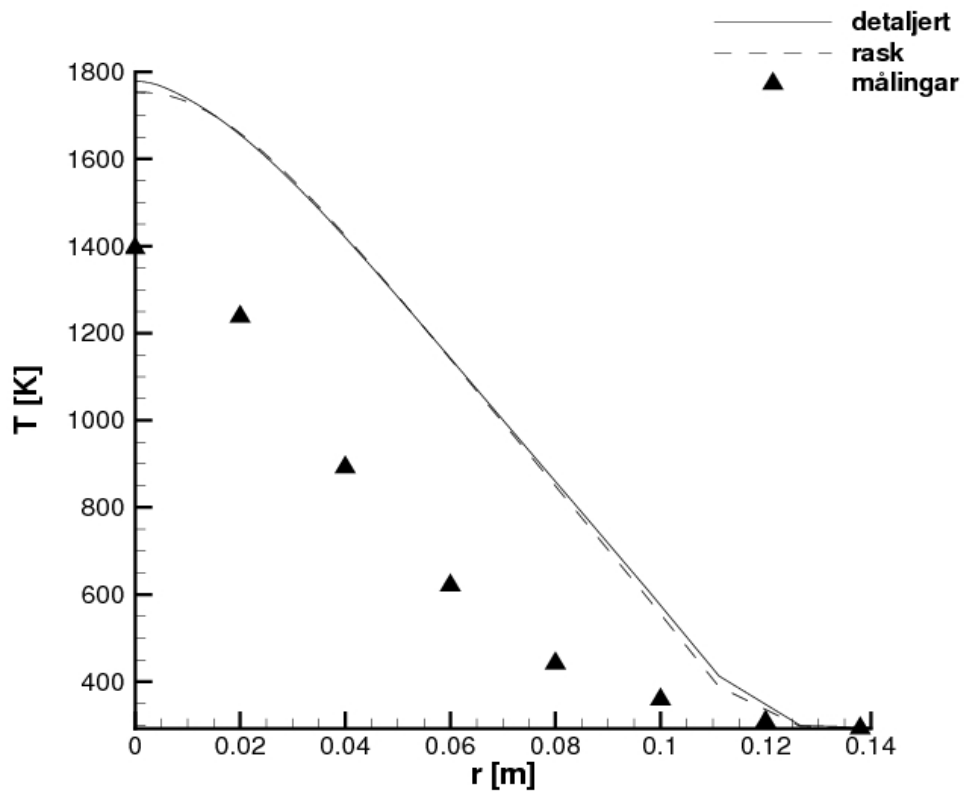


(a) Temperatur.

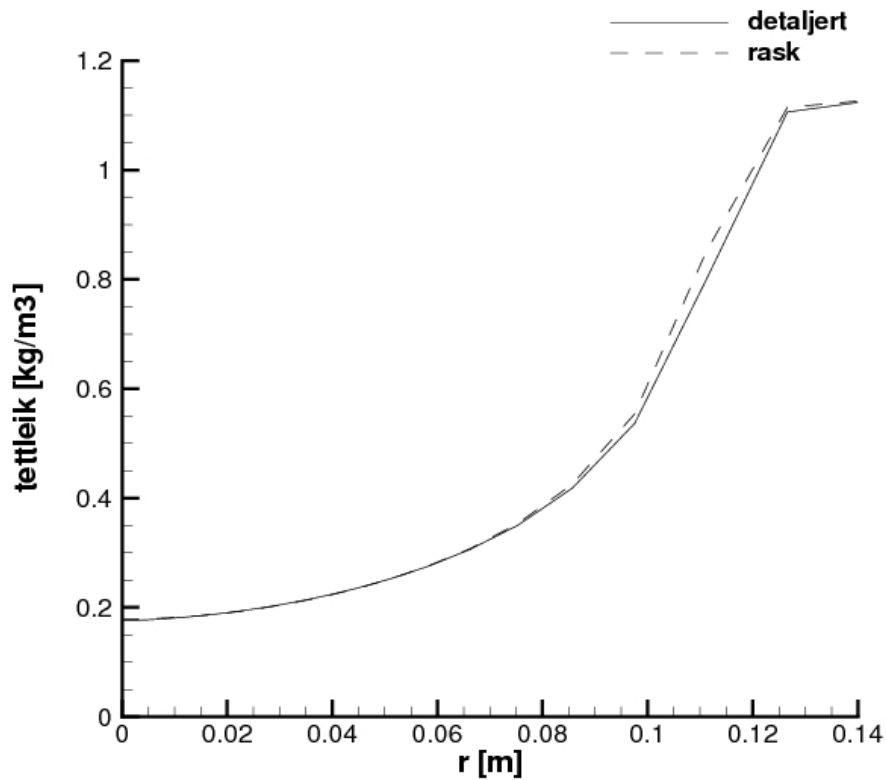


(b) Tettleik.

Figur 5.52: Samanlikning av verdiar ved $x/d = 60$ - CH_4 -flamma.

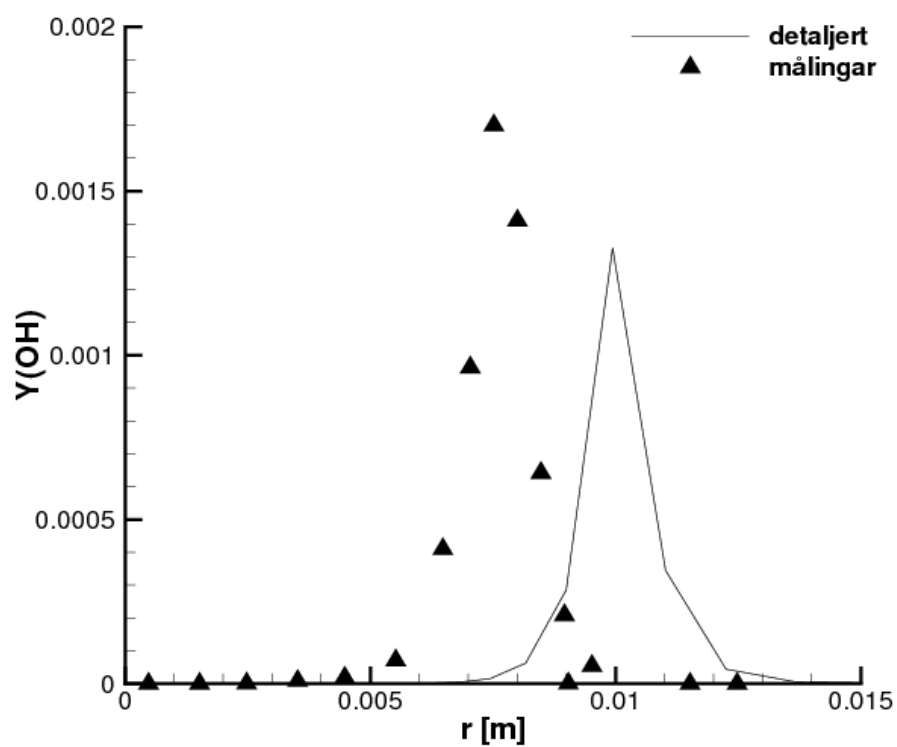
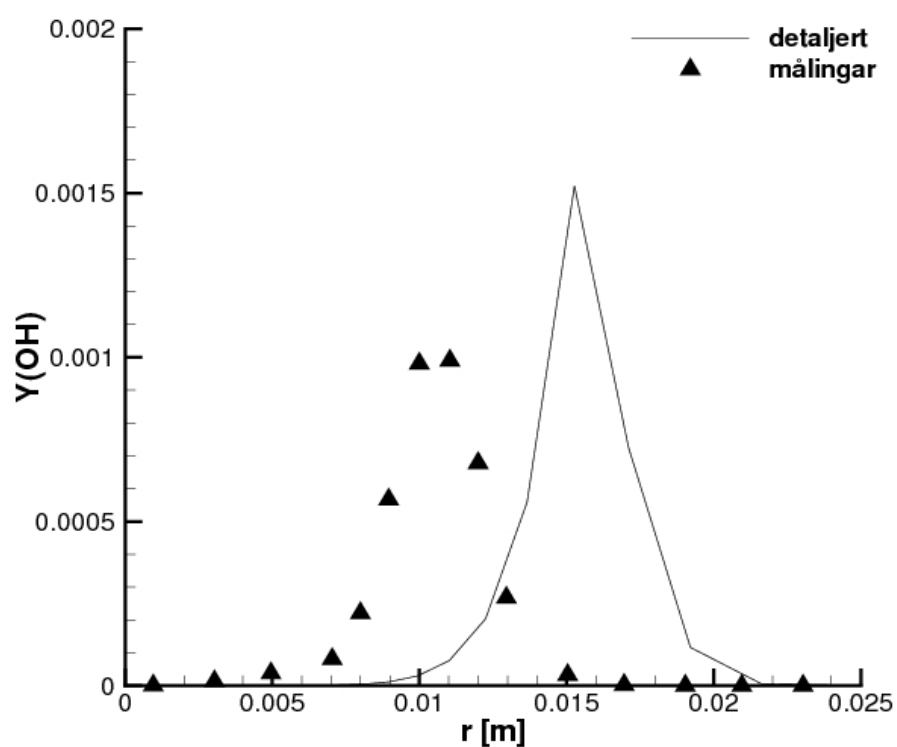


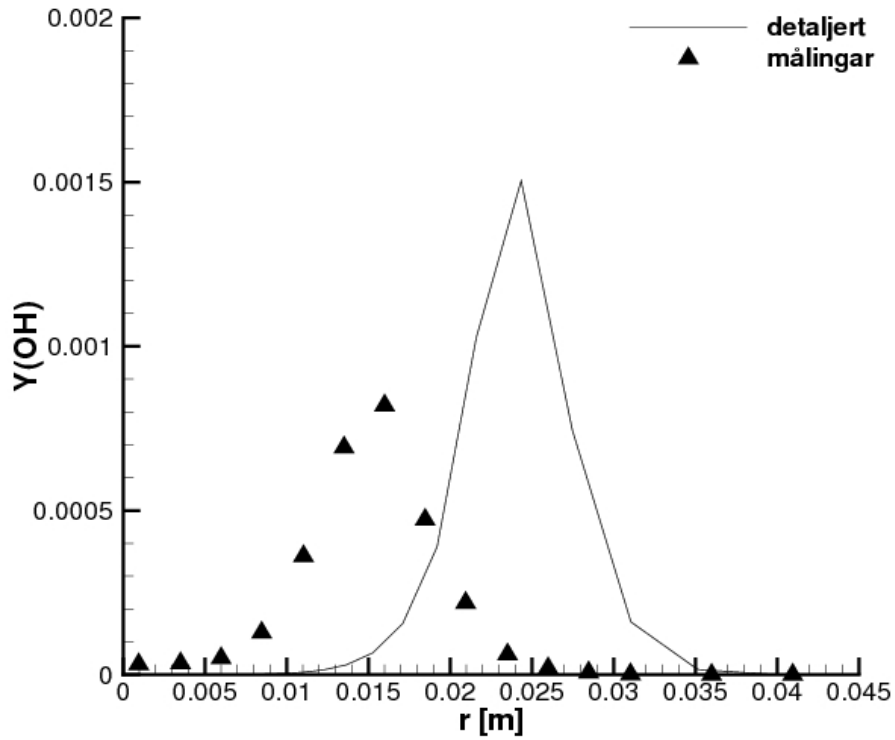
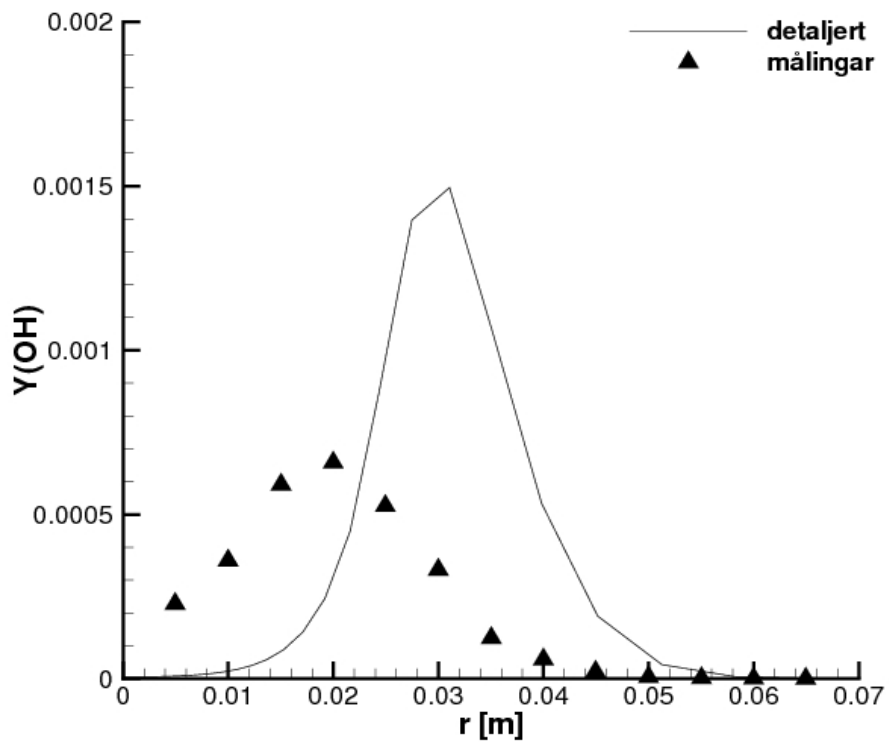
(a) Temperatur.

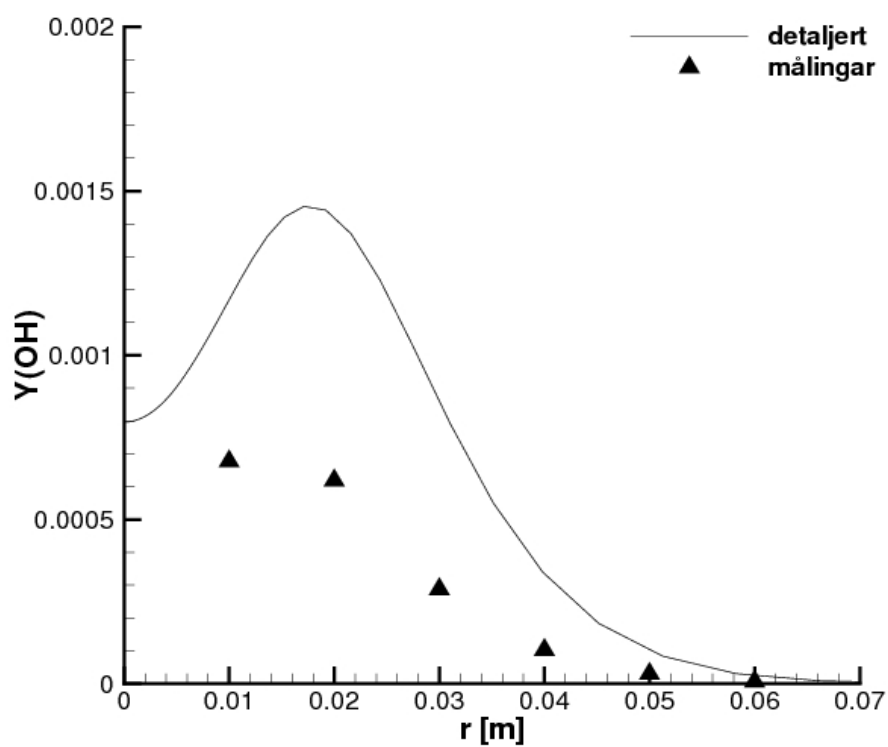
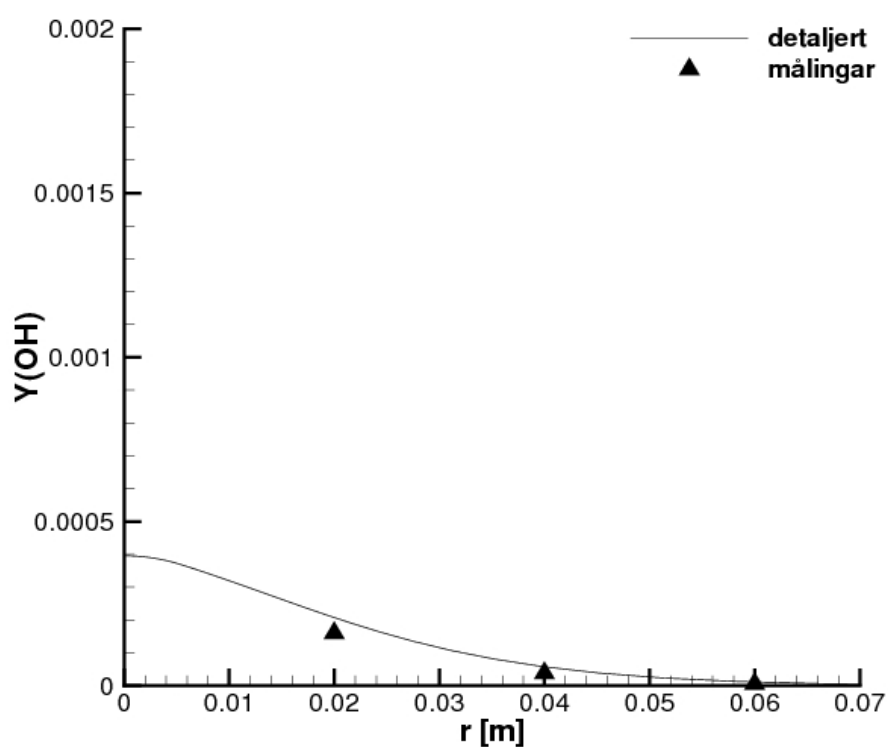


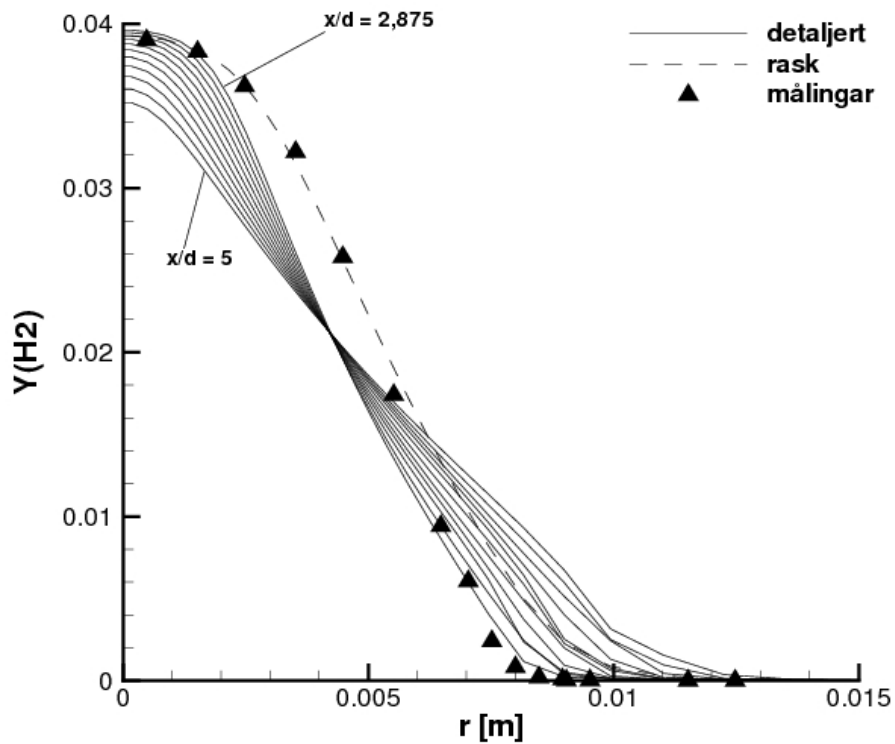
(b) Tettleik.

Figur 5.53: Samanlikning av verdier ved $x/d = 80$ - CH₄-flamma.

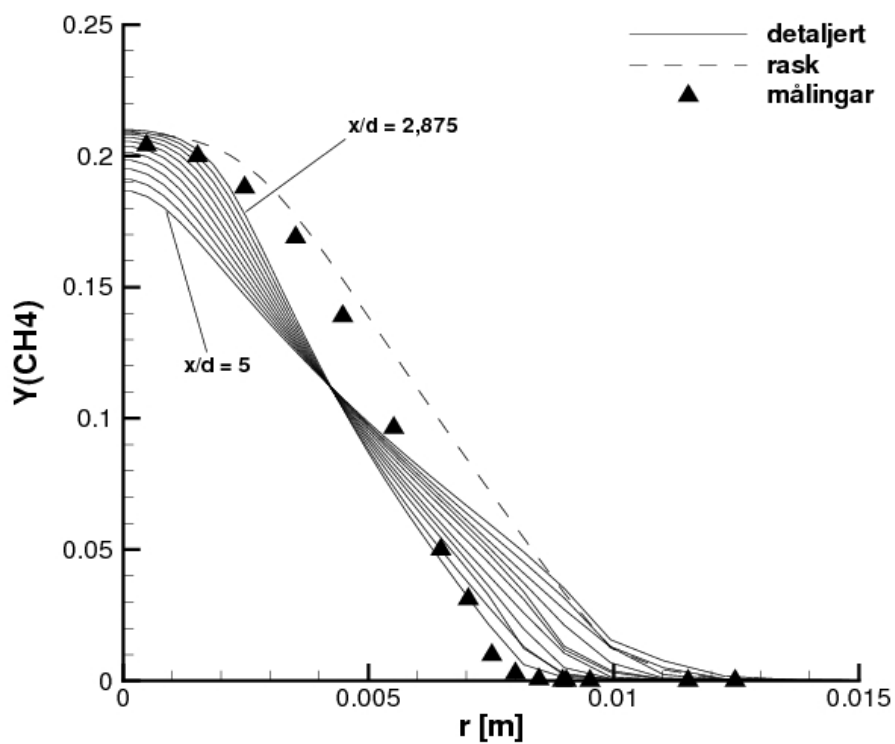
(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.**Figur 5.54:** Samanlikning av verdier - CH_4 -flamma. Massefraksjon av OH.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.**Figur 5.55:** Samanlikning av verdier - CH_4 -flamma. Massefraksjon av OH.

(a) $x/d = 60$.(b) $x/d = 80$.**Figur 5.56:** Samanlikning av verdiar - CH_4 -flamma. Massefraksjon av OH.

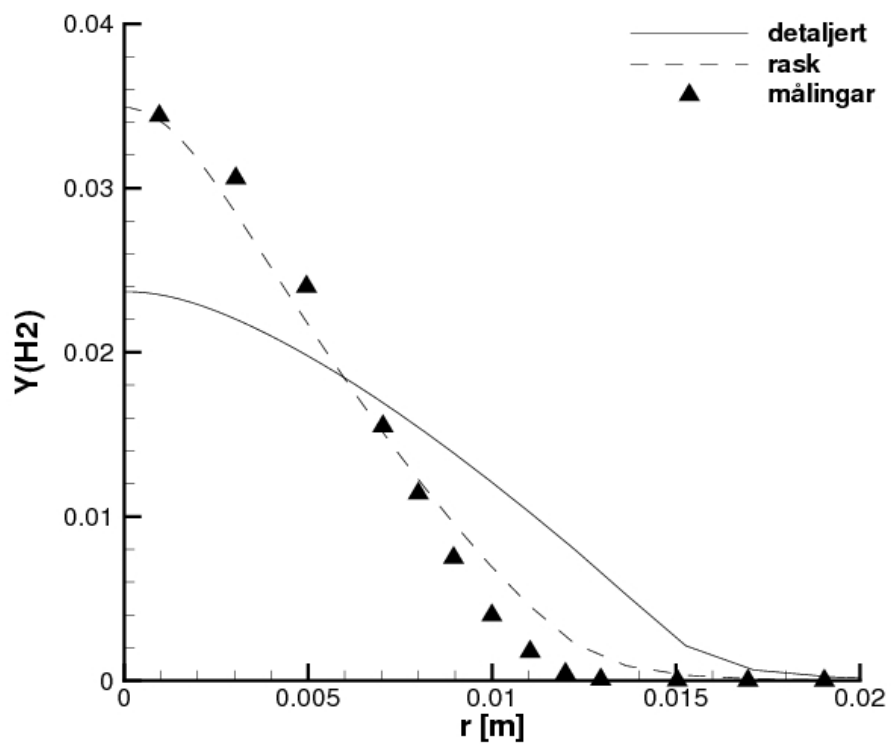


(a) Hydrogen.

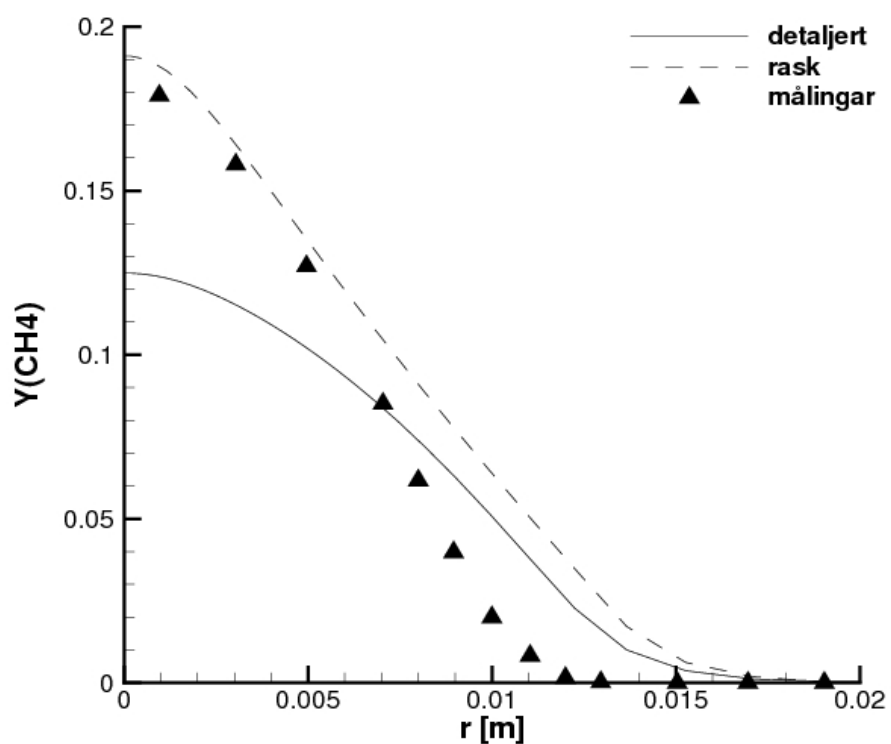


(b) Metan.

Figur 5.57: Samanlikning av verdier ved $x/d = 5$ - CH_4 -flamma.

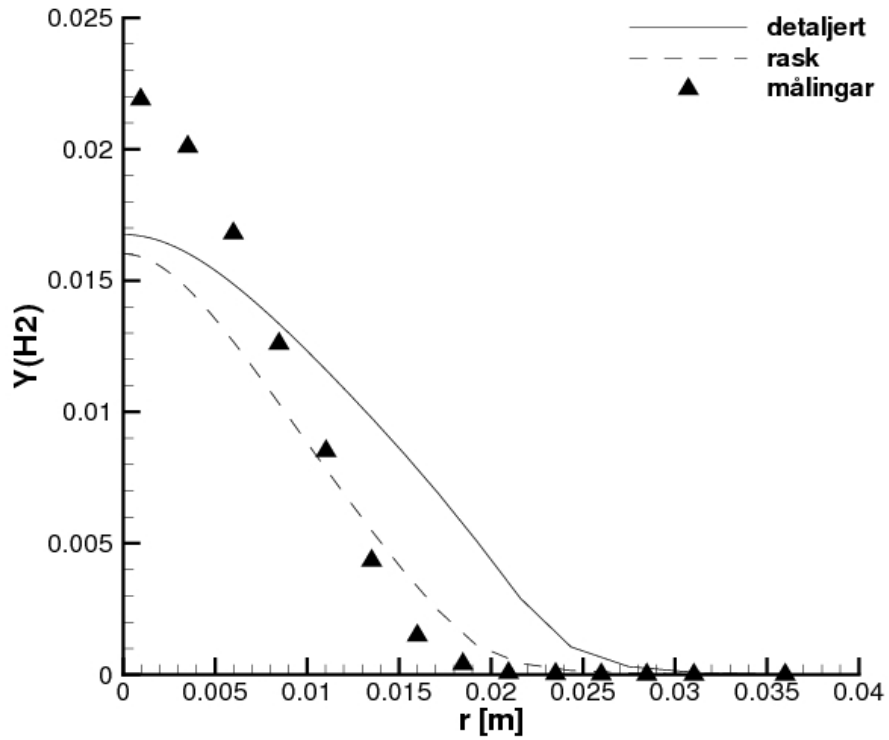


(a) Hydrogen.

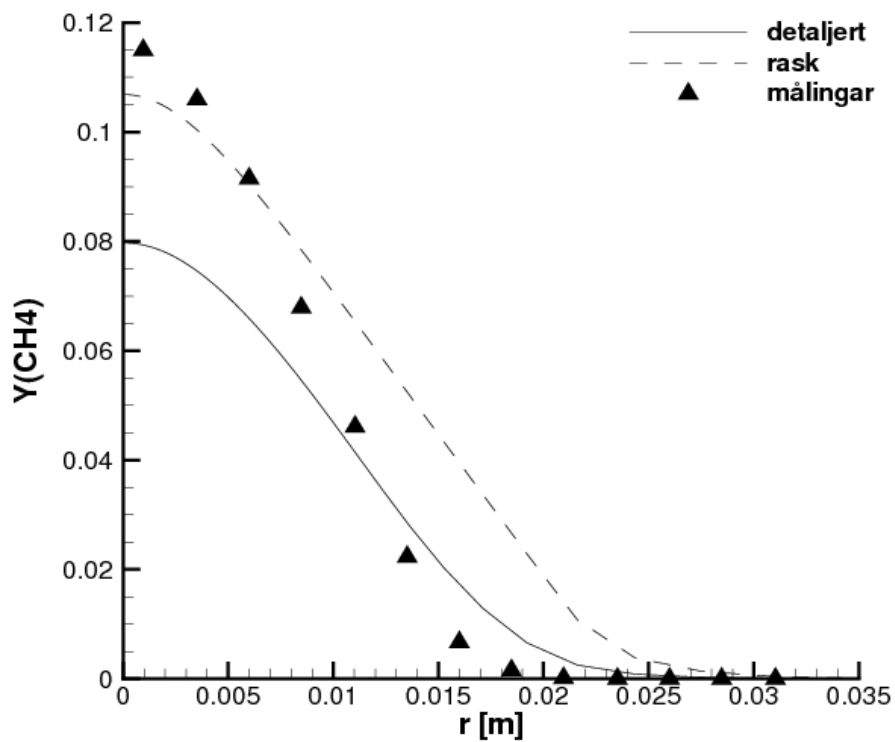


(b) Metan.

Figur 5.58: Samanlikning av verdier ved $x/d = 10$ - CH_4 -flamma.

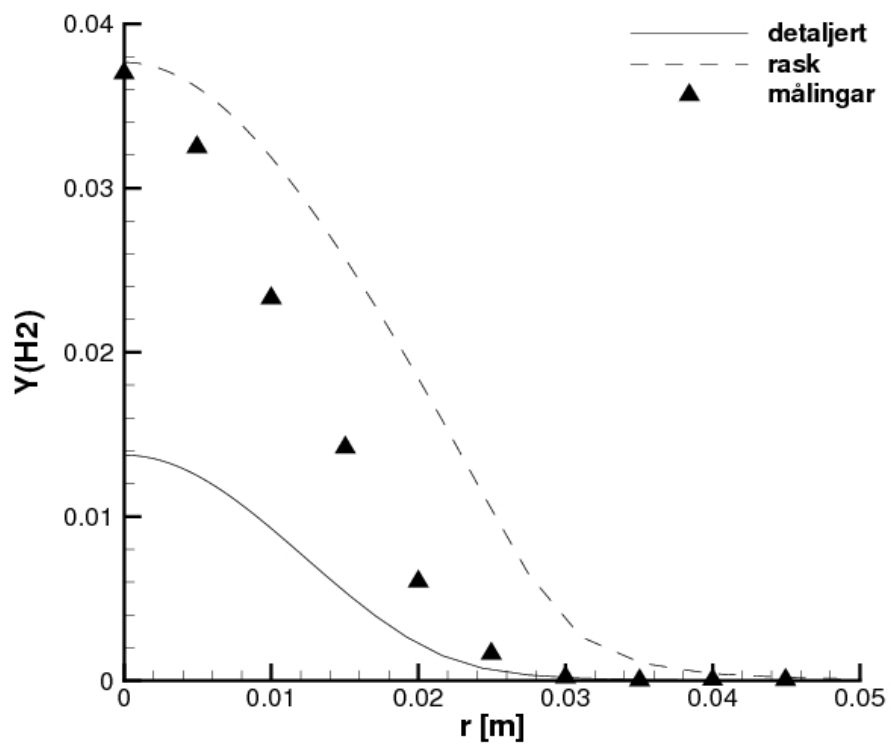


(a) Hydrogen.

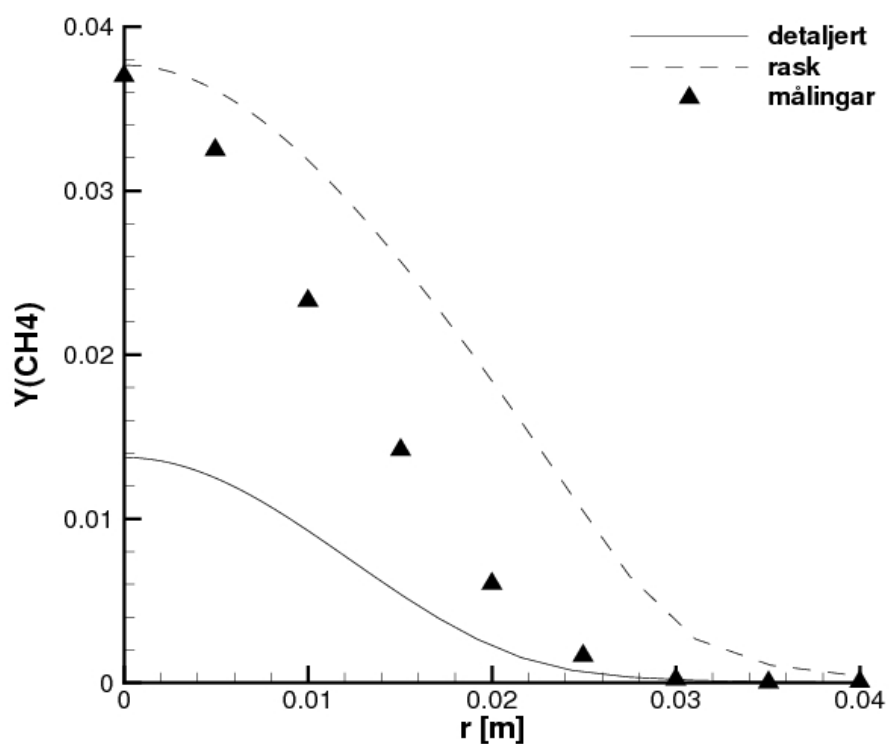


(b) Metan.

Figur 5.59: Samanlikning av verdier ved $x/d = 20$ - CH_4 -flamma.

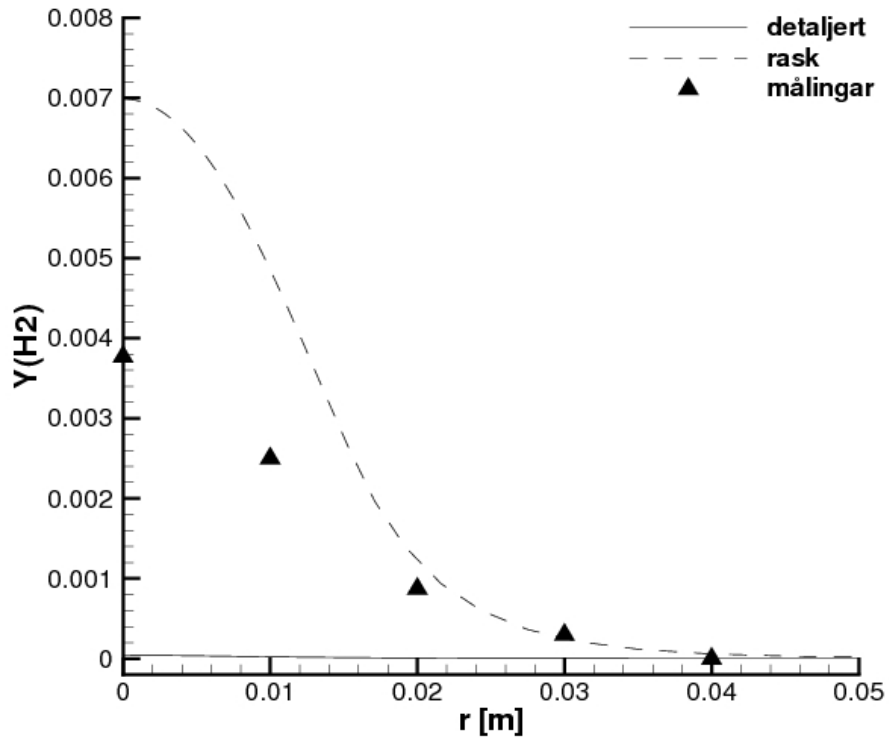


(a) Hydrogen.

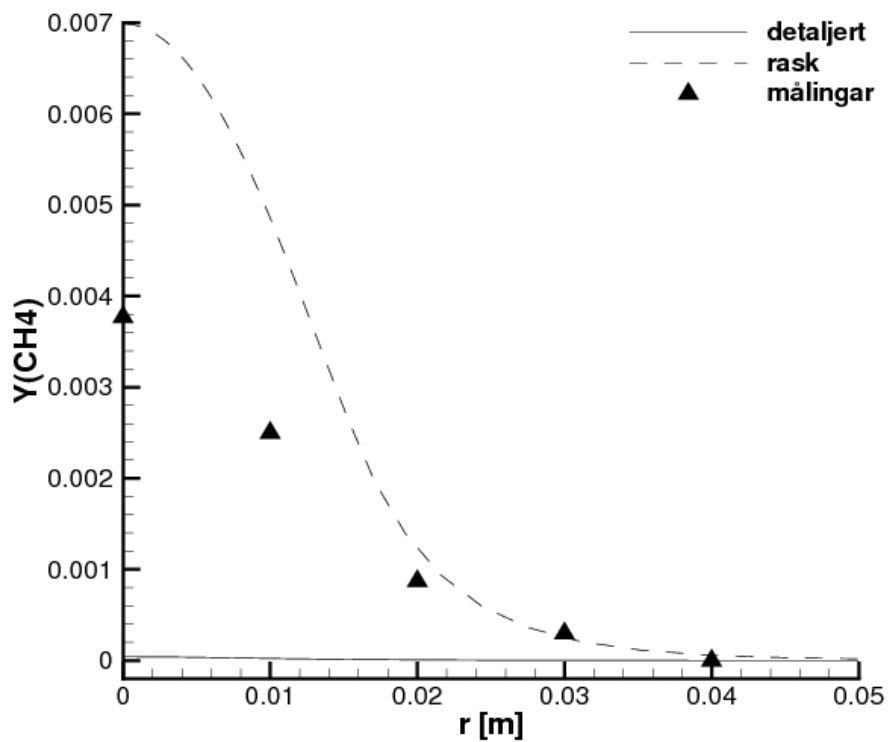


(b) Metan.

Figur 5.60: Samanlikning av verdier ved $x/d = 40$ - CH_4 -flamma.

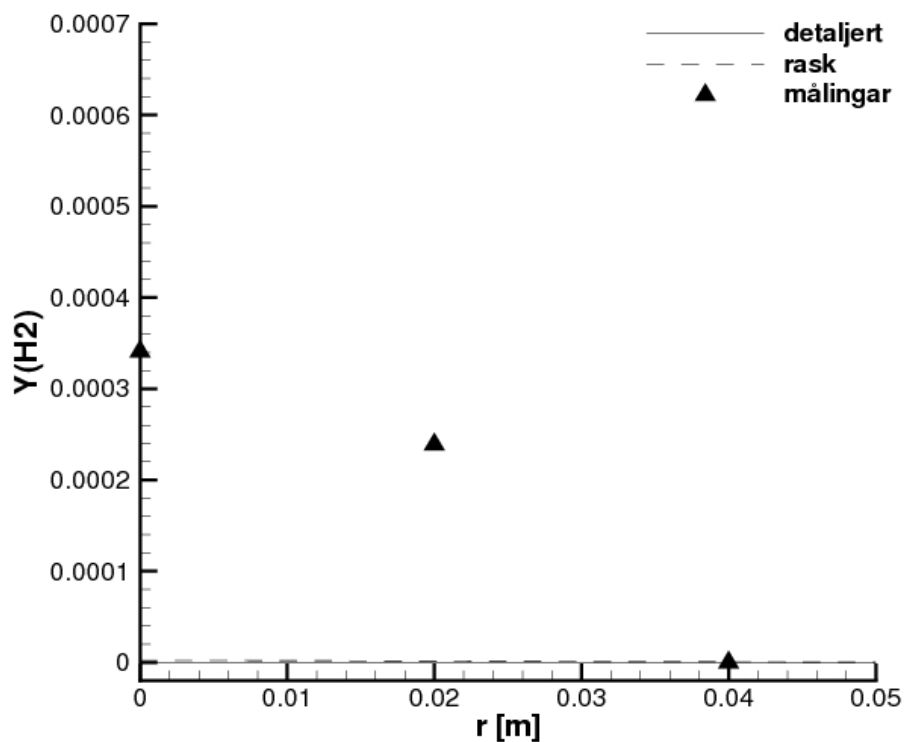


(a) Hydrogen.

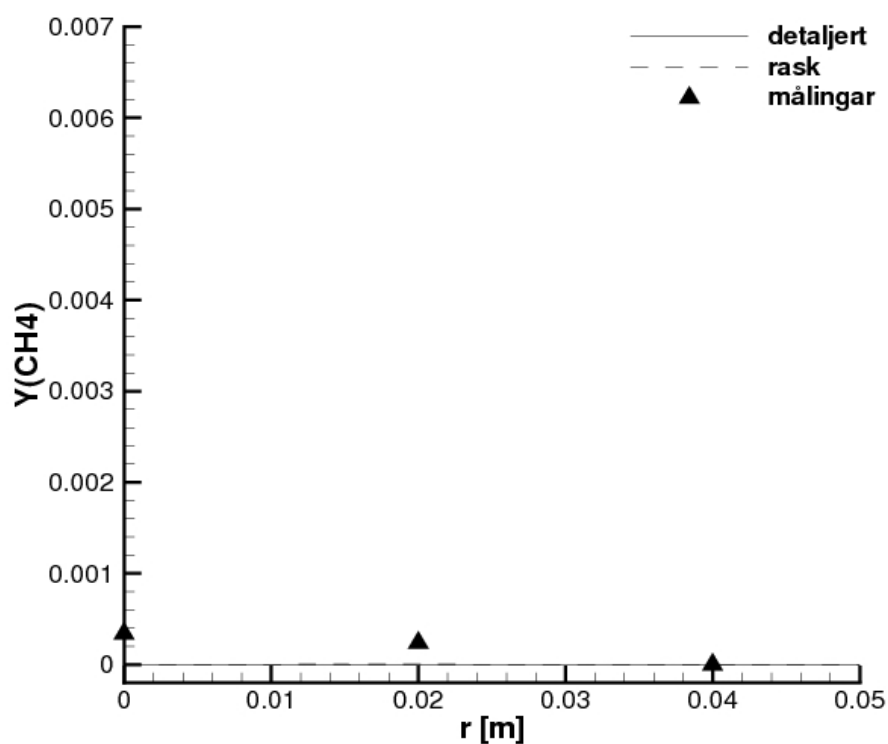


(b) Metan.

Figur 5.61: Samanlikning av verdier ved $x/d = 60$ - CH_4 -flamma.



(a) Hydrogen.



(b) Metan.

Figur 5.62: Samanlikning av verdier ved $x/d = 80$ - CH_4 -flamma.

Drøfting

Av konturprofilene synt tidlegare i denne delen, var det tydeleg at nettverket ikkje fanga opp flammesona nær dysa. Figur 5.40c syner at ved $x/d = 5$ byrjar større mengder av OH å kome med. Noko nærare dysa er det to “øyar” (sjå grøn farge) der det er meir OH enn i resten av området. At forbrenninga ikkje tek til der det skal inne ved dysa ved detaljert, gjer at tettleiken ikkje blir så låg som den skal. Rørslemengda vert for stor, og turbulens generert i dette området spreier farta utover i radiell retning (figur 5.42 og 5.43). Dette gjer at brenslet vert meir spreidd ved detaljert. Konsekvensen av dette er at flammesona vert noko forskyvd utover i radiell retning frå start av ved detaljert. Når flammesona har vorte breiare lenger nedstraums, då er den litt for langt ute i radiell retning. Det ser ut til at brenslet vert raskare brukt opp ved detaljert og. Den for kraftige turbulensenergien inne ved dysa gjev betre blanding med lufta, sidan stoffa vert raskare spreidd i radiell retning. Samstundes syner figurane at temperaturen vert meir og meir samanfallande for rask og detaljert, slik at spreinga i starten kan ikkje vere årsak til den for høge temperaturen ved detaljert åleine. Likevel skulle detaljert gje noko mindre temperatur enn rask, sidan flamma er noko forskyvd nedstraums, noko som kan tyde på at temperaturen er for høg ved rask. Det er verdt å merke seg at brenselmengda minkar ikkje så mykje som det burde for rask, med tanke på at temperaturen vert så mykje for høg.

Spørsmålet her vil vere om det er variasjon i tettleik åleine som gjev denne for store spreinga i starten. For H₃-flamma var det og noko for grovt grid inne ved dysa. Dette hadde ikkje så stor verknad som for CH₄-flamma, og det syner ikkje igjen noko særleg på figurane. Nærare dysa vil det kanskje syne att, men det har tilsynelatande ingen verknad på strøymingsbilete lenger nedstraums. Felles for begge flammene er at det er store avvik i temperatur mellom måling og simulering langt nedstraums. Men avviket er noko mindre for H₃-flamma enn CH₄-flamma.

Etter den raske spreinga i starten vert turbulensenergien kraftig redusert (sjå figur 5.43b) i høve måling/rask. Vidare utover i akseretninga vert ikkje den redusert like raskt som hjå måling/rask, og etterkvart vert dei samanfallande. Farta vert og meir samanfallande for alle tre.

For H₃-flamma kom flammen med nærare dysa enn for CH₄-flamma. Flammesona er noko breiare for H₃-flamma, sidan rørslemengda er mindre, og hydrogen reagerer lettare enn metan. Det kan og vere andre ting enn storleiken på flammesona som gjer at større delar av den kjem med. Uansett er det sær stor skilnad i kva verknad det har på fartsprofilen for dei to flammene. Temperaturen utviklar seg omtrent likt, og for begge flammene er det mindre avvik i fart og turbulensenergi lenger nedstraums.

5.3.4 Verknad av finare oppløysing på nettverket

Simulering av CH₄-flamma synte at det var naudsynt med finare grid nær dysa. Mange av simuleringane vart i utgangspunktet gjort med eit grovare grid enn det nytta over. Hovudsakleg vart gridet med 65x30 celler og aksiell lengd 0,7 m nytta, saman med ulike versjonar av dette. Årsaka var at dette ga mykje mindre reknetid enn det gridet med 110x50 celler og 0,8 m i aksiell retning.

Ved å redusere området av flamma ein ser på, vert oppløysinga finare. I denne delen er det gjort nett det. Fleire versjonar med ulik storleik på området er testa for å syne verknaden av dette. Desse modellane måtte hatt ganske mange fleire celler, enn grida nytta tidlegare, om det same området av flamma vart teke med. Denne delen syner kor stor skilnad det er for CH₄-flamma og H₃-flamma når det kjem til nettverk.

Når området vert forandra må det takast omsyn til grensene nytta i modellen. Det kan verte problem om det er gradientar over grensa. Vert området i akseretninga redusert, kan og radiell retning reduserast, men det beste er å ta litt og litt.

Det er sjølvsagt uheldig å ikkje få med heile flamma i modellen, noko som er naudsynt for å fastslå kor mykje NO_x der er i røykgassen. Samstundes er det viktig å få modellert flamma skikkeleg nær dysa, sidan feil her syner att på flamma lenger ut i akseretninga.

Det vart prøvd ut fire ulike områder, med noko ulikt tal på celler. Sidan området er så mykje mindre i akseretninga, er det berre for eit par av dei det går an å få samanlikna radielle profil med målingar. Det første gridet er nett som det i figur 5.7a. Dette vert omtala som “grid 1” frå no, og området her er $0 < x < 0,7$ m, med 30 celler i r-retning og 65 i x-retning. For grid nummer to (“grid 2”) er området forandra til $0 < x < 0,1$ m og $0 < r < 0,1$ m. Det er her 51 celler i r-retning og 73 i x-retning. “Grid 3” har like mange celler som nummer to, men her er området $0 < x < 0,06$ m, og $0 < r < 0,05$ m. Alle desse grida er strekt noko meir eller mindre i x-retning. Det er nytta mindre strekk, til mindre området er i x-retning. Det siste gridet (“grid 4”) har 50 celler i x-retning og 30 i r-retning. Området her er $0 < x < 0,02$ m og $0 < r < 0,025$ m. Om det siste skulle hatt tilsvarende mengd celler med, og dekke same området som “grid 1”, måtte det ha vore 1750 celler i x-retning og 240 celler i r-retning. For alle x snakka om over, er dette meint å vere akseretninga. “Grid 4” er ikkje strekt i x-retning. Alle grida har 10 grenseceller ved utløpet av dysa, og er difor strekt noko meir eller mindre i r-retning. Det er nytta detaljert kjemi i simuleringane så lenge ikkje anna vert sagt.

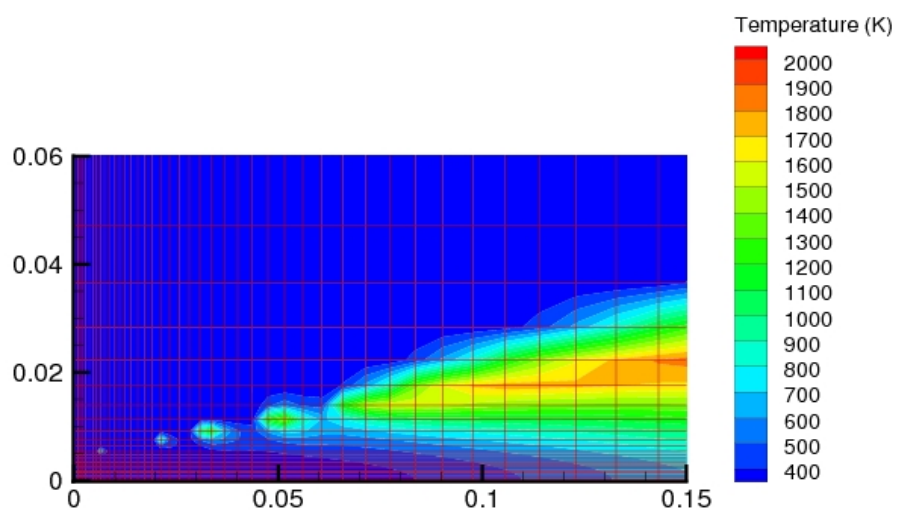
Resultat

Figur 5.63 - 5.66 syner konturplott av temperatur og massefraksjon av OH for grida. Grid 4 har så tett med linjer i nettverket at dei ikkje er med i figuren. Det er tydeleg korleis temperaturen og OH-verdien vert større nærare dysa, til finare gridet er. Figur 5.67 syner korleis konturane overlappar kvarandre. Her det nest grovaste nettverket lagt over det grovaste slik at det grovaste ikkje er synleg for $x \leq 0,1$ og $r \leq 0,1$ m. Det finaste gridet er lagt over alle dei andre. Det verkar som profila vert forskyvd meir og meir ut i radiell retning, til kortare området er i x-retning.

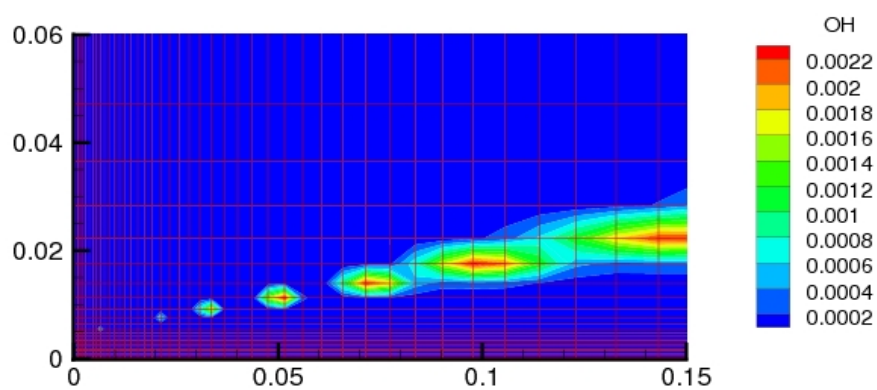
Figur 5.68 og 5.69 syner fart og turbulensenergi ved $x/d = 5$ og $x/d = 10$. Grid 3 er ikkje med på den siste posisjonen, sidan området er for kort. Nett som tidlegare resultat synte, så er turbulensenergien noko høgare inn mot senter for simuleringane nær dysa. Farta vert spreidd utover i radiell retning. Ved $x/d = 10$ har k minka ein del, og farta er spreidd meir enn målingar. Farta er ikkje berre spreidd, men det ser ut til at den totale volumstraumen er mindre enn for målingane.

Det er verdt å merke seg at grid 3 har høgast turbulensenergi ved $x/d = 5$, og farta vert mest spreidd her. Grid 1 og 2 skil seg ikkje mykje frå kvarandre her. Ved $x/d = 10$ er turbulensenergien lågare for grid 2. Farta er ikkje så ulik for dei, men det ser ut til at grid 1 har noko mindre volumstraum.

Temperaturen (figur 5.70) er for låg for alle grida ved $x/d = 5$. Grid 1 har lågast T av alle saman. Felles for dei tre er at temperaturprofilen er forskyvd utover i radiell retning, og lengst ute kjem grid 3, som har den finaste oppløysinga. Profilen for grid 2 og 3 er elles ganske likt, berre forskyvd radielt. Ved $x/d = 10$ er framleis grid 1 og 2 forskyvd i høve målingar, men no er profilen frå grid 1 nærare grid 2.

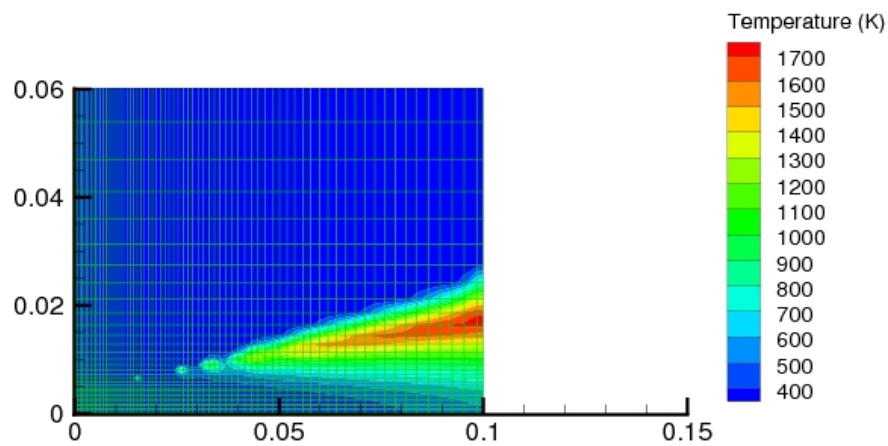


(a) Temperatur.

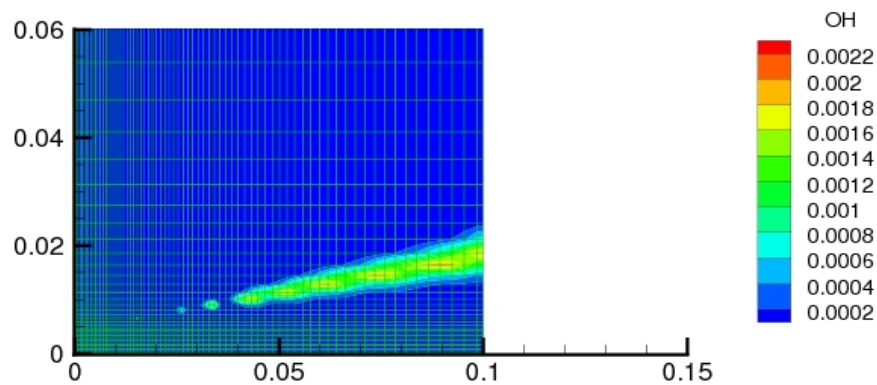


(b) Massefraksjon OH.

Figur 5.63: Verknad av finare oppløysing. Konturplott av grid 1 nær dysa.

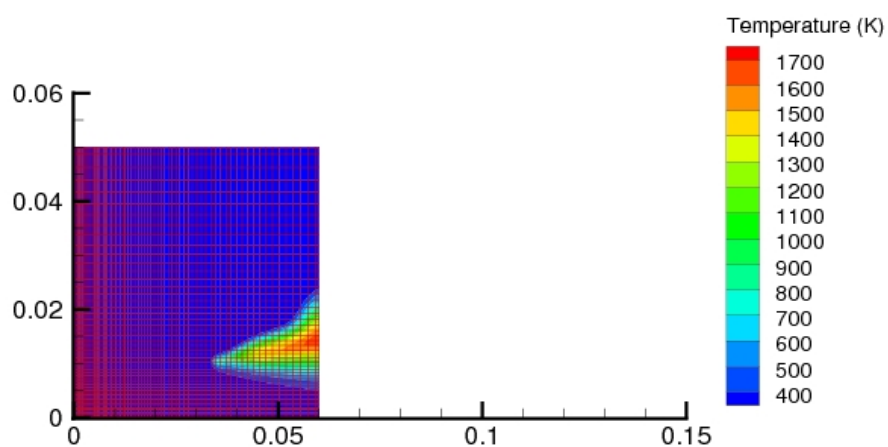


(a) Temperatur.

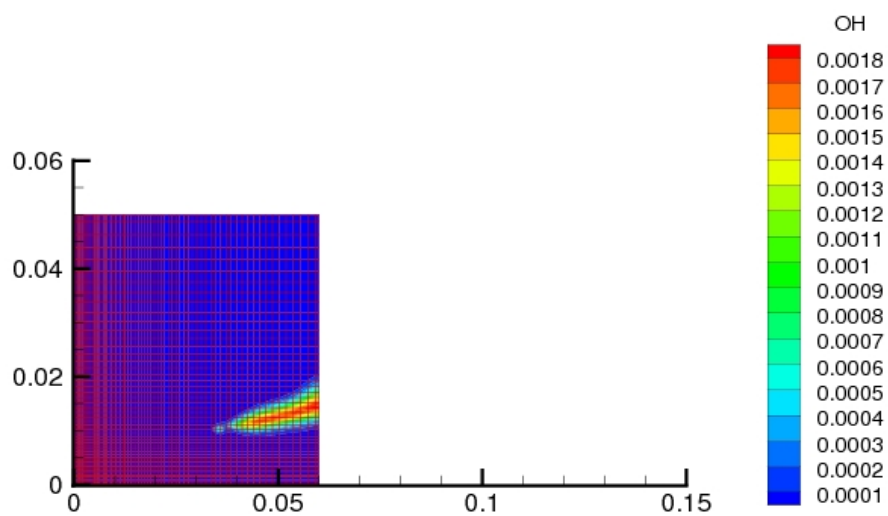


(b) Massefraksjon OH.

Figur 5.64: Verknad av finare oppløysing. Konturplott av grid 2 nær dysa.

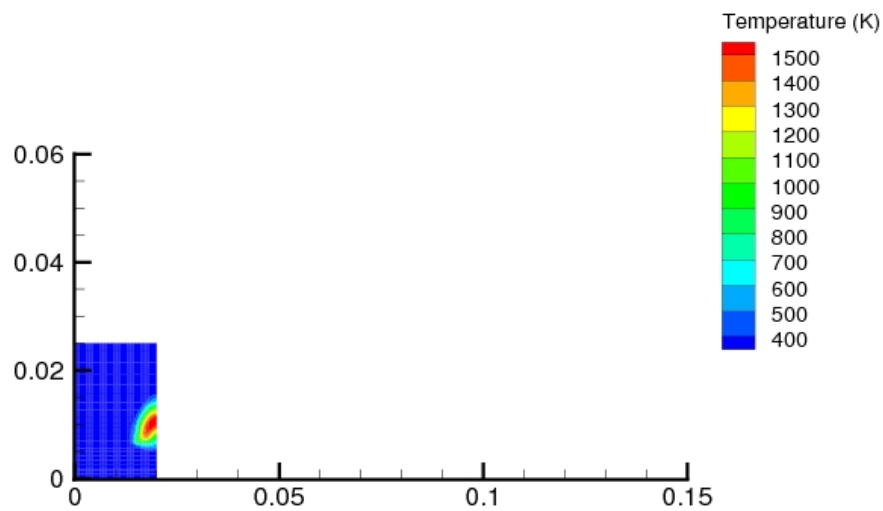


(a) Temperatur.

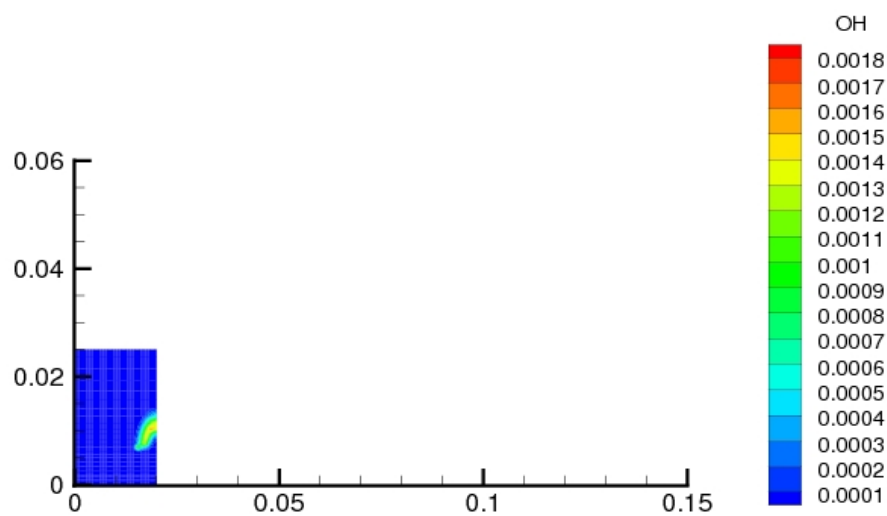


(b) Massefraksjon OH.

Figur 5.65: Verknad av finare oppløysing. Konturplott av grid 3 nær dysa.

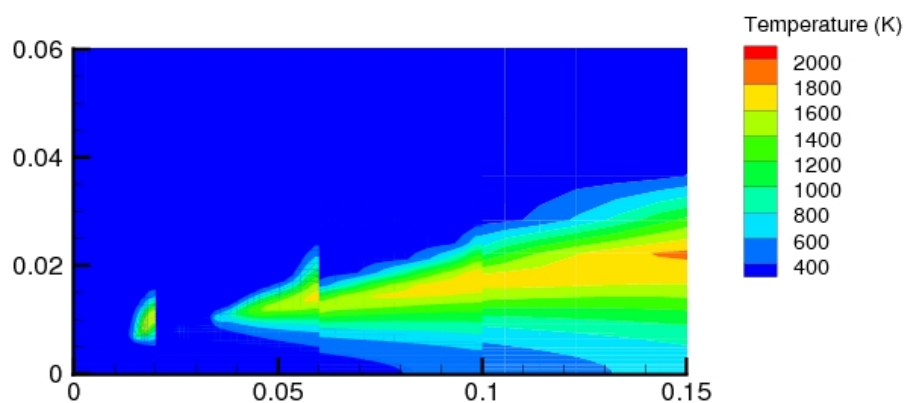


(a) Temperatur.

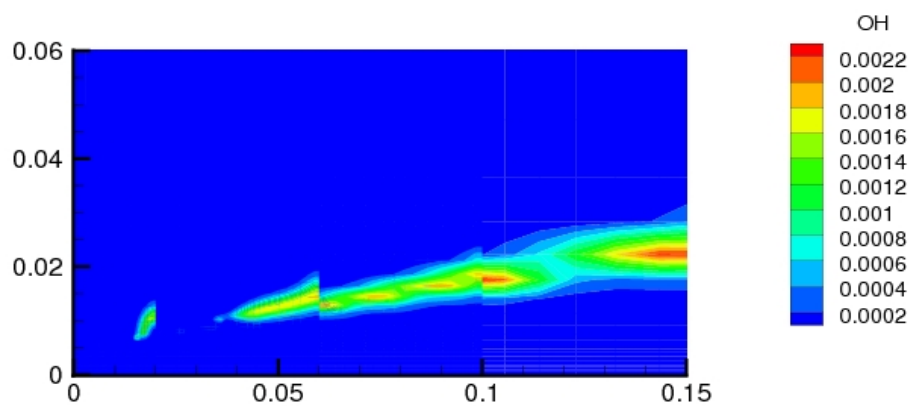


(b) Massefraksjon OH.

Figur 5.66: Verknad av finare oppløysing. Konturplott av grid 4 nær dysa.

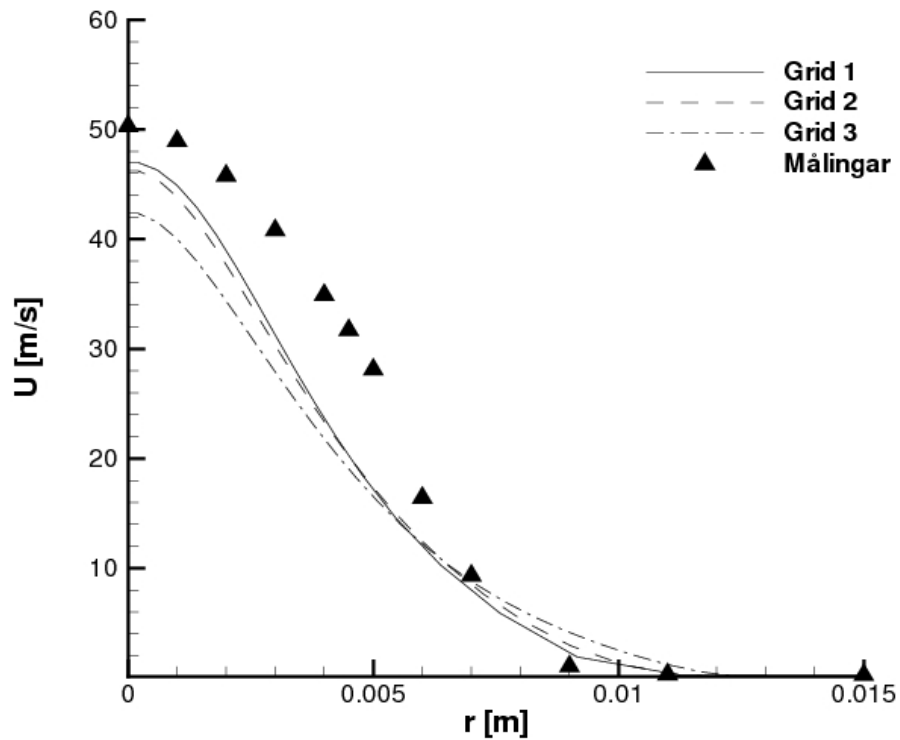


(a) Temperatur.

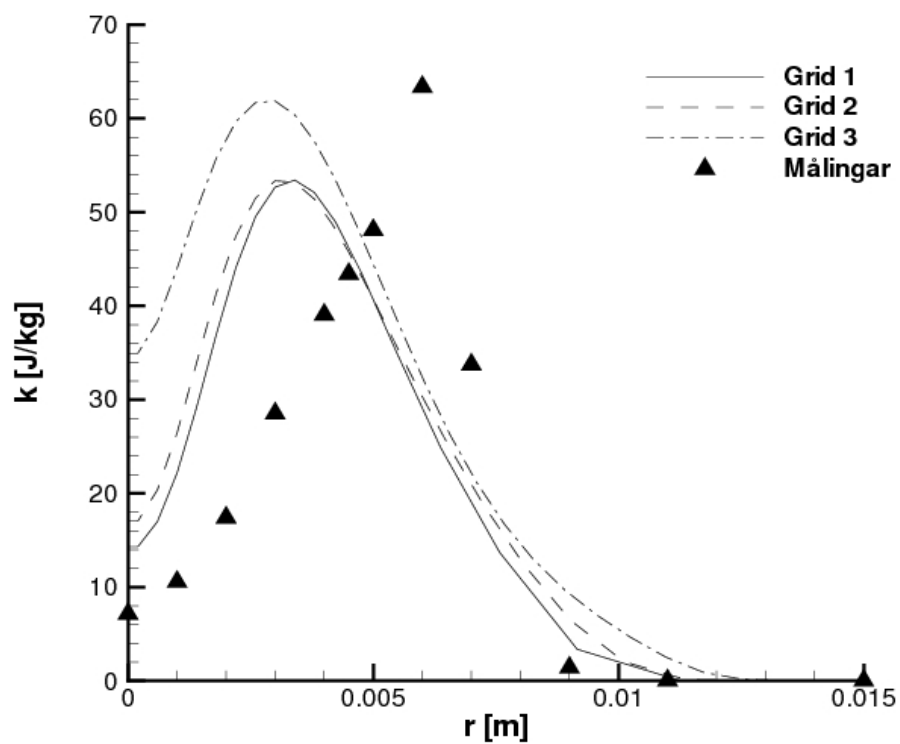


(b) Massefraksjon OH.

Figur 5.67: Verknad av finare oppløysing. Konturplott av alle grida nær dysa. Dei med finare oppløysing er lagt over dei som er grovare.

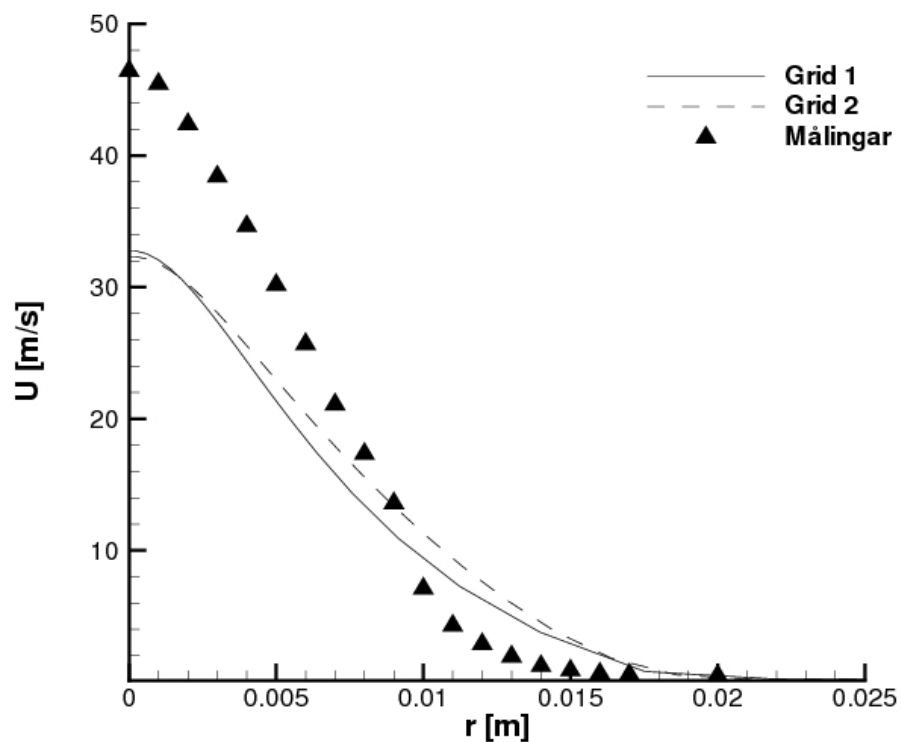


(a) Fart i x-retning.

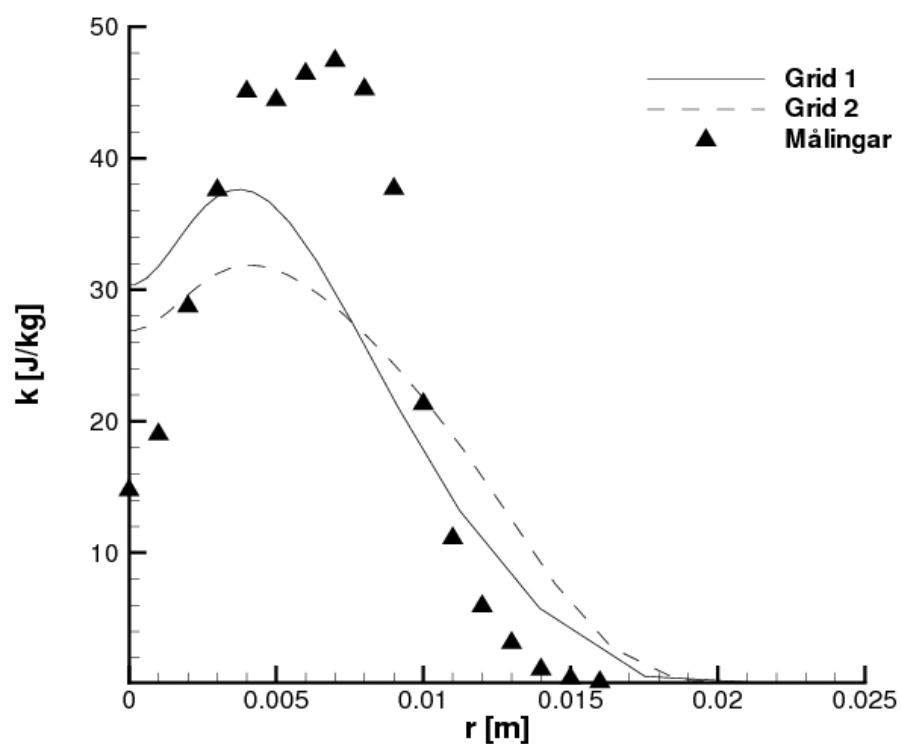


(b) Turbulensenergi.

Figur 5.68: Verknad av finare oppløysing. Samanlikning av verdier ved $x/d = 5$

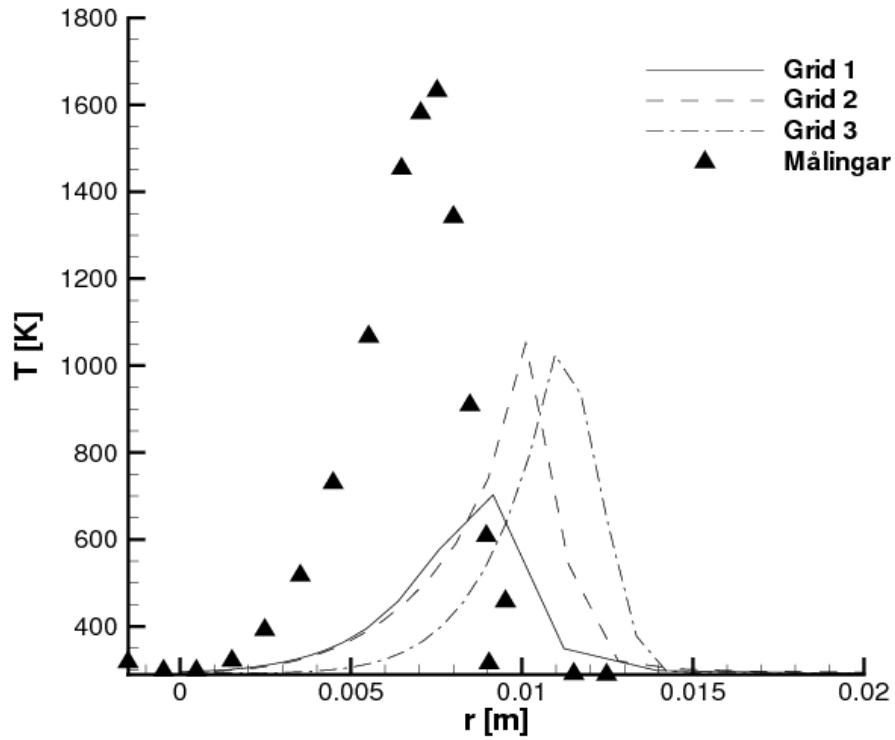
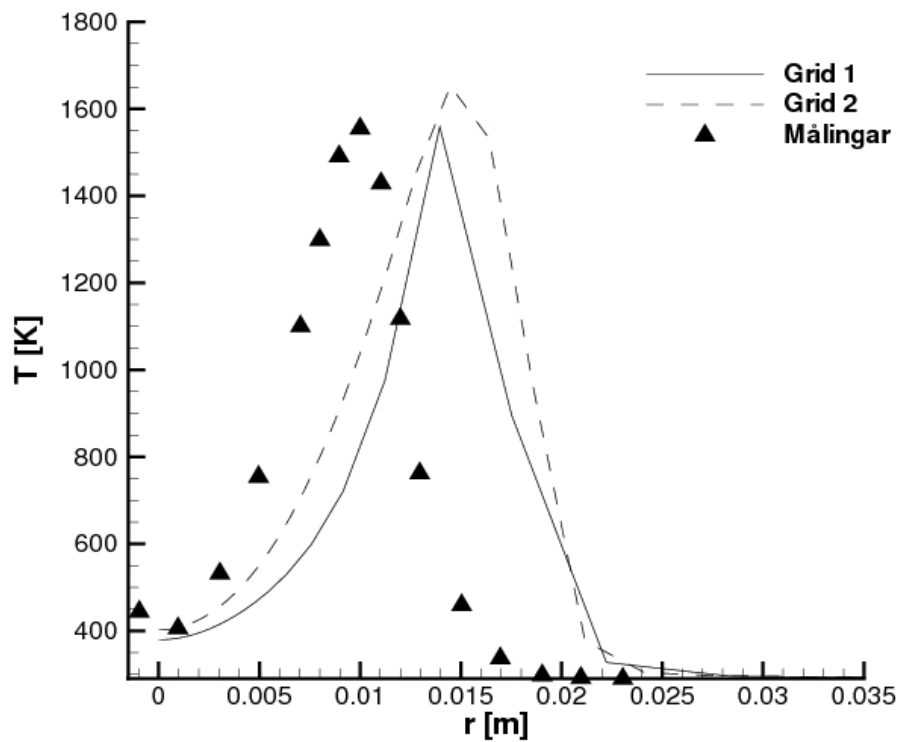


(a) Fart i x-retning.



(b) Turbulensenergi.

Figur 5.69: Verknad av finare oppløysing. Samanlikning av verdiar ved $x/d = 10$

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.**Figur 5.70:** Verknad av finare oppløysing. Samanlikning av temperatur.

Drøfting

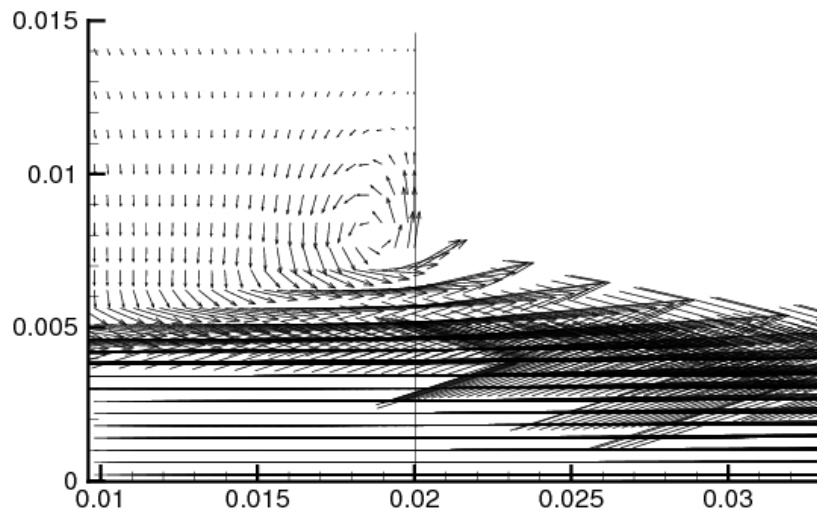
Gridet med finast oppløysing gjev mest avvik frå målingar omtrent for alle profila. Det verkar som at til betre oppløysinga er, til meir vert flammesona forskyvd, og dermed temperaturen. Likeins vert farta meir spreidd i starten for gridet med finast oppløysing.

Av konturprofila er det tydeleg at meir av flammesona kjem med lenger inn ved dysa. Det ser ut til at mindre område har stor verknad på strøyminga. Ved enden av området er det nytta ei grense der trykket er rekna konstant. For inkompressibel strøyming skulle dette vere ein bra føresetnad, så lenge området ein ser på er stort nok til at trykkgradienten i akseretninga ikkje er for stor. For kompressibel strøyming er det kjent at farta åt fluidet kan vere så stor, at det vert veldig liten avstand mellom trykkbølgjene. Informasjonen om trykkendring, som endringa i fluidet er ein følge av, “rekk ikkje å kome fram” før fluidet allereie har endra tilstand i området dei tette bølgjene vandrar i. Er området veldig lite, kan verknadane av dette syne att i inkompressibel strøyming [37].

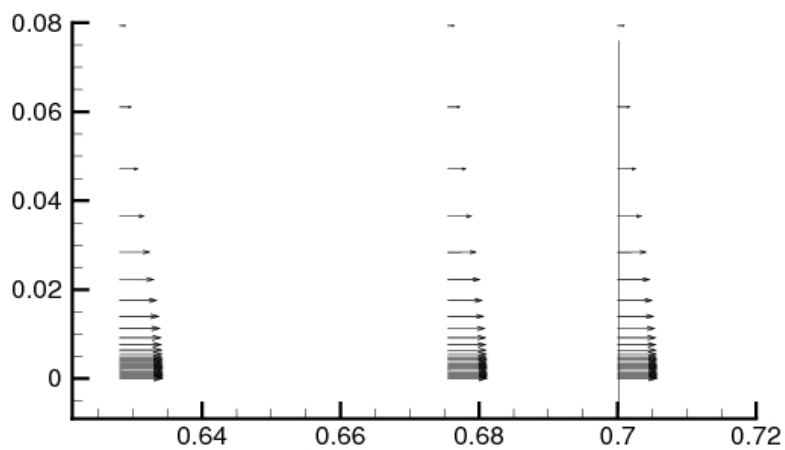
Om trykket ved utløpet er spesifisert til å vere for stort, eller for lite i høve verdiane like før grensa, vert trykkgradienten ned mot grensa stor. Dette gjev danning av kvervlar, og dermed strøyming oppstraums over utløpsgrensa. Dette vart det gjeve feilmelding om under heile iterasjonsprosessen for grid 4. I SPIDER vert innstrøyming over utløpet løyst ved å trekkje frå komponenten som står normalt på utløpsgrensa, og peikar i negativ x-retning, slik at berre komponenten som er parallelt med grensa vert teke med. I tillegg til at innstrøyming vert handsama slik, vert og farta normalt på utløpet forandra, slik at kontinuitet er oppfylt: Om farta er høgare enn $1e^{-30}$, vert den multiplisert med ein faktor, $\dot{m}_{inn}/\dot{m}_{ut}$, og dermed korrigert for kontinuiteten. Om farta er lågare, er det innstrøyming over utløpsgrensa, og den vert handsama som over.

Figur 5.71 syner vektorar åt farta ved utløpet for grid 4 og 1. I grid 4 var området $0 < x < 0,02$ og $0 < y < 0,025$ m. Den vertikale linja markerer utløpet hjå begge grida. Storleiksorten på vektorane er den same på begge figurane, slik at lengda kan samanliknast. Det er tydeleg at det vert danna kvervlar nær grensa for grid 4. Det viste seg i etterkant av simuleringane, at utløpet hadde omlag same tettheit og temperatur som lufta i omgjevnadane. Dette er ein rimeleg føresetnad, om gradientane ikkje vert for store.

Figur 5.72 syner vektorar nærare dysa for grid 1. Om denne vert samanlikna med grid 4 (figur 5.71a), er det tydeleg at kvervelen verkar inn på fartskomponenten i luftområdet inne ved dysa. Pilene er kraftigare for grid 4 enn grid 1. I høve farta åt jeten, er lufta tilnærma stillestående. Heft i strøyminga gjer at jeten dreg med seg luft, og skapar ein vertikal fartskomponent, peikande nedover.

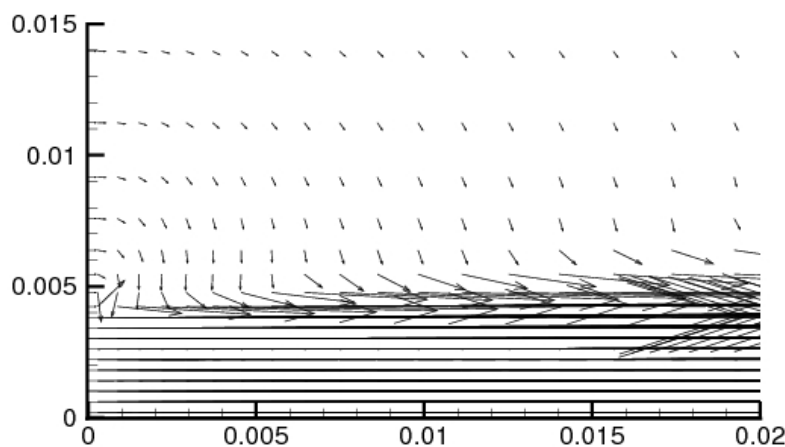


(a) Grid 4.



(b) Grid 1.

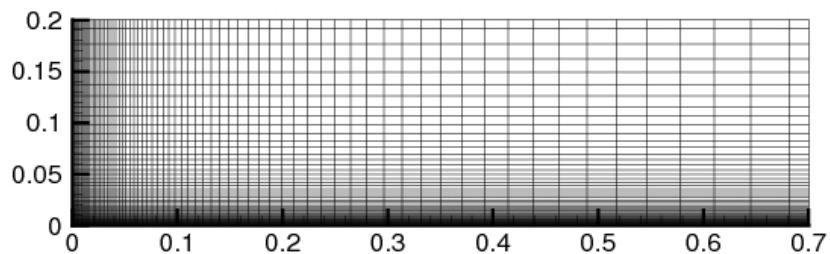
Figur 5.71: Verknad av finare oppløysing. Vektorplott av farta ved utløpet.



Figur 5.72: Verknad av finare oppløysing. Vektorplott av grid 1 nær dysa.

Resultata over syner at området kan reduserast for å få betre oppløysing, men det må takast omsyn til grensene. Området at grid 2 ga betre resultat, og strøyminga vart ikkje endra lenger oppstraums som følgje av utløpsgrensa.

Med bakgrunn i resultata over vart det testa endå eit grid i tillegg til dei nytta tidlegare. Med utgangspunkt i det som er synt i figur 5.7a, vart det laga eit med fleire celler i r- og x-retning. Det er strekt noko annleis i begge retningane, med føremål å få fleire celler der flammesona skal vere. Gridet er synt i figur 5.73. Der er 75 celler i x-retning og 57 i r-retning. Der er 10 brenselceller, nett som gridet med 65x30 celler. Det vart nytta grenseverdier frå enden av røret. Grida er samanlikna med det som vart nytta til samanlikning med H3-flamma (figur 5.21). Området det vert sett på er like stort for alle tre grida, med 0,7 meter i x-retning og 0,2 meter i r-retning. Årsaka til at denne samanlikninga vart gjort, er at gridet med 65x30 celler er noko for grovt, og det var ønskeleg å finne eit som hadde færre celler enn det med 120x50 celler.

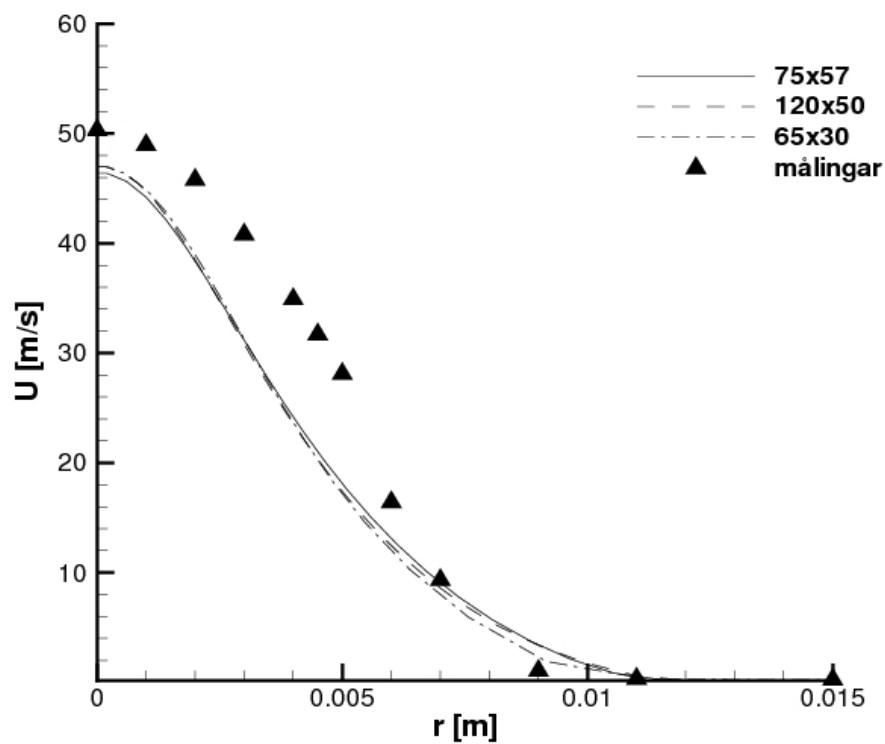
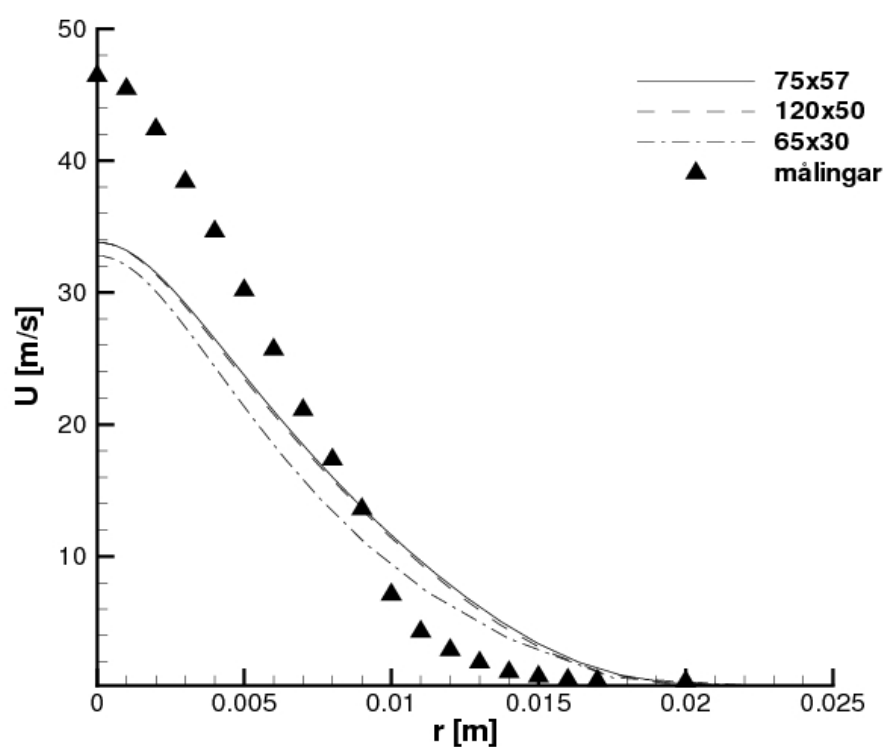


Figur 5.73: Grid med 75x57 celler.

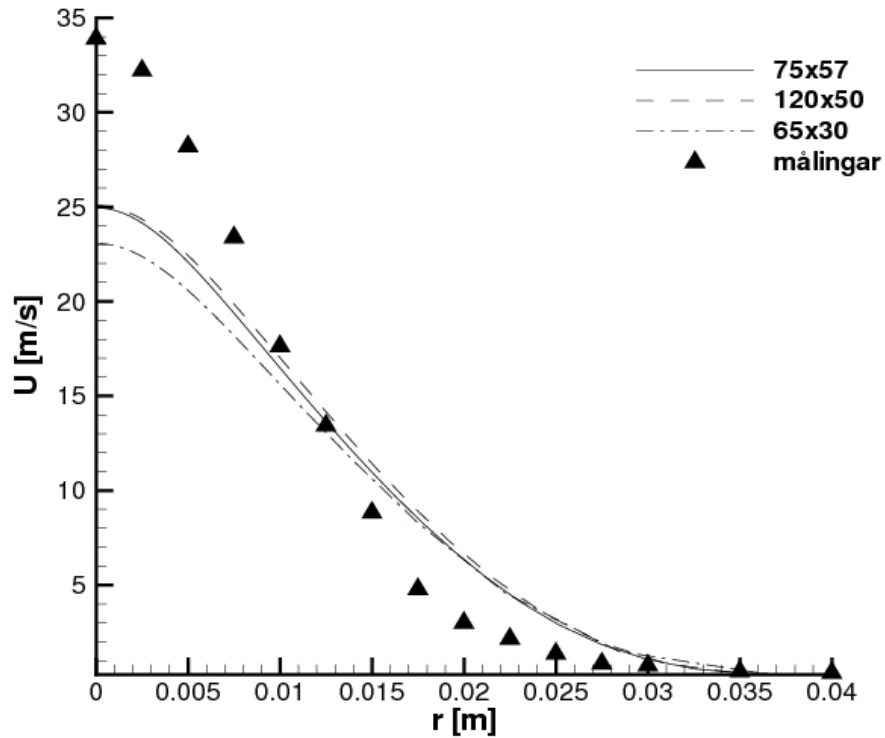
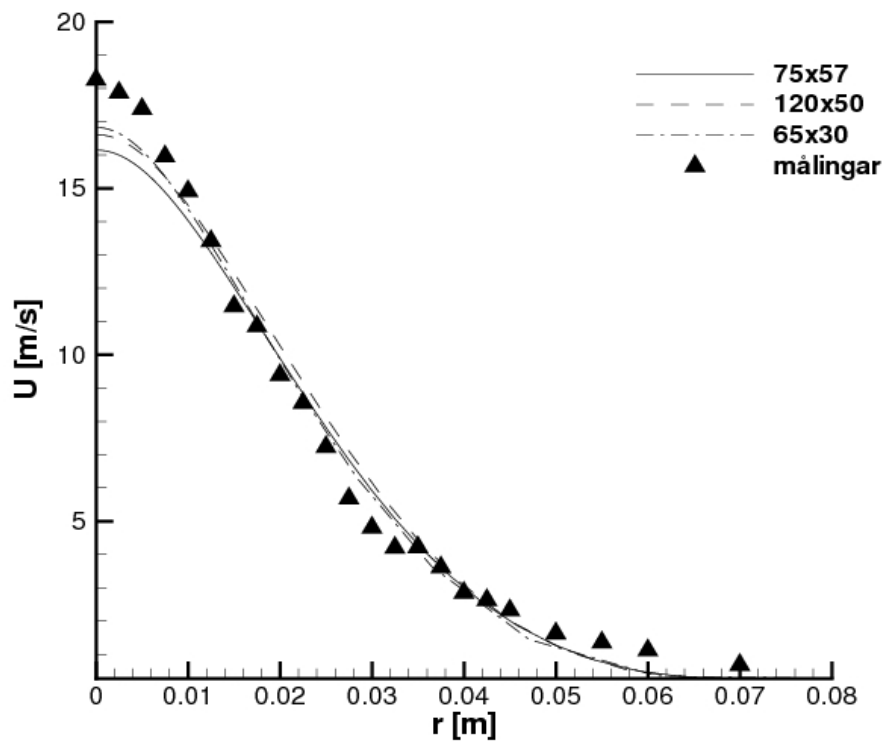
Resultat

Det er presentert resultat for fart og temperatur ved nokre aksielle posisjonar. Figur 5.74 og 5.75 syner farta, U . Det er liten skilnad mellom dei tre grida, men 120x50 og 75x57 gjev best samsvar. Unntaket er ved $x/d = 40$, der 75x57 er lågare enn dei andre ved senter. I høve måleverdiar er det, som tidlegare, ein del avvik fram til $x/d = 40$.

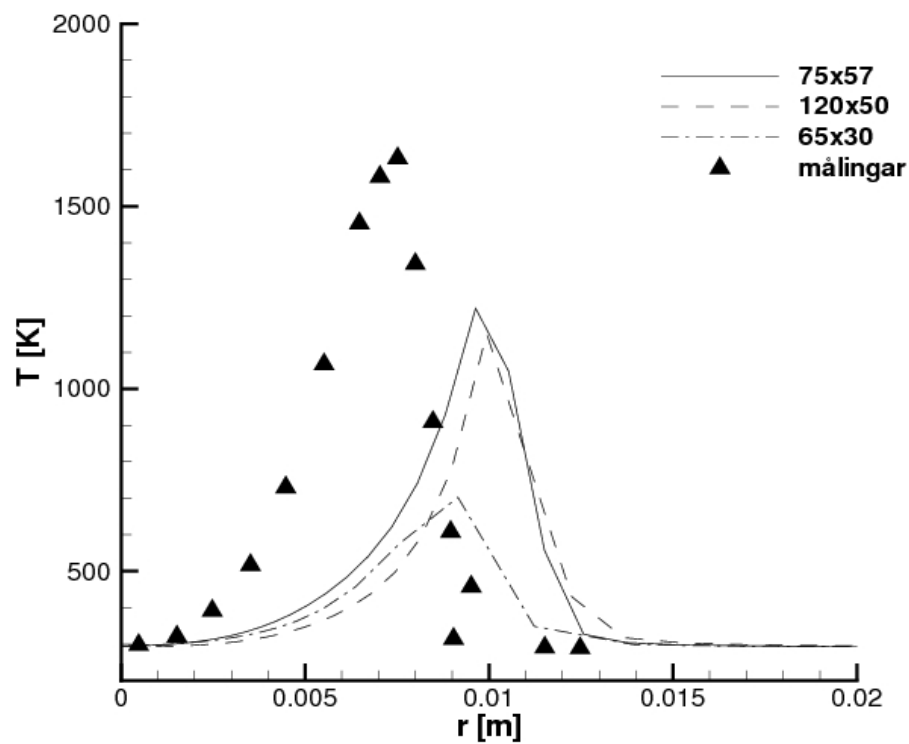
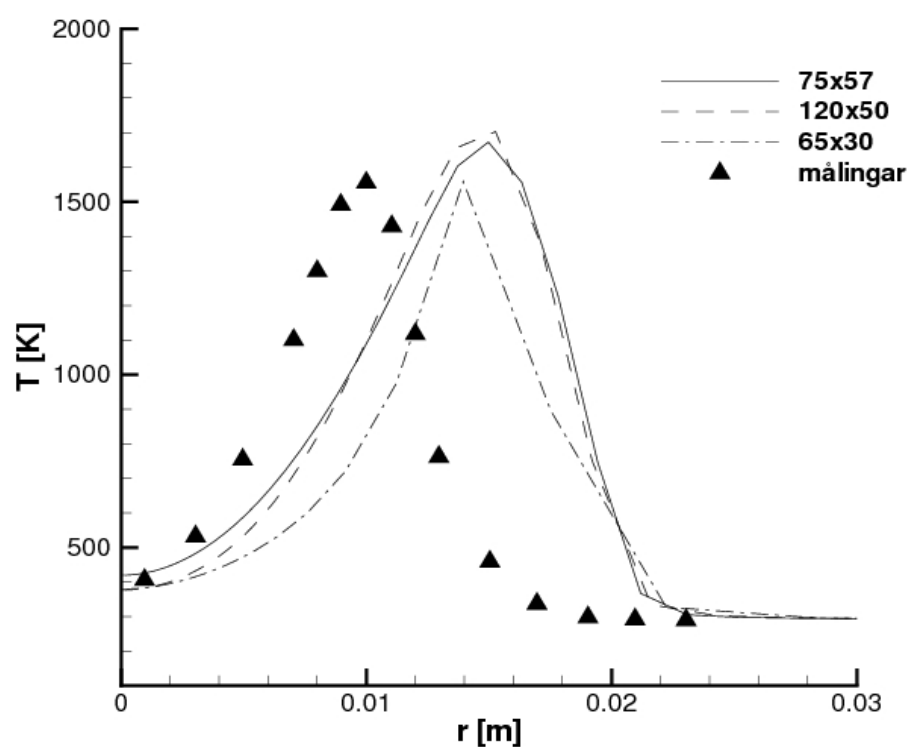
For temperaturen (figur 5.76 og 5.77) skil 65x30 seg tydeleg i høve dei to finaste fram til omlag $x/d = 20$. Gridet med 75x57 celler gjev betre resultat enn det grovaste nær dysa. Skilnaden frå målingar er framleis stor her.

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.

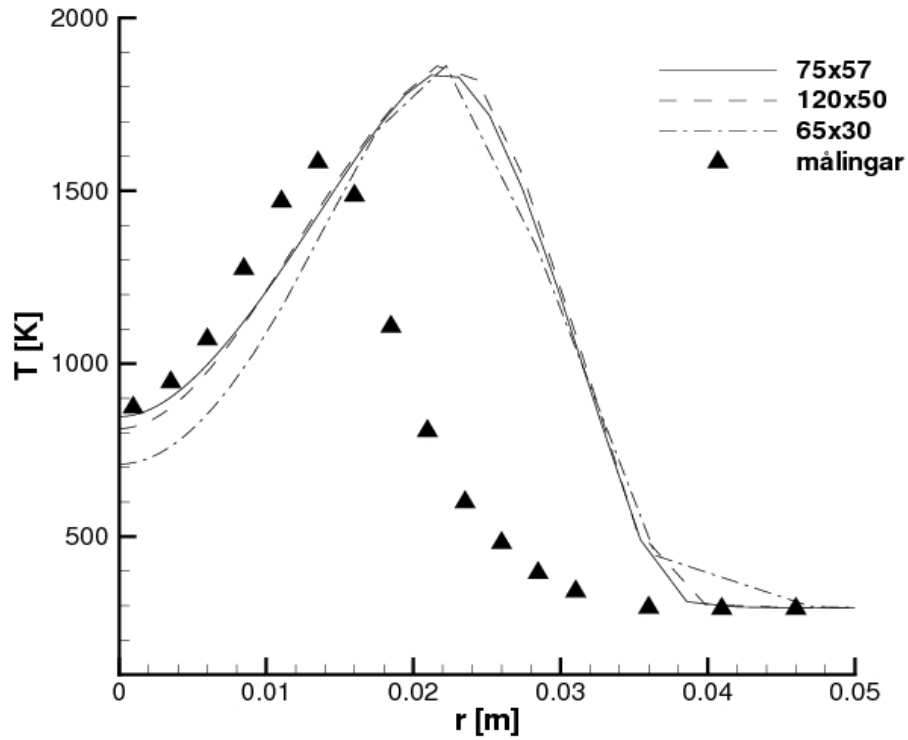
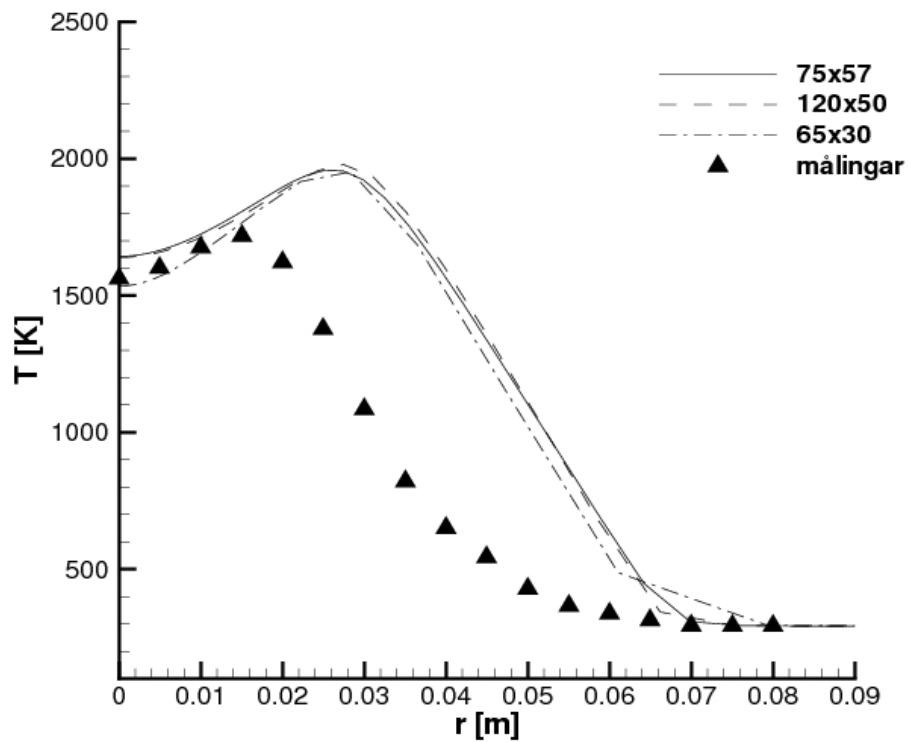
Figur 5.74: Samanlikning av tre grid med same område, men ulikt tal på celler. Fart i x -retning ved $x/d = 5$ og 10.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.

Figur 5.75: Samanlikning av tre grid med same område, men ulikt tal på celler. Fart i x -retning ved $x/d = 20$ og 40 .

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.

Figur 5.76: Samanlikning av tre grid med same område, men ulikt tal på celler. Temperatur ved $x/d = 5$ og 10.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.

Figur 5.77: Samanlikning av tre grid med same område, men ulikt tal på celler. Temperatur ved $x/d = 20$ og 40.

Drøfting

For temperaturen ved $x/d = 5$ er skilnaden mindre mellom dei to finaste enn mellom 65x30 og 120x50. Skilnaden mellom dei to grovaste er tydeleg, og dette syner korleis nokre fleire celler i tillegg på det grovaste betrar resultatet. Utifrå skilnaden mellom dei to finaste ved $x/d = 5$ kan ikkje gridet med 75x57 celler seiast å gje ei nettverkuavhengig løysing. Truleg er skilnaden større lenger inne ved dysa, men i høve det grovaste er dette så mykje betre at det kan nyttast vidare for å undersøkje andre justeringar av modellen. Reknetida er såpass mykje lengre for gridet med 120x50 celler, at 75x57 er nytta i dei fleste av simuleringane vidare.

5.3.5 Endring av blandingsraten i reaktormodellen

Det viste seg undervegs i simuleringane at blandingsraten, ν_r , var modifisert i SPIDER. Vanlegvis er denne gjeve ved $\nu_r = 1/\tau^* = \dot{m}^*$ (sjå likning 2.69 og 2.67). I modifikasjonen var blandingsraten redusert med ein faktor på 0,3, slik at blandingsraten nytta vidare var $0,3/\tau^*$. Det viste seg at ein slik modifikasjon ga betre resultat enn om den ikkje var modifisert. Det vil seie at meir av flammesona vart fanga opp nærare dysa.

Modifikasjonen bør ikkje nyttast før løysinga er nettverk-uavhengig, men samstundes er det problematisk å nytte eit altfor fint grid ved detaljert kjemi, på grunn av reknetida. Gridet kan framleis verte finare enn det er, og dette kan vere årsaka til at flammesona ikkje kjem med. Opphaldstida og blandingsraten er gjeve ved ε og ν , slik at rett verdier av desse skulle gje rett blandingsrate. Nær dysa er gradienten åt ε størst, og for å fange opp denne må nettverket vere fint nok.

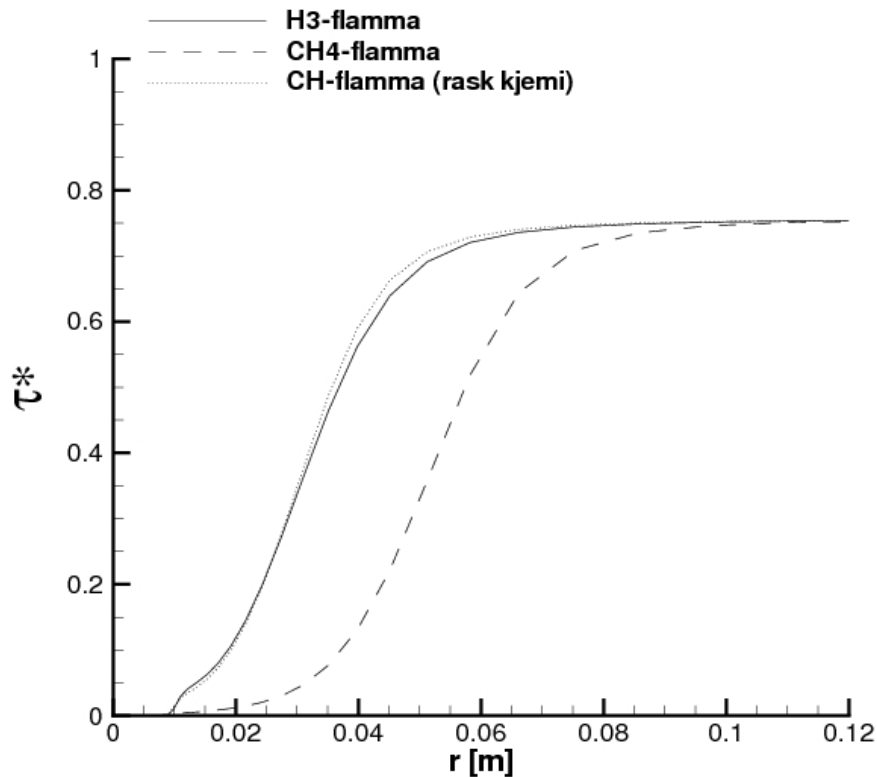
Ein reduksjon av blandingsraten gjev at endringa av Y_k^* vert mindre styrt av skilnadane mellom massefraksjonar i omgjevnader og finstrukturen (sjå likning 2.88). Om ein delreaksjon ein stad i flammen forbruker H_2 , har denne ei negativ reaksjonsrate, R_k^* . Til meir H_2 der er i omgjevnadane i høve finstrukturen, til meir vil dette leddet bremse opp endringa av Y_{H_2} over tid.

Ved utløpet av dysa er det mykje brensel i omgjevnadane; meir enn i finstrukturen, slik at det siste leddet i likning (2.88) er positivt. Den kjemiske reaksjonsraten er negativ for stoffa i brensl. Om blandingsraten vert redusert, vil siste leddet i likning (2.88) medverke til mindre endringa av Y_k^* .

I alle simuleringane har det vore nytta ein velblanda reaktor. I SPIDER vert det då nytta ein Δt lik $100 \cdot \tau^*$, om $\tau^* \leq 0,1$ s. Om opphaldstida er større vert den sett $\Delta t = 10$ s. I området der reaksjonane skjer nær dysa, er opphaldstida godt under 0,1 s. Då skal tida det vert integrert over vere 100 gongar større enn τ^* .

Resultat

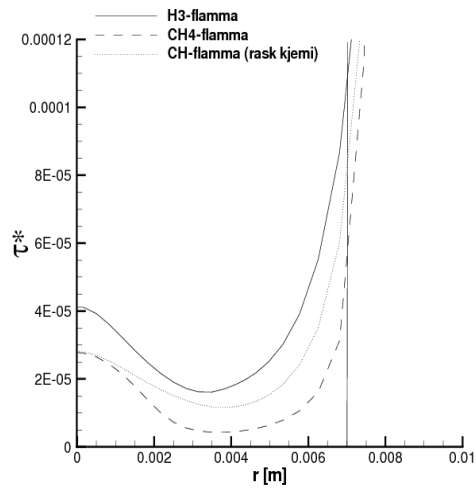
Figur 5.78 syner τ^* gjeve i sekunder for H3- og CH₄-flamma ved simulering med detaljert kjemi. Rask kjemi for CH₄-flamma er og teke med. Det er nytta same gridet som i figur 5.21. Opphaldstida er jamnt over mindre for CH₄-flamma med detaljert kjemi, medan rask kjemi er meir samanfallande med H3-flamma. Lenger ut i radiell retning, der dissipasjonen nærmar seg ν i verdi, vert τ^* nesten samanfallande for dei tre.



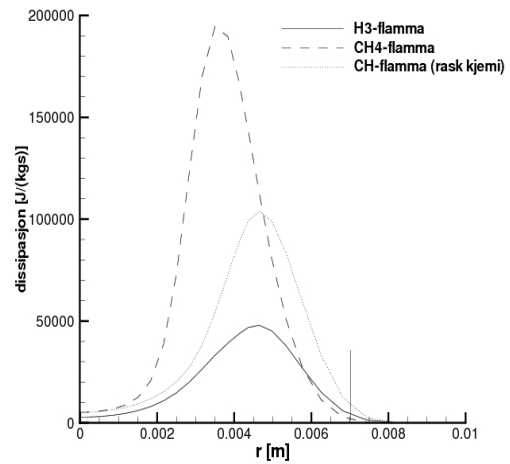
Figur 5.78: Samanlikning av τ^* for H3- og CH_4 -flamma ved $x = 0,02$ m.

Figur 5.79 syner τ^* , ε , T og Y_{OH} . Kurvene syner verdier i området der reaksjonane skjer ved $x = 0,02$ m. Det er tydeleg korleis opphaldstida varierer med ε . Fram til omlag $r = 0,005$ m så er ε for CH_4 -flamma høgast, og τ^* er lågast av dei tre. For omlag $0,005 \text{ m} < r < 0,008 \text{ m}$ er dissipasjonen mindre for detaljert enn rask for metanflamma, men opphaldstida er lågare for detaljert. Det er teikna inn ei vertikal linje ved $r = 0,007$ m. Det er omlag her temperaturen har maksimalverdi. Ved $x = 0,02$ m har ikkje forbrenninga teke til med detaljert kjemi for CH_4 -flamma, og difor er temperaturen omlag lik 292 K. Ved $r = 0,007$ m har H3-flamma mest opphaldstid, og CH_4 -flamma har minst. Dissipasjonen har vorte mykje lågare ved denne posisjonen enn det toppverdien er. Det er verdt å merke seg den store skilnaden i maksimalverdi hjå dissipasjonen for dei tre profila, og dette kan sjåast av k i tidlegare resultat for CH_4 -flamma. Sjølv om dissipasjonen er lågast for detaljert kjemi med CH_4 -flamma, er ikkje opphaldstida størst. Det tyder på at viskositeten, ν , må ha minka deretter.

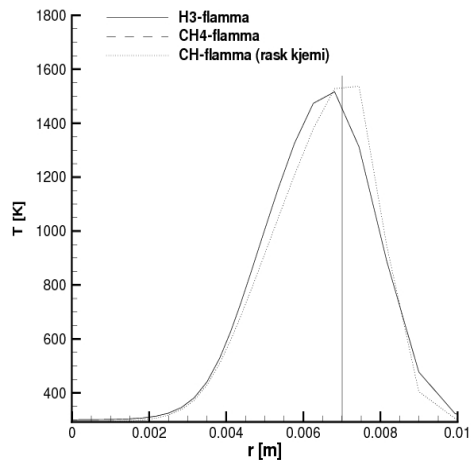
Elles så syner figurane at kurvene følgjer kvarandre ganske likt for begge flammene. Dissipasjonstoppen er ved omlag same radius for CH_4 -flamma med rask og H3-flamma. Temperaturprofilane er nesten samanfallande for dei to.



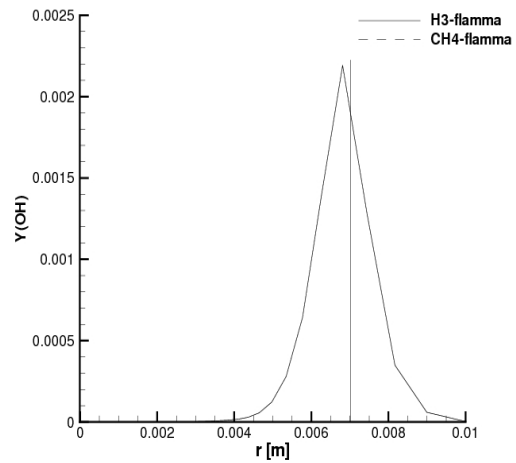
(a) Oppholdstid i finstrukturen.



(b) Dissipasjon av turbulensenergi.



(c) Temperatur.



(d) Massefraksjon av OH.

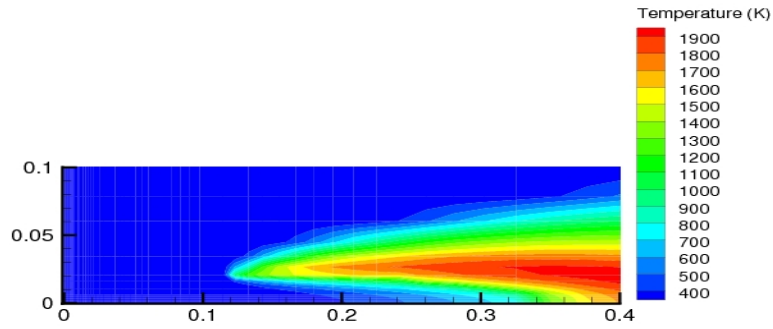
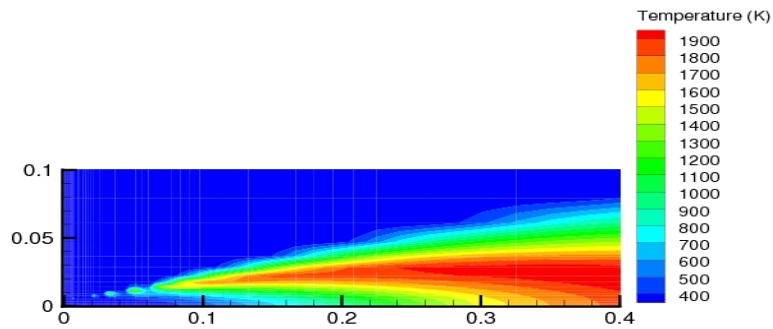
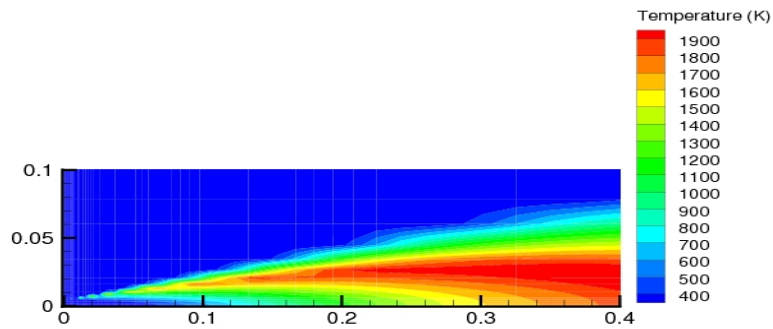
Figur 5.79: Samanlikning av verdier for H3- og CH₄-flamma ved $x = 0,02$ m.

I det følgjande er det samanlikna verdiar der blandingsraten er redusert med ein faktor på 0,1, saman med modifikasjonen som har vore i alle tidlegare simuleringar, $v_r = 0,3/\tau^*$. Desse simuleringane er gjort med gridet som har 75x57 celler (sjå avsnitt 5.3.4). Det vart og simulert utan modifikasjon, men med det grove gridet som har 65x30 celler. Det vart ikkje simulert utan modifikasjon med 75x57 celler, på grunn av for lita tid. Simulering med 65x30 celler vart gjort for alle tre variantane, med $v_r = 0,1/\tau^*$, $v_r = 0,3/\tau^*$ og utan modifikasjon. For å gje så mykje informasjon om resultata som mogleg, er det difor synt nokre konturplott frå simulering med 65x30 celler, der alle variantane er samanlikna. Deretter er det samanlikna fleire verdiar frå simuleringane med 75x57 celler, saman med modellen utan modifikasjon med 65x30 celler.

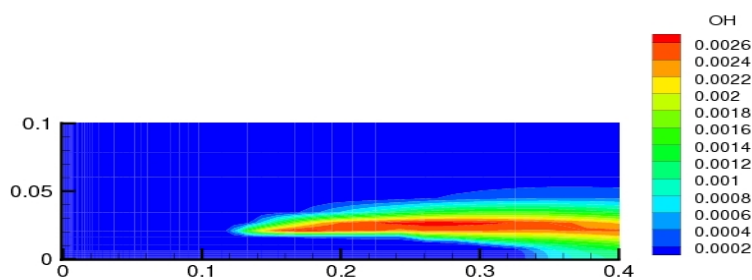
Figur 5.80 og 5.81 syner at det er stor skilnad mellom dei tre modifikasjonane. Flamma kjem med nærare dysa til mindre blandingsraten vert sett. For temperatur og OH-verdiane vert det ikkje danna “øyar” i delar av flammesona der det ikkje er modifikasjon. I simuleringane der v_r er redusert vert det liten kontinuitet bak mot dysa, der det er skilje mellom blå og grøn farge. Flamma er oppstykkka.

For OH-verdiane er det likeins. Her er det meir OH i regionar der flammesona er kontinuerleg utan modifikasjon. Der fargen er heilt raud i figur 5.81a, ved omlag $x = 0,2$ m, er det mindre OH frå simuleringane med modifikasjon. Medan verdien er omlag 0,0026 utan modifikasjon, er den omlag 0,0018 for $0,3/\tau^*$ og omlag det same for den siste. I området $0,1 \text{ m} < x < 0,2 \text{ m}$ er det modifikasjonen $0,1/\tau^*$ som gjev minst kontinuitet i flammen.

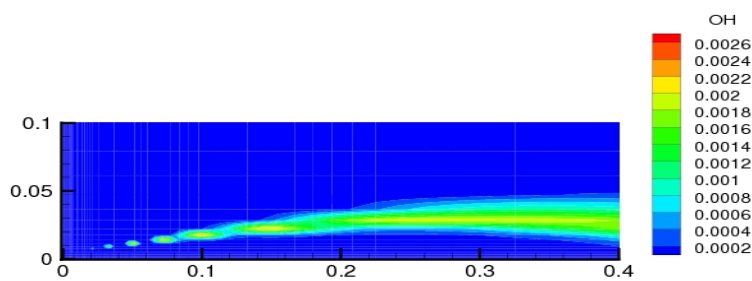
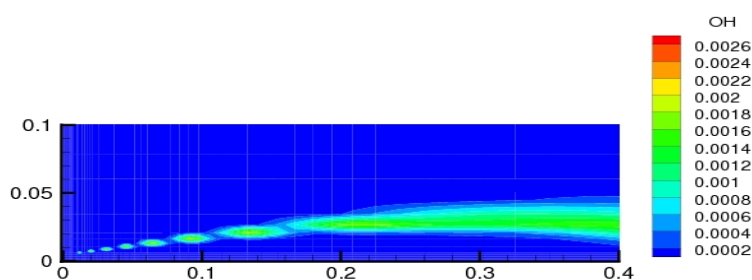
Figur 5.82 og 5.83 syner temperatur og massefraksjon frå gridet med 75x57 celler. Det er som sagt ikkje simulert utan modifikasjon med dette gridet. Som for det grove gridet ser det ut til at flammen kjem nærare dysa med mindre v_r . Det som kjem nærare er oppstykkka, både for temperatur og OH-verdiar. Figur 5.83b syner at det er noko meir OH i delen av flammen som er kontinuerleg, enn med den minste blandingsraten. Samanlikna med det grovare gridet (65x30), så kjem ein større del av ei kontinuerleg flamma bak mot dysa. For gridet med 75x57 celler byrjar ein kontinuerleg del av flammen ved omlag $x = 0,02$ m. Dette kan sjåast av temperaturen og OH-verdiane.

(a) Utan modifikasjon, $v_r = 1/\tau^*$.(b) $v_r = 0,3/\tau^*$.(c) $v_r = 0,1/\tau^*$.

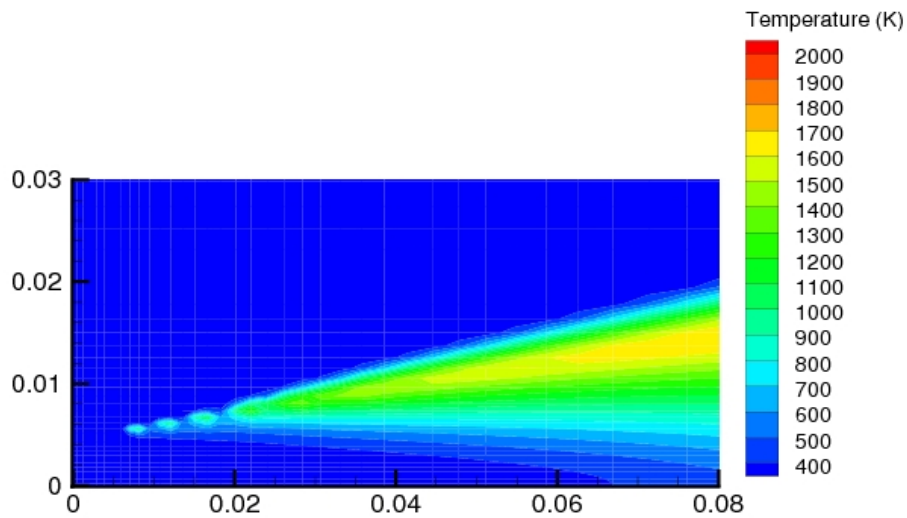
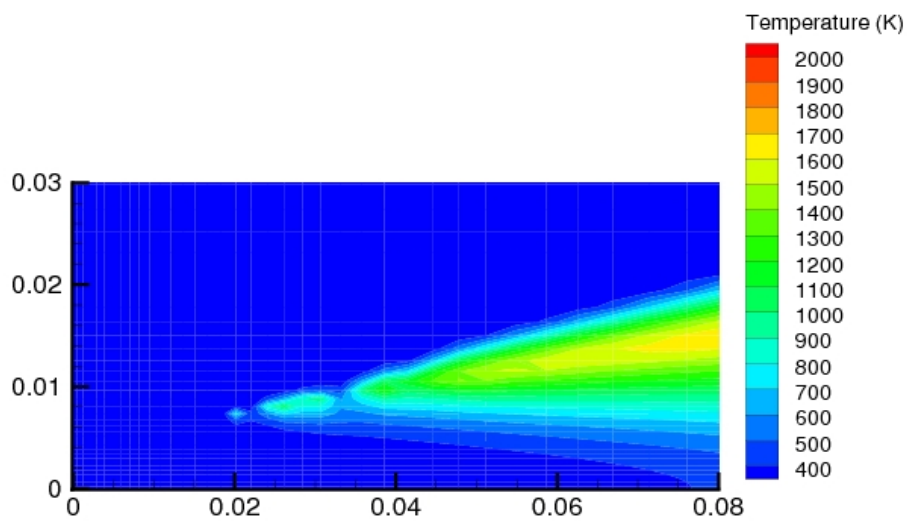
Figur 5.80: Samanlikning av ulike blandingsrater. Konturplott av temperatur frå grid med 65x30 celler.



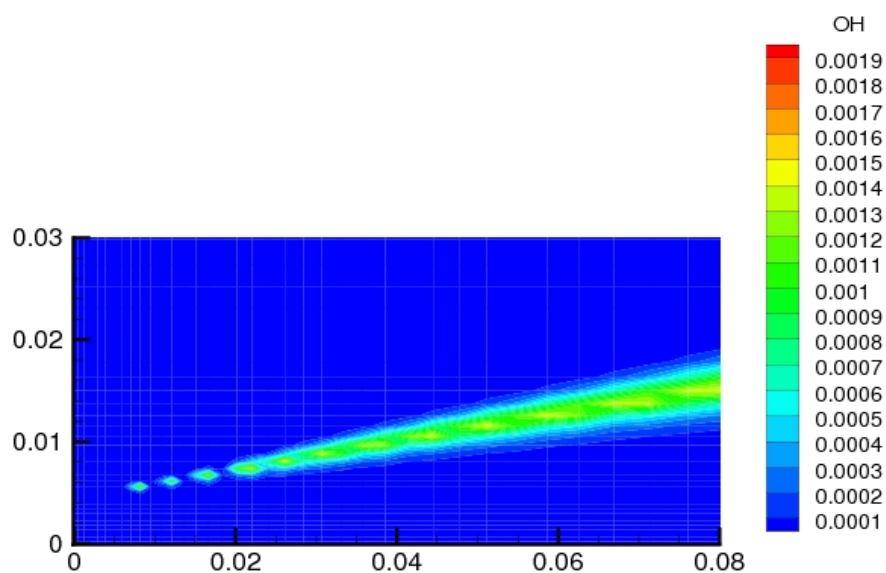
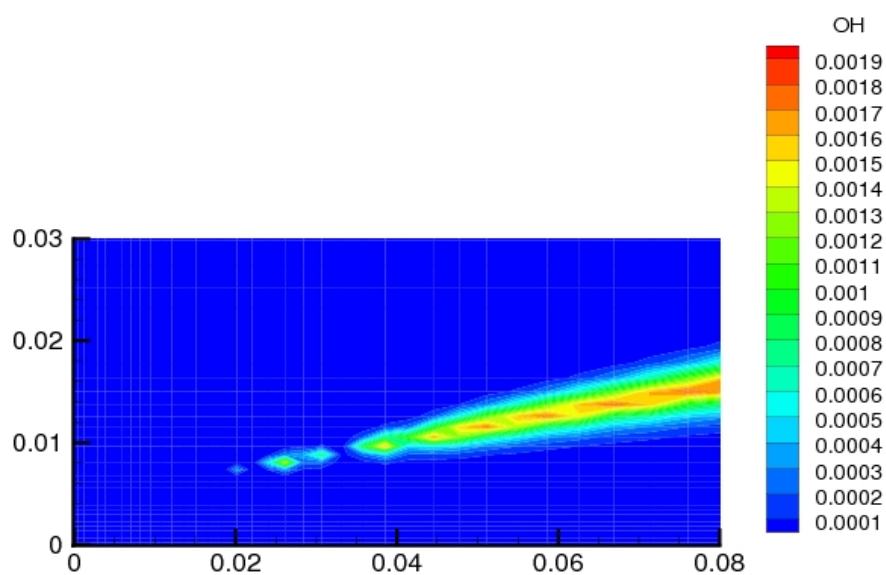
(a) Utan modifikasjon.

(b) $v_r = 0,3/\tau^*$.(c) $v_r = 0,1/\tau^*$.

Figur 5.81: Samanlikning av ulike blandingsrater. Massefraksjon av OH fra grid med 65x30 celler.

(a) $\nu_r = 0.1/\tau^*$.(b) $\nu_r = 0.3/\tau^*$.

Figur 5.82: Samanlikning av ulike blandingsrater. Konturplott av temperatur frå grid med 75x57 celler.

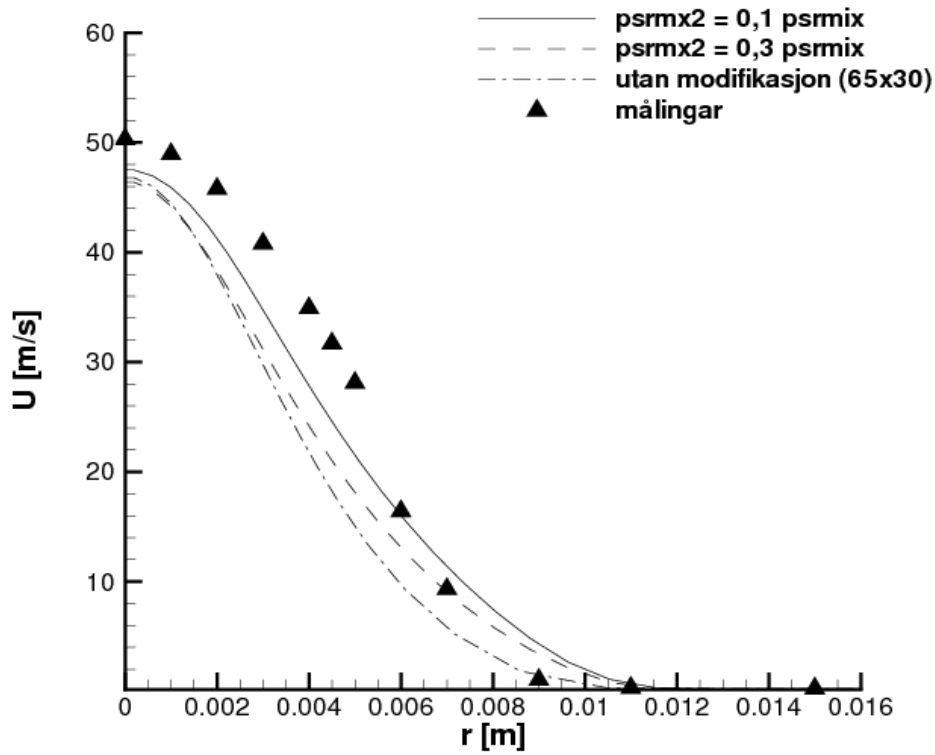
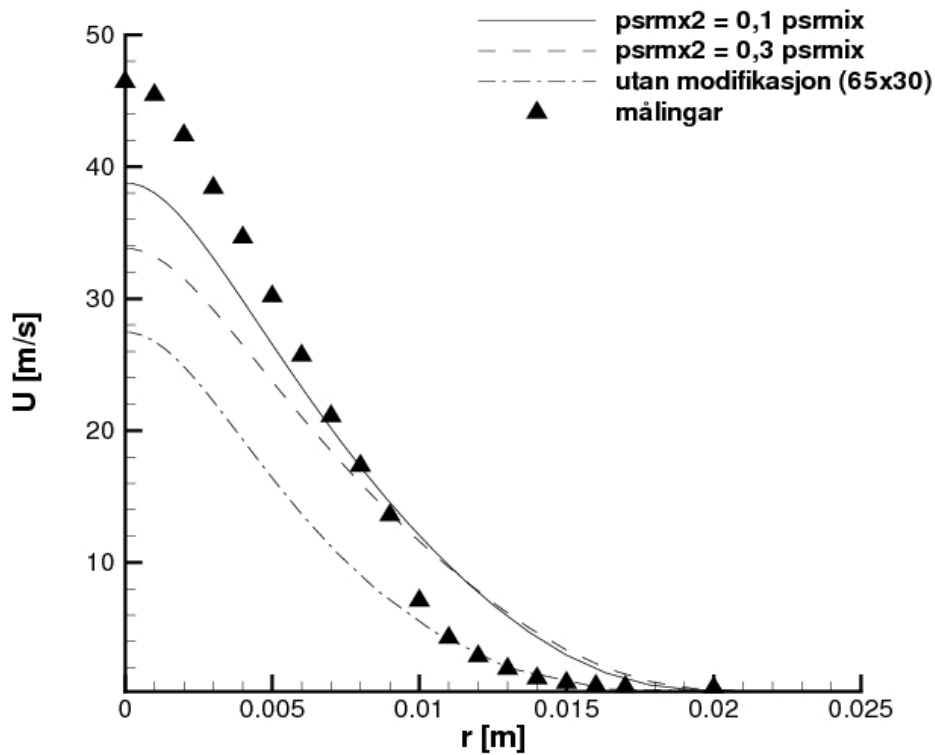
(a) $\nu_r = 0.1/\tau^*$.(b) $\nu_r = 0.3/\tau^*$.

Figur 5.83: Samanlikning av ulike blandingsrater. Massefraksjon av OH fra grid med 75x57 celler.

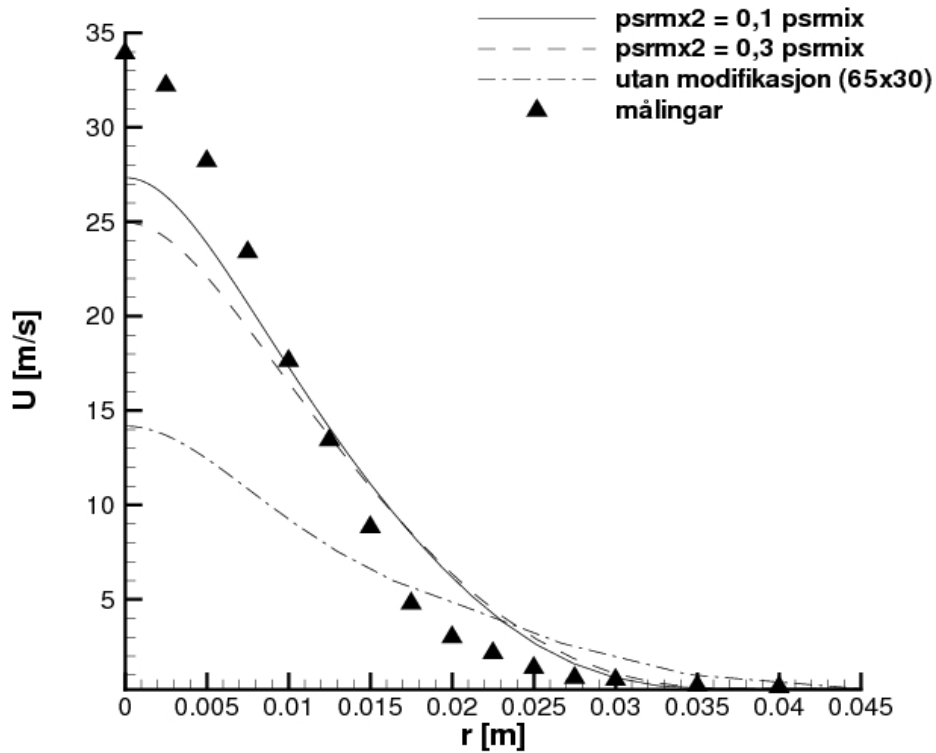
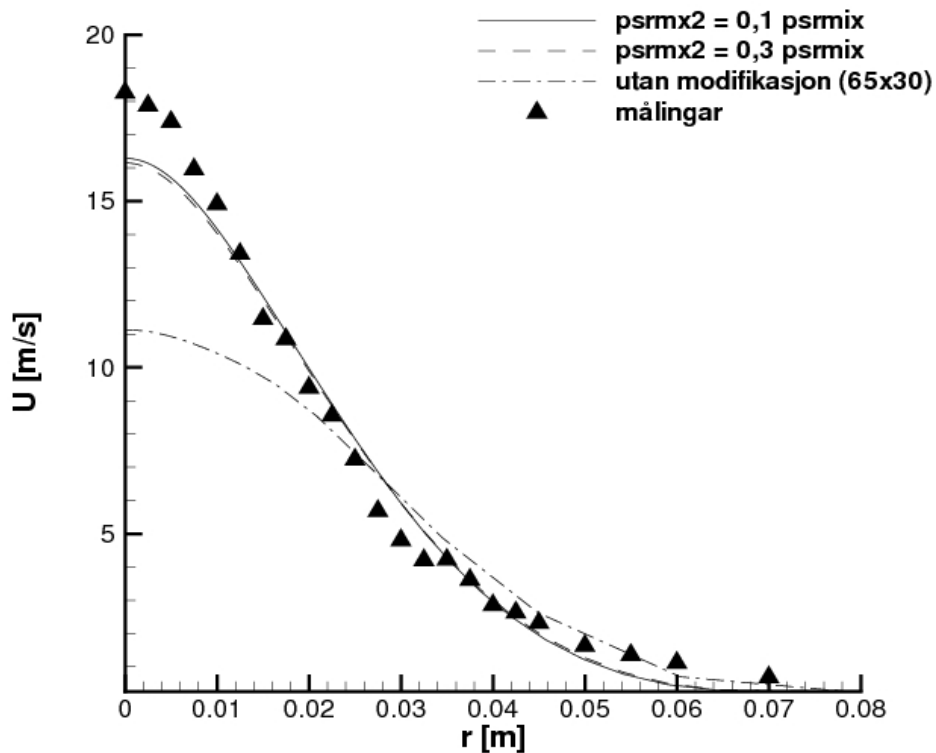
I det følgjande er det samanlikna verdiane for fart, temperatur og OH-verdiane saman med andre skalare storleikar. Verdiane er samanlikna med måledata ved $x/d = 5, 10, 20, 40, 60$ og 80 . For fart og turbulensenergi er det nytta likeins grenseverdiane som målingar ved $x/d = 0$. Dissipasjonen, ε , er henta frå enden av eit "røyr" med 30 grenseceller ved innløpet åt brensløpet (sjå figur 5.2a, 5.6a og 5.3).

Figur 5.84 - 5.86 syner fart i x-retning. "psrmx2" og "psrmix" er namn som er nytta på blandingsraten i programmet. $psrmx2 = 0,1$ $psrmix$ er då $v_r = 0,1/\tau^*$. Frå no av vert modifikasjonane ofte berre omtala som "0,1" og "0,3". Nær dysa er det tydeleg at 0,1 gjev best samsvar med målingar, men framleis er det for mykje spreiding. Ved $x/d = 10$ er senterfarta mindre for 0,1 enn målingar. For mykje spreiding held fram til omlag $x/d = 20$. Ved $x/d = 10$ og 20 ser det ut som at volumstraumen er ein del mindre for tilfellet utan modifikasjon. Ved $x/d = 60$ er profila meir samanfallande for alle simuleringane. Frå $x/d = 10$ til $x/d = 20$ vert verdiane utan modifikasjon nesten halvert inne ved $r = 0$. Farta der v_r er modifisert minkar ikkje så fort som den utan modifikasjon fram til $x/d = 20$. Mellom $x/d = 40$ og $x/d = 60$ har verdiane utan modifikasjon nesten ikkje minka, medan dei med modifikasjon minkar og "møter" dei andre verdiane utan endra v_r .

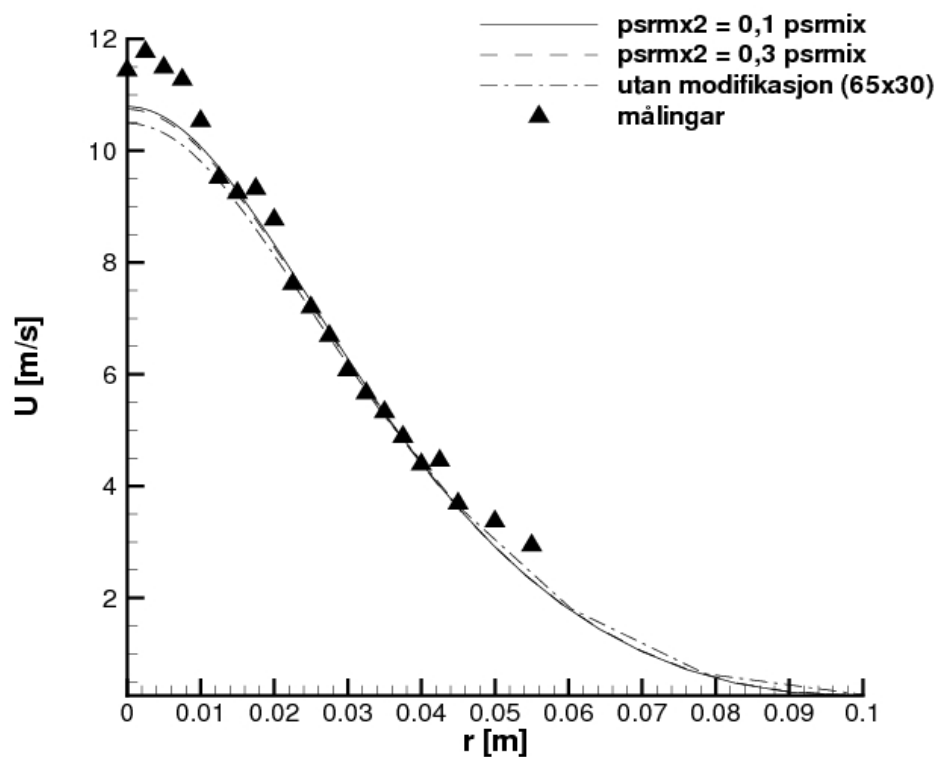
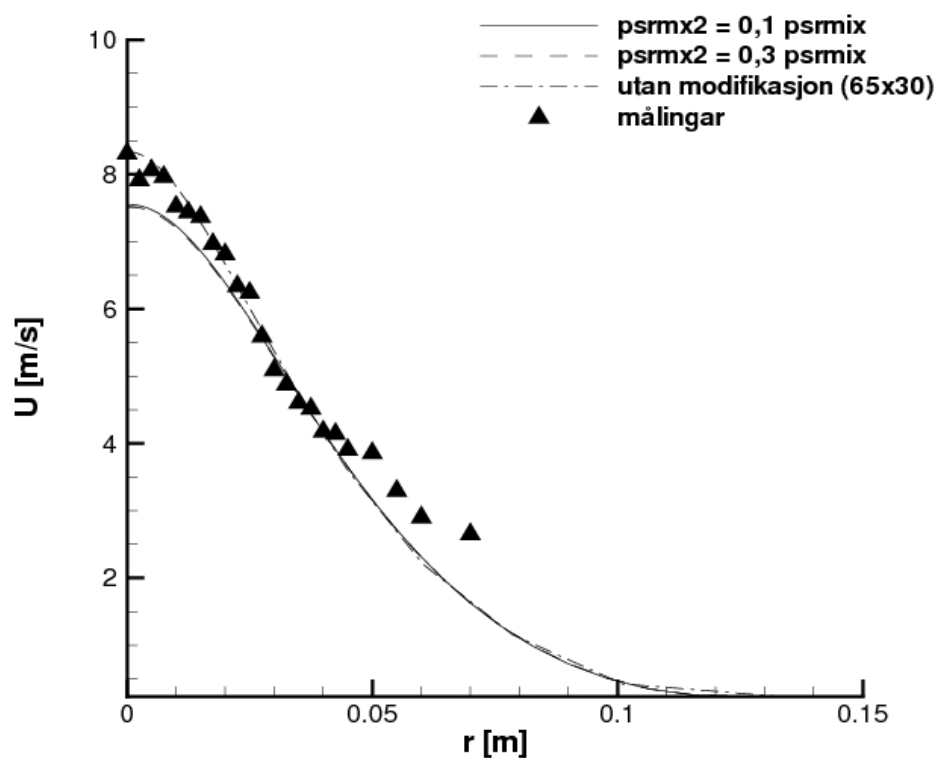
Temperaturen er synt i figur 5.87 - 5.89. Ved $x/d = 5$ er 0,1 nærast målingar, medan temperaturen enno er lik 292 K for simuleringane utan modifikasjon. Maksimaltemperaturen ligg noko lenger ute i radiell retning, og profilet er breiare for 0,1 enn målingar. Ved $x/d = 10$ er 0,1 og 0,3 meir samanfallande, men framleis er profila forskyvde i høve målingar. Ved $x/d = 20$ har temperaturen utan modifikasjon fått eit lyft, men er framleis mindre enn dei andre. Fram til omlag $r = 0,012$ m er det godt samsvar mellom modifisert v_r og målingar. Nett som tidlegare resultat har synt, så vert det eit avvik mellom måleverdiane og simulering etterkvart som maksimalverdien nærmar seg senterlinja. Frå då av er avviket nesten like stort fram mot $r = 0,1$ m. Ved $x/d = 60$ og $x/d = 80$ er det nesten ingen skilnad mellom dei ulike simuleringane. Modifikasjonen med $v_r = 0,1/\tau^*$ gjev eit betre temperaturprofil inne ved dysa, men framleis er avviket for stort, og ved $x/d = 80$ er det for mykje skilnad for alle simuleringane.

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.

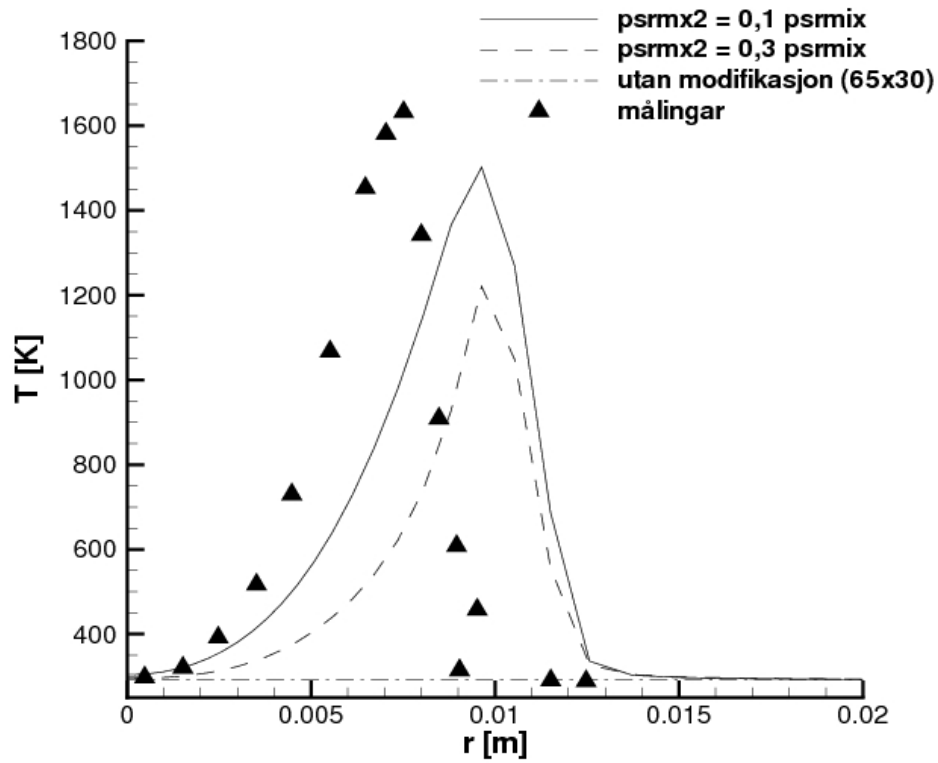
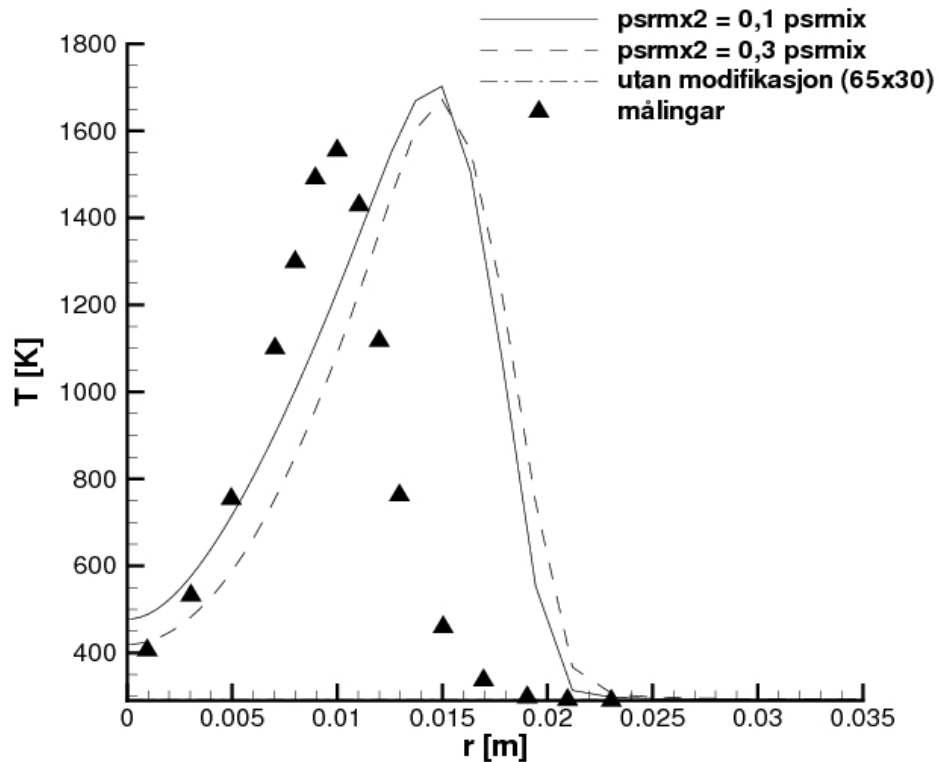
Figur 5.84: Samanlikning av ulike blandingsrater, der $\nu_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Fart i x-retning ved $x/d = 5$ og $x/d = 10$.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.

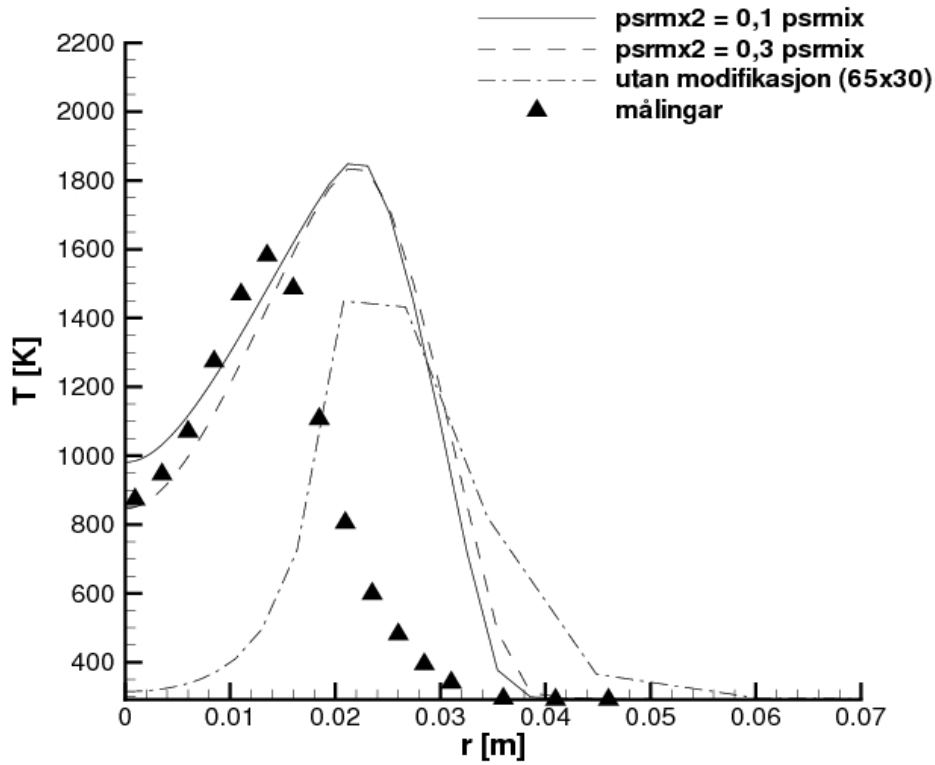
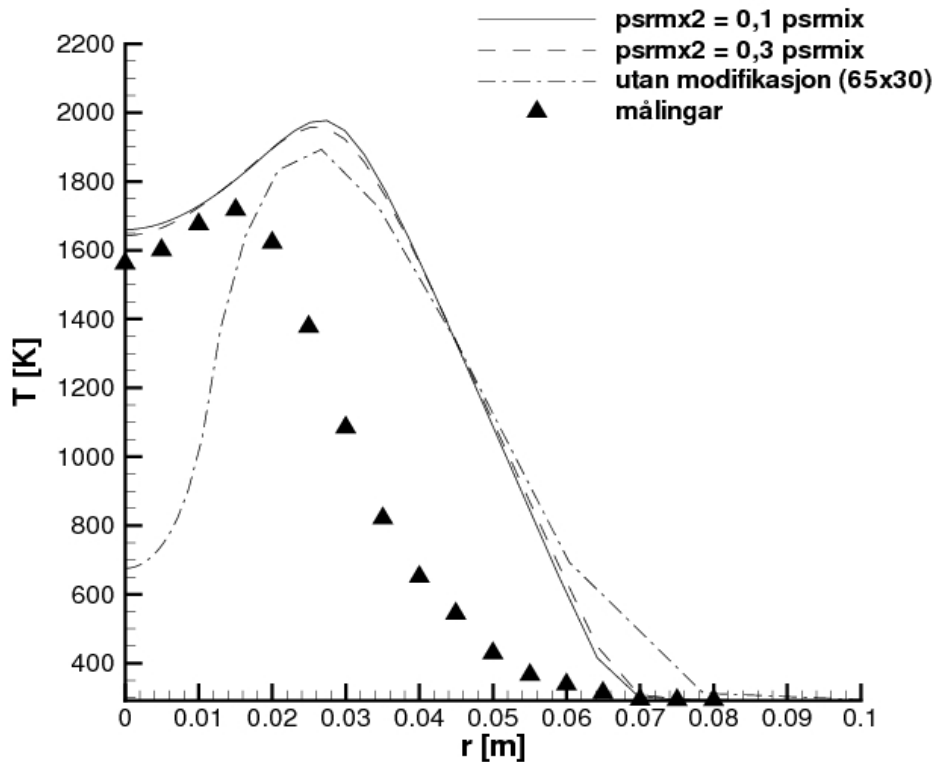
Figur 5.85: Samanlikning av ulike blandingsrater, der $v_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$.
Fart i x-retning ved $x/d = 20$ og $x/d = 40$.

(a) $x/d = 60$.(b) $x/d = 80$.

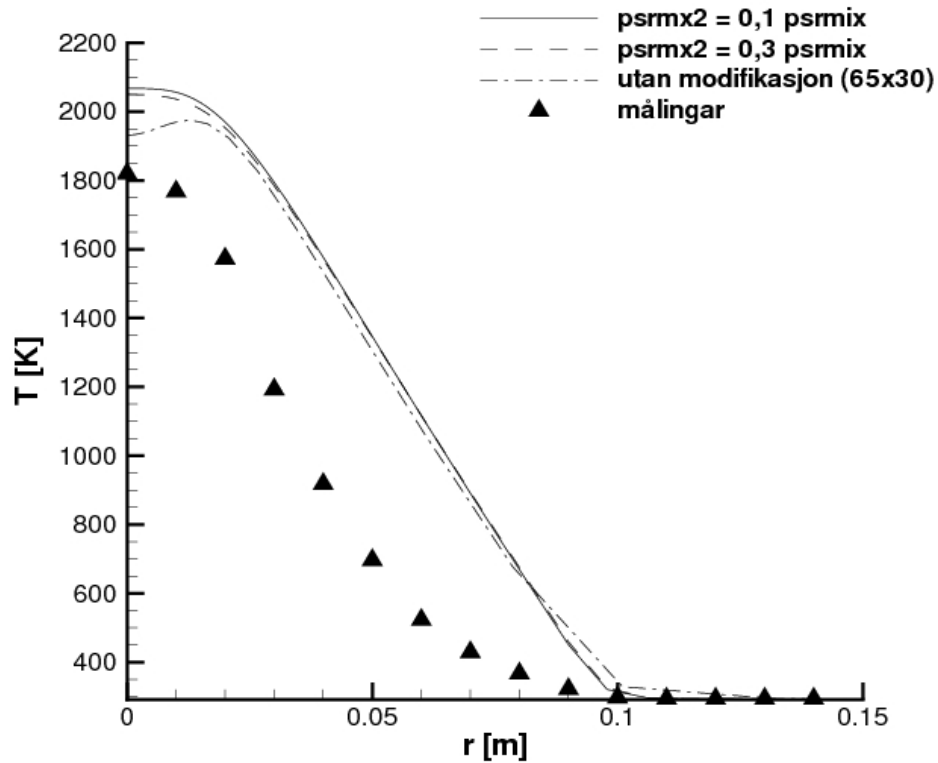
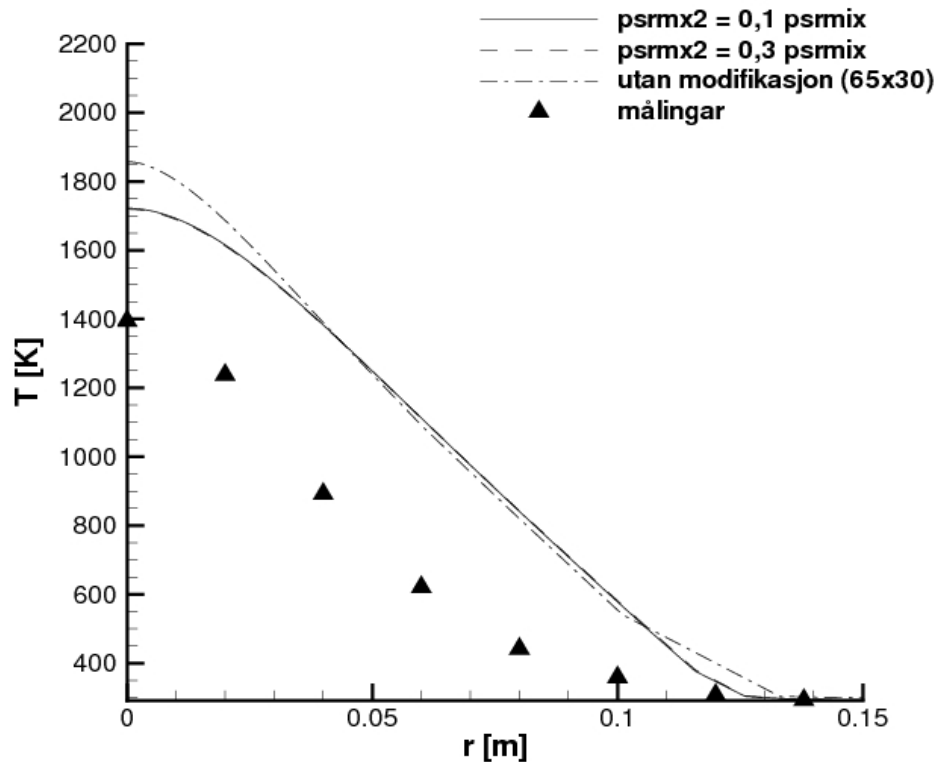
Figur 5.86: Samanlikning av ulike blandingsrater, der $\nu_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Fart i x-retning ved $x/d = 60$ og $x/d = 80$.

(a) $x/d = 5$.(b) $x/d = 10$.

Figur 5.87: Samanlikning av ulike blandingsrater, der $v_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Temperatur ved $x/d = 5$ og $x/d = 10$.

(a) $x/d = 20$.(b) $x/d = 40$.

Figur 5.88: Samanlikning av ulike blandingsrater, der $\nu_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Temperatur ved $x/d = 20$ og $x/d = 40$.

(a) $x/d = 60$.(b) $x/d = 80$.

Figur 5.89: Samanlikning av ulike blandingsrater, der $v_r = \text{psrmx2}$ og $\tau^* = \text{psrmix}$. Temperatur ved $x/d = 60$ og $x/d = 80$.

Drøfting

Det ser ut som at det er meir OH til lengre frå dysa den kontinuerlege delen av flammen byrjar. Figur 5.83 syner dette. For tilfellet der flammesona vert fanga opp nærare dysa, så vert og meir OH brukt tidlegare. Det kan tenkjast at når føresetnaden først er tilstades, numerisk eller anna, så vert det brukt meir OH lenger nedstraums, sidan det ikkje har vorte brukt noko nærare dysa. Tilfellet med $\nu_r = 0,1/\tau^*$ fordeler då forbruket meir utover, fordi flamma er større, enn hjå den andre modifikasjonen.

Figur 5.81 syner at fordelinga av OH ikkje er så oppstykkja for tilfellet utan modifikasjon. Det vert ingen “øyar” før flamma er kontinuerleg, ved omlag $x = 0,12$ m. For tilfellet med $\nu_r = 0,1/\tau^*$ er OH-verdiane mykje meir usamanhengande.

I EDC-modellen er blandingsraten definert likeins som masseutvekslinga, \dot{m}^* (sjå avsnitt 2.6). Er reaktoren rekna stasjonær, så er Y_k^* gjeve av likning (2.90). Inne ved dysa er det mykje brensel, og reaksjonsraten, R_k^* , er negativ om det vert forbrukt stoff k . I same området er opphaldstida, τ^* , veldig lita, som følgje av ein stor ε . Då er blandingsraten stor. Likning (2.91) gjev at den midla reaksjonsraten vert mindre til større ν_r vert, for ein gjeven \dot{m} og R_k^* . Med negativ verdi av reaksjonsraten i finstrukturen, vert det mindre forbruk av \dot{Y}_k til større blandingsraten er.

I SPIDER er ν_r forandra når likning (2.88) skal integrerast i LIMEX. Opphaldstida og dei andre storleikane er gjeve på vanleg måte. Ein reduksjon i blandingsraten kan gjerast ved å auke konstanten, C_{D2} (sjå likning 2.67). Dette skulle då gje ein høgare γ^* og γ_λ , som er sannsynet for å finne finstruktur og regionar med finstruktur. Dette er naturleg, då større sannsyn for å finne finstruktur skulle gje meir av stoff k i finstrukturen. Aukar Y_k^* , så skal det og verte mindre av Y_k° .

Der er framleis usikkert om denne diskontinuiteten vi ser i dei modifiserte simuleringane kjem av reduksjonen i ν_r . I høve målingar gjev dette uansett eit betre resultat. Noko anna som er endå meir usikkert er det store avviket i temperaturen. Dette er og tilfelle for H3-flamma. Inne ved dysa er temperaturen noko mindre enn målingar, men målingar finst det først ved $x/d = 5$. Av konturplotta ser vi at endå nærare dysa er temperaturen mykje for låg, enn om flamma kjem heilt inntil dysa. Det er vanskeleg å seie om den for høge temperaturen lenger nedstraums kjem av for låg temperatur inne ved dysa, utan å sjå om den totale energien er den same over det radielle tversnittet utover i akseretninga. Truleg vert flamma forsenka sidan flamma ikkje kjem med i byrjinga, men spørsmålet er kor mykje.

5.3.6 Modellering av NO_x

I denne delen er det presentert resultat som syner NO_x , og andre stoff som kan fortelje noko om danninga av denne. Det er berre CH_4 -flamma som vert handsama, sidan verdiane for NO er gjeve i molfraksjonar for H3-flamma. Det vart ikkje tid til å gjere om desse.

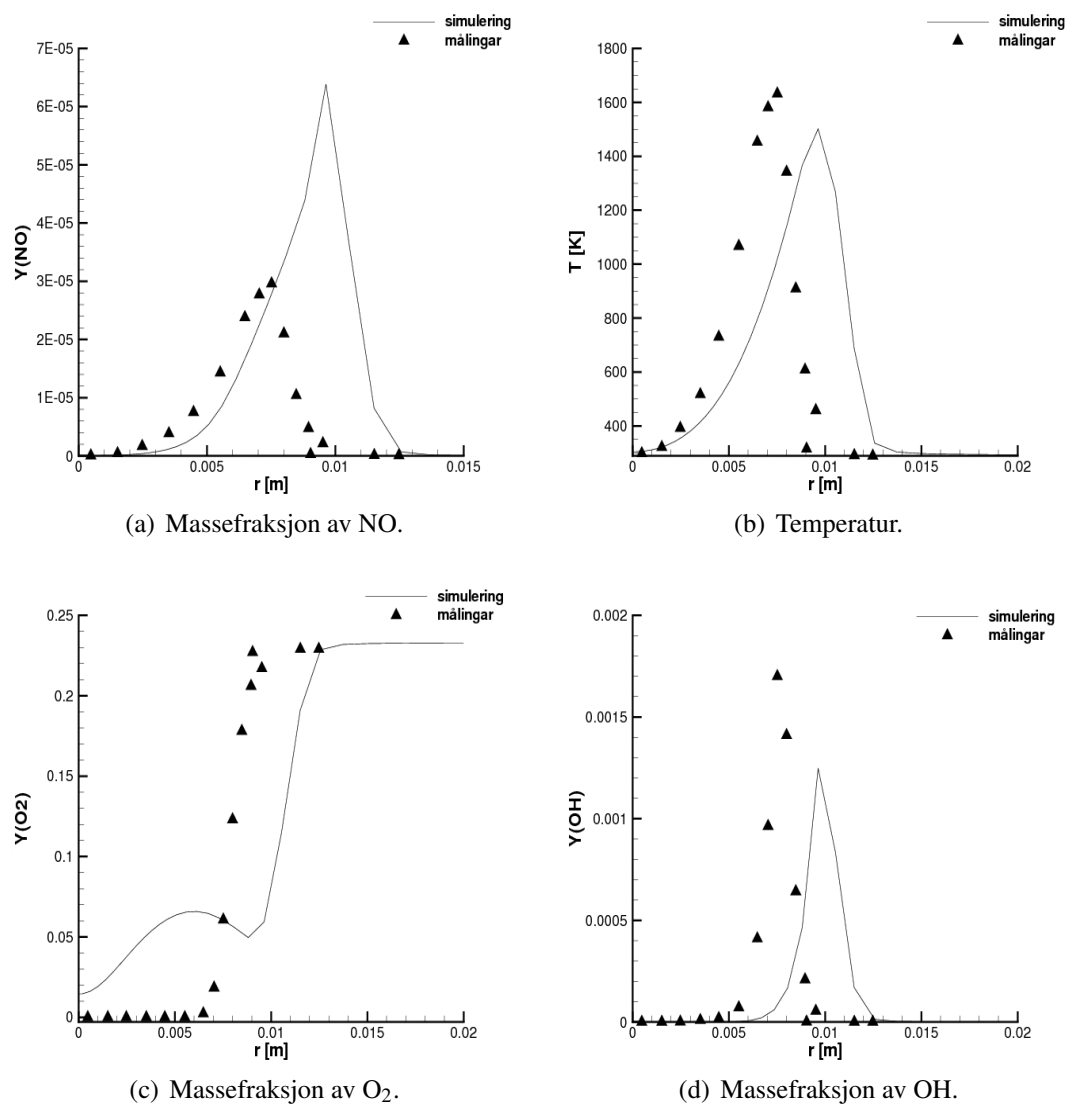
Kapittel 3 i denne rapporten gjev noko informasjon om kva for mekanismar som danner NO_x . For CH_4 -flamma vil det mellom anna verte danna CH- og CH_2 -radikal i brenselrike områder, og desse spelar ei viktig rolle i prompt-NO mekanismen. Temperaturen er kanskje den viktigaste faktoren for danning av NO, og denne vert samanlikna med NO-verdiane. For H3-flamma kan NNH-mekanismen verke inn på NO_x -danninga, spesielt ved flammefronten der det er mykje H, men dette vert altså ikkje handsama her.

Idet følgjande vert NO, T, O_2 , OH, H_2 og CH_4 synt i figurar, og dei er samanlikna med måledata. Dette er radielle profil ved $x/d = 5, 10, 20, 40, 60$ og 80 . Det er nytta same gridet frå førre del, med $v_r = 0,1/\tau^*$.

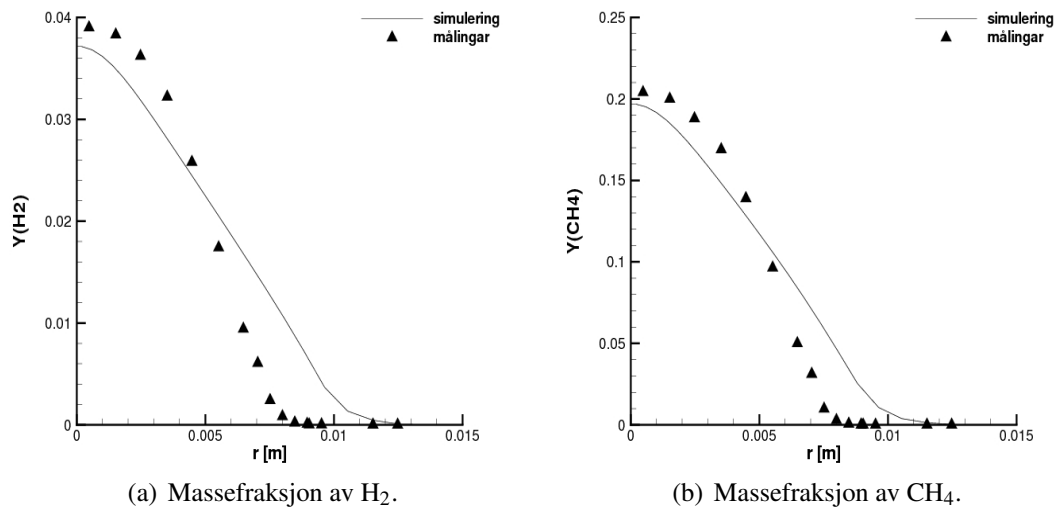
Resultat

Figur 5.90 syner NO saman med andre storleikar ved $x/d = 5$. Her er måleverdiene størst fram til omlag $r = 0,008$ m. Vidare utover i r-retning har simulerte verdiar ein toppverdi som er omlag 35 ppm (på massebasis) høgare enn det toppverdien åt målingane var lenger mot senterlinja. Profilet frå simuleringane er forskyvd utover i r-retning. Temperaturprofilet syner at maksimalverdien ikkje er så ulike, men er litt høgare for målingane, som har maksimalverdi på omlag 1650 K. Denne verdien er truleg for liten til at termisk NO er gjeldande. NO-verdien over det radielle tverrsnittet er større for simulering enn målingar.

I figur 5.90c ser vi at O_2 -verdien er forskyvd litt i radiell retning. Noko anna som bør merkast er korleis verdien frå simuleringane er i området $0 < r < 0,007$ m. I høve målingane er verdiane for store, og minkar før dei aukar igjen saman med målingar, men då noko forskyvd i r-retning. OH-verdien i figur 5.90d syner at maksimalverdien er noko lenger ute i r-retning, og lågare for simulerte verdiar. Figur 5.91 syner, nett som tidlegare, at brensllet vert noko meir spreidd i høve målingar.

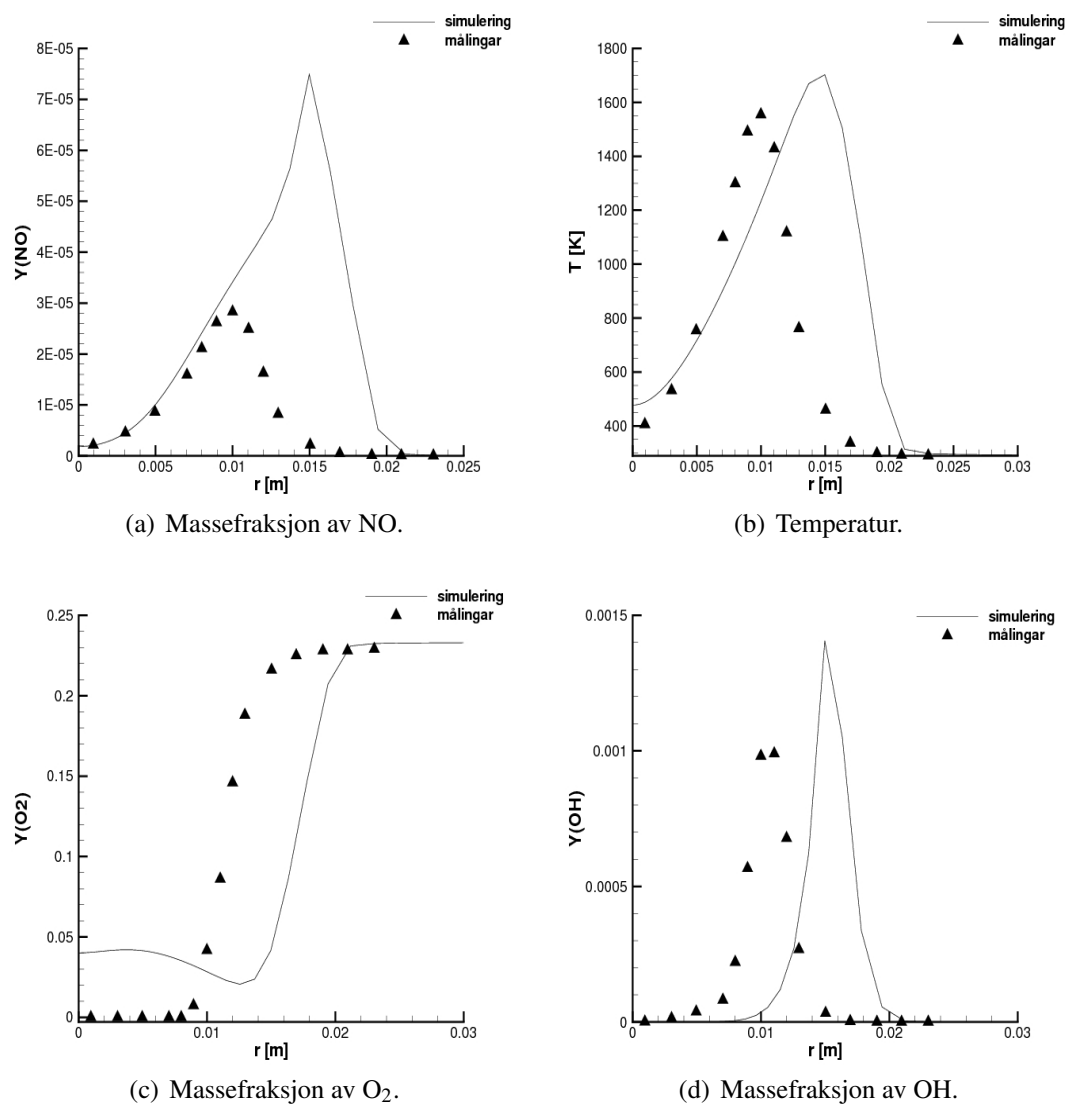


Figur 5.90: Samanlikning av NO, T, O_2 og OH ved $x/d = 5$.

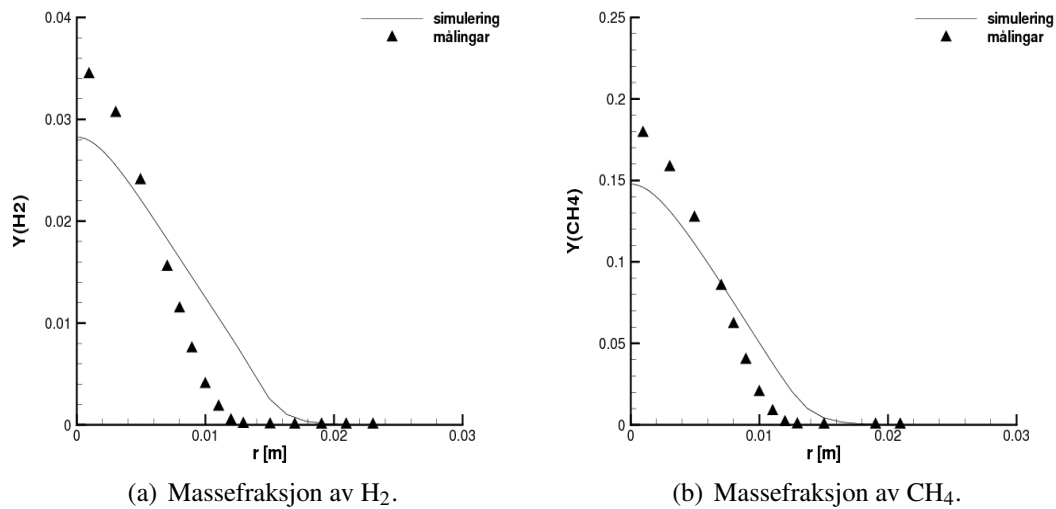


Figur 5.91: Samanlikning av H_2 og CH_4 ved $x/d = 5$.

Frå $x/d = 5$ til $x/d = 10$ er målte NO-verdiar nesten uforandra, profilet er noko breiare. Likeins er det for temperaturprofilet, men maksimalverdien er noko redusert. Maksimalverdien åt NO frå simuleringane har auka med omlag 10 ppm. Temperaturen har auka med nesten 200 K. Maksimalverdien åt OH frå simuleringar har auka med omlag 100 ppm (på massebasis), medan verdien frå målingane har minka med omlag 800 ppm. Profilet er noko breiare for både simuleringar og målingar. Både brensel og oksygen er noko meir spreidd i radiell retning her, enn ved $x/d = 5$.



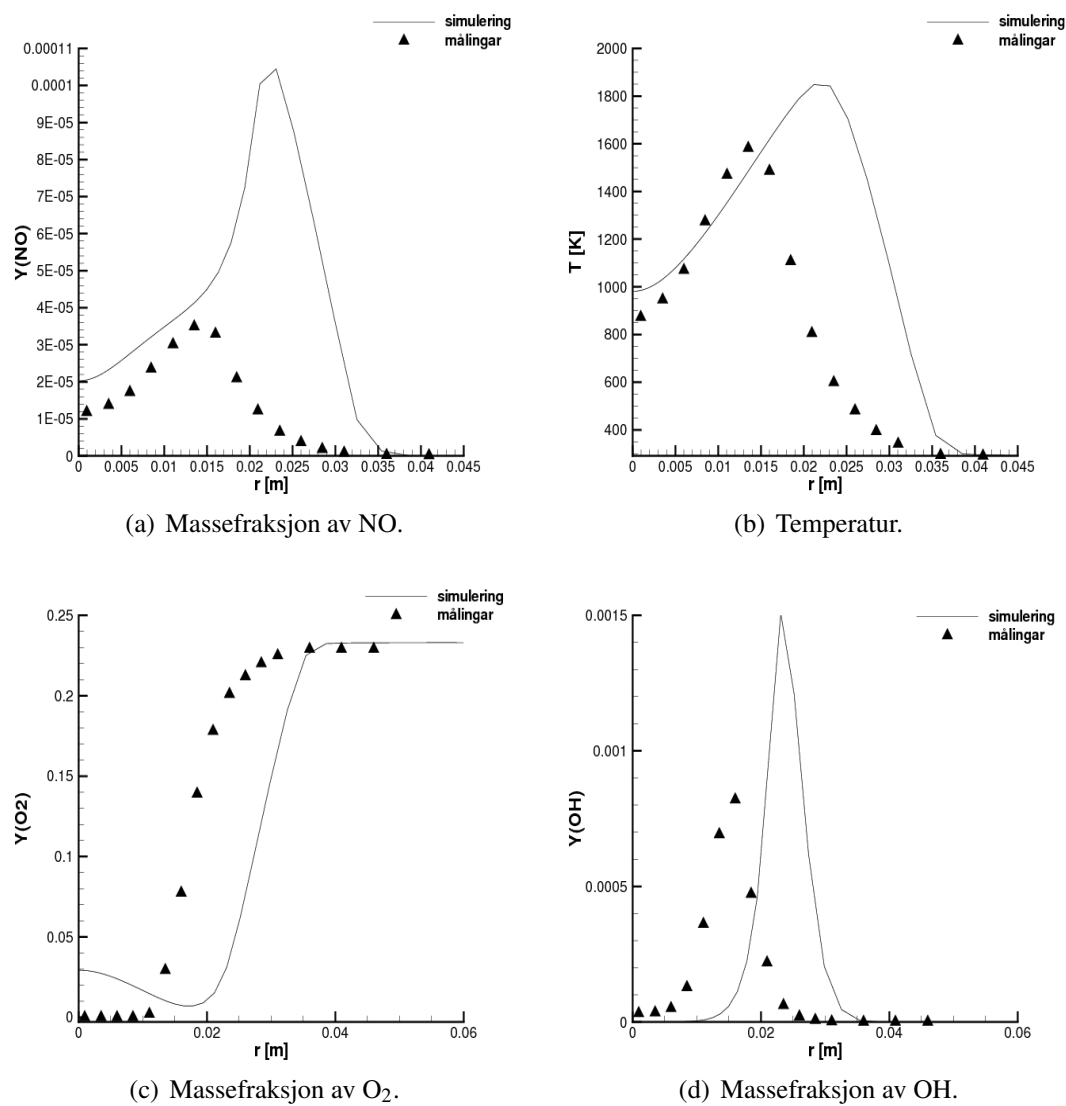
Figur 5.92: Samanlikning av NO , T , O_2 og OH ved $x/d = 10$.



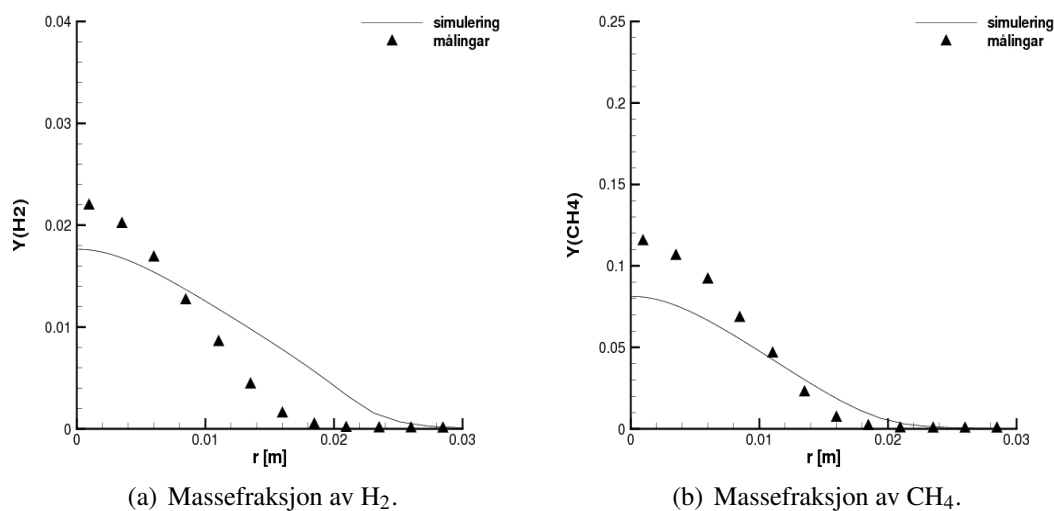
Figur 5.93: Samanlikning av H_2 og CH_4 ved $x/d = 10$.

Frå $x/d = 10$ til $x/d = 20$ aukar maksimalverdien åt NO med omlag 30 ppm. Måle-verdien er nesten uforandra, men profilet er noko breiare. Temperaturen ved $x/d = 20$ er omlag 1600 K for målingane, medan verdien frå simuleringane overstig 1800 K. For den siste er auken på omlag 150 K frå posisjonen $x/d = 10$. Framleis er profilet frå simuleringane forskyvd utover i r -retning, og med tanke på arealet som kurven danner, ser det ut som at simuleringane inneheld meir energi i form av varme. OH-verdiane er og forskyvd i r -retning, og toppverdien er omlag 650 ppm høgare enn målingar. O_2 -verdiane er og forskyvd. Inne ved $r = 0$ er verdien minka med omlag 0,01 frå $x/d = 10$ til $x/d = 20$. Framleis er det ikkje noko målt oksygen her.

Brenslet er framleis spreidd meir enn målingane, men det ser ut til at den totale mengda brensel, over det radielle tverrsnittet, ikkje minkar noko raskare enn målingar. Det er mogleg at det vert forbrukt CH_4 noko raskare, og H_2 noko langsamare, men dette er vanskeleg å tyde utifrå figuren.



Figur 5.94: Samanlikning av NO , T , O_2 og OH ved $x/d = 20$.

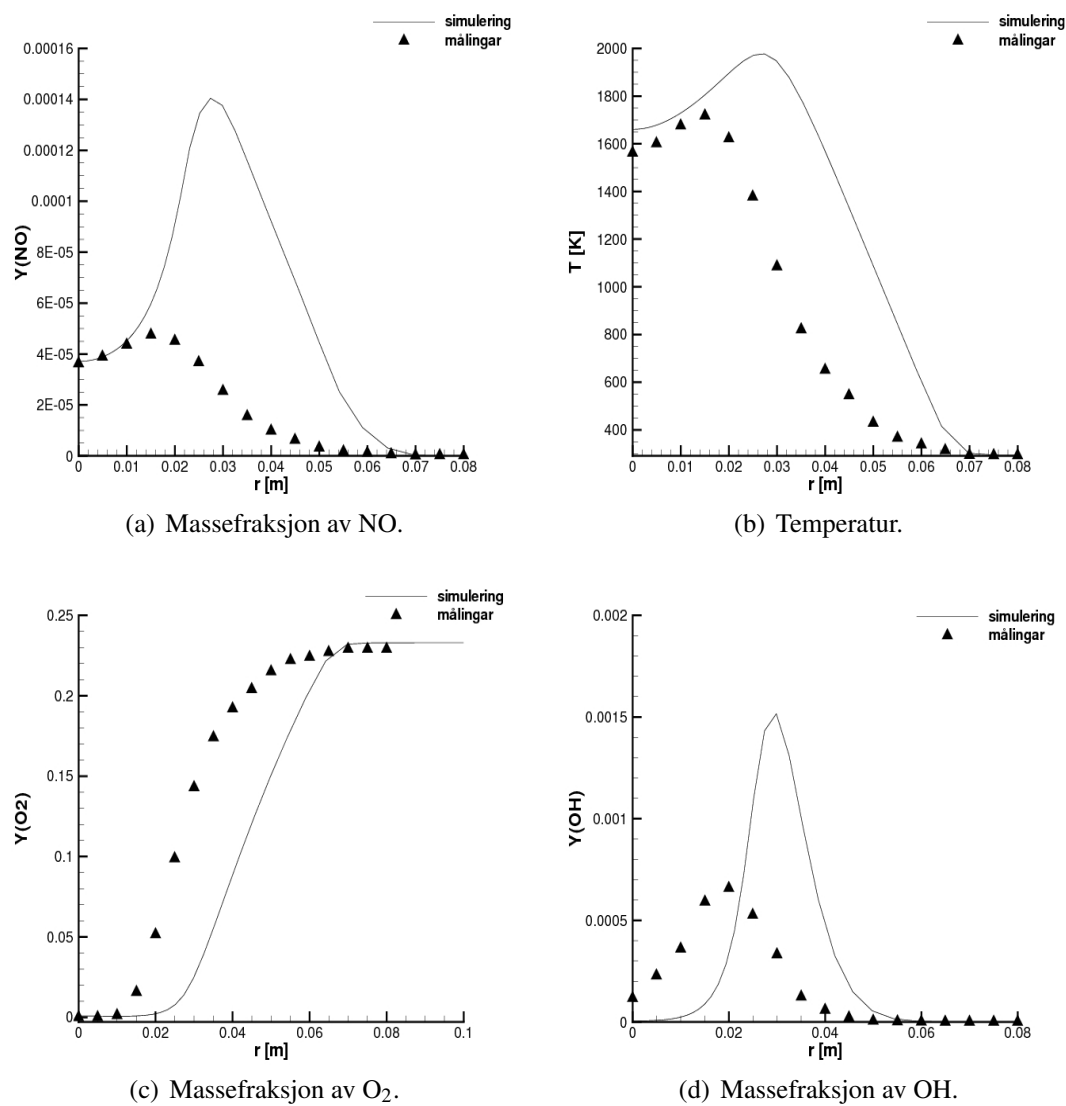


Figur 5.95: Samanlikning av H₂ og CH₄ ved $x/d = 20$.

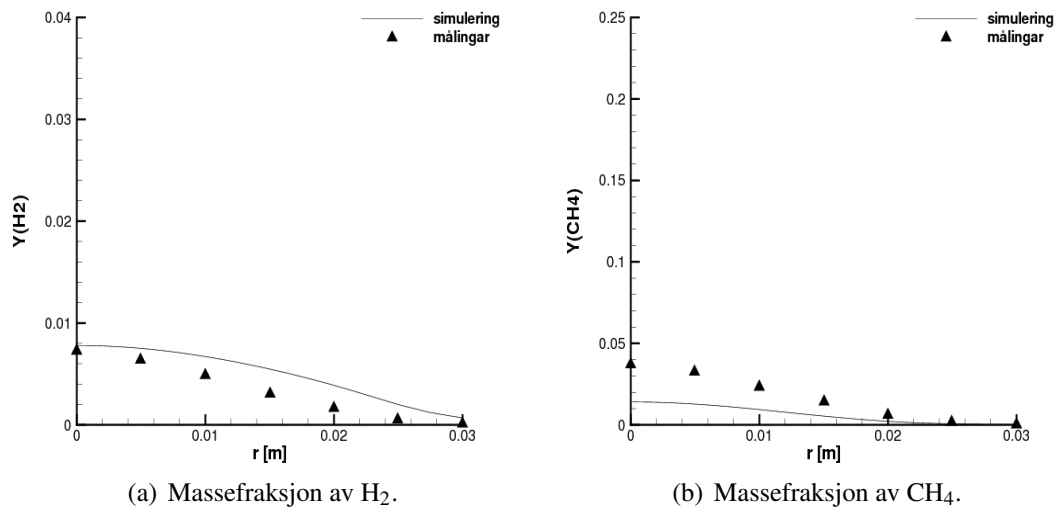
Ved $x/d = 40$ har NO-verdien frå simuleringane auka, og er no omlag 140 ppm, som er 35 ppm meir enn ved $x/d = 20$. Arealet som kurva dannar er tydeleg mykje større enn målingane. Den maksimale måleverdien har omtrent ikkje endra seg. Temperaturen har fått eit lyft på 100 K i simulerte verdiar, og er no 1950 K. Måleverdiane har ein maksimal temperatur på 1720 K.

Ved senter er det no tilnærma null oksygen i simulert verdi. Profilet er framleis forskyvd ut i r -retning, men kanskje noko mindre her. Simulerte OH-verdiar er omlag dei same som ved $x/d = 20$, men profilet er noko breiare. Målte OH-verdiar har minka ein del, og det er tydeleg at OH-verdiane ikkje vert like raskt redusert i simuleringane.

Det er tydeleg at simulerte CH₄-verdiar minkar raskare enn målingar ved $x/d = 40$, og at H₂-verdiane minkar langsamare. Dei er tilnærma likt spreidd no.



Figur 5.96: Samanlikning av NO , T , O_2 og OH ved $x/d = 40$.



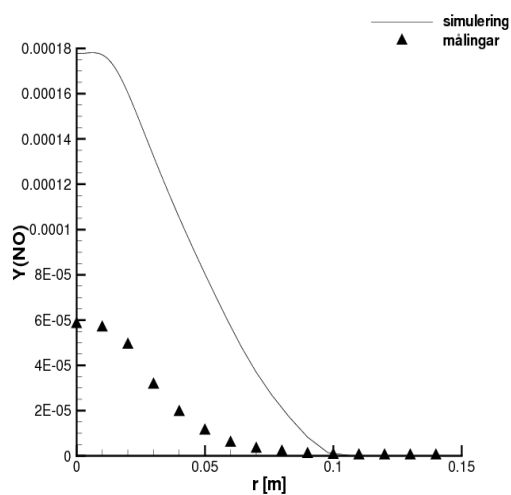
Figur 5.97: Samanlikning av H₂ og CH₄ ved $x/d = 40$.

Ved $x/d = 60$ (figur 5.98) har mengda NO auka endå meir i simuleringane, og er no omlag 180 ppm. Til samanlikning har målt NO auka med omlag 20 ppm, mellom $x/d = 40$ og $x/d = 60$. Det er tydeleg mykje meir NO langs radien for simuleringane, enn for målingane. Ved denne aksielle posisjonen har og temperaturen sin maksimale måleverdi, omlag 1820 K. Simulert verdi har maksimalt omlag 2060 K. Profilet er breiare, og arealet er større, for simulerte verdier.

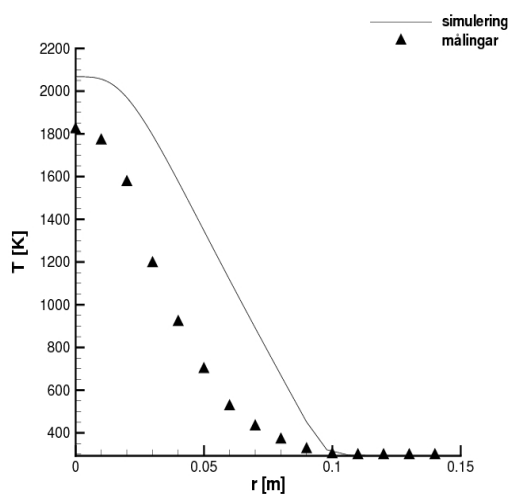
Det er noko lågare simulert verdi for O₂ inne ved senter. Framleis er det noko mindre av den langs r , enn for målingane. Simulert OH-verdi er framleis høgare enn målingar, og medan maksimal måleverdi er inne ved $r = 0$, er maksimalverdi frå simuleringa ved omlag $r = 0,015$ m.

CH₄ og H₂ er ikkje plotta her, sidan verdiane er lik null langs heile r .

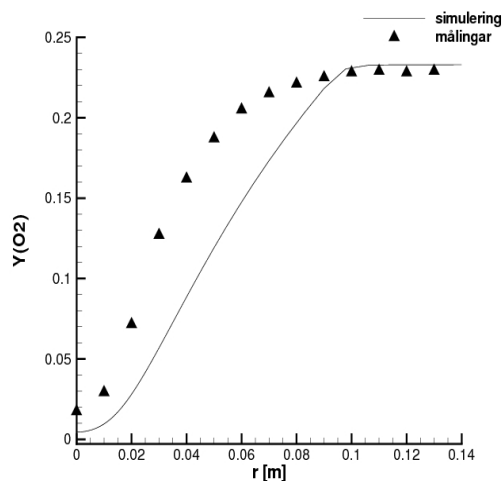
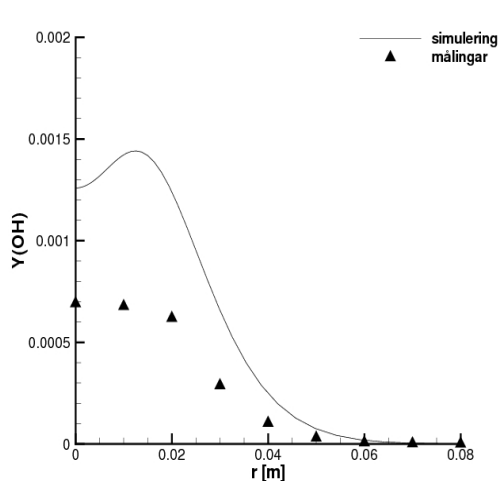
Ved $x/d = 80$ (figur 5.99) har simulert NO og temperatur framleis høgare verdi enn målingar. O₂-verdiane er nærare kvarandre her, og OH-verdiane er nesten samanfalande.



(a) Massefraksjon av NO.

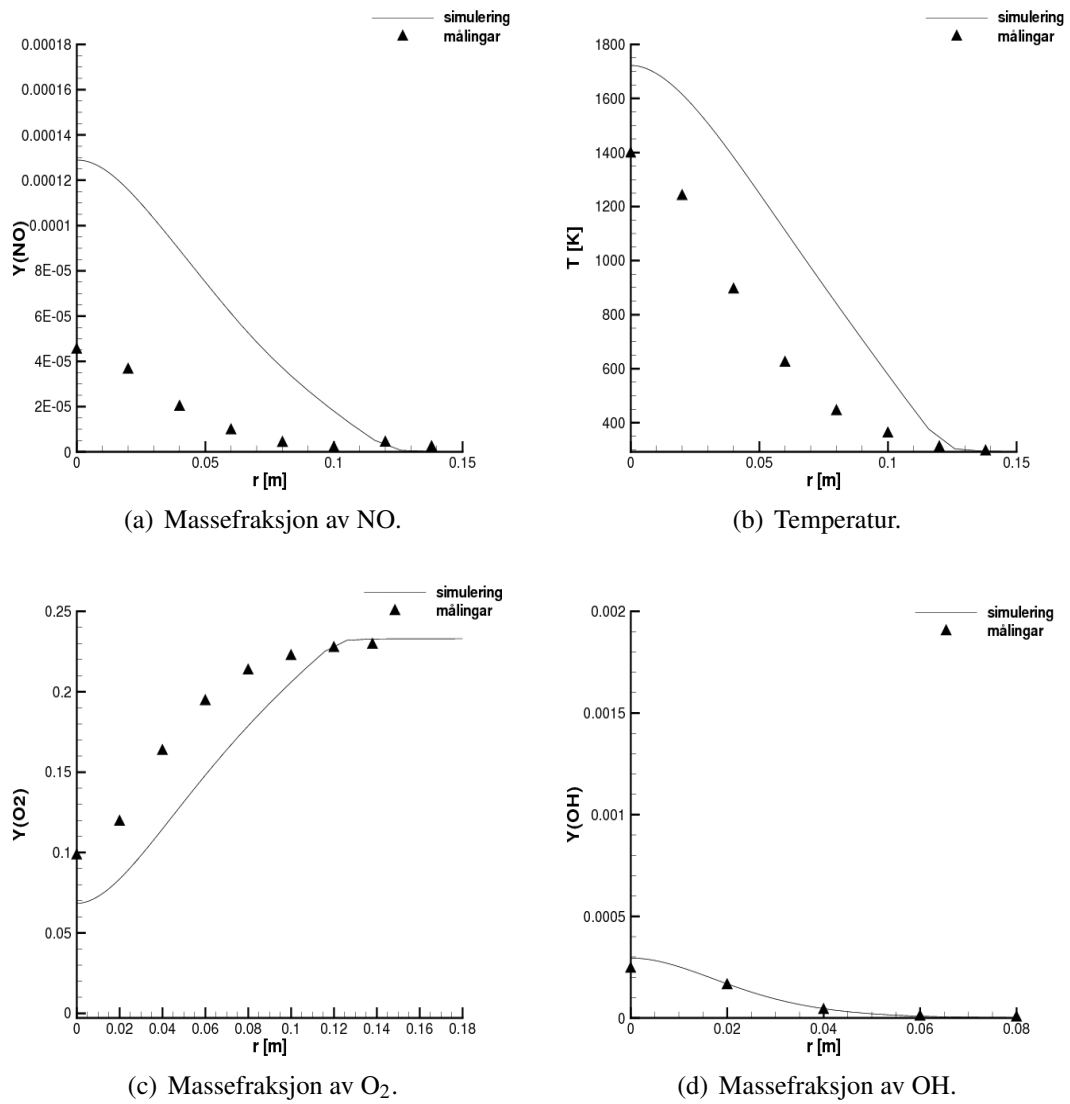


(b) Temperatur.

(c) Massefraksjon av O_2 .

(d) Massefraksjon av OH.

Figur 5.98: Samanlikning av NO, T, O_2 og OH ved $x/d = 60$.



Figur 5.99: Samanlikning av NO, T, O₂ og OH ved $x/d = 80$.

Drøfting

Sjølvs om temperaturen er omlag den same for måling og simulering ved $x/d = 5$, er simulert verdi av NO høgare enn målingane. Temperaturen er omlag 1600 K, og truleg er det litt for lite til at Zeldovich-mekanismen vert kopla inn. I området der NO har maksimal simulert verdi, er det omlag 0,005 meir H₂ enn i målingar, og Y_{CH_4} er omlag 0,02 høgare. Y_{O_2} -verdien er noko mindre enn målingar, men samstundes er den maksimale OH-verdien og her, noko som tyder på at forbrenninga er nær støkiometrisk. Figur 5.90c syner at noko av oksygenet finn vegen inn mot senter av jeten, i staden for å verte spreidd utover. Følgjen er at det vert mindre oksygen i området der det er for mykje brensel.

Mellom $x/d = 10$ og $x/d = 20$ aukar den simulerte NO-verdien, medan måleverdien er tilnærma uforandra. Truleg er det den noko for høge simulerte temperaturen som gjer at det vert danna termisk NO. Den målte NO-verdien kjem aldri over 60 ppm (på massebasis), medan den simulerte er omlag 180 ppm på det meste. Det er ein skilnad på 67 %. Til samanlikning er den maksimale målte temperaturen omlag 1820 K, medan den simulerte er omlag 2060 K. Dette er ein skilnad på 12 %. Den målte temperaturen kjem over det som er rekna for å gje nok energi til å setje i gong Zeldovich-mekanismen. Denne er og avhengig av at det er reaktantar til stades (sjå avsnitt 4.1.1), og for simuleringane er temperaturen litt under 1700 K allereie ved $x/d = 10$, medan målingane har denne verdien ved omlag $x/d = 40$. Noko anna som bør merkast er at temperaturen får maksimalverdi lenger ute i r-retning, kor det er meir oksygen enn ved mindre r. Mekanismen er avhengig av tilstrekkeleg med O og OH for å danne NO, og det er mest av desse radikala i det støkiometrisk området [34] (s. 573).

OH-verdiane er noko forskyvd utover i r-retning, sidan stoffa vert spreidde meir i radiell retning, og det støkiometriske området vert lenger ute. Det vart snakka om over at kanskje var området brenselrikt, men OH-verdien har vanlegvis ein maksimalverdi litt over på det brenselfattige området [34] (s. 46-47). Sidan NO-verdien vanlegvis er maksimal litt meir over på den brenselfattige sida enn OH, kan årsaka til den for høge NO-verdien inne ved dysa vere at det er meir O₂ lenger ute i radiell retning.

Den mykje for høge temperaturen i høve målingar gjer truleg sitt til at NO-verdien vert mykje for høg mange stader i flamma. Det maksimale avviket i høve målingar er i underkant av 15 %, men profilet er breiare, som tyder på at reaktantane er spreidde og flamma vert breiare. Samstundes ser ikkje det ut som at OH-profilet er så mykje for breitt i simuleringane, men det totale avviket er tydeleg. Flammesona er då ikkje nødvendigvis breiare, men den er forskyvd, og temperaturen vert spreidd meir inn mot senter enn for målingane. Spesielt frå $x = 0$ og til omlag $x/d = 20$ er temperaturgradienten mindre inn mot senter enn for målt temperatur. Likeins er gradienten større frå toppverdien og utover i r-retning for simulert temperatur.

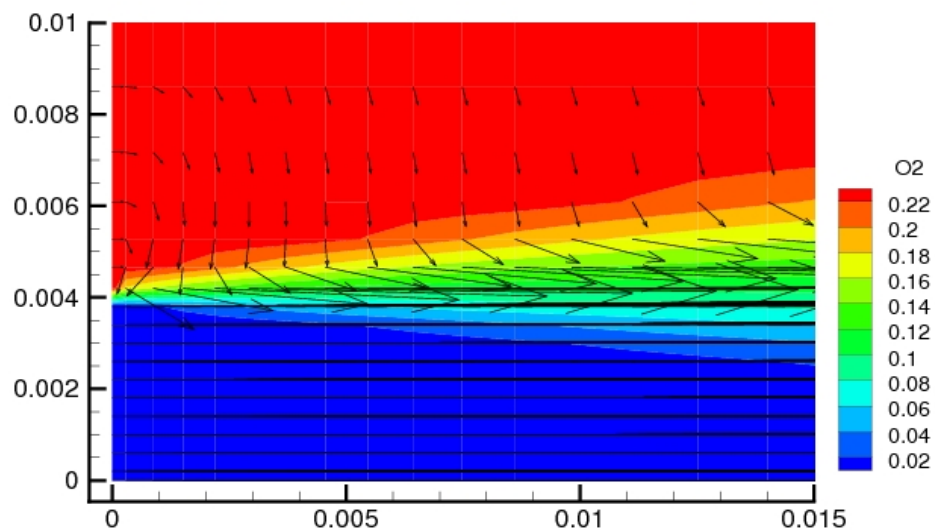
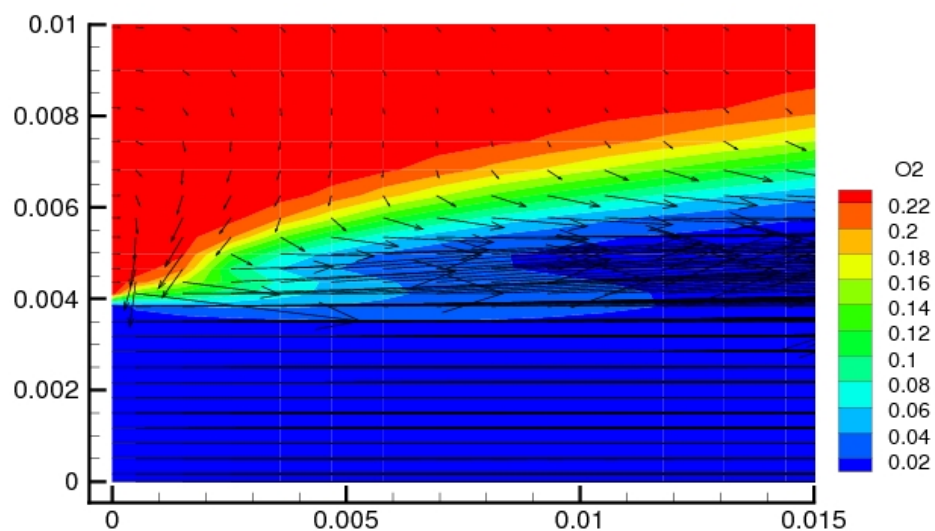
5.4 Drøfting og samanlikning av H3- og CH₄/H₂/N₂-flamma

Noko som viser att på begge flammene som er modellert i denne rapporten, er mellom anna den høge temperaturen, då spesielt litt nedstraums av dysa. Nær dysa er temperaturprofilen breiare enn målingar, som truleg er eit resultat av at flamma vert forskyvd i r-retning. Lenger nedstraums, der den maksimale temperaturen er i senter, er avviket frå målingar omlag det same langs heile radiusen. Dette syner att på begge flammene, men i noko større grad hjå CH₄-flamma (CH₄/H₂/N₂-flamma). Forskyvinga av flamma nær dysa skjer og for H3-flamma, men ikkje så mykje. Denne skilnaden i temperatur gjer at modellerte NO_x-verdiar avviker frå målingane.

Konturplott har synt at CH₄-flamma ikkje kjem med så nær dysa som hjå H3-flamma. Her er skilnaden tydeleg. Dette syner og att i OH-profila, då OH-verdien er mykje for liten ved $x/d = 5$ hjå CH₄-flamma. At temperaturen ikkje vert så høg som den skal, gjer at tettleiken går ned, noko som har innverknad på strøymingsfeltet. Det store spørsmålet her vil vere kvifor reaktantar vert spreidd på den måten dei gjer i starten. Middelfarta hjå brensllet som kjem ut av dysa i H3-flamma er 34,8 m/s, og tettleiken er 0,602 kg/m³. Middelfarta er 42,2 m/s hjå CH₄-flamma, og tettleiken er 0,657 kg/m³. Massestraumen er då omlag 24 % høgare hjå CH₄-flamma. Simulering med finare oppløysing på nettverket ga betre resultat, og truleg er det naudsynt med eit finare nettverk ved modellering av CH₄-flamma. Årsaka til dette kan vere skilnaden i rørslemengd hjå dei to brensla, og det kan vere den kjemiske kinetikken åt brensllet.

Geometrien på brennaren er den same. Unntaket kan vere korleis strøyminga rundt jetdysa, *co-flowen*, er sett opp. Lufta har ei fart lik 0,2 m/s hjå H3-flammen, og 0,3 m/s hjå den andre. I tillegg vert det sagt i dokumentasjonen åt CH₄-flamma at kanten ved utløpet av dysa er spissa. Dette er for å unngå sirkulasjon i strøyminga der luft og brensel møtast. I simuleringane der oppsettet var det same for begge flammene (sjå del 5.3.1 og 5.3.2) vart det nytta ei "solid boundary cell" mellom luft og brenselcellene. Denne hadde ein tjukkelse på omlag 0,34 mm. Simuleringar av CH₄-flamma, med og utan ein slik luftkant, hadde liten verknad på resultatet.

Figur 5.100 under syner eit vektorplott av farta, saman med eit konturprofil som syner massefraksjonen av O₂, for begge flammene. Den store rørslemengda hjå jeten skapar ei avbøying og akselerasjon i farta åt lufta, og det strøymer luft mot straumen av brensel. Dette kan samanliknast med eit teppe som rører seg med stor fart horisontalt i lufta. Friksjonen mellom teppet og lufta dreg med luft, og luft vel utanfor grensesjiktet strøymer ned for å fylle tomrommet. Nær dysa har begge flammene ein merkbar fartskomponent som peikar i negativ r-retning. For CH₄-flamma peikar denne omlag like mykje i negativ x-retning som i negativ r-retning. Som synt i resultatata tidlegare, er turbulensenergien noko for stor i høve målingar for CH₄-flamma.

(a) CH₄-flamma.(b) H₃-flamma.**Figur 5.100:** Vektorplott av farta, og konturplott av Y_{O_2} - H₃- og CH₄-flamma.

Det er tydeleg utifrå figurane at kanten mellom luft og brensel verkar inn på strøyminga meir hjå CH_4 -flamma.

I simuleringane er det ikkje teke omsyn til differensiell diffusjon. I SPIDER vert det nytta ein likeins diffusjonskoeffisient for stoffa. Sidan hydrogen har omlag åtte gongar så låg molvekt som metan, er dette kanskje ein uheldig forenkling. I realiteten vil hydrogen verte spreidd noko raskare. For CH_4 - flamma har målingar synt at hydrogen gjer nett det, då spesielt for $x/d < 5$. Om masse-diffusiviteten er ulik den termiske diffusiviteten, er $Le \neq 1$. I dokumentasjon som omhandlar målingar av denne flamma vert det hevda at føresetnaden om $Le = 1$ ikkje held mål nær dysa [35] (s. 496). Dette kan gje utslag på temperaturen, og kan vere noko av årsaka til avvika.

I simuleringane har det vore nytta eit konvergenskriterie på 0,001. Dette kravet set grensa for iterasjonsprosessen. I utgangspunktet er dette rekna for å vere noko unøyaktig, men eit kriterie på 0,0001 vart og testa, og dette ga liten skilnad for nokon av storleikane presentert over. Konvergenskriteriet som har vore nytta er difor rekna som nøyaktig nok, og skal ikkje vere årsak til avvika.

5.5 Oppsummering

- Det er gjennomført simuleringar av to turbulente diffusjonsflammer, der den eine har hydrogen og nitrogen i brenselblandinga, medan den andre har metan, hydrogen og nitrogen i brensllet. Simuleringane er utført med CFD-koda SPIDER. Det er nytta POW diskretiseringsskjema, SIMPLE-algoritmen i iterasjonsprosessen og TDMA for løysing av transportlikningar. Alle simuleringar er utført med Magnussen sin EDC-modell for turbulent forbrenning, saman med ulike variantar av k - ε -modellen.
- Dei ulike metodane nytta ved måling av metan-flamma er presentert.
- Grenseverdiar frå simuleringar av eit jet-røyr vart samanlikna med måledata.
- Testing av nettverk er utført med rask kjemi. Det vart testa tre ulike grid for metan-flamma. Resultata synte at det var mindre skilnad mellom dei, men at det grovaste ikkje bør nyttast ved presentasjon av det endelege resultatet. For H3-flamma vart det nytta eit likeins grid som i [12].
- Ulike verdiar på konstantane, $C_{\varepsilon 1}$ og $C_{\varepsilon 2}$, i k - ε -modellen vart prøvd ut. Resultata synte at ein kombinasjon med $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,80$ ga betre resultat enn $C_{\varepsilon 1} = 1,60$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,92$ for metan-flamma. For H3-flamma ga $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ og $C_{\varepsilon 2} = 1,83$ tilfredsstillande resultat, men langt nedstraums vert spreinga for lita. Truleg vil ein lineær variasjon av desse konstantane gje eit meir optimalt resultat. Det er ikkje vilkårlig kva for ein av konstantane vi vel å justere, om berre ein skal justerast opp eller ned i høve standard modell.
- Det vart simulert på begge flammene med detaljert kjemisk kinetikk inkludert i EDC-modellen. For å samanlikne dei, vart det prøvd å gjere modellane så like som mogleg. Resultata synte at flamma ikkje kjem med i området nær dysa, då spesielt for metan-flamma. Simulering av H3-flamma ga betre resultat. For metan-flamma var det store avvik i farta.
- På grunn av mishøvet mellom verdiane frå simuleringar og målingar, vart det testa grid som hadde finare oppløysing nær dysa. Dette vart gjort ved å endre storleiken på området. Her vart berre metan-flamma simulert. Resultata synte at finare oppløysing fekk flamma til å kome med nærare dysa. For lite område ga urealistiske verdiar på grunn av grensene nytta i programmet. Dette ga innstrøyming over utløpsgrensa for nokre av grida.
- Blandingsraten, i differensiallikninga som uttrykkjer endring av Y_k^* ved detaljert kjemi, vart testa med tre ulike verdiar. Denne er vanlegvis gjeve som $1/\tau^*$, men her vart den redusert utan å endre nokon av dei andre storleikane. Ein lågare verdi ga betre resultat.

- Simulerte NO-verdiar er, saman med andre viktige storleikar, samanlikna med målingar. Resultata er drøfta utifrå dei viktigaste mekanismane presentert i teori-delen, saman med resultata frå tidlegare i rapporten.
- Til slutt er alle resultata og tilhøyrande drøfting frå kvar del vidare drøfta. Her vert det og snakka litt om kvifor den eine flamma gjev meir avvik frå målingar enn den andre.

6 Konklusjon og vidare arbeid

6.1 Konklusjon

- Det er gjennomført fleire simuleringar av to turbulente diffusjonsflammer med rask og detaljert kjemi. Ulike nettverk vart testa for metan-flamma. For både flammene vart det testa fleire variantar av k - ε -modellen. Det vart prøvd ut nokre justeringar for å betre modellen, mellom anna finare oppløysing og endring av ein variabel i EDC-modellen.
- Rette innløpsverdiar til brennaren er viktig for realistisk modellering av forbrenninga.
- Val av nettverk hadde innverknad på resultata. Det var merkbar skilnad mellom det grovaste og finaste gridet. Resultata syner først og fremst moglegheitene som ligg i val av nettverk, og at det kan finnast ei tilnærma nettverk-uavhengig løysing.
- Andre verdiar på $C_{\varepsilon 1}$ og $C_{\varepsilon 2}$, enn det som er standard i k - ε -modellen, gjev betre resultat for ein rund jet. Truleg vil ein lineær variasjon av desse, gjerne som funksjon av avstanden i akseretninga, gje best resultat.
- Metan-flamma ga større avvik frå målte verdiar enn H₃-flamma. Det var mindre av flamma som kom med inne ved dysa. Truleg er det dei ulike brennelsesamansetnadane, og fysikken på flammene elles, som gjev desse skilnadane. Avvika i temperaturen hadde merkbar verknad på fartsfeltet.
- Simulering med detaljert kjemi krev finare oppløysing på nettverk enn med rask kjemi.
- Justeringar av storleikar i EDC-modellen kan gje ein betre modell.
- NO-verdiane frå simuleringane skilte seg ein del frå målte verdiar. Resultata synte samanhengar mellom NO-verdiar og temperatur.

6.2 Vidare arbeid

I grove trekk bør vidare arbeid omfatte fleire simuleringar og meir inngåande studie av metan-flamma, for å finne årsaker til avvika inne ved dysa. For både flammene må det undersøkast kvifor temperauren er så ulike målingane. Dette kan ein oppnå ved å gjere følgjande:

- Undersøkje nærare kva kanten mellom luft og brensel, ved utløpet av dysa, har å seie for modellen.
- Teste fleire grid for å finne ut om ei nettverk-uavhengig løysing gjev liknande avvik. Om nettverket må vere så fint at det er vanskeleg å oppnå konvergens, bør det gjerast noko i modellen for å lette reknetida. Variantar av sykliske grenser kan løyse dette.
- For å finne ut kva avvika i temperaturen skuldast, bør det gjerast ein sjekk av den totale energimengda som kjem inn i området, og korleis denne endrar seg undervegs i strøyminga. Her kan det ikkje utelukkast feil i tabellar eller utrekningar.
- Området kan utvidast for å sjå korleis temperaturen vert lenger nedstraums. Problemet her er manglande målingar, men det kan vere nyttig å sjå kor mykje temperaturen endrar seg vidare.
- Ein modell der $Le \neq 1$ bør prøvast ut. Den ulike spreinga av hydrogen og metan må takast omsyn til, spesielt nær dysa.
- Undersøkje om fleire justeringar i EDC-modellen har verknad på resultatet. Om dette har ein verknad, bør ein finne ut kvifor dei opphavlege verdiane ikkje gjev dei same resultata.
- Ytterligare studier av dei to ulike føresetnadane, uendeleg rask kjemi og detaljert kjemisk kinetikk, er naudsynt. Dei bør samanliknast meir, og ein gjennomgong av kva som er gjort i koda er kanskje naudsynt.
- Undervegs har det vist seg å vere diverse “hardkode” i programmet. Det bør undersøkast om der er ytterligare ting i programmet som overstyrer Lizzard.
- Det bør simuleraast på fleire enkle diffusjonsflammer, og dei bør samanliknast med flammene i denne oppgåva.

Litteratur

- [1] International workshop on measurements and computation of turbulent nonpremixed flames. <http://public.ca.sandia.gov/TNF//abstract.html>. [online]. Sist besøkt 19, november 2007.
- [2] A. N. Hayhurst and E. M. Hutchinson. Evidence for a New Way of Producing NO via NNH in Fuel-Rich Flames at Atmospheric Pressure. *Combustion and Flame*, 114:274–279, 1998.
- [3] B. E. Launder, A. Morse, W. Rodi and D. B. Spalding. Prediction of Free Shear Flows: A Comparison of the Performance of Six Turbulence Models. Technical report, NASA, 1973.
- [4] R. W. Bilger. The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames. In *22nd Symposium (Int'l) on Combustion*, pages 475–488, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988.
- [5] S. J. Chapman. *Fortran 90/95 - for Scientists and Engineers*. McGraw-Hill, 2004.
- [6] TU Darmstadt. Flame Data Base for Turbulent Nonpremixed Flames. <http://www.ekt.tu-darmstadt.de/flamebase/H3flame/index.html>. [online]. Sist besøkt 11. november 2007.
- [7] I. S. Ertesvåg. *Turbulent strøyming og forbrenning*. Tapir akademisk forlag, Trondheim, 2000.
- [8] I. S. Ertesvåg. *User Guide to SPIDER, A Computer Program System Based on Curvilinear Non-Orthogonal Coordinates*. Division of Thermodynamics, Norwegian Institute of Technology/SINTEF, November, 1993.
- [9] F. C. Christo and B. B. Dally. Modeling Turbulent Reacting Jets Issuing into a Hot and Diluted Coflow. *Combustion and Flame*, 142:117–129, 2005.
- [10] F. P. Incropera and D. P. DeWitt. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley and Sons, fifth edition, 2002.
- [11] I. R. Gran. *Mathematical Modeling and Numerical Simulation of Chemical Kinetics in Turbulent Combustion*. Doktor ingeniøravhandling 49:1994, NTH.

- [12] E. L. Grotle. Reduksjon av NO_x frå forbrenning. Prosjektoppgåve ved NTNU, 2007.
- [13] H. K. Versteeg and W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method*. Longman, 1995.
- [14] Miljøstatus i Norge. <http://www.miljostatus.no>. [online]. Sist besøkt 3. oktober 2007.
- [15] I. R. Gran and B. F. Magnussen. A Numerical Study of a Bluff-Body Stabilized Diffusion Flame. Part 2. Influence of Combustion Modeling And Finite-Rate Chemistry. *Combustion Science and Technology*, 119:191–217, 1996.
- [16] I. R. Gran, I. S. Ertesvåg and B. F. Magnussen. Influence of Turbulence Modeling on Predictions of Turbulent Combustion. *AIAA*, 35:106–110, 1997.
- [17] I. S. Ertesvåg and B. F. Magnussen. The Eddy Dissipation Turbulence Energy Cascade Model. *Combustion Science and Technology*, 159:213–236, 2001.
- [18] J. A. Miller and C. T. Bowman. Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 15:287–338, 1989.
- [19] J. J. McGuirk and W. Rodi. The Calculation of Three-Dimensional Turbulent Free Jets. *Turbulent Shear Flows*, 1:71, 1979.
- [20] J. W. Bozzeli and A. M. Dean. $\text{O} + \text{NNH}$: A Possible New Route for NO_x Formation in Flames. *International Journal of Chemical Kinetics*, 27:1097–1109, 1995.
- [21] J. Warnatz, U. Maas and R. W. Dibble. *Combustion*. Springer-Verlag, Berlin, third edition, 2001.
- [22] B. Lilleberg. Danning og reduksjon av nitrogenoksid i forbrenning. Prosjektoppgåve ved NTNU, 2001.
- [23] B. Lilleberg. Matematisk modellering og numerisk simulering av danning og reduksjon av nitrogenoksid i forbrenning. Masteroppgåve, NTNU, 2002.
- [24] M. J. Moran and H. N. Shapiro. *Fundamentals of Engineering Thermodynamics*. John Wiley and Sons, New York, fifth edition, 2004.
- [25] M. Skottene and K. E. Rian. A Study of NO_x Formation in Hydrogen Flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32:3572–2585, 2007.
- [26] B. F. Magnussen. On the Structure of Turbulence and a generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow. In *19th. AIAA Aerospace Science Meeting*, St. Louis, Missouri, January 1981.

- [27] W. Meier. Data from DLR Flame. E-post, 26. mars 2008. W. Meier er professor ved TU Darmstadt, og ansvarleg for delar av eksperimenta utført for CH₄-flamma.
- [28] M. C. Melaaen. *Analysis of Curvilinear Non-Orthogonal Coordinates for Numerical Calculation of Fluid Flow in Complex Geometries*. Doktor ingeniøravhandling 15:1990, NTH.
- [29] P. Burattini, R. A. Antonia and S. Rajagopalan. Effect of Initial Conditions on the Far Field of a Round Jet. 2004.
- [30] S. B. Pope. An Explanation of the Turbulent Round-Jet/Plane-Jet Anomaly. *AIAA*, 16:279–281, 1978.
- [31] M. Skottene. Numerisk simulering av en hydrogen jetflamme. Prosjektoppgåve ved NTNU, 2004.
- [32] M. Skottene. Numerisk modellering av hydrogenforbrenning med fokus på dannelse av NO_x. Masteroppgåve, NTNU, 2005.
- [33] T. Myhrvold, I. S. Ertesvåg, I. R. Gran, R. Cabra and J. -Y. Chen. A Numerical Investigation of a Lifted H₂/N₂ Turbulent Jet Flame in a Vitiated Coflow. *Combustion Science and Technology*, 178:6, 1001–1030, 2006.
- [34] S. R. Turns. *An Introduction to Combustion: Concepts and Application*. McGraw-Hill, New York, second edition, 2000.
- [35] V. Bergman, W. Meier, D. Wolff and W. Stricker. Application of Spontaneous Raman and Rayleigh Scattering and 2D LIF for the Characterization of a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame. *Applied Physics B*, 66:489–502, 1998.
- [36] W. Meier, R. S. Barlow, Y. L. Chen and J. -Y. Chen. Raman/Rayleigh/LIF Measurements in a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame: Experimental Techniques and Turbulence-Chemistry Interaction. *Combustion and Flame*, 123:326–343, 2000.
- [37] F. M. White. *Fluid Mechanics*. McGraw-Hill, New York, fifth edition, 2003.

