

**Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd**

MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ DVOUFÁZOVÉHO PROUDĚNÍ

Ing. Stanislav Plánička

**disertační práce
k získání akademického titulu doktor
v oboru Aplikovaná mechanika**

**Školitel: Doc. Ing. Jan Vimmr, Ph.D.
Katedra mechaniky**

Plzeň 2018

**University of West Bohemia
Faculty of Applied Sciences**

**MATHEMATICAL MODELING
OF TWO-PHASE FLOW**

Ing. Stanislav Plánička

**Ph.D. thesis submitted in partial fulfilment
of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy
in Applied Mechanics**

**Supervisor: Assoc. Prof. Ing. Jan Vimmr, Ph.D.
Department of Mechanics**

Pilsen 2018

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předkládanou disertační práci vypracoval samostatně a uvedl všechny použité informační zdroje v seznamu literatury na konci této práce.

V Plzni, 13. 8. 2018

Ing. Stanislav Plánička

Poděkování

Největší poděkování patří mým rodičům za stálou podporu a důvěru.

Rád bych poděkoval svému školiteli doc. Ing. Janu Vimmrovi, Ph.D. za všestrannou pomoc a neocenitelné rady poskytované nejen v průběhu mého studia a při psaní této disertační práce. Rovněž děkuji Ing. Aleně Jonášové, Ph.D. za dosavadní výbornou spolupráci a nezištnou pomoc. Dále děkuji kolegům z Katedry mechaniky a z centra NTIS za vytvoření výborných podmínek pro studium a psaní této disertační práce.

Velké poděkování patří rovněž společnosti ATMOS Chrást, s.r.o., která uvolnila výsledky dosažené v rámci projektu „Metodika návrhu olejových separátorů“ pro potřeby této disertační práce.

V neposlední řadě děkuji také své manželce Kristýně za velkou trpělivost.

Abstrakt

V disertační práci je zpracován ucelený přehled používaných modelů a technik pro řešení dvoufázového proudění, jejichž numerické řešení lze založit na metodě konečných objemů. Modely a techniky jsou zde podrobně diskutovány a je uveden rozsah jejich využitelnosti. Dále je zde s užitím průměrovacího procesu odvozen obecný dvoutekutinový model, který popisuje proudění dvou stlačitelných, nevazkých a tepelně nevodivých tekutin bez výměny hmoty. Pro numerické řešení dvoutekutinových modelů je prezentován algoritmus založený na metodě konečných objemů, který pro aproximaci toků využívá AUSM+ schéma. Na řešených testovacích úlohách je ukázáno, že čtyřrovnicový dvoutekutinový model bez energetických rovnic s dvojicí Taitových stavových rovnic není příliš vhodný pro řešení Toumiova „shock tube“ problému se silným vlivem termodynamiky, avšak lze s jeho využitím velmi dobře řešit problém vodovodního kohoutku. Pro dostatečně přesné řešení Toumiova „shock tube“ problému je dále implementován šestirovicový dvoutekutinový model s energetickými rovnicemi. Při numerickém řešení této úlohy byla navíc zvýšena přesnost použitých schémat pomocí lineární rekonstrukce primitivních veličin s minmod limiterem. Dosažené výsledky tak zachycují velmi ostře nespojitosti vzniklé v proudovém poli. V disertační práci je dále diskutován a řešen tzv. třírovnicový model. Jedná se o redukovaný dvoutekutinový model uzpůsobený pro řešení proudění s volnou hladinou. Stlačitelnost kapaliny je zde modelována také pomocí Taitovy stavové rovnice. Pro řešení modelu byl navržen obdobný algoritmus numerického řešení využívající AUSM+ schéma, které zde rovněž bylo použito pro aproximaci nekonzervativní části modelu. Navržený numerický řešič je verifikován na úloze protřetí hráze. Popsaný model je dále validován na problému vzestupu bubliny, což je úloha s komplexním rozvrstvením tekutiny v tíhovém poli. Aplikační část předkládané disertační práce je zaměřena na řešení problému z průmyslové praxe týkajícího se odlučování oleje a vzduchu v tlakových nádobách šroubových kompresorů. Pro numerické simulace těchto úloh byl použit dvoutekutinový model implementovaný ve výpočtovém systému ANSYS Fluent. Parametry výpočtového modelu byly nastaveny v souladu s provedenými experimentálními měřeními. Na základě provedených analýz a vyhodnocení výsledků numerických simulací dvoufázového proudění oleje a vzduchu ve třech zcela odlišných tlakových nádobách jsou stanovena obecná doporučení pro návrh tlakových nádob s ohledem na zefektivnění procesu oddělení obou fází. Navazující numerické simulace dále prokazují, že v tlakových nádobách štíhlých tvarů probíhá separační proces efektivněji, oproti tlakovým nádobám zavalitých tvarů.

Klíčová slova

dvoufázové proudění, šestirovicový dvoutekutinový model, čtyřrovnicový dvoutekutinový model, třírovnicový model pro řešení rozvrstvených proudění, metoda konečných objemů, AUSM schéma, olejový separátor

Abstract

The Ph.D. thesis presents a detailed overview of models and techniques used for two-phase flows modeling, which can be numerically solved using the finite volume method. The models and techniques are discussed in detail, including their extent of validity. Using averaging approach, the derivation of the general two-phase two-fluid model is shown. The model is suitable to describe the flow of two compressible, inviscid and thermally non-conducting fluids without mutual mass exchange. A numerical algorithm for the numerical solution of selected two-fluid models is proposed. The solver is based on the finite volume method and employs the AUSM+ scheme for the approximation of numerical fluxes. The numerical results of selected test cases show that the four-equation two-fluid model without energy equations coupled with the Tait equations of state for both fluids is not able to solve the Toumi shock tube problem correctly, which is strongly influenced by the system thermodynamics. On the other hand, the four-equation model is very suitable for the numerical solution of the water faucet problem. To solve the Toumi shock tube problem more accurately, the six-equation two-fluid model is implemented. It is shown that the results of numerical simulations achieved by the proposed algorithm, which was improved by the linear reconstruction of primitive variables by means of the minmod limiter, are able to capture discontinuities in the flow field very sharply. In this work, the three-equation model for free surface flows, which is derived from two-fluid models and extended with the Tait equation of state, is discussed and solved. Similarly to the aforementioned models, the three-equation model was solved using own developed numerical algorithm, which utilizes the AUSM+ scheme for the computation of the non-conservative part of the model. The proposed finite volume solver was verified on the dam break problem. The three-equation model is additionally validated on the rising bubble problem, which is a task with complex stratification in the gravity field. The practical part of the Ph.D. thesis focuses on the separation of air and oil in pressure vessels of screw compressors. The two-fluid model implemented in the computing system ANSYS Fluent was used to solve these tasks. The parameters of the computational model were set in accordance with the experimental measurements. On the basis of performed analyses and numerical simulations of phase separation in three different pressure vessels, general suggestions how to make the separation process of both phases more effective are proposed. Additional numerical simulations also showed that the separation process of both phases is generally more effective in slim shape pressure vessels than in thick shape ones.

Keywords

two-phase flows, six-equation two-fluid model, four-equation two-fluid model, free-equation model for the free surface flows, finite volume method, AUSM scheme, oil separator

Obsah

Motivace.....	6
Úvod.....	6
Cíle práce	7
Přehled používaných matematických modelů a metod pro řešení vícefázového proudění a aktuální směry výzkumu	9
1.1 Stručný pohled do historie výpočtové dynamiky tekutin	9
1.2 Základní klasifikace vícefázového proudění	9
1.2.1 Matematické modelování rozvrstvených proudění.....	12
1.2.2 Matematické modelování přechodového proudění více fází	17
1.2.3 Matematické modelování proudění s diskrétními částicemi.....	21
Základní principy modelování dvoufázového proudění.....	24
2.1 Proudové režimy.....	25
2.2 Mezifázové silové působení	28
2.3 Objemové podíly fází	30
2.4 Odvození dvoutekutinového modelu.....	31
2.5 Stavové rovnice stlačitelných tekutin	36
2.6 Fyzikální vlastnosti směsí.....	42
2.7 Metody pro zachycení rozhraní a další používané dvoufázové modely	44
2.7.1 Metoda založená na značkovací funkci volume-of-fluid.....	45
2.7.2 Metoda založená na značkovací funkci level set.....	49
2.7.3 Sedmirovnicové dvoutekutinové modely	51
2.7.4 Šestirovnicové dvoutekutinové modely.....	53
2.7.5 Modely směsí.....	54
2.7.6 Homogenní rovnovážný model	56
2.7.7 Eulerovy – Lagrangeovy modely	57
2.8 Použití dvoufázových modelů v praxi	61
Numerická implementace vybraných dvoutekutinových modelů pro řešení proudění stlačitelných, nevázkých tekutin	63
3.1 Čtyřrovnicový dvoutekutinový model.....	63
3.1.1 Numerické řešení čtyřrovnicového dvoutekutinového modelu založené na metodě konečných objemů.....	66
3.1.2 Numerické výsledky vybraných testovacích problémů	75
3.2 Šestirovnicový dvoutekutinový model	85
3.2.1 Numerické řešení šestirovnicového dvoutekutinového modelu založené na metodě konečných objemů.....	87

3.2.2	Numerické řešení Toumiova „shock tube“ problému	88
3.3	Třírovniceový model pro řešení rozvrstvených proudění	90
3.3.1	Numerické řešení třírovniceového modelu založené na metodě konečných objemů.....	93
3.3.2	Numerické řešení problému protržení hráze.....	95
3.3.3	Numerické řešení problému vzestupu bubliny	98
Numerické řešení separace oleje a vzduchu v tlakových nádobách šroubových kompresorů		101
4.1	Význam a funkce tlakové nádoby	101
4.2	Výpočtový model proudění v tlakové nádobě	102
4.2.1	Matematický model dvoufázového proudění v tlakové nádobě	104
4.2.2	Experimentální stanovení parametrů matematického modelu	106
4.3	Výsledky numerických simulací separace fází oleje a stlačeného vzduchu ve vybraných tlakových nádobách.....	109
4.4	Vliv vnějších rozměrů tlakové nádoby na efektivitu procesu separace fází	111
4.4.1	Matematický model dvoufázového proudění v olejovém separátoru PDP190.....	113
4.4.2	Výsledky numerických simulací oddělování fází.....	115
Závěr		121
Přínosy práce.....		122
Literatura.....		123

Přehled používaných označení a zkratk

indexace veličin

x_1, x_2, x_e	fáze 1, fáze 2, fáze e	(obecná označení)
x_l, x_g	kapalná fáze, plynná fáze	(dvoutekutinové modely)
x_m	směs fází	
x_f, x_p	tekutá fáze, částice rozptýlené fáze	(proudění s diskretními částicemi)
x_{Int}	hodnota na rozhraní	
$x_i, x_{i,j}$	hodnota v kontrolním objemu i (v 1D), resp. i, j (ve 2D)	
x_{i_k}	hodnota na k -té hraně i -tého kontrolního objemu	
x^n	hodnota v n -té časové hladině	
x_q	q -tá složka vektoru x	

délková měřítka

\mathcal{L}	velikost celé oblasti
d	charakteristická velikost částic
Δx	velikost buňky výpočetní sítě

nezávisle proměnné

t [s]	čas
x, y, z [m]	prostorové proměnné

vektorové veličiny

F [N]	vektor síly
F_D [N]	vektor odporové síly
u [m s ⁻¹]	vektor rychlosti

skalární veličiny

α [-]	objemový podíl fáze
ϵ [J m ³ kg ⁻¹]	měrná vnitřní energie
κ [-]	Poissonova adiabatická konstanta
η [Pa s]	dynamická viskozita
ρ [kg m ⁻³]	hustota
σ [-]	součinitel velikosti tlaku rozhraní p_{IP}

C_D [-]	tvarový součinitel odporu
c [m s ⁻¹]	rychlost zvuku v poddajném prostředí
c_p [J kg ⁻¹ K ⁻¹]	měrná tepelná kapacita při izobarickém ději
c_V [J kg ⁻¹ K ⁻¹]	měrná tepelná kapacita při izochorickém ději
d_p [m]	průměr částice
e [J m ³ kg ⁻¹]	měrná celková energie
g [m s ⁻²]	velikost tíhového zrychlení
m [kg]	hmotnost
\dot{m} [kg s ⁻¹]	hmotnostní tok
p [Pa]	tlak
p_{IP} [Pa]	tlak rozhraní (přídavný člen)
r [J kg ⁻¹ K ⁻¹]	plynová konstanta

T	[K]	termodynamická teplota
u	[m s ⁻¹]	kartézská složka vektoru rychlosti \mathbf{u} ve směru x
V	[m ³]	objem
v	[m s ⁻¹]	kartézská složka vektoru rychlosti \mathbf{u} ve směru y

numerické řešení

Δt	[s]	velikost časového kroku
Δx	[m]	velikost buňky výpočetní sítě
$\partial \Omega, \partial \Omega_i$		hranice výpočtové oblasti, hranice kontrolního objemu i
Ω, Ω_i		výpočtová oblast, kontrolní objem i
\mathbf{n}	[m]	vektor vnější normály kontrolního objemu
\mathbf{n}_j	[-]	jednotkový vektor vnější normály kontrolního objemu
CFL	[-]	Courantovo číslo
M_n		normálové Machovo číslo
\mathbf{f}, \mathbf{g}		kartézské složky nevazkého konzervativního toku stěnou kontrolního objemu
\mathbf{F}, \mathbf{G}		numerické aproximace kartézských toků \mathbf{f} a \mathbf{g}
\mathbf{n}		vektor nekonzervativních členů
\mathbf{s}		vektor zdrojových členů
\mathbf{v}		vektor primitivních proměnných
\mathbf{w}		vektor konzervativních proměnných

podobnostní čísla

Re	Reynoldsovo číslo
Re _p	Reynoldsovo číslo částice
St	Stokesovo číslo
M	Machovo číslo

zkratky

ALE	Arbitrary Lagrangian – Eulerian (smíšený lagrangeovský – eulerovský popis kontinua)
AUSM	Advection Upstream Splitting Method (numerické schéma používané pro aproximaci nevazkých toků)
CFD	Computational Fluid Dynamics (výpočtová dynamika tekutin)
DGFEM	Discontinuous Galerkin Finite Element Method (nespojité Galerkinova metoda konečných prvků)
DPM	Discrete Phase Model (model pro řešení proudění tekutiny s diskrétními částicemi)
FVM	Finite Volume Method (metoda konečných objemů)
HEM	Homogeneous Equilibrium Model (model pro řešení proudění homogenních rovnovážných směsí)
LBM	Lattice Boltzmann Method (moderní numerická metoda pro řešení proudění)
LS	Level Set method (metoda zachycení rozhraní s hladkou značkovací funkcí)

MAC	Marker And Cell (metoda pro řešení rozvrstvených proudění)
PLIC	Piecewise Linear Interface Calculation (lineární interpretace rozhraní tekutin s variabilním sklonem)
SLIC	Simple Line Interface Calculation (horizontálně – vertikální interpretace rozhraní tekutin)
TFM	Two-Fluid Models (dvoutekutinové eulerovské modely)
VOF	Volume-Of-Fluid method (metoda zachycení rozhraní se skokovou značkovací funkcí)

Motivace

Předkládaná disertační práce se zaměřuje na modelování dvoufázového proudění. Prvotním impulzem, proč se začal autor disertační práce zabývat touto problematikou, byl projekt znalostního transferu mezi Západočeskou univerzitou v Plzni a společností ATMOS Chrást, s.r.o. podpořený Ministerstvem průmyslu a obchodu v rámci Operačního programu Podnikání a inovace (OPPI) s názvem „Metodika návrhu olejových separátorů“, jehož byl řešitelem. Jedním z cílů projektu byl výzkum dvoufázového proudění uvnitř tlakových nádob takzvaných olejových separátorů ve šroubových kompresorech vyvíjených a vyráběných společností ATMOS Chrást, s.r.o. Hlavním záměrem tohoto výzkumu bylo lépe porozumět principům vzájemného separování fází oleje a vzduchu v tlakových nádobách a pomocí numerických simulací analyzovat konkrétní typy olejových separátorů z hlediska kvality oddělování obou fází. Na základě získaných teoretických poznatků a provedených analýz potom byly stanoveny obecné zásady, které společnost ATMOS Chrást, s.r.o. využívá při návrhu tlakových nádob (olejových separátorů) šroubových kompresorů. Vzhledem ke složitosti modelování dvoufázového proudění v těchto konkrétních průmyslových aplikacích, a především k velmi omezenému času realizace celého projektu znalostního transferu byly numerické simulace separace fází oleje a vzduchu v olejových separátorech prováděny pomocí profesionálního výpočtového systému ANSYS Fluent založeného na metodě konečných objemů. Ve výpočtovém systému ANSYS Fluent je implementováno několik různých modelů pro řešení dvoufázového proudění. Na základě rešerše použitelnosti těchto modelů byl zvolen jako nejvhodnější model pro numerické simulace oddělování fází oleje a vzduchu v olejových separátorech šroubových kompresorů tzv. „Eulerian model“ patřící do skupiny eulerovských dvoutekutinových modelů, jež považují obě fáze za kontinua. Z vícefázových modelů implementovaných ve výpočetním systému ANSYS Fluent bývá tento model sice výpočetně nejsložitější, avšak umožňuje jako jediný namodelovat procesy probíhající uvnitř olejových separátorů. Na základě provedené rešerše poznamenejme, že použití dvoutekutinového modelu pro numerické simulace dvoufázového proudění v separátorech není zcela běžné. V odborné literatuře navíc nebyla nalezena žádná zmínka o numerických simulacích odlučování fází oleje a vzduchu na olejových separátorech.

Po ukončení projektu znalostního transferu se autor této disertační práce dále věnoval matematickému modelování dvoufázového proudění. S ohledem na praktické zkušenosti, které získal během realizace projektu znalostního transferu, soustředil svoji pozornost zejména na modelování dvoufázového proudění pomocí eulerovských dvoutekutinových modelů, jejich algoritmizaci, softwarovou implementaci a na způsoby jejich numerického řešení.

Úvod

Problematika modelování dvoufázového proudění je natolik rozsáhlá a komplexní, že je v praxi zcela běžné omezit se pouze na řešení dynamiky proudění a nezahrnovat do výpočtu jevy spojené s výměnou hmoty mezi jednotlivými fázemi, pokud to není žádoucí z povahy řešené úlohy. V současnosti se používá celá řada různých specializovaných modelů a technik popisujících dvoufázové proudění přizpůsobených pro konkrétní aplikace. Základní tvary modelů navíc bývají rozšiřovány o další podmodely umožňující dostatečně přesně simulovat komplexní jevy ve specifických úlohách, pro které byly navrženy. Problém však nastává při potřebě řešit úlohy mimo oblast použitelnosti daného dvoufázového modelu, neboť dostatečně robustní a univerzální model pro simulace obecných dvoufázových proudění nebyl dosud nalezen.

Co se týče vlastního modelování dvoufázového proudění, existuje celá řada různých přístupů a metod řešení. Například pro řešení rozvrstveného proudění s jasně patrným rozhraním dvou tekutých fází jsou používány metody speciálně navržené pro modelování mezifázového rozhraní, zatímco proudění jednotlivých fází je popsáno dobře známými Navierovými – Stokesovými rovnicemi. V případě, že rozhraní proudících tekutin již není zcela zřetelné, přecházíme postupně od rozvrstveného proudění tekutin k heterogenní směsi, případně dále k homogenní směsi. Pro řešení těchto případů tzv. přechodových proudění byly navrženy různé eulerovské modely, které lze dále zjednodušovat až k modelům určeným pro řešení proudění homogenních rovnovážných směsí. Poznamenejme, že v limitním případě při proudění zcela homogenizované směsi, jakou je například vzduch, lze potom opět použít Navierovy – Stokesovy rovnice popisující proudění jednofázové tekutiny. Pro proudění tekutiny s rozptýlenými makroskopickými částicemi se často používají eulerovské – lagrangeovské modely diskretních částic.

Disertační práce je členěna do čtyř hlavních kapitol. V první kapitole je provedena rozsáhlá rešerše problematiky dvoufázového proudění, která se věnuje přehledu používaných modelů a metod pro řešení dvoufázového proudění, včetně diskuse jejich silných a slabých stránek.

Druhá kapitola seznamuje čtenáře s fyzikálními základy modelování dvoufázového proudění. Je zde odvozen obecný dvoutekutinový model, je ukázán způsob jeho uzavření a jsou diskutovány různé formulace stavových rovnic. Na závěr druhé kapitoly jsou podrobně představeny vybrané metody pro řešení rozvrstveného proudění, eulerovské modely a princip eulerovských – lagrangeovských modelů diskretních částic.

Ve třetí kapitole jsou detailně rozebrány tři autorem této disertační práce softwarově implementované eulerovské modely, a to čtyřrovnícový dvoutekutinový model, šestirovnícový dvoutekutinový model a třírovnícový model pro řešení proudění s volnou hladinou. Je ukázán způsob jejich numerického řešení založený na metodě konečných objemů. Autorem této disertační práce vyvinutý software byl použit pro numerické řešení vybraných testovacích úloh. Dosažené numerické výsledky jsou dále porovnány s výsledky numerických simulací publikovaných v odborné literatuře.

Poslední, čtvrtá kapitola pojednává o numerickém řešení problému z průmyslové praxe týkajícího se separace oleje a vzduchu v olejových separátorech šroubových kompresorů. Numerické simulace byly provedeny pomocí výpočetního systému ANSYS Fluent při použití dvoutekutinového eulerovského modelu. Na základě provedených analýz a rozboru výsledků dosažených pro tři různé typy tlakových nádob (olejových separátorů) byla stanovena obecná doporučení pro návrh tlakové nádoby separátoru umožňující efektivnější proces separace obou fází. Dále byl na vybrané tlakové nádobě, splňující tato doporučení, sledován vliv vnějších rozměrů nádoby na dosaženou čistotu separovaných fází.

Cíle práce

Hlavním cílem předkládané disertační práce je zvládnout modelování dvoufázového proudění na takové úrovni, která odpovídá potřebám průmyslové praxe. Z tohoto pohledu je nezbytné provést detailní rešerši odborné literatury zabývající se modelováním dvoufázového proudění a na základě této rešerše sestavit ucelený přehled používaných modelů a technik pro řešení dvoufázového proudění, popsat jejich klady a zápory a vymežit rozsah jejich platnosti.

Dalším cílem, vyplývajícím ze získaných praktických zkušeností autora této disertační práce během realizace projektu znalostního transferu „Metodika návrhu olejových separátorů“, je popis základních eulerovských dvoutekutinových modelů, jejich algoritimizace a vlastní softwarová

implementace. Záměrem je vyvinout numerický řešič pro dvoufázové proudění, ten poté aplikovat na výpočty vybraných známých testovacích úloh, a tím validovat použité eulerovské modely a verifikovat autorem navržené algoritmy numerického řešení.

Cílem této disertační práce je rovněž pomocí numerických simulací ověřit hypotézu, že vnější rozměry tlakové nádoby (olejového separátoru) mají významný vliv na efektivitu procesu separace oleje a vzduchu. Dosavadní zkušenosti s fungováním olejových separátorů ve šroubových kompresorech totiž naznačují, že tlakové nádoby olejových separátorů štíhlých tvarů separují olej a vzduch lépe než nádoby zavalitých tvarů.

Kapitola 1

Přehled používaných matematických modelů a metod pro řešení vícefázového proudění a aktuální směry výzkumu

1.1 Stručný pohled do historie výpočtové dynamiky tekutin

Tekutiny široce ovlivňují náš každodenní život, ať už si to uvědomujeme, či nikoliv. Proto je samozřejmě užitečné zkoumat je samotné a děje s nimi spojené. Pravděpodobně prvním známým badatelem v této oblasti poznání byl Archimédes ze Syrakus (287 – 212 př. Kr.), proto jej dnes považujeme za jakéhosi zakladatele mechaniky tekutin [139]. Formuloval první poznatky hydrostatiky a dokázal je prakticky aplikovat. V běžné praxi se proudění tekutin přitom často neomezuje jen na jednu fázi, ale bývá prouděním více fází. Za pravděpodobně prvním doloženým výzkumem v oblasti dvoufázového proudění stojí všestranný renesanční velikán Leonardo da Vinci (1452 – 1519), který v ilustracích zachycoval proudové režimy a víry na vodní hladině při pohybu [41].

Pokud jsou naše znalosti dostatečné, můžeme přistoupit k tvorbě matematicko – fyzikálních modelů, jejichž prostřednictvím lze popisovat reálný svět. Matematické modelování je velmi účinný nástroj, díky kterému lze některým dějům lépe porozumět, nebo dokonce je možné i jevy předpovídat, čehož se dnes velmi hojně využívá v obrovském množství oblastí lidských činností. Obdobně je tomu pochopitelně i v mechanice tekutin, kde konkrétní matematické modely mohou například sloužit k předpovědi počasí, stejně jako mohou vést například k úspoře návrhového času a peněz při vývoji a konstrukci turbín jaderných elektráren.

V současnosti se ke kontinuálnímu popisu proudění reálných tekutin používá nelineární systém Navierových – Stokesových rovnic doplněný o nezbytné konstitutivní vztahy, který však bohužel v nejobecnějším tvaru není analyticky řešitelný. Neřešitelný model pochopitelně nelze pro smysluplnou aplikaci použít. Nové podněty našťestí přinesl prudký rozvoj výpočetní techniky a s tím související vývoj v oblasti numerické matematiky. Krátce po druhé světové válce vznikl nový obor, tzv. výpočtová dynamika tekutin („*Computational Fluid Dynamics*“, zkráceně CFD). Jak se zvyšoval výkon počítačů a zlepšovala se jejich dostupnost, rozšiřoval se tento obor z elitních vědeckých laboratoří do dalších výzkumných subjektů a později i do komerční sféry. S tím se pochopitelně rozvíjely i používané výpočtové modely, jež následně vedly k vývoji efektivnějších algoritmů vlastního numerického řešení.

V šedesátých letech 20. století vznikaly základy dodnes používaných výpočtových modelů, jako například $k - \epsilon$ model turbulence pro řešení turbulentního proudění, vícefázový Eulerův – Lagrangeův model pro řešení proudění s částicemi nebo „*Marker and Cell*“ metoda umožňující stanovit rozhraní dvou separovaných tekutin, [135], [105].

1.2 Základní klasifikace vícefázového proudění

Tento odstavec je zaměřen na popis různých přístupů modelování vícefázového proudění. Je důležité si nejprve alespoň intuitivně ujasnit, co rozumíme pod pojmem fáze, k čemuž poslouží následující dva příklady. Příkladem jednofázového proudění může být proudění vzduchu v potrubí. Ač se chemicky jedná o směs řady plynů, v měřítku výpočtové dynamiky tekutin lze považovat tuto směs za výborně promíchanou a je tedy možné přiřadit jí základní fyzikální vlastnosti, jako např. hustotu, dynamickou viskozitu, měrnou tepelnou kapacitu a další. Proudění takového média lze

matematicky popsat nelineárním systémem Navierových – Stokesových rovnic, který lze úspěšně numericky řešit pomocí klasických „jednofázových“ metod.

Naopak příkladem vícefázového proudění může být proud vody unášející různě velké částice písku a šterku říčním korytem. Pokud bychom studovali proudění takovéto heterogenní suspenze v ohybu říčního koryta, zjistili bychom, že malé částice písku sledují ohýbající se proud mnohem snáze než těžší kusy šterku, které míří spíše k vnější straně oblouku. Z mechanického hlediska se tedy částice různých velikostí, hmotností a tvarů chovají odlišně. Říkáme, že mají tzv. různou mechanickou odezvu. Množina částic, které mají shodnou mechanickou odezvu a chovají se v proudu stejně, se nazývá fází. Tento myšlený děj by potom byl označen jako proudění více fází, či prostě vícefázové proudění. Rovněž pohyb suspenze vody a ledu je nezbytné v rámci uvedeného hlediska považovat za proudění vícefázové, přestože se chemicky jedná o jedinou sloučeninu. Zajímavé jevy, spojené s dynamikou vícefázového proudění, můžeme běžně pozorovat například při dešti, kdy velké kapky padají vzduchem dolů, ale drobné kapky chaoticky poletují, často i směrem vzhůru.

Speciálním případem vícefázového proudění je proudění dvoufázové, kde zřejmě proudí pouze dvě fáze, avšak lze studovat důležité jevy spojené se sdružením a vzájemným působením obou fází.

Běžně numericky simulovaná vícefázová proudění jsou velmi rozmanitá. Častými úlohami jsou například různé problémy s volnou hladinou, obtékání trupů lodí, či lití materiálů. Velká skupina úloh pro jaderný, naftařský a petrochemický průmysl se zabývá prouděním plynů a kapalin v různých potrubních systémech. Dále připomeňme například simulace pohybu částic v různých mechanických separátorech prachu, modelování pohybu usazenin, či fluidní transport různých produktů. Jak bylo zmíněno v úvodu této práce, v současnosti je ve výpočtovém modelování používáno množství specializovaných přístupů pro konkrétní aplikace. Bohatost jevů je spojena s tím, že klasifikace typů proudění, či modelů jsou často nejednoznačné. Podle skupenství fází můžeme rozlišovat proudění typu:

- **Kapalina – pevná látka:** kapalinu označujeme jako primární, nosnou fázi. Částice pevné látky označujeme jako fázi sekundární. Příkladem může být zkoumání erozivního působení šterku rozptýleného ve vodě na stěny vodního díla. V těchto případech bychom mluvili o dvoufázovém proudění, pokud by všechny pevné částice měly stejný tvar a hmotnost.
- **Plyn – pevná látka:** podobné předchozímu typu, avšak nosnou fází je v tomto případě plyn. Příkladem může být proudění v separátoru prachu a vzduchu, či fluidní transport obilí a paliv. (Při fluidizaci jsou jednotlivé částice obtékány kolem celého povrchu, čímž se uvolní vazby mezi nimi a celá heterogenní směs získá tekutý charakter.)
- **Tekutina – tekutina:** zde je i pro případ dvou různých tekutin situace podstatně složitější, protože charakter proudění se kvalitativně významně mění s řadou vnějších vlivů, a to především s objemovým tokem a objemovým poměrem obou fází. Mluvíme potom o tzv. vícefázových proudových režimech, či proudových vzorech. Kritéria přechodu mezi jednotlivými režimy byla popsána v práci autorů Mishima a Ishiio [90]. Řada experimentátorů se věnuje právě studiu proudových režimů za specifických podmínek. V kanálech a potrubích jsou nejjednoduššími režimy rozvrstvená proudění a proudění jednotlivých částic (bublin, nebo kapek). Do této třídy bychom mohli zařadit například tvorbu vln na vodní hladině vlivem větru, či zkoumání korozivních účinků vzduchu rozptýleného ve vodě na kolena potrubí.

Uvedené rozdělení je samozřejmě neostré, protože reálné případy bývají různými kombinacemi. Zmiňovaná problematika proudových vzorů, blíže popsána v odstavci 2.1, není přitom výsadou proudění pouze tekutých fází. Obdobně i pohyb rozptýlených bublin, či kapek lze za některých

podmínek považovat spíše za proudění částic v nosné fázi, než proudění dvou tekutin. Proto je užitečné třídit vícefázová proudění i podle dalších hledisek, například podle charakteru rozhraní:

- **Rozvrstvené proudění:** v těchto případech je zřetelné jasné rozhraní mezi fázemi. Do této třídy bychom mohli zařadit pohyb vodní hladiny nebo materiálové lití.
- **Přechodové proudění více fází:** rozhraní mezi fázemi jsou značně komplexní, malá, či neostrá. V použitém měřítku již nelze přesně rozeznat rozhraní mezi fázemi a je nezbytné přejít k vyššímu stupni homogenizace. Příkladem může být přechodové proudění více fází v potrubí nebo obecně proudění heterogenních směsí.
- **Proudění s diskrétními částicemi:** sekundární fáze je zformována do množství malých částic rozptýlených v tekutině. Příkladem může být oddělování těžkých pevných částic z tekutiny v odstředivce.

V praktických aplikacích opět samozřejmě dochází k tomu, že se charakter vícefázového proudění mění i v rámci této klasifikace. Většina skutečných dějů totiž bývá značně komplexní, posuďme znovu příklad deště. Vzduch s různě velkými a jinak se chovajícími kapkami vody bychom mohli považovat za vícefázové proudění s rozptýlenými částicemi, vodní mlhu potom za částečně homogenizované proudění více fází a konečně odtékající proudy a formující se louže bychom zařadili do kategorie rozvrstvených proudění. Dalším příkladem může být formování spreje schematicky znázorněné na obr. 10.

Výše zmíněné rozdělení proudění podle charakteru bude použito v této práci a uvedeno do souvislosti s klasifikací vícefázových modelů. Podrobnější rozbor vybraných vícefázových modelů je uveden v této a v následující kapitole této práce.

Mnohé děje probíhající ve vícefázovém proudění nelze popsat jednoduše pouze pomocí vztahů mechaniky, ale je nezbytné precizně zachytit i jejich termodynamickou podstatu, zahrnout látkovou přeměnu a modelovat vzájemné působení obou fází. Příkladem může být nerovnovážné proudění vody a páry v okruzích parogenerátorů elektráren nebo kavitace za lodním šroubem. Často je nezbytné i propojení s dalšími vědními obory, jako například s poznatky chemie při procesu hoření paliva ve spalovacích motorech. Odpovídající popis komplikovaných dějů je značně náročný.

V této práci se omezíme pouze na nejjednodušší případy numerických simulací dvoufázového proudění bez výměny hmoty mezi fázemi. Bohužel i modelování tohoto jednoduchého problému přináší řadu komplikací. Modelování a numerické simulace jednofázového proudění je problematika dnes poměrně dobře zvládnutá. Matematické modely pro komplexní popis jednofázového proudění jsou dnes velmi propracované a metody numerického řešení dostatečně přesně a spolehlivě fungující. Pro vícefázové proudění však není situace tak jednoduchá. Lze odvodit bilanční rovnice pro jednotlivé fáze, avšak ucelená globální obdoba systému Navierových – Stokesových rovnic nebyla zatím objevena. Proto se používá řada vztahů odpovídajících charakteristickému chování řešeného systému, které však často obsahují více neznámých, než je rovnic. Je tedy nezbytné pracovat s dalšími konstitutivními a empirickými vztahy. Nelze se tak téměř vyhnout použití experimentálně stanovených veličin. Chování sestavených matematických modelů doplněných o konstitutivní vztahy je nezbytné důkladně studovat a testovat, [55].

Pro simulace proudění více tekutin se používá řada numerických metod. Dnes jsou patrně nejčastěji používané algoritmy založené na metodě konečných objemů, stále větší popularitu si získávají moderní „*lattice*“ Boltzmannova metoda a nespojitá Galerkinova metoda konečných prvků.

Nyní se velmi stručně zmíníme o nespojitě Galerkinově metodě konečných prvků

(„*Discontinuous Galerkin Finite Element Method*“, zkráceně DGFEM), která je zobecněnou kombinací metody konečných prvků a metody konečných objemů s cílem využít jejich silné stránky a potlačit jejich nevýhody. Za prvotní je považována práce autorů Reeda a Hilla [107]. Poznamenejme, že Katedra mechaniky Fakulty aplikovaných věd ZČU v Plzni také pracuje na numerických řešičích založených na DGFEM, [133], [14]. Tato metoda dosahuje vyšší řád přesnosti oproti metodě konečných objemů a současně je stále dostatečně robustní. Nevýhodou je však složitější systém rovnic a tedy vyšší výpočetní náročnost, kterou by měla nově zmírnit například modifikovaná „*weak Galerkin FEM*“, prezentovaná v článku [42]. Zhruba před deseti lety se DGFEM začala silněji prosazovat mezi výpočetní metody pro řešení dvoufázových modelů.

V současné době je na vzestupu také využívání „*lattice*“ Boltzmannovy metody (zkr. LBM). Jedná se o poměrně nový přístup prezentovaný McNamarou a Zanettim v [87]. Základní myšlenkou je redukováný kinetický model pro vyjádření rovnic proudění v mezoskopickém měřítku, který řeší molekulární dynamiku pomocí modelových částic (distribučních funkcí) statisticky zachycujících pohyb množiny skutečných částic. Uvedená metoda se postupně dostala do mnoha aplikací a velmi rychle i do problematiky vícefázového proudění. Rothman a Keller [109] prezentovali „*color – fluid LGA model*“, který rozlišuje příslušné fáze pomocí identifikátoru (barvy) modelových částic. Je důležité si uvědomit, že popis proudění je v pojetí LBM principiálně jiný vůči metodám založeným na řešení systému Navierových – Stokesových rovnic. Proto jsou pro tuto metodu vyvíjeny specializované vícefázové modely, které jsou však mimo rámec této disertační práce. Mezi nejvýznamnější přednosti LBM lze řadit např.: snadná paralelizace výpočtů, konvektivní operátor je lineární, přesnost obdobná schémátům druhého řádu, tlak je dopočítáván ze stavové rovnice a není tedy nutné řešit eliptickou Poissonovu rovnici pro tlak. Nevýhodou vícefázových modifikací LBM je nestabilita při výpočtech s vysokým poměrem hustot fází, což se pokouší řešit např. práce [63], [73]. LBM lze rovněž použít pro řešení proudění s volnou hladinou, jak například ukazují výsledky pracovníků Katedry mechaniky Fakulty aplikovaných věd ZČU v Plzni, [134].

V této práci se omezíme na numerické řešení modelů dvoufázového proudění pomocí metody konečných objemů. A dále budou diskutovány pouze vybrané modely dvoufázového proudění, jejichž numerické řešení lze na metodě konečných objemů založit.

1.2.1 Matematické modelování rozvrstvených proudění

Pokud proudí dvě tekutiny oddělené rozhraním, hovoříme o rozvrstveném proudění („*stratified flow*“, v některé literatuře se rovněž používá označení „*separated flow*“). Často se setkáváme s tím, že sekundární fáze se v modelu zanedbá. Toto zjednodušení lze využít v případech, kdy sekundární fáze má minimální vliv na sledované děje a přenos hybnosti z ní do fáze primární je relativně malý. Zredukované modely se hojně používají pro řešení takzvaných proudění s volnou hladinou („*free surface flow*“), příkladem užití mohou být např. simulace pohybu hladiny vody kolem plující lodě, protržení hráze, či studium dopadu kapky na klidnou hladinu, viz obr. 1. Na rozhraní primární a zanedbané fáze („*void fraction*“) se v modelech obvykle uvažuje působící konstantní hydrostatický tlak od zanedbané fáze. Navíc se pomocí přidavných členů, či modelů přidávají i další vlivy ovlivňující rozhraní, například povrchové napětí, jehož silový účinek je závislý na často obtížně stanovitelné lokální křivosti rozhraní.

Poznamenejme dále, že pokud bychom chtěli přesně dodržet zavedenou terminologii, potom proudění s volnou hladinou znamená, že rozhraní je skutečně volné, ustanovené pouze působením tíhy. Jednotliví autoři však tento fakt opomíjejí a podle užití základního modelu označují i použití rozšířených modelů, jako modely pro řešení problémů s volnou hladinou.



Obr. 1: Z tohoto obrázku, zachyceného po dopadu kapky na klidnou vodní hladinu, jsou patrné radiálně se šířící vzruchy z dopadu a centrální zpětný výtrysk. Převzato z [103].

Dalším úskalím terminologie je označení modelů jako dvoufázových či nikoliv. Jedna z linií klasifikací modelů, které se budeme držet v této práci, řadí modely k dvoufázovým, pokud je lze použít pro popis proudění s výskytem dvou fází. Například jiná linie však striktně vyžaduje modelování obou fází v celé oblasti, pročež bychom většinu modelů pro řešení rozvrstvených proudění neklasifikovali jako modely dvoufázové, ale spíše jako modely používající dvojici jednofázových modelů, jak bude vysvětleno níže.

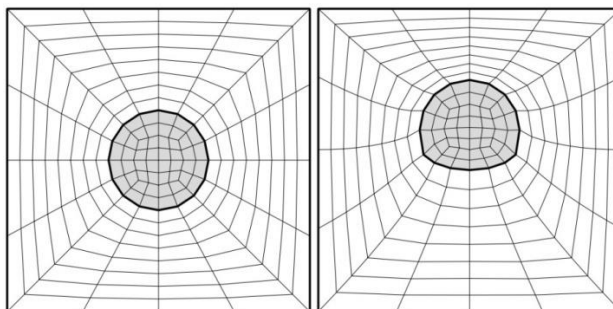
Rozvrstvená proudění se hojně vyskytují jak v přírodě, tak i v průmyslových aplikacích. Dnes potřebujeme z různých důvodů děje kolem nás modelovat matematicky. Proto jsou problémy simulací proudění s hladinou velmi časté a pro jejich numerické řešení vznikla řada specializovaných algoritmů. Postupy vhodné pro implementaci metody konečných objemů dělíme obvykle do dvou skupin: metody sledování rozhraní („*interface tracking method*“) a metody zachycení rozhraní („*interface capturing method*“). Porovnání nejpoužívanějších metod lze najít například v práci Elgetiho a Sauerlanda [32]. Samozřejmě existují hybridní kódy kombinující výhody obou přístupů. Poznamenejme dále, že existují i další efektivní způsoby řešení problémů proudění s volnou hladinou, jako například specializované modifikace „*lattice*“ Boltzmannovy metody, lagrangeovská hydrodynamika vyhlazených částic („*Smoothed Particle Hydrodynamics*“, která byla mimo jiné implementována i pro řešení těchto úloh na Katedře mechaniky Fakulty aplikovaných věd ZČU v Plzni, viz [81], ucelený výklad metody lze najít také např. v [69]) a další.

Nejsilnějším nástrojem pro modelování proudění s více fázemi je metoda přímé numerické simulace. Jedná se o podrobné modelování všech jevů v heterogenní tekutině. Výpočet se tedy provádí na sítích významně jemnějších, než je charakteristická délka nejmenších heterogenit, které jsou schopny detailně postihnout tvary jakýchkoliv rozhraní. Přímá simulace tedy vyžaduje i extrémně malé časové kroky, tj. kratší, než je typický čas studovaných problémů. Při přímé numerické simulaci zaujímá každou část objemu pouze jediná fáze. Tedy postačí řešit jednofázového systému rovnic proudění. Zpravidla potom není potřeba používat empirické přídatné vztahy. V případě nutnosti postačují na rozhraní jednoduché analytické vztahy. Významné jevy (např. vztlak, turbulence, deformace částic, nestacionarity apod.) lze pak vysledovat přímo z výsledků úlohy, [105]. Do značné míry lze tedy metodami přímé numerické simulace nahradit, či vhodně doplnit experiment a analýzou výsledků stanovit vstupní koeficienty pro konstitutivní vztahy jiných druhů vícefázových modelů. Hlavní nevýhodou jsou obrovské nároky na výpočetní paměť a dlouhý výpočetní čas. I na stávajících počítačích lze řešit pouze malé úlohy. Avšak vzhledem k neustálému růstu výpočetních možností nelze uvedený přístup do budoucna zavrhnout.

1.2.1.1 Metoda sledování rozhraní

Metody sledování rozhraní, jejichž přehled lze například najít v Hymanově knize [60], pracují s proměnlivou sítí. Poloha rozhraní se vyvíjí v čase, šíří se spolu s tekutinou a spolu s ní se mění i síť. Nejčastěji se tento postup realizuje tak, že se posouvají uzly sítě na rozhraní. Rozhraní je tedy v každém okamžiku přesně a jasně popsáno hraničními uzly a příslušnými hranami výpočetní sítě. Tyto uzly lze označit jako značky („*markers*“) identifikující rozhraní. Výhoda tohoto postupu je velká přesnost zachycení polohy rozhraní. Naopak nevýhodou je nutnost měnit polohu uzlů výpočetní sítě v průběhu iteračního procesu, což vyžaduje nejen další výpočetní čas, ale i lagrangeovský řešič pro určení nových poloh uzlů sítě na rozhraní.

Důležitým úkolem je volba vhodného způsobu přesítování. Výpočetně nejjednodušší je úprava pouze buněk přilehlých k rozhraní, což ovšem vede k deformacím tvarů buněk a kolapsu sítě při větším posuvu hraničních uzlů. Ze stejného důvodu nebývá obecně vhodné měnit síť lagrangeovsky v celé výpočetní oblasti, tedy tak, aby pohyb uzlů sítě odpovídal pohybu tekutiny. Pro síťování se běžně užívají různé metody, které vnitřní uzly sítě v podstatě libovolně přemísťují, či umísťují s ohledem například na kvalitu sítě. Často používaná je například „*elastic mesh update method*“, jejíž užití je ukázáno na obr. 2, při jejíž aplikaci jsou jednoznačně určeny hraniční body sítě na okrajích a na rozhraní a síť uvnitř této oblasti je modelována jako pružné těleso.



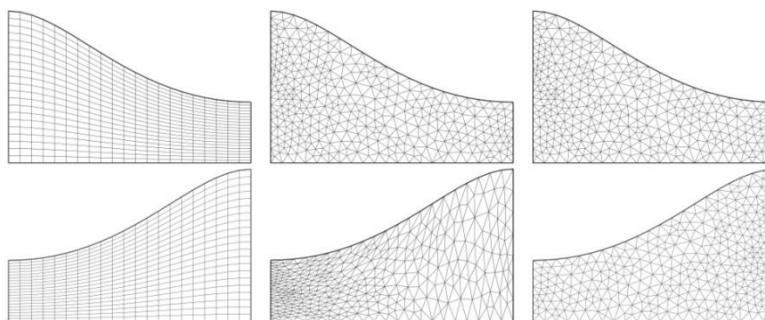
Obr. 2: Původní síť (vlevo) modifikovaná pomocí „*elastic mesh update*“ metody (vpravo). Jedná se o příklad proudění dvou separovaných tekutin v tíhovém poli, kde šedá tekutina má menší hustotu [32].

Hybridní pohyb sítě, různý od pohybu tekutiny, vyžaduje použití ALE („*Arbitrary Lagrangian – Eulerian*“) popisu při řešení rovnic proudění. Při značných pohybech a deformacích rozhraní je nutné oblast celkově přesítovat, což je pochopitelně výpočetně ještě náročnější, avšak udržení dobré kvality sítě se pozitivně odráží na dosažených výsledcích. Pokud je potřeba přesně zachytit složitý tvar rozhraní, je nezbytné použít větší počet značek a jemnější síť, čímž vzrůstá výpočetní náročnost. Komplikace nastávají, pokud dochází k velkým deformacím rozhraní. Například při rozpínání bubliny se hraniční vrcholy od sebe vzdalují, jejich hustota řídne a tvar popisovaného rozhraní se stává stále více hranatým. Řešením je opětovné přidávání dalších uzlů na rozhraní. Při opačném ději teoreticky nemusíme nutně uzly odebírat, ale je to užitečné z pohledu optimalizace výpočetní náročnosti. Přidávání a mazání značkových uzlů je třeba řešit velmi rozvážně pomocí dalšího algoritmu. Ještě komplikovanější situace nastává v případech zániku rozhraní, či vzniku nového rozhraní. Příkladem takových dějů mohou být dopad kapky na hladinu, spojování bublin nebo výtrysk z volné hladiny. Zvláště v těchto případech musí být velmi precizně definovány podmínky smazání značkovačů (zánik rozhraní), či přidání značkovačů (vznik rozhraní) korespondujících s reálným vývojem systému.

Obě strany rozhraní zaujímají jiné fáze. Na těchto podoblastech jsou poté řešeny příslušné jednofázové systémy Navierových – Stokesových rovnic. Na rozhraní se skokově mění veličiny a dochází k interakci obou fází, která bývá modelována jak pomocí sdružených, tak i nesdružených

metod interakce. Pokud jsou matematické modely proudění obou fází zcela shodné, je implementace sdružených metod interakce jednodušší. Proudění v celé výpočtové oblasti bývá v těchto případech obvykle řešeno pomocí jediného systému Navierových – Stokesových rovnic a vlastnosti tekutin se mění v závislosti na poloze rozhraní. Na druhou stranu při použití nesdružených metod interakce obou fází lze snadněji zahrnout relaxační členy tlumící případné oscilace na rozhraní, více informací lze najít například v pracích [62], [126].

Poznamenejme, že pro proudění se zcela zanedbanou sekundární fází není potřeba vytvářet v oblasti zanedbané tekutiny výpočetní síť, což znamená úsporu výpočetních nároků. Příklady úprav výpočetní sítě při rozvrstveném proudění se zanedbanou fází jsou zobrazeny na obr. 3.



Obr. 3: Příklady úprav sítě při sledování rozhraní proudící tekutiny s volnou hladinou. Nahoře původní oblast vyplněná tekutinou, dole nová deformovaná oblast vyplněná tekutinou. Vlevo adaptace polohy uzlů sítě pomocí algebraické funkce, uprostřed pružná adaptace polohy uzlů sítě a vpravo nově vytvořená síť v oblasti, převzato z [6].

1.2.1.2 Metoda zachycení rozhraní

Metoda zachycení rozhraní používá pevnou výpočetní síť. Odpadá zde tedy potřeba přesítování, což spoří výpočetní čas oproti metodě sledování rozhraní. Na druhou stranu je nezbytné vhodným způsobem stanovit polohu rozhraní. Metody zachycení rozhraní proto používají značkovače, či značkovací funkce, které detekují rozhraní a identifikují jednotlivé fáze.

Nejstarší metodou pro řešení rozvrstveného proudění vůbec je „*Marker–And–Cell*“ metoda (zkr. MAC). Vznikala již v 60. letech 20. století na strukturovaných sítích, kdy Harlow a Welch v [52] použili identifikační značky pro řešení proudění nestlačitelné tekutiny s volnou hladinou. Nehmotné značkovací částice identifikující tekutinu jsou unášeny proudem. Buňky, které je neobsahují, jsou označovány jako prázdné. Buňky, které je obsahují a sousedí s prázdnými buňkami, jsou označeny jako hraniční a zbylé jako buňky vyplněné tekutinou. Pro zlepšení stability výpočtu použili autoři střídavou síť, kde rychlosti jsou vypočítávány na stěnách kontrolního objemu, kdežto tlak a ostatní veličiny ve středu buňky. V každé z buněk na počátku obsahující tekutinu je hned několik značkovačů. Jejich následný pohyb je vypočítáván v Lagrangeově popisu, přičemž je použita průměrná rychlost proudění v příslušné buňce. MAC metoda je dnes považována spíše za překonanou, avšak stále vznikají práce na hybridních kódech kombinující modernější metody s metodami MAC typu.

Modernější metody používají místo částicových značkovačů značkovací funkce, které vyjadřují polohu rozhraní. Vývoj značkovací funkce popisuje advekční rovnice, která se numericky řeší obdobně jako rovnice proudění v Eulerově popisu, což je jednodušší na algoritmizaci. Nevýhodou těchto metod je právě přesnost popisu tvaru rozhraní pomocí takové diskretizované značkovací funkce. Během výpočetního procesu může být principiálně tloušťka obecného rozhraní přinejlepším omezena na jednu buňku. Nelze tedy definovat rozhraní jako ostrou hranici. Pro dosažení kvalitního rozlišení tvaru komplexních rozhraní je potom nezbytné použít hustou výpočetní síť, výpočet se

postupně přibližuje přímé numerické simulaci.

Do této kategorie můžeme zařadit „*Volume-Of-Fluid*“ metodu (zkr. VOF), za jejíž zakladatele jsou považováni Hirt a Nichols [56]. VOF dobře zachovává objem fází, avšak interpretuje rozhraní nespojitě, což je velký problém například při práci s podmodely povrchového napětí. Nebo sem lze řadit „*level set*“ metodu autorů Sussmana, Smereky a Oshera, [123], jejíž značkovací funkce, tzv. „*level set*“ funkce, je spojitá i hladká, avšak je problematické zajistit zachování hmoty obou fází. Pro výpočet advekce hladké „*level set*“ funkce lze relativně snadno použít schémata vyšších řádů přesnosti, zatímco numerické řešení pomocí VOF metody při použití schémat vyššího řádu značně osciluje. VOF a „*level set*“ metody budou blíže přiblíženy v odstavcích 2.7.1 a 2.7.2. Mezi metody zachycení rozhraní lze rovněž řadit třírovnicový model pro výpočet proudění s volnou hladinou, viz [27], který je odvozen z klasického dvoutekutinového modelu a je podrobně popsán a řešen v odstavci 3.3.

Odstranit falešnou ztrátu hmoty při použití „*level set*“ metody se snažili i další autoři. Pokračování práce autorů Sussmana, Pucketta, [122], se soustředilo na tvorbu hybridních metod, které kombinovaly VOF a „*level set*“ metodu s cílem upřednostnit jejich výhody, tedy konzervativitu VOF metody, resp. hladkost „*level set*“ funkce a potlačit nedostatky. MAC metodou se inspirovali Enright a kol. [34], kteří zpřesnili výpočet rozhraní stanovené „*level set*“ metodou pomocí nehmotných značkovaců jejichž poloha byla řešena v Lagrangeově popisu, tedy obdobně jako vyjadřují rozhraní „*front-tracking*“ metody.

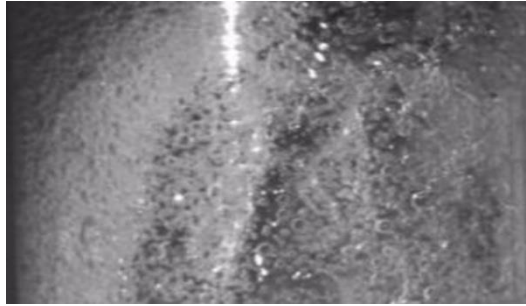
Numerickým simulacím proudění tekutin s volnou hladinou pomocí „*level set*“ metody se věnovala například práce kolektivu vedeného Changem [61], která na problému spojování bublin stoupajících kapalinou zkoumala efektivitu Eulerových dvoufázových modelů, viz odstavec 1.2.2, s přidanou „*level set*“ funkcí. Nestlačitelné dvoufázové proudění kapalin rovněž řešili Sussman a kol. [121], kteří se zaměřili na numerické problémy spojené se značným rozdílem hustot jednotlivých fází a silnou interakcí na rozhraní fází. Shepel a Smith v práci [113] použili kombinaci metody konečných objemů pro prostorovou diskretizaci výchozích rovnic popisující proudění tekutin a metody konečných prvků pro prostorovou diskretizaci „*level set*“ funkce. Fyzikální vlastnosti tekutin (hustota, dynamická viskozita atp.) v celé oblasti byly dále určeny modifikovanou Heavisideovou funkcí se spojitým přechodem v oblastech rozhraní fází, čímž bylo dosaženo zlepšení chování numerických schémat.

Zmiňme na tomto místě ještě jednu významnou metodu pro modelování rozhraní mezi jednotlivými fázemi. Základem této metody je tzv. „*front-tracking*“ algoritmus, který využívá pevnou síť, podobně jako metoda zachycení rozhraní. Avšak pro nalezení tvaru rozhraní nepoužívá značkovací funkce, ale nehmotné značkovače, které jsou unášeny spolu s rozhraním. Na rozdíl od MAC metody tedy nejsou tyto značkovače používány pro identifikaci tekutin (objemů). Tato metoda je detailněji vysvětlená v práci [64].

Metody pro řešení rozvrstveného proudění jsou obecně nevhodné pro modelování topologicky složitých proudění, jako je například pěnivé proudění („*churn flow*“), jehož příklad je ukázán na obr. 4. Simulace podobných problémů by vyžadovaly velmi jemné výpočetní síť a byly by tedy výpočetně neúměrně náročné.

Při aplikaci uvedených metod je potřeba věnovat největší pozornost především výpočtu pohybu rozhraní. V případě velkých rozdílů hustot jednotlivých fází jsou vhodnější schémata prvního řádu přesnosti potlačující vznikající numerické oscilace. Problematické může v těchto případech rovněž být řešení eliptické rovnice pro tlak, kdy jednoduché řešiče často produkují záporné hodnoty hustoty a sofistikovanější řešiče nekonvergují. Více se lze dočíst například v Prosperettiho a

Tryggvasonově knize [105].

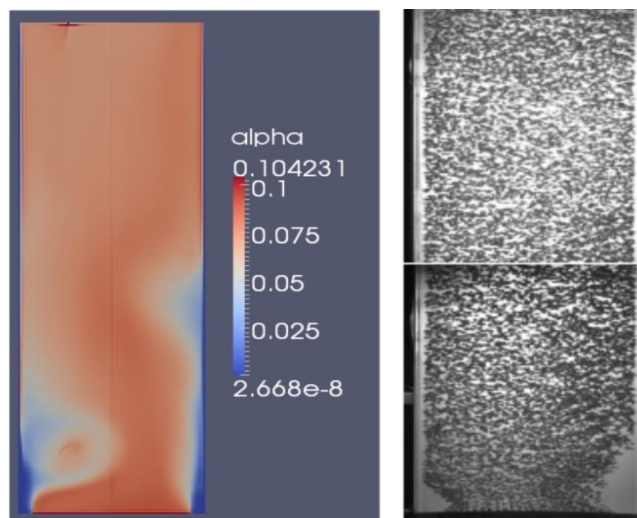


Obr. 4: Vzestupné pěnivé proudění vody a vzduchu se složitou topologií, obrázek z experimentu převzat z práce [92].

Dodejme, že za specifických, avšak velmi často řešených podmínek, kdy je vertikální rozměr vzhledem k ostatním malý a proudění v tomto svislém směru zanedbatelné, lze zcela rozvrstvené proudění s volnou hladinou modelovat pomocí tzv. rovnic mělké vody („*shallow water equations*“). Matematický popis mělké vody vychází z vertikálně průměrovaných Navierových – Stokesových rovnic pro jednu fázi. Polohu hladiny tekutiny definuje veličina představující lokální hloubku. Řešení příslušných úloh pomocí takto redukovaného matematického modelu je velmi efektivní a Katedra mechaniky Fakulty aplikovaných věd ZČU v Plzni s ním má rovněž zkušenosti, [38], [39].

1.2.2 Matematické modelování přechodového proudění více fází

Pokud je tvar rozhraní mezi fázemi ve výpočtové oblasti příliš složitý, není dnes z hlediska výpočetní náročnosti možné modelovat celý děj podrobně pomocí metod vyvinutých pro řešení rozvrstvených proudění, které věrně popisují rozhraní obou fází. Precizní popis tvaru rozhraní pomocí těchto metod by vyžadoval extrémně jemnou výpočetní síť v porovnání s celkovou velikostí výpočtové oblasti. Příkladem takového proudění se složitou topologií může být proudění tekutiny napěněné velkým množstvím relativně malých plynových bublin, viz obr. 4, 5. Komplexní, složité úlohy inženýrské praxe je však nutné řešit s dostupnými zdroji a dosáhnout výsledků v reálném čase, proto je nezbytné udržet výpočetní náročnost související s celkovým počtem buněk sítě v rozumných mezích. To je možné pomocí jistého stupně homogenizace dvoufázového proudění.



Obr. 5: Probublávání vzduchu vodním sloupcem lze účinně modelovat pomocí eulerovských dvoufázových modelů. Na obrázku vlevo je rozložení objemového podílu vzduchu určené pomocí numerického řešení úlohy, vpravo foto z experimentu. Převzato z [144].

Tzv. eulerovské dvoufázové modely uvažují možný současný výskyt obou fází v libovolné části výpočtové oblasti. Předpokládá se, že obě tekutiny se v částech oblasti prostupují („*interpenetrating*“), avšak zůstávají oddělené a nemísí se v další fázi. Rovnice proudění jsou průměrovány, například způsobem popsáním v odstavci 2.4. Průměrované rovnice mají formálně tvar velmi podobný systému Navierových – Stokesových rovnic popisujícímú jednofázové proudění. Vyskytují se však nové členy, které jsou produktem průměrování. Systém rovnic lze doplnit interakčními členy a někdy bývají přidávány i umělé členy pro lepší numerickou řešitelnost. Přídavné členy mohou mít různé matematické formy fyzikální význam. Ve specifických případech bývají používány empirické vztahy, které však často mívají významná omezení zužující rozsah jejich použitelnosti. I přesto lze díky eulerovským modelům dosáhnout kvalitních výsledků srovnatelných s experimentálními měřeními.

V některých případech je dále možné redukovat popis problému s přijetím zjednodušujících předpokladů. Pokud se obě fáze chovají téměř stejně, hovoříme o tzv. mechanicky silně sdružených fázích, postačují pro jejich popis jednoduché homogenizované modely. Naopak když je chování fází značně odlišné, je nezbytné složitěji modelovat obě fáze preferovat tzv. dvoutekutinové modely. Eulerovské modely pracují s veličinou objemový podíl fáze („*volume fraction*“), což je objemový podíl příslušné fáze k velikosti celého elementárního objemu

$$\alpha_1 = \frac{V_1}{V}, \alpha_2 = \frac{V_2}{V}, \quad (1.1)$$

kde indexy 1 a 2 označují jednotlivé fáze, α_1 značí objemový podíl první fáze a α_2 objemový podíl druhé fáze, V_1 část elementárního objemu vyplněnou první fází, V_2 část elementárního objemu vyplněnou druhou fází a V je celkový objem.

Teorie proudění dvou nemísitelných fází předpokládá, že objem může vyplňovat pouze první, nebo druhá fáze. Poznamenejme, že prázdný prostor existovat nemůže, neboť by se jednalo o třetí fázi („*void fraction*“). Musí tedy platit

$$V_1 + V_2 = V \quad (1.2)$$

a rovnost pro objemové podíly

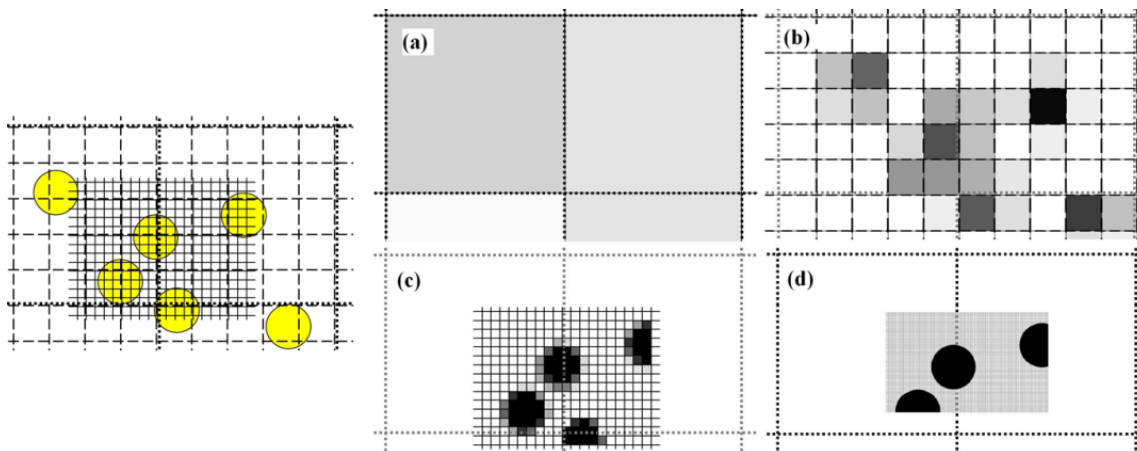
$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1, \quad (1.3)$$

která bude dokázána v odstavci 2.3. Eulerovské modely tedy neposkytují informaci o přesné topologii rozhraní fází, která je v těchto modelech pouze zjednodušeně nastíněna prostřednictvím poměru objemů, které fáze zaujímají. Pro dvě fáze dostačuje stanovení objemového podílu jedné z fází, protože objemový podíl další fáze je jednoznačně určen rovnicí (1.3).

U výše zmíněného pěnivého proudění by se tedy v konkrétní části oblasti vyskytovalo několik plynných bublin obklopených tekutinou. Neměli bychom sice přesnou informaci o jejich poloze a tvaru, ale prostřednictvím objemového podílu plynné fáze α_1 bychom měli dobrou představu, jakou část objemu bubliny vyplňují, jak ukazuje obr. 5. Vhodný dvoufázový model je schopen dobře popsat dynamické chování takového systému, což je ve většině aplikací právě to nejdůležitější.

Protože eulerovské modely řeší proudění obou tekutin v dané části objemu, je i v obecných případech složitých tvarů rozhraní fází dostačující řidší síť oproti modelům pro řešení rozvrstvených proudění. Eulerovské modely sice řeší větší soustavu rovnic, navíc doplněnou o nové členy a množství konstitutivních vztahů, ale i tak mívají v těchto složitých případech nižší výpočetní nároky a bývají celkově výpočetně efektivnější. Pokud by bylo předmětem zájmu nalezení ostřejšího tvaru rozhraní při použití eulerovských modelů, je nezbytné rozmazání jeho tvaru způsobenou koncepcí objemových podílů kompenzovat jemnější sítí, jak ilustrují obr. 7 a

obr. 6. Tím by však byla potlačena filozofie homogenizačního přístupu a naopak řešení složitějšího systému rovnic na jemné síti by znamenalo ztrátu výpočetní efektivity. Poznamenejme, že v tomto pohledu je možné sledovat určitou analogii s metodami zachycení rozhraní, jejichž terminologií bychom mohli říct, že rozložení objemového podílu zde plní roli značkovací funkce.



Obr. 6: Ukázka vlivu kvality sítě na hodnotu objemového podílu α pro případ několika kapek velikosti $d = 1$ mm (žlutě vlevo): $\Delta x_{(a)} = 4$ mm, $\Delta x_{(b)} = 0,8$ mm, $\Delta x_{(c)} = 0,2$ mm, $\Delta x_{(d)} = 0,02$ mm, kde Δx je velikost čtvercové buňky výpočetní sítě.



Obr. 7: Rozvoj tvaru Rayleighovy – Taylorovy nestability v tíhovém poli z klidného rozhraní vzduchu (dole, $\alpha = 0$) a vody (nahore, $\alpha = 1$), převzato z [22]. Nahore tvar rozhraní určený pomocí VOF, dole rozložení objemového podílu vody vypočtené pomocí dvoutekutinového modelu. Počet buněk zleva: 6×30 , 12×60 , 24×120 a 48×240 .

Eulerovské modely jsou nejčastěji používány v praxi, protože si dokážou poradit s komplexními problémy a dobře se hodí pro široké spektrum aplikací. Bohužel matematická formulace rovnic bývá často složitá. Lze se setkat s rovnicemi v nekonzervativním tvaru, navíc může systém ztrácet hyperbolicitu. Při řešení diskretizovaných úloh pomocí výpočetních algoritmů dochází k numerickým nestabilitám, kvůli nimž jsou stále nejpoužívanější schémata pouze prvního řádu

přesnosti, která svou přirozenou vnitřní vazkostí tlumí numerické oscilace dvoufázových modelů. Vzhledem k těmto úskalím se většina úsilí soustředí především na výzkum metod numerického řešení, které by byly dostatečně přesné, zároveň však stabilní a robustní.

Eulerovské modely pro řešení dvoufázového proudění se nejčastěji třídí podle stupně homogenizace pohybových rovnic. Pokud jsou v modelech zahrnuty pohybové rovnice obou fází, hovoříme o tzv. dvoutekutinových modelech („*two-fluid model*“, zkráceně TFM, či Eulerových – Eulerových modelech). Tyto modely je nezbytné používat při řešení problémů se slabým mechanickým sdružením fází, kdy se dynamické chování proudění jednotlivých fází výrazněji liší, a tedy musí být řešeno zvlášť pomocí samostatných pohybových rovnic. Naopak pokud model obsahuje pouze jedinou pohybovou rovnici, jejíž pomocí je modelován pohyb celého mechanicky silně sdruženého dvoufázového systému, hovoříme o tzv. homogenních modelech („*homogeneous models*“), či modelech směsi („*mixture models*“).

Modelů je velké množství a jejich tvary se často liší pouze v detailech. Jejich názvy se nejčastěji odvozují od celkového počtu bilančních rovnic, případně doplněných o další evoluční rovnice. Bohužel taková klasifikace je opět nejednoznačná. Například se používají čtyřrovnícové dvoutekutinové modely, stejně jako čtyřrovnícové modely směsi, apod. Doplnující informací může být například: míra homogenizace, upřesnění použitých konstitutivních vztahů. U složitějších TFM je běžně udáván také počet tlakových polí, se kterými model pracuje.

Nejsložitější používaný model, vhodný pro nerovnovázné děje se silným vlivem řady mezifázových členů, je sedmirovnícový dvoutekutinový model s dvěma tlakovými poli, pomocí něhož Baer a Nunziato v klíčové práci [5] popisovali hoření a následný vývoj plynů prudce reaktivních materiálů. Matematické vlastnosti tohoto systému byly později zevrubně zkoumány například v práci [33] Embida a Baera.

Naopak jedním z nejjednodušších eulerovských modelů je model směsi. Základní podoba modelu směsi je formálně velmi blízká klasickému systému pro řešení proudění jedné fáze. Navíc je však soustava rovnic doplněná o další rovnici, která určuje vývoj objemového podílu obou fází, většinou se použije advekční rovnice pro objemový podíl, či rovnice kontinuity pro jednu z fází. Další podrobnosti o modelu směsi lze najít například ve studii Manninena a kol [84].

Vůbec nejjednodušší model je homogenní rovnovážný model, který nahrazuje dvoufázový systém jednofázovou směsí tekutin, podrobnosti lze najít v pracích Stwarta a Wendroffa [120] nebo Menikoffa a Plohra [89]. Tento velmi jednoduchý model se používá často pro kritické proudění v potrubích, pro řešení tepelných výměníků atd. Nedokáže však zachytit výraznější hybnostní, či termodynamickou nerovnováhu mezi fázemi.

Uveďme dále několik významných výzkumných prací, zaměřených do oblasti numerického řešení zmiňovaných eulerovských modelů. Stadtke a kol. se v práci [119] soustředili na řešení nestacionárního dvoufázového proudění, popsaného plně hyperbolickým dvoutekutinovým modelem s nekonzervativním členem, prostřednictvím vybraných „*flux-vector-splitting*“ metod. Na nerovnovázné transonické proudění páry a kapek vody v turbinovém stupni byly zaměřeny práce Halama a kol. [49], [48]. Autoři použili nerovnovážný model směsi rozšířený o rovnice popisující evoluci a transport kapek. Numerické řešení tohoto systému rovnic bylo realizováno ve dvou krocích. V prvním kroku byla vypočítána konvekce proudu pomocí metody konečných objemů založené na Laxově-Wendroffově schématu s umělou viskozitou a ve druhém kroku byla řešena v každé buňce nezávisle kondenzační část.

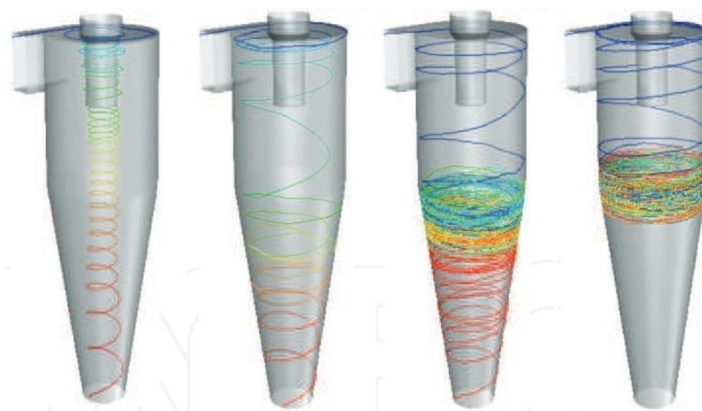
V posledním desetiletí byla zřejmá snaha autorů o přesnější řešení turbulentního dvoufázového proudění. Například Zeng [146] zahrnul do dvoutekutinového modelu popisujícího proudění plynu

s kapkami poloempirický vztah vyjadřující indukovanou brázdou za částčkou při jejím obtékání. Velká pozornost je i nadále věnována analýze vlastností a stability numerických metod pro řešení eulerovských modelů, více lze najít například v práci Liaa a kol. [75].

Vybrané modely a příklady jejich užití budou blíže popsány v následujících kapitolách této disertační práce.

1.2.3 Matematické modelování proudění s diskrétními částicemi

Při numerických simulacích pohybu kapaliny s relativně malým množstvím malých částic se obvykle využívají tzv. Eulerovy – Lagrangeovy modely diskrétních částic („*Discrete Phase Model*“, zkr. DPM). Pohyb tekutiny, která bývá obvykle chápána jako nosná fáze, je zde řešen v Eulerově popisu. Avšak jednotlivé částice rozptýlené fáze jsou sledovány zvláště v Lagrangeově popisu. Princip modelu je jednoduchý a snadno pochopitelný. Jeho teoretické základy jsou starší, než výpočtová dynamika tekutin. Při implementaci DPM je nezbytné vhodnou numerickou metodou určovat pohyb jednotlivých částic, což vyžaduje řešič vycházející z Lagrangeova popisu.



Obr. 8: Vizualizace trajektorií samostatných prachových částic různých velikostí (zleva: 5 μm , 20 μm , 40 μm a 60 μm) v cyklonovém separátoru. Převzato z [131].

Simulovat proudění tekutiny s omezeným počtem malých částic pomocí metod pro řešení rozvrstveného proudění není dobrou volbou, neboť by řešení vyžadovalo nesmyslně jemnou síť. Alternativou by mohlo být použití algoritmů pro dynamické lokální zahuštění sítě, což však není výpočetně zcela efektivní řešení. Obdobně nevhodné je užití TFM, které by zbytečně řešily v celé oblasti složitější systém rovnic, přičemž omezený počet částic se vyskytuje jen v několika buňkách sítě. EM a metody zachycení rozhraní navíc neumí určit přesnou polohu částic. Právě schopnost velmi přesně určit polohu částic je největší devizou jejich sledování v Lagrangeově popisu, jak ukazuje obr. 8. DPM jsou při těchto aplikacích velmi efektivní. Řeší jednodušší systém pro popis proudění. Celá řada autorů užívá přímo Navierovy – Stokesovy rovnice pro popis jednofázového systému, jejichž řešení je dobře propracované. Následně je modelována interakce tekutiny a částic. Potom jsou pomocí druhého Newtonova zákona vypočtena zrychlení, rychlosti a polohy jednotlivých částic, a to velmi přesně. Poznamenejme, že pokud by měly všechny částice stejnou velikost, hmotnost i tvar, měly by stejnou mechanickou odezvu a jednalo by se o dvoufázový systém tekutina – částice.

Aplikace Eulerových – Lagrangeových modelů má jedno zásadní omezení. Velikost částic by měla být výrazně menší, než je velikost nejmenší buňky výpočetní sítě. Pokud by naopak byla velikost částic srovnatelná s velikostí buněk, nebo větší, nelze klasický DPM vůbec použít a bylo by třeba model výrazně upravit. Například pro sledování velkých bublin v kádi se obvykle používají metody pro rozvrstvená proudění. Komplikace vznikají, pokud roste počet sledovaných částic.

Algoritmus totiž musí nejen uchovávat informace o jejich poloze a kinematice, což zaplňuje výpočetní paměť, ale musí i numericky řešit jejich pohyb, což stojí další výpočetní čas. S větším počtem částic navíc roste i pravděpodobnost jejich vzájemných srážek. Pokud bychom tedy chtěli modelovat děj precizně, je nezbytné doplnit kód o kolizní algoritmus. Celková výpočetní efektivita DPM metody tedy se vzrůstajícím počtem částic klesá.

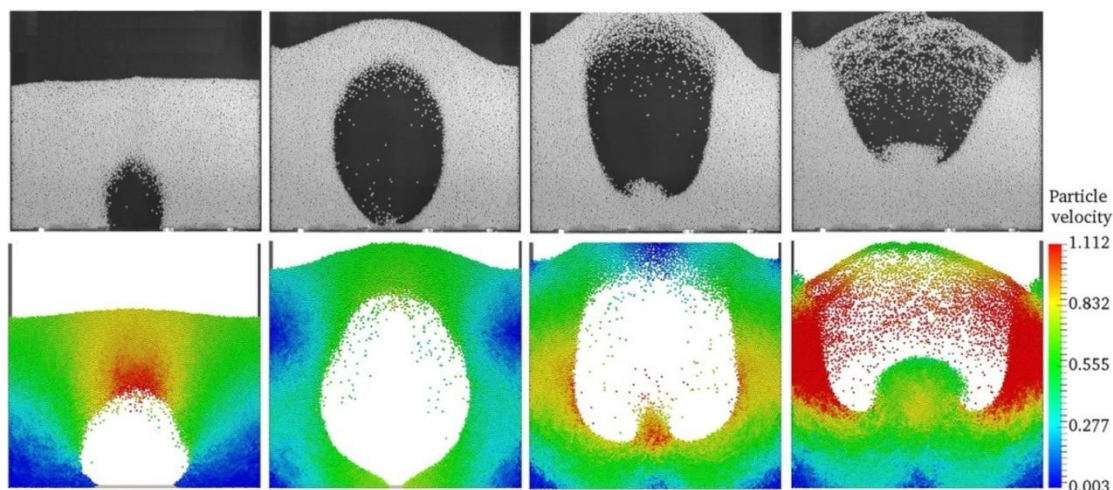
V jednoduchém případě je pohyb rozptýlených částic přímo ovlivňován hydrodynamickou silou od nosné tekutiny, která je zahrnuta do DPM modelu prostřednictvím zdrojového členu. Používá se například známý Newtonův vzorec pro odporovou sílu působící na částici (2.2), opačná síla potom působí i na nosnou tekutinu. Ve složitějších případech bývají přidávány další zdrojové členy. Pro shluk částic lze zavést tzv. bariérovou funkci, která koriguje zdrojové členy pro sestavu částic. V řadě komplexních praktických aplikací jsou sledovány polohy milionů částic. Jejich pohyb a interakce s nosnou tekutinou potom již nelze řešeny jednotlivě, ale je nezbytné použít zjednodušené varianty DPM využívající statistických metod.

Dříve používané vztahy pro mezifázové silové působení, často s velmi omezeným rozsahem platnosti, mívaly empirický základ a jejich odvozením se zabývalo mnoho významných výzkumníků. Při obtékání jednotlivých částic vznikají složité struktury, což reflektují sofistikované modely interakce. V současné době jsou tyto modely rozšířeny i pro nekulové tvary částic. Podle míry interakce mezi částicemi rozptýlené fáze a nosnou fází rozdělujeme dvoufázové systémy s diskrétními částicemi:

- **Jednosměrně sdružené systémy („one-way coupling“):** tekutina ovlivňuje pohyb částic, avšak pohyb samotné tekutiny není částicemi ovlivňován. Takový model interakce lze použít, pokud je hmotnost částic zanedbatelná, jejich četnost velmi malá, nebo mají podobnou hybnost jako nosná fáze. Poznamenejme, že zde není zachována celková hybnost dvoufázového systému.
- **Obousměrně sdružené systémy („two-way coupling“):** nosná tekutina i částice vzájemně ovlivňují svůj pohyb. Obousměrná interakce bývá používána při proudění s většími a hmotnějšími částicemi.
- **Čtyřsměrně sdružené systémy („four-way coupling“):** zahrnují obousměrnou interakci částic a nosné tekutiny navíc doplněnou o vzájemnou interakci částic a jejich kolize. Komplexní model interakcí je nutné použít při větším objemovém podílu rozptýlené fáze, například při simulacích fluidizace, či sedimentace.

Pro vzájemné působení částic jsou používány dva hlavní typy modelů. Nepružný model („hard sphere model“) prezentovaný Campbellem a Brennenem, [16], či Hoomansem a kol., [59]. Nepružný model předpokládá okamžité srážky pouze dvou částic (binární srážky), při kterých dojde k výměně hybnosti. Druhým typem je pružný model („soft sphere model“), prezentovaný Cundallem a Strackem, [20], ve kterém je kontakt podrobně modelován pomocí soustav pružin a tlumičů. Pružný model umožňuje vícenásobné kontakty, avšak vyžaduje podrobné modelování deformací v čase, což prodlužuje výpočet. Řešení fluidního lože pomocí DPM se čtyřsměrným sdružením a aplikací pružného modelu srážek částic ukazuje obr. 9.

Pohybová rovnice částic, ve tvaru obyčejné diferenciální rovnice, bývá řešena integrací. Lze využít různá schémata dle požadavků na přesnost a stabilitu. Na různé způsoby numerického řešení pohybových rovnic částic se zaměřili například Lain a Goz, [72], kteří ukázali, že způsob integrace a formulace odporového mezifázového členu silně ovlivňuje řešení a může vést i k umělým numerickým oscilacím a nestabilitám. Rozšířením je práce [43], kde bylo ukázáno, jak volba časového kroku integrace ovlivňuje přesnost a stabilitu výpočtu.



Obr. 9: Časový vývoj pohybu bubliny fluidním ložem tvořeným částicemi, převzato z [76]. Nahoře jsou foto z experimentu, dole jsou výsledky simulace při použití DPM se čtyřsměrným sdružením.

Nejvíce současných kódů využívá bodovou formulaci částic, kde každá částice je nositelem hmoty, hybnosti a energie. Pro korektní výpočet interakčních sil mezi částicemi a nosnou tekutinou je nezbytné určit hodnoty proudových veličin. Proto je nezbytné přiřadit polohu částice do konkrétní buňky výpočetní sítě a naopak. Namapování měnících se poloh částic na výpočetní síť pro numerické řešení nosné fáze je skutečnou výzvou z hlediska efektivity algoritmizace.

Velmi výhodné může být propojení DPM s klasickými eulerovskými dvoufázovými modely s cílem kombinovat výhody a potlačit nedostatky obou z nich, například pro dosažení přesných trajektorií částic a redukcí výpočetní náročnosti. Zjednodušeně lze říci, že EM dominuje pro kontinuum, nahromadění částicové fáze, či komplexní kolize. DPM je naopak vhodnější pro simulace pohybu jednotlivých částic, či při potřebě zachycení efektů spojených s rotací částic, více lze najít například v práci Schellandera a kol. [114].

Dodejme, že při turbulenci lze modelovat i ovlivňování pohybu částic fluktuací složkou turbulentního proudění. K tomuto účelu se používá například „*random walk model*“, který bývá používán pro simulace náhodných jevů v mnoha rozličných oblastech. Některé proudové režimy v kombinaci s velikostí částic turbulenci spíše tlumí, jiné naopak zesilují.

Kapitola 2

Základní principy modelování dvoufázového proudění

Věrné simulace obecného proudění dvou fází vyžadují komplexní matematické modely. Je to dané pestrostí dějů. Základní tvary dvoufázových modelů bývají nejčastěji rozšiřovány například o členy popisující vlivy povrchového napětí, mezifázové výměny hmoty nebo turbulence. Při numerických simulacích dvoufázového proudění se bohužel objevují různé nestability neznámé z výpočtů jednofázového proudění a další úskalí, některá přitom stále nejsou probádána. Před numerickou simulací složité úlohy je třeba zkoumat matematické vlastnosti použitých modelů, výpočtové modely důkladně prověřit na jednodušších testovacích úlohách a dosažené výsledky rovněž v ideálním případě porovnat s experimentálně změřenými daty.

Pro nás, běžné pozorovatele, či uživatele, skýtá proudění dvou fází mnoho zajímavých jevů, které bývají často a účinně využívány nejen v mnoha průmyslových odvětvích. Například odstředivé oddělení těžší fáze využívají různé odstředivky v pivovarnictví, mlékárnách nebo čističkách odpadních vod. Stejným jevem z opačného pohledu je hromadění lehčí fáze ve středu rotace, které využívají například centrifugy na obohacování uranu, ale dobře jej znají i pijáci turecké kávy pozorující bubliny na hladině. Odstředivé oddělování fází s různou hustotou je rovněž hlavní fyzikální podstatou efektivních olejových separátorů. Problematika numerických simulací dvoufázového proudění v těchto separátorech je popsána ve čtvrté kapitole této disertační práce.

Bez povrchového napětí by se neformovaly kapky vody tak, jak je známe. Tvorbu kapek rovněž využívají různé atomizéry a spreje. Povrchové napětí na vodní hladině využívají i různé živočichové, jako například vodoměrka štíhlá. S povrchovým napětím těsně souvisí i pojmy smáčivost, či vodoodpudivost. Víme, že voda nesmáčí mastné povrchy. Proto při mytí, či praní přidáváme různé prostředky a mýdla, které zmenšují povrchové napětí vody a zlepšují smáčení špinavých povrchů vodou, čímž usnadňují čištění. Díky různým přípravkům, či moderním nanotechnologiím se zlepšuje vodoodpudivost oblečení, či skel automobilů.

Pokud bychom se zaměřili na oblast s mezifázovou výměnou, var vody v nádobách je nám dobře známý z kuchyní. Velmi působivé bývají tance kapek na rozpáleném povrchu (tzv. Leidenfrostův efekt). Mezi kapku a horký povrch se odpaří tenká vrstva páry, na které kapka levituje. Tato vrstva oddělí tekutinu od horkého povrchu, čímž se zpomalí její var. Divoký pohyb levitující kapky je pak nejčastěji důsledkem drobných nečistot a poruch na rozpáleném povrchu. Naopak většina z nás nemá osobní zkušenost s jevem zvaným kavitace. Jde vlastně také o var kapaliny, avšak ne vlivem zvýšení teploty, ale z důvodu kritického poklesu tlaku většinou vlivem dynamiky proudění. Kavitační vznik bublin a jejich následný zánik je proces velmi rychlý, až explozivní, bývá zdrojem vibrací a často silně opotřebovává přilehlé povrchy. Proto je třeba vznik kavitace potlačovat především při návrhu potrubních systémů pro rychlá proudění, či rychloběžných lodních šroubů. Pro zajímavost dodejme, že kavitace je velkým demaskujícím činitelem při pasivní akustické detekci ponorek. Naopak využití má kavitační eroze při obrábění kapalinovým paprskem, kdy vznikající kavitační rázy zvyšují obráběcí účinky. Toto je pouze malý výřez pestrých jevů objevujících se při dvoufázovém proudění, jejich ucelenější přehled i s matematicko – fyzikálním popisem lze najít například v Brennenově [12], či Hanrattyho [51] knihách.

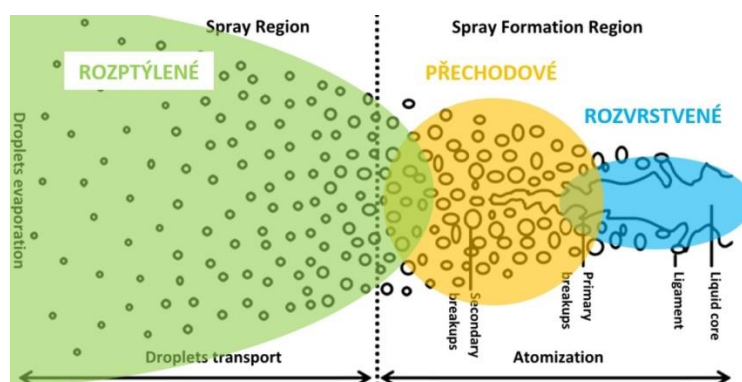
Tato práce se však nebude širokou problematikou modelování dalších jevů zabývat, jak již bylo řečeno v první kapitole. Omezuje se pouze na základní tvary modelů pro popis nevazkého dvoufázového proudění, kde neprobíhá míchání, či hmotnostní výměna mezi fázemi. Vzájemná

působení se omezují výhradně na jednoduchou silovou interakci fází. Tím je pomínuto množství přídatných modelů, které často vyžadují interdisciplinární znalosti. Pochopitelně nemohou být po takovýchto razantních zjednodušeních korektně simulovány skutečné přírodní jevy. I tyto jednoduché modely pro proudění dvou fází však skrývají určitá úskalí, která se mnohdy nepříjemně projevují při jejich numerickém řešení. Stále totiž uvažujeme dvě fáze, které vzájemně odděluje pohybující se rozhraní obecného tvaru. Rozhraní je velmi tenké (řádově v délkách molekul) a napříč se skokově mění fyzikální vlastnosti tekutin. Řešené rovnice mohou navíc být v nekonzervativním tvaru a výsledný systém rovnic nehyperbolický. Proto je důležité se zabývat i řešením těchto jednoduchých modelů. Ve většině případů se navíc jedná o nejhorší možnou úlohu z pohledu numerického řešení. Dobře navržené přídatné členy a konstitutivní vztahy totiž spíše zlepšují celkové chování a jejich implementace obvykle nevyžaduje zásadní překonstruování řešiče. Už pouhé zavedení vazkosti se obvykle projevuje tlumením drobných numerických oscilací.

Existuje i řada členů, které se do systému rovnic přidávají uměle právě pro dosažení hyperbolicity modelu, či zlepšení stability numerických metod. Konkrétně například do dvoutekutinových modelů, které bývají špatně podmíněny, se přidávají členy umělé vazkosti, které tlumí drobné numerické oscilace a zabraňují tak divergenci řešení následkem jejich kumulace, více lze najít například v pracích Bonzaniniové a kol. [10], Holmáse a kol. [58]. Kolev v knize [71] napsal: „*Nehyperbolické modely nemohou správně popisovat problémy proudění.*“ Ukazuje se však, že ztráta hyperbolicity dvoufázových modelů může souviset s přechodem do jiného proudového režimu (o režimech je pojednáno v následujícím odstavci 2.1), a tedy souvisí i s fyzickou destabilizací proudu a změnou struktury proudění, viz [67]. Přechodu mezi proudovými režimy se v mnoha praktických aplikacích nelze vyhnout, proto je nezbytné zvládnout numerické řešení modelů i za takovýchto kritických situací [24], například pomocí vhodných regularizačních technik odstraňujících problém ztráty hyperbolicity modelu nebo pomocí členů tlumících numerické oscilace. Skutečná fyzikální podstata umělých přídatných členů pro numerickou stabilizaci řešení, či regularizaci modelu je často diskutabilní, jejich význam bývá předmětem zkoumání a patrně souvisí s mikroskopickými jevy, nebo jevy jejichž vliv byl při odvozování rovnic opominut.

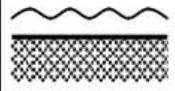
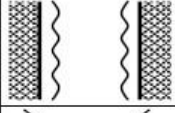
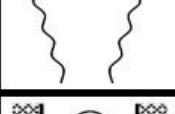
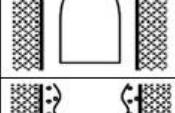
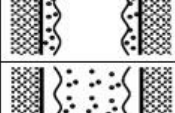
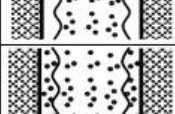
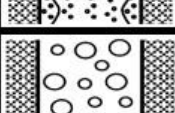
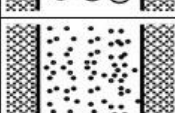
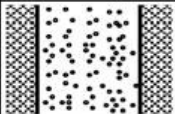
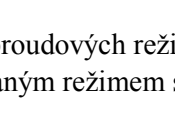
2.1 Proudové režimy

Při sledování dvoufázového proudění lze pozorovat určité makroskopické odlišnosti struktur. Nejjednodušeji lze rozdělit dvoufázová proudění podle celkového charakteristického tvaru rozhraní na rozvrstvená („*separated*“), přechodová („*transitional*“) a rozptýlená („*dispersed*“). Příklady jsou schematicky ukázány na obr. 10. Uvedené rozdělení v podstatě sledují i specializace dvoufázových modelů, které popisoval odstavec 1.2.



Obr. 10: Schematické znázornění typické sprejové atomizace (zprava doleva), upraveno z [44].
S vyznačenými oblastmi typu proudění podle tvaru rozhraní.

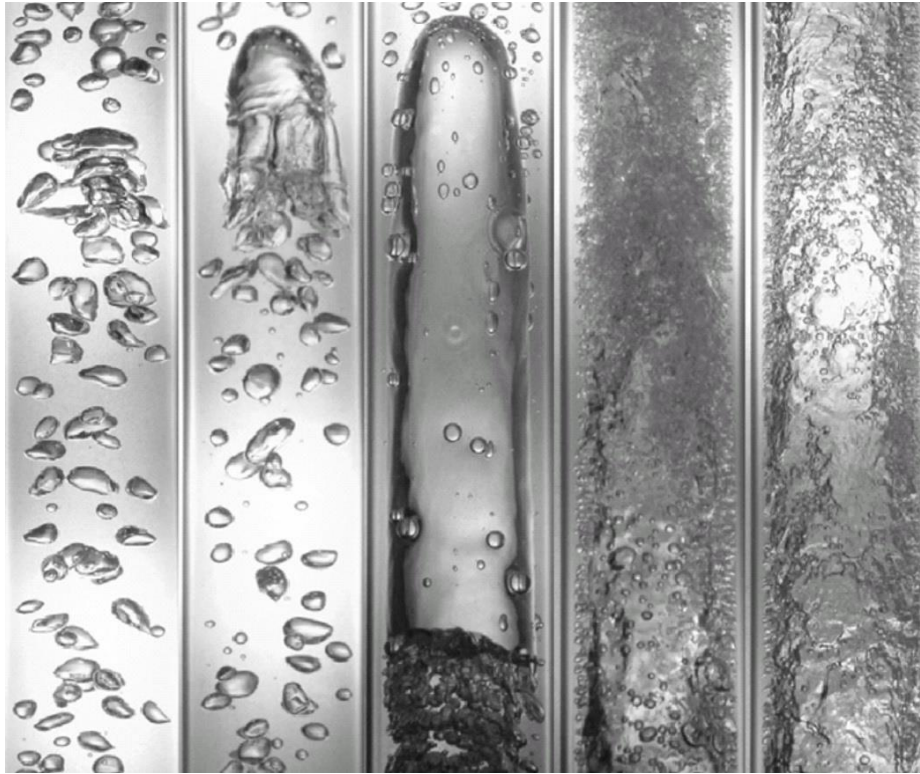
V jednofázovém proudění je známá problematika přechodu od laminárního proudění přes přechodové k turbulentnímu. U proudění dvou fází existují také přechody, a to mezi tzv. proudovými režimy („*flow regimes*“, „*flow patterns*“). Názvy režimů jsou v textu pro jednoduchost převzaty z anglické literatury, protože se jejich české ekvivalenty bohužel nepodařilo najít. (Případné puristické snahy by bylo vhodné ponechat raději na experimentátorech zabývajících se dvofázovým prouděním. Doslovný překlad by mohl být někdy spíš úsměvný.) Na obr. 11 je uveden přehled některých často se vyskytujících proudových režimů, jak jej sestavil jeden z průkopníků studia dvofázového proudění Ishii v knize [65].

třída	režim	náčrt	struktura	příklad
rozvrstvená proudění	film flow		tekutá vrstva v plynu plynná vrstva v tekutině	kondenzace var
	annular flow		plynné jádro v tekutém obalu tekuté jádro v plynném obalu	kondenzace v trubce var v trubce
	jet flow		proud plynu do tekutiny výtrysk tekutiny do plynu	proudový kondenzátor atomizér
přechodová proudění	cap, slug, churn turbulent flow		plynná kapsa v tekutině	nestacionární proudění v potrubí
	bubbly annular flow		bublíny v tekutém obalu obklopující plynné jádro	odpařovače
	droplet annular flow		kapky v plynném jádru, které obklopuje tekutý obal	parogenerátory
	bubbly droplet annular flow		kapky v plynném jádru, tekutý obal s bublinkami	kanálky varného jaderného reaktoru
rozptýlená proudění	bubbly flow		bublíny v tekutině	chemické reaktory
	droplet flow		kapky v plynu	děšť
	particulate flow		částice v plynu, nebo tekutině	fluidní transport

Obr. 11: Přehled nejdůležitějších proudových režimů doplněný o schematický náčrt, popis a příklady, kde se v praxi s daným režimem setkáváme. Upraveno z knihy [66].

Konkrétní stav proudění, či proudový režim je silně závislý na vnějších podmínkách, především na: celkové geometrii oblasti, objemových podílech fází, rychlostech a průtocích. V závislosti na hodnotách těchto veličin se potom experimentálně sestavují tzv. mapy proudových režimů. Asi nejlépe jsou prozkoumány proudové režimy v potrubních systémech, příkladem jsou fotografie na obr. 12. Z experimentů vyplývá, že i malá změna parametrů může změnit proudový režim. Stav

proudění ovlivňuje jeho makroskopické chování, má například velký vliv na tlakovou ztrátu, či rozvoj turbulence. Správný výpočet tlakového pole je velmi důležitý při numerických simulacích zahrnujících var či kondenzaci, chybný výsledek by mohl mít především v případě jaderných elektráren i fatální následky. Snahou výzkumníků je stanovit jasná kritéria přechodu mezi jednotlivými režimy formulovaná nejlépe jednoduchými algebraickými vztahy. Někdy jsou však přechody mezi režimy pozvolné a neostře, obdobně jako při přechodu jednofázového laminárního proudění do proudění turbulentního.

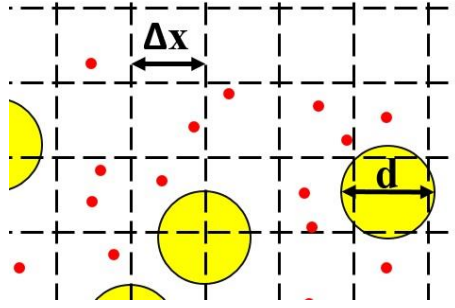


Obr. 12: Proudové režimy zachycené ve vertikální trubici o průměru 25,4 mm. Zleva: „bubbly flow“, „cap-bubbly flow“, „slug flow“, „churn-turbulent flow“ a „annular flow“. Zdroj [66].

Dvoufázová proudění tedy lze rozdělovat nejen podle skupenství fází, ale i podle struktury, což poprvé prosazovali na přelomu 60. a 70. let Wallis a Ishii. Členění proudění podle struktury je pro numerické modelování asi nejdůležitější. Například pro efektivní simulace rozptýlených malých bublin ve vodě se hodí zcela odlišný model, než pro simulace vln na vodní hladině, ačkoliv se jedná o dvoufázové proudění voda – vzduch. Naopak dělení podle skupenství je při volbě modelu spíše podružné. Pro numerické simulace pomalého proudění jednotlivých nedeformovatelných kapek v nosném plynu lze použít stejný model jako pro proudění pevných částic v nosné kapalině.

Při řešení úloh dvoufázového proudění s využitím vhodného modelu bývají používány pro různé proudové režimy odlišné empirické konstitutivní vztahy uzpůsobené pro konkrétní proudový režim. V komplexních úlohách se někdy vyskytuje v oblasti více různých režimů, což vyžaduje použití různých konstitutivních vztahů v částech výpočtové oblasti a komplikuje numerické modelování.

Pro kvalitativní rozlišení dvoufázového proudění zavedeme charakteristická délková měřítka zvyrazněná na obr. 13: \mathcal{L} – velikost celé oblasti, d – charakteristická velikost rozhraní (např. rozměr vln na vodní hladině u rozvrstvených proudění, či rozměr prachových částic ve větru u rozptýlených proudění) a Δx – typický rozměr elementárního objemu, resp. buňky výpočetní sítě.



Obr. 13: Zavedení charakteristických rozměrů: d průměr částic, Δx velikost buňky výpočetní sítě. Obrázek ilustruje trojfázové proudění částic dvou velikostí (žluté a červené kruhy) v tekutině (bílá výplň).

Rozměr úlohy je pochopitelně největší. Pokud by rozhraní mělo větší rozměr ($\mathcal{L} \ll d$), sledovali bychom pravděpodobně podoblast s jednou fází. Pokud je tvar rozhraní kompaktní a tekutiny zřetelně oddělené, hovoříme o proudění rozvrstveném, příklad je ukázán na obr. 1. Rozhraní bývá dobře patrné i z makroskopického pohledu, pro délková měřítka platí relace $\mathcal{L} > d$. S tím jak se zmenšuje charakteristický rozměr rozhraní $\mathcal{L} \gg d$ dochází obvykle k jeho rozpadání, formují se nové útvary, tvoří se kapky a bubliny. Přesný tvar rozhraní není z makroskopického pohledu jasně patrný, proudění není zcela rozvrstvené, ani čistě rozptýlené, ale tzv. přechodové. O rozptýleném proudění hovoříme, pokud jej tvoří jednotlivé částice. V praktických aplikacích se vyskytuje převážně v relaci délek $\mathcal{L} \gg d$. Poznamenejme, že formování velkých částic tekutiny je obtížné, protože vyžaduje velké povrchové napětí a pomalé proudění.

2.2 Mezifázové silové působení

Jak bylo řečeno dříve, na rozhraní fází, jehož tloušťka je mikroskopická (uvádí se $\sim 10^{-10}$ m), přecházíme z jedné fáze do druhé, přitom se skokově mění fyzikální vlastnosti látek. Na rozhraní se modelují silová působení tlaku, tření, povrchového napětí aj. Vliv jednotlivých členů bývá různý, proto některé bývají zanedbávány. Pohybové rovnice separované *tekutiny* e ve 2D lze vyjádřit například ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_e u_e + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_e u_e^2 + p) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho_e u_e v_e) = \rho_e f_x^V - \left(\frac{\partial (\tau_{xx})_e}{\partial x} + \frac{\partial (\tau_{xy})_e}{\partial y} \right) + \Sigma_{e_x}^S, \quad (2.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_e v_e + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_e u_e v_e) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho_e v_e^2 + p) = \rho_e f_y^V - \left(\frac{\partial (\tau_{yx})_e}{\partial x} + \frac{\partial (\tau_{yy})_e}{\partial y} \right) + \Sigma_{e_y}^S, \quad (2.1b)$$

kde ρ je hustota tekutiny, u a v kartézské složky vektoru rychlosti tekutiny a p tlak. Na pravé straně pohybových rovnic (2.1) jsou modelovány:

- Vliv objemových sil, kde vektor \mathbf{f}^V má význam zrychlení. Například při uvažování tíhové síly by bylo zavedeno $\mathbf{f}^V = [f_x^V, f_y^V]^T = [0, -g]^T$, kde g značí velikost tíhového zrychlení.
- Vliv třecích sil, kde $\tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{yx}, \tau_{yy}$ jsou složky symetrického tenzoru vazkých napětí.
- Vliv povrchových sil, kde $\Sigma_x^S = [\Sigma_x^S, \Sigma_y^S]^T$ představuje vektor povrchových sil na jednotku plochy, který se uplatňuje pouze na rozhraní tekutin. Velikost povrchové síly je přímo úměrná povrchovému napětí a křivosti rozhraní k . Více podrobností o modelování povrchového napětí lze nalézt například v [104], [127], [128].

Při modelování rozptýleného proudění s částicemi (označíme indexem p – „particle“) obtékanými nosnou primární tekutinou (index f – „fluid“) lze členy vyjadřující jednotlivé interakce nahradit jinými empirickými členy, které potom v sobě spojují silové účinky různých vlivů. Nejznámějším takovým modelem je zahrnutí odporové síly \mathbf{F}_D („drag force“) pomocí vztahu

odvozeného ze známého Newtonova vzorce

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{2} C_D \rho_f S_p |\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p| (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p), \quad (2.2)$$

kde C_D je tvarový součinitel odporu, ρ_f je hustota tekutiny, S_p efektivní průřez částice, $\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p$ rozdíl rychlostí proudění tekutiny a částice. Vyjádření odporové síly (2.2) platí pro účinek na částici. Pro zachování hybnosti celého systému, je potom nezbytné zavést stejně velký, opačně orientovaný účinek působící na nosnou tekutinu. Dynamiku pohybu částice stálé hmotnosti m_p popisuje druhý Newtonův pohybový zákon

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_D. \quad (2.3)$$

Z analýzy jeho důsledků vyplývá mnoho zajímavých poznatků o dynamice fází, včetně výše popisovaného odstředivého oddělování fází různých hmotností.

Pro obtékané částice se zavádí tzv. Reynoldsovo číslo částice, které charakterizuje proudění v jejím okolí a je definované vztahem

$$\text{Re}_p = \frac{\rho_f |\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p| d_p}{\eta_f}, \quad (2.4)$$

kde d_p je charakteristický rozměr částice a η_f dynamická viskozita tekutiny. Dosazením vztahu (2.2) do pohybové rovnice (2.3) a vyjádřením průřezu S_p pomocí průměru d_p , hustoty ρ_p a hmotnosti částice m_p obdržíme pro kulovou částici

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{3}{4} \frac{m_p C_D \rho_f}{d_p \rho_p} |\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p| (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p). \quad (2.5)$$

Po vydělení hmotností částice a zavedení Reynoldsova čísla částice (2.4) lze rovnost přeformulovat do tvaru

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{18 \eta_f}{d_p^2 \rho_p} \frac{C_D \text{Re}_p}{24} (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p), \quad (2.6)$$

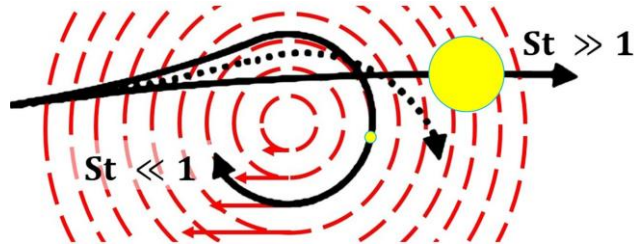
kde druhý zlomek představuje tzv. odporovou funkci f_D („*drag function*“). Součinitel odporu C_D („*drag coefficient*“) bývá modelován pomocí různých vztahů, které často závisejí na Reynoldsově čísle částice Re_p , nebo na proudovém režimu. První zlomek v rovnici (2.6) má rozměr $[\text{s}^{-1}]$ a definuje tzv. relaxační čas rychlosti částice

$$\tau_p = \frac{d_p^2 \rho_p}{18 \eta_f}. \quad (2.7)$$

Relaxační čas je mírou odezvy částice na změnu proudění tekuté fáze. Malé a lehké částice mají malý relaxační čas. Odporová síla způsobená tekutinou při obtékání u nich převládá nad vlastní setrvačností, což se projeví tím, že jednotlivé částice dobře kopírují proud nosné tekutiny. Těžké částice naopak mají velký relaxační čas, vlastní setrvačnost u nich dominuje a jsou relativně málo ovlivňovány odporovými silami. Svůj pohyb mění vlivem interakce s nosnou tekutinou pouze zvolna. Uvedený rozbor lze ilustrovat následujícím obr. 14 a kvantifikovat pomocí bezrozměrového Stokesova čísla

$$\text{St} = \frac{\tau_p}{\tau_f}, \quad (2.8)$$

kde $\tau_f = L/u_f^0$ je charakteristický čas nosné fáze, definovaný jako podíl typického rozměru proudění (např. velikost obtékané překážky) a velikosti rychlosti nabíhajícího proudu při obtékání částice.



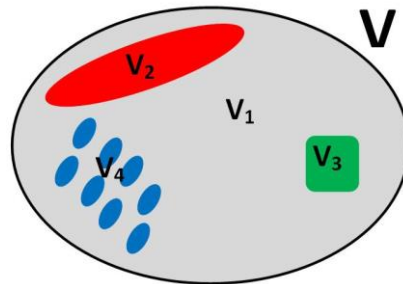
Obr. 14: Vliv Stokesova čísla, resp. relaxačního času různých částic při průletu vírovou strukturou.

Stokesovo číslo je tedy poměr času odezvy částice a proudu. Pokud je $St \ll 1$ částice dobře sleduje proud, naopak při velkém St proudění ovlivňuje pohyb částice minimálně. V případě $St = 0$ částice zcela kopíruje pohyb tekutiny. Takový stav, kdy se obě fáze pohybují společně, označujeme jako mechanickou rovnováhu fází a předpokládají jej například homogenní eulerovské modely.

Kromě uvedených podobnostních čísel Re_p a St se v teorii dvoufázového proudění zavádí řada dalších podobnostních čísel. Vztahují se například ke vztlaku, povrchovému napětí, kapilaritě, výměně hmoty, tření, tvaru kapek, či tepelné výměně. Více lze najít například v [4] nebo v Brennenově knize [12].

2.3 Objemové podíly fází

Koncept objemových podílů byl zaveden již v odstavci 1.2.2, v tomto odstavci bude myšlenka dále rozvinuta. Uvažujme kontrolní objem o objemu V vyplněný tekutinou obecně o n fázích. Objem příslušející e -té fázi označíme V_e . Příklad situace pro čtyři fáze ukazuje obr. 15.



Obr. 15: Kontrolní objem V zcela vyplněný čtyřmi fázemi (šedá, červená, zelená a modrá barva) o objemech V_e .

Dílčí objemy fází se navzájem nepřekrývají a současně sjednocení všech dílčích objemů tvoří celý kontrolní objem, tedy

$$\sum_{i=1}^n V_e = V. \quad (2.9)$$

Definujeme objemový podíl e -té fáze v kontrolním objemu jako

$$\alpha_e = \frac{V_e}{V}, \quad (2.10)$$

tedy relativní část objemu vyplněnou e -tou fází. Protože součet objemových podílů vyplňuje celý prostor, musí pro ně platit tzv. rovnice pro objemové podíly

$$\sum_{e=1}^n \alpha_e = 1, \quad (2.11)$$

což se dá dokázat dosazením definičního vztahu (2.10) do rovnosti (2.9)

$$\sum_{e=1}^n V_e = \sum_{e=1}^n \alpha_e V = V (\sum_{e=1}^n \alpha_e) = V, \quad (2.12)$$

kde po vykrácení rovnice velikostí kontrolního objemu V obdržíme rovnost (2.11). Rovnice (2.9) a (2.11) lze přeformulovat do tvaru

$$V_1 = V - \sum_{e=2}^n V_e, \quad (2.13a)$$

$$\alpha_1 = 1 - \sum_{e=2}^n \alpha_e, \quad (2.13b)$$

což je často využívaným důsledkem teorie disjunktních objemů vyplňující celý kontrolní objem. Pro výpočet objemových podílů, resp. objemů všech n fází postačuje určit objemový podíl, resp. objem $n - 1$ fází, čehož využívají některé modely a metody numerického řešení.

Rovnice pro objemové podíly (2.11) je součástí fyzikální podstaty dvoufázových problémů. S ní, nebo jejími důsledky se setkáváme u většiny dvoufázových modelů. Například dvoutekutinové modely ji využívají jako jeden z konstitutivních vztahů, které uzavírají systém rovnic. Obvykle bývají řešeny dva typy algoritmů:

- Do jedné části modelů je zahrnuta přímo rovnost pro objemové podíly (2.11) jako konstitutivní vztah. Příkladem může být šestirovnicový dvoutekutinový model odvozený v následujícím odstavci 2.4 a řešený v odstavci 3.2.
- U druhé části modelů je rovnost pro objemové podíly vynucena až dodatečně. Sedmirovnicové dvoutekutinové modely a jejich deriváty mohou určovat objemový podíl jedné fáze z přidružené advekční rovnice. Objemový podíl další fáze lze potom dopočítat pomocí vztahu (2.13b).

Pro dvoufázové proudění ($n = 2$) se problém zřejmě redukuje pouze na první a druhou fázi a platí výše uvedené rovnice v konkrétních tvarech (1.2), (1.1), (1.3) a

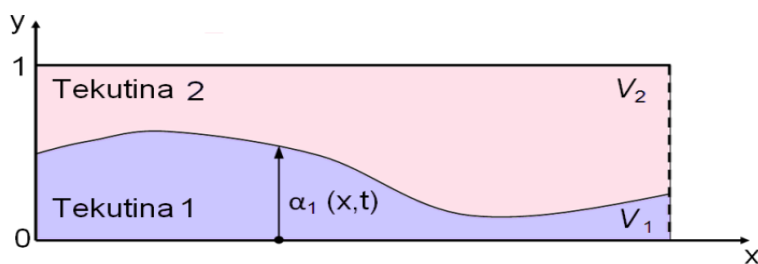
$$\alpha_1 = 1 - \alpha_2. \quad (2.14)$$

Poznamenejme, že obdobně lze zavést i hmotnostní podíl fází β_e , viz (2.55), a odvodit obdobné vztahy. Tato veličina je užívána především při odvozování některých fyzikálních vlastností směsí. Poznamenejme, že vzhledem k různým hustotám fází obecně neplatí $\alpha_e = \beta_e$.

2.4 Odvození dvoutekutinového modelu

Pro numerické simulace rozvrstvených proudění v relaci měřítek $\mathcal{L} > d > \Delta x$, kde d je charakteristická velikost rozhraní, stejně tak jako pro rozptýlená proudění částic $\mathcal{L} > \Delta x \gg d_p$, kde d_p je průměr částic, se obvykle používají efektivní specializované metody. Při řešení ostatních úloh se nejčastěji užívají elerovské dvoufázové modely založené na myšlence současného výskytu nemísitelných fází v kontrolních objemech. Z důvodu jednoduchosti se zaměříme v tomto odstavci na odvození eulerovského dvoutekutinového modelu (TFM), který uvažuje proudění **dvou stlačitelných nevazkých tekutých fází**. Systém rovnic popisující dvoufázové proudění bývá v literatuře odvozován průměrovacím procesem na kontrolním objemu. Podrobná odvození lze najít například v [12], [71], [105], [65] nebo [25].

Matematicky lze použít různé průměrovací techniky. V této práci bude použito objemové průměrování pro odvození dvoutekutinových rovnic v 1D. Zavedeme myšlený kontrolní objem, ve kterém se současně vyskytují dvě fáze, které se nemísí a neprobíhá mezi nimi výměna hmoty. Pro jednoduchost matematického odvození budeme uvažovat obě fáze plně separované, jako na obr. 16, což nemá vliv na obecnost. Lokální objemový podíl primární fáze je charakterizován funkcí $\alpha_1(x, t)$ a objemový podíl sekundární fáze lze dopočítat použitím vztahu (2.14). Tento postup je zpracován například v práci Stewarta a Wendroffa [120]. U TFM se používá označení a indexování: 1 (primární) / 2 (sekundární), nebo l („liquid“ – kapalina) / g („gas“ – plyn).



Obr. 16: Dvě plně separované tekutiny v kontrolním objemu.

Při odvozování rovnice kontinuity integrujeme její známý tvar pro jednofázovou stlačitelnou tekutinu

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (2.15)$$

pro obě obecně tekuté fáze, tj. pro *tekutinu 1* podél $y \in \langle 0; \alpha_1(x,t) \rangle$ a pro *tekutinu 2* podél $y \in \langle \alpha_1(x,t); 1 \rangle$. Je použit klasický zápis, kde x, y odpovídají prostorovým souřadnicím a u, v složkám vektoru rychlosti v příslušných směrech, ρ značí hustotu a t je čas.

Aplikujeme následující integrační pravidla:

$$\int_{a(x,t)}^{b(x,t)} \frac{\partial f(x,y,t)}{\partial t} dy = \frac{\partial}{\partial t} \int_{a(x,t)}^{b(x,t)} f(x,y,t) dy - f(x,b,t) \frac{\partial b(x,t)}{\partial t} + f(x,a,t) \frac{\partial a(x,t)}{\partial t}, \quad (2.16a)$$

$$\int_{a(x,t)}^{b(x,t)} \frac{\partial f(x,y,t)}{\partial x} dy = \frac{\partial}{\partial x} \int_{a(x,t)}^{b(x,t)} f(x,y,t) dy - f(x,b,t) \frac{\partial b(x,t)}{\partial x} + f(x,a,t) \frac{\partial a(x,t)}{\partial x}, \quad (2.16b)$$

$$\int_{a(x,t)}^{b(x,t)} \frac{\partial f(x,y,t)}{\partial y} dy = f(x,b,t) - f(x,a,t). \quad (2.16c)$$

Rovnici kontinuity (2.15) tedy integrujeme pro *tekutinu 1* podél y

$$\int_0^{\alpha_1(x,t)} \left\{ \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial x} + \frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial y} \right\} dy = 0 \quad (2.17)$$

s použitím výše uvedených integračních pravidel (2.16) dostaneme

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \rho_1(x,y,t) dy - \rho_1(x,\alpha_1,t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t} + \rho_1(x,0,t) \frac{\partial 0}{\partial t} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{ \rho_1 u_1 \}(x,y,t) dy - \{ \rho_1 u_1 \}(x,\alpha_1,t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} + \{ \rho_1 u_1 \}(x,0,t) \frac{\partial 0}{\partial x} + \\ & + \{ \rho_1 v_1 \}(x,\alpha_1,t) - \{ \rho_1 v_1 \}(x,0,t) = 0. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Obdobně integrujeme rovnici kontinuity (2.15) pro *tekutinu 2* podél y

$$\int_{\alpha_1(x,t)}^1 \left\{ \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial x} + \frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial y} \right\} dy = 0 \quad (2.19)$$

s použitím integračních pravidel (2.16)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \rho_2(x,y,t) dy - \rho_2(x,1,t) \frac{\partial 1}{\partial t} + \rho_2(x,\alpha_1,t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{ \rho_2 u_2 \}(x,y,t) dy - \{ \rho_2 u_2 \}(x,1,t) \frac{\partial 1}{\partial x} + \{ \rho_2 u_2 \}(x,\alpha_1,t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} + \\ & + \{ \rho_2 v_2 \}(x,1,t) - \{ \rho_2 v_2 \}(x,\alpha_1,t) = 0. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Pro nevazké tekutiny platí na pevných nepropustných stěnách kanálu okrajové podmínky

$$v_1(x,0,t) = 0, \quad (2.21a)$$

$$v_2(x,1,t) = 0. \quad (2.21b)$$

Na rozhraní plně separovaných tekutin platí transportní rovnice pro lokální objemový podíl α_1

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_1(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = v_1(x, \alpha_1, t), \quad (2.22a)$$

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_2(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = v_2(x, \alpha_1, t). \quad (2.22b)$$

Vraťme se nyní k rovnici (2.18)

$$\begin{aligned} & \left. \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \rho_1(x, y, t) dy \right|^1 - \rho_1(x, \alpha_1, t) \left. \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t} \right|^2 + \rho_1(x, 0, t) \left. \frac{\partial 0}{\partial t} \right|^3 + \\ & + \left. \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 u_1\}(x, y, t) dy \right|^4 - \{\rho_1 u_1\}(x, \alpha_1, t) \left. \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} \right|^5 + \{\rho_1 u_1\}(x, 0, t) \left. \frac{\partial 0}{\partial x} \right|^6 + \\ & + \{\rho_1 v_1\}(x, \alpha_1, t) |^7 - \{\rho_1 v_1\}(x, 0, t) |^8 = 0, \end{aligned} \quad (2.18)$$

ve které jsou třetí a šestý člen nulové, osmý člen je nulový při respektování podmínky na nepropustné stěně (2.21a) a druhý, pátý a sedmý člen se také vynulují, jak je patrné z transportní rovnice na rozhraní tekutin (2.22a) rozšířené o hustotu *tekutiny 1*. Rovnice kontinuity pro *tekutinu 1* se potom zjednoduší do tvaru s prvním a čtvrtým členem

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \rho_1(x, y, t) dy + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 u_1\}(x, y, t) dy = 0. \quad (2.23)$$

Rovnici kontinuity pro *tekutinu 2* (2.19), resp. (2.20) lze upravit analogicky do tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \rho_2(x, y, t) dy + \frac{\partial}{\partial x} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{\rho_2 u_2\}(x, y, t) dy = 0. \quad (2.24)$$

Zavedeme-li průměrované hodnoty veličin

$$\int_0^{\alpha_1(x,t)} \rho_1 dy = \alpha_1 \widehat{\rho}_1, \quad (2.25a)$$

$$\int_{\alpha_1(x,t)}^1 \rho_2 dy = (1 - \alpha_1) \widehat{\rho}_2 = \alpha_2 \widehat{\rho}_2, \quad (2.25b)$$

$$\int_0^{\alpha_1(x,t)} \rho_1 u_1 dy = \alpha_1 \widehat{\rho}_1 \widehat{u}_1, \quad (2.25c)$$

$$\int_{\alpha_1(x,t)}^1 \rho_2 u_2 dy = (1 - \alpha_1) \widehat{\rho}_2 \widehat{u}_2 = \alpha_2 \widehat{\rho}_2 \widehat{u}_2. \quad (2.25d)$$

Při respektování průměrování (2.25) lze upravit rovnice (2.23) a (2.24) do tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \widehat{\rho}_1) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_1 \widehat{\rho}_1 \widehat{u}_1) = 0, \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \widehat{\rho}_2) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_2 \widehat{\rho}_2 \widehat{u}_2) = 0. \quad (2.27)$$

Stejným průměrovacím postupem lze upravit pohybové rovnice i rovnici pro celkovou energii systému. Pohybová rovnice pro jednofázové proudění stlačitelné neviské tekutiny ve směru osy x je

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho u v) = 0, \quad (2.28)$$

kde p je tlak. Integrujeme pro *tekutinu 1* podél $y \in \langle 0; \alpha_1(x, t) \rangle$ opět za použití integračních pravidel (2.16)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 u_1\}(x, y, t) dy - \{\rho_1 u_1\}(x, \alpha_1, t) \left. \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t} \right| + \{\rho_1 u_1\}(x, 0, t) \left. \frac{\partial 0}{\partial t} \right| + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 u_1^2 + p_1\}(x, y, t) dy - \{\rho_1 u_1^2 + p_1\}(x, \alpha_1, t) \left. \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} \right| + \{\rho_1 u_1^2 + p_1\}(x, 0, t) \left. \frac{\partial 0}{\partial x} \right| + \end{aligned}$$

$$+ \{\rho_1 u_1 v_1\}(x, \alpha_1, t) - \{\rho_1 u_1 v_1\}(x, 0, t) = 0 \quad (2.29)$$

a tekutinu 2 podél $y \in \langle \alpha_1(x, t); 1 \rangle$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{\rho_2 u_2\}(x, y, t) dy - \{\rho_2 u_2\}(x, 1, t) \frac{\partial 1}{\partial t} + \{\rho_2 u_2\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{\rho_2 u_2^2 + p_2\}(x, y, t) dy - \{\rho_2 u_2^2 + p_2\}(x, 1, t) \frac{\partial 1}{\partial x} + \{\rho_2 u_2^2 + p_2\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} + \\ & + \{\rho_2 u_2 v_2\}(x, 1, t) - \{\rho_2 u_2 v_2\}(x, \alpha_1, t) = 0. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Při respektování okrajových podmínek na stěně (2.21) a na rozhraní (2.22) lze rovnici (2.29) zjednodušit do tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 u_1\}(x, y, t) dy + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 u_1^2 + p_1\}(x, y, t) dy - p_1(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} = 0, \quad (2.31)$$

Pohybovou rovnici pro tekutinu 2 (2.30) lze stejným způsobem upravit do tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{\rho_2 u_2\}(x, y, t) dy + \frac{\partial}{\partial x} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{\rho_2 u_2^2 + p_2\}(x, y, t) dy + p_2(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} = 0. \quad (2.32)$$

Zavedeme-li dále průměrované hodnoty veličin

$$\int_0^{\alpha_1(x,t)} \rho_1 u_1^2 dy = \alpha_1 \widehat{\rho_1 u_1^2}, \quad (2.33a)$$

$$\int_{\alpha_1(x,t)}^1 \rho_2 u_2^2 dy = (1 - \alpha_1) \widehat{\rho_2 u_2^2} = \alpha_2 \widehat{\rho_2 u_2^2}, \quad (2.33b)$$

$$\int_0^{\alpha_1(x,t)} p_1 dy = \alpha_1 \widehat{p_1}, \quad (2.33c)$$

$$\int_{\alpha_1(x,t)}^1 p_2 dy = (1 - \alpha_1) \widehat{p_2} = \alpha_2 \widehat{p_2}, \quad (2.33d)$$

získáme po úpravě rovnic (2.31) a (2.32) průměrované pohybové rovnice obou tekutin

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \widehat{\rho_1 u_1}) + \frac{\partial}{\partial x} [\alpha_1 (\widehat{\rho_1 u_1^2} + \widehat{p_1})] = p_1(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}, \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \widehat{\rho_2 u_2}) + \frac{\partial}{\partial x} [\alpha_2 (\widehat{\rho_2 u_2^2} + \widehat{p_2})] = -p_2(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}. \quad (2.35)$$

Poznamenejme, že na pravé straně pohybových rovnic dvoutekutinového dvoufázového modelu figuruje ve srovnání s pohybovými rovnicemi pro jednofázové proudění nový člen, který je produktem průměrovacího procesu. Z bližší analýzy vztahů (2.34) a (2.35) vyplývá, že hybnost pro směs jako celek bude zachována, pokud si budou tlaky tekutin na rozhraní rovny.

Energetickou rovnici s měrnou celkovou energií e pro stlačitelnou, tepelně nevodivou a nevazkou tekutinu ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho e + \frac{\partial}{\partial x} [(\rho e + p)u] + \frac{\partial}{\partial y} [(\rho e + p)v] = 0, \quad (2.36)$$

integrujeme pro tekutinu 1 podél $y \in \langle 0; \alpha_1(x, t) \rangle$ za použití integračních pravidel (2.16)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 e_1\}(x, y, t) dy - \{\rho_1 e_1\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t} + \{\rho_1 e_1\}(x, 0, t) \frac{\partial 0}{\partial t} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{(\rho_1 e_1 + p_1)u_1\}(x, y, t) dy - \{(\rho_1 e_1 + p_1)u_1\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} + \end{aligned}$$

$$+ \{(\rho_1 e_1 + p_1)u_1\}(x, 0, t) \frac{\partial 0}{\partial x} + \{(\rho_1 e_1 + p_1)v_1\}(x, \alpha_1, t) - \{(\rho_1 e_1 + p_1)v_1\}(x, 0, t) = 0 \quad (2.37)$$

a pro tekutinu 2 podél $y \in \langle \alpha_1(x, t); 1 \rangle$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{\rho_2 e_2\}(x, y, t) dy - \{\rho_2 e_2\}(x, 1, t) \frac{\partial 1}{\partial t} + \{\rho_2 e_2\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{(\rho_2 e_2 + p_2)u_2\}(x, y, t) dy - \{(\rho_2 e_2 + p_2)u_2\}(x, 1, t) \frac{\partial 1}{\partial x} + \\ & + \{(\rho_2 e_2 + p_2)u_2\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} + \{(\rho_2 e_2 + p_2)v_2\}(x, 1, t) - \{(\rho_2 e_2 + p_2)v_2\}(x, \alpha_1, t) = 0. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Při respektování okrajových podmínek na stěně (2.21) a podmínek na rozhraní (2.22) se rovnice (2.37) zjednoduší do tvaru

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 e_1\}(x, y, t) dy + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{[(\rho_1 e_1 + p_1)u_1]\}(x, y, t) dy = \\ & = \{p_1 u_1\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial x} - \{p_1 v_1\}(x, \alpha_1, t), \end{aligned} \quad (2.39)$$

kde na pravé straně figuruje část transportní rovnice (2.22) vynásobené tlakem a tedy při jejím respektování platí

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{\rho_1 e_1\}(x, y, t) dy + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\alpha_1(x,t)} \{[(\rho_1 e_1 + p_1)u_1]\}(x, y, t) dy = \\ & = \{p_1\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Energetickou rovnici pro tekutinu 2 (2.38) lze analogicky převést do tvaru

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{\rho_2 e_2\}(x, y, t) dy + \frac{\partial}{\partial x} \int_{\alpha_1(x,t)}^1 \{(\rho_2 e_2 + p_2)u_2\}(x, y, t) dy = \\ & = -\{p_2\}(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1(x,t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Zavedeme-li následující průměrované veličiny

$$\int_0^{\alpha_1(x,t)} \rho_1 e_1 dy = \alpha_1 \widehat{\rho_1 e_1}, \quad (2.42a)$$

$$\int_{\alpha_1(x,t)}^1 \rho_2 e_2 dy = (1 - \alpha_1) \widehat{\rho_2 e_2} = \alpha_2 \widehat{\rho_2 e_2}, \quad (2.42b)$$

$$\int_0^{\alpha_1(x,t)} \rho_1 e_1 u_1 dy = \alpha_1 \widehat{\rho_1 e_1 u_1}, \quad (2.42c)$$

$$\int_{\alpha_1(x,t)}^1 \rho_2 e_2 u_2 dy = (1 - \alpha_1) \widehat{\rho_2 e_2 u_2} = \alpha_2 \widehat{\rho_2 e_2 u_2}, \quad (2.42d)$$

$$\int_0^{\alpha_1(x,t)} p_1 u_1 dy = \alpha_1 \widehat{p_1 u_1}, \quad (2.42e)$$

$$\int_{\alpha_1(x,t)}^1 p_2 u_2 dy = (1 - \alpha_1) \widehat{p_2 u_2} = \alpha_2 \widehat{p_2 u_2}. \quad (2.42f)$$

získáme průměrované tvary rovnic energie pro tekutinu 1 a tekutinu 2

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \widehat{\rho_1 e_1}) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_1 \widehat{\rho_1 e_1 u_1} + \alpha_1 \widehat{p_1 u_1}) = -p_1(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \widehat{\rho_2 e_2}) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_2 \widehat{\rho_2 e_2 u_2} + \alpha_2 \widehat{p_2 u_2}) = p_2(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}. \quad (2.44)$$

Protože počet neznámých převyšuje počet rovnic, je nezbytné matematický model vhodně doplnit a uzavřít. Poznamenejme, že s tímto problémem je nezbytné si poradit i při modelování jednofázového proudění. V případě nelineárního systému Eulerových rovnic v 1D

(rovnice kontinuity, pohybová rovnice a rovnice pro celkovou energii), který popisuje proudění stlačitelné, nevazké a tepelně nevodivé tekutiny, máme čtyři neznámé ρ, u, e, p . Aby byl systém řešitelný, musí tedy být nutně doplněn o další rovnici. Protože stlačitelná tekutina se chová jako termodynamický systém, běžně se využívá stavová rovnice, která uzavírá tento systém rovnic.

U dvoutekutinových modelů je situace složitější. Systém rovnic pro proudění dvou stlačitelných, nevazkých a tepelně nevodivých tekutin, které se nemísí a neprobíhá mezi nimi výměna hmoty, obsahuje rovnice kontinuity pro obě fáze (2.26), (2.27), pohybové rovnice pro obě fáze (2.34), (2.35) a rovnice celkové energie pro obě fáze (2.43), (2.44). Celkem máme tedy šest parciálních diferenciálních rovnic

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \widehat{\rho}_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \widehat{\rho}_1 u_1) = 0, \quad (2.45a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \widehat{\rho}_2) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2 \widehat{\rho}_2 u_2) = 0. \quad (2.45b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \widehat{\rho}_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_1(\widehat{\rho}_1 u_1^2 + \widehat{p}_1)] = p_1(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}, \quad (2.46a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \widehat{\rho}_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_2(\widehat{\rho}_2 u_2^2 + \widehat{p}_2)] = -p_2(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}. \quad (2.46b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \widehat{\rho}_1 e_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \widehat{\rho}_1 e_1 u_1 + \alpha_1 \widehat{p}_1 u_1) = -p_1(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}, \quad (2.47a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \widehat{\rho}_2 e_2) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2 \widehat{\rho}_2 e_2 u_2 + \alpha_2 \widehat{p}_2 u_2) = p_2(x, \alpha_1, t) \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}, \quad (2.47b)$$

avšak dvanáct neznámých: $\rho_1, \rho_2, u_1, u_2, e_1, e_2, p_1, p_2, \alpha_1, \alpha_2, p_1(x, \alpha_1, t), p_2(x, \alpha_1, t)$. Tento základní dvoutekutinový model, označovaný také jako výchozí, či obecný dvoutekutinový model („*generic model*“), tedy vyžaduje šest doplňujících rovnic. Opět existuje mnoho přístupů jak systém uzavřít. Pro odvozený dvoutekutinový model se používá například kombinace:

- kalorickou stavovou rovnicí $\epsilon_1 = f(\rho_1, T_1)$ a termickou stavovou rovnicí $p_1 = f(\rho_1, T_1)$ pro tekutinu 1,
- kalorickou stavovou rovnicí $\epsilon_2 = f(\rho_2, T_2)$ a termickou stavovou rovnicí $p_2 = f(\rho_2, T_2)$ pro tekutinu 2,
- rovnice pro objemový podíl fází (2.14): $\alpha_1 = 1 - \alpha_2$,
- relace tlakového pole, např. rovnost tlaků na rozhraní tekutin $p_1(x, \alpha_1, t) = p_2(x, \alpha_1, t)$.

2.5 Stavové rovnice stlačitelných tekutin

Při řešení úloh proudění stlačitelných tekutin je obecně nezbytné doplnit výchozí rovnice mechaniky tekutin vhodným konstitutivním vztahem, který spolu váže stavové veličiny a charakterizuje termodynamický systém. Vlastnosti tekutin přitom bývají velmi různorodé. Ideální plyn je dokonale stlačitelný, avšak ideální kapalina dokonale nestlačitelná. Poznamenejme, že dvoufázové proudění s ideální kapalinou by však svým charakterem neodpovídalo výše odvozenému výchozímu TFM (odstavec 2.4), který byl odvozen pro dvě stlačitelné fáze. Z čistě praktického hlediska následné algoritmizace řešení diskretizovaného matematického modelu je nejvhodnější použít pro obě fáze stejně matematicky formulované konstitutivní vztahy. Jejich tvar však musí být dostatečně univerzální pro adekvátní zachycení vlastností jak plynu, tak i kapaliny a to pouze vhodnou volbou parametrů těchto konstitutivních vztahů.

První rovnosti mezi stavovými veličinami plynu vznikaly již v 17. a 18. století. V roce 1834 z nich byla odvozena Clapeyronem tzv. stavová rovnice ideálního plynu. Stavovou rovnicí ideálního plynu lze relativně úspěšně použít i pro běžné plyny za normálních podmínek. Stejně tak lze s její

pomocí například navrhovat jednoduché termodynamické stroje. Stavové rovnice obecně nelze odvodit pouze makroskopickými metodami, ale je nezbytné zahrnout jevy na molekulové úrovni. Pro jejich určení se využívají experimentální metody nebo závěry statistické fyziky. Běžně rozeznáváme dva druhy stavových rovnic: kalorické stavové rovnice

$$\epsilon = f(\rho, T), \quad (2.48)$$

která vyjadřuje závislost měrné vnitřní energie ϵ na termodynamické teplotě T a dalších vnějších proměnných a termické stavové rovnice

$$p = f(\rho, T), \quad (2.49)$$

což představuje závislost tlaku na termodynamické teplotě a dalších vnějších proměnných.

Ideální plyn se skládá z částic zanedbatelných rozměrů, jejichž interakce se omezují výhradně na dokonale pružné srážky. Rychlost částic roste s odmocninou termodynamické teploty. Tlak plynu je důsledkem odrazů částic od stěn. Tato idealizace platí pro běžné plyny při nízké hustotě, resp. při vysoké teplotě a nízkém tlaku. Clapeyronova stavová rovnice ideálního plynu je známá v mnoha vyjádřeních, například

$$p V = n R_m T, \quad (2.50a)$$

kde R_m je univerzální plynová konstanta ($R_m \doteq 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$) a n značí látkové množství definované jako $n = N/N_A$, kde N je počet molekul a N_A Avogadrova konstanta, která odpovídá počtu entit v jednom molu látkového množství, přesněji je definovaná jako počet atomů ve dvanácti gramech uhlíku $^{12}_6\text{C}$ ($N_A \doteq 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$). Potom

$$p V = n R_m T = \frac{N}{N_A} R_m T = N k T, \quad (2.50b)$$

kde k je Boltzmannova konstanta vyjadřující vztah mezi termodynamickou teplotou a kinetickou energií plynu $k = R_m/N_A \doteq 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$. Alternativně lze upravit rovnici (2.50a) dosazením vlevo $V = m/\rho$ a vpravo $n = m/M_m$, kde M_m je molární hmotnost konkrétního plynu. Po vykrácení hmotností dostáváme

$$\frac{p}{\rho} = \frac{R_m}{M_m} T, \quad (2.50c)$$

$$p = \rho r T, \quad (2.50d)$$

kde $r = R_m/M_m$ je plynová konstanta, charakterizující konkrétní plyn. Například pro vzduch jako výborně promíchanou směs plynů se udává relativní molekulová hmotnost $M_r = 28,96$, čemuž odpovídá molární hmotnost $M_m = M_r m_u N_A = 28,96 \text{ g mol}^{-1}$ (atomová hmotnostní konstanta $m_u \doteq 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$) a hodnota plynové konstanty $r \doteq 287 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Pro měrnou vnitřní energii ϵ platí

$$\epsilon = c_V T = \frac{1}{(\kappa-1)} \frac{p}{\rho}, \quad (2.51)$$

což je forma kalorické stavové rovnice pro ideální plyn. Rychlost zvuku v plynu je obecně definovaná výrazem

$$c = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_S}. \quad (2.52)$$

Zvuk se šíří jako podélné vlnění stlačitelné látky, jedná se tedy o postupné zhušťování a zředování média, ke kterému dochází relativně velmi rychle. Proto se tento děj obvykle považuje za

izentropický (adiabatický). V ideálním plynu je adiabatický děj, tedy děj bez výměny tepla, popsán vztahem

$$\frac{p}{\rho^\kappa} = \text{konst.}, \quad (2.53)$$

kde κ je Poissonova adiabatická konstanta ($\kappa = 1,4$ pro dvouatomové plyny), která je poměrem měrných tepelných kapacit při konstantním tlaku c_p a při konstantním objemu c_v

$$\kappa = \frac{c_p}{c_v}. \quad (2.54)$$

Rozdíl měrných tepelných kapacit je roven plynové konstantě (tzv. Mayerův vztah)

$$c_p - c_v = r. \quad (2.55)$$

Rychlost zvuku v ideálním plynu určíme z definice (2.52) diferencováním adiabatického zákona (2.53)

$$c = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_s} = \sqrt{\frac{\partial (\text{konst. } \rho^\kappa)}{\partial \rho}} = \sqrt{\text{konst. } \kappa \rho^{\kappa-1}} = \sqrt{\frac{\kappa (\text{konst. } \rho^\kappa)}{\rho}} = \sqrt{\frac{\kappa p}{\rho}}, \quad (2.56)$$

což lze při respektování výše uvedených vztahů upravit například do tvarů

$$c = \sqrt{\frac{\kappa p}{\rho}} = \sqrt{\kappa r T} = \sqrt{(\kappa - 1) c_p T}. \quad (2.57)$$

Skutečné chování reálných plynů se bohužel od ideálního plynu liší. Tento nesoulad je zvláště patrný například při vysoké hustotě. Jako první se o nápravu pokusil van der Waals, který v 70. letech 19. století zavedl inovovanou stavovou rovnici

$$\left(p + \frac{a n^2}{v^2} \right) (V - n b) = n R_m T, \quad (2.58)$$

kde a , b jsou materiálové konstanty. Uvažoval přitom molekuly nenulových rozměrů, které navíc vůči sobě působí přitažlivými a odpudivými silami. Právě konstanty mají ve van der Waalsově interpretaci modelovat silová působení (a – parametr molekulové přitažlivosti, b – parametr molekulové odpudivosti). Pro $a = 0$ a $b = 0$ dostáváme původní podobu stavové rovnice ideálního plynu. Van der Waalsova stavová rovnice se docela dobře hodí i pro použití na dvoufázových směsích. Její přesnost však rapidně klesá v oblasti změny skupenství, protože takováto stavová rovnice není schopna postihnout změnu skupenství. Vlivem překotného vývoje techniky v období druhé světové války přestala být i tato vylepšená stavová rovnice dostačující. Od druhé poloviny dvacátého století až dosud jsou prezentovány stále nové specializované stavové rovnice, které mívají různá matematická vyjádření: nejčastěji se jedná o kubické rovnice, ale lze se setkat i s exponenciálními vztahy, mnohparametrovými rovnicemi čítajícími desítky členů, aj.

Často používaný konstitutivní vztah při řešení dvoufázových úloh je tzv. **Taitova rovnice**. Původně sloužila pro vyjádření stlačitelnosti ($p - V$ závislosti) vody bez funkční závislosti na teplotě. Potom byla používána pro další kapaliny a později se rozšířila i pro plyny a pevné látky, více Inko lze najít například v [29]. Lze ji formulovat i pro vícefázové směsi látek, viz [37], [57]. Má dostačující přesnost ve velkém rozsahu. Fyzikální interpretace Taitovy rovnice však není zcela zřejmá, spíše se jedná o poloempirický vztah v jednoduchém matematické vyjádření

$$-\frac{1}{V} \frac{\Delta V}{\Delta p} = \frac{A}{B + \Delta p}, \quad (2.59)$$

kde A , B jsou experimentálně určené materiálové koeficienty. Poznamenejme, že v podstatě ekvivalentním vztahem je definovaná objemová stlačitelnost γ vlivem vnějšího tlaku

$$\gamma = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dp} = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp}. \quad (2.60)$$

Kombinací tohoto vztahu s definiční rovnicí pro určení rychlosti zvuku (2.52) obdržíme vztah mezi rychlostí zvuku a objemovou stlačitelností

$$c = \sqrt{\frac{1}{\rho \gamma}}. \quad (2.61)$$

Pravá strana Taitovy rovnice (2.59) tedy v podstatě modeluje objemovou stlačitelnost γ , rychlost zvuku lze potom určit velmi snadno dosazením do (2.61).

Nejvýznamnějším rysem stavových rovnic Taitova typu je, že spolu přímo váží tlak a hustotu $f(\rho, p)$. V rovnici tedy nefiguruje teplota, ani energie. Taitovu rovnici lze použít jako konstitutivní vztah v systémech se slabým vlivem termodynamiky nebo při rychlých izentropických dějích. Její užití je možné i při řešení některých termodynamických problémů, ale je nezbytné mít na paměti neprovázanost tlaku a hustoty s teplotou. Poznamenejme, že pokud je energetická rovnice v modelu podružná, tedy není potřeba řešit například rozložení teploty, nebo přenos energie, lze ji při řešení systému rovnic popisujících proudění stlačitelné tekutiny zcela vypustit. Při použití například stavové rovnice ideálního plynu nelze systém rovnic takto zredukovat, protože energetická rovnice je provázaná se stavovou rovnicí.

Uvažujme nyní dvě různé varianty stavové rovnice Taitova typu pro modelování stlačitelnosti vzduchu, tedy

$$p = p_0 \left(\frac{\rho}{\rho_{p_0}} \right)^\kappa, \quad (2.62)$$

$$p = \rho c^2. \quad (2.63)$$

První rovnice, použitá například v práci [100], pracuje s modelovými parametry: referenční tlak p_0 , hustota při referenčním tlaku ρ_{p_0} a κ , což představuje v tomto případě Poissonovu konstantu. Rovnice (2.62) je ve tvaru (2.53), popisující adiabatický děj ideálního plynu. Jedná se tedy o izentropický přechod z referenčního stavu popsaného (p_0, ρ_{p_0}) do stavu (p, ρ) . Pro rychlost zvuku platí

$$c = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}} = \sqrt{\frac{p_0}{\rho_{p_0}^\kappa} \kappa \rho^{\kappa-1}} = \sqrt{p_0 \left(\frac{\rho}{\rho_{p_0}} \right)^\kappa \kappa \rho^{-1}} = \sqrt{\frac{\kappa p}{\rho}}. \quad (2.64)$$

Oproti tomu v rovnici (2.63), použité v práci [36], figuruje jediná modelová konstanta c . V tomto případě se jedná o hodnotu rychlosti zvuku. Rovnost je podobná definičnímu vztahu pro rychlost zvuku (2.52). Z analýzy termodynamiky procesu popsaného stavovou rovnicí (2.63) při uvažování ideálního plynu (2.50d) je patrné, že rovnice tohoto typu s konstantní hodnotou rychlosti zvuku modeluje izotermický děj

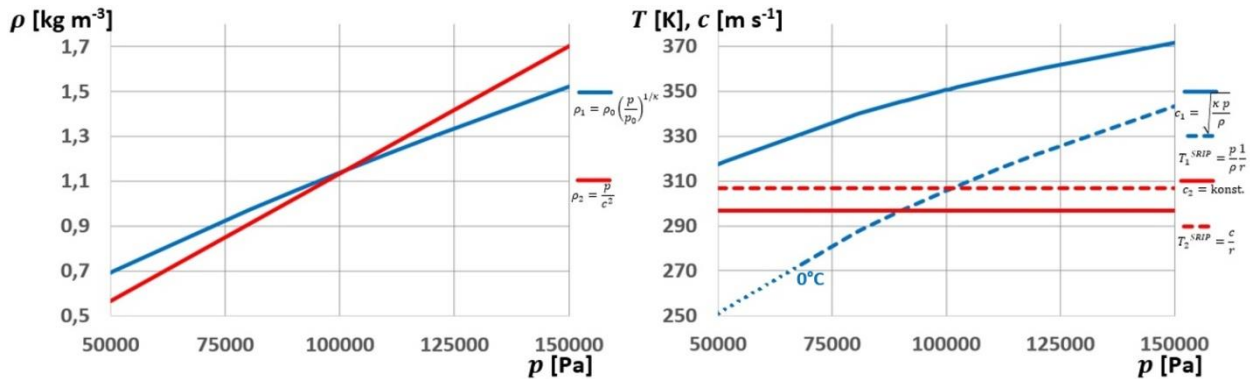
$$\frac{p}{\rho} = c^2 = \text{konst.} = r T. \quad (2.65)$$

Uvedené jednoduché rovnice Taitova typu budou dále vzájemně porovnány a konfrontovány se stavovou rovnicí ideálního plynu, viz obr. 17. Jak bylo řečeno výše, první rovnice (2.62) odpovídá izentropickému ději ideálního plynu, tudíž její výsledky odpovídají rovnici (2.53). Červené křivky zobrazují hodnoty pro druhou stavovou rovnicí (2.63). V levém grafu je závislost hustoty ρ na tlaku p . V pravém grafu je závislost rychlosti zvuku c na tlaku p určené z příslušných rovnic (2.64) a (2.65). Pro zajímavost je dále přerušovanou čarou vykreslena závislost termodynamické teploty T v závislosti na hodnotách p a $\rho(p)$, která je dopočtená ze stavové rovnice ideálního plynu (2.50d)

s plynovou konstantou $r = 287 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$. Hodnota Poissonovy konstanty odpovídala dvouatomovému plynu $\kappa = 1,4$, zbylé parametry rovnice (2.62) byly nastaveny tak, aby odpovídaly hustotě $\rho_{p_0} = 1,15 \text{ kg m}^{-3}$ při tlaku $p_0 = 101\,325 \text{ Pa}$. K tomuto nastavení byla přiřazena adekvátní hodnota rychlosti zvuku při referenčních podmínkách pro druhou rovnici (2.63)

$$c = \sqrt{\frac{p_0}{\rho_{p_0}}}. \quad (2.66)$$

Relativní odchylka hustot $|\rho_{rov1} - \rho_{rov2}|/\rho_{p_0}$ vypočtených z rovnic (2.62) a (2.63) při odchylce tlaku $|p - p_0| \leq 10 \text{ kPa}$ je menší, než 3 %. Naopak velmi rozdílná je rychlost zvuku $c_{rov1} = c_{rov2} \sqrt{\kappa} \doteq c_{rov2} \cdot 1,18$ při tlaku p_0 .

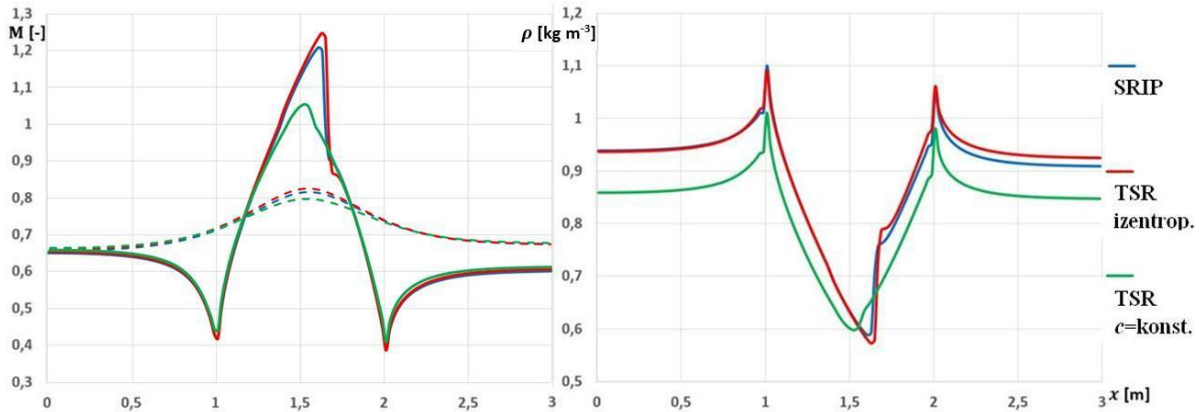


Obr. 17: Porovnání dvou variant stavové rovnice modelující stlačitelnost vzduchu: izentropické (2.62) modře a izotermické (2.63) červeně. Vlevo hustota v závislosti na tlaku. Vpravo rychlost zvuku v závislosti na tlaku, navíc přerušovanou čarou vynesena křivka termodynamické teploty $T(p, \rho)$ určená ze stavové rovnice ideálního plynu (2.50d).

Dále byly provedeny numerické simulace jednofázového transsonického proudění nevazkého plynu v GAMM kanále. Tato úloha je dobře experimentálně podpořena a používá se standardně pro hodnocení kvality numerického řešení, kdy je cílem především ostře a přesně zachytit lokální prudké změny proudových veličin v transonické oblasti, viz [132]. Výsledky provedených numerických simulací mají prověřit, jak si jednoduché tvary stavových rovnic poradí s problémem transsonického proudění.

Obdélníková výpočtová oblast o rozměrech $3 \times 1 \text{ m}$ s obloukovou výdutí v polovině spodní strany s délkou tětiny 1 m a výškou oblouku $0,1 \text{ m}$, byla pokryta strukturovanou čtyřúhelníkovou výpočetní sítí o 150×50 buňkách. Úloha simuluje proudění ideálního plynu GAMM kanálem z oblasti referenčních podmínek $p_0^{IN} = p_0 = 101\,325 \text{ Pa}$, $\rho_0^{IN} = \rho_{p_0} = 1,15 \text{ kg m}^{-3}$ při nulovém úhlu náběhu do oblasti sníženého tlaku $p^{OUT} = p_0^{IN} \cdot 0,737 \doteq 74\,577 \text{ Pa}$ na výstupu z kanálu. Systém Eulerových rovnic popisující proudění stlačitelné, nevazké a tepelně nevodivé tekutiny byl postupně uzavřen třemi výše diskutovanými stavovými rovnicemi: rovnicí ideálního plynu, Taitovou rovnicí v izentropické variantě a Taitovou rovnicí v izotermické variantě. Při použití obou variant Taitovy rovnice nebylo pracováno s energetickou rovnicí, která byla v těchto případech nadbytečná. Matematický model úlohy byl řešen numericky pomocí metody konečných objemů. Pro časovou diskretizaci bylo použito jednokrokové Eulerovo schéma a pro prostorovou diskretizaci nevazkých toků AUSM schéma prvního řádu přesnosti, navržené Liouem a Steffenem v [80], které bude podrobněji rozebráno v odstavci 3.1.1.1. Schémata prvního řádu přesnosti byla zvolena s ohledem na budoucí implementaci stavových rovnic při numerickém řešení dvofázových problémů, kde je použití schémat prvního řádu časté. Přesnost použitých schémat je nedostačující pro věrné zachycení rázových vln a singularit vznikajících v uvedeném případě, viz [47], což ovšem

není cílem těchto úloh.



Obr. 18: Numerické simulace transsonického proudění v Gamm kanálu při použití: stavové rovnice ideálního plynu (modře), Taitovy stavové rovnice v izentropické variantě (červeně) a v izotermické variantě (zeleně). Vlevo průběh Machova čísla podél dolní stěny (plná čára) a horní stěny (přerušovaná čára), vpravo hustota tekutiny podél dolní stěny.

Předcházející obr. 18 ukazuje rozdíly ve výsledcích úlohy transsonického proudění v Gamm kanálu. Děj je rychlý a uplatňuje se zde značně stlačitelnost vzduchu. Výsledky dosažené při použití Taitovy rovnice v izentropické variantě (2.62) se blíží výsledkům při použití stavové rovnice ideálního plynu. Provedené numerické simulace ukazují, že tato verze jednoduché stavové rovnice je vhodná i pro rychlé děje se stlačitelnou tekutinou. Řešený model uzavřený rovnicí (2.62) je navíc méně výpočetně náročný oproti modelu se stavovou rovnicí ideálního plynu, protože je zredukovaný o energetickou rovnici.

Naopak izotermická varianta Taitovy rovnice (2.63) není vhodná pro transsonické proudění, kde se ve skutečnosti značně mění teplota. Výsledky se značně liší od skutečnosti, nejmarkantnější jsou rozdíly hustoty, jak je patrné z pravého grafu na obr. 18. To je dáno nejen dynamikou transsonického proudění, ale i rostoucí chybnou odchylkou závislosti $\rho - p$ při vyšších tlakových rozdílech, jak ukazuje levá část obr. 17.

Při řešení problémů dvoufázového proudění umožňuje Taitova rovnice v běžných aplikacích postihovat jak vlastnosti kapalin, tak i plynů. Přitom funguje překvapivě dobře a ve velkém rozsahu tlaků a hustot. Tvar rovnice zůstává stejný, mění se jen materiálové konstanty, což je velmi výhodné. Protože je založena na stlačitelnosti, je její použití nevhodné v oblastech, kde dochází ke změnám skupenství, nebo se mění stlačitelnost látek. Velmi hojně se Taitova rovnice používá v modelech pro řešení úloh transportu více fází bez silných termodynamických vlivů, např. modelování dopravy ropných látek potrubím.

Další jednoduchá a snadno použitelná stavová rovnice je tzv. rovnice ztuhlé tekutiny („*stiffened equation of state*“). Je vhodná jak pro kapaliny, tak i plyny. Často se používá i při řešení vícefázových problémů, zejména pro kapalinu pod velkým tlakem, tedy v různých simulacích podvodních výbuchů.

$$p = p(\rho, \epsilon) = (\kappa - 1) \rho (\epsilon - \epsilon^{*v}) - \kappa p_{\infty}, \quad (2.67a)$$

kde p_{∞} a ϵ^{*v} jsou modelové parametry. Referenční tlak p_{∞} má právě ztužovací funkci, při $p_{\infty} = 0$ je tekutina výborně stlačitelná a její chování se blíží ideálnímu plynu, naopak pro velké hodnoty p_{∞} je tekutina špatně stlačitelná a její kompresní vlastnosti odpovídají kapalině. Měrná vazebná energie ϵ^{*v} , pomocí níž je určena nulová hladina vnitřní energie, vymezuje kritickou oblast a fázový

přechod. Aby měla stavová rovnice fyzikální smysl, musí platit $c_V > 0$ a $\kappa > 1$. Podrobnosti lze najít například v pracích Menikoffa [88], [89], či v článku Flåttena a kol [40]. Pomocí termodynamických závislostí lze rovnici (2.67a) upravit do tvaru

$$p(\rho, T) = (\kappa - 1) \rho c_V T - p_\infty, \quad (2.67b)$$

Pro rychlost zvuku při použití stavové rovnice ztuhlé tekutiny platí

$$c = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_S} = \sqrt{\frac{\kappa (p + p_\infty)}{\rho}} = \sqrt{(\kappa - 1) c_p T}. \quad (2.68)$$

Rychlost zvuku ve ztuhlé tekutině je tedy vyšší (c roste s p_∞).

Úskalím některých stavových rovnic, mj. i Taitovy rovnice a rovnice ztuhlé tekutiny, je možný nefyzikální pokles tlaku do záporných hodnot spolu s řešením rychlosti zvuku v oboru komplexních čísel.

2.6 Fyzikální vlastnosti směsí

Heterogenní směs nemísitelných tekutin se z dostatečně vzdáleného pohledu jeví jako směs homogenní. Za určitých podmínek lze modelovat proudění takových heterogenních směsí pomocí jednoduchých eulerovských modelů, jako je například homogenní rovnovážný model. Proto je důležité zabývat se vlastnostmi homogenizovaných směsí. Avšak poznamenejme, že nehomogenity nelze nikdy zcela opominout. Příkladem může být krev, tedy směs především plazmy a krevních částic. Ve velkých nádobách se chová podobně jako homogenní tekutina, ale v malých kapilárách už nikoliv. Použití homogenního modelu pro kapiláry s průměrem menším než červená krvinka by bylo zcela nesprávné.

Hustotu směsi lze odvodit z definice

$$\rho_m = \frac{m_m}{V}, \quad (2.69)$$

kde se zavádí index m pro veličiny související se směsí („mixture“). Celková hmotnost směsi v kontrolním objemu o velikosti V je součtem hmotností dílčích fází. Po zahrnutí definice objemových podílů (2.10) postupně dostáváme

$$\rho_m = \frac{m_m}{V} = \frac{\sum_{e=1}^n m_e}{V} = \frac{\sum_{e=1}^n \rho_e V_e}{V} = \frac{\sum_{e=1}^n \rho_e \alpha_e V}{V}, \quad (2.70)$$

odkud po vykrácení objemem V obdržíme vzorec pro výpočet hustoty směsi

$$\rho_m = \sum_{e=1}^n \alpha_e \rho_e. \quad (2.71)$$

Stejně tak hybnost vícefázového systému vztahovaná na jednotku objemu je součtem hybností dílčích fází

$$\rho_m \mathbf{u}_m = \sum_{e=1}^n \alpha_e \rho_e \mathbf{u}_e. \quad (2.72)$$

Rovnici lze dále upravit například vydělením rovnice hustotou směsi

$$\mathbf{u}_m = \frac{\sum_{e=1}^n \alpha_e \rho_e \mathbf{u}_e}{\rho_m} = \sum_{e=1}^n \beta_e \mathbf{u}_e, \quad (2.73)$$

kde

$$\beta_e = \frac{\alpha_e \rho_e}{\rho_m} \quad (2.74)$$

je tzv. hmotnostní podíl e -té fáze. Podobně lze také vypočítat rovněž vnitřní energii směsi, či entalpii. Naopak určení vlastností směsi, např. dynamické viskozity nebo tepelné vodivosti,

pomocí takovýchto jednoduchých vztahů bývá zavádějící. Složitě je rovněž určení rychlosti zvuku ve dvoufázových systémech, která je nezbytná pro řešení diskretizovaných rovnic dvoufázového proudění pomocí některých numerických metod.

Uvažujme dvě výrazně odlišné tekutiny, např. vodu (kapalinu) a vzduch (plyn). Fyzikální vlastnosti jsou nám i z každodenní zkušenosti dobře známé. Voda je relativně těžká a velmi špatně stlačitelná, vzduch je relativně lehký, ale dobře stlačitelný. Rychlost zvuku se mírně liší podle podmínek a ve vzduchu má přibližně velikost $c_g \approx 330 \text{ m s}^{-1}$, ve vodě pak $c_l \approx 1470 \text{ m s}^{-1} \approx 4,5 \cdot c_g$. Při proudění směsi vzduchu a vody potrubím lze jasně stanovit např. hustotu směsi pomocí rovnice (2.71). Jak ale stanovit rychlost zvuku? Na první pohled by se nabízela analogie ke vztahům (2.71) nebo (2.72), tedy že rychlost zvuku ve směsi se bude pohybovat mezi hodnotami c_g a c_l v závislosti na poměru zastoupení fází. Tato úvaha je ovšem chybná! Ve skutečnosti bývá rychlost zvuku ve směsi c_m výrazně nižší i ve srovnání s $\min\{c_g, c_l\}$, avšak není to pravidlem. Jako první popsal anomálii rychlosti zvuku dvoufázového proudění Mallock [83], který zjistil, že rychlost šíření akustických vln v takové směsi klesá až k hodnotě $c_m \approx 20 \text{ m s}^{-1}$ a už malá příměs vzduchu ve vodě $\alpha_g = 0,01$ způsobí pokles na rychlost zvuku ve směsi $c_m \approx 100 \text{ m s}^{-1}$. Neobvyklé chování bývá vysvětlováno tak, že hustota směsi se při $\alpha_g = 0,01$ změní pouze nepatrně ($\rho_l/\rho_g \approx 1000$), ale celková stlačitelnost směsi γ_m se vlivem přítomnosti bublin zvýší mnohonásobně ($\gamma_l/\gamma_g \approx 5 \cdot 10^{-5}$).

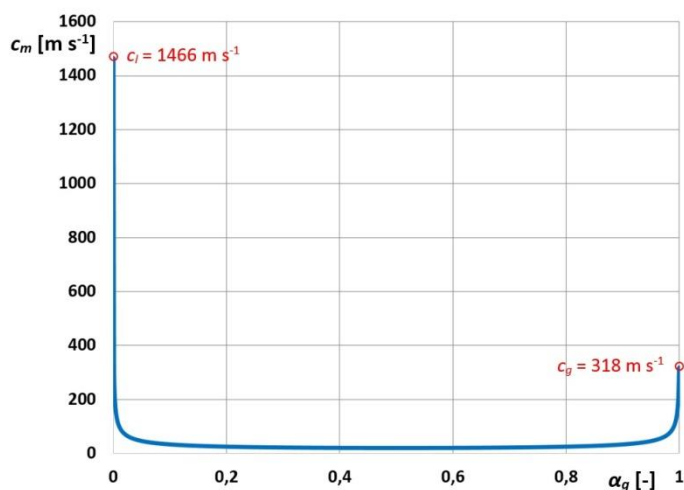
První vzorec pro rychlost zvuku ve směsi formuloval Wood odvozením z (2.61), viz [142], [125]

$$c_m^2 = \frac{1}{\rho_m \gamma_m} = \frac{1}{(\alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l)(\alpha_g \gamma_g + \alpha_l \gamma_l)}. \quad (2.75)$$

Wallis [136] dospěl při uvažování lokální termodynamické rovnováhy, bez výměny hmoty mezi fázemi k rovnosti

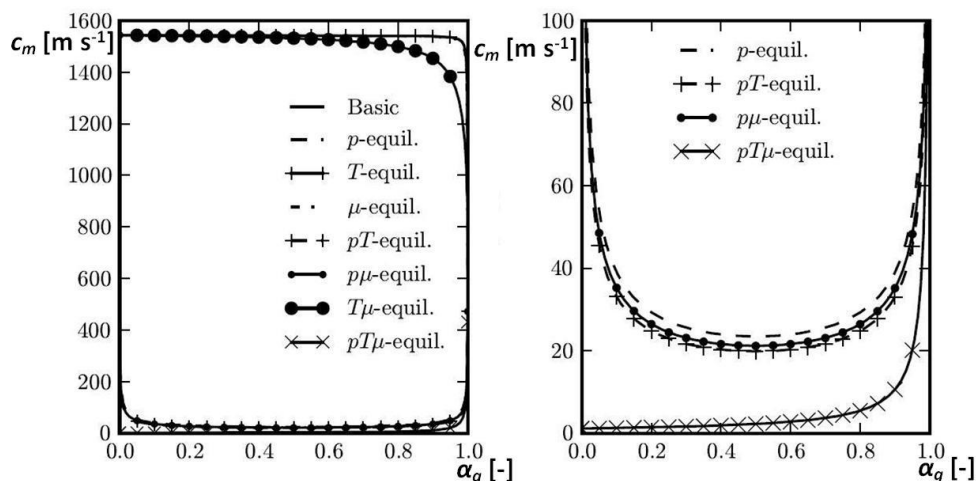
$$\frac{1}{\rho_m c_m^2} = \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} + \frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2}, \quad (2.76)$$

což je ekvivalentní Woodově rovnici. Výsledky těchto modelů byly podpořeny experimentálními měřeními. Na obr. 19 je vykreslena závislost rychlosti zvuku ve směsi c_m vody a vzduchu na objemovém podílu vzduchu α_g dle vztahu (2.75) pro hodnoty: $\rho_l = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_g = 1 \text{ kg m}^{-3}$, $\gamma_l = 4,65 \cdot 10^{-10} \text{ Pa}^{-1}$, $\gamma_g = 9,87 \cdot 10^{-6} \text{ Pa}^{-1}$.



Obr. 19: Rychlost zvuku ve směsi vody a vzduchu v závislosti na objemovém podílu vzduchu.

V případě proudění vody a páry může být kvůli látkové výměně na rozhraní fází rychlost zvuku ještě nižší. Rychlost zvuku obecně závisí na objemových podílech fází, tlaku, velikosti částic, povrchovém napětí, teplotě, povaze rovnováhy mezi fázemi, či frekvenci šířeného zvuku, což zachycují sofistikovanější modely pro určení rychlosti zvuku ve směsích. Další informace lze najít například v pracích Kiefferové [70] nebo Lunda [82]. Složitost celé problematiky dokládá obr. 20, který ukazuje rychlosti zvuku ve dvoufázové směsi vody a vodní páry při atmosférickém tlaku pro různé druhy rovnováhy (tj. rovnosti vybraných veličin v obou fázích). Poznamenejme, že veličina μ v obr. 20 představuje chemický potenciál. Čím je rozdíl chemických potenciálů $|\mu_l - \mu_g|$ větší, tím je mezifázová výměna hmoty intenzivnější, a tedy při rovnováze $\mu_l = \mu_g$ nedochází, podle použitého modelu, k výměně hmoty, [82].



Obr. 20: Rychlost zvuku ve směsi vody a vodní páry v závislosti na objemovém podílu vzduchu pro různé druhy rovnováhy (T - termodynamická teplota, p – tlak, μ – chemický potenciál). Vpravo plný rozsah rychlostí, vlevo detail pro $c_m \in \langle 0; 100 \rangle$ m s⁻¹. Převzato z [82].

2.7 Metody pro zachycení rozhraní a další používané dvoufázové modely

Eulerovské dvoufázové modely budou v dalším textu převážně popisovány v 1D, protože pro formulaci a pochopení problémů je jeden rozměr dostačující. Rozšíření těchto modelů o další dimenze je relativně snadné. Naopak metody pro simulace rozvrstvených proudění a modely s diskretními částicemi budou diskutovány ve 2D, protože jejich 1D formulace v podstatě postrádají smysl.

Proudění separovaných tekutin lze simulovat například numerickým řešením diskretizovaného jednofázového systému Navierových – Stokesových rovnic pomocí metody konečných objemů. Úkolem speciálních technik je potom co nejpřesněji zachytit polohu rozhraní. Proudové veličiny po obou stranách rozhraní se mohou výrazně lišit, navíc obě tekutiny mohou mít velmi rozdílné fyzikální vlastnosti (hustotu, dynamickou viskozitu, aj.). Prudké změny hodnot veličin na rozhraní působí problémy při numerickém řešení úlohy. Navíc mohou být i zdrojem fyzikálních nestabilit proudění různých povah, například Kelvinova – Helmholtzova nestabilita, na obr. 21, způsobená výrazným rozdílem rychlostí fází v podélném směru rozhraní, či Rayleighova – Taylorova nestabilita na obr. 7, vznikající v tíhovém poli při výrazném rozdílu hustot fází v nestabilním uspořádání.



Obr. 21: Kelvinova – Helmholtzova oblaka, [116].

Přehled vybraných, v současnosti často používaných, technik a jejich obecných vlastností je uveden v odstavci 1.2.1. V dalších odstavcích budou tedy detailněji rozebrány metody používající značkovací „*Volume-Of-Fluid*“ (zkr. VOF) a „*Level Set*“ funkce (zkr. LS) pro nalezení rozhraní. Tyto metody řadíme do skupiny tzv. metod zachycení rozhraní (viz odstavec 1.2.1.2). VOF i LS jsou dostatečně přesné, avšak neumožňují popsat rozhraní zcela ostře jako např. metody sledování rozhraní. Velkou výhodou je používání pevné výpočetní sítě a absence diskrétních značkovacích sledujících rozhraní, které jsou zde nahrazeny značkovacími funkcemi VOF, nebo LS. Výpočetní kódy používající VOF a LS si rovněž umí výborně poradit s problémy vzniku a zániku nových rozhraní, například při spojování/rozdělování bublin/kapek, protože tyto jevy přímo vyplývají z vývoje značkovacích funkcí a není zapotřebí speciálních algoritmů řešících tuto problematiku. Porovnání obou metod lze najít například v [108], [2].

Technika VOF je implementovaná do řady komerčních programů pro výpočty proudění. V softwaru ANSYS Fluent slouží jako hlavní nástroj pro simulace separovaných proudění. Skupina metod založených na LS funkci pochází z informatiky. Původně byly tyto metody používány pro digitální zpracování obrazu a pro simulace proudění byly upraveny až později. Programátoři pracují s různými druhy LS algoritmů, proto využívají s oblibou i LS metodu pro zachycení hladiny tekutiny v počítačové grafice, tedy v oboru, jehož vliv v každodenním životě neustále sílí.

2.7.1 Metoda založená na značkovací funkci volume-of-fluid

Za průkopníky VOF metody jsou považováni Hirt a Nichols, kteří navázali na Noha a Woodwarda [96]. V práci [56] publikované v roce 1981 Hirt a Nichols popsali řešení proudění nestlačitelné tekutiny s volnou hladinou pomocí VOF. Pro prostorovou diskretizaci úlohy použili metodu konečných diferencí a evoluce VOF funkce byla řešena pomocí schématu typu dárce – příjemce. Ve své práci ukázali výsledky numerických simulací protržení hráze a vývoj Rayleighovy – Taylorovy nestability.

Hlavním přínosem techniky VOF je použití značkovací funkce $F(\mathbf{x}, t)$, pomocí níž jsou obě fáze vzájemně identifikovány. Pro hodnoty značkovací VOF funkce platí:

- $F(\mathbf{x}, t) = 1$ v každém bodě s polohou \mathbf{x} , který zaujímá *tekutina 1*,
- $F(\mathbf{x}, t) = 0$ v každém bodě s polohou \mathbf{x} , který zaujímá *tekutina 2*.

Z teorie dvoufázového proudění vyplývá, že více případů nastat nemůže. Značkovací VOF funkce je tedy funkcí skokovou, nespojitou, nabývající hodnot 0, 1.

Jak bylo řečeno výše, vlastnosti i proudové veličiny se skokově mění na rozhraní obecného tvaru, což je nezbytné vhodně zachytit. Při řešení modelu používajícího VOF funkci pomocí

metody konečných objemů jsou některé buňky výpočetní sítě vyplněny jednou, nebo druhou tekutinou. Proudění v celé oblasti je popsáno například pomocí jednofázového nelineárního systému Eulerových rovnic se zdrojovým členem \mathbf{f} , které lze pro proudění nestlačitelné nevazké tekutiny a při zanedbání energetické rovnice zapsat ve 2D jako

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.77)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u + \frac{\partial}{\partial x} (u^2 + \frac{p}{\rho}) + \frac{\partial}{\partial y} (uv) = f_x, \quad (2.78a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} v + \frac{\partial}{\partial x} (uv) + \frac{\partial}{\partial y} (v^2 + \frac{p}{\rho}) = f_y. \quad (2.78b)$$

Zároveň však obecně existují ve výpočtové oblasti buňky s rozhraním, které obsahují různé podíly obou tekutin. Lokální vlastnosti tekutin je vhodné definovat zobecněnými funkcemi, například hustotu pomocí hodnoty značkovací funkce

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_1 F(\mathbf{x}, t) + \rho_2 [1 - F(\mathbf{x}, t)]. \quad (2.79)$$

Metoda konečných objemů, která používá integrální tvary rovnic proudění, naštěstí umí pracovat s nehladkými i nespojitými funkcemi i veličinami. Používají se průměrovaná vyjádření veličin. Hustota v kontrolním objemu i

$$\rho_i = \rho_1 \widehat{F}_i + \rho_2 [1 - \widehat{F}_i], \quad (2.80)$$

kde \widehat{F}_i je hodnota VOF funkce průměrovaná na kontrolním objemu i o velikosti $|S_i|$

$$\widehat{F}_i = \frac{\iint_{S_i} F(\mathbf{x}, t) \, dS}{|S_i|}, \quad (2.81)$$

kteřá je v podstatě ekvivalentem objemového podílu *tekutiny 1* v příslušné buňce. Platí $\alpha_{1i} = \widehat{F}_i$ a $\alpha_{2i} = 1 - \widehat{F}_i$. Veličiny uplatňující se pouze na rozhraní, jako např. povrchové napětí, lze zahrnout pomocí delta funkce soustředěné v místě rozhraní.

Pro řešení proudění nevazkých nestlačitelných tekutin, popsaného výše uvedenými rovnicemi, lze v principu použít běžné metody. Avšak potíže mohou dělat velké rozdíly hustot aj. v sousedících buňkách sítě, které způsobují oscilace v řešení při použití numerických schémat vyššího řádu přesnosti. Proto se stále často užívají numerická schémata prvního řádu přesnosti, která tlumí oscilace svou vnitřní vazkostí, ale bohužel také přespříliš vyhlazují řešení.

Předpokládá se, že hodnoty značkovacích VOF a samozřejmě i LS funkcí jsou pouze pasivně unášeny spolu s prouděním rychlostí \mathbf{u} . Vývoj obecné značkovací funkce \tilde{F} je modelován pomocí advekční rovnice

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{F} + u \frac{\partial}{\partial x} \tilde{F} + v \frac{\partial}{\partial y} \tilde{F} = 0. \quad (2.82)$$

Pro případ proudění nestlačitelných kapalin lze tuto rovnici přeformulovat do konzervativního tvaru a je tedy rovnocenná zákonu zachování \tilde{F} . Z použití pravidla o derivaci součinu funkcí vyplývá

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{F} + \frac{\partial}{\partial x} (u \tilde{F}) + \frac{\partial}{\partial y} (v \tilde{F}) - \tilde{F} \left(\frac{\partial}{\partial x} u + \frac{\partial}{\partial y} v \right) = 0, \quad (2.83)$$

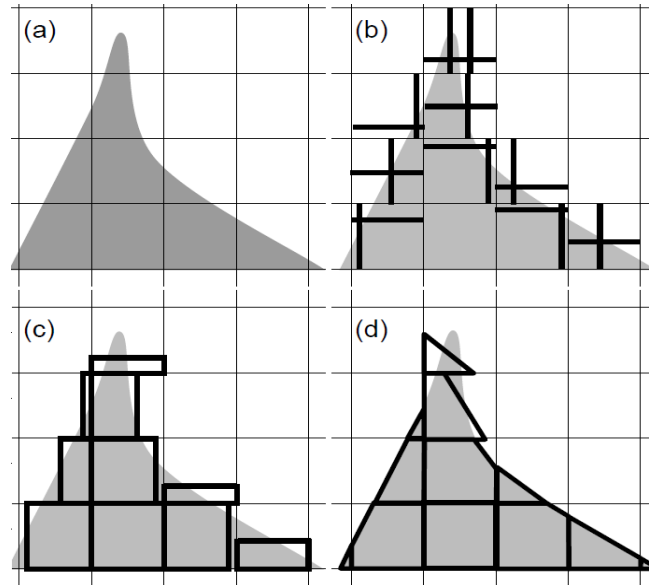
kde poslední závorka představuje rovnici kontinuity pro nestlačitelnou tekutinu (2.77). Alternativně lze advekční rovnici (2.82) odvodit s použitím materiálové derivace

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y}. \quad (2.84)$$

Tekutina je unášena proudem, přičemž si nese s sebou svůj identifikátor \tilde{F} . Hodnota značkovací funkce se tedy v Lagrangeově popisu nemění, tudíž musí platit

$$\frac{D}{Dt} \tilde{F} = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{F} + u \frac{\partial}{\partial x} \tilde{F} + v \frac{\partial}{\partial y} \tilde{F} = 0. \quad (2.85)$$

Zásadní úlohu při implementaci VOF metody má interpretace rozhraní na základě hodnoty VOF funkce \hat{F}_i , která slouží k nalezení tvaru rozhraní v buňce i . Používají se různé přístupy, některé ukazuje obr. 22.

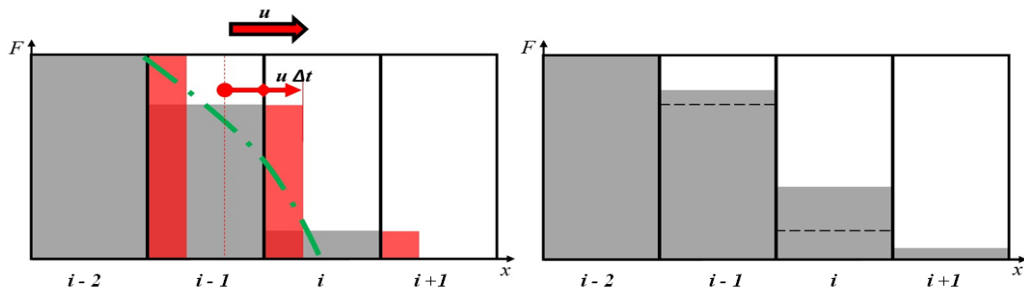


Obr. 22: Příklady VOF rekonstrukce rozhraní fyzického tvaru **a**: **b** – původní SLIC (Noh a Woodward [96]), **c** – zjednodušená SLIC (Hirt a Nichols [56]), **d** – PLIC. Obrázek převzat z [105].

V tomto odstavci budou ukázány dvě metody využívající geometrickou rekonstrukci rozhraní pomocí přímk „*simple line interface calculation*“ (SLIC) a „*piecewise linear interface calculation*“ (PLIC). Volba metody interpretace rozhraní má zásadní vliv na vývoj značkovací funkce, který bývá určován na základě rychlosti \mathbf{u} vypočtené z rovnic proudění například pomocí jednoduchých schémat typu dárce – příjemce s malou numerickou difuzí. Přímé použití klasických schémat pro výpočet advekce průměrované VOF funkce bez interpretace rozhraní v kontrolních objemech vede k velkým chybám a rychlému rozmazání rozhraní, jak dokumentuje následující obr. 23. Uvažujme několik kontrolních objemů stálé šířky Δx a výšky h s indexy i , na nichž je známé rozložení průměrované VOF funkce dané diskretními hodnotami \hat{F}_i^n a které zachycují skutečný tvar rozhraní vyznačený zelenou čerchovanou čarou. Dále mějme v celé oblasti konstantní advekční rychlost šíření rozhraní u ve směru x . Advekci ve směru y v našem výkladu pro jednoduchost neuvažujme. V levé části obr. 23 šedá barva představuje hodnotu VOF funkce \hat{F}_i^n . Červená tečkovaná čára ohraničuje oblast šířky $u \Delta t$ podléhající advekci. Červeně je vyznačená hodnota advekce VOF funkce velikosti $\hat{F} u \Delta t$. Pro i -tý kontrolní objem je změna hodnoty VOF funkce dána přitečenou částí (červeně v sektoru i) a odečtenou část (červeně v sektoru $i + 1$). V pravé části obr. 23 jsou šedivě znázorněny nové hodnoty VOF funkce

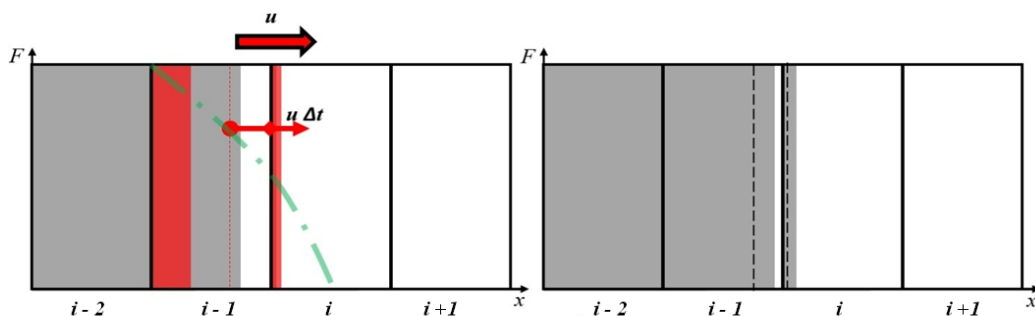
$$\hat{F}_i^{n+1} = \hat{F}_i^n - \frac{u \Delta t}{\Delta x} (\hat{F}_i^n - \hat{F}_{i-1}^n) \quad (2.86)$$

v porovnání se starými hodnotami vyznačenými přerušovanou čarou.



Obr. 23: Advekce značkovací VOF funkce při použití průměrné hodnoty VOF na kontrolních objemech vede k přílišné difuzi rozhraní. Šedivou barvou vlevo původní hodnoty VOF funkce, vpravo hodnoty po advekci.

Původní verze SLIC rekonstrukce rozhraní, [96], interpretovala rozhraní ve 2D jako rovnoběžky s hranami strukturované výpočetní sítě, jak ukazuje obr. 22b, přičemž autoři použili odděleně část rovnoběžnou s osou y pro advekci výhradně ve směru x a část rovnoběžnou s osou x pro advekci výhradně ve směru y . SLIC rekonstrukce byla později zjednodušena na jedinou rovnoběžku s hranou výpočetní sítě reprezentující rozhraní ve 2D, viz obr. 22c, [56]. Poloha objemu vyplněného tekutinou je určena tak, aby přiléhala sousedící buňce výpočetní sítě s největším podílem tekutiny, tedy nejvyšší hodnotou VOF funkce. Advekční schémata využívají zjednodušené SLIC rozhraní pro advekci v obou směrech x i y , přitom opět podléhá advekci jen oblast o šířce $u \Delta t$ (resp. $v \Delta t$ ve směru y), avšak navíc je zohledněna rekonstrukce. Změna hodnoty VOF funkce vlivem přitečení/odtečení ve směru x je tedy určena hodnotou VOF funkce v pásu $u \Delta t$ (červená přerušovaná čára), jak ukazuje obr. 24. Ve 2D se advekce VOF funkce řeší v obou směrech odděleně, přičemž pořadí se v každé iteraci obvykle obrací, např.: v sudých iteracích se napřed řeší advekce ve směru x , a poté ve směru y , a v lichých iteracích nejprve ve směru y , a poté ve směru x , viz [112]. Algoritmy založené na obou variantách SLIC rekonstrukce jsou přibližně stejně přesné. Dobře zachovávají objem tekutin, avšak evoluce VOF funkce vede k malým nefyzikálním poruchám celistvosti rozhraní.



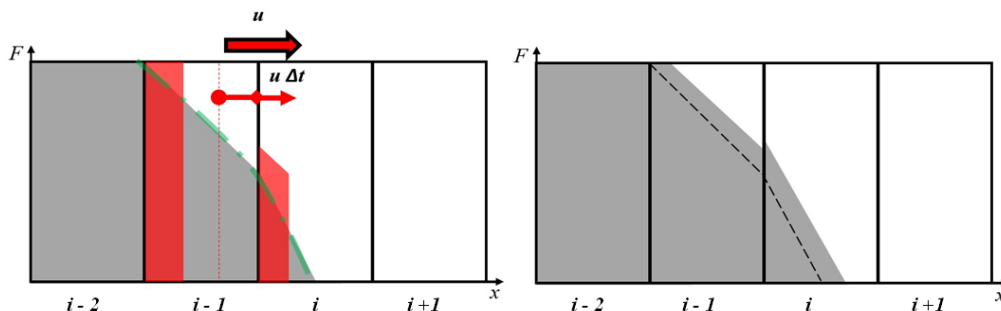
Obr. 24: Advekce VOF funkce při použití SLIC rekonstrukce rozhraní. Šedivou barvou vlevo původní hodnoty VOF funkce, vpravo hodnoty VOF funkce po advekci.

PLIC zachycuje rozhraní ve 2D jako jedinou rovnou čáru obecného sklonu, jak ukazuje obr. 22d. Určení tvaru rozhraní z hodnoty VOF funkce není tak prosté jako u SLIC rekonstrukce. Klíčové je přitom určení úhlu sklonu rozhraní, jehož normála bývá ztotožňována se směrem největšího růstu hodnoty VOF funkce, tedy $\mathbf{n} = \nabla F$. Například Rudman, [110], doporučuje pro výpočet normály na strukturované síti vzorec

$$n^x_{i,j} = \frac{1}{\Delta x} (\hat{F}_{i+1,j+1} + 2\hat{F}_{i+1,j} + \hat{F}_{i+1,j-1} - \hat{F}_{i-1,j+1} - 2\hat{F}_{i-1,j} - \hat{F}_{i-1,j-1}), \quad (2.87a)$$

$$n^y_{i,j} = \frac{1}{\Delta y} (\hat{F}_{i+1,j+1} + 2\hat{F}_{i,j+1} + \hat{F}_{i-1,j+1} - \hat{F}_{i+1,j-1} - 2\hat{F}_{i,j-1} - \hat{F}_{i-1,j-1}). \quad (2.87b)$$

Ze známého sklonu hraniční přímky a hodnoty VOF funkce $\hat{F}_{i,j}$ se určí poloha hranice v konkrétní buňce i,j , což je podrobně popsáno například v [9]. Advekce VOF funkce je opět určena rekonstruovanou hodnotou v pásu šířky $u \Delta t$, viz obr. 25. PLIC rekonstrukce je oproti SLIC přesnější a značně redukuje nefyzikální výtrysky tekutin. Její rozšíření do 3D je v porovnání se SLIC rekonstrukcí bohužel značně náročnější, protože existuje velké množství geometrických konfigurací při rozdělování 3D buněk plochou rozhraní. Pro šestistěnné elementy je tento problém ukázán například v [46], pro čtyřstěnné elementy v [15].



Obr. 25: Advekce VOF funkce při použití PLIC rekonstrukce rozhraní. Šedivou barvou vlevo původní hodnoty VOF funkce, vpravo hodnoty po advekci.

Potíže při použití VOF metody působí zahrnutí vlivu povrchového napětí, jehož výpočet pracuje s křivostí k , viz rovnice (2.1). Stanovit odpovídající hodnotu křivosti k nespojitého rozhraní nalezeného pomocí VOF metody je obtížné. Používá se například kvadratická náhrada tvaru rozhraní po částech, ze které se stanovuje hodnota k derivováním. Oproti SLIC rekonstrukci je snazší nalezení křivosti při použití PLIC rekonstrukce.

2.7.2 Metoda založená na značkovací funkci level set

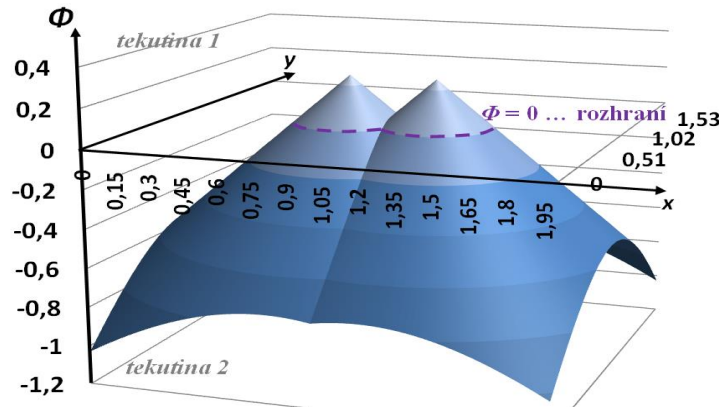
„Level set“ technika je velmi podobná technice VOF. Hlavní rozdíl je v použité značkovací funkci, která je v tomto případě spojitá, a dokonce hladká, což usnadňuje numerickou řešitelnost. První práci [99] využívající LS formulaci pro pohyblivá rozhraní publikovali Osher a Sethian v roce 1988. Použití LS funkce pro simulace rozvrstveného proudění nestlačitelných tekutin rozvinuli Sussman, Smereka a Osher, [123]. Navrhli značkovací LS funkci Φ jako funkci vzdálenosti od rozhraní doplněnou o znaménko identifikující tekutinu. Rozhraní je potom jednoznačně určeno nulovou hladinou LS funkce $\Phi = 0$. Použití hladkých funkcí usnadňuje aplikaci numerických schémat vyššího řádu přesnosti, například uvedení autoři prezentují použití „essentially nonoscillatory scheme“ (ENO) druhého řádu přesnosti, a to i při modelování proudění vzduchu a vody, tedy tekutin s velkým poměrem hustot (~ 1000). V [123] byly prezentovány výsledky numerických simulací dopadů kapek, srážek kapek, dále byl diskutován vliv poměru hustot tekutin na numerické simulace a zahrnuto povrchové napětí. Rozšíření LS techniky do 3D je relativně snadné.

Původní značkovací LS funkce je definovaná jako vzdálenostní funkce, pro níž platí

- $\Phi(x, t) = \min |\mathbf{x} - \mathbf{x}_{Int}|$ v každé poloze \mathbf{x} , který zaujímá *tekutina 1*, (2.88a)
- $\Phi(x, t) = -\min |\mathbf{x} - \mathbf{x}_{Int}|$ v každé poloze \mathbf{x} , který zaujímá *tekutina 2*, (2.88b)

kde \mathbf{x}_{Int} je poloha bodu nacházejícího se na rozhraní. Rozhraní se tedy nachází na nulové hladině vzdálenostní funkce, viz obr. 26. Velikost gradientu vzdálenostní LS funkce v celé oblasti je rovna jedné

$$\sqrt{\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial y}\right)^2} = 1. \quad (2.89)$$

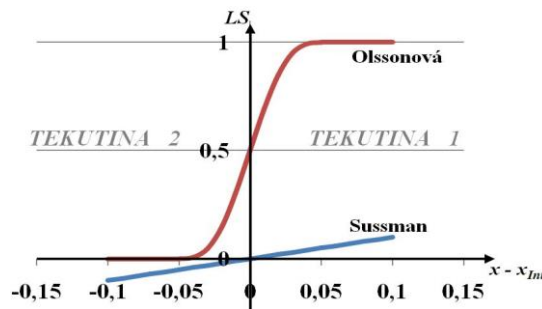


Obr. 26: Vzdálenostní „level set“ funkce pro 2D problém představující dva kruhové útvary s průnikem vyplněné tekutinou 1 a obklopené tekutinou 2.

Alternativně lze použít i jiná vyjádření LS funkce. Olssonová a kol., [97], [98], například použily vyhlazenou skokovou funkci

$$\Phi^*(x, t) = \begin{cases} 0; & \Phi(x, t) < -\varepsilon \\ 1; & \Phi(x, t) > \varepsilon \\ \frac{1}{2} + \frac{\Phi}{2\varepsilon} + \frac{1}{2\pi} \sin \frac{\Phi \pi}{\varepsilon}; & \text{jinak} \end{cases} \quad (2.90)$$

Rozhraní tekutin se nachází na hladině $\Phi^*(x_{Int}, t) = 0,5$. Pro tuto LS funkci obecně neplatí rovnice (2.89), velikost gradientu není konstantní a jeho velikost na rozhraní závisí na volbě parametru ε , který představuje poloměr přechodové oblasti. $\Phi^*(x, t)$ tedy není funkce vzdálenostní, ale má spíš svým charakterem blíže k objemovému podílu α_1 při rozvrstveném proudění. Rozdíl mezi funkcemi (2.88) a (2.90) ukazuje obr. 27.



Obr. 27: Porovnání vzdálenostní LS funkce ([123], modře) a LS funkce s vyhlazeným skokem ([97] pro $\varepsilon = 0,05$, červeně).

Proudění tekutin se řeší analogicky jako při použití VOF funkcí. Hustotu opět můžeme definovat pomocí zobecněných funkcí, například prostřednictvím Heavisideovy skokové funkce

$$\rho = \rho_1 H(\Phi(x, t)) + \rho_2 [1 - H(\Phi(x, t))], \quad (2.91)$$

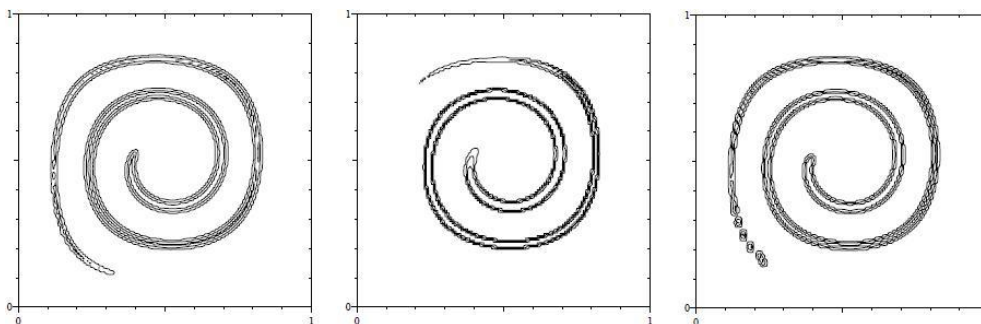
nebo v případě potřeby hladce za přímého použití vyhlazené skokové funkce

$$\rho = \rho_1 \Phi^*(x, t) + \rho_2 [1 - \Phi^*(x, t)]. \quad (2.92)$$

Právě použití hladkých funkcí hustoty oddaluje vznik oscilací při použití schémat vyššího řádu přesnosti pro numerické řešení rovnic proudění a pro výpočet advekce značkovací funkce danou

rovnici (2.82). Na druhou stranu je však dominantním faktorem při ztrátě konzervativity metod založených na LS značkovací funkci. Pro širokou přechodovou oblast (velké ε) se totiž zvětšuje nesoulad mezi ostře definovaným rozhraním tekutin a zvolna se měnící hustotou. Nekonzervativita LS technik je dále diskutována například v práci [145], kde autoři navrhnou způsob jak zajistit zachování hmoty.

Vlastnosti VOF a LS funkcí někteří autoři kombinují do hybridních metod, [122]. Nebo VOF a LS metody se doplňují o metody s pohyblivými značkovači sledujícími rozhraní, [34]. Obr. 28 ukazuje porovnání výsledků simulací deformace asymetricky umístěné kapky v prázdném okolí vlivem vířivého rychlostního pole, [108]. Zcela vlevo je tvar oblasti vyplněné tekutinou po deformaci vypočtený pomocí „*front-tracking*“ metody, tedy určený pomocí nehmotných značkovacích částic pohybujících se spolu s rozhraním tekutin. Tento výsledek je považován za nejpřesnější z prezentovaných. Uprostřed je výsledek simulace pomocí LS metody a vpravo potom výsledek při použití VOF metody s PLIC geometrickou rekonstrukcí. Rider a Kothe ukázali na výsledcích této úlohy, že objem tekutiny vypočtený pomocí VOF metody se prakticky nemění, ale při použití LS metody bylo během této simulace ztraceno $\sim 6,5\%$ původního objemu kapky.



Obr. 28: Deformace kapky vířivým rychlostním polem. Zleva: metoda s pohyblivými značkovacími částicemi, LS metoda a PLIC-VOF metoda. Převzato z [108].

2.7.3 Sedmirovnicové dvoutekutinové modely

Nyní přejdeme k eulerovským dvoufázovým modelům založených na průměrovaných rovnicích a rozebereme některé z nich. Nejkomplexnější dvoutekutinový model („*Two-Fluid Model*“, zkr. TFM) je model sedmirovnicový skládající se z rovnic kontinuity, pohybové rovnice a energetické rovnice pro obě fáze, ke kterým je navíc přidružena transportní rovnice další proměnné. Nejčastěji se jedná o advekční rovnici objemového podílu jedné z fází. Ostatní eulerovské modely lze odvodit ze sedmirovnicového modelu přijetím zjednodušujících předpokladů, resp. nahrazením některých rovnic rovnicemi s průměrovanými veličinami pro směs jako celek, nebo jejich úplným vynecháním.

Historicky vznikly však sedmirovnicové TFM z výchozího šestirovnicového TFM (2.45) – (2.47), který byl odvozen průměrovaním v odstavci 2.4. V dalším zápisu jsou pro jednoduchost vynechány stříšky značící průměrované veličiny a je zaveden vztah představující rovnost tlaků na rozhraní tekutin $p_1(x, \alpha_1, t) = p_2(x, \alpha_1, t) = p_{int}$, s tímto předpokladem pracuje většina dnes používaných dvoutekutinových modelů. Případný rozdíl tlaků p_1 a p_2 v tekutinách napříč rozhraním lze modelovat pomocí tlakového rozdílu Δp .

Průkopníci modelování dvoufázového proudění se chtěli vypořádat se ztrátou hyperbolicity šestirovnicového TFM. Snažili se přitom uzavřít systém dalšími rovnicemi, zpočátku algebraickými, což nevedlo k úspěchu. Postupně našli diferenciální rovnici pro $\Delta p = p_2 - p_1$, na jejíž základě byl odvozen, viz [7], vztah

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 + u_2 \frac{\partial}{\partial x} \alpha_2 \approx \frac{p_2 - p_1}{\tau_2}, \quad (2.93)$$

kde τ_2 je fenomenologický parametr závisející na režimu dvoufázového proudění. Tento vztah byl převratný, neboť dával do souvislosti pohyb rozhraní s rozdílem tlaků tekutin na obou jeho stranách. V [7] je dále ukázáno, že parametr τ_2 má význam relaxačního času pro dosažení tlakové rovnováhy obou fází.

První těchto poznatků úspěšně využili v praxi Baer a Nunziato, kteří použili sedmou advektivní rovnici pro objemový podíl menšinového tuhého granulótu

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 + u_{Int} \frac{\partial}{\partial x} \alpha_2 = f \quad (2.94)$$

v práci „*A two phase mixture theory for the deflagration to detonation transition in reactive granular materials*”, [5]. Na pravé straně rovnosti (2.94) je relativně složitý algebraický zdrojový člen f , který zahrnuje efekty stlačitelnosti dvoufázového proudění plynu s granulátem při explozi. Navíc autoři použili upravený tvar dvoutekutinového modelu

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_1 \rho_1 u_1) = 0, \quad (2.95a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_2 \rho_2 u_2) = 0. \quad (2.95b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x} [\alpha_1 (\rho_1 u_1^2 + p_1)] = p_{Int} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}, \quad (2.96a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial x} [\alpha_2 (\rho_2 u_2^2 + p_2)] = -p_{Int} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}. \quad (2.96b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 e_1) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_1 \rho_1 e_1 u_1 + \alpha_1 p_1 u_1) = p_{Int} u_{Int} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}, \quad (2.97a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 e_2) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_2 \rho_2 e_2 u_2 + \alpha_2 p_2 u_2) = -p_{Int} u_{Int} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}, \quad (2.97b)$$

kde nahradili časové derivace objemového podílu s využitím rychlosti šíření rozhraní u_{Int} figurující už ve vztahu (2.94). Toto nahrazení lze provést po dosazení vztahu (2.94) zcela přesně při $f = 0$. Výsledný systém sedmi rovnic je nekonzervativní kvůli advektivní rovnici pro objemový podíl a nekonzervativním členům na pravé straně pohybových rovnic a rovnic energie.

Zrekapitulujme neznámé veličiny: $\alpha_1, \alpha_2, \rho_1, \rho_2, u_1, u_2, p_1, p_2, e_1, e_2, u_{Int}, p_{Int}$, kterých je celkem 12. Je tedy nezbytné systém doplnit o dalších pět rovnic, což lze udělat různými způsoby. Baer a Nunziato konkrétně zahrnuli navíc do modelu rovnost pro objemové podíly fází (2.14), pro obě tekutiny po jedné vhodné stavové rovnici a předepsali vztahy modelující rychlost šíření rozhraní a tlak na rozhraní

$$u_{Int} = u_2, \quad (2.98a)$$

$$p_{Int} = p_1. \quad (2.98b)$$

Obecně je tedy použit předpoklad, že rozhraní se šíří rychlostí méně stlačitelné fáze a tlak na rozhraní je určen tlakem více stlačitelné fáze. Výsledný sedmírovnicový model je hyperbolický s reálnými vlastními čísly: $u_2, u_1 - c_1, u_1, u_1 + c_1, u_2 - c_2, u_2, u_2 + c_2$, počáteční úloha je tedy dobře podmíněná. Proto je práce [5] popisující sedmírovnicový model velice důležitá pro rozvoj dvoutekutinových modelů a je dodnes často citovaná.

Pro zavedení sedmé rovnice sice chybí teoretické opodstatnění, ale je považována za jeden z konstitutivních vztahů uzavírajících systém rovnic. Prostřednictvím tohoto vztahu je dosaženo hyperbolicity systému. Advektivní rovnice (2.94) bývá používána ve tvaru s nulovou pravou stranou.

Teoretickou oporou k tomuto kroku je analogie k metodám pro simulace rozvrstveného dvoufázového proudění, viz odstavec 2.7.1. Pokud nedochází k výměně hmoty, musí zůstat při sledování jednotlivých částic proudící tekutiny v Lagrangeově popisu zachován značkovač identifikující tekutinu, a tedy $D \tilde{F} / D t = 0$. Na molekulové úrovni je tímto značkovačem funkce α nabývající hodnot 0,1. Podle toho lze rozlišit, o jakou tekutinu se jedná. Adaptací této myšlenky na makroskopickou úroveň dostáváme advekční rovnici pro objemový podíl s nulovou pravou stranou

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 + u_{Int} \frac{\partial}{\partial x} \alpha_2 = 0. \quad (2.99)$$

Tuto rovnici bez pravé strany použili rovněž Saurel a Abgrall v [111], přičemž navrhli odlišný způsob uzavření systému rovnic. Místo vztahů (2.98) definovali

$$u_{Int} = \frac{\alpha_1 \rho_1 u_1 + \alpha_2 \rho_2 u_2}{\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2}, \quad (2.100a)$$

$$p_{Int} = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2. \quad (2.100b)$$

Poznamenejme, že existují i jiné způsoby těchto uzavření. Výsledný nekonzervativní systém pro dvě stlačitelné tekutiny je rovněž hyperbolický, v práci [111] jsou výsledky analýzy jeho matematických vlastností v prostoru primitivních proměnných s vlastními čísly $u_{Int}, u_1 - c_1, u_1, u_1 + c_1, u_2 - c_2, u_2, u_2 + c_2$. Pomocí této základní verze sedmirovnicového TFM se ale hůře simulují problémy se silnými rázy a tlakovými pulzacemi, jak je pojednáno v [111]. Systém rovnic (2.99), (2.95), (2.96), (2.97) s uzavřením (2.100) byl řešen pomocí Godunovy metody a HLL schématu a testován pro dvoutekutinové úlohy na problému vodovodního kohoutku.

Oba uvedené sedmirovnicové modely dávají totožné výsledky pro směsi v tlakové a rychlostní rovnováze. Patří do skupiny tzv. dvoutekutinových modelů se dvěma tlakovými poli („*two-fluid two-pressure model*“), jsou hyperbolické s relativně dobrými matematickými vlastnostmi. Zvládnou si poradit i s vyššími gradienty tlaku a objemového podílu bez falešných oscilací. Rovnice nemají konzervativní obdobu.

Poznamenejme, že ze sedmirovnicového modelu s advekční rovnicí pro objemový podíl byly vyvinuty modely uzpůsobené pro řešení rozvrstvených proudění (pětirovnicový model, [94], a třírovnicový model, [27], který je implementovaný v odstavci 3.3 této práce).

2.7.4 Šestirovnicové dvoutekutinové modely

Příkladem šestirovnicového TFM je výchozí model (2.45) – (2.47) odvozený v odstavci 2.4. Šestirovnicové TFM umožňují simulace dějů, kdy obě fáze jsou v nerovnováze a to jak z hlediska mechaniky, tak i termodynamiky. Bývají používány, především pro simulace v jaderném průmyslu, kde se využívá právě jejich schopností dobrého modelování nerovnovážných dějů. Díky jejich schopnostem je možné zahrnout výměnu různých veličin, modelovanou pomocí zdrojových členů různých typů, které lze například kategorizovat podle matematické formulace:

- **Bez derivací:** jedná se o zdrojové algebraické členy, většinou empirického původu odvozené pro ustálený experiment, které mívají velmi omezený rozsah platnosti, problematický je především přechod do jiného proudového režimu. Použití jakýchkoliv přídavných členů mimo rozsah jejich platnosti je přitom často hlavním zdrojem chyb numerických simulací dvoufázového proudění.
- **S derivacemi prvního řádu:** členy mohou obsahovat prostorové i časové derivace. Jedná se většinou o vztahy s teoretickým základem doplněným a podpořeným experimentálně. Vztahy mohou zahrnovat i vliv blízkého okolí, nebo historie. Protože obsahují derivace, ovlivňují matematický charakter systému a jeho strukturu. Toho se často používá pro konstrukci zcela umělých členů, jejichž funkcí je právě zlepšení matematických vlastností modelu. Příkladem

takového umělého členu je tlak rozhraní („*interfacial pressure*“), viz rovnice(3.9) a (3.10), doplňující čtyřrovnícový a šesterovnícový TFM ve třetí kapitole této práce.

- **S derivacemi druhého řádu:** tyto přidavné vztahy pro modelování fyzikálních dějů se používají zřídka. Většinou je to praktickým důsledkem nedostatečné přesnosti numerického řešení dvoufázových modelů, při kterém se používají schémata prvního řádu přesnosti, či numerické stabilizace, které neumožňují přesné určení derivací vyšších řádů. Častěji se lze setkat se stabilizačními členy umělé vazkosti pro zlepšení chování numerického řešení.

Poznamenejme, že výše diskutované přidavné členy nejsou výsadou jen šesterovnícových TFM, ale používají se obecně při modelování dvoufázového proudění.

Standardně používaný je šesterovnícový dvoutekutinový model s jedním tlakovým polem. Tento model s tlakovou rovnováhou je v základním tvaru nehyperbolický s mírně komplexními vlastními čísly, jak je ukázáno v [120]. Pro řešení tedy není zcela vhodný, protože dochází k rozvoji nestabilit, navíc neřeší korektně šíření tlakových vln. Pro jeho numerické řešení nelze přímo využít řešiče hyperbolických rovnic. Přesto model stabilizovaný umělou numerickou viskozitou používal program RELAP5 (kód pro analýzu chování a bezpečnosti jaderných elektráren, USA).

Případně lze zlepšit vlastnosti tohoto modelu pomocí přidavných členů s derivacemi prvního řádu (tlak rozhraní, virtuální hmota), které mění jeho strukturu a jejichž pomocí je dosaženo hyperbolicity. Například v programu CATHARE (kód pro řešení termohydrauliky a bezpečnosti jaderných elektráren s PWR a BWR bloky, Francie) byl bez zjevného fyzikálního opodstatnění přidán člen tlaku rozhraní jen pro dosažení hyperbolicity. Takový model je řešitelný pohodlněji, například podobným způsobem, jakým řešili sedmivnícový model Saurel a Abgrall, [143]. Šesterovnícový TFM s jedním tlakovým polem je podrobněji rozebrán, včetně uzavíracích vztahů a numerického řešení vybraných úloh, v odstavci 3.2.

Dalšími zjednodušeními lze potom získat menší modely, [45]. Například pětivnícové dvoutekutinové modely s jedním tlakovým polem, kde jsou uvažovány tekutiny v termodynamické rovnováze a obě energetické rovnice jsou nahrazeny jedinou energetickou rovnicí pro směs jako celek, viz např. [85]. Případně byly odvozeny i jednotekutinové dvoufázové modely s mechanickou rovnováhou, tedy jedinou pohybovou rovnicí, a termodynamickou nerovnováhou. Tyto modely ale nejsou příliš realistické a nedosahují zcela uspokojivých výsledků.

Nebo čtyřrovnícové modely s jedním tlakovým polem používané za předpokladu, kdy není potřeba řešit termodynamické jevy. Obě energetické rovnice jsou v takových případech vynechány a vznikne nejjednodušší dvoutekutinový model. Tento model a jeho řešení je podrobně rozebráno v odstavci 3.1, případně jej lze najít v odborné literatuře, například: [18], [130], [36], [100].

2.7.5 Modely směsi

Modely tohoto typu již nejsou podle obvyklé terminologie označovány jako dvoutekutinové. Precizní kategorizace se řídí podle počtu pohybových rovnic fází. U modelů směsi se již nepoužívají dvě pohybové rovnice pro každou fázi, ale jediná pohybová rovnice pro směs. Samozřejmě že i zde existují jakési přechodové modely, které uvažují pouze jednu z tekutin ve stavu saturace. Ty potom popisují pohyb směsi například pomocí jedné pohybové rovnice pro směs navíc doplněnou oddělenou pohybovou rovnicí pro druhou fázi.

Nejčastěji se setkáváme se čtyřrovnícovými modely směsi obsahující rovnice například ve tvaru:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_m u_m) = 0, \quad (2.101)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m u_m) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_m u_m^2 + p) = 0, \quad (2.102)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m e_m) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_m e_m u_m + p u_m) = 0. \quad (2.103)$$

První tři rovnice mají tvar systému Eulerových rovnic v 1D, kde jsou použity hodnoty primitivních veličin pro směs jako celek, viz odstavec o vlastnostech směsí 2.6 v této kapitole práce: $\rho_m = \alpha_1 \rho_1 + (1 - \alpha_1) \rho_2$, $u_m = \frac{\alpha_1 \rho_1 u_1 + (1 - \alpha_1) \rho_2 u_2}{\rho_m}$, $e_m = \frac{\alpha_1 \rho_1 e_1 + (1 - \alpha_1) \rho_2 e_2}{\rho_m}$, případně lze při vyšším stupni zjednodušení pracovat s některými z těchto veličin přímo jako s primitivními proměnnými. Pro nalezení správných hodnot pro směs je však klíčová znalost poměru obou fází, který definuje hodnota objemového podílu α_i . Proto je systém doplněn o čtvrtou rovnici, ze které je objemový podíl fází dopočten. Buďto bývá při saturaci *tekutiny 2* používaná rovnice kontinuity první fáze

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \rho_1 u_1) = 0, \quad (2.104a)$$

nebo rovnou nekonzervativní advekční rovnice pro objemový podíl

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 + u_2 \frac{\partial}{\partial x} \alpha_2 = 0. \quad (2.104b)$$

Hlavní myšlenkou modelů směsi je však dodatečné zavedení mechanické nerovnováhy představované různými rychlostmi obou tekutin, například nenulovým skluzem tekutin $S = u_2/u_1$. Mnoho informací o modelech směsi je například v [84]. Rozdíl rychlostí bývá zaveden koncepcí relativních rychlostí, které bývají obvykle určovány pomocí algebraických vztahů, podložených empirickými výsledky. Takové vztahy mají samozřejmě omezený rozsah platnosti a silně závisejí na režimu proudění, viz [53]. Podle vyjádření nerovnoměrností rychlostí tekutin potom rozlišujeme podmodely:

- „*drift-flux model*“ (DFM), [147]
- „*mixture model*“, [65]
- „*algebraic-slip model*“ (ASM), [102]
- „*suspension model*“, „*local equilibrium model*“, atd.

Modely směsi jsou velmi úspěšné, o čemž svědčí jejich stálé používání, ačkoliv „*drift-flux model*“ prezentovali Zuber a Findlay už v roce 1965. Velmi často bývají užívány i pro řešení termohydrauliky jaderných systémů, a to i přes jejich omezené schopnosti řešit nerovnovážné děje, např. [54].

Manninen a kol., [84], například ukázali modelování vzájemného pohybu tekutin následujícím způsobem. Zavedli relativní rychlost („*drift velocity*“) sekundární fáze vůči směsi

$$u_{dr,2} = u_2 - u_m \quad (2.105)$$

a relativní rychlost mezi fázemi

$$u_{21} = u_2 - u_1, \quad (2.106)$$

pro kterou platí rovnice vyvozená z teorie obtékání částice tekutinou

$$u_{21} = \frac{(\rho_2 - \rho_m) d_2^2}{18 \eta_1 f_D} a, \quad (2.107)$$

kde $f_D(C_D, Re_p)$ je odporová funkce, a sekundární zrychlení částic určené vztahem

$$a = -u_m \frac{\partial u_m}{\partial x} - \frac{\partial u_m}{\partial t}. \quad (2.108)$$

Tento model byl použit například pro numerické simulace nanoproudění heterogenní směsi s částicemi [91] a je implementován rovněž ve výpočtovém systému ANSYS Fluent, kde například posloužil pro predikci koroze stěn v potrubním systému vlivem působení bublinek oxidačního plynu rozptýlených v tekutině [31].

Modely směsi jsou oproti TFM značně jednodušší, protože jediná sada rovnic slouží pro proudění celé směsi. Vyhnete se tak potřebě množství konstitutivních vztahů. Model obsahuje méně rovnic a dobře se řeší, výpočetní náročnost není o mnoho vyšší, než u jednofázového systému, což je značná úspora oproti TFM. Vzhledem ke své koncepci je však použitelný pouze na systémy s vyšší mírou mechanického sdružení obou systémů, tedy kdy mechanická odezva obou fází je podobná, relativní dynamika není moc velká a také relativní rychlosti jsou spíše malé. Pro správné modelování výrazně odlišně se pohybujících fází je nezbytné použít TFM. Přesto tento model do určité míry vystihuje autonomní dynamiku obou tekutin a díky čtvrté rovnici (2.104) vypočítává objemový podíl fází. Modely směsi tedy mají určitá omezení, ale při správném použití jsou až překvapivě přesné a velmi efektivní.

2.7.6 Homogenní rovnovážný model

Homogenní model („*Homogeneous Equilibrium Model*“, zkr. HEM, [120] a [89]) se používá pro homogenní směsi, které jsou v mechanické i termodynamické rovnováze. Znamená to, že jsou výborně promíchané, částice jsou pouze malé a obě tekutiny se pohybují společně, s nulovým skluzem rychlostí, jsou mechanicky zcela sdružené. Tepelná výměna probíhá okamžitě a nedochází k žádným chemickým reakcím.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_m u_m) = 0, \quad (2.109)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m u_m) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_m u_m^2 + p) = 0, \quad (2.110)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m e_m) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_m e_m u_m + p u_m) = 0. \quad (2.111)$$

Systém rovnic je ekvivalentní systému jednofázového proudění stlačitelné nevazké tekutiny, pouze jsou použity hodnoty veličin pro směs jako celek. Z pohledu metod numerického řešení je tedy homogenní rovnovážný model rovnocenný jednofázovému modelu, jehož řešení je dobře zvládnuté, např. [132]. Nejproblematictější částí úlohy je tak stanovení vhodných konstitutivních vztahů uzavírajících model (např. stavová rovnice pro směs, rychlost zvuku ve směsi), viz odstavec o vlastnostech směsí 2.6. Velikost rychlosti zvuku ve směsi se může úlohu od úlohy velmi lišit. Použité metody numerického řešení pro obecné aplikace si potom musejí poradit prakticky s jakýmkoliv Machovým číslem. Obdobné problémy mohou však nastat například i při řešení modelů směsi. Vhodnou volbou mohou být předpokláděné řešiče stlačitelných proudění použité např. v [17]. Metody numerického řešení stlačitelného proudění jsou sice určeny především pro vyšší hodnoty Machova čísla, ale díky předpokládačům mohou být i dostatečně přesné a efektivní pro pomalá proudění, tj. proudění s nízkými Machovými čísly.

HEM se často používá pro řešení homogenního proudění v potrubních systémech, např.: homogenní proudění směsi tekutiny s rozptýlenými bublinami, proudění v tepelných výměnících, kritické proudění v potrubích, aj. Ale nelze jej použít pro proudění se silnější nerovnováhou, např.: částicové proudění, „*annular flow*“, nebo „*slug flow*“ režimy. V případě potřeby je možné drobné nehomogenity zahrnout do výsledků dodatečně pomocí přídatných vztahů, například pomocí skluzu rychlosti, analogicky jako u modelů směsi. Je však důležité si uvědomit, že homogenní model již nepracuje s koncepcí objemových podílů. Poměr fází je v celé výpočtové oblasti považován za stálý.

Výše byly uvedeny jen nejznámější eulerovské modely: sedmivrstvicový TFM, šestivrstvicový TFM, modely směsi a homogenní rovnovážný model. Existuje však nepřeberné množství dalších modelů, jak bylo průběžně připomínáno. Ve speciálnějších aplikacích bývají modely doplňovány o další členy či rovnice, např. populační modely kapek, viz [50]. V důsledku se lze setkat i s vícerovnicovými modely.

2.7.7 Eulerovy – Lagrangeovy modely

Základem další velké třídy modelů je sledování pohybu jednotlivých částic rozptýlených v tekuté fázi. Tekutá fáze bývá označována také jako nosná, primární, či kontinuum a rozptýlená fáze jako sekundární, či prostě částicová. Aby tvořily částice jedinou fázi, musí mít stejnou mechanickou odezvu. To platí pro kulové částice ze stejného materiálu o jednotném průměru d_p , který implikuje stejný povrch, součinitel odporu, hmotnost, atd. Pohyb tekutiny bývá řešen numerickými metodami v Eulerově popisu, avšak pohyb jednotlivých částic je řešen zvlášť v Lagrangeově popisu. Odtud obecný název modelů, také označovaných jako modely rozptýlených, či diskretních částic („Discrete Phase Model“, zkr. DPM).

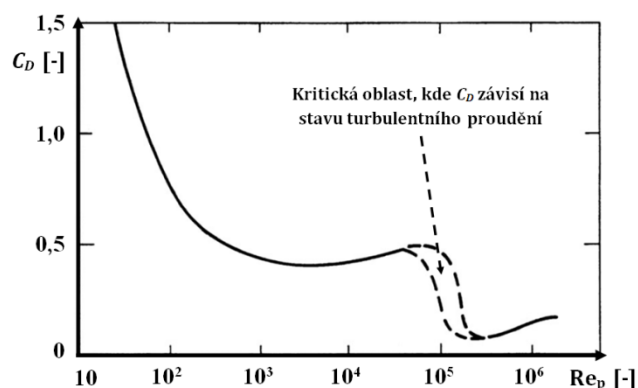
Myšlenka DPM je prostá. Na osamocenou částici působí při obtékání tekutinou aerodynamické síly. První zavedení takových sil je známo už od Newtona, viz odstavec 2.2, který formuloval vzorec pro odporovou sílu

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{2} C_D \rho_f S_p |\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p| (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p). \quad (2.2)$$

Pro kulové částice lze formulovat pohybovou rovnici vlivem odporové síly ve tvaru

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{3}{4} \frac{m_p C_D \rho_f}{d_p \rho_p} |\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p| (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p), \quad (2.5)$$

kde veličiny indexované p se vztahují k částicové fázi a veličiny indexované f k fázi nosné, C_D je součinitel odporu. Později bylo experimentálně zjištěno, že pro Stokesovo proudění s malým Reynoldsovým číslem $Re_p < 1$ je koeficient odporu kulové částice nepřímo úměrný Re_p a klesá až do oblasti $Re_p \approx 1000$, za kterou je C_D téměř konstantní. Další razantní pokles C_D souvisí s přechodem mezní vrstvy do turbulence v oblasti $Re_p \approx 300\,000$. Tato závislost je naznačena na obr. 29.



Obr. 29: Závislosti odporového součinitele C_D kulové částice na Reynoldsově čísle částice Re_p , upraveno z [12].

Koeficient odporu bývá modelován různými způsoby, nejčastěji jako závislost $C_D(Re_p)$. Jeden z prvních modelů pro stanovení odporového součinitele je nazýván podle autorů Schillera a

Naumanna, kteří jej prezentovali v roce 1935, [115],

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_p} (1 + 0,15 \text{Re}_p^{0,687}); & \text{Re}_p \leq 1000 \\ 0,44 & \text{Re}_p > 1000 \end{cases} . \quad (2.112)$$

V případě potřeby bývají v simulacích modelovány i další druhy sil působících na částici, podrobnější popis včetně modelových rovnic lze najít např. v [12], [95]. Kromě uvedené odporové síly („*drag*“) jsou to například:

- **Vztlaková síla („*lift*“, F_L)**, která se dále rozlišuje na tzv. Saffmanovou vztlakovou sílu způsobenou rozložením tlaku při nesymetrickém obtékání částice a Magnusovou vztlakovou sílu způsobenou rotací částice.
- **Archimédova vztlaková síla („*buoyancy*“, F_B)**, jež je způsobená gradientem hydrostatického tlaku.

Pomocí přídatných členů lze modelovat i výměnu hmoty mezi fázemi vlivem termodynamických, nebo chemických procesů. Pro kulové částice jsou dnes k dispozici vztahy dobře modelující uvedené interakce. Existují korekce pro nekulové útvary, ale takové případy jsou významně složitější. Pokud jsou částice tvořeny tekutinou, tedy jedná se o kapky nebo bubliny, mohou se deformovat a mít vnitřní proudění s vlastní dynamikou.

Celkové silové působení na částici je dáno superpozicí jednotlivých sil. Výslednice sil určuje zrychlení částice, jak ukazuje druhý Newtonův zákon

$$m_p \mathbf{a}_p = m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_B + \dots + \mathbf{G} . \quad (2.3)$$

Dále stačí řešit kinematiku soustavy částic v čase integrací pohybových rovnic.

Jednosměrná sdružení fází nezachovávají hybnost celého systému, protože hybnost částic se mění vlivem působících silových interakcí, avšak tyto interakce neovlivňují pohyb nosné tekutiny. Za určitých podmínek může být tato chyba zanedbatelná a nevádí, [19] uvádí kritérium pro objemový podíl diskretních částic $\alpha_p < 10^{-6}$. Obousměrné sdružení fází respektuje i vliv částic na pohyb tekutiny, které se obvykle modeluje zahrnutím příslušného zdrojového členu do rovnic proudění, např. pro odpor použijeme

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_f u_f) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_f u_f^2 + p) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_f u_f v_f) = - \\ - \frac{3}{4} \frac{C_D \rho_f}{d_p} |u_f - u_p| (u_f - u_p) \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p), \end{aligned} \quad (2.113a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_f v_f) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_f u_f v_f) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_f v_f^2 + p) = - \\ - \frac{3}{4} \frac{C_D \rho_f}{d_p} |v_f - v_p| (v_f - v_p) \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p), \end{aligned} \quad (2.113b)$$

při obvyklé bodové formulaci DPM. Uvažují se malé částice ($d_p \ll \Delta x$), jejich reprezentace je tzv. bodová. V jediném bodě \mathbf{x}_p výpočtové oblasti je soustředěna celá částice (hmotnost, kinematické veličiny, aj.). V pohybové rovnici tekutiny se zdrojový odporový člen uplatní pouze v místě částice, proto je násoben delta funkcí soustředěnou v bodě \mathbf{x}_p . Stejným způsobem jako byl zahrnut vliv odporové síly do rovnic (2.113), by byl zahrnut i vliv dalších sil. DPM modifikované pro objemnější útvary umožňují modelování částic větších rozměrů ($d_p < \Delta x$), které jsou reprezentovány složitějšími distribučními funkcemi nahrazujícími delta funkce v rovnicích (2.113). Při obtékání částic velikosti $d_p > \Delta x/10$ vznikají rozsáhlejší proudové struktury, které klasická

DPM nepostihuje a musí být upravena. V případě použití metody konečných objemů pro numerické řešení rovnic proudění je zdrojový člen určen součtem celkového silového účinku všech částic obsažených v příslušném kontrolním objemu (tzv. „*particle source in cell method*“). Poznamenejme, že v uvedeném výkladu je drobný nesoulad. Uvažujeme kulové částice, ale zároveň rovinné proudění a dvoufázový problém formulujeme jako dvojrozměrný. Pro 2D úlohy se nepoužívá degradace na kruhové částice.

Pokud je koncentrace částic vyšší, je vyšší rovněž pravděpodobnost jejich srážek. Dobré modely s tzv. čtyřsměrným sdružením umí modelovat i jejich vzájemné srážky. Pomocí modelů s komplexní interakcí lze modelovat i systémy s velmi vysokou koncentrací částic sekundární fáze ($\alpha_p \rightarrow 1$), například: fluidizaci (obr. 9), sedimentaci nebo simulace obrábění povrchů. V takových případech by DPM bez kolizního modelu zcela selhala, neboť nezakazuje současný výskyt více částic v jednom bodě, a proto nedokáže postihnout reálné chování takových systémů. Navíc by snadno mohlo dojít k nesmyslnému nahromadění částic $\alpha_p > 1$ v důsledku jejich nefyzikální lokální kumulace. V odstavci 1.2.3 byly stručně zmíněny dva modely srážek „*hard-sphere*“ a „*soft-sphere*“, více o nich lze najít například v [23]. Srážkové algoritmy samozřejmě dělají výpočet náročnější a je na zvážení, zda je v modelu použit. Musejí totiž nejprve efektivně identifikovat částice, které se v daný čas dostanou do takové polohy, že dochází k vzájemné srážce. A potom je třeba řešit jejich vzájemnou interakci pomocí kolizního modelu, což např. při použití „*soft-sphere*“ modelu vyžaduje podrobné modelování srážky v čase prodlužující výpočet.

Crowe a kol., [19], doporučují použít čtyřsměrné sdružení pro $\alpha_p > 10^{-3}$, což je přibližná hranice mezi tzv. zředěným prouděním („*dilute*“) a zhuštěným prouděním („*dense*“). Alternativním náhledem je poměr charakteristických časů dvoufázového systému τ_p/τ_c , kde τ_p je relaxační čas částice definovaný rovnicí (2.7) a τ_c je typický čas mezi dvěma následujícími srážkami částic. Proudění s částicemi lze považovat za zředěné, pokud je pro jeho dynamiku dominantní interakce s prouděním a vliv srážek je malý ($\tau_p/\tau_c < 1$), naopak dynamiku zhuštěného proudění silně ovlivňují srážky částic ($\tau_p/\tau_c > 1$). Pro nezbytné použití čtyřsměrného sdružení částic bývá uváděno kritérium $\alpha_p < 0,1$.

Korektní výpočet proudového pole při vyšších objemových podílech částic vyžaduje přechod od rovnic popisujících jednofázové proudění k rovnicím násobeným objemovým podílem $\alpha_f = 1 - \alpha_p$. Celkový tvar systému naštěstí zůstává zachován, je konzervativní a hyperbolický. Advekce objemového podílu α_p je u DPM určena řešeným pohybem částic.

Algoritmy řešení DPM potřebují kromě řešiče rovnic proudění i lagrangeovský řešič pro určování pohybu jednotlivých částic. Zrychlení částice \mathbf{a}_p je určeno působícími silovými účinky a druhým Newtonovým zákonem (2.3). Integrací obyčejných diferenciálních rovnic kinematiky je postupně vypočtena rychlost částice $\mathbf{u}_p = [u_p, v_p]^T$ a poloha částice $\mathbf{x}_p = [x_p, y_p]^T$. Pro numerickou integraci lze použít různá schémata i vyšších řádů přesnosti, podle požadavků na přesnost a stabilitu. Vůbec nejjednodušší je explicitní Eulerova metoda prvního řádu přesnosti

$$\mathbf{u}_p^{m+1} = \mathbf{u}_p^m + \Delta t^* \mathbf{a}_p^m(\mathbf{x}_p, t), \quad (2.114a)$$

$$\mathbf{x}_p^{m+1} = \mathbf{x}_p^m + \Delta t^* \mathbf{u}_p^{m+1}(\mathbf{x}_p, t). \quad (2.114b)$$

Fyzikální časový krok Δt^* integrace pohybových rovnic, nemusí obecně být totožný s fyzikálním iteračním časovým krokem rovnic proudění Δt . Pokud je odezva částice na změny v proudu velmi

dobrá ($St \ll 1$), není pro přesný výpočet její polohy dostačující jediná iterace ($\Delta t^* = \Delta t$). Mezi iterace numerického řešení proudového pole je nezbytné vložit několik iterací pro numerické řešení pohybu částice.

Poznamenejme, že při hledání ustáleného dvoufázového proudění s částicemi lze použít různých algoritmů. S jednosměrným sdružením je nejefektivnější napřed vypočítat ustálené proudové pole a až potom jednorázově vyřešit pohyb částic. Pokud je řešen ustálený případ s obousměrným sdružením, je velmi účinné střídat delší sekvenci numerických iterací řešiče proudového pole s neměnnými interakčními členy a poté naráz přepočítat pohyb částic a aktualizovat interakční členy.

Aby bylo možné správně vypočítat síly působící na částici, je nezbytné znát proudové pole v místě částice. Při implementaci metody konečných objemů je tedy potřeba vědět, v jaké buňce se částice aktuálně nachází. Naopak pro určení interakčních zdrojových členů, kterými působí částice na tekutinu nebo objemových podílů fází v buňce je nutné stanovit, jaké částice se nachází v dané buňce. Pro kulové částice, jejichž počet v buňce je P , lze objemový podíl částic vyjádřit jako

$$\alpha_p = \frac{\sum P V_p}{V_{buňky}} = \frac{P V_p}{V_{buňky}} = |\text{převvedeno do 2D}| = \frac{P S_p}{S_{buňky}} = \frac{6 P V_p}{4 d_p S_{buňky}}, \quad (2.115)$$

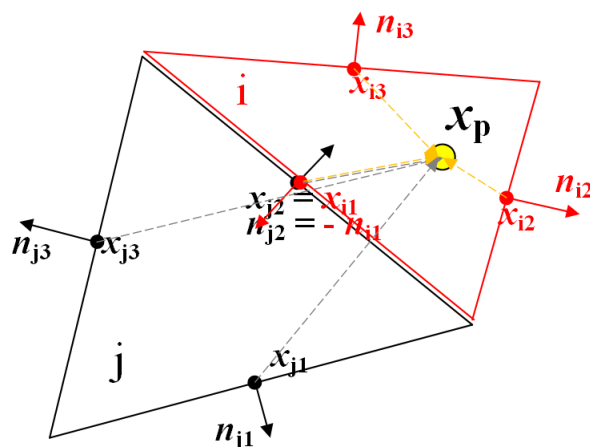
kde poslední výraz představuje přepočet pro 2D dvoufázovou úlohu s kulovými částicemi. Namapování měnicích se poloh částic a nehybných buněk je relativně snadnou úlohou na strukturované síti, avšak na nestrukturované síti je efektivní algoritmizace komplikovaná. Neustálé procházení všech možností v cyklech je časově náročné.

Jedním z takových specializovaných algoritmů je tzv. „*neighbour search method*“, která je založena na hledání posloupnosti buněk, přes které částice při pohybu prolétává. Na začátku je známá počáteční poloha částice, která je uvnitř známé buňky. Z řešení rovnic proudění, následného určení interakce a výpočtu pohybových rovnic částice známe vektor rychlosti a konečnou polohu částice. Jedním z postupů je procházení buněk v trajektorii částice. Pro každou buňku v této posloupnosti je určena hrana, kterou částice vylétla a ta jednoznačně ukazuje na dalšího souseda v posloupnosti. Jiný algoritmus byl použit v [95], zde bude popsána a ukázána na obr. 30 jeho varianta. Pro počáteční buňku j jsou napočteny hodnoty průmětů vzdáleností středů stěn k (s polohou \mathbf{x}_{jk}) k nové poloze částice \mathbf{x}_p

$$L_k = (\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{jk}) \cdot \mathbf{n}_{jk}, \quad (2.116)$$

kde \mathbf{n}_{jk} je jednotkový vektor vnější normály ke stěně k . V případě, že jsou všechny hodnoty L_k záporné, leží bod \mathbf{x}_p , tedy i částice, uvnitř tohoto elementu. V opačném případě existuje alespoň jedna stěna, pro kterou je hodnota $L_k > 0$. Částice potom leží od buňky j směrem přes hranu s nejvyšší hodnotou L_k , viz obr 30. Tímto způsobem se najde posloupnost sousedů až k buňce, uvnitř které částice leží. Poznamenejme, že by mohly existovat i singulární případy, které je třeba dále ošetřit. Uvedený algoritmus funguje pro 2D i 3D elementy libovolných tvarů. Avšak selhává na obecných, nekonvexních geometriích.

Výpočetní kódy používají dva hlavní přístupy ukládání informací o částicích (m_p , \mathbf{x}_p , \mathbf{u}_p , atd.). První ukládá veškeré informace zvlášť a každá částice má tedy vlastní reprezentaci. Při výpočtu působení na tekutinu je to však problém, protože je ještě navíc nezbytné přiřadit jednotlivé částice do konkrétních buněk pro výpočet zdrojového členu. Alternativou je shromažďování informací o částicích v buňkách, ve kterých se nalézají, což odstraňuje předchozí problém, avšak při pohybu částic je pro změnu nezbytné přesouvat informace o nich mezi buňkami.



Obr. 30: Jeden ze způsobů hledání buňky, v níž se částice nachází, odvozený z práce [95].

2.8 Použití dvoufázových modelů v praxi

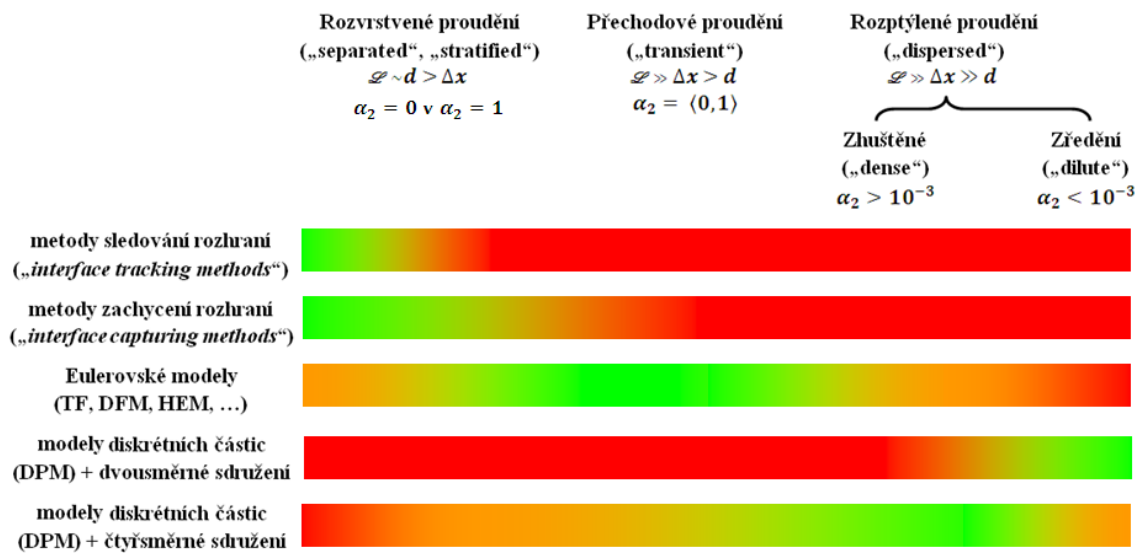
V prvních dvou kapitolách této disertační práce byl uveden výčet vybraných modelů pro řešení dvoufázového proudění a některé z nich byly rozebrány podrobněji. Byly diskutovány výhody a nevýhody jednotlivých modelů a technik, oblasti jejich užití i konkrétní aplikace. Žádný z modelů bohužel není zcela univerzální a nehodí se pro určité typy úloh. A to buďto po stránce fyzikální, např. modelovat rozvrstvená proudění pomocí DPM s obousměrným sdružením prostě nelze. Nebo s ohledem na výpočetní náročnost, např. simulace proudění s částicemi pomocí metod pro řešení rozvrstvených proudění je výpočetně neúnosné. Celkovou vhodnost naznačuje obr. 31. V úlohách, kde dochází k přechodu od rozvrstvených proudění a tekutiny se mísí v heterogenní směs, je vhodnější použít dvoutekutinový model. Obdobných případů je nepřehledné množství s různými kombinacemi modelů. Diskutujme nyní několik konkrétních úloh.

Simulace rozvrstveného proudění s potřebou přesně určovat rozhraní: Nejvhodnější jsou metody sledování rozhraní. Pracují sice v ALE popisu a potřebují vhodné algoritmy pro dynamicky se měnící výpočetní síť, ale zvládnou určit polohu rozhraní velmi dobře. Lze využít i metody zachycení rozhraní, které však pro přesnou identifikaci rozhraní potřebují velmi jemnou výpočetní síť. Stejný problém je při použití TFM, které jsou pro tuto aplikaci navíc neefektivní, protože řeší složitější systém rovnic. Zcela nevhodné jsou částicové modely nebo homogenní model.

Simulace rozvrstveného proudění, kde není nutné zcela přesně najít rozhraní: Zde jsou nejvhodnější volbou metody zachycení rozhraní, které na pevných výpočetních sítích s běžnou hustotou dospějí efektivně k dostatečně přesnému řešení. Lze použít i metody sledování rozhraní, které však při řešení zpomaluje potřeba měnit síť ve výpočtové oblasti. Stejně tak je možné použít TFM, který je však méně efektivní. Teoreticky lze použít i DPM s komplexním čtyřsměrným sdružením, ale výpočet s mnoha částicemi a kolizním modelem by rovněž nebyl výpočetně efektivní.

Simulace proudění s částicemi a přesným sledováním poloh částic: Jednoznačně nejvhodnější jsou v takových případech DPM, které přesně řeší pohyb jednotlivých částic, což ostatní modely nedokážou.

Simulace rozptýleného proudění, kde je dostačující znalost přibližné polohy částic: Opět nejvhodnější je DPM metoda. Uspokojivých výsledků dosahují i TFM a při vyšším objemovém podílu částic jsou i výpočetně efektivnější. Při obrovském množství částic totiž řeší méně rovnic oproti DPM a navíc nepotřebují kolizní model. Pokud jsou částice a nosná tekutina silněji mechanicky sdružené, lze použít i modely směsi.



Obr. 31: Celková vhodnost vybraných dvoufázových modelů a technik pro konkrétní typ proudění: zelená – vhodné použití, červená – nevhodné použití.

Kapitola 3

Numerická implementace vybraných dvoutekutinových modelů pro řešení proudění stlačitelných, nevazkých tekutin

3.1 Čtyřrovnice dvoutekutinový model

Čtyřrovnice dvoutekutinový (TFM) model s jedním tlakovým polem v 1D byl řešen například v práci [36], kde Evje a Flåtten navrhli pro jeho řešení hybridní schéma „*central – upwind*“. Paillère, Corre a García Cascales v práci [100] použili pro řešení čtyřrovnice TFM modelu AUSM+ schéma s předpodmiňovačem pro malá Machova čísla. Simulovali problém vodovodního kohoutku, úlohu sedimentace kapaliny ze směsi a oscilační pohyb kapaliny v trubici tvaru U s otevřenými konci do okolního plynu. Oscilační pohyb kapaliny byl vyvolán nerovnováznou počáteční hladinou kapaliny v trubici.

V tomto odstavci bude nejprve obecně popsán tento dvoutekutinový model a poté bude podrobně diskutováno vlastní numerické řešení provedené autorem této disertační práce.

Čtyřrovnice TFM se skládá ze dvou rovnic kontinuity (3.1) a dvou pohybových rovnic (3.2)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \rho_1 u_1) = 0, \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \rho_2) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2 \rho_2 u_2) = 0, \quad (3.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_1(\rho_1 u_1^2 + p)] = p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + (p^{\Delta p})_1, \quad (3.2a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \rho_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_2(\rho_2 u_2^2 + p)] = p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + (p^{\Delta p})_2. \quad (3.2b)$$

Zopakujme zavedená označení. Veličiny indexované 1 přísluší *tekutině 1* a veličiny indexované 2 přísluší *tekutině 2*. Nezávisle proměnnými jsou prostorová souřadnice x a čas t , neznámými veličinami proudění jsou objemový podíl fáze α , hustota ρ , složka rychlosti u ve směru x a tlak p .

Z výchozího šestirovnice TFM (2.45) – (2.47), který byl odvozen v odstavci 2.4, tedy byly vypuštěny energetické rovnice. Proto není čtyřrovnice model schopný postihnout složitější termodynamické děje spojené s prouděním směsi, jako například přenos tepla.

Uvedené rovnice (3.1), (3.2) jsou totožné s odvozeným výchozím modelem s jedním tlakovým polem $p = p_1 = p_2 = p_{Int}$. Díky platnosti následující rovnosti

$$\frac{\partial \alpha_2}{\partial x} = \frac{\partial (1 - \alpha_1)}{\partial x} = - \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \quad (3.3)$$

pracuje model s objemovými podíly obou fází. Pro obě tekutiny byly navíc do pohybových rovnic přidány členy $p^{\Delta p}$ zahrnující umělý přídatný člen tlak rozhraní („*interfacial pressure*“). Čtyřrovnice TFM s jedním tlakovým polem je nehyperbolický a právě pro zajištění hyperbolicity bylo nezbytné přidat umělé členy $p^{\Delta p}$ obsahující derivace prvního řádu, viz (3.9).

Přestože TFM (3.1) – (3.2) je zapsán v nekonzervativním tvaru a nelze jej do konzervativního tvaru přeformulovat, bývá zaváděn, analogicky k jednofázovým systémům, tzv. vektor konzervativních proměnných

$$\mathbf{w} = [\alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \alpha_1 \rho_1 u_1, \alpha_2 \rho_2 u_2]^T. \quad (3.4)$$

Výše uvedený TFM (3.1) – (3.2) lze zapsat maticově a případně doplnit o vektor zdrojových členů $\mathbf{s}(\mathbf{w})$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{w} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{w}) = \mathbf{n}(\mathbf{w}) + \mathbf{s}(\mathbf{w}), \quad (3.5)$$

kde

$$\mathbf{f}(\mathbf{w}) = [\alpha_1 \rho_1 u_1, \alpha_2 \rho_2 u_2, \alpha_1 (\rho_1 u_1^2 + p), \alpha_2 (\rho_2 u_2^2 + p)]^T \quad (3.6a)$$

je vektor konzervativních nevazkých toků

$$\mathbf{n}(\mathbf{w}) = \left[0, 0, p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + (p^{\Delta p})_1, p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + (p^{\Delta p})_2 \right]^T, \quad (3.6b)$$

je vektor nekonzervativních členů obsahujících první derivace a

$$\mathbf{s}(\mathbf{w}) = [0, 0, \alpha_1 \rho_1 g, \alpha_2 \rho_2 g]^T \quad (3.6c)$$

je příkladem vektoru zdrojových členů bez derivací, neboť v některých úlohách je do zdrojového členu (3.6c) zahrnuta tíhová síla vztažená na jednotku objemu pro každou z tekutin, určená tíhovým zrychlením g ve směru x .

Model slouží pro popis proudění heterogenní směsi dvou stlačitelných nevazkých tekutin. Vektor proměnných obsahuje devět neznámých veličin: $\alpha_1, \alpha_2, \rho_1, \rho_2, u_1, u_2, p, (p^{\Delta p})_1, (p^{\Delta p})_2$. Model je tedy třeba doplnit o pět konstitutivních vztahů, například:

- rovnice pro objemové podíly, (2.14), $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$,
- stavová rovnice pro tekutinu 1 ve tvaru $f_1(p, \rho_1) = 0$,
- stavová rovnice pro tekutinu 2, rovněž ve tvaru $f_2(p, \rho_2) = 0$,
- vhodný model pro vyjádření přídavných členů $(p^{\Delta p})_1$ a $(p^{\Delta p})_2$.

Poznamenejme, že v této práci dále využíváme způsob uzavření čtyřrovnicevého TFM pomocí Taitových stavových rovnic izentropického typu (2.62), použité rovněž v práci Paillère a kol. [100]. Závislosti hustoty na tlaku $\rho(p)$ a rychlosti zvuku na tlaku $c(p)$ obou tekutin ukazuje obr. 32. Protože tekutina 1 je uvažována jako více stlačitelná fáze (plyn), byla použita Taitova stavová rovnice ve tvaru

$$p = p_1^0 \left(\frac{\rho_1}{\rho_1^0} \right)^{\kappa_1}, \quad (3.7a)$$

kde κ_1 je Poissonova adiabatická konstanta, p_1^0 je referenční tlak a ρ_1^0 je hustota tekutiny 1 při referenčním tlaku $p = p_1^0$. Pro hodnoty $\kappa_1 = 1,4$, $p_1^0 = 10^5$ Pa a $\rho_1^0 = 1$ kg m⁻³ rovnice (3.7a) přibližně modeluje izentropickou stlačitelnost vzduchu vlivem vnějšího tlaku. Rychlost zvuku lze určit z definice (2.64) jako

$$c_1 = \sqrt{\frac{\kappa_1 p}{\rho_1}}. \quad (3.7b)$$

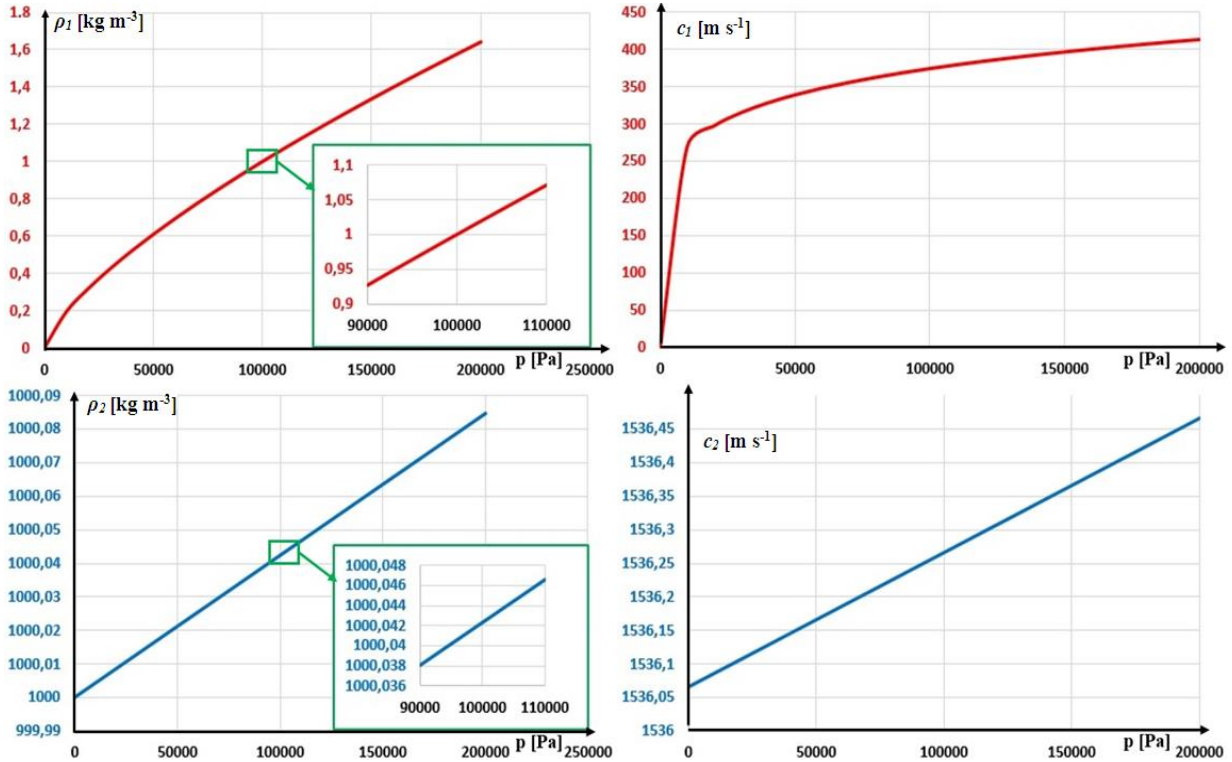
Protože tekutina 2 je uvažována jako méně stlačitelná fáze (kapalina), byla použita Taitova stavová rovnice ve tvaru

$$p = K \left[\left(\frac{\rho_2}{\rho_2^0} \right)^{\kappa_2} - 1 \right], \quad (3.8a)$$

kde K , κ_2 a ρ_2^0 nazveme pro jednoduchost jen modelovými konstantami. Pro hodnoty $\kappa_2 = 7,15$, $K = 3,3 \cdot 10^8$ Pa a $\rho_2^0 = 1000$ kg m⁻³ přibližně modeluje (3.8a) stlačitelnost vody. Rychlost zvuku

lze určit z definice (2.64) jako

$$c_2 = \sqrt{\frac{\kappa_2}{\rho_2} (p + K)}. \quad (3.8b)$$



Obr. 32: Grafy závislosti hustot na tlaku vlevo a rychlostí zvuku na tlaku vpravo při použití Taitových stavových rovnic (3.7) pro tekutinu 1 nahoře a (3.8) pro tekutinu 2 dole.

Umělý přidavný člen lze vyjádřit různými způsoby. Velmi často se používá tzv. „Bestionův vztah“ [8]

$$(p^{\Delta p})_1 = \Delta p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = (p_{IP} - p) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}, \quad (3.9a)$$

$$(p^{\Delta p})_2 = \Delta p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} = (p_{IP} - p) \frac{\partial \alpha_2}{\partial x}, \quad (3.9b)$$

obsahující veličinu tlak rozhraní („interfacial pressure“) p_{IP} , pro kterou platí

$$p_{IP} = p - \sigma \frac{\alpha_1 \alpha_2 \rho_1 \rho_2}{\alpha_1 \rho_2 + \alpha_2 \rho_1} (u_1 - u_2)^2. \quad (3.10)$$

Pro $\sigma \geq 1$ je celý systém (3.1) a (3.2) hyperbolický, za současného splnění následujících předpokladů

$$0 < \alpha_1 < 1 \text{ a tedy i } 0 < \alpha_2 < 1, \quad (3.11a)$$

$$p > 0 \text{ Pa}. \quad (3.11b)$$

Z podmínky (3.11b) plyne při použití stavových rovnic (3.7a) a (3.8a) omezení pro hustoty tekutin $\rho_1 > 0 \text{ kg m}^{-3}$ a $\rho_2 > 1000 \text{ kg m}^{-3}$.

Bestionův vztah byl zaveden jako regularizační člen pro docílení hyperbolicity dvoutekutinového modelu v kódu CATHARE a prvně popsán v práci [8]. Používá se velmi často jako jeden ze způsobů dosažení hyperbolicity různých dvoutekutinových modelů, jak bylo zmíněno již v odstavci 2.7.4.

Doplňující vztahy určují závislé proměnné: $\alpha_2(\alpha_1)$, $\rho_1(p)$, $\rho_2(p)$, $(p^{\Delta p})_1(\alpha_1, \alpha_2, \rho_1, \rho_2, u_1, u_2, p)$, $(p^{\Delta p})_2(\alpha_1, \alpha_2, \rho_1, \rho_2, u_1, u_2, p)$. Zavedeme dále vektor primitivních proměnných

$$\mathbf{v} = [\alpha_1, u_1, u_2, p]^T. \quad (3.12)$$

Rychlosti obou tekutin je možné vyjádřit přímo ze složek vektoru konzervativních proměnných (3.4)

$$u_1 = \frac{w_3}{w_1}, u_2 = \frac{w_4}{w_2}. \quad (3.13)$$

První dvě složky vektoru \mathbf{w} s respektováním rovnice pro objemové podíly (2.14)

$$w_1 = \alpha_1 \rho_1(p), w_2 = (1 - \alpha_1) \rho_2(p) \quad (3.14)$$

společně tvoří nelineární rovnici pro tlak

$$w_2 = \left(1 - \frac{w_1}{\rho_1(p)}\right) \rho_2(p). \quad (3.15)$$

Pokud známe tlak, můžeme určit poslední primitivní proměnnou, a to objemový podíl *tekutiny 1*

$$\alpha_1 = \frac{w_1}{\rho_1(p)} = 1 - \frac{w_2}{\rho_2(p)}, \quad (3.16)$$

neboť hustoty tekutin jsou jednoznačně určeny hodnotou tlaku p a stavovými rovnicemi (3.7a) a (3.8a).

3.1.1 Numerické řešení čtyřrovnice dvoutekutinového modelu založené na metodě konečných objemů

Pro numerické řešení výše popsaného čtyřrovnice TFM v 1D byl implementován algoritmus založený na prostorové diskretizaci metodou konečných objemů. Metoda konečných objemů byla implementována tak, aby bylo možné navržený algoritmus využít obecně i pro řešení úloh ve 2D jak na strukturovaných, tak i na nestrukturovaných výpočetních sítích. Metoda konečných objemů byla pro numerické řešení zvolena i s ohledem na skutečnost, že výpočty aplikačních úloh související se separací oleje a vzduchu v olejových separátorech, které budou diskutovány ve čtvrté kapitole této práce, byly provedeny pomocí konečně objemového profesionálního výpočtového systému ANSYS Fluent.

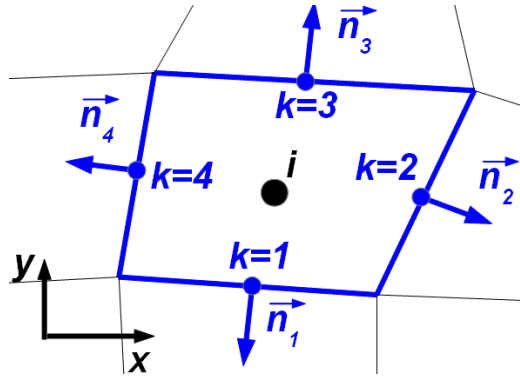
Metoda konečných objemů („*Finite Volume Method*“) je rozšířená numerická metoda pro řešení úloh výpočtové dynamiky tekutin používaná od 70. let 20. století. Za její zakladatele jsou považováni MacDonald, MacCormack a Paullay. Tato metoda je velmi dobře popsána například v [74].

V tomto odstavci budou nejprve stručně popsány základní principy metody konečných objemů ve 2D. Základem metody je diskretizace výpočtové oblasti $\Omega \in \mathbb{R}^2$ množstvím malých navzájem disjunktních kontrolních objemů, tzv. buněk $\{\Omega_i\}_{i=1}^N$. Sjednocení všech buněk tvoří tedy celou výpočtovou oblast, platí $\bigcup_{i=1}^N \Omega_i = \Omega$. Hranice $\{\partial \Omega_{ik}\}_{k=1}^M$ kontrolního objemu Ω_i se nazývají hrany. Detail strukturované konečně objemové sítě ve 2D ukazuje obr. 33, kde je modře zvýrazněna uvažovaná čtyřúhelníková buňka Ω_i a vektory vnějších normál příslušných hran $\{\mathbf{n}_k\}_{k=1}^4$.

Metoda konečných objemů vychází z integrální formulace výchozích rovnic dynamiky tekutin zapsaných v konzervativním kompaktním vektorovém tvaru ve 2D

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{w}(x,t)}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{w}(x,t))}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{w}(x,t))}{\partial y} \right) d\Omega = \mathbf{0}, \quad (3.17)$$

kde \mathbf{w} je vektor konzervativních proměnných a $\mathbf{f}(\mathbf{w})$ a $\mathbf{g}(\mathbf{w})$ jsou kartézské složky vektoru nevazkého toku.



Obr. 33: Detail konečně objemově strukturované čtyřúhelníkové sítě ve 2D s vyznačením uvažované buňky Ω_i , jejích hran a příslušných vnějších normál.

Uvažujme dále, že výpočtová oblast Ω je diskretizovaná výše popsanou strukturovanou výpočetní sítí konečných objemů $\{\Omega_i\}_{i=1}^N$. Integrální tvar výchozích rovnic (3.17) platí na celé oblasti, i ve všech kontrolních objemech Ω_i , tedy

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial \mathbf{w}(x,t)}{\partial t} dS + \int_{\Omega_i} \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{w}(x,t))}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{w}(x,t))}{\partial y} \right) dS = \mathbf{0}. \quad (3.18)$$

Principem metody konečných objemů je aproximace hodnot přesného řešení $\mathbf{w}(x,t)$ pomocí integrálního průměru

$$\mathbf{w}_i(t) = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \mathbf{w}(x,t) dS \quad (3.19)$$

přes uvažovanou buňku Ω_i o obsahu $|\Omega_i|$. Hodnota přibližného řešení $\mathbf{w}_i(t)$ je v našem případě konstantní funkce na uvažované buňce Ω_i v daném čase t .

Na integrální formulaci (3.18) aplikujeme Greenovu větu, která převádí plošné integrály na křivkové integrály

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial \mathbf{w}(x,t)}{\partial t} dS + \oint_{\partial\Omega_i} \left(\mathbf{f}(\mathbf{w}(x,t)) n_{j_x} + \mathbf{g}(\mathbf{w}(x,t)) n_{j_y} \right) dl = \mathbf{0}, \quad (3.20)$$

kde $\mathbf{n}_j = [n_{j_x}, n_{j_y}]^T$ je jednotkový vektor vnější normály k hranici $\partial\Omega_i$. První člen upravíme s využitím zavedeného integrálního průměru (3.19) a křivkový integrál v druhém členu nahradíme součtem integrálů přes jednotlivé hrany uvažované čtyřúhelníkové buňky Ω_i , viz obr. 33,

$$\frac{d(|\Omega_i| \mathbf{w}_i(t))}{d t} + \sum_{k=1}^4 \int_{\partial\Omega_{i_k}} \left(\mathbf{f}(\mathbf{w}(x,t)) n_{j_{kx}} + \mathbf{g}(\mathbf{w}(x,t)) n_{j_{ky}} \right) dl_k = \mathbf{0}, \quad (3.21)$$

kde $\mathbf{n}_{j_k} = [n_{j_{kx}}, n_{j_{ky}}]^T$ je jednotkový vektor vnější normály k -té hrany uvažovaného kontrolního objemu Ω_i . Protože kontrolní objem Ω_i je v čase t neměnný, můžeme rovnici (3.21) přepsat do tvaru

$$\frac{d(\mathbf{w}_i(t))}{d t} + \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{k=1}^4 \int_{\partial\Omega_{i_k}} \left(\mathbf{f}(\mathbf{w}(x,t)) n_{j_{kx}} + \mathbf{g}(\mathbf{w}(x,t)) n_{j_{ky}} \right) dl_k = \mathbf{0}. \quad (3.22)$$

Protože hodnoty přesného řešení $\mathbf{w}(x,t)$ na hranách $l_k; k = 1, \dots, 4$ kontrolního objemu Ω_i neznáme, je potřeba celkový fyzikální tok $\mathbf{f}(\mathbf{w}(x,t)) n_{j_{kx}} + \mathbf{g}(\mathbf{w}(x,t)) n_{j_{ky}}$ hranicí l_k nahradit numerickým tokem definovaným jako

$$\mathbf{F}_{ik} n_{j_{kx}} + \mathbf{G}_{ik} n_{j_{ky}} = \frac{1}{|l_k|} \int_{\partial\Omega_{ik}} \left(\mathbf{f}(\mathbf{w}(\mathbf{x}, t)) n_{j_{kx}} + \mathbf{g}(\mathbf{w}(\mathbf{x}, t)) n_{j_{ky}} \right) dl_k, \quad (3.23)$$

kde $|l_k|$ je délka k -té hrany. Rovnici (3.22) lze s použitím zavedeného celkového numerického toku upravit do semidiskrétního tvaru

$$\frac{d(\mathbf{w}_i(t))}{dt} + \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{k=1}^4 (\mathbf{F}_{ik} n_{j_{kx}} + \mathbf{G}_{ik} n_{j_{ky}}) |l_k| = \mathbf{0}. \quad (3.24)$$

Obyčejnou diferenciální rovnici (3.24) je možné řešit různými způsoby, jako například pomocí Rungeových – Kuttových metod. V našem případě pro jednoduchost uvažujme pro aproximaci časové derivace zpětné Eulerovo schéma, tedy

$$\frac{\mathbf{w}_i^{n+1} - \mathbf{w}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{k=1}^4 (\mathbf{F}_{ik}^n n_{j_{kx}} + \mathbf{G}_{ik}^n n_{j_{ky}}) |l_k| = \mathbf{0}. \quad (3.25)$$

Konečně obdržíme explicitní schéma metody konečných objemů ve tvaru

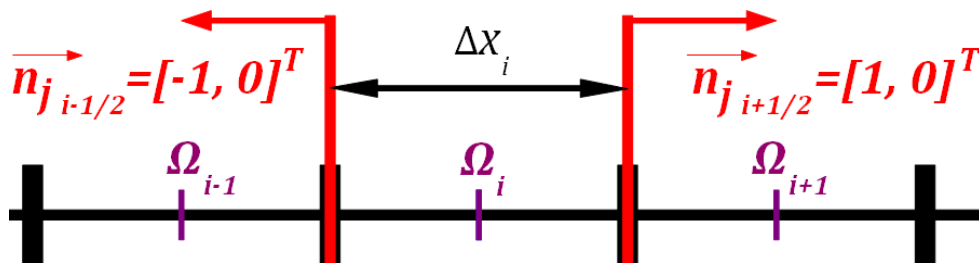
$$\mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_i|} \sum_{k=1}^4 (\mathbf{F}_{ik}^n n_{j_{kx}} + \mathbf{G}_{ik}^n n_{j_{ky}}) |l_k|, \quad (3.26)$$

kde pro časový krok platí $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. Konkrétní podoba schématu metody konečných objemů závisí na způsobu výpočtu celkového numerického toku.

Dále bude ukázán postup řešení čtyřrovnice TFM (3.5) a (3.4), (3.6) pomocí metody konečných objemů v 1D. Odvozené explicitní schéma metody konečných objemů (3.26) se pro 1D případ zjednoduší do tvaru

$$\mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} [\mathbf{F}_{i+1/2}^n \cdot 1 + \mathbf{F}_{i-1/2}^n \cdot (-1)] = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} [\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n], \quad (3.27)$$

kde Δx_i je velikost i -té buňky, $\mathbf{F}_{i+1/2}^n$ je celkový numerický tok pravou hranou buňky Ω_i , jejíž jednotkový vektor vnější normály je $\mathbf{n}_{j_{i+1/2}} = [1, 0]^T$ a $\mathbf{F}_{i-1/2}^n$ je celkový numerický tok levou hranou s jednotkovým vektorem vnější normály $\mathbf{n}_{j_{i-1/2}} = [-1, 0]^T$, viz obr. 34. Výpočet numerického toku $\mathbf{F}_{i+1/2}^n(\mathbf{w}_i^n, \mathbf{w}_{i+1}^n)$ pravou hranou kontrolního objemu provedeme pomocí hodnot \mathbf{w}_i^n a \mathbf{w}_{i+1}^n a podobně výpočet numerického toku levou hranou $\mathbf{F}_{i-1/2}^n(\mathbf{w}_i^n, \mathbf{w}_{i-1}^n)$ pomocí hodnot \mathbf{w}_i^n a \mathbf{w}_{i-1}^n . Při algoritmicizaci metody konečných objemů bývá obvykle používáno označení stávající buňky i jako vnitřní, či levé (L) a příslušného souseda jako buňky vnější, nebo pravé (R). Konkrétně v 1D, viz obr. 34, potom můžeme značit pro pravou hranu $i + 1/2$ buňky $\mathbf{w}_i^n = \mathbf{w}_L$ a $\mathbf{w}_{i+1}^n = \mathbf{w}_R$, pro levou hranu $i - 1/2$ buňky i $\mathbf{w}_i^n = \mathbf{w}_L$ a $\mathbf{w}_{i-1}^n = \mathbf{w}_R$.



Obr. 34: Detail výpočetní sítě pro aplikaci metody konečných objemů v 1D.

Nekonzervativní členy a zdrojové členy vystupující na pravé straně rovnice (3.5) diskretizujeme způsobem popsaným v [100] jako

$$\mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} [\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n] + \Delta t (\mathbf{N}_i^n + \mathbf{S}_i^n), \quad (3.28)$$

viz obr. 34, kde \mathbf{N}_i^n a \mathbf{S}_i^n jsou aproximace nekonzervativních a zdrojových členů v bodě i a časové hladině n . Konkrétní podoba těchto aproximací bude popsána dále.

Při použití explicitní dvoukrokové Heunovy metody, která v prediktoru používá Eulerovu metodu a v korektoru lichoběžníkové pravidlo, dostaneme numerické schéma ve tvaru

$$\mathbf{w}_i^{n+1/2} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} [\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n] + \Delta t (\mathbf{N}_i^n + \mathbf{S}_i^n), \quad (3.29a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x_i} \left([\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n] + [\mathbf{F}_{i+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}^{n+1/2}] \right) + \\ + \frac{\Delta t}{2} ([\mathbf{N}_i^n + \mathbf{S}_i^n] + [\mathbf{N}_i^{n+1/2} + \mathbf{S}_i^{n+1/2}]). \end{aligned} \quad (3.29b)$$

Prediktorový krok (3.29a) slouží k výpočtu pomocné hodnoty $\mathbf{w}_i^{n+1/2}$, která se spolu s původní hodnotou \mathbf{w}_i^n využívá pro určení hodnoty \mathbf{w}_i^{n+1} na konci časového kroku Δt v korektoru. Poznamenejme, že například numerický tok $\mathbf{F}_{i+1/2}^{n+1/2}$ se vypočte pomocí hodnot $\mathbf{w}_i^{n+1/2}$ a $\mathbf{w}_{i+1}^{n+1/2}$. Heunova metoda je metoda druhého řádu přesnosti, viz [138], [86], [21]. Při konstrukci numerických metod je nezbytné dbát na to, aby řád přesnosti numerického schématu pro výpočet časové derivace byl vyšší, nebo alespoň stejný, jako řád přesnosti numerického schématu v prostorové proměnné. Nyní přistoupíme k aproximaci nevazkého numerického toku.

3.1.1.1 AUSM schéma pro aproximaci nevazkého numerického toku

Pro určení nevazkého numerického toku bylo dále použito AUSM („*Advection Upstream Splitting Method*“) schéma, původně navržené autory Liouem a Steffenem v roce 1993 [80], jehož základy a přehled nejvýznamnějších pozdějších modifikací lze nalézt například v [78]. Toto schéma bylo použito především z důvodu jeho jednoduchosti a efektivity. Je sice pouze prvního řádu přesnosti, avšak to není zcela na závadu. Schémata prvního řádu přesnosti jsou pro použití v řešících dvoufázového proudění poměrně oblíbená, protože jejich přirozená vnitřní vazkost pomáhá tlumit oscilace, které se obecně objevují při řešení dvoufázových modelů. AUSM schéma navíc mezi schémata prvního řádu patří k těm, která obsahují nejméně umělé vazkosti.

Hlavní myšlenkou AUSM schémat je rozdílný přístup ke konvekci a k šíření tlakových poruch, protože mechanismy jejich šíření jsou fyzikálně odlišné. Celkový numerický tok je tedy rozdělen na dvě složky, konvektivní část a tlakovou část $\mathbf{F} = \mathbf{F}^C + \mathbf{F}^P$, které jsou řešeny různě. Oba toky rozhraním \mathbf{F}^C i \mathbf{F}^P se přitom štěpí na příspěvky od levé a pravé buňky v závislosti na Machově čísle. Není tedy pro jejich výpočet nutné provádět analýzu vlastních čísel systému tak, jako to vyžadují např. „*flux difference splitting*“ schémata. Výpočet vlastních čísel bývá u dvoufázových modelů velmi obtížný. AUSM schémata jsou proto poměrně oblíbená při výpočtech dvoufázového proudění. Jednu z prvních prací zaměřenou na výpočty dvoufázového proudění pomocí AUSM schémat prezentovali Edwards a Liou [30], kteří vyšli z homogenního rovnovážného modelu. Dále uveďme například řešení „*drift-flux*“ modelu [35] a dvoutekutinových modelů [100] AUSM schémata, nebo aplikaci AUSM+-up schématu na řešení problémů rozvrstvených proudění [79].

V navrženém algoritmu pro řešení čtyřrovnice TFM (3.1), (3.2) je použito prostorové diskretizační schéma založené na AUSM+ schématu, které bylo rovněž využito pro řešení čtyřrovnice a šestirovnice dvoutekutinového modelu v práci [100]. Na rozdíl od ní je však použit pouze základ schématu bez předpokládavě zlepšujícího chování schématu v oblastech nízkých Machových čísel. V těchto oblastech je rychlost konvekce mnohem menší, než rychlost šíření zvukových vln, což může v důsledku působit řadu obtíží jako například: numerické oscilace řešení, pomalá konvergence a zaokrouhlovací chyby vznikající při práci s čísly rozdílných řádů.

AUSM schémata pro řešení dvoutekutinových modelů uvažují nejen dělení na konvektivní a tlakovou část

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}_1^C + \mathbf{F}_1^P = \begin{bmatrix} \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1^2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_1 p \end{bmatrix} = \dot{m}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ u_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_1 p \end{bmatrix}, \quad (3.30a)$$

$$\mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_2^C + \mathbf{F}_2^P = \begin{bmatrix} \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2^2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_2 p \end{bmatrix} = \dot{m}_2 \begin{bmatrix} 1 \\ u_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_2 p \end{bmatrix}, \quad (3.30b)$$

ale respektují i různé rychlosti šíření informací v obou tekutinách (\mathbf{F}_1 pro tekutinu 1 a \mathbf{F}_2 pro tekutinu 2), což bude zřejmé dále. Aproximace nevazkého numerického toku pro jednu z tekutin $\mathbf{F}_{i+1/2}^n$ pravou hranou kontrolního objemu i s vnější jednotkovou normálou $\mathbf{n}_{j_{i+1/2}} = [1,0]^T$, viz obr. 34, je vyjádřena jako funkce veličin $\mathbf{w}_i^n = \mathbf{w}_L$, $\mathbf{w}_{i+1}^n = \mathbf{w}_R$. Tok levou hranou by byl určen stejně po výše zmíněné záměně indexů buněk ($\mathbf{w}_i^n = \mathbf{w}_L$, $\mathbf{w}_{i-1}^n = \mathbf{w}_R$ s jednotkovým vektorem vnější normály $\mathbf{n}_{j_{i-1/2}} = [-1,0]^T$). Příspěvky k celkovému numerickému toku jsou určeny normálovým Machovým číslem, proto je u AUSM+ schématu třeba nejprve určit rychlost zvuku v obou tekutinách na hraně. K tomu je možné použít různých vyjádření, například volbu jedné z hodnot, aritmetický průměr, nebo geometrický průměr

$$c_1 = \sqrt{c_{1L} c_{1R}}, \quad (3.31a)$$

$$c_2 = \sqrt{c_{2L} c_{2R}}. \quad (3.31b)$$

Potom normálové Machovo číslo je definováno pomocí následujících vztahů

$$M_{n_{1L}} = \frac{u_{1L} n_{j_x}}{c_1}, \quad M_{n_{1R}} = \frac{u_{1R} n_{j_x}}{c_1}, \quad (3.32a)$$

$$M_{n_{2L}} = \frac{u_{2L} n_{j_x}}{c_2}, \quad M_{n_{2R}} = \frac{u_{2R} n_{j_x}}{c_2}. \quad (3.32b)$$

Dále se určí Machova čísla na hranách jako součet příspěvků levých a pravých normálových Machových čísel pro obě tekutiny

$$M_{1L/R} = \mathfrak{M}^+(M_{n_{1L}}) + \mathfrak{M}^-(M_{n_{1R}}), \quad (3.33a)$$

$$M_{2L/R} = \mathfrak{M}^+(M_{n_{2L}}) + \mathfrak{M}^-(M_{n_{2R}}), \quad (3.33b)$$

kde \mathfrak{M}^+ a \mathfrak{M}^- jsou polynomiální štěpící funkce splňující podmínky konzistence, diferencovatelnosti a symetrie uvedené v [77]:

- $\mathfrak{M}^+(M) + \mathfrak{M}^-(M) = M$,
- $\mathfrak{M}^+(M) \geq 0$, $\mathfrak{M}^-(M) \leq 0$,
- $\mathfrak{M}^+(M)$ a $\mathfrak{M}^-(M)$ jsou monotónní rostoucí funkce,
- $\mathfrak{M}^+(M) = -\mathfrak{M}^-(-M)$,
- $\mathfrak{M}^+(M) = M$, když $M \geq 1$; $\mathfrak{M}^-(M) = M$, když $M \leq -1$,
- $\mathfrak{M}^+(M)$ a $\mathfrak{M}^-(M)$ jsou spojitě diferencovatelné.

Používají se přitom různá vyjádření štěpících funkcí, zde například

$$\mathfrak{M}^+(M_{neL}) = \begin{cases} \frac{1}{2} (M_{neL} + |M_{neL}|); & \text{pokud } |M_{neL}| \geq 1 \\ \frac{1}{4} (M_{neL} + 1)^2 + \frac{1}{8} (M_{neL}^2 - 1)^2; & \text{jinak} \end{cases}, \quad (3.34a)$$

$$\mathfrak{M}^-(M_{neR}) = \begin{cases} \frac{1}{2} (M_{neR} - |M_{neR}|); & \text{pokud } |M_{neR}| \geq 1 \\ -\frac{1}{4} (M_{neR} - 1)^2 - \frac{1}{8} (M_{neR}^2 - 1)^2; & \text{jinak} \end{cases}, \quad (3.34b)$$

kde $e = 1$ pro tekutinu 1 a $e = 2$ pro tekutinu 2. Graf závislosti štěpících funkcí \mathfrak{M}^+ a \mathfrak{M}^- na hodnotě normálového Machova čísla M_n ukazuje obr. 35. Hmotnostní toky obou tekutin jsou potom definovány jako

$$\dot{m}_1 = c_1 \left(\alpha_{1L} \rho_{1L} \frac{M_{1L/R}^+ |M_{1L/R}|}{2} + \alpha_{1R} \rho_{1R} \frac{M_{1L/R}^- |M_{1L/R}|}{2} \right), \quad (3.35a)$$

$$\dot{m}_2 = c_2 \left(\alpha_{2L} \rho_{2L} \frac{M_{2L/R}^+ |M_{2L/R}|}{2} + \alpha_{2R} \rho_{2R} \frac{M_{2L/R}^- |M_{2L/R}|}{2} \right). \quad (3.35b)$$

Konvektivní složky celkového numerického toku jsou potom určeny na základě znaménka hmotnostního toku,

$$\mathbf{F}_1^C = \frac{1}{2} \dot{m}_1 \left(\begin{bmatrix} 1 \\ u_{1L} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ u_{1R} \end{bmatrix} \right) + \frac{1}{2} |\dot{m}_1| \left(\begin{bmatrix} 1 \\ u_{1L} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ u_{1R} \end{bmatrix} \right), \quad (3.36a)$$

$$\mathbf{F}_2^C = \frac{1}{2} \dot{m}_2 \left(\begin{bmatrix} 1 \\ u_{2L} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ u_{2R} \end{bmatrix} \right) + \frac{1}{2} |\dot{m}_2| \left(\begin{bmatrix} 1 \\ u_{2L} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ u_{2R} \end{bmatrix} \right), \quad (3.36b)$$

analogicky, jako je tomu v klasických schématech typu „upwind“ na základě rychlosti šíření informací.

Obdobným způsobem se určí tlaková část celkového numerického toku. Tlaky na stěně jsou definovány pomocí štěpících funkcí jako

$$p_{1L/R} = \mathfrak{P}^+(M_{n1L}) \alpha_{1L} p_L + \mathfrak{P}^-(M_{n1R}) \alpha_{1R} p_R, \quad (3.37a)$$

$$p_{2L/R} = \mathfrak{P}^+(M_{n2L}) \alpha_{2L} p_L + \mathfrak{P}^-(M_{n2R}) \alpha_{2R} p_R, \quad (3.37b)$$

kde \mathfrak{P}^+ a \mathfrak{P}^- jsou polynomiální štěpící funkce splňující podmínky konzistence, diferencovatelnosti a symetrie uvedené v [77]:

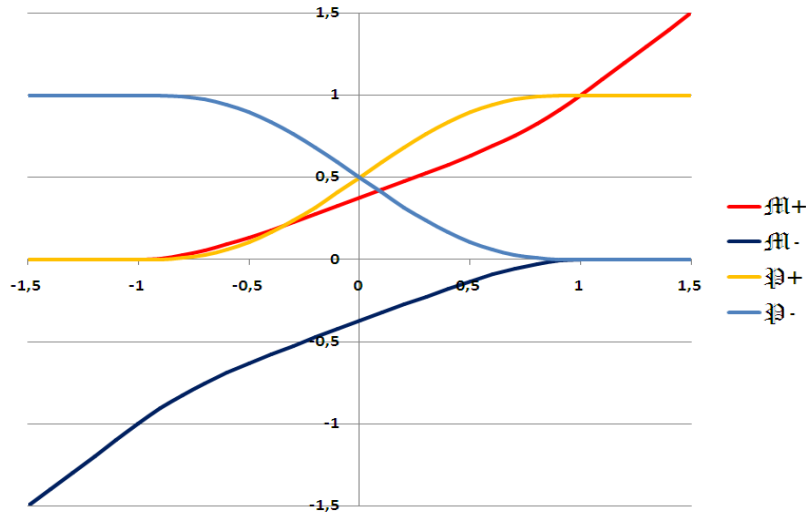
- $\mathfrak{P}^+(M) + \mathfrak{P}^-(M) = 1$,
- $\mathfrak{P}^+(M) \geq 0$, $\mathfrak{P}^-(M) \geq 0$ (podmínka nezáporného tlaku),
- $\mathfrak{P}^+(M)$ je neklesající funkce a $\mathfrak{P}^-(M)$ je nerostoucí funkce,
- $\mathfrak{P}^+(M) = \mathfrak{P}^-(-M)$,
- $\mathfrak{P}^+ = 1$, když $M > 1$; $\mathfrak{P}^- = 1$, když $M < -1$,
- $\mathfrak{P}^+(M)$ a $\mathfrak{P}^-(M)$ jsou spojitě diferencovatelné.

Opět se můžeme setkat s různými vyjádřeními štěpících funkcí, zde například

$$\mathfrak{P}^+(M_{neL}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{(M_{neL} + |M_{neL}|)}{M_{neL}}; & \text{pokud } |M_{neL}| \geq 1 \\ \frac{1}{4} (M_{neL} + 1)^2 \left(2 - M_{neL} + \frac{3}{4} M_{neL} [M_{neL} - 1]^2 \right); & \text{jinak} \end{cases}, \quad (3.38a)$$

$$\mathfrak{P}^-(M_{neR}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{(M_{neR} - |M_{neR}|)}{M_{neR}}; & \text{pokud } |M_{neR}| \geq 1 \\ \frac{1}{4} (M_{neR} - 1)^2 \left(2 + M_{neR} - \frac{3}{4} M_{neR} [M_{neR} + 1]^2 \right); & \text{jinak} \end{cases}, \quad (3.38b)$$

kde $e = 1$ pro tekutinu 1 a $e = 2$ pro tekutinu 2. Závislosti štěpících funkcí \mathfrak{M}^+ a \mathfrak{M}^- na hodnotě normálového Machova čísla M_n ukazuje obr. 35, ze kterého je dobře patrné dodržení výše uváděných požadavků.



Obr. 35: Graf závislosti hodnot štěpících funkcí \mathfrak{M}^+ , \mathfrak{M}^- definovaných rovnicemi (3.34) a funkcí \mathfrak{B}^+ , \mathfrak{B}^- definovaných rovnicemi (3.38) na hodnotě normálového Machova čísla.

Tlaková část celkového numerického toku je potom určena přímo tlaky na stěně $p_{e_{L/R}}$, které ale mají pro každou tekutinu jinou hodnotu a to ačkoliv diskutujeme řešení TFM s jediným tlakovým polem

$$\mathbf{F}_1^P = p_{1L/R} \begin{bmatrix} 0 \\ n_{j_x} \end{bmatrix}, \quad (3.39a)$$

$$\mathbf{F}_2^P = p_{2L/R} \begin{bmatrix} 0 \\ n_{j_x} \end{bmatrix}. \quad (3.39b)$$

3.1.1.2 Diskretizace nekonzervativních a zdrojových členů

Posledním krokem je zahrnutí nekonzervativních a zdrojových členů do algoritmu numerické metody. Než přistoupíme k vlastní diskretizaci vektoru nekonzervativních členů s prvními derivacemi (3.6b), provedeme jeho drobnou úpravu dosazením rovnice (3.9)

$$\mathbf{n}(\mathbf{w}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + (p^{\Delta p})_1 \\ p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + (p^{\Delta p})_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \Delta p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \\ p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + \Delta p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + (p_{IP} - p) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \\ p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + (p_{IP} - p) \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ p_{IP} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \\ p_{IP} \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} \end{bmatrix}, \quad (3.40)$$

následně zavedeme tlak rozhraní definovaný konstitutivním vztahem (3.10) a obdržíme finální tvar vektoru nekonzervativních členů

$$\mathbf{n}(\mathbf{w}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \left[p - \sigma \frac{\alpha_1 \alpha_2 \rho_1 \rho_2}{\alpha_1 \rho_2 + \alpha_2 \rho_1} (u_1 - u_2)^2 \right] \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \\ \left[p - \sigma \frac{\alpha_1 \alpha_2 \rho_1 \rho_2}{\alpha_1 \rho_2 + \alpha_2 \rho_1} (u_1 - u_2)^2 \right] \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} \end{bmatrix}. \quad (3.41)$$

Vezmeme-li v úvahu rovnost pro objemové podíly a její důsledek (3.3), lze rovnici (3.41) dále upravit do tvaru

$$\mathbf{n}(\mathbf{w}) = \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \left[p - \sigma \frac{\alpha_1 \alpha_2 \rho_1 \rho_2}{\alpha_1 \rho_2 + \alpha_2 \rho_1} (u_1 - u_2)^2 \right] \cdot [0, 0, 1, -1]^T. \quad (3.42)$$

Vektor nekonzervativních členů diskretizujeme pomocí vhodné aproximace prostorové derivace objemového podílu $\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}$, například

$$\mathbf{N}_i^n = \frac{\alpha_{1i+1}^n - \alpha_{1i-1}^n}{2 \Delta x} \{p_{IP}(\mathbf{w}_i^n)\} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad (3.43)$$

kde tlak rozhraní p_{IP} je stanoven z hodnot \mathbf{w}_i^n v aktuální buňce Ω_i . Poznamenejme na tomto místě, že nevhodný způsob diskretizace nekonzervativních členů může vést k rozvoji oscilací numerického řešení, jak upozorňuje například [79]. V numerickém kódu vyvíjeném autorem této disertační práce byla použita, stejně jako v [100], aproximace derivace objemového podílu pomocí centrální diferenční formule druhého řádu přesnosti na výpočetní síti s konstantním krokem $\Delta x = \text{konst.}$.

Stejně tak je z hodnot v i -tém kontrolním objemu diskretizován vektor zdrojových členů

$$\mathbf{S}_i^n = \mathbf{s}(\mathbf{w}_i^n). \quad (3.44)$$

3.1.1.3 Zvýšení řádu přesnosti prostorové diskretizace

Pro numerické simulace TFM se používají řešiče založené na schématech prvního řádu přesnosti, které tlumí nefyzikální (numerické) oscilace vznikající při řešení dvoufázových modelů. V menším měřítku jsou používány pro řešení TFM schémata druhého řádu přesnosti, která bývají doplňována o tlumicí členy. V některých případech, například uveďme práci [93], se lze setkat s aplikací MUSCL („*Monotone Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws*“) techniky pro zvýšení řádu přesnosti prostorové diskretizace. V této práci bude v některých případech použita lineární rekonstrukce veličin, která umožňuje zvýšit přesnost prostorové diskretizace. Základní explicitní schéma metody konečných objemů v 1D

$$\mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\mathbf{F}_{i+1/2}^n(\mathbf{w}_i^n, \mathbf{w}_{i+1}^n) - \mathbf{F}_{i-1/2}^n(\mathbf{w}_i^n, \mathbf{w}_{i-1}^n) \right] \quad (3.45)$$

při použití lineární rekonstrukce použije pro výpočet numerických toků hranami kontrolního objemu místo konstantních hodnot v příslušných buňkách rekonstruované hodnoty

$$\mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\mathbf{F}_{i+1/2}^n(\mathbf{WR}_i^n, \mathbf{WL}_{i+1}^n) - \mathbf{F}_{i-1/2}^n(\mathbf{WL}_i^n, \mathbf{WR}_{i-1}^n) \right]. \quad (3.46)$$

Lineární rekonstrukce veličin se zpravidla u TFM provádí na vektoru primitivních proměnných \mathbf{v} (3.12). Autorem této disertační práce byla rovněž testována varianta s rekonstrukcí vektoru konzervativních proměnných \mathbf{w} . Tento postup však není vhodný pro použití při numerickém řešení TFM. Rekonstruování obou rovnic kontinuity totiž vede ke vzniku oscilací tlaku a objemového podílu.

Lineární rekonstrukci jednotlivých složek v_q , $q=1, \dots, 4$ vektoru primitivních proměnných $\mathbf{v} = [v_1, v_2, v_3, v_4]^T = [\alpha_1, u_1, u_2, p]^T$ v buňce Ω_i s použitím minmod limiteru lze definovat jako

$$VR_i^n = v_i^n + \minmod(\sigma_{u_i}, \sigma_{d_i}) \frac{\Delta x}{2}, \quad (3.47a)$$

$$VL_i^n = v_i^n - \minmod(\sigma_{u_i}, \sigma_{d_i}) \frac{\Delta x}{2}, \quad (3.47b)$$

kde σ_u a σ_d jsou směrnice příslušné složky vektoru primitivních proměnných proti proudu a po proudu, [13]. Tyto první derivace bývají aproximovány diferenčními podíly

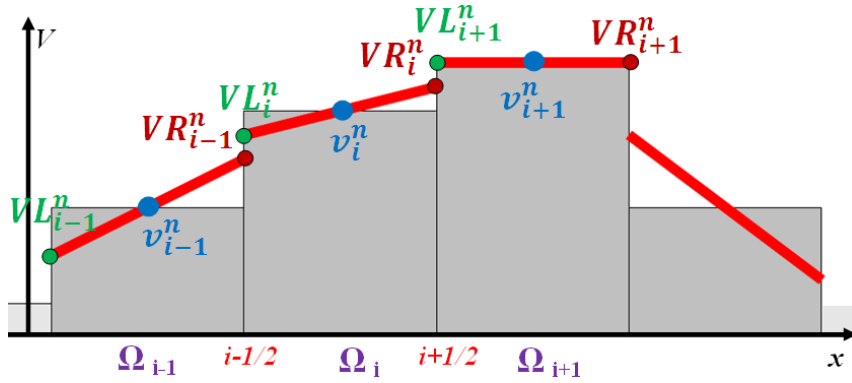
$$\sigma_{u_i} = \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x}, \quad (3.48a)$$

$$\sigma_{d_i} = \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x}. \quad (3.48b)$$

Minmod limiter je definován jako

$$\text{minmod}(\sigma_u, \sigma_d) = \begin{cases} 0, & \text{pokud} & \sigma_u \sigma_d \leq 0 \\ \sigma_u, & \text{pokud} & \sigma_u \sigma_d > 0 \text{ a zároveň } |\sigma_u| \leq |\sigma_d|. \\ \sigma_d, & \text{pokud} & \sigma_u \sigma_d > 0 \text{ a zároveň } |\sigma_u| > |\sigma_d| \end{cases} \quad (3.49)$$

Výsledek rekonstrukce je ukázán na obr. 36. Hodnota minmod funkce je tedy nulová pokud je v místě i lokální extrém, jinak vrací hodnotu aproximující gradient příslušné veličiny s menší absolutní velikostí. Díky této vlastnosti nedochází při rekonstrukci k případnému vzniku nového extrému.



Obr. 36: Lineární rekonstrukce vektoru primitivních proměnných v při použití minmod limiteru.

Poznamenejme, že při implementaci lineární rekonstrukce je nezbytné použít schéma alespoň druhého řádu přesnosti v čase, například zmíněné Heunenovo schéma (3.29). U dvoukrokového schématu se přitom rekonstrukce obvykle neprovádí v prediktoru, ale rekonstruují se až hodnoty primitivních proměnných v mezikroku $v^{n+1/2}$ před výpočtem korektoru. Hodnoty konzervativních proměnných dosazované do schématu se přitom zaměňují za hodnoty konzervativních proměnných odvozených z rekonstruovaných primitivních proměnných obdobně, jako to bylo ukázáno u rovnic (3.45) a (3.46).

Na tomto místě zrekapitulujeme, jak lze ze známého vektoru konzervativních proměnných (3.4) se složkami $w = [w_1, w_2, w_3, w_4]^T$ dopočítat složky vektoru primitivních proměnných. Nejprve je potřeba vyřešit nelineární rovnici pro tlak (3.15), například použitím metody prosté iterace popsané v odstavci 3.1.2.1

$$w_2 = \left(1 - \frac{w_1}{\rho_1(p)}\right) \rho_2(p) \Rightarrow v_4 = p. \quad (3.50a)$$

S použitím stavových rovnic určíme ze známého tlaku hustoty tekutin a následně dopočteme objemové podíly

$$v_1 = \alpha_1 = \frac{w_1}{\rho_1(v_4)} = \frac{w_1}{\rho_1(v_4)} = 1 - \frac{w_2}{\rho_2(v_4)}. \quad (3.50b)$$

Nakonec vypočteme rychlosti obou tekutin

$$v_2 = u_1 = \frac{w_3}{w_1}, \quad (3.50c)$$

$$v_3 = u_2 = \frac{w_4}{w_2}. \quad (3.50d)$$

Opačný postup, tedy určení vektoru konzervativních proměnných z vektoru primitivních proměnných (3.12) je jednodušší, protože není potřeba řešit nelineární rovnici pro tlak (3.15). Postupným dosazováním vypočteme

$$w_1 = \alpha_1 \rho_1 = v_1 \rho_1(v_4), \quad (3.51a)$$

$$w_2 = \alpha_2 \rho_2 = (1 - v_1) \rho_2(v_4), \quad (3.51b)$$

$$w_3 = \alpha_1 \rho_1 u_1 = w_1 v_2, \quad (3.51c)$$

$$w_4 = \alpha_2 \rho_2 u_2 = w_2 v_3, \quad (3.51d)$$

Výše popsaný algoritmus numerického řešení čtyřrovniceového TFM byl implementován autorem této disertační práce ve výpočtovém prostředí MATLAB. Oproti [100] sice nebyl implementován předpodmiňovač pro lepší chování a přesnost řešiče založeného na AUSM+ schématu při nízkých rychlostech proudění, ale na druhou stranu je použito schéma vyššího řádu přesnosti pro časovou diskretizaci a první řád přesnosti prostorové diskretizace je zvýšen pomocí výše popsané lineární rekonstrukce.

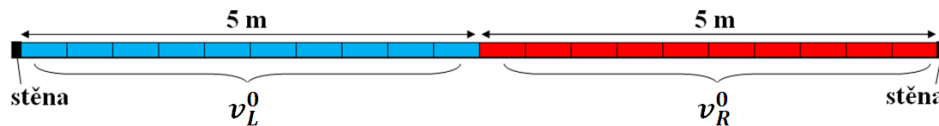
3.1.2 Numerické výsledky vybraných testovacích problémů

V tomto odstavci jsou prezentovány dosažené numerické výsledky dvou vybraných testovacích problémů (Toumiův „*shock tube*“ problém a problém vodovodního kohoutku) pomocí vyvinutého softwaru založeného na metodách detailně diskutovaných v předchozím odstavci. Poznamenejme, že řadu dalších testovacích problémů lze najít například v přehledu [118].

3.1.2.1 Toumiův „*shock tube*“ problém

Pro validaci použitého čtyřrovniceového dvoutekutinového modelu a verifikaci jeho numerického řešení pomocí vyvinutého softwaru byl řešen Toumiův „*shock tube*“ problém, popsáný v [129], který je používán jako jedna ze standardních úloh pro testování řešičů dvoufázového proudění.

Zformulujme tento problém. Jednorozměrnou výpočtovou oblast tvoří deset metrů dlouhá trubice s uzavřenými konci, která je rozdělena v polovině. Obě poloviny jsou naplněny dvoufázovými směsmi tekutin v rozdílných, ustálených stavech, jak naznačuje obr. 37. V čase $t = 0$ s je překážka oddělující obě poloviny náhle odstraněna, nastane šok a je sledován další vývoj tohoto systému.



Obr. 37: Toumiův problém.

Výpočtová oblast byla diskretizovaná rovnoměrnou výpočetní sítí konečných objemů o N buňkách. Počáteční hodnota vektoru primitivních proměnných v levé polovině oblasti byla

$$\mathbf{v}_L^0 = [v_{L1}^0; v_{L2}^0; v_{L3}^0; v_{L4}^0]^T = [\alpha_{1L}^0; u_{1L}^0; u_{2L}^0; p_L^0]^T, \quad (3.52a)$$

kde $\alpha_{1L}^0 = 0,25$, $u_{1L}^0 = u_{2L}^0 = 0 \text{ m s}^{-1}$, $p_L^0 = 2 \cdot 10^7 \text{ Pa}$. Počáteční podmínky v pravé polovině oblasti byly

$$\mathbf{v}_R^0 = [v_{R1}^0; v_{R2}^0; v_{R3}^0; v_{R4}^0]^T = [\alpha_{1R}^0; u_{1R}^0; u_{2R}^0; p_R^0]^T, \quad (3.52b)$$

kde $\alpha_{1R}^0 = 0,1$, $u_{1R}^0 = u_{2R}^0 = 0 \text{ m s}^{-1}$, $p_R^0 = 1 \cdot 10^7 \text{ Pa}$. Na obou koncích výpočtové oblasti byla aplikována okrajová podmínka pevné stěny. To bylo prakticky realizováno přidáním virtuálních buněk za hranice výpočtové oblasti. V těchto virtuálních buňkách byl stejný tlak a objemový podíl, jako ve vnitřních buňkách výpočetní sítě přilehlých ke stěnám, které značíme indexem (L) , avšak

rychlosti byly zrcadleny rovinou stěny. Tedy pro vektor primitivních proměnných ve virtuálních buňkách bude platit

$$\mathbf{v}_{R\,virt} = [\alpha_L; -u_{1L}; -u_{2L}; p_L]^T = [v_{1L}; -v_{2L}; -v_{3L}; v_{4L}]^T \quad (3.53a)$$

a pro vektor konzervativních proměnných ve virtuálních buňkách platí

$$\mathbf{w}_{R\,virt} = [w_{1L}; w_{2L}; -w_{3L}; -w_{4L}]^T, \quad (3.53b)$$

jak je patrné z rovnic (3.51c) a (3.51d)

Vlastnosti tekutin byly modelovány pomocí Taitových stavových rovnic (3.7) a (3.8), přičemž byly uvažovány jejich výše uvedené parametry: $\kappa_1 = 1,4$, $p_1^0 = 10^5$ Pa, $\rho_1^0 = 1$ kg m⁻³, $\kappa_2 = 7,15$, $K = 3,3 \cdot 10^8$ Pa a $\rho_2^0 = 1000$ kg m⁻³. Pro takovou konfiguraci parametrů má výsledné médium představovat směs vody se vzduchem v oblasti běžných atmosférických podmínek. Nastavení parametrů je zcela odpovídající pro později řešený problém vodovodního kohoutku, avšak není zcela vhodné pro vysoké tlaky Toumiova problému, jak bude diskutováno dále.

Úloha byla řešena bez tíhy, tedy $\mathbf{s}(\mathbf{w}) = \mathbf{0}$. Hodnota koeficientu v Bestionově vztahu pro tlak rozhraní (3.10) byla nastavena na $\sigma = 2$. Protože pro numerické řešení používáme explicitní AUSM+ schéma s lineární rekonstrukcí, které je podmíněně stabilní je délka časového kroku určena tak, aby vyhovovala nutné podmínce stability ve tvaru

$$\Delta t \leq \frac{\text{CFL}}{\left| \max_j \lambda(\mathbf{A}_j) \right|_{\Delta x}}, \quad (3.54)$$

kde $\left| \max_j \lambda(\mathbf{A}_j) \right|$ je maximální absolutní hodnota vlastních čísel Jacobiových matic $\mathbf{A}_j = \mathbf{A}(\mathbf{w}_j)$, Δx je konstantní krok prostorové diskretizace a $\text{CFL} \in (0,1)$. V této práci volíme $\text{CFL} = 0,5$.

Při numerickém řešení je nezbytné znát tlakové pole určené nelineární rovnicí, která je kombinací stavových rovnic a rovnice pro objemové podíly, jak bylo řečeno výše. V tomto konkrétním případě tedy určit řešení rovnice

$$\frac{w_1}{\rho_1(p)} + \frac{w_2}{\rho_2(p)} = 1, \quad (3.55)$$

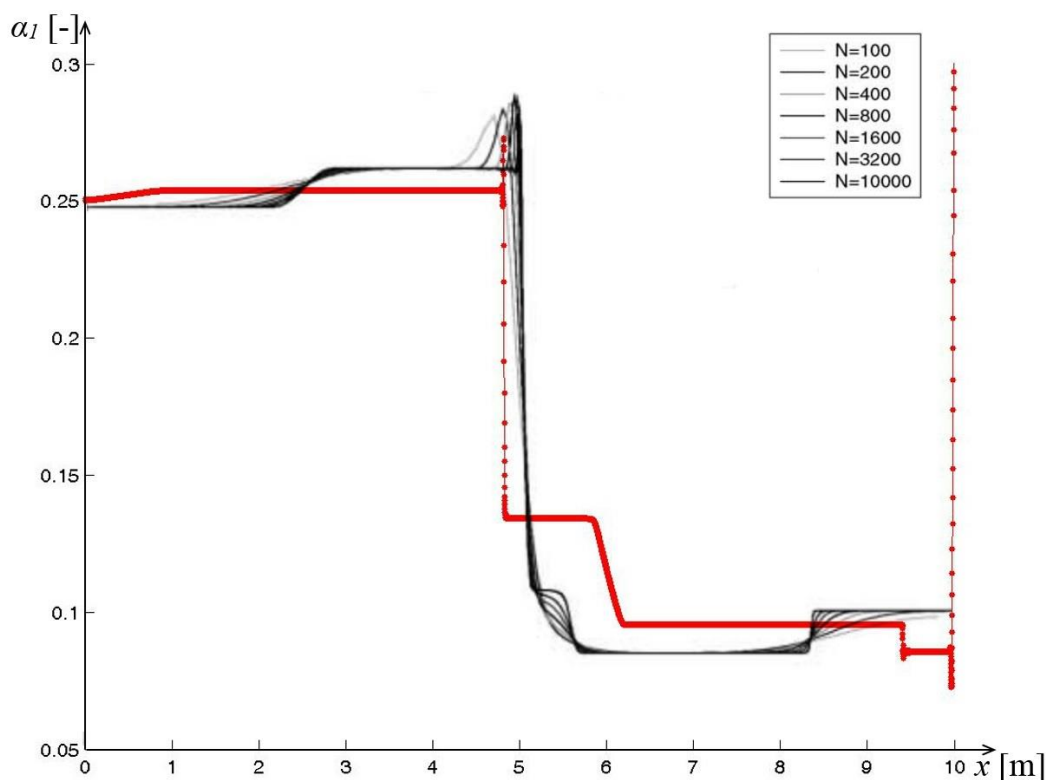
ze které plyne

$$\frac{w_1}{1 - \frac{w_2}{\rho_2(p)}} = \rho_1(p). \quad (3.56)$$

Po dosazení stavových rovnic (3.7a) a (3.8a) dostáváme nelineární rovnici pro tlak v závislosti na hodnotách první a druhé složky vektoru konzervativních proměnných. Při inverzním vyjádření stavové rovnice pro tekutinu 1 (3.7a) obdržíme implicitní předpis

$$p = p_1^0 \left[\frac{\frac{w_1}{\rho_1^0}}{1 - \frac{w_2}{\rho_2^0}} \right]^{\kappa_1} = f(w_1, w_2, p), \quad (3.57)$$

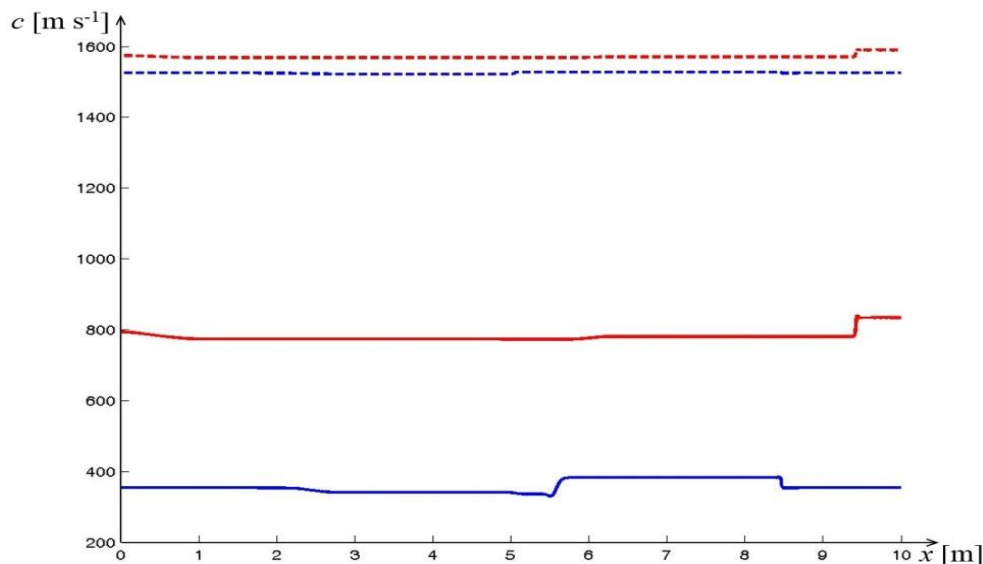
který byl řešen numericky pomocí metody prosté iterace s počátečními podmínkami $p = p^n$ pro nalezení hodnoty tlaku v mezikroku časové diskretizace $n + 1/2$ a $p = p^{n+1/2}$ na konci časového kroku $n + 1$. Pro řešený Toumiův problém iterační metoda pro výpočet tlaku v buňce konverguje velmi dobře, neboť po několika iteracích dosáhneme přesnosti na tři desetinná místa, tj. $\Delta p = p^m - p^{m-1} < 1 \cdot 10^{-3}$ Pa, což s ohledem na velikosti tlaků v Toumiově problému je dostačující.



Obr. 38: Toumioův problém, rozložení objemového podílu *tekutiny 1* ve směsi podél výpočtové oblasti v čase $t_k = 0,006$ s. Červeně jsou vyznačeny dosažené výsledky, černě řešení prezentovaná v práci [100] na různých sítích.

Na obr. 38 jsou červeně ukázány výsledky numerické simulace Toumiova problému v čase $t_k = 0,006$ s dosažené pomocí vlastního vyvinutého výpočetního softwaru pro řešení čtyřrovnice TFM, založeného na AUSM+ schématu s lineární rekonstrukcí primitivních proměnných v korektorovém kroku. Výpočtová oblast byla diskretizovaná rovnoměrnou výpočetní sítí o počtu $N = 10^4$ elementů. Pro srovnání jsou v obr. 38 černě vyznačena i řešení prezentovaná v práci [100] pro různé výpočetní sítě. Při jejich dosažení byl sice použit podobný řešič, avšak složitější šestirovnice TFM, který je schopný lépe pracovat s termodynamikou systému. U Toumiova problému s velkým počátečním tlakovým skokem má korektní řešení termodynamiky systému nezanedbatelný vliv na přesnost výsledného řešení úlohy. Výpočty potvrdily, že čtyřrovnice TFM model nevystihuje korektně časový vývoj tohoto systému, protože neobsahuje energetické rovnice.

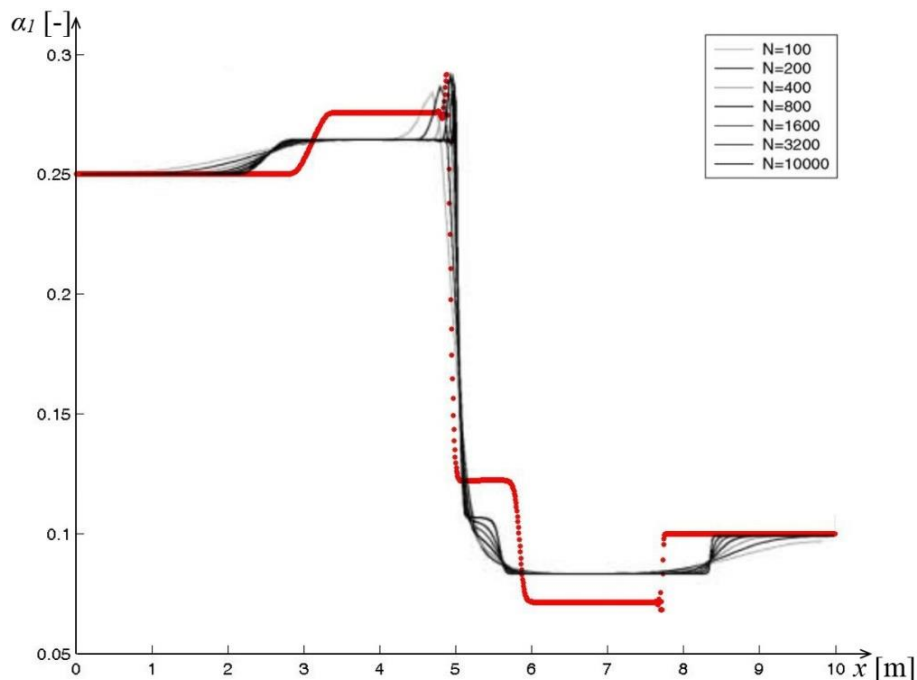
Celkový tvar rozložení objemového podílu *tekutiny 1* vypočtený vlastním vyvinutým softwarem se sice blíží rozložení simulovanému pomocí šestirovnice TFM, avšak polohy nespojitostí a v důsledku toho i vypočtené hodnoty veličin mezi nimi se liší. Největší odchylkou je hodnota řešení zcela vpravo. Řešení dosažené šestirovnice TFM drží u obou konců výpočtové oblasti počáteční hodnoty objemového podílu, avšak objemový podíl *tekutiny 1* za nespojitostí u pravé stěny je znatelně nižší a v těsné blízkosti stěny potom skokově roste. Pokud obr. 38 pozorněji prohlédneme, zjistíme, že šíření nespojitostí v provedené simulaci je rychlejší oproti simulaci s použitím šestirovnice TFM. To je způsobeno nastavením parametrů stavových rovnic, protože rychlost šíření nespojitostí v tekutině úzce souvisí s vlastními čísly Jacobiovy matice systému, která závisí na rychlosti zvuku. Rychlost zvuku v *tekutině 1* za vysokých tlaků je podle použité stavové rovnice výrazně vyšší, než je rychlost zvuku v numerických simulacích používající šestirovnice model, jak ukazuje obr. 39.



Obr. 39: Porovnání rychlostí zvuku v použitém modelu červeně a v šestirovnicovém modelu modře. Plnou čarou pro tekutinu 1, přerušovanou čarou pro tekutinu 2.

Rozbor výsledků simulací v časech $t < 0,006$ s skutečně ukazuje rychlejší šíření nespojitostí z kontaktního rázu směsí v obou polovinách výpočtové oblasti. Popisovaný pokles hodnoty objemového podílu tekutiny 1 u pravého okraje je důsledkem toho, že vlna nejvíce vpravo je tak rychlá, že dokonce dosáhla stěny v čase $t < t_k$. Pokles tedy není způsoben špatným řešením okrajově – počáteční úlohy v této oblasti, ale je důsledkem zředění objemového podílu tekutiny 1 v odražené vlně od stěny.

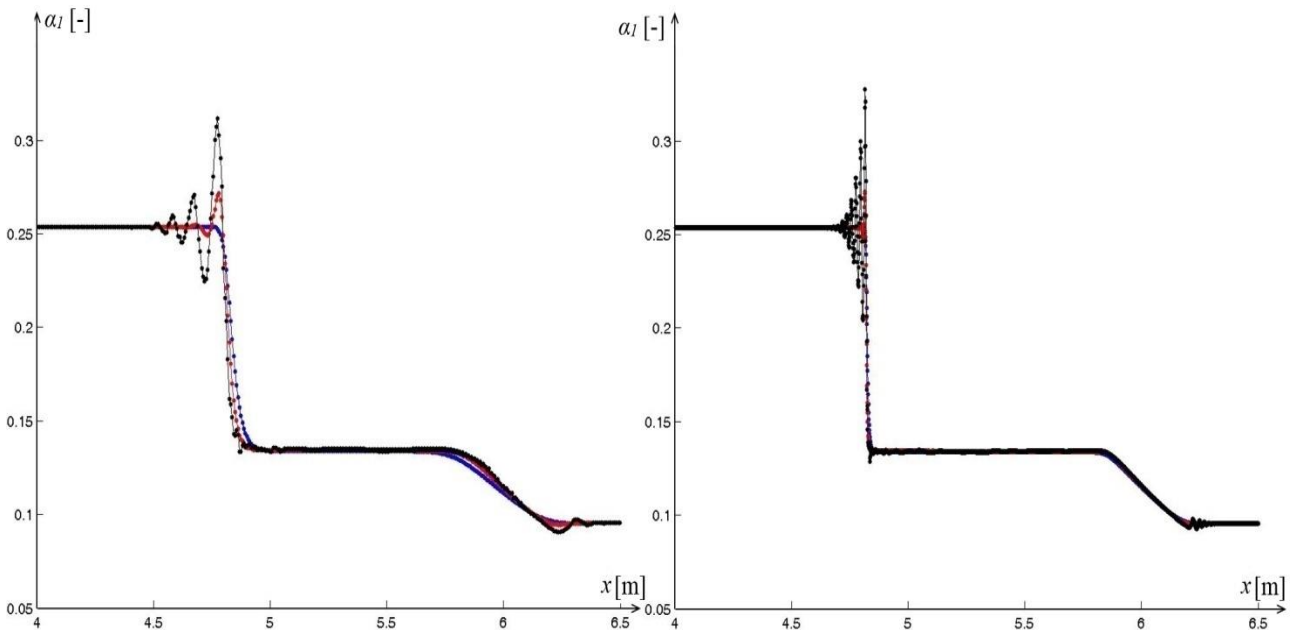
Prostou změnou Poissonovy adiabatické konstanty na $\kappa_1 = 1$ se lze přiblížit zdola k rychlosti zvuku v tekutině 1 stanovenou pomocí šestirovnicového TFM s relativní odchylkou menší než 30%. Výsledky čtyřrovnicového modelu s upraveným parametrem κ_1 ukazuje obr. 40.



Obr. 40: Toumiův problém, rozložení objemového podílu tekutiny 1 v čase $t_k = 0,006$ s. Červeně jsou vyznačeny výsledky dosažené po modifikaci parametru κ_1 , pro srovnání černě řešení prezentovaná v práci [100] na různých sítích.

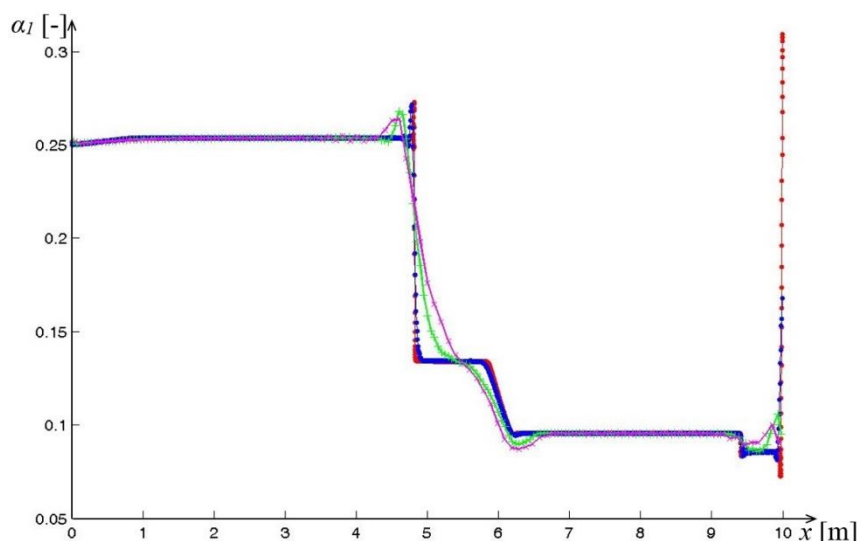
V oblasti kontaktu levé a pravé části $x \approx 5$ m vzniká ve skutečnosti výkmit hodnoty objemového podílu. Schémata prvního řádu přesnosti obecně neumějí tento jev zachytit, protože řešení je zde vyhlazeno vyšší numerickou vazkostí těchto schémat. Například AUSM+ schéma bez rekonstrukce na jemné síti o $N = 10^4$ buňkách dokáže zachytit celkový tvar rozložení objemového podílu velmi dobře a ostře, ale tento výkmit zcela vyhlazuje. Mnohem lepších výsledků při zachycení výkmitu dosahuje AUSM+ schéma s lineární rekonstrukcí primitivních veličin v korektorovém kroku.

Výsledky numerických simulací s rozdílným způsobem implementace lineární rekonstrukce s minmod limiterem při řešení Toumiova problému jsou ukázány na obr. 41. Důvodem, proč bylo upřednostněno rekonstruování hodnot primitivních proměnných pouze v mezikroku, tj. před korektorovým krokem, je udržení numerických oscilací řešení v přijatelných mezích. Pokud aplikujeme stejnou rekonstrukci rovněž před prvním, tj. prediktorovým krokem, dochází k velkému zesílení výkmitu, který se šíří i do okolí. Navíc vznikají numerické oscilace i v místech, kde pro jejich vznik nejsou fyzikální předpoklady, například v oblasti $x \approx 6,25$ m, viz obr. 41. Přitom na celkový tvar řešení a dosahované hodnoty má toto zvýšení přesnosti zanedbatelný vliv. Výše popisované numerické schéma s rekonstrukcí pouze v korektorovém kroku je tedy z těchto tří nejvýhodnější, protože se vyznačuje nižší disipací oproti schématu AUSM+ bez rekonstrukce, zachycuje i výkmit objemového podílu a přitom není výrazně disperzní.



Obr. 41: Toumioův problém v detailu. Ukázka rozdílného způsobu implementace lineární rekonstrukce veličin: modře bez rekonstrukce, červeně rekonstrukce v korektorovém kroku, černě rekonstrukce v prediktorovém i korektorovém kroku. Vlevo na síti o $N = 1600$, vpravo na síti o $N = 10^4$ buňkách.

Následující obr. 42 ukazuje vliv sítě na výsledky při použití AUSM+ schématu s rekonstrukcí v korektorovém kroku. Dosažené výsledky pro výpočetní síť s $N = 1600$ buňkami (modrá křivka) se velmi blíží výsledkům pro síť s $N = 10^4$ buňkami (červená křivka), přitom však výpočet s více buňkami trval zhruba pětadesátkrát déle. Výsledky numerických simulací na sítích čítajících málo (stovky) buněk na druhou stranu nezachycují korektně nespojitosti, viz fialová a zelená křivka v obr. 42. Z uvedeného rozboru je zřejmé, že síť s $N = 1600$ buňkami je vhodná pro řešení námi zvoleného problému, protože dosažené výsledky jsou dostatečně přesné s ohledem na výpočetní čas.



Obr. 42: Objemový podíl *tekutiny 1* pro různé varianty sítě s počtem buněk: $N = 100$ fialově, $N = 200$ zeleně, $N = 1600$ modře a $N = 10^4$ červeně.

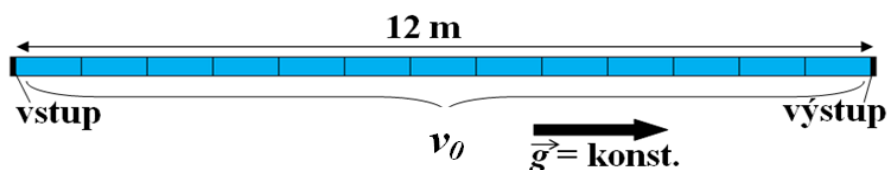
3.1.2.2 Problém vodovodního kohoutku

Dále byl řešen problém vodovodního kohoutku („*water faucet problem*“) známý také jako Ransomův problém popsáný v [106]. Smyslem problému vodovodního kohoutku je zachytit tvar sloupce vytékající kapaliny do okolního plynu urychlovaného vlivem působení homogenního tíhového pole, přičemž se utvoří dobře známý nálevkovitý tvar. Výsledky numerických simulací Ransomovy úlohy navíc musejí kvalitně zachytit nespojitost, která vzniká na rozhraní mezi oblastí vlivu „odplouvající“ počáteční podmínky a oblastí s vyvinutým nálevkovitým tvarem proudu kapaliny.

Jednorozměrnou výpočtovou oblast tvoří dvanáct metrů dlouhá, nebo chceme-li vysoká trubice s otevřenými konci, která byla diskretizovaná rovnoměrnou výpočetní sítí konečných objemů o N buňkách, jak naznačuje obr. 43. Počáteční hodnota vektoru primitivních proměnných v celé oblasti je konstantní a kromě tlaku odpovídá vstupní okrajové podmínce

$$\mathbf{v}^0 = [v_1^0; v_2^0; v_3^0; v_4^0]^T = [\alpha_1^0; u_1^0; u_2^0; p^0]^T, \quad (3.58)$$

kde $\alpha_1^0 = 0,2$, $u_1^0 = 0 \text{ m s}^{-1}$, $u_2^0 = 10 \text{ m s}^{-1}$, $p^0 = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$.



Obr. 43: Ransomův problém.

Na jednom konci výpočtové oblasti byla aplikována vstupní okrajová podmínka. Na druhém konci potom podmínka výstupní, jedná se o konec, ke kterému jsou tekutiny urychlovány vlivem tíhového zrychlení, jak ukazuje obr. 43. Vstup a výstup byly prakticky provedeny přidáním virtuálních buněk za hranice výpočtové oblasti. Ve vstupní virtuální buňce (in) byly předepsány hodnoty rychlostí obou tekutin, objemový podíl plynu a tlak byl extrapolován z přilehlé první buňky $i = 1$

$$\mathbf{v}_{in} = [\alpha_{1in}; u_{1in}; u_{2in}; p_1]^T, \quad (3.59)$$

kde $\alpha_1^0 = \alpha_{1in}$, $u_1^0 = u_{1in}$, $u_2^0 = u_{2in}$. Z extrapolovaného tlaku byly vypočteny hustoty obou tekutin a následně sestaven vektor konzervativních proměnných na vstupu. Naproti tomu na výstupu byl předepsán pevný výstupní tlak a hodnoty zbylých primitivních veličin extrapolovány z proudového pole, tedy převzaty z poslední buňky

$$\mathbf{v}_{out} = [\alpha_{1N}; u_{1N}; u_{2N}; p_{out}]^T. \quad (3.60)$$

Hustoty obou tekutin na výstupu odpovídají tomuto tlaku $p^0 = p_{out}$ a zůstávají tedy po celou dobu konstantní $\rho_1^0 = \rho_1(p^0)$ a $\rho_2^0 = \rho_2(p^0)$. Na základě těchto veličin lze sestavit vektor konzervativních proměnných na výstupu

$$\mathbf{w}_{out} = [\alpha_{1N} \rho_1^0; (1 - \alpha_{1N}) \rho_2^0; \alpha_{1N} \rho_1^0 u_{1N}; (1 - \alpha_{1N}) \rho_2^0 u_{2N}]^T. \quad (3.61)$$

Úloha má analytické řešení. V celé oblasti vlivu počáteční podmínky zrychluje kapalina v podstatě jako kompaktní, tuhé těleso, které zaujímá $\alpha_2^0 = 1 - \alpha_1^0$ průřezu oblasti v každém bodě $x > x_{dis}$. Počáteční rychlost je u_2^0 , zrychlení má velikost g a stejný směr. Z kinematického řešení lze určit rychlost v čase $t_k \geq 0$, který uplynul od počátku děje, jako $u_2(t) = u_2^0 + g t_k$ a posunutí levého okraje této oblasti $x_{dis}(t) = u_2^0 t + \frac{1}{2} g t_k^2$, které se stává v čase t_k bodem nespojitosti („discontinuity“), kde odplouvající sloupec kapaliny stálého průřezu přechází v nálevkovitý tvar, jak ukazuje obr. 44. I ve zbylé části výpočtové oblasti je kapalina urychlována od místa vstupu stejným způsobem a rychlost je určena rovnicí $u_2^2(x) = u_{2in}^2 + 2 x g$. Zde se ovšem vyvíjí nálevkovitý tvar, který je určen konstantním objemovým tokem kapaliny v jednotlivých řezech, přičemž rychlost kapaliny podél oblasti narůstá. Za předpokladu nestlačitelnosti kapaliny lze zapsat rovnici spojitosti toku jako $\dot{V} = \text{konst.}$, pro dva průřezy potom dostáváme $u_2 S \alpha_2|_1 = u_2 S \alpha_2|_2$. Průřez 1D výpočtové oblasti je stálý a jako referenční průřez na vstupu je výhodné vzít počátek $x = 0$. Následně upravíme rovnici spojitosti toku a dosadíme řešení kinematické rovnice $\alpha_{2in} u_{2in} = \alpha_2(x) \sqrt{u_{2in}^2 + 2 x g}$. Za předpokladu, že hustota je konstantní, dostáváme řešení úlohy ve tvaru

$$u_2(x) = \begin{cases} \sqrt{u_{2in}^2 + 2 x g}, & \text{když } x < u_2^0 t + \frac{1}{2} g t_k^2, \\ u_2^0 + g t_k, & \text{jinak} \end{cases}, \quad (3.62)$$

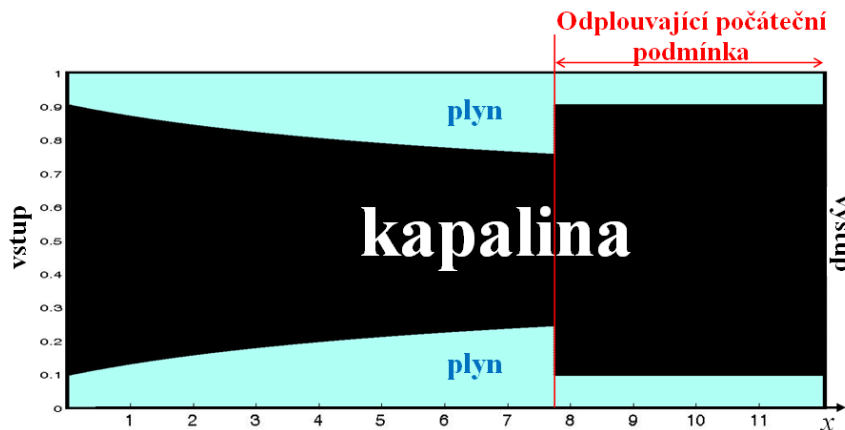
$$\alpha_1(x) = \begin{cases} 1 - \frac{(1 - \alpha_{1in}) u_{2in}}{\sqrt{u_{2in}^2 + 2 x g}}, & \text{když } x < u_2^0 t + \frac{1}{2} g t_k^2, \\ \alpha_1^0, & \text{jinak} \end{cases}, \quad (3.63)$$

Pro tíhové zrychlení $g = 9,81 \text{ m s}^{-2}$ a čas $t_k = 0,6 \text{ s}$ leží bod nespojitosti v místě $x_{dis} \doteq 7,767 \text{ m}$. Analytické řešení rovnic pro objemové podíly fázi přehledně ukazuje vizualizace na obr. 44, kde je dobře patrný nálevkovitý tvar v oblasti $x < x_{dis}$.

Pro modelování stlačitelnosti obou tekutin vlivem vnějšího tlaku jsou použity stejné stavové rovnice (3.7) a (3.8), jako v předcházejícím případě Toumiova problému, s totožnými parametry. Proto je rovněž použit v předchozím odstavci popsáný způsob výpočtu nelineární rovnice (3.57) pro tlak pomocí numerické metody prosté iterace.

Hodnota koeficientu v Bestionově vztahu pro tlak rozhraní (3.10), který figuruje ve vektoru nekonzervativních členů, byla nastavena na hodnotu $\sigma = 1,2$. V úloze vodovodního kohoutku je pochopitelně nezbytné zahrnout vliv tíhové síly. Proto je v tomto případě nenulový vektor zdrojových členů s hodnotou tíhového zrychlení $g = 9,81 \text{ m s}^{-2}$. Délka časového kroku byla

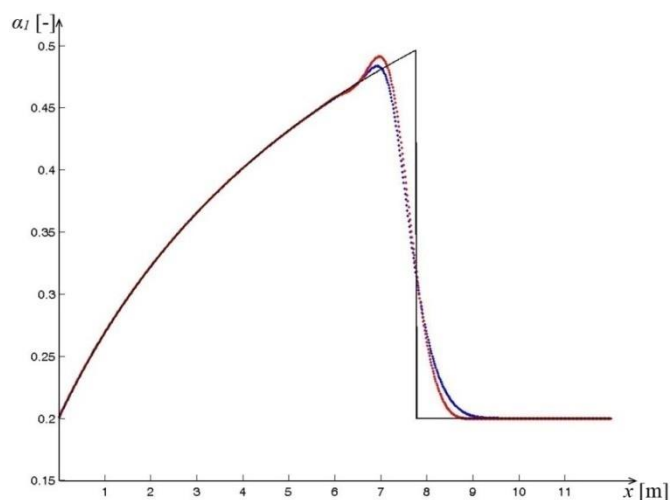
určována podle vztahu (3.54) s Courantovým číslem $CFL = 0,95$.



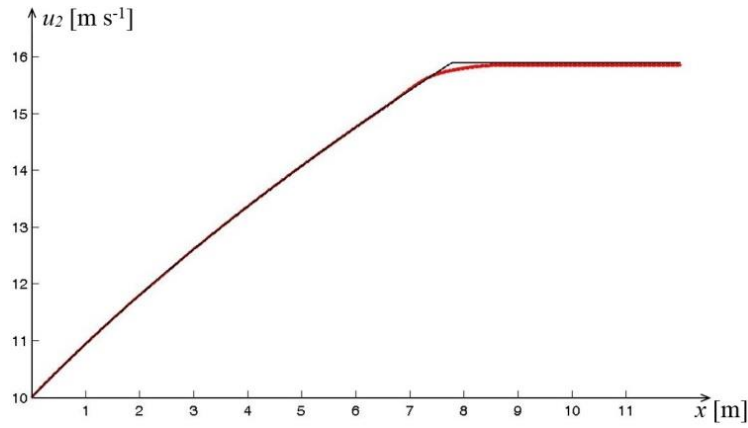
Obr. 44: Analytické řešení Ransomova problému vodovodního kohoutku v čase $t_k = 0,6$ s. V levé části je dobře patrný nálevkovitý tvar vyvíjející se ze vstupu vlivem tíhového zrychlení působícího na kapalinu.

Řešení Ransomova problému vodovodního kohoutku s vyvinutou nespojitostí v čase $t_k = 0,6$ s pro dvě varianty výpočetních algoritmů, prezentované autorem této práce na studentské vědecké konferenci [I], ukazují obr. 45 a 46. Červenou křivkou jsou vyneseny výsledky získané vlastním vyvinutým softwarem založeným na AUSM+ schématu s lineární rekonstrukcí primitivních veličin v korektorovém kroku a modře jsou potom vykresleny výsledky AUSM+ schématu bez rekonstrukce. Pro srovnání je černou čarou v grafech znázorněno analytické řešení.

Závislost objemového podílu *tekutiny 1* (plynu) na poloze, či chceme-li hloubce od vstupního vodovodního kohoutku, ukazuje obr. 45. V levé části od nespojitosti, tedy v $x < x_{dis} \doteq 7,767$ m je dobře patrný nálevkovitý tvar proudu *tekutiny 2* (tedy kapaliny, či chceme-li vody) urychlované tíhovým zrychlením ze vstupu. Objemový podíl můžeme dát do souvislosti s částí průřezu, kterou daná fáze zaujímá $S_2 \Leftrightarrow S_{celkový} \alpha_2$ a převést tak 1D řešení na obr. 45 do 2D představy jako je na obr. 44. Z výsledků je patrné, že i bez lineární rekonstrukce AUSM+ schéma v tomto případě produkuje zákmit řešení v oblasti nespojitosti. Na obr. 46 jsou ukázána řešení rychlosti *tekutiny 2* (kapaliny) na poloze. Modré body se v tomto rozlišení obrázku téměř překrývají s červenými.



Obr. 45: Numerické řešení problému vodovodního kohoutku v čase $t_k = 0,6$ s. Závislost objemového podílu *tekutiny 1* na poloze, určená na výpočetní síti o $N = 800$ buňkách. Analytické řešení černě, AUSM+ schéma modře a AUSM+ schéma s lineární rekonstrukcí v korektorovém kroku červeně.



Obr. 46: Numerické řešení problému vodovodního kohoutku v čase $t_k = 0,6$ s. Závislost rychlosti tekutiny 2 na poloze, určená na výpočetní síti o $N = 800$ buňkách. Analytické řešení černě, AUSM+ schéma modře a AUSM+ schéma s lineární rekonstrukcí v korektorovém kroku červeně.

Právě úloha vodovodního kohoutku se velmi často používá pro testování kvality algoritmů numerického řešení čtyřrovnice TFM. Při hledání ustáleného stavu této úlohy byl objeven, v podstatě náhodou, velmi zajímavý jev, který není popsán nikde v dohledatelné literatuře, neboť ta se ustáleným řešením ($t > t_s \doteq 0,85$ s; t_s je čas dosažení ustáleného řešení) zabývá pouze okrajově, [I], [II]. Pozornost výzkumníků se totiž koncentruje především na numerické simulace vývoje nespovitosti a kvalitu jejího zachycení.

Po odplutí počáteční podmínky v čase $t_s \doteq 0,85$ s je dosaženo ustáleného stavu, hodnoty řešených veličin odpovídají ustálenému analytickému řešení a metoda velmi rychle konverguje. Pro řešení pomocí algoritmu s AUSM+ schématem s lineární rekonstrukcí v korektorovém kroku trvá tento ustálený stav relativně dlouho, bez odchylek, či náznaků nefyzikálních oscilací. Až někdy v čase $t > 5$ s se náhle objeví na vstupu porucha, která se šíří postupně do celé výpočtové oblasti a způsobuje nežádoucí (nefyzikální) oscilace.

Této destabilizaci autor disertační práce zabránil tím, že navrhl alternativní způsob řešení čtyřrovnice TFM a použil pro výpočet jím navržené kompozitní schéma s vyšší mírou numerické viskozity, viz následující odstavce.

Příklad alternativního způsobu řešení čtyřrovnice modelu

Odlíšný postup řešení byl navržen v práci [36], kde se Evje a Flåtten rovněž inspirovali AUSM schématy a myšlenkou štěpit toky na konvektivní a tlakovou část. Avšak pro výpočet použili schémata nezávislejší na vlastní struktuře systému i na rychlosti zvuku. Dvoutekutinový model (3.1), (3.2) přeformulovali do tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1^2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2^2 \end{bmatrix} + (\sigma^{\Delta p}) \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha_1 \rho_1 g \\ \alpha_2 \rho_2 g \end{bmatrix}, \quad (3.64)$$

který lze zapsat maticově jako

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{w} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}^c + (\sigma^{\Delta p}) \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{a} + \mathbf{a} \frac{\partial p}{\partial x} = \mathbf{s}, \quad (3.65)$$

kde $\sigma^{\Delta p} = \sigma \frac{\alpha_1 \alpha_2 \rho_1 \rho_2}{\alpha_1 \rho_2 + \alpha_2 \rho_1} (u_1 - u_2)^2$ je jeden ze členů tlaku rozhraní, viz (3.10). Dopadem této úpravy je však zvýšení počtu nekonzervativních členů na dva. Schéma metody konečných objemů při použití zpětného Eulerova schématu má tvar

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{F}_{i+1/2}^{Cn} - \mathbf{F}_{i-1/2}^{Cn}] - \Sigma \Delta p_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{A}_{i+1/2}^n - \mathbf{A}_{i-1/2}^n] - \\ - \mathbf{A}_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} [P_{i+1/2}^{n+1/2} - P_{i-1/2}^{n+1/2}] + \Delta t \mathbf{S}_i^n. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Derivace objemových podílů ve třetím členu byly aproximovány centrálně. Derivace tlaků na stěnách byly řešeny tokovou funkcí tlaku řešenou pomocí Laxova-Friedrichsova schématu, jedná se tedy o aplikaci střídavé sítě, více podrobností lze najít v [36].

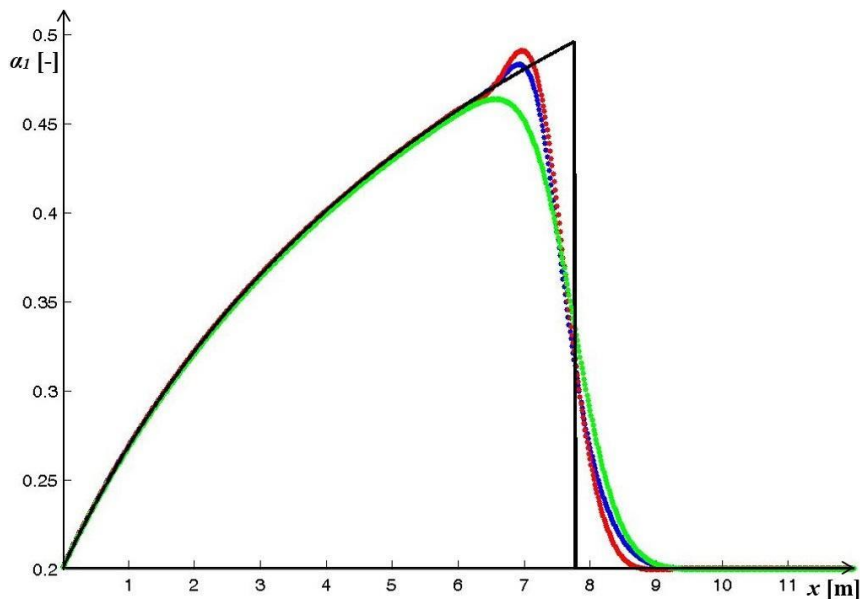
Pro aproximaci konvektivní části numerického toku použil autor této práce AUSM+ schéma popsané v odstavci 3.1.1.1. Výsledky numerických simulací Toumiova problému jsou téměř totožné s výše popsanými. Pro odstranění nefyzikálních numerických oscilací ustáleného řešení úlohy proto bylo navrženo kompozitní schéma, viz [I] a [II], které střídá sekvence upwind schématu, [36], ve tvaru

$$F_e^{C_Upwind}{}_{i+1/2} = \begin{cases} \begin{bmatrix} (\alpha_e \rho_e)_i \\ (\alpha_e \rho_e u_e)_i \end{bmatrix} u_{e_{i+1/2}}, & \text{když } u_{e_{i+1/2}} \geq 0 \\ \begin{bmatrix} (\alpha_e \rho_e)_{i+1} \\ (\alpha_e \rho_e u_e)_{i+1} \end{bmatrix} u_{e_{i+1/2}}, & \text{když } u_{e_{i+1/2}} < 0 \end{cases} \quad (3.67)$$

pro tekutinu e , kde rychlost na stěně je určena jako průměr hodnot ze sousedních buněk $u_{e_{i+1/2}} = (u_{e_i} + u_{e_{i+1}})/2$, s iteracemi centrálního schématu ve tvaru, [36],

$$F_{C_Central}{}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (F_i^C + F_{i+1}^C) + \frac{1}{4} \frac{\Delta x}{\Delta t} (\mathbf{w}_i - \mathbf{w}_{i+1}). \quad (3.68)$$

Poměr střídání upwind (34 iterací) a centrálního schématu (1 iterace) byl na základě numerických experimentů, stanoven tak, aby výsledné kompozitní schéma zachycovalo nespojitost co možná nejlépe a přitom řešilo ustálený stav Ransomova problému dostatečně přesně a přitom bez nežádoucích nefyzikálních oscilací. Rozbor vlivu poměru střídání upwind a centrálního schématu na numerické výsledky problému vodovodního kohoutku byl prezentován autorem této práce na konferenci [II]. Porovnání výsledků dosažených pomocí AUSM+ schémat bez rekonstrukce a s rekonstrukcí v korektorovém kroku a kompozitního schématu ukazuje obr. 47, [I], přičemž bylo ve všech výpočtech použito Heuenovo schéma pro aproximaci časové derivace.



Obr. 47: Problém vodovodního kohoutku v čase $t_k = 0,6$ s. Objemový podíl tekutiny l vypočtený s použitím různých schémat: AUSM+ s rekonstrukcí v korektoru (červeně), AUSM+ bez rekonstrukce (modře) a kompozitní schéma (zeleně).

3.2 Šestirovnicový dvoutekutinový model

Šestirovnicový TFM v 1D byl rovněž implementován v [100] pro řešení Toumiova „*shock tube*“ problému a Saurelova „*shock tube*“ problému. Šestirovnicový TFM se skládá ze dvou rovnic kontinuity, dvou pohybových rovnic a dvou rovnic energie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \rho_1 u_1) = 0, \quad (3.69a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \rho_2) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2 \rho_2 u_2) = 0, \quad (3.69b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_1(\rho_1 u_1^2 + p)] = p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + (p^{\Delta p})_1, \quad (3.70a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \rho_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_2(\rho_2 u_2^2 + p)] = p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + (p^{\Delta p})_2, \quad (3.70b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 e_1) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_1 u_1(\rho_1 e_1 + p)] = -p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_{Int} (p^{\Delta p})_1, \quad (3.71a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \rho_2 e_2) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_2 u_2(\rho_2 e_2 + p)] = -p \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + u_{Int} (p^{\Delta p})_2. \quad (3.71b)$$

Oproti čtyřrovnicovému TFM je rozšířený o energetické rovnice, po jedné pro každou fázi a je tedy schopný postihovat i termodynamické děje. Poznamenejme, že e značí měrnou celkovou energii tekutiny a u_{Int} je rychlost pohybu rozhraní.

Uvedené rovnice (3.69) – (3.71) odpovídají výchozímu TFM (2.45) – (2.47), odvozenému v odstavci 2.4, opět s jediným tlakovým polem $p = p_1 = p_2 = p_{Int}$. Šestirovnicový TFM s jedním tlakovým polem není hyperbolický, ale po přidání přídatného umělého členu do pohybových a energetických rovnic pro každou tekutinu se hyperbolickým stane. Přestože model (3.69) – (3.71) je nekonzervativní, bývá rovněž zaváděn vektor konzervativních proměnných

$$\mathbf{w} = [\alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \alpha_1 \rho_1 u_1, \alpha_2 \rho_2 u_2, \alpha_1 \rho_1 e_1, \alpha_2 \rho_2 e_2]^T. \quad (3.72)$$

Uvedený systém rovnic lze zapsat maticově a případně doplnit o vektor zdrojových členů $\mathbf{s}(\mathbf{w})$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{w} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{w}) = \mathbf{n}(\mathbf{w}) + \mathbf{s}(\mathbf{w}), \quad (3.73)$$

kde vektor nevazkých konzervativních toků $\mathbf{f}(\mathbf{w})$, vektor nekonzervativních členů $\mathbf{n}(\mathbf{w})$, který obsahuje první derivace, a vektor zdrojových členů $\mathbf{s}(\mathbf{w})$ mají složky

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_1(\rho_1 u_1^2 + p) \\ \alpha_2(\rho_2 u_2^2 + p) \\ \alpha_1 u_1(\rho_1 e_1 + p) \\ \alpha_2 u_2(\rho_2 e_2 + p) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{n} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ p \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + (p^{\Delta p})_1 \\ p \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + (p^{\Delta p})_2 \\ -p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_{Int} (p^{\Delta p})_1 \\ -p \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + u_{Int} (p^{\Delta p})_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha_1 \rho_1 g \\ \alpha_2 \rho_2 g \\ \alpha_1 \rho_1 g u_1 \\ \alpha_2 \rho_2 g u_2 \end{bmatrix}. \quad (3.74)$$

Tento systém obsahuje 12 neznámých veličin: $\alpha_1, \alpha_2, \rho_1, \rho_2, u_1, u_2, e_1, e_2, p, (p^{\Delta p})_1, (p^{\Delta p})_2, u_{Int}$. Je tedy třeba jej doplnit o alespoň šest přídatných vztahů:

- rovnice pro objemové podíly, (2.14), $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$,
- stavová rovnice pro tekutinu 1,
- stavová rovnice pro tekutinu 2,
- vhodný model pro vyjádření přídatných členů $(p^{\Delta p})_1$ a $(p^{\Delta p})_2$,

- rovnice pro rychlost pohybu rozhraní u_{int} .

Pro názornost však byl, po vzoru [100], zvolen složitější způsob uzavření rovnic, který zavádí další fyzikální veličiny, a to termodynamické teploty obou fází T_1, T_2 . Nově je tedy zapotřebí osmi přídatných vztahů pro uzavření modelu:

- rovnice pro objemové podíly $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$,
- dvojice stavových rovnic pro *tekutinu 1*: $p(\rho_1, \epsilon_1)$ a $p(\rho_1, T_1)$,
- dvojice stavových rovnic pro *tekutinu 2*: $p(\rho_2, \epsilon_2)$ a $p(\rho_2, T_2)$,
- vhodný model pro vyjádření přídatných členů $(p^{\Delta p})_1$ a $(p^{\Delta p})_2$,
- rovnice pro rychlost pohybu rozhraní u_{int} .

Pro *tekutinu 1* (plyn) použijeme stavovou rovnici ve tvaru

$$p = (\kappa_1 - 1) \rho_1 \epsilon_1, \quad (3.75)$$

kde ϵ značí měrnou vnitřní energii a modelový parametr představuje Poissonovu konstantu $\kappa_1 = 1,4$. A druhou stavovou rovnici

$$p = \rho_1 r_1 T_1, \quad (3.76)$$

kde uvažujeme plynovou konstantu o hodnotě $r_1 = 288,2 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$. Kombinací těchto vztahů dostaneme

$$\epsilon_1 = \frac{r_1 T_1}{\kappa_1 - 1}. \quad (3.77)$$

Rychlost zvuku v *tekutině 1* je definována jako

$$c_1 = \sqrt{\frac{\kappa_1 p}{\rho_1}}. \quad (3.78)$$

Obdobně pro *tekutinu 2* (kapalinu) použijeme stavovou rovnici ve tvaru

$$p = (\kappa_2 - 1) \rho_2 \epsilon_2 - \kappa_2 K \quad (3.79)$$

s hodnotami modelových konstant $\kappa_2 = 2,8$ a $K = 8,5 \cdot 10^8 \text{ Pa}$ a druhý konstitutivní vztah

$$p = \frac{\kappa_2 - 1}{\kappa_2} \rho_2 c_{p_2} T_2 - K, \quad (3.80)$$

kde uvažujeme, že pro měrnou tepelnou kapacitu platí $c_{p_2} = 4186 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$. Kombinací (3.79) a (3.80) dostaneme

$$\epsilon_2 = \frac{c_{p_2} T_2}{\kappa_2} + \frac{K}{\rho_2}. \quad (3.81)$$

Rychlost zvuku v *tekutině 2* je definována jako

$$c_2 = \sqrt{\frac{\kappa_2 (p+K)}{\rho_2}}. \quad (3.82)$$

Z vektoru konzervativních proměnných se potom určí tlak následovně. Nejprve se vypočte měrná vnitřní energie, pro každou tekutinu, pro kterou platí

$$\epsilon = e - \frac{1}{2} u^2. \quad (3.83)$$

Pomocí složek vektoru konzervativních proměnných \mathbf{w} lze měrné vnitřní energie vyjádřit jako: $\epsilon_1 = w_5/w_1 - 1/2 [w_3/w_1]^2$ a $\epsilon_2 = w_6/w_2 - 1/2 [w_4/w_2]^2$. Kombinací stavových rovnic (3.75) a (3.79) spolu s rovností pro objemové podíly vznikne opět nelineární rovnice pro tlak

$$\frac{w_1 (\kappa_1 - 1) \epsilon_1}{p} + \frac{w_2 (\kappa_2 - 1) \epsilon_2}{p + \kappa_2 K} = 1, \quad (3.84)$$

kteřou lze efektivně řešit numerickými metodami, například metodou prosté iterace popsanou v odstavci 3.1.2.1. Hustoty tekutin jsou jednoznačně určeny tlakem a měrnými vnitřními energiemi. Z prvních dvou složek vektoru konzervativních proměnných lze dopočítat objemové podíly fází. Termodynamické teploty dopočítáme například ze stavových rovnic (3.77) a (3.81).

Tlak rozhraní je vyjádřen pomocí Bestionových vztahů (3.9) – (3.11b). Rychlost pohybu rozhraní může být modelována jako různé vážené průměry rychlostí obou fází, např.

$$u_{int} = C u_1 + (1 - C) u_2, \quad (3.85)$$

kde $C \in (0, 1)$, nebo pomocí konstitutivních vztahů uvedených v odstavci 2.7.3. V našem případě byla zvolena váha $C = \alpha_1$ v rovnici (3.85). Kompletní vektor primitivních proměnných čítá šest složek

$$\mathbf{v} = [\alpha_1, u_1, u_2, p, T_1, T_2]^T. \quad (3.86)$$

3.2.1 Numerické řešení šestirovnicového dvoutekutivového modelu založené na metodě konečných objemů

Pro numerické řešení šestirovnicového TFM autor této disertační práce modifikoval již vyvinutý řešič pro čtyřrovnicový TFM založený na metodě konečných objemů, AUSM+ schématu s lineární rekonstrukcí primitivních veličin v korektorovém kroku a minmod limiterem. Schéma metody konečných objemů zůstává stejné ve tvaru (3.29a) a (3.29b). Předtím, než provedeme štěpení nevazkého numerického toku na konvektivní a tlakovou část, upravíme pátou a šestou složku vektoru nevazkého toku zavedením měrné celkové entalpie $h_e = e_e + p/\rho_e$ tekutiny e .

AUSM schéma bylo detailně popsáno v odstavci 3.1.1.1. Konzervativní numerický tok je zde dělen na konvektivní a tlakovou část. Oproti rovnicím (3.30) zde však vystupují navíc toky energetických rovnic

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}_1^C + \mathbf{F}_1^P = \begin{bmatrix} \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1^2 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 h_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_1 p \\ 0 \end{bmatrix} = \dot{m}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ u_1 \\ h_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_1 p \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.87a)$$

$$\mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_2^C + \mathbf{F}_2^P = \begin{bmatrix} \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2^2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 h_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_2 p \\ 0 \end{bmatrix} = \dot{m}_2 \begin{bmatrix} 1 \\ u_2 \\ h_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_2 p \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.87b)$$

Konvektivní a tlakové složky numerického toku se štěpí podle normálového Machova čísla na příspěvky od jednotlivých buněk (L a R) způsobem popsaným v odstavci 3.1.1.1, včetně uvedených štěpicích polynomů. Konvektivní složky celkového numerického toku jsou potom určeny na základě znaménka hmotnostního toku, určeného z rovnic (3.35)

$$\mathbf{F}_1^C = \frac{1}{2} \dot{m}_1 \left(\begin{bmatrix} 1 \\ u_{1L} \\ h_{1L} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ u_{1R} \\ h_{1R} \end{bmatrix} \right) + \frac{1}{2} |\dot{m}_1| \left(\begin{bmatrix} 1 \\ u_{1L} \\ h_{1L} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ u_{1R} \\ h_{1R} \end{bmatrix} \right), \quad (3.88a)$$

$$\mathbf{F}_2^C = \frac{1}{2} \dot{m}_2 \left(\begin{bmatrix} 1 \\ u_{2L} \\ h_{2L} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ u_{2R} \\ h_{2R} \end{bmatrix} \right) + \frac{1}{2} |\dot{m}_2| \left(\begin{bmatrix} 1 \\ u_{2L} \\ h_{2L} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ u_{2R} \\ h_{2R} \end{bmatrix} \right). \quad (3.88b)$$

Rychlost pohybu rozhraní, figurující v nových složkách vektoru $\mathbf{n}(\mathbf{w})$, je stanovena v i -té buňce pomocí vztahu (3.85). Posledním úkolem je diskretizace členů s časovou derivací objemového

podílu $-p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}$ a $-p \frac{\partial \alpha_2}{\partial t}$, které se nově vyskytují v nekonzervativních vektorech $\mathbf{n}(\mathbf{w})$, první člen diskretizujeme pomocí zpětné diferenční formule

$$\left[-p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}\right]_i^n = [-p]_i^n \frac{[\alpha_1]_i^n - [\alpha_1]_i^{n-1}}{\Delta t^{n-1}}, \quad (3.89a)$$

což však vyžaduje při algoritmizaci uchovávat hodnoty objemového podílu z minulé časové hladiny. Z rovnosti pro objemové podíly platí $\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\frac{\partial \alpha_2}{\partial t}$ a tedy

$$\left[-p \frac{\partial \alpha_2}{\partial t}\right]_i^n = [-p]_i^n \frac{[\alpha_2]_i^n - [\alpha_2]_i^{n-1}}{\Delta t^{n-1}} = [p]_i^n \frac{[\alpha_1]_i^n - [\alpha_1]_i^{n-1}}{\Delta t^{n-1}}. \quad (3.89b)$$

3.2.2 Numerické řešení Toumiova „shock tube“ problému

Jako testovací úloha byl použit Toumiův „shock tube“ problém, popsáný v odstavci 3.1.2.1 věnovaném implementaci čtyřrovniceového TFM. Počáteční hodnoty vektoru primitivních proměnných v obou polovinách oblasti byly doplněny o termodynamické teploty tekutin $T_{1L}^0 = T_{2L}^0 = T_{1R}^0 = T_{2R}^0 = 308,15 \text{ K}$

$$\mathbf{v}_L^0 = [\alpha_{1L}^0; u_{1L}^0; u_{2L}^0; p_L^0; T_{1L}^0; T_{2L}^0]^T, \quad (3.90a)$$

$$\mathbf{v}_R^0 = [\alpha_{1R}^0; u_{1R}^0; u_{2R}^0; p_R^0; T_{1R}^0; T_{2R}^0]^T. \quad (3.90b)$$

Na koncích výpočtové oblasti o N buňkách byla aplikována stěnová okrajová podmínka. Hodnoty složek vektoru primitivních proměnných ve virtuální buňce za stěnou, vzhledem k přilehlé vnitřní buňce (L) výpočetní sítě, jsou

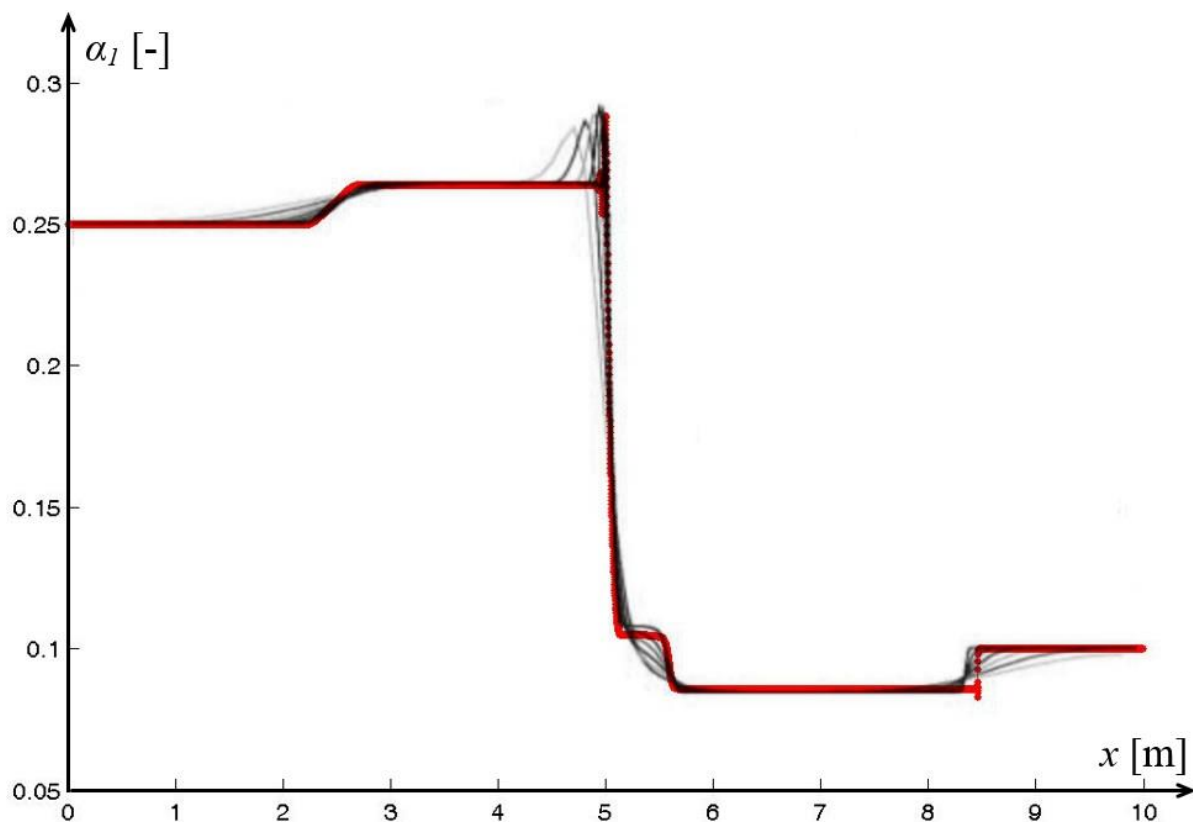
$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{R \text{ virt}} &= [\alpha_{1L}; -u_{1L}; -u_{2L}; p_L; T_{1L}; T_{2L}]^T = \\ &= [v_{1L}; -v_{2L}; -v_{3L}; v_{4L}; v_{5L}; v_{6L}]^T \end{aligned} \quad (3.91a)$$

a vektor konzervativních proměnných má odpovídající tvar

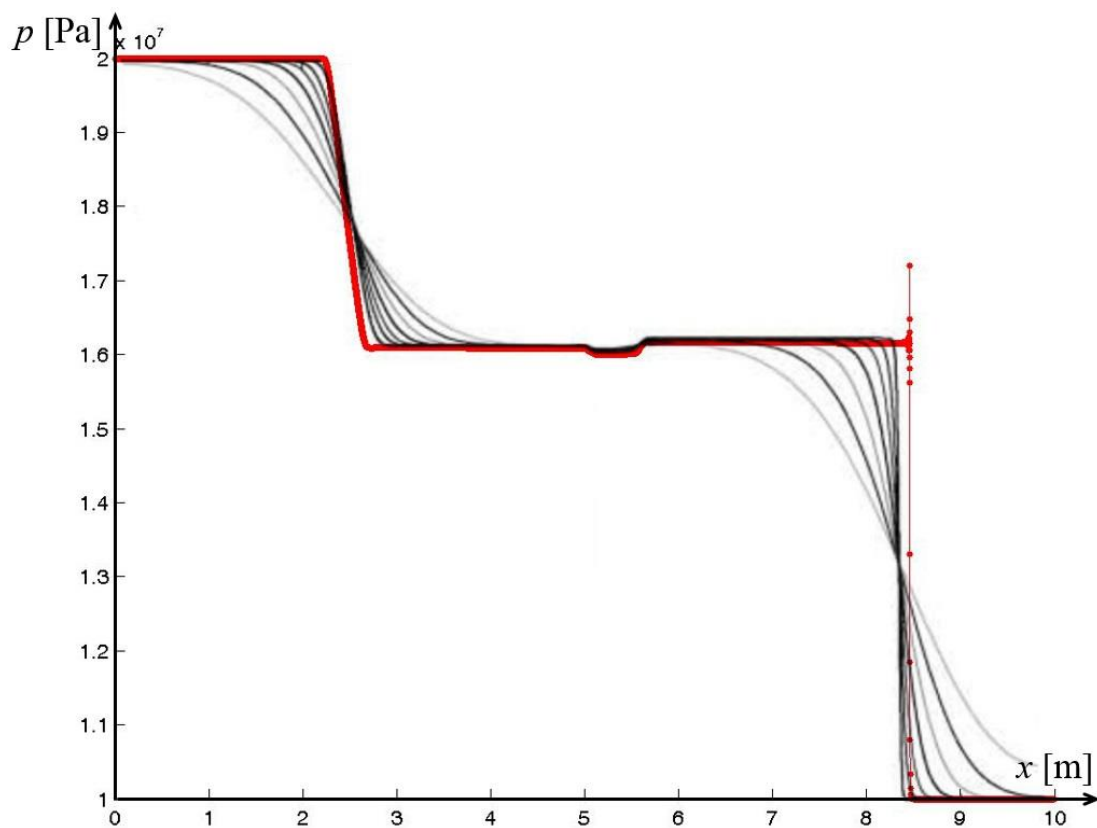
$$\mathbf{w}_{R \text{ virt}} = [w_{1L}; w_{2L}; -w_{3L}; -w_{4L}; w_{5L}; w_{6L}]^T. \quad (3.91b)$$

Konstitutivní vztahy, včetně hodnot parametrů byly uvedeny v předchozím výkladu. Hodnota koeficientu v Bestionově vztahu pro tlak rozhraní (3.10) je $\sigma = 2$. Vliv tíhového zrychlení není v modelu zahrnut. Délka časového kroku byla určována podle vztahu (3.54) s Courantovým číslem $\text{CFL} = 0,1$.

Dosažené numerické výsledky získané pomocí popsaného výpočetního algoritmu, který používá Heuenovo schéma pro výpočet časové derivace a AUSM+ schéma pro aproximaci nevazkého konzervativního toku s lineární rekonstrukcí primitivních veličin v korektorovém kroku, jsou vyneseny červenou barvou v obr. 48 a 49. Byla použita rovnoměrná výpočetní síť o $N = 10^4$ buňkách. Oproti zjednodušenému čtyřrovniceovému TFM je patrná dobrá shoda s výsledky prezentovanými v [100], které jsou vykresleny v obrázcích černě. Dosažené numerické řešení šestirovniceového modelu při použití stejné sítě dokonce zachycuje přechody ostřeji než výsledky publikované v [100]. To je patrně důsledkem vyšší přesnosti použitých numerických schémat v navrženém výpočetním algoritmu řešení.



Obr. 48: Toumiův problém, rozložení objemového podílu *tekutiny 1* v čase $t_k = 0,006$ s. Červeně jsou vyznačeny výsledky dosažené pomocí vyvinutého řešiče a černě řešení prezentované v práci [100] na různých sítích.



Obr. 49: Toumiův problém, tlak ve výpočtové oblasti v čase $t_k = 0,006$ s. Červeně jsou vyznačeny výsledky dosažené pomocí vyvinutého řešiče a černě řešení prezentované v práci [100] na různých sítích.

3.3 Třírovniceový model pro řešení rozvrstvených proudění

V kapitolách 1 a 2 bylo konstatováno, že rozvrstvená proudění lze simulovat nejen pomocí specializovaných metod, ale i pomocí dvoutekutinových eulerovských modelů. Pro řešení rozvrstvených proudění je vhodnější použít TFM, který je rozšířen o advekční rovnici objemového podílu jedné z fází (2.99). Tato rovnice totiž dává přímo do spojitosti advekci objemového podílu s rychlostí pohybu rozhraní u_{Int} . Zavedení této rovnice, coby konstitutivního vztahu do šestirovniceového výchozího modelu, bylo ukázáno v odstavci 2.7.3 věnovaném sedmirovniceovému TFM, kde byla rovněž popsána její těsná vazba k modelům pro řešení rozvrstvených proudění dvou tekutin a příbuznost rovnice (2.99) s advekční rovnicí značkovacích funkcí (2.82), která se používá v metodách zachycení rozhraní, viz odstavec 2.7.1. Pro simulace rozvrstvených proudění se proto používají sedmirovniceové TFM a redukované modely z nich odvozené, například pětirovniceový model prezentovaný v [94], který autoři Murrone a Guillard použili pro řešení problémů protržení hráze, vzestupu bubliny aj.

Studovat problematiku rozvrstvených proudění má význam pouze ve dvou, či třech dimenzích. Proto bude tento model a způsob jeho řešení popsán ve 2D, na rozdíl od předešlých TFM, se kterými bylo pracováno pouze v 1D.

Vůbec nejjednodušší model pro řešení proudění jedné stlačitelné tekutiny s volnou hladinou odvozený od TFM je třírovniceový model, který prezentoval Dumbser v práci [27]. Dumbser použil pro numerické řešení třírovniceového modelu nespojitou Galerkinovu metodu konečných prvků (zkr. DGFEM), viz [28]. Tento model byl validován například na úloze vstřikování proudu tekutiny, či deformace čtverce ve vírovém rychlostním poli. Dále byly v práci [27] prezentovány výsledky různě definovaných úloh protržení hrází. Výsledky 3D úloh byly publikovány později, v [26], kde lze najít další numerické výsledky simulací protržení hrází, obtékání překážek na hladině nebo lití materiálů.

Třírovniceový model je odvozen z původního Baerova – Nunziatova sedmirovniceového TFM (2.95) – (2.97) a (2.99), [5], který doplňují příslušné konstitutivní vztahy pro podmínky na rozhraní tekutin (2.98). V první řadě je zcela zanedbána sekundární tekutina a dále se předpokládá, že její dynamika neovlivňuje chování primární fáze. To vedlo k redukci modelu o všechny tři rovnice popisující proudění sekundární fáze i o všechny příslušné veličiny. Redukovaný model je vhodný pro simulace proudění s volnou hladinou, například pro simulaci rozvrstveného proudění jedné tekutiny ve vakuu. Předmětem simulací je pouze pohyb primární tekutiny bez řešení transportu energie aj. Pro modelování stlačitelnosti tekutiny byla použita Taitova rovnice nezávislá na energetické rovnici, která byla ze systému vypuštěna pro nadbytečnost.

Rovnice kontinuity a pohybová rovnice primární fáze s rovnicí pro advekci primární fáze tvoří dohromady třírovniceový model pro řešení rozvrstveného proudění stlačitelné tekutiny

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) = 0, \quad (3.92)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_1(\rho_1 \mathbf{u}_1^2 + p_1)] = p_{Int} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}, \quad (3.93)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_1 + \mathbf{u}_{Int} \frac{\partial}{\partial x} \alpha_1 = 0. \quad (3.94)$$

Tento model je doplněn o konstitutivní vztahy v souladu s původním Baerovým – Nunziatovým modelem. Tlak na rozhraní je roven tlaku lehčí z fází (zanedbaná fáze) $p_{Int} = p_2$ a rychlost pohybu rozhraní je totožná s pohybem těžší fáze (tekutina, zanedbaná fáze) $\mathbf{u}_{Int} = \mathbf{u}_1$. Tlak sekundární fáze je nezbytné vhodně modelovat, neboť byl při redukci modelu vypuštěn. Dumbser navrhl držet

na rozhraní konstantní tlak na hodnotě atmosférického tlaku $p_{Int} = p_2 = p_{ATM}$, navíc použil stavovou rovnici vtaženou k hodnotě p_{ATM} . Tento předpoklad dobře vystihuje například právě simulace protržení hrází. V důsledku je možné vztáhnout tlak k hodnotě atmosférického tlaku a pracovat potom s relativním tlakem $\tilde{p} = p - p_{ATM}$. Výhodou tohoto přístupu, kdy $\tilde{p}_{Int} = 0$ Pa, je vynulování nekonzervativního členu s tlakem na rozhraní v pohybové rovnici. Jedná se tedy formálně o obdobu systému Eulerových rovnic doplněnou o advekční rovnici pro objemový podíl tekutiny, která vyjadřuje unášení rozhraní společně s pohybem tekutiny.

Dále budou, vzhledem k přítomnosti jen jediné tekutiny, vynechány indexy označující tekutinu. Rozepsáno ve 2D dostáváme třírovnicový model rovinného proudění tekutiny s volnou hladinou

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha \rho) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha \rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha \rho v) = 0, \quad (3.95)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha \rho u) + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha(\rho u^2 + \tilde{p})] + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha \rho u v) = 0, \quad (3.96a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha \rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha \rho u v) + \frac{\partial}{\partial y}[\alpha(\rho v^2 + \tilde{p})] = \alpha \rho g, \quad (3.96b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\alpha + u \frac{\partial}{\partial x}\alpha + v \frac{\partial}{\partial y}\alpha = 0, \quad (3.97)$$

kde x a y jsou kartézské složky vektoru prostorových proměnných, u a v jsou kartézské složky vektoru rychlosti tekutiny $\mathbf{u} = [u, v]^T$ ve směrech x a y . Advekční rovnice (3.97) je však bohužel v nekonzervativním tvaru. Zdrojový člen na pravé straně rovnic hybnosti představuje tíhovou sílu vztahenou na jednotku objemu určenou tíhovým zrychlením g ve směru y . Aby měl model fyzikální smysl, musí být obecně celkový tlak kladný, tedy musí platit $\tilde{p} > -p_{ATM}$, a zároveň být kladná hustota $\rho > 0$. Za těchto podmínek je model hyperbolický s reálnými vlastními čísly $\lambda_1 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - c |\mathbf{n}|$, $\lambda_2 = \lambda_3 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, $\lambda_4 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + c |\mathbf{n}|$ pro $0 < \alpha < 1$. To znamená, že žádná z fází nesmí v oblasti zcela vymizet. V praxi se omezující podmínka pro objemový podíl řeší tak, že přítomnost čisté fáze značí $\alpha = 1 - \varepsilon$ a naopak její úplnou nepřítomnost $\alpha = 0 + \varepsilon$, kde ε je řádově malé číslo.

Při sestavování numerického kódu založeného na metodě konečných objemů pro řešení popsaného modelu (3.95) – (3.97) působil největší problémy výpočet advekční rovnice (3.97). Poznamenejme, že ve výše citovaných pracích není uveden způsob výpočtu této advekční rovnice. Prvotním záměrem bylo určit nekonzervativní členy pomocí centrálního schématu, jako to bylo učiněno při řešení nekonzervativních členů TFM, viz (3.43). Ve 2D by příslušné schéma mělo tvar

$$\alpha_{i,j}^{n+1} = \alpha_{i,j}^n - u_{i,j}^n \frac{\Delta t}{2 \Delta x} (\alpha_{i+1,j}^n - \alpha_{i-1,j}^n) - v_{i,j}^n \frac{\Delta t}{2 \Delta y} (\alpha_{i,j+1}^n - \alpha_{i,j-1}^n), \quad (3.98)$$

při použití rovnoměrné kartézské strukturované sítě, kde i je řádkový index a j sloupcový index. Při implementaci na problém protržení hráze však poměrně záhy došlo k velkému růstu skalárního součinu vektoru rychlosti s aproximací gradientu objemového podílu, takže došlo k překročení fyzikálních limitů pro objemový podíl, tj. $\alpha_{i,j}^{n+1} \notin \langle 0,1 \rangle$.

Výsledků bylo dosaženo až po přeformulování rovnice (3.97) s použitím věty o derivaci součinu funkcí

$$u \frac{\partial \alpha}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(\alpha u) - \alpha \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (3.99a)$$

$$v \frac{\partial \alpha}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}(\alpha v) - \alpha \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (3.99b)$$

Nový tvar advekční rovnice pro objemový podíl je tedy

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha u) + \frac{\partial}{\partial y} (\alpha v) - \alpha \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0. \quad (3.100)$$

Ukázalo se, že při numerickém řešení vybraných testovacích úloh protržení hráze (odstavec 3.3.2) a vzestupu bubliny (odstavec 3.3.3), ve kterých byla použita advekční rovnice v upraveném tvaru (3.100) následně řešená níže popsáním způsobem, zůstávaly hodnoty objemového podílu v průběhu celého iteračního procesu omezené $\alpha^{n+1} \in \langle \max(\alpha^n), \min(\alpha^n) \rangle$ a tedy nebylo třeba sledovat splnění fyzikálního omezení ($\alpha \in \langle 0,1 \rangle$), ani podmínky hyperbolicity ($\alpha \in (0,1)$) daného systému.

Třírovnicový model (3.95), (3.96) a (3.100) lze zapsat maticově

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{w} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{w}) + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{g}(\mathbf{w}) = \mathbf{n}(\mathbf{w}) + \mathbf{s}(\mathbf{w}), \quad (3.101)$$

kde vektor konzervativních proměnných má tvar

$$\mathbf{w} = [\alpha \rho, \alpha \rho u, \alpha \rho v, \alpha]^T, \quad (3.102a)$$

kartézské složky vektoru nevazkého konzervativního toku stěnou jsou

$$\mathbf{f}(\mathbf{w}) = [\alpha \rho u, \alpha (\rho u^2 + \tilde{p}), \alpha \rho u v, \alpha u]^T, \quad (3.102b)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{w}) = [\alpha \rho v, \alpha \rho u v, \alpha (\rho v^2 + \tilde{p}), \alpha v]^T, \quad (3.102c)$$

vektor zdrojových členů zahrnující tíhovou sílu vztaženou na jednotku objemu je vyjádřený jako

$$\mathbf{s}(\mathbf{w}) = [0, 0, \alpha \rho g, 0]^T \quad (3.102d)$$

a nový nekonzervativní člen v přeformulované advekční rovnici je

$$\mathbf{n}(\mathbf{w}) = \left[0, 0, 0, \alpha \frac{\partial u}{\partial x} + \alpha \frac{\partial v}{\partial y} \right]^T. \quad (3.102e)$$

Model slouží pro řešení proudění tekutiny s volnou hladinou. Vzhledem k přijatým předpokladům při jeho odvození je použitelný v případě, že zanedbané médium ovlivňuje pohyb tekutiny pouze minimálně. Zároveň by v zanedbané fázi neměl být silný tlakový gradient podél rozhraní, protože model předpokládá konstantní rozložení vnějšího hydrostatického tlaku působícího na rozhraní. Rozhraní se šíří společně s prouděním tekutiny. Model neobsahuje energetickou rovnici, tudíž jej nelze použít pro řešení úloh termodynamiky. Uvedený model je vhodný například pro simulace protržení hrází nebo lití různých materiálů do forem. Dokáže přitom pracovat i se složitým rozvrstvením tekutiny, jak bude ukázáno na úloze vzestupu bubliny v odstavci 3.3.3.

Při odvozování třírovnicového modelu ze sedmirovnicového TFM byly převzaty uzavírací vztahy zavedené Baerem a Nunziatem (2.98). Proměnné ve výsledném třírovnicovém modelu jsou $\alpha, \rho, u, v, \tilde{p}$. Systém je tedy třeba dále doplnit již jen o jeden konstitutivní vztah, a to

- stavovou rovnici pro tekutinu ve tvaru $f(\tilde{p}, \rho) = 0$.

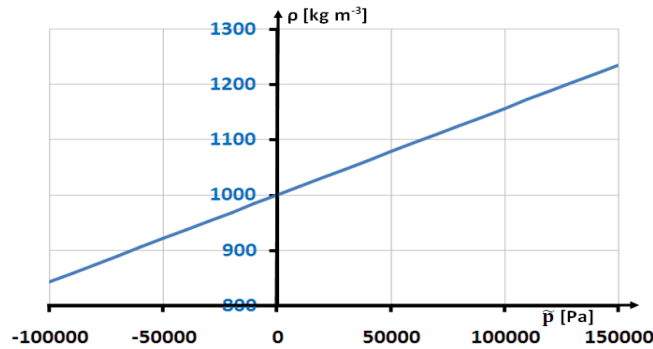
Dumbser uzavřel systém pomocí Taitovy stavové rovnice využívající relativní tlak $\tilde{p} = p - p^{ATM}$

$$\tilde{p} = K \left[\left(\frac{\rho}{\rho^0} \right)^\kappa - 1 \right], \quad (3.103)$$

kde hodnoty modelových parametrů pro problém protržení hráze byly nastaveny na $K = 6,37 \cdot 10^5$ Pa, $\rho^0 = 1000$ kg m⁻³, $\kappa = 1$. Poznamenejme, že tvar stavové rovnice (3.103) je formálně shodný se stavovou rovnicí (3.8) pro tlaky absolutní. Při $\kappa = 1$ závisí hustota na tlaku lineárně, jak ukazuje obr. 50. Rychlost zvuku je určena vztahem

$$c = \sqrt{\frac{\kappa}{\rho} (\tilde{p} + K)} \quad (3.104)$$

a pro uvedené hodnoty má konstantní velikost $c \doteq 25,24 \text{ m s}^{-1}$.



Obr. 50: Graf závislosti hustoty tekutiny na relativním tlaku \tilde{p} .

Stejné hodnoty parametrů stavové rovnice byly použity i pro provedené numerické simulace vybraných testovacích úloh z důvodu porovnatelnosti dosažených výsledků. Hustota modelované tekutiny v okolí relativního tlaku $\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, neboli $p = p_{ATM}$, přibližně odpovídá hustotě vody. Jak ale ukazuje graf na obr. 50, tekutina se dá dobře stlačovat, což neodpovídá reálnému chování vody.

Nerealistické hodnoty modelových parametrů byly použity záměrně proto, aby byla rychlost zvuku v tekutině nízká. Cílem bylo uměle udržet Machovo číslo ve výpočtové oblasti na relativně vysoké, avšak podzvukové hodnotě z důvodu dosažení větší efektivity a přesnosti použitých numerických metod určených pro řešení proudění stlačitelných tekutin. Podrobnější diskusi lze najít v [27]. Volba materiálových parametrů má však značný vliv na dosažené výsledky, protože dobrá stlačitelnost modelované tekutiny neodpovídá reálnému chování kapalin (vody).

Vektor primitivních proměnných čítá čtyři veličiny

$$\mathbf{v} = [\alpha, u, v, \tilde{p}]^T. \quad (3.105)$$

Další výhodou tohoto modelu oproti čtyřrovnicovému i šestirovnicovému TFM je, že není potřeba řešit nelineární rovnici pro tlak (3.57). Vzhledem k tomu, že je určována pomocí advekční rovnice přímo hodnota objemového podílu, lze snadno vypočítat ze složek vektoru konzervativních proměnných hustotu $\rho = W_1/W_4$ a následně dosazením do stavové rovnice (3.103) získat hodnotu relativního tlaku.

3.3.1 Numerické řešení třírovnicového modelu založené na metodě konečných objemů

Pro numerické řešení rozvrstveného proudění tekutiny ve 2D byl vyvinut autorem této disertační práce software založený na metodě konečných objemů, který využívá AUSM+ schéma. Jedná se o podobný numerický kód, který byl vytvořen pro řešení čtyřrovnicového a šestirovnicového TFM, v tomto případě je navíc rozšířen do 2D. Dále ukážeme způsob diskretizace rovnice pro advekci objemového podílu (3.100) pomocí metody konečných objemů na strukturované čtyřúhelníkové síti, analogicky jako v odstavci 3.1.1.

Rovnici (3.100) integrujeme přes kontrolní objem $\Omega_{i,j}$

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial}{\partial t} \alpha \, dS + \int_{\Omega_{i,j}} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\alpha u) + \frac{\partial}{\partial y} (\alpha v) \right] dS - \int_{\Omega_{i,j}} \alpha \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dS = 0, \quad (3.106)$$

zavedeme integrální průměr pro objemový podíl

$$\alpha_{i,j}(t) = \frac{1}{|\Omega_{i,j}|} \int_{\Omega_{i,j}} \alpha(x,t) dS \quad (3.107)$$

přes buňku $\Omega_{i,j}$ a aplikujeme Greenovu větu, která převede plošné integrály na křivkové

$$\frac{d \alpha_{i,j} |\Omega_{i,j}|}{dt} + \oint_{\partial \Omega_{i,j}} (\alpha u n_{j_x} + \alpha v n_{j_y}) dl - \alpha_{i,j} \oint_{\partial \Omega_{i,j}} (u n_{j_x} + v n_{j_y}) dl = 0. \quad (3.108)$$

Dále křivkové integrály nahradíme součtem integrálů přes jednotlivé hrany uvažované čtyřúhelníkové buňky $\Omega_{i,j}$ pevné výpočetní sítě

$$\begin{aligned} \frac{d \alpha_{i,j}}{dt} + \frac{1}{|\Omega_{i,j}|} \sum_{k=1}^4 \int_{\partial \Omega_{i,j,k}} \left((\alpha u)(x,t) n_{j_{kx}} + (\alpha v)(x,t) n_{j_{ky}} \right) dl_k - \\ - \frac{1}{|\Omega_{i,j}|} \alpha_{i,j} \sum_{k=1}^4 \int_{\partial \Omega_{i,j,k}} \left(u(x,t) n_{j_{kx}} + v(x,t) n_{j_{ky}} \right) dl_k = 0. \end{aligned} \quad (3.109)$$

A konečně zavedením numerických toků podobně jako v (3.23) dostaneme pro čtvrtou složku vektoru konzervativních proměnných schéma ve tvaru

$$\begin{aligned} w_{4,i,j}^{n+1} = w_{4,i,j}^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_{i,j}|} \sum_{k=1}^4 \left(F_{4,i,j,k}^n n_{j_{kx}} + G_{4,i,j,k}^n n_{j_{ky}} \right) |l_k| + \\ + \frac{\Delta t}{|\Omega_{i,j}|} w_{4,i,j}^n \sum_{k=1}^4 \left(H_{4,i,j,k}^n n_{j_{kx}} + I_{4,i,j,k}^n n_{j_{ky}} \right) |l_k|, \end{aligned} \quad (3.110)$$

kde bylo užito zpětné Eulerovo schéma pro aproximaci časové derivace. Rovnice (3.110) představuje diskretizovanou formulaci advekční rovnice (3.100).

3.3.1.1 AUSM schéma pro aproximaci toků v třírovníkovém modelu

Pro aproximaci konzervativních numerických toků použijeme opět AUSM+ schéma, které spočívá v rozdělení numerického toku na konvektivní a tlakovou část, viz odstavec věnovaný AUSM schématu 3.1.1.1, [100], [47] nebo [78],

$$\left(\mathbf{F}_{i,j,k}^n n_{j_{kx}} + \mathbf{G}_{i,j,k}^n n_{j_{ky}} \right) = (\mathbf{F}\mathbf{G})^C + (\mathbf{F}\mathbf{G})^P = \begin{bmatrix} \alpha \rho \\ \alpha \rho u \\ \alpha \rho v \\ \alpha \end{bmatrix} (u n_{j_{kx}} + v n_{j_{ky}}) + \alpha \tilde{p} \begin{bmatrix} 0 \\ n_{j_{kx}} \\ n_{j_{ky}} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.111)$$

kde $(u n_{j_{kx}} + v n_{j_{ky}}) = V_n$ je konvektivní normálová rychlost na stěně k .

Aproximace nevazkého konzervativního toku stěnou k kontrolního objemu $\Omega_{i,j}$ s vnější jednotkovou normálou $\mathbf{n}_{j_{i,j,k}}$ je vyjádřena jako funkce hodnot neznámých ve vnitřní buňce $\mathbf{w}_{i,j}^n = \mathbf{w}_L$ a hodnot v sousední buňce $\mathbf{w}_{i,j,k}^n = \mathbf{w}_R$ za stěnou k . Toky zbylými stěnami s příslušnými normálami se určí zcela stejným způsobem, pouze dojde ke změně vnější buňky \mathbf{w}_R a normály $\mathbf{n}_{j_{i,j,k}}$.

Příspěvky k toku od obou přilehlých buněk jsou určeny normálovým Machovým číslem na stěně, jehož velikost závisí na vyjádření rychlosti zvuku na stěně. Velikost rychlosti zvuku lze vyjádřit různými způsoby, v tomto případě byla aproximována aritmetickým průměrem z hodnot v přilehlých buňkách

$$c = \frac{c_L + c_R}{2}. \quad (3.112)$$

Normálové Machovo číslo je určeno podílem průmětu vektoru rychlosti proudění tekutiny

do směru vnější normály příslušné stěny a rychlosti zvuku

$$M_{nL} = \frac{\mathbf{u}_L \cdot \mathbf{n}_j}{c} = \frac{u_L n_{jx} + v_L n_{jy}}{c}, \quad (3.113a)$$

$$M_{nR} = \frac{\mathbf{u}_R \cdot \mathbf{n}_j}{c} = \frac{u_R n_{jx} + v_R n_{jy}}{c}. \quad (3.113b)$$

Machovo číslo na hranici je dáno součtem příspěvků levého a pravého normálového Machova čísla

$$M_{L/R} = \mathfrak{M}^+(M_{nL}) + \mathfrak{M}^-(M_{nR}), \quad (3.114)$$

kde \mathfrak{M}^+ a \mathfrak{M}^- jsou polynomiální štěpící funkce (3.34). Konvektivní složka konzervativního numerického toku je potom určena rovnicí

$$(\mathbf{FG})^C = \frac{1}{2} M_{L/R} c (\mathbf{w}_L + \mathbf{w}_R) + \frac{1}{2} |M_{L/R}| c (\mathbf{w}_L - \mathbf{w}_R). \quad (3.115)$$

Tlaková složka numerického konzervativního toku je určena tlakem na stěně sousedících buněk, který je definovaný pomocí polynomiálních štěpících funkcí \mathfrak{P}^+ a \mathfrak{P}^- , viz (3.38), jako

$$p_{L/R} = \mathfrak{P}^+(M_{nL}) \alpha_L \tilde{p}_L + \mathfrak{P}^-(M_{nR}) \alpha_R \tilde{p}_R \quad (3.116)$$

a platí tedy

$$(\mathbf{FG})^P = p_{L/R} [0, \quad n_{jx}, \quad n_{jy}, \quad 0]^T. \quad (3.117)$$

Na popsaném AUSM+ schématu je založeno i vyčíslení nekonzervativního členu vyskytujícího se v advekční rovnici pro objemový podíl *tekutiny*, jak prezentoval autor této práce na konferenci [IV]. Tok rychlosti stěnou v nekonzervativním členu lze vyjádřit jako

$$\left(\mathbf{H}_{i,jk}^n n_{j_{kx}} + \mathbf{I}_{i,jk}^n n_{j_{ky}} \right) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} n_{j_{kx}} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ v \end{bmatrix} n_{j_{yx}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} (u n_{j_{kx}} + v n_{j_{kx}}). \quad (3.118)$$

Ve schématu je použito stejné štěpení podle Machova čísla, jako při aproximaci konvektivní části konzervativního numerického toku

$$(\mathbf{HI})^N = \left[\frac{1}{2} M_{L/R} c (1 + 1) + \frac{1}{2} |M_{L/R}| c (1 - 1) \right] \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = M_{L/R} c \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.119)$$

Vektor zdrojových členů je na základě hodnot v kontrolním objemu $\Omega_{i,j}$ aproximován jako

$$\mathbf{S}_{i,j}^n = w_{1i,j}^n g [0, \quad 0, \quad 1, \quad 0]^T. \quad (3.120)$$

Výsledné schéma FVM při použití AUSM+ schématu pro diskretizaci konzervativního i nekonzervativního toku se zahrnutím vlivu tíhové síly má potom tvar

$$\mathbf{w}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{w}_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_{i,j}|} \sum_{k=1}^4 \left[(\mathbf{FG})_k^n + (\mathbf{FG})_k^{Pn} - w_{4i,j}^n (\mathbf{HI})_k^{Nn} \right] |l_k| + \Delta t \mathbf{S}_{i,j}^n \quad (3.121)$$

v případě, že časová diskretizace je aproximována zpětným Eulerovým schématem.

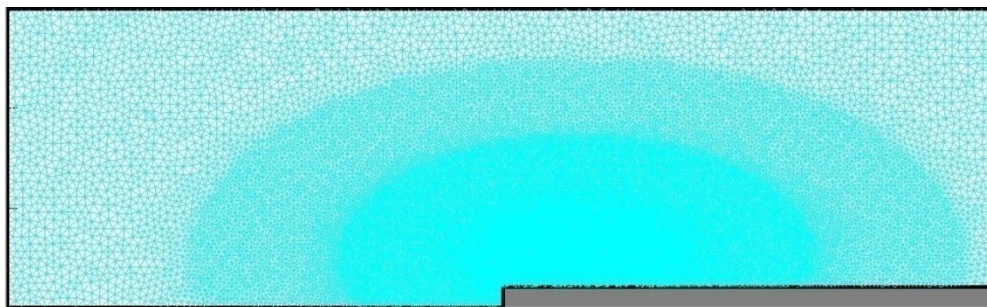
3.3.2 Numerické řešení problému protržení hráze

Úloha protržení hráze („*dambreak problem*“) je běžnou testovací úlohou numerických řešičů navržených pro simulace rozlivů, lití, šíření zátopových vln aj. Existuje řada těchto úloh dobře podložených experimentálními měřeními na zmenšených modelech, [117], [1], či analytickými výsledky zjednodušených modelů. Úlohy protržení hráze spočívají v rozdělení výpočtové oblasti

do dvou stacionárních celků s různou výškou hladiny kapaliny. Na začátku simulace (okamžik protržení) je náhle „odstraněna překážka mezi oblastmi“ a je sledován časový vývoj systému.

Pro porovnání výsledků vlastního vyvinutého numerického řešiče s výsledky uvedenými v práci [27] byla zvolena úloha „*dambreak: wet bed with bottom step*“. Jedná se o úlohu protržení, kde v místě původní hráze se navíc nachází schod na dně a v oblasti, do které se rozlévá zátopová vlna, je na počátku určitá hladina vody, viz obr. 52. Simulovaná úloha byla nastavena stejně jako v [27], z důvodu možnosti porovnání dosažených výsledků, [IV]. Hlavní odlišnost je v použitém řešiči.

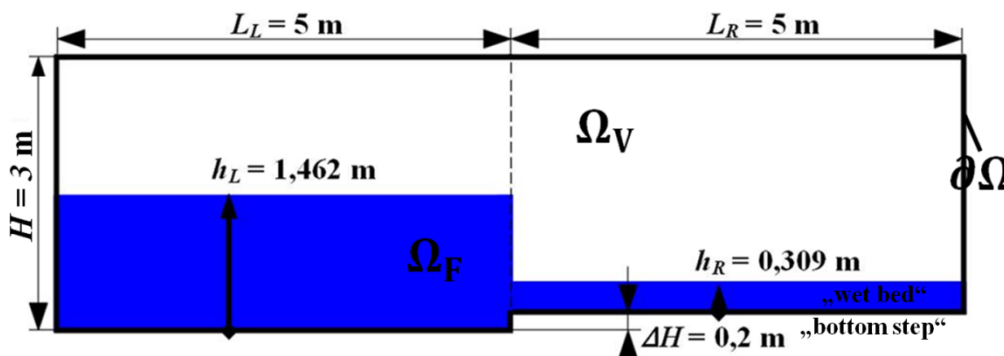
Výpočtová oblast Ω , zobrazená na obr. 52, byla diskretizovaná nestrukturovanou trojúhelníkovou výpočetní sítí o $N = 79\,000$ elementech, kterou ukazuje obr. 51.



Obr. 51: Nestrukturovaná trojúhelníková výpočetní síť o $N = 79\,000$ buňkách zahuštěná v oblasti formování záplavové vlny.

Vytvořená výpočetní síť je zahuštěna v oblasti protržení hráze a v oblasti následného rozlivu tak, aby typická velikost buněk v této oblasti $\Delta a \doteq 0,007$ m přibližně odpovídala trojúhelníkové síti použité v [27]. Směrem od této oblasti byly použity větší trojúhelníkové buňky (až $\Delta a \doteq 0,11$ m), kvůli redukci výpočetní náročnosti celé úlohy. Poznamenejme, že ze stejného důvodu byla i celá výpočtová oblast o jeden metr shora snížena. Výpočty na hrubších sítích ukázaly, že v této oblasti, vyplněné zanedbanou fází, se neodehrává nic podstatného a zdejší proudění nepatrného množství tekutiny $\alpha \approx 1 - \varepsilon$ má pouze malý vliv na tvar formující se záplavové vlny.

V levé části oblasti, tj. v nádrži, byla vyšší hladina s výškou $h_L = 1,462$ m. V pravé, rozlivové části byla výška hladiny $h_R = 0,309$ m, jak ukazuje obr. 52.



Obr. 52: Geometrie úlohy protržení hráze se schodem na dně a modře vyznačenou oblastí na počátku vyplněnou tekutinou.

V Taitově stavové rovnici byly použity modelové konstanty $K = 6,37 \cdot 10^5$ Pa, $\rho^0 = 1000$ kg m⁻³, $\kappa = 1$. V celé oblasti je zahrnut vliv tíhové síly určené konstantním tíhovým zrychlením $g = -9,81$ m s⁻² ve zdrojovém členu (3.102d). Počáteční podmínka uvažuje tekutinu

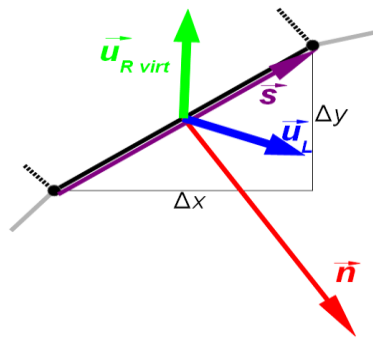
v klidovém stavu. A dále se předpokládá tlakové pole s přibližně hydrostatickým rozložením relativního tlaku $\tilde{p}(y) = (y - h_L)g \rho^0$, přičemž nulová hladina tlaku se nachází ve výšce hladiny *tekutiny* v nádrži h_L . S ohledem na podmínku hyperbolicity představovala *tekutinu* hodnota objemového podílu $\alpha = 1 - \varepsilon$ v oblasti Ω_F a v oblasti bez *tekutiny* Ω_V byla hodnota objemového podílu $\alpha = \varepsilon$. Počáteční vektor primitivních proměnných v těchto částech výpočtové oblasti $\Omega = \Omega_F \cup \Omega_V$ měl složky

$$\mathbf{v}_F^0 = [1 - \varepsilon, 0, 0, (y - h_L)g \rho^0]^T, \quad (3.122a)$$

$$\mathbf{v}_V^0 = [\varepsilon, 0, 0, (y - h_L)g \rho^0]^T, \quad (3.122b)$$

kde ε je řádově malé číslo, v těchto úlohách byla použita hodnota $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-2}$.

Na hranici výpočtové oblasti $\partial\Omega$ byla předepsána podmínka pevné nepropustné stěny. Praktická implementace byla realizovaná pomocí virtuálních buněk se zrcadleným vektorem rychlosti vůči rovině stěny, jak ukazuje obr. 53.



Obr. 53: Otočení vektoru rychlosti \mathbf{u}_L vůči rovině stěny.

Stěna k je charakterizovaná směrovým vektorem $\mathbf{s} = [\Delta x, \Delta y]^T$ a vektorem vnější normály $\mathbf{n} = [-\Delta y, \Delta x]^T$. Vektor rychlosti $\mathbf{u}_L = [u_L, v_L]^T$ v buňce L přilehlé ke stěně k lze potom zrcadlit rovinou stěny k například s využitím jednotkového směrového vektoru stěny $\mathbf{s}_j = \mathbf{s}/|\mathbf{s}|$ v zrcadlově otočený vektor

$$\mathbf{u}_{R \text{ virt}} = 2(\mathbf{u}_L \cdot \mathbf{s}_j) \mathbf{s}_j - \mathbf{u}_L = [u_{R \text{ virt}1}, u_{R \text{ virt}2}]^T. \quad (3.123)$$

Vektor primitivních proměnných ve virtuální buňce za stěnou potom obsahuje složky

$$\mathbf{v}_{R \text{ virt}} = [\alpha_L, u_{R \text{ vir}1}, u_{R \text{ vir}2}, \tilde{p}_L]^T. \quad (3.124)$$

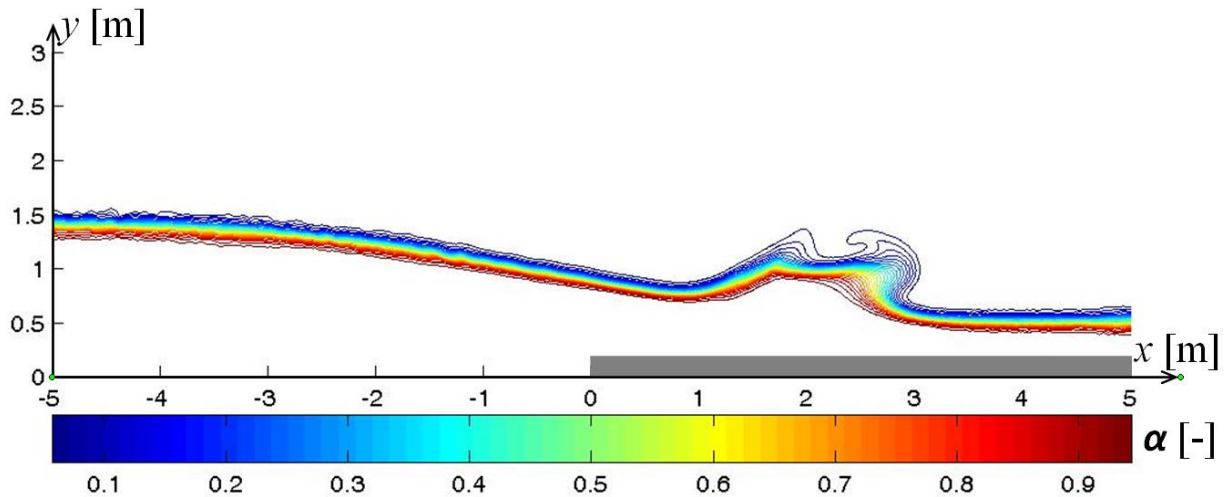
Z něj lze potom sestavit vektor konzervativních proměnných. Případně lze analogickým postupem zrcadlit příslušné složky vektoru konzervativních proměnných \mathbf{w}_L a sestavit vektor za stěnou

$$\mathbf{w}_w = [w_{1L}, 2([w_{2L}, w_{3L}] \cdot \mathbf{s}_j) s_{j1} - w_{2L}, 2([w_{2L}, w_{3L}] \cdot \mathbf{s}_j) s_{j2} - w_{3L}, w_{4L}]^T. \quad (3.125)$$

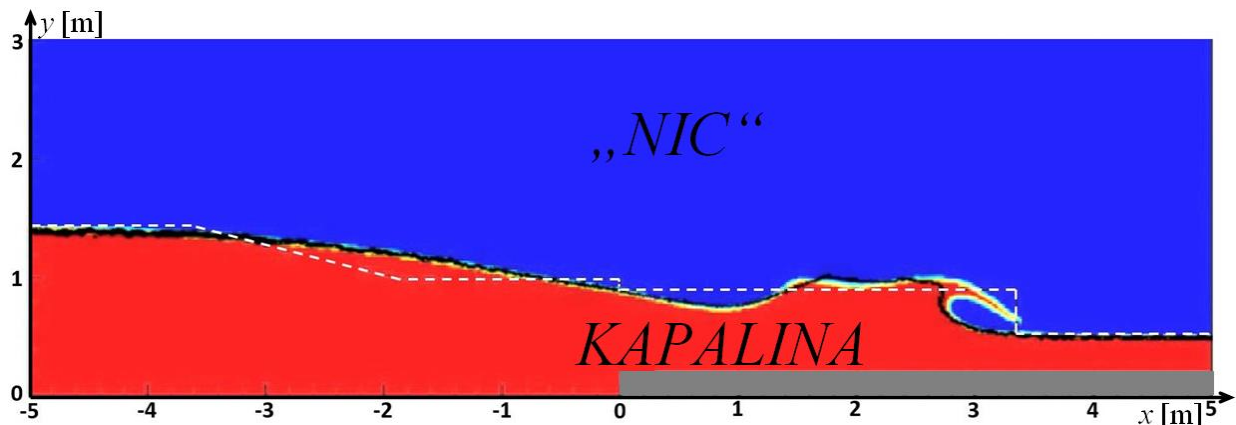
Izočáry objemového podílu kapaliny vypočtené pomocí výše popsaného numerického řešiče jsou ukázány na obr. 54. Obr. 55 ukazuje přímé srovnání těchto výsledků s výsledky prezentovanými v práci [27]. Bílou přerušovanou čarou je znázorněno řešení úlohy pomocí rovnic mělké vody, viz [27]. Červená a modrá plocha, na jejichž přechodu je žlutá kontura, představuje řešení třírovnicevého modelu dosažené pomocí DGFEM, [27]. Pomocí DGFEM by měla být dosažitelná vyšší přesnost, než při použití výše popsaného řešiče. Poznamenejme, že při vykreslování výsledků DGFEM použil Dumbser trik, kdy převzal konturu $\alpha = 0,5$ za ostrý tvar rozhraní, aniž by v práci blíže ukázal rozmazání tvaru rozhraní. Černá čára v obr. 55 představuje řešení dosažené pomocí navrženého algoritmu při použití stejného triku, jde tedy o restrikcí vizualizace na obr. 54 pouze

na konturu $\alpha = 0,5$.

Z výsledků je patrné, že vypočtený tvar rozhraní kapaliny celkově odpovídá referenčním výsledkům. Na obou krajích oblasti jsou správně udrženy počáteční výšky hladiny. Výsledky dosažené pomocí vyvinutého řešiče nezachytily malý přeliv čelní vlny přibližně v místě $x \approx 3$ m vypočtený pomocí DGFEM. Zde se patrně projevila vyšší numerická viskozita použitých schémat, [IV].



Obr. 54: Izočáry objemového podílu kapaliny vypočtené při simulaci úlohy protržení hráze do oblasti se schodem a mokrým dnem v čase $t_k = 1$ s.



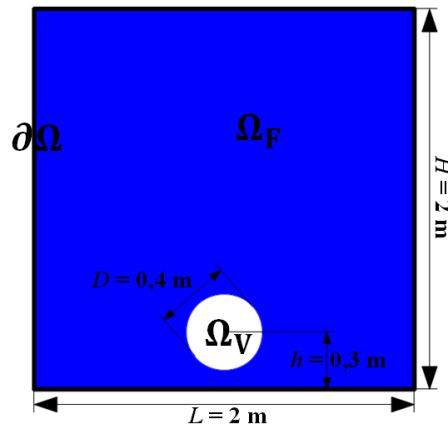
Obr. 55: Hladiny kapaliny v čase $t_k = 1$ s vypočtené při simulacích úlohy protržení: bílou přerušovanou čarou – řešení rovnice mělké vody, žluté rozhraní červené a modré plochy – řešení třírovnicového modelu pomocí DGFEM (oba výsledky viz [27]) a černou čarou – výsledek dosažený pomocí navrženého kódu.

3.3.3 Numerické řešení problému vzestupu bubliny

Numerické řešení úlohy vzestupu bubliny („*rising bubble problem*“, „*bubble ascension problem*“) má za cíl ověřit schopnost třírovnicového modelu správně zachytit složitý tvar rozhraní v tíhovém poli. V práci [27] byly prezentovány různé výsledky se složitým tvarem rozhraní, avšak bez zahrnutí tíhové síly do výpočtu, nebo byly řešeny úlohy s vlivem tíhové síly, avšak jednoduchým rozhraním, např. úloha protržení. Úloha simuluje vzestup velké osamocené bubliny plynu obklopené těžkou kapalinou vlivem tíhové síly. Při aplikaci třírovnicového modelu je přitom uvažována výhradně okolní kapalina. Bublina je ztotožněna s prázdnou částí, kterou „zaujímá“ zanedbaná fáze, viz obr. 56. Vlivem tíhového pole se kapalina tlačí dolů a tím vytlačuje prázdný

prostor představující bublinu vzhůru. Problém vzestupu bubliny byl pro použití třírovnice modelu velmi přitažlivý, protože je v ní zaměřena pozornost na pohyb zanedbané fáze. Jedná se tedy v podstatě o inverzní úlohu k různým simulacím protržení, nebo lití řešených v pracích [27] a [26], kde je sledovaná uvažovaná *tekutina*.

Vzestup bubliny je klasickou úlohou pro testování modelů uzpůsobených pro simulace rozvrstvených proudění, tedy například metody sledování rozhraní a metody zachycení rozhraní. V literatuře nebylo nalezeno její řešení pomocí třírovnice modelu, ale řešili ji Murrone a Guillard ve výše zmíněné práci [94] pomocí pětirovnice modelu odvozeného rovněž z Baerova – Nunziatova TFM, který je tedy principiálně bližší třírovnice modelu, než metody sledování rozhraní, či zachycení rozhraní. Proto byly výsledky prezentované v [94] brány jako vzorové.



Obr. 56: Geometrie úlohy vzestupu bubliny s modře vyznačenou oblastí na počátku vyplněnou tekutinou.

V Taitově stavové rovnici byly použity výše uvedené modelové parametry, viz 3.3.2. Poznamenejme, že v práci [94] byly použity stavové rovnice ztuhlé tekutiny pro obě fáze. Parametry Taitovy rovnice nebyly uzpůsobeny vlastnostem *kapaliny* z [94], ale byly ponechány na původních hodnotách z důvodu vyšší efektivity numerického řešiče stlačitelného proudění, viz odstavec 3.3. V celé oblasti je zahrnut vliv tíhové síly určené konstantním zrychlením $g = -9,81 \text{ m s}^{-2}$ ve zdrojovém členu (3.102d). Počáteční podmínka uvažuje *kapalinu* v klidovém stavu. A dále se předpokládá tlakové pole s přibližně hydrostatickým rozložením relativního tlaku $\tilde{p}(y) = (y - h_L)g \rho^0$, přičemž nulová hladina tlaku se nachází ve výšce $h_L = 1,5 \text{ m}$. S ohledem na podmínku hyperbolicity představovala oblast vyplněnou *kapalinou* Ω_F hodnota objemového podílu $\alpha = 1 - \varepsilon$ a prázdnou oblast Ω_V , tedy bublinu, hodnota objemového podílu $\alpha = \varepsilon$. Počáteční podmínka pro vektor primitivních proměnných byla v dílčích oblastech

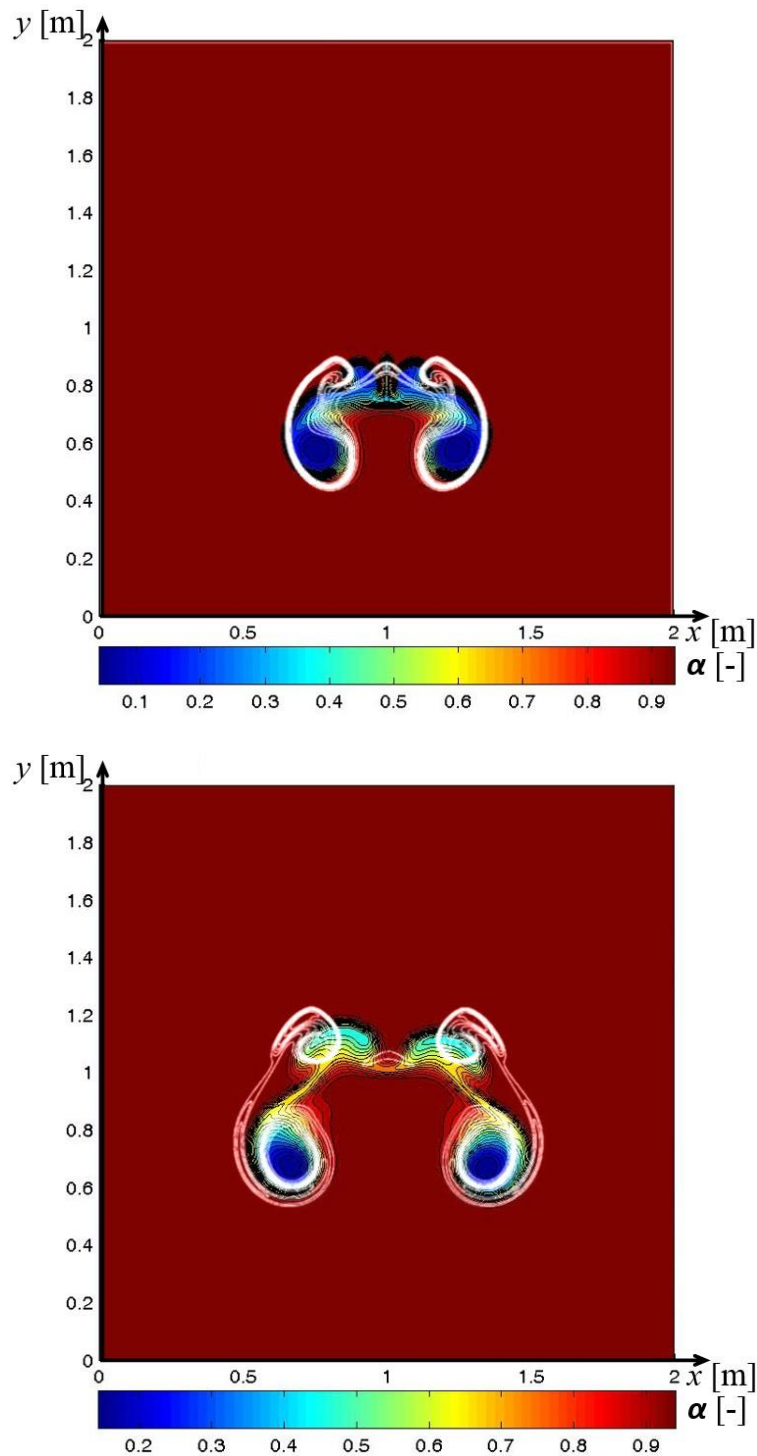
$$\mathbf{v}_F^0 = [1 - \varepsilon, 0, 0, (y - h_0)g \rho^0]^T, \quad (3.126a)$$

$$\mathbf{v}_V^0 = [\varepsilon, 0, 0, (y - h_0)g \rho^0]^T, \quad (3.126b)$$

v těchto úlohách byly použity hodnoty $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-2}$. Na okraji výpočtové oblasti $\partial\Omega$ byla předepsána podmínka nepropustné stěny, jejíž implementace byla popsána v odstavci 3.3.2.

Výpočtová oblast Ω byla diskretizována strukturovanou čtvercovou výpočetní sítí o počtu 600×600 elementů. Rozložení objemového podílu kapaliny v časech $t = 0,55 \text{ s}$ a $t_k = 1 \text{ s}$ jsou ukázány na obr. 57. Pro srovnání jsou v těchto obrázcích vloženy rovněž bílé izočáry objemového podílu prezentované v [94], které jsou řešením složitějšího pětirovnice modelu. Výsledky ukazují, že třírovnice model je schopen úspěšně simulovat i úlohy tohoto typu. Zachycuje dobře polohu velké bubliny i její rozpad při vzestupu skrz těžší kapalinu, ačkoliv určité rozdíly oproti

řešení pětirovnicového modelu jsou na obr. 57 patrné. Z rozložení objemového podílu kapaliny, především v čase $t_k = 1$ s, je rovněž patrné, že byla porušena symetričnost řešení úlohy. Tato chyba je pravděpodobně způsobena kumulací numerických chyb při výpočtu na velmi jemné síti. Výsledky jsou symetrické až do okamžiku $t \approx 0,5$ s, kdy je symetrie narušena, viz [IV]. Úloha byla rovněž řešena na nestrukturované trojúhelníkové výpočetní síti, na které byla symetrie porušena záhy a konečné výsledky v čase $t_k = 1$ s byly značně nesymetrické.



Obr. 57: Rozložení objemového podílu kapaliny v časech $t = 0,55$ s nahoře a v čase $t_k = 1$ s dole. Izoplochy představují řešení dosažené pomocí vyvinutého algoritmu a bíle jsou vloženy izočáry představující řešení pětirovnicového modelu publikované v [94].

Kapitola 4

Numerické řešení separace oleje a vzduchu v tlakových nádobách šroubových kompresorů

Podnětem pro numerické simulace separace oleje a vzduchu v tlakových nádobách bylo řešení projektu znalostního transferu s názvem „Metodika návrhu olejových separátorů“ mezi společností ATMOS Chrást, s.r.o. a Západočeskou univerzitou v Plzni zastoupenou centrem excelence NTIS (Nové technologie pro informační společnost). Velká část uvedeného projektu se zaměřovala na modelování proudění oleje a stlačeného vzduchu tlakových nádobách (tzv. olejových separátorech), které jsou součástí šroubových kompresorových strojů vyvíjených a vyráběných ve společnosti ATMOS Chrást, s.r.o.

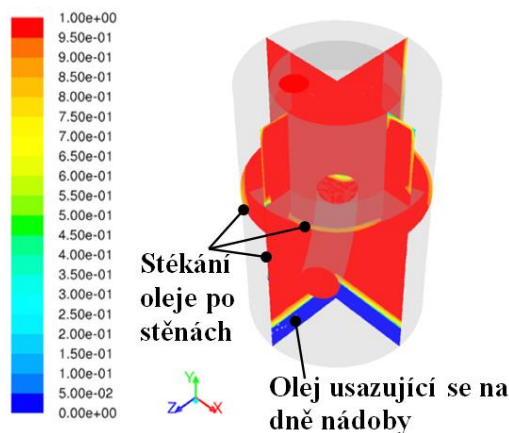
Vzhledem k velmi omezenému času realizace projektu, tehdy chybějícím zkušenostem s tvorbou kódů pro řešení vícefázového proudění a celkové komplexnosti řešených úloh byly numerické simulace dvoufázového proudění oleje a vzduchu provedeny ve výpočtovém systému ANSYS Fluent, verze 13.0, který je založený na metodě konečných objemů. Na základě rešerše dvoufázových modelů implementovaných v systému ANSYS Fluent byl jako nejvhodnější pro uvedené úlohy vybrán dvoutekutinový eulerovský model. Projekt znalostního transferu se tak stal prvotním podnětem pro autorovo studium modelů dvoufázového proudění a především dvoutekutinových modelů, které vedlo až k sepsání této disertační práce.

Na základě teoretických poznatků o dynamice proudění dvou fází a po rozboru výsledků provedených numerických simulací proudění oleje a stlačeného vzduchu ve třech vybraných konstrukčních provedeních tlakových nádob byly následně formulovány obecné zásady pro návrh celkového tvaru tlakové nádoby separátoru tak, aby bylo vzájemné oddělení obou fází co nejefektivnější a výsledný stlačený vzduch byl co nejčistší.

Poznámka: Některé obrázky byly převzaty, či pasáže textu upraveny ze souhrnné výzkumné zprávy z projektu „Metodika návrhu olejových separátorů“ [III] sepsané autorem této disertační práce.

4.1 Význam a funkce tlakové nádoby

Šroubové kompresory s vysokým výkonem jsou mazány olejem. To má bohužel za následek znečištění výsledného produktu, tedy stlačeného vzduchu, nežádoucím olejem. Proto je do strojů s mazanými šroubovými kompresory řazena tlaková nádoba odlučovače oleje, tzv. separátor, kde dochází k oddělování fází oleje a stlačeného vzduchu. Na obr. 58 je rozložení objemového podílu vzduchu v ukázkové tlakové nádobě typu V35, jehož geometrie je na obr. 59.



Obr. 58: Rozložení objemového podílu vzduchu (α_1 , [-]) v olejovém separátoru V35 vypočtené pomocí výpočtového systému ANSYS Fluent, zobrazené v kolmých řezech a na pomocných plochách.

Účinnost oddělení fází zásadním způsobem ovlivňuje ekonomiku provozu celého stroje. Stlačený vzduch prochází za separátorem jemným vzduchovým filtrem, kde jsou zachycovány poslední nečistoty. Případná olejová mlha v této oblasti filtry velmi rychle zanáší. Naopak vysoká čistota stlačeného vzduchu po separaci se odrazí v delší životnosti jemného vzduchového filtru a tedy v nižší četnosti příslušných servisních úkonů. Důležité je ale zároveň minimalizovat napětí vzduchem kompresorového oleje vycházejícího ze separátoru. Olej totiž maže samotný šroubový kompresor, utěšňuje mezery mezi rotory a slouží jako chladivo. Nežádoucí vzduch v oleji degraduje jeho užité vlastnosti, způsobuje pokles komprese, rychlejší opotřebení kompresoru a zhoršuje termoregulaci. Ideální olejový separátor by tedy z libovolné směsi stlačeného vzduchu a oleje vyprodukoval za jakýchkoliv provozních podmínek zcela čistý vzduch na straně jedné a zcela čistý olej na straně druhé.

Podle požadavků řešeného projektu znalostního transferu byla čistota vzduchu před vstupem do jemného vzduchového filtru hlavním hodnotícím kritériem pro posouzení tlakových nádob z hlediska účinnosti separace fází. Pro kvantifikaci této efektivity separace jednotlivých nádob sloužilo vyhodnocení relativního objemového toku oleje (*tekutina 2*) na stupu do jemného filtru vztažené k objemovému toku oleje na vstupu do nádoby

$$K_S = \frac{\dot{V}_{2Z}^{\text{výstup vzduchu}}}{\dot{V}_{2DO}^{\text{vstup směsi}}} \quad (4.1)$$

4.2 Výpočtový model proudění v tlakové nádobě

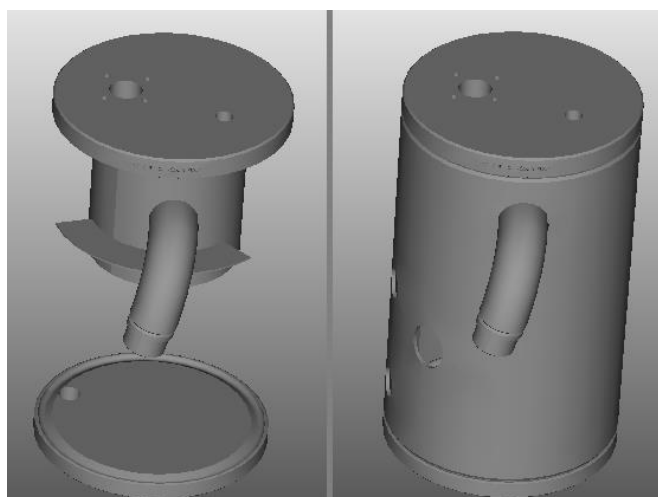
Po provedení důkladné rešerše bohužel nebyly v dostupné odborné literatuře nalezeny žádné podklady, věnující se simulacím separace vícefázového proudění v odlučovačích tohoto typu. Problémy separace sice bývají řešeny často, avšak pomocí eulerovských – lagrangeovských modelů diskretních částic, o kterých je podrobněji pojednáno v odstavcích 1.2.3 a 2.7.7. Jedná se například o simulace proudění v různých prachových separátorech, viz obr. 8, pro které je částicový model efektivní a dosahuje excelentních výsledků, podrobnosti lze najít například v [11], [137] nebo [131]. Režim proudění s jednotlivými částicemi dominuje i u olejových separátorů v oblastech s nižším objemovým podílem oleje, tedy v částech oblasti na obr. 58 zbarvených červenými odstíny. Model diskretních částic je ovšem nevhodný pro popis proudění nahromaděného oleje, které je dominantní v modře zbarvených částech oblasti na obr. 58.

Poznamenejme, že dalším modelem implantovaným v systému ANSYS Fluent je „*volume-of-fluid*“ model pro řešení rozvrstveného proudění, blíže diskutovaný v odstavcích 1.2.1.2 a 2.7.1. Pro správné zachycení separace obou fází ze směsi by použití tohoto modelu vyžadovalo extrémně jemnou síť. Výpočtový model by tedy nebyl zvládnutelný dostupnými výpočetními prostředky. Pro úlohy separace je nevhodný rovněž model směsi, taktéž obsažený v systému ANSYS FLUENT. Model směsi disponuje jen omezenou schopností modelovat fáze s výrazně odlišným dynamickým chováním, tedy fáze s tzv. slabým mechanickým sdružením, viz odstavec 2.7.5.

Jako nejvhodnější byl na základě provedené rešerše a prvotních numerických simulací zjednodušených úloh vybrán dvoutekutinový eulerovský model implementovaný v systému ANSYS Fluent. Jedinou prací, ve které byl použit dvoutekutinový model pro úlohy separace fází, kterou se podařilo v odborné literatuře najít, byla studie prvotních výpočtů [101] v softwaru CFX na separátoru typu voda – olej, tedy problém separace dvou kapalin podobných hustot.

Dvoutekutinový model v softwaru Fluent byl samozřejmě podrobně testován na zjednodušených úlohách, stejně tak byla provedena analýza vlivu sítě na dosahované výsledky. Zvláště pečlivě byly testovány doplňkové modely a konstitutivní vztahy (např. modely turbulence, interakční členy, především mezifázový odporový účinek aj.), stejně jako způsoby zadávání okrajových podmínek. Podrobnosti byly prezentovány autorem této práce na konferenci [V] a lze je také najít v souhrnné výzkumné zprávě z projektu znalostního transferu [III].

Po vyhodnocení prvotních studií bylo přistoupeno k simulacím s reálnými tlakovými nádobami. Klíčové pro nalezení ustáleného řešení je zadání správných okrajových podmínek výpočtu a odladění parametrů modelu. Potřebné hodnoty byly stanoveny experimentálně, případně podle výsledků simulací zpětně korigovány na základě zkušeností techniků společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. Ve společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. bylo sestaveno experimentální zařízení, tzv. stand, pro nalezení parametrů a okrajových podmínek. V experimentální zkušební trati byla použita nádoba odlučovače V35, jejíž CAD model je na obr. 59. Jedná se o jednu z konfigurací tlakové nádoby separátoru používanou v kompresorových strojích společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. Poznamenejme, že rozložení objemového podílu vzduchu v této nádobě vypočtené pomocí finálního modelu bylo ukázáno na obr. 58.

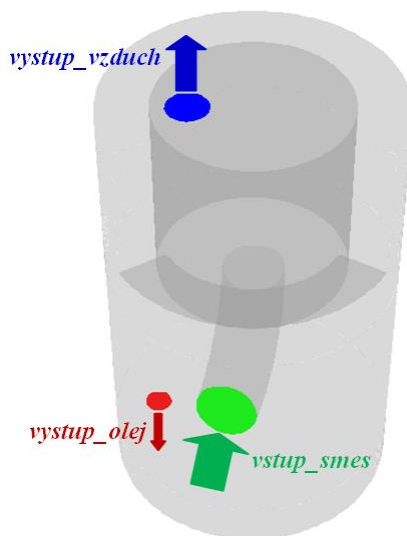


Obr. 59: CAD model tlakové nádoby V35. Vlevo je skryt plášť nádoby s patrnou konfigurací vnitřních přepážek, tzv. košilka. Vpravo je celkový vnější pohled.

Z olejem mazaného šroubového kompresoru proudí směs oleje a stlačeného vzduchu potrubím do tlakové nádoby separátoru. Schéma výpočtové oblasti separátoru V35 ukazuje obr. 60, na kterém jsou barevně zvýrazněny vstupní a výstupní okrajové podmínky. Konkrétně u tohoto separátoru je vhnána směs vzduchu a oleje kolenem mírně vyoseným vůči svislé ose do tlakové nádoby, kde je rozstříkována o vnitřní košilku. V nádobě se mechanickými procesy oddělují stlačený vzduch a olej. Přitom se především prostřednictvím různých rozstříků využívá odlišné setrvačnosti obou fází v součinnosti s vlivem tíhové síly. V ideálním separátoru by došlo k úplnému oddělení obou fází, avšak v reálném separátoru jsou i na výstupech obě fáze stále mírně znečištěny. Z nádoby je potom usazený olej otvorem ve dně odsáván zpět do olejového okruhu stroje. V olejovém okruhu jsou z kompresorového oleje filtrovány nečistoty, podobně jako u auta, případně je olej chlazen apod. Poté je znovu použit k mazání kompresoru. Stlačený vzduch je vyfukován přes jemný vzduchový filtr, kde jsou zachycovány zbytky nežádoucího oleje, či další nečistoty. Právě na vstupu do jemného filtru by měl být vzduch co možná nejčistší, aby se omezila degradace filtru. U separátoru V35 je oblast vyfukování vzduchu do jemného filtru označena jako „výstup vzduchu“ a zvýrazněna modrou barvou na obr. 60. Jemný filtr je tedy umístěn vně, za samotnou tlakovou nádobou. Poznamenejme, že některá konstrukční řešení používají jemný filtr uvnitř tlakové nádoby, například PDP28, PDP190 nebo V41. Po případných dalších úpravách je stlačený vzduch jímán ve vzdušniku a připraven k použití.

Výpočtová oblast separátoru V35 zahrnuje kompletní tlakovou nádobu. Její geometrie byla odvozena z dodaného CAD modelu. Byly potlačeny některé méně významné detaily pro celkový tvar proudění, jako například: olejoznak, nálevka oleje, pojistný tlakový ventil atp. Za vstupní okrajovou podmínkou („vstup směsi“) se nachází koleno, které je důležité ve výpočtovém modelu uvažovat, kvůli realističtějšímu tvaru proudění na přechodu do samotné tlakové nádoby. Již v kolenu navíc dochází k částečné separaci fází, jak je patrné z rozložení objemového podílu vzduchu na pomocné zobrazovací ploše mezi kolenem a tělesem nádoby na obr. 58. Soustava vnitřních

košilek potom určuje tvar proudění uvnitř nádoby. Dolní výstupní okrajová podmínka („výstup oleje“) se nachází ve dně nádoby. Horní výstupní okrajová podmínka („výstup vzduchu“) je umístěna ve víku nádoby. Na této výstupní ploše je sledováno hlavního hodnotící kritérium (4.1) pro čistotu vzduchu před jemným vzduchovým filtrem, proto není v modelu třeba složitě modelovat samotný vzduchový filtr.



Obr. 60: Geometrie výpočtové oblasti s barevně rozlišenými hranicemi: stěny šedou barvou, vstupy a výstupy barevně, navíc schematicky doplněny o směr proudění do/z výpočtové oblasti.

4.2.1 Matematický model dvoufázového proudění v tlakové nádobě

Ve výpočtové oblasti, zobrazené na obr. 60, byla vytvořena nestrukturovaná výpočetní síť složená ze šestistěnných trojrozměrných konečných objemů. Pro simulace proudění vzduchu a oleje při použití finálního modelu byla testována celá řada sítí. Přičemž hodnotícími kritérii byly: pokles reziduí řešených veličin, ustálenost objemu oleje v nádobě, ustálenost hodnoty objemového podílu oleje vystupujícího „výstupem vzduchu“ a výpočetní čas. Dle těchto kritérií byla jako nejlepší vyhodnocena síť v hlavním proudu co možná nejrovnoměrnější, s elementy s nízkou mírou protažení a typickým rozměrem kolem $\Delta x = 3 \text{ mm}$, viz [III]. Pro jemnější síť se neměnily výsledky již tak významně, výrazně se prodlužoval výpočetní čas a navíc se na velmi jemné síti projevovaly numerické oscilace, jež se nepodařilo stabilizovat. Poznamenejme, že objem výpočtové oblasti nádoby typu V35 je přibližně $V = 18 \text{ dm}^3$ a výpočetní síť konečných objemů, vyhodnocená jako nejvhodnější, čítala přibližně 700 000 buněk. Vzhledem k tomuto omezení maximálního počtu buněk sítě, pro který použité numerické metody ještě uspokojivě konvergují, bohužel nemohla být zjemněna síť v oblasti mezní vrstvy, což by bylo nejvhodnější diskretizací pro zachycení olejového filmu na stěnách nádoby. Místo toho provedené numerické simulace plně spoléhaly na rozšířené stěnové funkce implementované v systému ANSYS Fluent zjednodušeně modelující mezní vrstvu.

Při numerických simulacích separace byl přijat předpoklad, že při konstantních provozních podmínkách se po dostatečně dlouhé době ustálí rovněž proudění v samotné tlakové nádobě. Poznamenejme, že proudění v tlakové nádobě je ve skutečnosti nestacionární. Dvoufázové děje obecně bývají nestacionární, navíc proudění v kompresorovém stroji je turbulentní a šroubový kompresor vyvolává mírné tlakové pulzace. Provedené experimenty na zkonstruovaném standu ukázaly, že měřené veličiny se po dosažení provozního stavu poměrně rychle téměř ustálí, a velikost jejich oscilací je relativně malá. Z tohoto důvodu bylo řešeno ustálené proudění v separátoru, které vypovídá o průměrném stavu proudění v oblasti.

Zkušenosti techniků a provedená experimentální měření ukázaly, že proudění v oblasti tlakové nádoby je relativně pomalé. Podle výsledků numerických simulací je velikost rychlosti ve většině objemu oblasti nižší než $|\mathbf{v}| \approx 15 \text{ m s}^{-1}$, v lokálních maximech dosahuje až $|\mathbf{v}_{max}| \approx 30 \text{ m s}^{-1}$.

Proto byl stlačený vzduch modelován jen jako nestlačitelná tekutina. Protože je modelován ustálený provozní stav zcela prohrátého stroje, není také řešen přenos tepla a tepelná výměna. Vlastnosti tekutin (tj. hustota a dynamická viskozita) byly v simulacích nastaveny jako konstanty o hodnotách odpovídajících ustálené teplotě a ustálenému tlaku v experimentální trati. Podmínky v experimentu i v numerických simulacích byly voleny tak, aby odpovídaly typickému provoznímu režimu kompresorového stroje.

V dominantní části výpočtové oblasti proudí stlačený vzduch, ve kterém jsou v různé koncentraci rozptýleny kapky oleje. V menší části oblasti u dna naopak převažuje olej. Systém ANSYS Fluent při řešení dvoutekutinového modelu vyžaduje určit jednu fázi jako primární, či nosnou. Dále může být uvažováno větší množství sekundárních fází (vícefázový model). Protože na vstupu je výrazně větší objemový podíl vzduchu a ve výpočtové oblasti jeho celkový podíl převažuje, byl vzduch označen za fázi primární. Olej je považován za sekundární fázi. Pro jednoduchost je proudění v separátoru uvažováno jako dvoufázové. Při modelování mezifázového silového působení tedy předpokládáme, že veškerý olej je zformován do kulových kapek stejného průměru d_2 .

Úlohy separace byly simulovány pomocí dvoutekutinového „*Eulerova modelu*“ s jediným tlakovým polem v systému ANSYS Fluent, který je popsán v manuálu [3]. Z modelu byly vyňaty energetické rovnice vzhledem k předpokladu nestlačitelnosti obou tekutin a současně stálé teplotě v oblasti. Systém rovnic zahrnuje zákon zachování hmotnosti a pohybové rovnice rozepsané po složkách pro každou tekutinu, či chceme-li fázi

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 u_1}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial y} + \frac{\partial \alpha_1 w_1}{\partial z} = 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 u_2}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial y} + \frac{\partial \alpha_2 w_2}{\partial z} = 0, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 u_1^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_1 u_1 v_1) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_1 u_1 w_1) + \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 p) = \frac{1}{\rho_1} (VX_1 + DX_1), \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2 u_2^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_2 u_2 v_2) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_2 u_2 w_2) + \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2 p) = \frac{1}{\rho_2} (VX_2 + DX_2), \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 v_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 u_1 v_1) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_1 v_1^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_1 v_1 w_1) + \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_1 p) = \frac{1}{\rho_1} (VY_1 + DY_1) - \alpha_1 g, \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 v_2) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2 u_2 v_2) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_2 v_2^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_2 v_2 w_2) + \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_2 p) = \frac{1}{\rho_2} (VY_2 + DY_2) - \alpha_2 g, \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 w_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 u_1 w_1) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_1 v_1 w_1) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_1 w_1^2) + \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_1 p) = \frac{1}{\rho_1} (VZ_1 + DZ_1), \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 w_2) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2 u_2 w_2) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_2 v_2 w_2) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_2 w_2^2) + \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_2 p) = \frac{1}{\rho_2} (VZ_2 + DZ_2), \quad (4.9)$$

kde u, v, w jsou kartézské složky vektoru rychlosti $\mathbf{u} = [u, v, w]^T$. VX, VY a VZ představují kartézské složky působení třecích sil vztážené na jednotku objemu, poznamenejme, že v matematickém modelu úlohy byl zahrnut vliv turbulence pomocí modelu turbulence $k - \varepsilon$, který byl řešen pro směs jako celek. Zdrojové členy DX, DY a DZ vyjadřují kartézské složky vlivu mezifázového silového odporu vztáženého na jednotku objemu, dále je zahrnuto tíhové zrychlení o velikosti g . Připomeňme indexovou konvenci $e = 1$ pro tekutinu 1, primární fázi, tedy stlačený vzduch a $e = 2$ pro tekutinu 2, tedy olej.

Model zachycuje pouze dynamiku dvoufázového proudění, při němž nedochází k výměně hmoty mezi fázemi. Veškerá fázová interakce se omezuje výhradně na silové účinky modelované pomocí mezifázového odporového členu, který ovlivňuje hybnosti obou fází, viz pohybové rovnice (4.4) – (4.9). Odporové síly v důsledku zásadním způsobem určují vzájemnou dynamiku obou fází při separačním procesu. Jediným parametrem určující odporový mezifázový součinitel je průměr částic sekundární fáze d_2 . Jak bylo uvedeno výše, pro modelované dvoufázové proudění platí $d_2 = \text{konst.}$ Správné stanovení parametru d_2 je klíčové pro dosažení vypovídajících výsledků numerických simulací dvoufázového proudění. Mezifázové silové působení je, v souladu se třetím Newtonovým zákonem, symetrické, vyjádřené vztahy

$$\mathbf{D}_1 = [DX_1, DY_1, DZ_1]^T = -\mathbf{D}_2 = [-DX_2, -DY_2, -DZ_2]^T, \quad (4.10)$$

$$\mathbf{D}_1 = -\mathbf{D}_2 = K (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1), \quad (4.11)$$

kde K je mezifázový odporový součinitel, který je pro proudění dvou tekutin definován jako

$$K = \frac{\rho_2 f_D}{6 \tau_2} d_2 A, \quad (4.12)$$

kde relaxační čas sekundární fáze je

$$\tau_2 = \frac{\rho_2 d_2}{18 \eta_1}, \quad (4.13)$$

plocha rozhraní mezi fázemi při uvažování kulových částic sekundární fáze

$$A = \alpha_2 \frac{6}{d_2} \quad (4.14)$$

a f_D je odporová funkce vyjádřená různými způsoby, viz například [68]. Pro řešení proudění v separátorech byl použit Schillerův – Naumannův model, [115],

$$f_D = \frac{C_D \text{Re}_2}{24} \quad (4.15)$$

s Reynoldsovým číslem částic sekundární fáze

$$\text{Re}_2 = \frac{\rho_1 |\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1| d_2}{\eta_1} \quad (4.16)$$

a součinitelem odporu

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_2} (1 + 0,15 \text{Re}_2^{0,687}); & \text{Re}_2 \leq 1000 \\ 0,44 & \text{Re}_2 > 1000 \end{cases}. \quad (4.17)$$

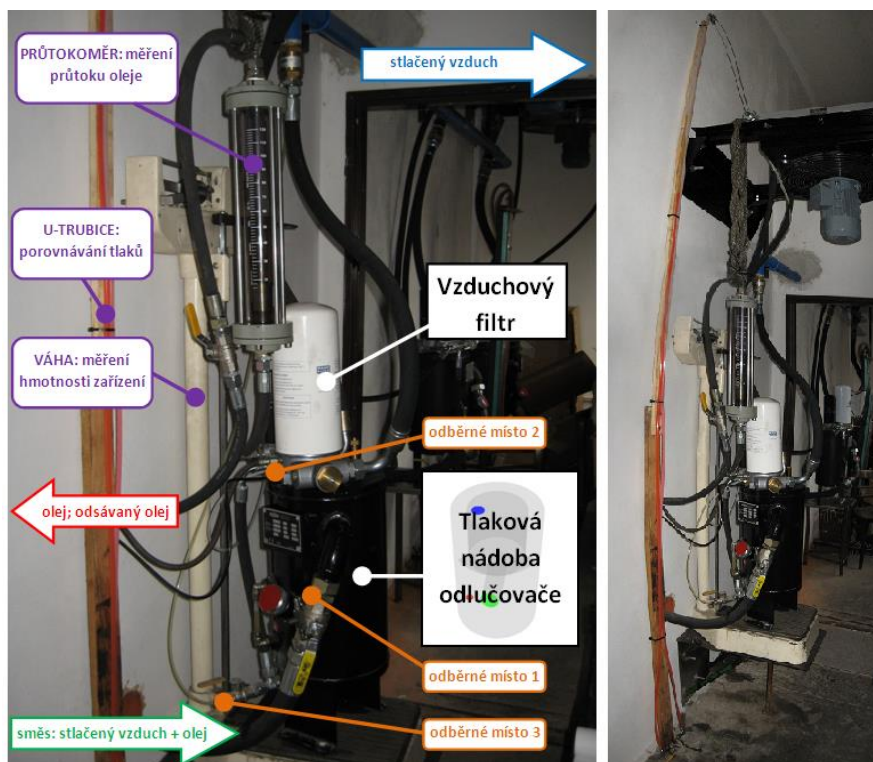
Více podrobností o silovém působení mezi fázemi lze najít i v odstavcích 2.2 a 2.7.7.

Na vstupu bylo uvažováno homogenní dvoufázové proudění s rovnoměrnou rychlostí a s rovnoměrným rozložením fází, definované prostřednictvím okrajové podmínky vstupní rychlosti. Na obou výstupech byly předepsány tlakové výstupní okrajové podmínky. Pro úplnost dodejme počáteční podmínku, která předpokládala vyplnění celé oblasti stlačeným vzduchem v klidu.

Popsaný dvoufázový model byl numericky řešen pomocí sekvenčního kódu založeného na vícefázové modifikaci SIMPLE metody sdružení tlakového a rychlostního pole, tzv. „*Phase Coupled SIMPLE*“ algoritmus popsany v manuálu [3]. Časové derivace byly aproximovány implicitním schématem druhého řádu přesnosti. Pro diskretizaci nevazkých toků bylo použito upwind schéma prvního řádu přesnosti. Poznamenejme, že schéma prvního řádu je v softwaru Fluent doporučenou volbou pro řešení úloh vícefázového proudění. Numerické testy ukázaly, že při použití schémat vyššího řádu přesnosti konverguje metoda numerického řešení velmi špatně.

4.2.2 Experimentální stanovení parametrů matematického modelu

Pro dosažení vypovídajících výsledků numerických simulací ustáleného dvoufázového proudění separace oleje a vzduchu pomocí výše popsaného modelu je nezbytné nastavit správné parametry úlohy týkající se provozních podmínek, okrajových podmínek a mezifázového silového působení fází. Proto bylo provedeno experimentální měření na měřicím zkušebním standu zkonstruovaném ve společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. Nadto měla další změřená data pomoci ověřit výsledky numerických simulací a v případě potřeby následně korigovat zadávané parametry modelu. Zkušební zařízení, schematicky znázorněné na obr. 62 a vyfocené na obr. 61, bylo sestaveno v rámci projektu „Metodika návrhu olejových separátorů“ úpravou standardně používané měřicí trati pro zkoušky bloků šroubových kompresorů.

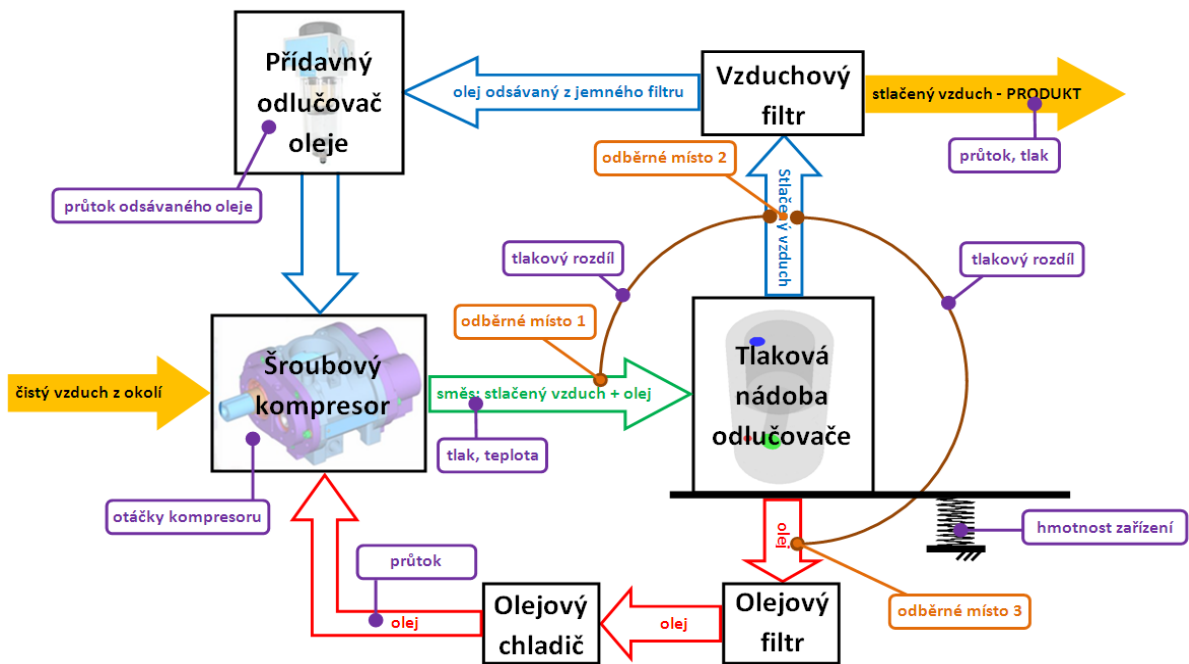


Obr. 61: Část standu s nádobou V35 a částí měřicí aparatury; vpravo širokouhlé foto, vlevo detail.

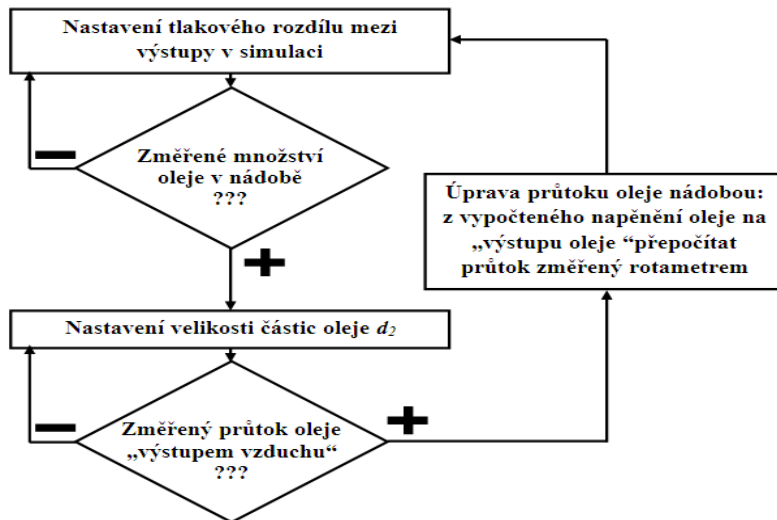
Měřicí aparatura musela být několikrát upravena. Například původním záměrem bylo změření tlakových diferencí mezi jednotlivými vstupními a výstupními okrajovými podmínkami pomocí U trubice, které by přímo sloužily k zadání okrajových podmínek numerické simulace. Měření tlakového rozdílu se bohužel ukázalo jako neproveditelné, protože při běhu zařízení došlo k rychlé kontaminaci U trubice olejem i vzduchem, což znemožnilo přesně určit diference. Místo těchto hodnot byl potom navržen nepřímý postup pro stanovení potřebných parametrů, který spojoval výsledky simulací a výsledky měření. Například: na základě objemu olejové náplně v separátoru a hmotnostního rozdílu separátoru v klidovém stavu a za provozu byl určen celkový objem oleje v tlakové nádobě za provozu. Tato hodnota byla potom zpětně použita pro nalezení tlakového rozdílu mezi výstupními okrajovými podmínkami. Pro nastavení průměru olejových částic d_2 , který má dominantní vliv na průběh separace, bylo použito změření průtoku oleje do jemného vzduchového filtru. Tedy vlastně přímé změření veličiny potřebné pro hodnocení separátoru z hlediska efektivity separace. Průtok kompresorového oleje byl měřen kalibrovaným rotametrem, hodnota objemového průtoku byla korigována o napětí oleje vzduchem vypočtené ze simulací. Podmínky v zařízení, včetně průtoku vzduchu byly změřeny v standardně používané části trati.

Finální varianta zkušebního zařízení je ukázána na obr. 62, kde jsou měřené veličiny vyznačeny fialově. Bohužel se nepodařilo změřit dostatečně kvalitně všechny zamýšlené veličiny. Počet kvalitně změřených parametrů byl právě dostačující pro nastavení parametrů matematického modelu úlohy, avšak bohužel nebyly změřeny další veličiny, které by případně podpořily správnost provedených numerických simulací.

Parametry numerické simulace s nádobou V35 byly nastaveny za použití změřených veličin postupným ladicím procesem, jehož schéma je na obr. 63. Parametry modelu byly postupně měněny tak, aby výsledky simulace odpovídaly všem experimentálně změřeným veličinám na zkušebním standu. Poznamenejme, že tento proces byl velmi zdlouhavý, protože vyžadoval mnoho časově náročných numerických simulací.



Obr. 62: Schéma měřicího zařízení.



Obr. 63: Schéma ladicího procesu pro stanovení parametrů numerické simulace.

Uvedeným postupem byly stanoveny následující parametry simulace:

- **Vstupní okrajová podmínka „vstup vzduchu“:** homogenní proudění kolmo vůči rovině vstupu, rychlost fází $|\mathbf{u}_1| = |\mathbf{u}_2| = 16,236 \text{ m s}^{-1}$; objemový podíl oleje $\alpha_2 = 0,01982$. Poznamenejme, že uvedené hodnoty odpovídají průtoku stlačeného vzduchu $\dot{V}_1 = 93,7 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$ a oleje $\dot{V}_2 = 31,58 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$.
- **Výstupní okrajová podmínka „výstup oleje“:** relativní tlak $\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$.
- **Výstupní okrajová podmínka „výstup vzduchu“:** relativní tlak $\tilde{p} = -3280 \text{ Pa}$.
- **Vlastnosti látek:** odpovídají ustáleným podmínkám v trati, tedy tlaku $p = 737 \text{ kPa}$ a teplotě $t = 86,1^\circ\text{C}$:

$$\text{vzduch: } \rho_1 = 7,17 \text{ kg m}^{-3}; \eta_1 = 2,14 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s,}$$

$$\text{olej: } \rho_2 = 850 \text{ kg m}^{-3}; \eta_2 = 0,0139 \text{ Pa s.}$$

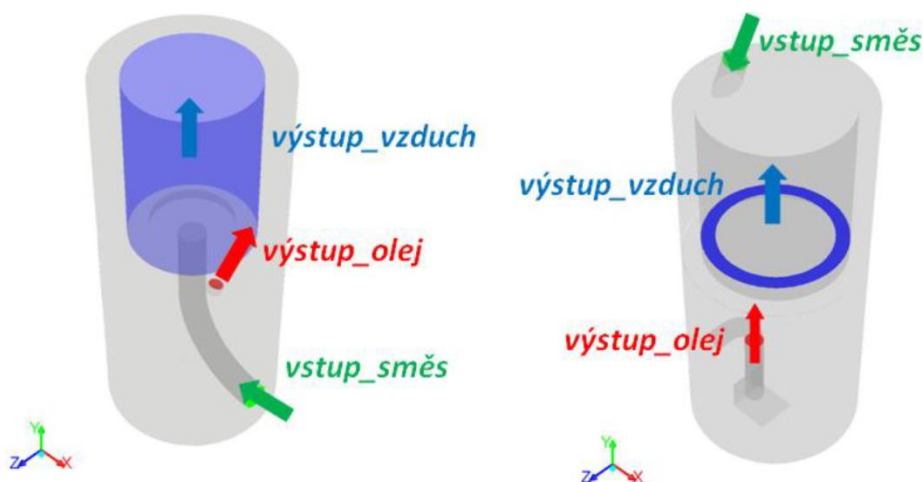
- **Velikost částic sekundární fáze:** $d_2 = 1,01 \cdot 10^{-4} \text{ m}$.
- **Velikost tíhového zrychlení:** $g = 9,81 \text{ m s}^{-2}$.

4.3 Výsledky numerických simulací separace fází oleje a stlačeného vzduchu ve vybraných tlakových nádobách

Okrajové podmínky na vstupu i obou výstupech jsou dodrženy zcela přesně. Rychlostní pole a proudnice mají očekávaný tvar, separace obou fází kvalitativně odpovídá fyzikálním předpokladům. Objevují se drobné oscilace sledovaných veličin (rezidua proudových veličin, tlak na vstupu, množství oleje v nádobě, maxima rychlosti v oblasti). Mírně osciluje rovněž průtok oleje na „výstupu vzduchu“ a tedy i hodnota hlavního hodnotícího kritéria K_s pro posouzení efektivity procesu separace v nádobě, viz (4.1). Hodnoty byly proto po dosažení ustáleného stavu zaznamenávány v průběhu iteračního procesu a následně statisticky vyhodnoceny.

Pro nádobu V35 zapojenou do zkušebního standu odpovídá průtok oleje hodnotám naměřeným v experimentu. To je samozřejmě dáno nastavením parametrů numerické simulace tak, aby odpovídaly výsledkům měření. Hodnota hlavního hodnotícího kritéria pro posouzení efektivity separace v této nádobě byla $K_s = (4,667 \pm 0,093) \%$. Připomeňme, že se jedná o poměr objemového toku oleje do jemného vzduchového filtru vůči objemovému toku oleje na vstupu do tlakové nádoby.

Navíc byl simulován proces separace fází v dalších dvou vybraných nádobách. Výpočtové oblasti obou separátorů jsou schematicky znázorněny na obr. 64. Tyto nádoby však již nebyly experimentálně měřeny, proto byly do určité míry převzaty parametry ze simulace nádoby V35. Byl přijat předpoklad, že šroubový kompresor stejného typu běžící na stejné výkonové hladině znečišťuje stlačený vzduch olejovými částicemi stejného rozměru. Na vstupu do tlakových nádob byly předepsány totožné rychlosti tekutin a objemový podíl, jako v případě nádoby V35. Protože však přívodní potrubí má u všech nádob různý průměr, liší se průtoky obou tekutin těmito nádobami. Tlakový rozdíl mezi výstupy, který nejvíce ovlivňuje především ustálenou hladinu oleje v nádobě, byl znovu určen ladicím procesem tak, aby hladina oleje v nádobě odpovídala poloze určené na základě kvalifikovaného odhadu techniků společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. Pro obě nádoby byl tak v simulacích zadán relativní tlak na „výstupu vzduchu“ $\tilde{p} = 200 \text{ Pa}$.

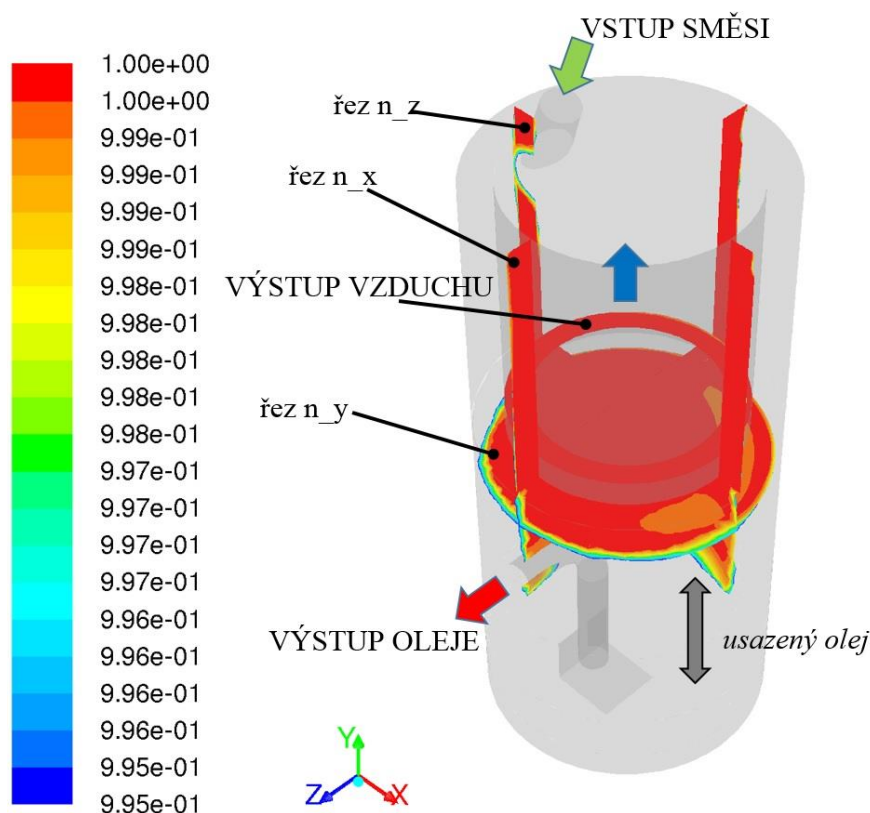


Obr. 64: Geometrie výpočtové oblasti s barevně rozlišenými hranicemi. Vlevo nádoba V41, vpravo nádoba PDP28.

Efektivita separace byla na základě výsledků numerických simulací kvantifikována jako $K_s = (3,644 \pm 0,401) \%$ pro nádobu V41 s dolním rozstříkem směsi a $K_s = (0,131 \pm 0,013) \%$ pro nádobu PDP28 s tangenciálním vstupem směsi. Separátor typu PDP28 byl tedy vyhodnocen jako nejlepší podle kritéria čistoty vzduchu na vstupu do jemného vzduchového filtru.

Na obr. 65 je rozložení objemového podílu vzduchu v nejúčinnějším separátoru PDP28. Rozložení je vykresleno na všech vstupních a výstupních plochách a ve třech kolmých pomocných řezech s normálami x , y a z . Hodnoty mimo $\alpha_1 \in \langle 1; 0,995 \rangle$ byly ořezány a vykreslen je objemový podíl vzduchu pouze ve směsi částečně očištěné od oleje s objemovým podílem $\alpha_2 \leq 0,5 \%$, tedy

zhruba čtvrtinovým podílem oleje oproti vstupní směsi. Výsledky numerické simulace proudění dvoufázové směsi v nádobě PDP28 prokázaly postupné oddělení kapek těžšího oleje při cyklónovém proudění vzduchu. Na obr. 65 je viditelné stékání odděleného oleje po vnějších stěnách tlakové nádoby. V dolní části nádoby se potom olej hromadí, patrná je celkem vysoká hladina usazeného oleje.



Obr. 65: Objemový podíl vzduchu (α_1 , [-]) v nádobě PDP28.

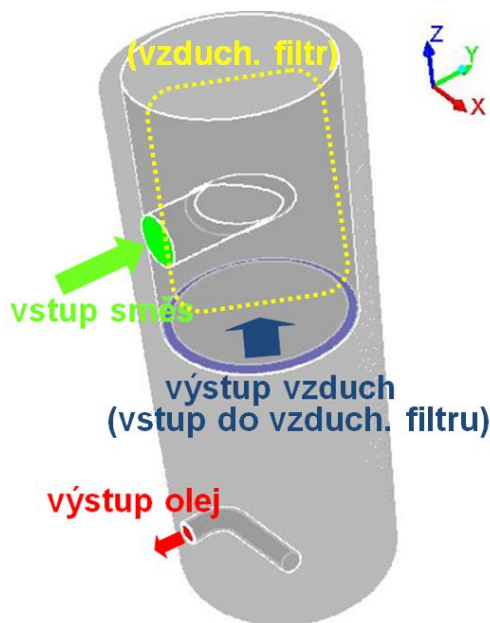
Na základě teoretických znalostí o dynamice dvoufázového proudění, porovnání výsledků numerických simulací provedených na jednotlivých nádobách a analýzy oddělování stlačeného vzduchu a oleje ze směsi byla stanovena obecná doporučení pro konstrukci tlakových nádob z hlediska efektivity procesu separace fází. Výtah ze zprávy [III]:

- Preferovat cyklonovou separaci, která dosahuje vyšší čistoty vzduchu v celém objemu. Proudové struktury jsou navíc jednodušší a tlaková ztráta v oblasti nižší.
- Používat tangenciální vstup směsi, který směřuje vstupní proud směsi do obvodového směru a podpoří tak cyklonový efekt. Zároveň je vhodné využít částečnou separaci již v přívodním potrubí tak, aby byl těžší olej již směřován k obvodu nádoby a neostříkoval přepážky uvnitř nádoby.
- Používat vyšší tlakové nádoby, které mají větší výšku vstupu do jemného vzduchového filtru od hladiny oleje.
- Minimalizovat rozrušování hladiny oleje proudícím vzduchem a zamezit tak zpětnému vytrhávání usazeného oleje do proudu vzduchu. Do blízkosti hladiny oleje umísťovat co nejméně prvků, které zasahují do proudu a tím napomáhají zmíněnému vytrhávání oleje.
- Pro čistotu odváděného oleje je nejdůležitější udržet v nádobě dostatečnou výšku usazeného oleje, přičemž umístění otvoru nehraje zásadní roli. Z tohoto pohledu je nejvhodnější opět nádoba PDP28. Naopak nejproblématictější je nádoba V41, kde je odvod oleje v boční stěně relativně blízko hladině oleje a objemový podíl nasávaného vzduchu v oleji značný. Poznamenejme, že při rychlém víření by teoreticky mohlo dojít k hromadění lehčí fáze, tedy vzduchu ve středu víru, avšak díky vyšší viskozitě je pohyb oleje v nádobě relativně pomalý.

4.4 Vliv vnějších rozměrů tlakové nádoby na efektivitu procesu separace fází

Kromě výše uvedených obecných doporučení pro návrh tlakových nádob z hlediska efektivity oddělení fází musejí samozřejmě konstruktéři brát ohledy i na další praktická omezení. Například vnitřní jemný vzduchový filtr má určité rozměry, tudíž nelze zkonstruovat tlakové nádoby libovolně štíhlého tvaru. Existuje také empirický vztah pro optimální objem separátoru v závislosti na výkonu kompresoru. Nadto je nezbytné respektovat i jiná návrhová hlediska, například pevnost tlakové nádoby, její výrobní a materiálovou náročnost, cenu atd.

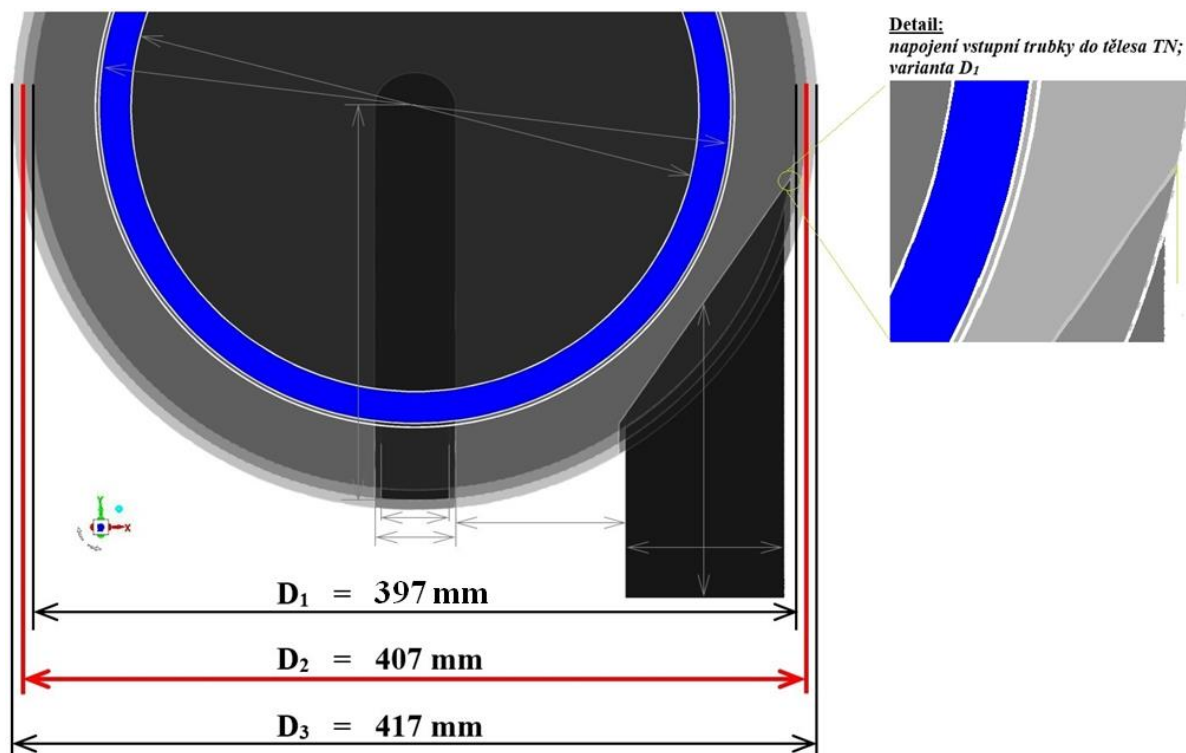
Příkladem tlakové nádoby, která dobře odpovídá výše uvedeným doporučením pro tvar z hlediska efektivity oddělení vzduchu a oleje je separátor PDP190 schematicky znázorněný na obr. 66. Tento velký separátor je určený pro výkonné šroubové kompresory.



Obr. 66: Geometrie výpočtové oblasti nádoby separátoru PDP190 s barevně rozlišenými hranicemi.

Na výpočtových geometriích odvozených z výchozí konstrukce PDP190 byl kvantifikován vliv vnějších rozměrů tlakové nádoby na objemový podíl oleje vstupujícího do jemného vzduchového filtru a na efektivitu separátoru dle vzorce (4.1). Cílem těchto simulací, provedených na geometriích modifikovaných vnějších rozměrů, bylo výpočtem podpořit, či vyvrátit domněnku o vlivu celkových vnějších proporcí tlakové nádoby na efektivitu separace fází. Při tvorbě výpočtových geometrií byly měněny pouze výška a průměr nádoby, ostatní geometrické parametry zůstaly zachovány. V původní podobě tak zůstaly například konfigurace vstupních a výstupních oblastí. Zachovávané rozměrové kóty jsou vyznačeny šedivou barvou na obr. 67 a obr. 68, tamtéž původní rozměry PDP190 červeně a jejich modifikace černě. Bylo vytvořeno celkem devět variant výpočtových geometrií, viz tab. 1, kombinující tři různé průměry se třemi výškami.

Z původní varianty o průměru $D_2 = 407$ mm byla nejprve vytvořena geometrie s nejmenším přípustným průměrem $D_1 = 396$ mm, který byl dán nejzazším možným spojitým napojením původní vstupní trubky do tělesa nádoby. Vstupní trubku by nebylo možné připojit k ještě menší nádobě bez větších úprav původní geometrie, jak ukazuje detail napojení v obr. 67. Poté byla vytvořena nádoba s největším průměrem, jejíž průměr byl zvětšen z původního průměru v opačném poměru vůči předchozímu zmenšení $D_3 = D_2/D_1 \cdot D_2 \doteq 417$ mm. Půdorysy všech tří geometrií různých průměrů jsou společně vykresleny v obr. 67.



Obr. 67: Výpočtové geometrie odvozené od původního návrhu PDP190 s průměrem D_2 .

Dle vyjádření pracovníků společnosti, v souladu s kritériem na optimální objem separátoru vzhledem k výkonu použitého kompresoru, jsou smysluplné pouze modifikace zachovávající celkový objem tlakové nádoby. Varianty s tímto objemem budou dále označovány jako tzv. „hlavní varianty“. Poznamenejme, že tvar i rozměry krytu jemného vzduchového filtru umístěného uvnitř tlakové nádoby se nemění. Pro dílčí objemy musí platit

$$|\Omega^{\text{PDP190}}| = V^{\text{PDP190}} - V^{\text{filtr}}, \quad (4.18)$$

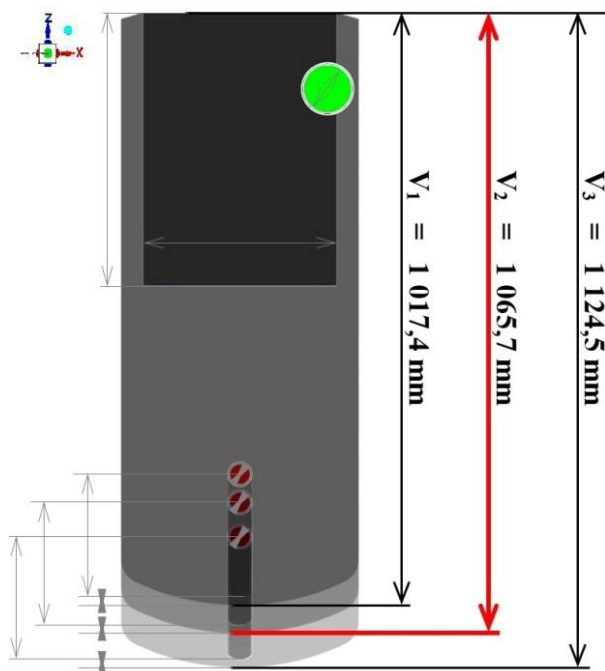
což znamená při respektování kritéria zachování objemu nádoby $V^{\text{hlavní}} = V^{\text{PDP190}}$

$$|\Omega^{\text{hlavní}}| = V^{\text{hlavní}} - V^{\text{filtr}} = |\Omega^{\text{PDP190}}|. \quad (4.19)$$

Shodné tedy musí být i objemy výpočtových oblastí „hlavních variant“ geometrie $|\Omega^{\text{PDP190}}| \doteq 95,5 \text{ dm}^3$. Pro srovnání poznamenejme, že objem výpočtové oblasti nádoby zkušebního standu V35 byl $|\Omega| = 18 \text{ dm}^3$. Výše popsaným dvěma upraveným průměry tlakové nádoby byly na základě kritéria zachování objemu nádoby, resp. oblasti přiřazeny příslušné výšky $V_3 \doteq 1125 \text{ mm}$ a $V_1 \doteq 1017 \text{ mm}$, viz zeleně vyznačené „hlavní varianty“ v tab. 1. Toho bylo dosaženo přidáním, nebo odebráním válcové sekce potřebné délky ve středu tlakové nádoby mezi krytem vzduchového filtru a trubkou odvádějící olej. Bokorysy výpočtových geometrií tří výšek ukazuje obr. 68.

Navíc byly řešeny i všechny ostatní kombinace průměrů a výšek, vyznačené oranžově v tab. 1, které sice nejsou zcela optimální pro šroubový kompresor použitého výkonu, ale výsledky výpočtů ostatních variant mají sloužit pro posouzení vlivu celkových vnějších rozměrů tlakové nádoby na efektivitu separace fází.

Poznamenejme, že studium vlivu vnějších rozměrů na separátorech odvozených od PDP190 již nebylo řešeno v rámci projektu „Metodika návrhu olejových separátorů“, ale až později. Výše popsaný model úlohy zůstal téměř zachován, avšak samotné numerické simulace byly provedeny pomocí novější verze systému ANSYS Fluent 14.5. Ukázalo se, že novější verze je pro numerické simulace separace dvou fází vhodnější oproti starší verzi 13.0. Novější verze neměla problémy se stabilitou numerických metod řešení úlohy, a to i pro velký počet buněk. Ve spojení s výkonnějšími počítači tedy mohly být úlohy separace řešeny na jemnějších sítích.



Obr. 68: Výpočtové geometrie odvozené od původního návrhu PDP190 s výškou V_2 .

Tabulka 1: Přehled variant výpočtových geometrií a jejich objemů. D_2V_2 značí původní variantu PDP190. V zelených polích jsou tzv. „hlavní varianty“ s totožným objemem, v oranžových polích varianty ostatní.

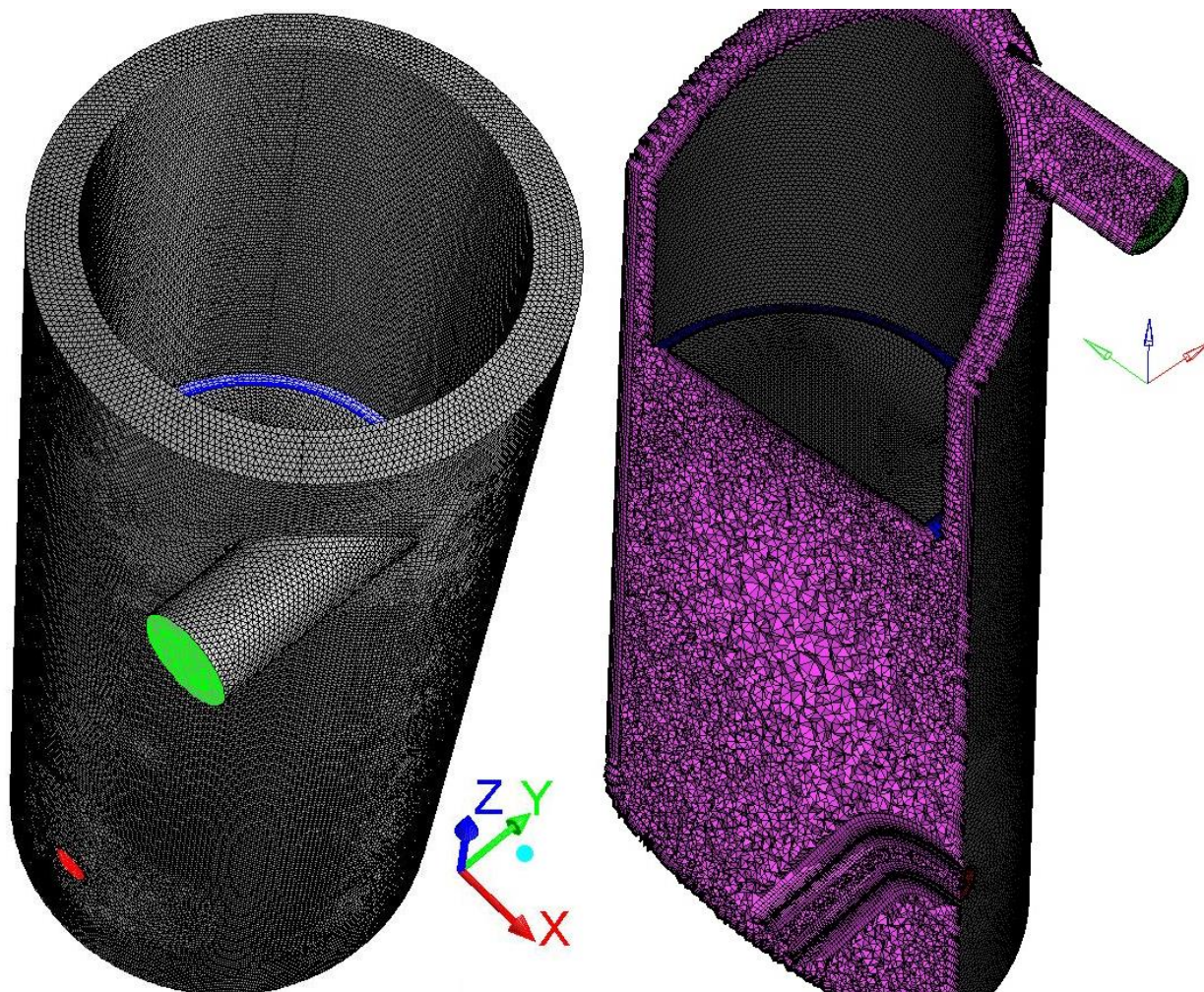
	výška	V_1	V_2	V_3
průměr	mm	1017	1066	1125
D_3	417	D3V1 95,5 dm ³	D3V2 102,0 dm ³	D3V3 110,1 dm ³
		D2V1 89,2 dm ³	D2V2 95,5 dm ³	D2V3 103,2 dm ³
D_2	407	D1V1 82,6 dm ³	D1V2 88,5 dm ³	D1V3 95,5 dm ³
D_1	397			

Výpočtová oblast originální geometrie tlakové nádoby (*varianta D_2V_2*) byla pokryta výpočetní sítí konečných objemů ve tvaru čtyřstěnů s mezní vrstvou tvořenou pětistěnnými elementy. Pro tvorbu výpočetní sítě byl použit systém Altair HyperMesh 13.0, ve kterém bylo vytvořeno pět variant sítí různých hustot. Na těchto sítích byl testován vliv diskretizace na dosahované výsledky. Numerické výsledky dosažené na třech nejmenších sítích jsou velmi blízké, proto předpokládáme, že výsledky dosažené s použitím těchto sítí se již blíží neznámému přesnému řešení úlohy. Pro finální numerické simulace byla potom použita síť zobrazená na obr. 69, která měla z těchto tří nejmenší počet elementů. Poznamenejme, že hustotou buněk ve volném proudu přibližně odpovídá síti vyhodnocené jako nejlepší rovněž během realizace projektu „Metodika návrhu olejových separátorů“, síť je však výrazně kvalitnější v oblasti stěn. Díky tomuto zjmenění výpočetní sítě v oblasti mezní vrstvy se dále podařilo podrobněji modelovat olejový film na stěně nádoby.

4.4.1 Matematický model dvoufázového proudění v olejovém separátoru PDP190

Pro řešení úloh separace stlačeného vzduchu a oleje byl použit finální matematický model z projektu „Metodika návrhu olejových separátorů“ popsany rovnicemi (4.2) – (4.17), jehož parametry se opírají o provedená experimentální měření, viz odstavec 4.2.2. Modifikací byla pouze záměna modelu turbulence $k - \varepsilon$ za model turbulence $k - \omega$. Rozdíly v dosahovaných

numerických výsledcích jsou zanedbatelné, avšak model turbulence $k - \omega$ by měl být pro simulace proudění uvnitř nádoby obecně vhodnější, jak uvádí například [140] a [141]. Model turbulence $k - \omega$ byl aplikován rovněž pro směs jako celek. Matematický model úlohy byl numericky řešen pomocí stejných metod jako dřívější simulace ve starší verzi systému ANSYS Fluent.



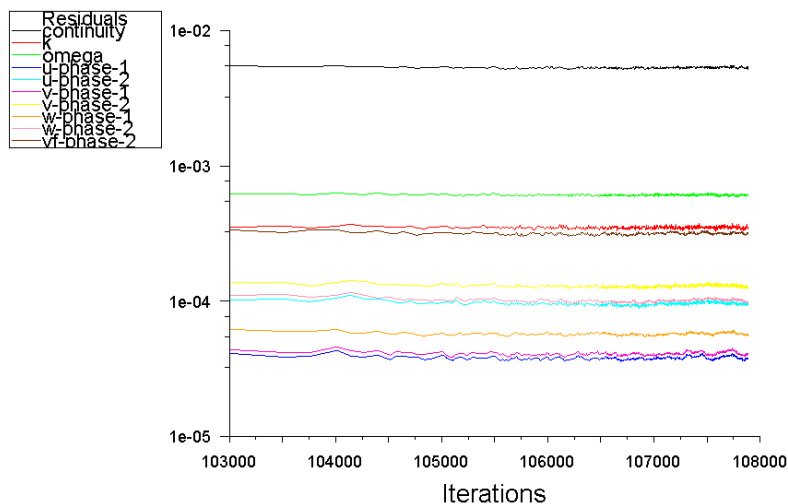
Obr. 69: Výpočetní síť pokrývající výpočtovou oblast původní varianty D2V2. Vlevo povrchová síť se zbarvením okrajových podmínek, vpravo řez oblastí s fialově zbarvenou objemovou sítí.

Ve společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. bylo provedeno experimentální měření na zkušební trati s nádobou PDP190, při kterém byl změřen objemový průtok vzduchu nasávaného z okolí ($\dot{V}_1^{vně} = 23,1 \text{ m}^3 \text{ min}^{-1}$) do kompresoru, průtok oleje nádobou ($\dot{V}_2 = 169 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$), ustálená teplota ($t = 77 \text{ °C}$) a jmenovitý přetlak v trati ($p^* = 7,5 \text{ bar}$). Tyto veličiny jsou dostačující pro definici vlastností vzduchu a předepsání vstupních okrajových podmínek, avšak nedostačují pro stanovení parametru velikosti olejových částic d_2 , který určuje vzájemnou dynamiku obou fází. Proto bylo předpokládáno, že velikost částic d_2 je shodná s typickou velikostí částic nepřímo určenou s využitím měření na standu s nádobou V35, viz odstavec 4.2.2. Hodnota d_2 tedy byla převzata z dřívějších simulací, stejně jako hustota oleje a dynamická viskozita oleje. Posledním potřebným parametrem pro kompletní zadání úlohy je hodnota tlakového rozdílu mezi výstupními tlakovými okrajovými podmínkami, která značnou měrou ovlivňuje výšku oleje v tlakové nádobě. Velikost tlakového rozdílu byla stanovena ladicím procesem, kdy byla postupně porovnávána výška oleje odečtená na olejoznaku během experimentálního měření nádoby PDP190 s ustálenými výškami hladiny oleje určenými na základě numerických simulací s různými hodnotami rozdílu tlaků mezi výstupy. Naměřená ustálená výška hladiny v olejoznaku za provozu byla $h_o = 351 \text{ mm}$ od nejnižšího místa nádoby, což v použitém geometrickém modelu je ekvivalentní kótě $z_o = -704 \text{ mm}$.

- **Vlastnosti látek:** uvažujeme-li suchý vzduch s plynovou konstantou $r_1 = 287,1 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ nasávaný z okolí o teplotě $t_1^{vně} = 22 \text{ °C}$ a tlaku $p_1^{vně} = 1 \text{ atm}$, obdržíme po dosazení do stavové rovnice ideálního plynu (2.50) hustotu stlačeného vzduchu ve stroji $\rho_1 = 8,47 \text{ kg m}^{-3}$ při naměřené teplotě a přetlaku. Dynamická viskozita $\eta_1 = 2,08 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$ byla pro naměřenou teplotu interpolována z tabulkových hodnot uvedených v [124]. Pro olej byly převzaty hodnoty hustoty $\rho_2 = 850 \text{ kg m}^{-3}$ a dynamické viskozity $\eta_2 = 0,0139 \text{ Pa s}$.
- **Vstupní okrajová podmínka „vstup vzduchu“:** na vstupu byla použita okrajová podmínka hmotnostního toku, směr vstupujícího proudění je kolmý k rovině vstupu a obě fáze se pohybují stejnou rychlostí. Hmotnostní tok stlačeného vzduchu vstupní hranicí byl $\dot{m}_1 = 0,46 \text{ kg s}^{-1}$ a hmotnostní tok oleje $\dot{m}_2 = 2,394 \text{ kg s}^{-1}$. Poznamenejme, že to odpovídá objemovému podílu oleje na vstupu $\alpha_2 \doteq 4,93 \%$
- **Výstupní okrajová podmínka „výstup oleje“:** relativní tlak $\tilde{p} = -6400 \text{ Pa}$.
- **Výstupní okrajová podmínka „výstup vzduchu“:** relativní tlak $\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$.
- **Velikost částecek sekundární fáze:** $d_2 = 1,01 \cdot 10^{-4} \text{ m}$.
- **Tíhové zrychlení:** $g_z = -9,81 \text{ m s}^{-2}$.

4.4.2 Výsledky numerických simulací oddělování fází

Provedené numerické simulace na všech variantách geometrie výpočtové oblasti používaly ekvivalentní síť, totožný model se stejnými parametry, a to včetně okrajových podmínek. Rezidua řešených proudových veličin se ustálí během iteračního procesu výpočtu relativně rychle a dále zůstávají na stejných hodnotách jen s nepatrnými oscilacemi, viz obr. 70.

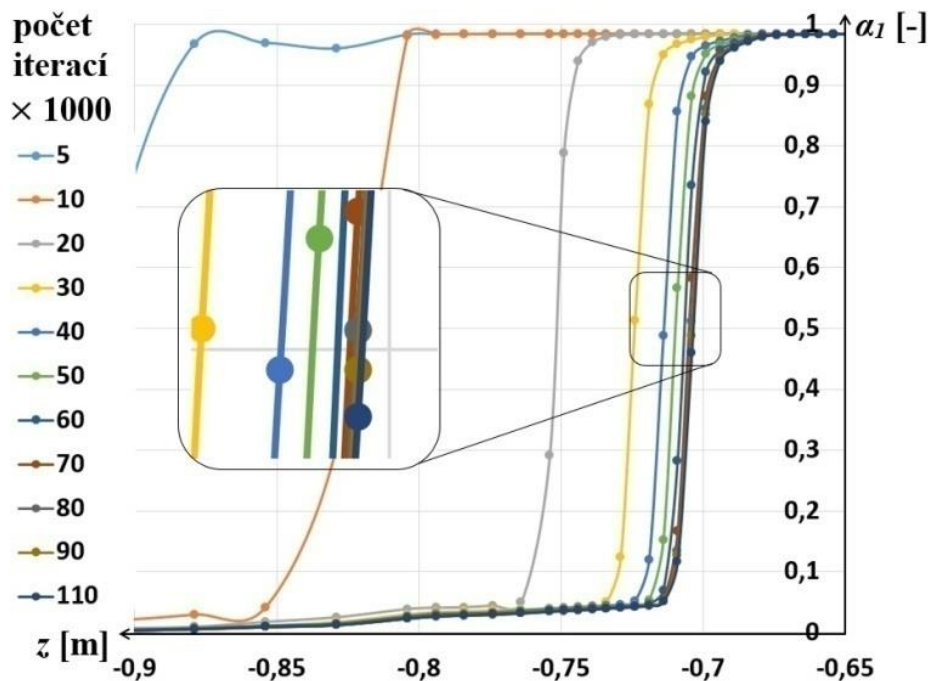


Obr. 70: Rezidua veličin v samotném konci numerické simulace D2V2.

Úplné ustálení dalších sledovaných veličin (tlak na vstupu, objemové podíly na obou výstupech, maximální rychlost v oblasti, bilance hmotnostního toku, výška hladiny oleje a objem oleje ve výpočtové oblasti) trvá mnohem déle, jak dokládají obr. 71 a obr. 75. Pro variantu D2V2 nastane ustálený stav zhruba po 60 000 – 70 000 iteracích, při řešení ostatních variant tomu bylo podobně. Dále lze v průběhu iteračního procesu pozorovat drobné oscilace veličin, avšak jejich střední hodnoty se již v podstatě nemění. Například statistické vyhodnocení objemového podílu vzduchu na „výstupu vzduchu“ zaznamenávaného mezi 85 000. iterací a 105 000. iterací s přesností na osm platných míst ukazuje přesnost dosaženého výsledku na čtyři platné cifry $\alpha_1 = (99888,7 \pm 2,3) \cdot 10^{-5}$.

Stejně tak dochází v průběhu iteračního procesu numerické metody řešení ustáleného stavu k pozvolnému zvyšování hladiny usazeného oleje. Počáteční podmínka předpokládá, že v nádobě není žádný olej, ale její vliv postupně v průběhu simulace mizí, nádoba se plní olejem, dokud není

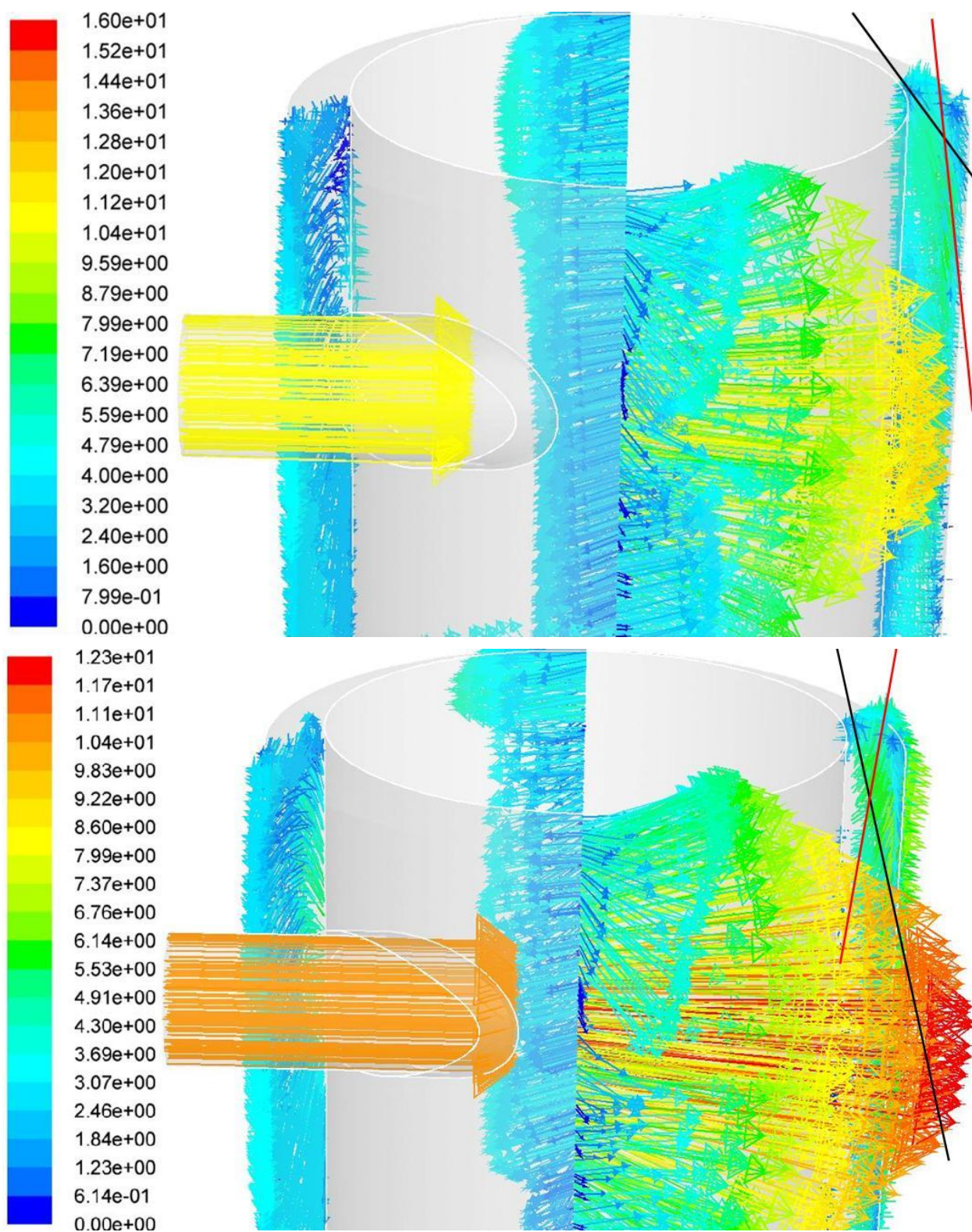
dosaženo ustálené hladiny oleje. Tento proces zachycuje obr. 71, kde prudký růst objemového podílu vzduchu s výškou indikuje polohu hladiny oleje. Poznamenejme dále, že jako přesná svislá poloha hladiny oleje byl určen bod, kde po ustálení byla průměrná hodnota objemových podílů obou tekutin stejná $\alpha_1 = \alpha_2 = 0,5$. V simulaci na původní geometrii D2V2 to odpovídalo poloze hladiny $z \doteq 703,5$ mm. Připomeňme, že cílová, experimentálně změřená poloha byla $z_0 = 704$ mm. Dodejme, že pro různé řešené varianty geometrií se polohy hladiny oleje lišily.



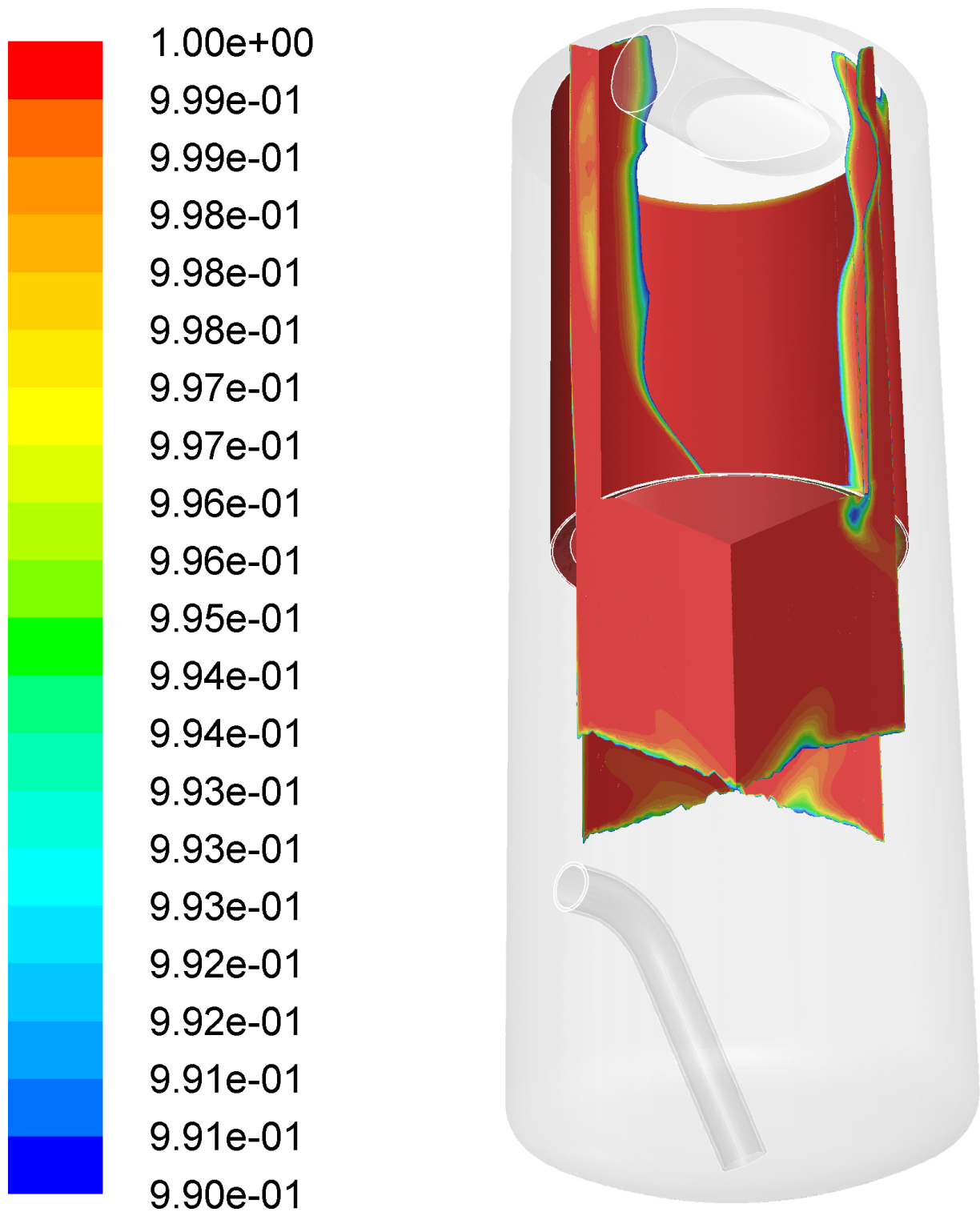
Obr. 71: Jednotlivé křivky zachycují průměrný objemový podíl vzduchu ve vodorovných řezech výpočtovou oblastí umístěných na svislé kótě z během iteračního procesu výpočtu varianty D2V2. Prudký růst křivky tedy v podstatě indikuje polohu hladiny usazeného oleje v nádobě.

Mechanismus separace obou fází je shodný jako u separátoru PDP28 s tangenciálním vstupem. Pro všech devět variant geometrie výpočtové oblasti byly dosaženy výsledky kvalitativně velmi podobné. Největší část oleje se odděluje ze směsi hned za vstupem v prostoru mezikruží mezi vnitřní přepážkou (tzv. košilkou) kryjící vnitřní jemný vzduchový filtr a tělesem tlakové nádoby. Zde pozorujeme centrifugální efekt, kdy se částice těžšího oleje vlivem vlastní odstředivosti pohybují více směrem od středu, v porovnání s lehčím vzduchem, viz obr. 72, a postupně se hromadí u stěny nádoby. Na obr. 72 jsou zobrazeny vektory rychlosti jednotlivých fází zobrazené na vstupu a v osovéch řezech s normálami x a y . Navíc jsou zvýrazněny pro obě fáze dvě přímky udané směry vektorů rychlostí ve dvou vybraných bodech, které dokumentují výrazněji odstředivý směr pohybu oleje oproti směru pohybu vzduchu.

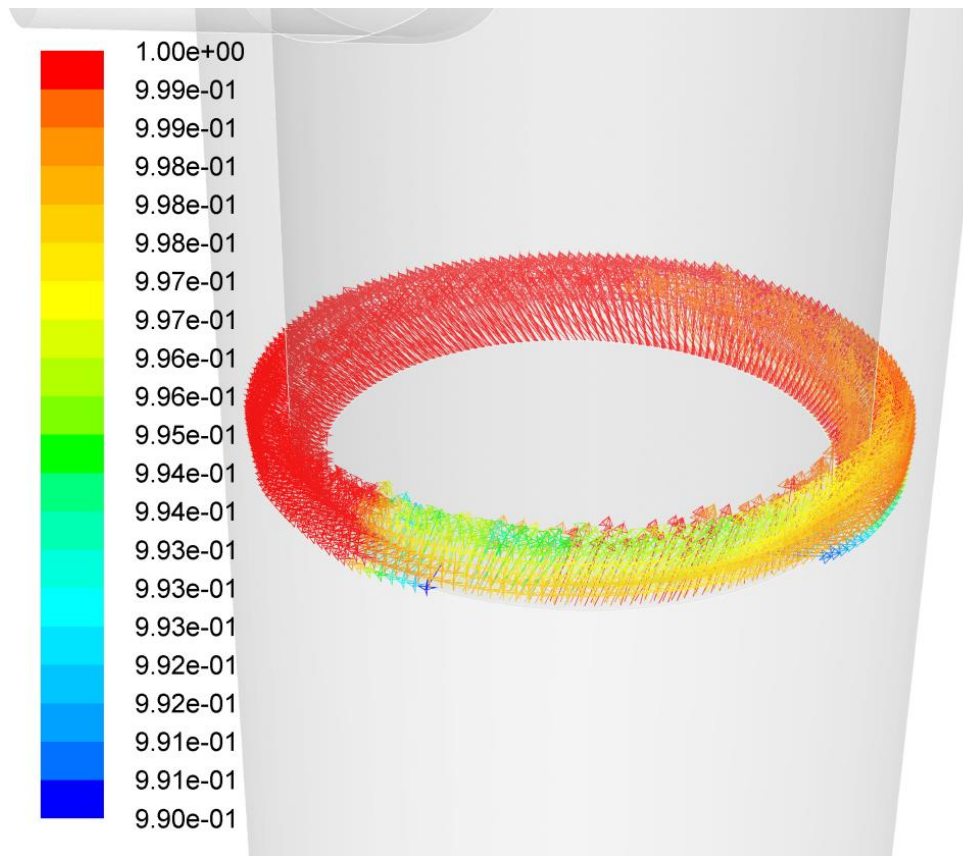
Olejový film stéká po stěnách nádoby dolů, kde se usazuje. Z výsledků numerických simulací byl určen relativní objemový tok oleje do jemného vzduchového filtru vůči objemovému toku oleje na vstupu $K_s = 1,01$ %. Separátor PDP190 je tedy z pohledu tohoto kritéria při separaci fází efektivnější, než například V35 a V41, avšak nedosahuje kvalit PDP28. Je třeba si však uvědomit, že vzhledem k výkonu kompresoru a velkým průtokům obou fází oblastí teče do jemného filtru nezanedbatelné množství oleje. Slabým místem stávajícího návrhu PDP190 z pohledu čistoty vzduchu je ostřík vnitřní košilky vstupující směsí. Uvažujeme-li na vstupu do výpočtové oblasti směs s homogenním rozložením objemového podílu obou fází, je vnitřní košilka značně skrápěna olejem, který po ní stéká a v oblasti dolní hrany košilky je potom nasáván do jemného vzduchového filtru, jak ukazují obr. 73 a obr. 74. Vhodným řešením, jak dále vylepšit efektivitu PDP190, by mohla být například promyšlená zástavba tlakové nádoby do kompresorového stroje, která by konfigurací přívodního potrubí směsi směřovala odstředivým pohybem co největší množství oleje k vnějšímu plášti nádoby již na vstupu.



Obr. 72: Detail vektorů rychlosti v oblasti vstupu zobrazených na vybraných plochách. Nahoře vektory rychlosti vzduchu, dole vektory rychlosti oleje. Vektory jsou zbarveny podle velikosti rychlosti příslušné fáze [m s^{-1}].

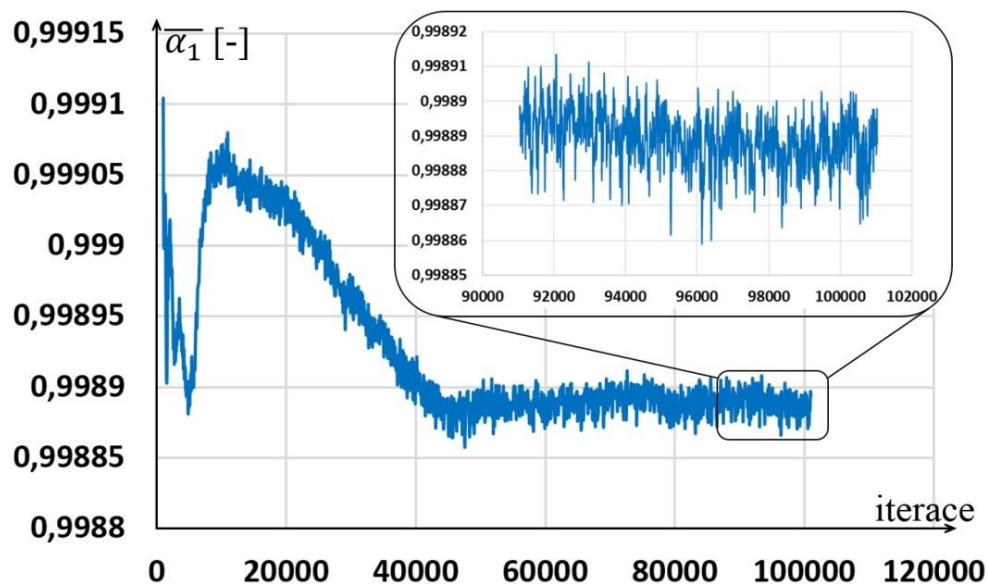


Obr. 73: Objemový podíl vzduchu (α_1 , [-]) v kolmých řezech nádobou PDP190 a na její vnitřní košilce. Dobře patrná je vysoká hladina usazeného oleje v nádobě a stékání oleje po vnitřní košilce v oblasti vstupu směsi do tlakové nádoby.



Obr. 74: Vektory rychlosti zbarvené podle objemového podílu vzduchu (α_1 , [-]) na okrajové podmínce „výstup vzduchu“, tedy v místech kudy vzduch proudí do jemného vzduchového filtru.

Průměrnou hodnotu objemového podílu vzduchu na „výstupu vzduchu“ v průběhu iteračního procesu ukazuje obr. 75 pro numerické simulace s původní geometrií *D2V2*. Povrchový graf na obr. 76 ukazuje hodnoty koeficientu pro vyhodnocení separace K_s definovaného vztahem (4.1) pro všechny řešené výpočtové geometrie odvozené od tlakové nádoby PDP190. Provedené numerické simulace separace oleje a vzduchu potvrdily očekávaný trend, že separace probíhá ve štíhlých tlakových nádobách efektivněji, než v zavalitých tlakových nádobách. Nejlépe tedy očistí stlačený vzduch od oleje nádoba *DIV3* s nejnižší hodnotou $\dot{V}_{2Z}^{\text{výstup vzduchu}}$, resp. K_s , jak ukazuje obr. 76, a dále demonstrují hodnoty v tab. 2 a tab. 3.



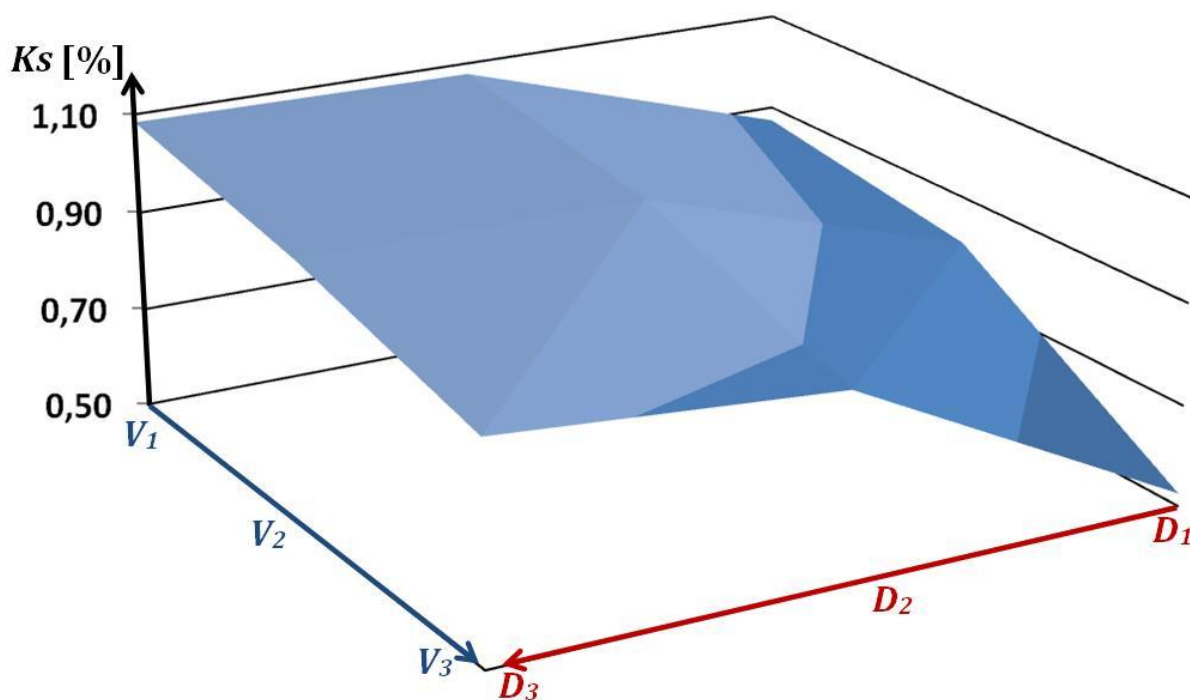
Obr. 75: Objemový podíl vzduchu na výstupu do jemného vzduchového filtru v průběhu iteračního procesu, varianta *D2V2*.

Tabulka 2: Objemový podíl oleje (α_2 , [-]) na „výstupu vzduchu“, tedy vstupu vzduchu do jemného vzduchového filtru, pro jednotlivé varianty a procentuelní porovnání relativního rozdílu této hodnoty vůči hodnotě vypočtené pro původní geometrii D2V2.

	výška	V ₁	V ₂	V ₃
průměr	mm	1017	1066	1125
D ₃	417	1,21e-3 8,5%	1,15e-3 3,4%	1,07e-3 -3,8%
D ₂	407	1,17e-3 5,3%	1,11e-3 ref.	9,63e-4 -13%
D ₁	397	9,10e-4 -18%	8,50e-4 -24%	5,51e-4 -50%

Tabulka 3: Objemový tok oleje ($\dot{V}_{2Z}^{\text{výstup vzduchu}}$, [cm³ s⁻¹]) do jemného vzduchového filtru pro jednotlivé varianty a vyhodnocení efektivity separace představované relativním objemovým tokem oleje do jemného filtru vůči objemovému toku oleje na vstupu (K_s , [%]).

	výška	V ₁	V ₂	V ₃
průměr	mm	1017	1066	1125
D ₃	417	30,5 1,08 %	28,7 1,02 %	26,0 0,92 %
D ₂	407	30,4 1,08 %	28,5 1,01 %	24,4 0,87 %
D ₁	397	24,5 0,87 %	22,7 0,81 %	14,8 0,53 %



Obr. 76: Relativní objemový tok oleje na výstupu do jemného vzduchového filtru vůči objemovému toku oleje na vstupu pro všech devět variant výpočtové oblasti.

Závěr

Závěrem lze konstatovat, že dvoufázové proudění bohužel nelze v současnosti popsat jediným univerzálním modelem. Pro řešení dvoufázového proudění jsou používány různé druhy specializovaných modelů a technik. Příkladem modelů s relativně širokým rozsahem použití jsou tzv. eulerovské dvoutekutinové modely.

Předkládaná disertační práce vysvětluje podstatu a základní pojmy dvoufázového proudění, jako například proudové režimy, silové působení mezi jednotlivými fázemi, či fyzikální vlastnosti směsí, které jsou potřebné pro modelování dvoufázového proudění. Obsáhlá rešeršní část seznamuje čtenáře s metodami pro zachycení, či sledování tvaru rozhraní rozvrstvených proudění, dále s eulerovskými modely a s eulerovskými – lagrangeovskými modely pro popis a řešení proudění tekutiny s rozptýlenými diskrétními částicemi. Současně jsou zde také diskutovány silné a slabé stránky těchto modelů a technik, jsou rozebrány jejich vzájemné rozdíly a porovnány možnosti použití pro modelování konkrétních úloh. Ucelený přehled modelů a technik, prezentovaný v disertační práci, tak může být vodítkem při hledání vhodného dvoufázového modelu pro konkrétní aplikaci.

Stěžejní část celé disertační práce je věnována matematickému modelování pomocí eulerovských dvoutekutinových modelů pro popis proudění dvou nevázkých, stlačitelných a tepelně nevodivých tekutin, mezi nimiž nedochází k výměně hmoty. S využitím průměrovacích technik byl odvozen tzv. obecný šestirovnicový dvoutekutinový model a bylo ukázáno potřebné uzavření celého systému rovnic. V disertační práci byly rovněž popsány způsoby numerického řešení dvoutekutinových modelů, které jsou založeny na metodě konečných objemů využívající AUSM+ schéma s lineární rekonstrukcí veličin pro zvýšení řádu přesnosti. Autorem disertační práce navržený výpočetní algoritmus byl softwarově implementován a vyvinutý řešič byl nejprve použit pro numerické řešení vybraných testovacích úloh při uvažování čtyřrovnicového dvoutekutinového modelu. Dosažené numerické výsledky testovací úlohy Toumiova „shock tube“ problému ukázaly, že čtyřrovnicový model, který nezahrnuje rovnice pro celkovou energii systému, není vhodný pro řešení proudění s výrazným vlivem termodynamiky. Relativně dobrých výsledků však bylo dosaženo pomocí čtyřrovnicového modelu při numerickém řešení testovací úlohy vodovodního kohoutku, kde je vliv termodynamiky systému na proudění zanedbatelný.

Vyvinutý numerický řešič byl rovněž aplikován při uvažování šestirovnicového dvoutekutinového modelu pro numerické řešení Toumiova „shock tube“ problému. Numerické výsledky dosažené pomocí vlastního vyvinutého softwaru se velmi dobře shodují s výsledky publikovanými jinými autory v odborné literatuře. Nespojitosti v proudovém poli jsou zachyceny velmi dobře, a to díky, autorem této disertační práce, zvýšenému řádu přesnosti použitých schémat pomocí lineární rekonstrukce s minmod limiterem.

V disertační práci byl rovněž popsán a numericky řešen třírovnicový model pro rozvrstvená proudění. Tento nejjednodušší model pro řešení rozvrstvených proudění s volnou hladinou je odvozen od dvoutekutinových modelů doplněných o advekční rovnici pro objemový podíl. Pro jeho řešení byl použit autorem této disertační práce vyvinutý numerický řešič založený na AUSM+ schématu metody konečných objemů rozšířený do 2D, který umožňuje rovněž výpočty na obecných (nestrukturovaných) výpočetních sítích.

Při návrhu numerického řešiče byla zvláštní pozornost věnována diskretizaci advekční rovnice pro objemový podíl v nekonzervativním tvaru, jejíž konzervativní část byla řešena obvyklým způsobem spolu s rovnicí kontinuity a pohybovými rovnicemi a pro nekonzervativní část bylo

navrženo schéma vycházející z aproximace toků pomocí AUSM+ schématu. Tento vyvinutý numerický řešič byl testován na problému protržení hráze. Vypočtený tvar zátopové vlny po protržení hráze koresponduje s výsledky publikovanými v odborné literatuře, avšak z provedeného porovnání je patrná vyšší numerická viskozita použitých schémat. Navíc byl výpočtový model validován pro úlohu vzestupu bubliny kapalinou, čímž byla prokázána jeho schopnost poradit si i s problémy s vícečetným rozvrstvením tekutin v tíhovém poli.

Čtvrtá kapitola disertační práce byla věnována řešení konkrétní úlohy z průmyslové praxe, a to separaci oleje a vzduchu v tlakových nádobách (olejových separátorech) ve šroubových kompresorech vyvíjených a vyráběných ve společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. Numerické simulace byly provedeny s využitím dvoutekutivního modelu implementovaného ve výpočtovém systému ANSYS Fluent. Použité parametry výpočtového modelu se opíraly o experimentální data změřená na zkušebním zařízení ve společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. Provedené numerické simulace na třech separátorech odlišné koncepce ukázaly výhody cyklónové separace obou fází oproti separaci rozstříkem. Na základě vyhodnocení dosažených výsledků a provedených analýz byla stanovena obecná doporučení pro návrh tlakových nádob (olejových separátorů) s ohledem na zefektivnění procesu oddělení fází oleje a vzduchu. Výsledky dalších numerických simulací jednoznačně potvrdily hypotézu, že vnější rozměry tlakové nádoby (olejového separátoru) mají významný vliv na efektivitu procesu separace oleje a vzduchu. Ukázalo se, že štíhlé tlakové nádoby separují olej a vzduch lépe než tlakové nádoby zavalitých tvarů.

Z výše uvedeného je zřejmé, že všechny cíle formulované v úvodu disertační práce byly splněny.

Přínosy práce

Za jeden z významných přínosů autora disertační práce, lze považovat to, že na základě provedené rešerše odborné literatury zpracoval ucelený přehled používaných modelů a technik pro řešení dvofázového proudění, včetně bohaté diskuse o výhodách a nevýhodách jednotlivých modelů a rozsahu jejich použití. Tento přehled může být dobrým východiskem pro navazující výzkumné práce zaměřené na tuto oblast nejen na Katedře mechaniky Fakulty aplikovaných věd ZČU v Plzni.

Další přínos autora disertační práce lze spatřovat v úspěšné implementaci třírovnicového modelu pro řešení proudění s volnou hladinou na problém vzestupu bubliny kapalinou. Jedná se o úlohu s vícečetným rozvrstvením tekutiny v tíhovém poli. Pokud je autorovi z provedené rešerše dobře známo, jedná se o první úspěšnou implementaci třírovnicového modelu na úlohu tohoto typu, neboť v odborné literatuře byla tato úloha řešena pomocí jiných modelů (pětirovnicový model), či technik (metody sledování rozhraní a metody zachycení rozhraní).

Přínosem autora disertační práce je bezesporu i řešení úlohy z průmyslové praxe týkající se odlučování oleje a vzduchu v tlakových nádobách šroubových kompresorů. Poznamenejme, že řešení separace fází v různých prachových separátorech je v odborné literatuře relativně dobře popsáno, přičemž obvykle bývají implementovány eulerovské – lagrangeovské modely diskrétních částic. Avšak implementace dvoutekutivních modelů na řešení separace oleje a vzduchu nebyla podle vědomí autora disertační práce dosud publikována. Autor disertační práce dále s využitím numerických simulací stanovil obecné zásady pro návrh olejových separátorů s ohledem na efektivitu separace obou fází a prokázal, že proces separace v tlakových nádobách štíhlého tvaru je účinnější než v tlakových nádobách zavalitého tvaru. Formulovaná obecná doporučení pomáhají konstruktérům společnosti ATMOS Chrást, s.r.o. při konstrukci efektivnějších separátorů oleje používaných ve šroubových kompresorech.

Literatura

- [1] Alcrudo, F., Benkhaldoun, F.: *Exact solutions to the Riemann problem of the shallow water equations with a bottom step*. Computers & Fluids, Vol. 30, pp. 643-671, 2001.
- [2] Aniszewski, W., Ménard, T., Marek, B.: *Volume of fluid (VOF) type advection methods in two-phase flow: A comparative study*. Computers & Fluids, Vol. 97, pp. 52-73, 2014.
- [3] ANSYS, Inc.: *ANSYS FLUENT Theory guide*. Release 14.5, 2012.
- [4] Awad, M.M.: *Two-phase flow*. InTechOpen, 2012. Dostupné online na <http://dx.doi.org/10.5772/76201>
- [5] Baer, M.R., Nunziato, J.W.: *A two phase mixture theory for the deflagration to detonation (DDT) transition in reactive granular materials*. International Journal of Multiphase Flows, Vol. 12, pp. 869-889, 1986.
- [6] Behr, M., Abraham F.: *Free-surface flow simulations in the presence of inclined walls*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 191, pp. 47-68, 2002.
- [7] Berry, R.A., et al.: *Progress in the development of compressible, multiphase flow modeling capability for nuclear reactor flow applications*. The Idaho National Laboratory, Department of Energy, 2008.
- [8] Bestion, D.: *The physical closure laws in the CATHARE code*. Nuclear Engineering and Design, Vol. 124, pp. 229-245, 1990.
- [9] Bipin, K.: *High performance computing for multiphase fluids flows*. PhD thesis, Dublin City University, Faculty of Engineering and Computing, 2009.
- [10] Bonzanini, A., Picchi, D., Poesio, P.: *Simplified 1D incompressible two-fluid model with artificial diffusion for slug flow capturing in horizontal and nearly horizontal pipes*. Energies, Vol. 10, 1372, 2017.
- [11] Brar, L.S., Sharma, R.P., Elsayed, K.: *The effect of the cyclone length on the performance of Stairmand high-efficiency cyclone*. Powder Technology, Vol. 286, pp. 668-677, 2015.
- [12] Brennen, C.E.: *Fundamentals of multiphase flows*. Cambridge University Press, 2005. ISBN 0521 848040
- [13] Bublík, O.: *Výpočtové metody dynamiky tekutin*. Pomocný učební text, FAV, ZČU, Plzeň, 2012.
- [14] Bublík O., Vimmr, J., Jonášová A.: *Comparison of discontinuous Galerkin time integration schemes for the solution of flow problems with deformable domains*. Applied Mathematics and Computation, Vol. 267, pp. 329-340, 2015.
- [15] Caboussat, A., Clausen, P., Rappaz, J.: *Numerical simulation of two-phase flow with interface tracking by adaptive Eulerian grid subdivision*. Mathematical and Computer Modelling, Vol. 55, pp. 490-504, 2012.
- [16] Campbell, C.S., Brennen, C.E.: *Computer simulations of granular shear flows*. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 151, pp. 167-188, 1985.
- [17] Clerc, S.: *Numerical simulation of the homogeneous equilibrium model for two-phase flows*. Journal of Computational Physics, Vol. 161, pp. 354-375, 2000.
- [18] Coquel, F., et al.: *A numerical method using upwind schemes for the resolution of two-phase flows*. Journal of Computational Physics, Vol. 136, pp. 272-288, 1997.
- [19] Crowe, C., Sommerfeld, M., Tsuji, Y.: *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC Press, 2011. ISBN 978-1439840504
- [20] Cundall, P.D., Strack, O.D.: *A discrete numerical model for granular assemblies*. Geotechnique, Vol. 29, pp. 47-65, 1979.
- [21] Čermák, L.: *Numerické metody pro řešení diferenciálních rovnic*. FSI VUT, Brno, 2013.
- [22] Černe, G, et al.: *Coupling of the interface tracking and the two-fluid models for the simulation of incompressible two-phase flow*. Journal of Computational Physics, Vol. 171, pp. 776-804, 2001.
- [23] Deen, N.G., et al.: *Review of discrete particle modeling of fluidized beds*. Chemical Engineering Science, Vol. 62., pp. 28-44, 2007.
- [24] Dinh, T.N., Nourgaliev, R.R., Theofanous, T.G.: *Understanding the ill-posed two-fluid model*. The 10th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, Seoul, 2003.
- [25] Drew, D.A., Passman, S.L.: *Theory of multicomponent fluids*. Springer-Verlag New York, Inc. 1999. ISBN 0-387-98380-5

- [26] Dumbser, M.: *A diffuse interface method for complex three-dimensional free surface flows*. Computer methods in applied mechanics and engineering, Vol. 257, pp. 47-64, 2013.
- [27] Dumbser M.: *A simple two-phase method for the simulation of complex free surface flows*. Computer methods in applied mechanics and engineering, Vol. 200, pp. 1204-1219, 2010.
- [28] Dumbser, M., et al.: *A unified framework for the construction of one-step finite volume and discontinuous Galerkin schemes on unstructured meshes*. Journal of Computational Physics, Vol. 227, pp. 8209-8253, 2008.
- [29] Dymond, J.H., Malhotra, R.: *The Tait equation: 100 years on*. International Journal of Thermophysics, Vol. 9, pp. 941-951, 1988.
- [30] Edwards J.R., Liou, M.S.: *Low-diffusion flux-splitting methods for real fluid flows at all speed*. American Institute of Aeronautics & Astronautics, 1999.
- [31] El-Batsh, H.M., Doheim, M.A., Hassan, A.F.: *On the application of mixture model for two-phase flow induced corrosion in a complex pipeline configuration*. Applied Mathematical Modelling, Vol. 36, pp. 5686-5699, 2012.
- [32] Elgeti, S., Sauerland, H.: *Deforming fluid domains within the finite element method; Five mesh-based tracking methods in comparison*. Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science, 2014.
- [33] Embid, P., Baer, M.R.: *Mathematical analysis of a two-phase continuum mixture theory*. Continuum Mechanics and Thermomechanics, Vol. 4, pp. 279-312, 1992.
- [34] Enright, D., et al.: *A hybrid particle level set method for improved interface capturing*. Journal of Computational Physics, Vol. 183, pp. 83-116, 2002.
- [35] Evje, S., Fjelde, K.K.: *On a rough AUSM scheme for one-dimensional two-phase model*. Computers & Fluids, Vol. 32, pp. 1497-1530, 2003.
- [36] Evje, S., Flåtten, T.: *Hybrid central-upwind schemes for numerical resolution of two-phase flows*. ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis, Vol. 39, pp. 253-273, 2005.
- [37] Fakhretdinov, I.A., Zhdanov, E.R.: *Tait's equation of state for liquid mixtures*. High Temperature, Vol. 42, pp. 396-400, 2004.
- [38] Fišer, M.: *Numerical simulations of the shallow water flow*. Disertační práce, KME FAV ZČU, Plzeň, 2016.
- [39] Fišer, M., et al.: *A mass conservative well-balanced reconstruction at dry/wet interfaces for the Godunov-type shallow water model*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 82, pp. 893-908, 2016.
- [40] Flåtten, T., Morin, A., Munkejord, S.T.: *On solutions to equilibrium problems for systems of stiffened gases*. SIAM Journal on Applied Mathematics, Vol. 71, pp 41-67, 2011.
- [41] Gad-el-Hak, M.: *Flow control: passive, active and reactive flow management*. Cambridge university press, 2010. ISBN 978-0-521-77006-4
- [42] Ginting, V., Guang, L., Jiangguo, L.: *On application of the weak Galerkin finite element method to a two-phase model for subsurface flow*. Journal of Scientific Computing, Vol. 66, pp. 225- 239, 2015.
- [43] Goz, M.F., Lain, S., Sommerfeld, M.: *Study of the numerical instabilities in Lagrangian tracking of bubbles and particles in two-phase flow*. Computers and Chemical Engineering, Vol. 28, pp. 2727-2733, 2004.
- [44] Grosshans, H., et al.: *Prediction and measurement of the local extinction coefficient in sprays for 3D simulation/experiment data comparison*. International Journal of Multiphase Flow, Vol. 72, pp. 218-232, 2015.
- [45] Guillard, H., Labois, M.: *Numerical modeling of compressible two-phase flows*. European Conference on Computational Fluid Dynamics, Delft, 2006.
- [46] Gunsing, M.: *Modelling of bubbly flows using volume of fluid, front tracking and discrete bubble models*. PhD thesis, Twente University Press, 2004.
- [47] Hajžman, M., Bublík, O., Vimmr, J.: *On the modeling of compressible inviscid flow problems using AUSM schemes*. Applied and Computational Mechanics, Vol. 1, pp. 469-478, 2007.
- [48] Halama, J., Benkhaldoun, F., Fořt, J.: *Flux schemes based finite volume method for internal transonic flow with condensation*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 65, pp. 953-968, 2010.

- [49] Halama, J., Benkhaldoun, F., Fořt, J.: *Numerical modeling of two-phase transonic flow. Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 80, pp. 1624-1635, 2010.
- [50] Halama, J., Hric, V., Pátý, M.: *Numerical simulation of transonic flow of stream with non-equilibrium phase change using typical and simplified method. Applied Mathematics and Computation*, Vol. 319, pp. 499-509, 2018.
- [51] Hanratty, T.J.: *Physics of gas-liquid flows*. Cambridge University Press, 2013. ISBN 978-1-107-04120-2
- [52] Harlow, F., Welch, J.: *Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. Physics of Fluids*, Vol. 8, pp. 2182, 1965.
- [53] Hibiki, T., Ishii, M.: *One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes. International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46, pp. 4935-4948, 2003.
- [54] Hibiki, T., Ishii, M.: *One-dimensional drift-flux model for two-phase flow in a large diameter pipe. International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46, pp. 1773-1790, 2003.
- [55] Hiltunen, K., et al.: *Multiphase flow dynamics – theory and numerics*. Edita Prima Oy, Helsinki, 2009. ISBN 978-951-38-7365-3
- [56] Hirt, C.W., Nichols, B.D.: *Volume of fluid method for the dynamics of free boundaries. Journal of Computational Physics*, Vol. 39, pp. 201-225, 1981.
- [57] Hoang, H., et al.: *Tait equation in the extended corresponding states framework: application to liquids and liquid mixtures. Fluid Phase Equilibria*, Vol. 387, pp. 5-11, 2015.
- [58] Holmås, H., et al.: *Analysis of a 1D incompressible two-fluid model including artificial diffusion. IMA Journal of Applied Mechanics*, Vol. 73, pp. 651-667.
- [59] Hoomans, B.P. et al.: *Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. Chemical Engineering Science*, Vol. 51, pp. 99-118, 1996.
- [60] Hyman, J.M.: *Numerical methods for tracking interfaces. Physica D: Nonlinear Phenomena*, Vol. 12, pp. 396-407, 1984.
- [61] Chang, Y.C., et al.: *A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. Journal of Computational Physics*, Vol. 124, pp. 449-464, 1996.
- [62] Charin, A.H.L.M, et al.: *A moving mesh interface tracking method for simulation of liquid-liquid systems. Journal of Computational Physics*, Vol. 334, pp. 419-441, 2017.
- [63] Inamuro, T., et al.: *A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences. Journal of Computational Physics*, Vol. 196, pp. 628-644, 2004.
- [64] Irfan, M., Muradoglu, M.: *A front tracking method for direct numerical simulation of evaporation process in a multiphase system. Journal of Computational Physics*, Vol. 357, pp. 132-153, 2017.
- [65] Ishii, M.: *Thermo-fluid dynamics theory of two-phase flow*. Eyrolles, Michigan, 1975.
- [66] Ishii, M., Hibiki, T.: *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow, 2nd edition*. Springer, 2011. ISBN 978-1-4419-7984-1
- [67] Issa, R.I., Kempf, M.H.W.: *Simulation of slug flow in horizontal and nearly horizontal pipes with the two-fluid model. International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 29, pp. 69-95, 2003.
- [68] Karimi, M., et al.: *Comparison of different drag coefficient correlations in the CFD modelling of alaboratory-scale Rushton-turbine flotation tank. 9th International Conference on CFD in Mineral Process Industries*, CSIRO, Melbourne, 2012.
- [69] Kelager, M.: *Lagrangian fluid dynamics using smoothed particle hydrodynamics*. Graduate project at University of Copenhagen, Department of Computer Science, 2006.
- [70] Kieffer, S.W.: *Sound speed in liquid-gas mixtures: water-air and water-steam. Journal of geophysical research*, Vol. 82, pp. 2895-2904, 1977.
- [71] Kolev, N.I.: *Multiphase flow dynamics 1: Fundamentals*, 3rd edition. Springer, 2007. ISBN 978-3-540-69832-6
- [72] Lain, S., Goz, M.F.: *Instabilities in numerical simulations of dispersed two-phase flow. Mechanics Research Communications*, Vol. 27, pp. 475-483, 2000.
- [73] Lee, T., Lin, C.L.: *A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. Journal of Computational Physics*, Vol. 206, pp. 16-

47, 2005.

- [74] Leveque, R.J.: *Finite-volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge university press, 2004. ISBN 0-521-81087-6
- [75] Liao, J., Mei, R., Klausner, J.F.: *A study on the numerical stability of the two-fluid model near ill-posedness*. International Journal of Multiphase Flow, Vol. 34, pp. 1067-1087, 2008.
- [76] Linmin, L., et al.: *Modeling of spout-fluidized beds and investigation of drag closures using OpenFOAM*. Powder Technology, Vol. 305, pp. 364-376, 2017.
- [77] Liou, M.S.: *A sequel to AUSM: AUSM+*. Journal of Computational Physics, Vol. 129, pp. 364-382, 1996.
- [78] Liou, M.S.: *The evolution of AUSM schemes*. Defence Science Journal, Vol. 60, pp. 606-613, 2010.
- [79] Liou, M.S., Chang, Ch.H.: *A robust and accurate approach to computing compressible multiphase flow: Stratified flow model and AUSM⁺-up scheme*. Journal of Computational Physics, Vol. 225, pp. 840-873, 2007.
- [80] Liou, M.S., Steffen, C.J.: *A new flux splitting scheme*. Journal of Computational Physics, Vol. 107, pp. 23-39, 1993.
- [81] Lobovský, L.: *Fluid-structure interaction by means of smoothed particle hydrodynamics*. Disertační práce, KME FAV ZČU, Plzeň, 2009.
- [82] Lund, H.: *A hierarchy of relaxation models for two-phase flow*. SIAM Journal on Applied Mathematics, 2012.
- [83] Mallock, A.: *The damping of sound by frothy liquids*. Proceedings of the royal society, Vol. 84, 1910.
- [84] Manninen, M., Taivassalo, V., Kallio, S.: *On mixture model for multiphase flow*. VTT 288, Technical Research Centre of Finland, Espoo, 1996.
- [85] Martínez, P.J.F.: *Numerical and mathematical analysis of a five-equation model for two-phase flow*. Master's thesis, SINTEF Energy Research, Trondheim, 2010.
- [86] Mathews, J.H., Fink, K.D.: *Numerical methods using MATLAB*. New Jersey, 2004. ISBN 0-13-065248-2
- [87] McNamara, G., Zanetti, G.: *Use of Boltzmann-equation to simulate lattice-gas automata*. Physical Review Letters, Vol. 61, pp. 2332-2335, 1988.
- [88] Menikoff, R.: *Empirical EOS for solids*. Shock Wave Science and Technology, Vol. 2, pp. 143-188, 2007
- [89] Menikoff, R., Plohr, B.J.: *The Riemann problem for fluid flow of real materials*. Reviews of Modern Physics, Vol. 61, pp. 75-130, 1989.
- [90] Mishima, K., Ishii, M.: *Flow regime transition criteria for upward two-phase flow in vertical tubes*. International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 27, pp. 723-737, 1984.
- [91] Mohammad, A., et al.: *Two-phase mixture model for nanofluid turbulent flow and heat transfer: Effect of heterogeneous distribution of nanoparticles*. Chemical Engineering Science, Vol. 167, pp. 135-144, 2017.
- [92] Mukhtar, A., et al.: *Interrogating the effect of bend on two-phase gas-liquid flow using advanced instrumentation*. Proceedings of the 7th International Conference on Multiphase Flow, Tampa, 2010.
- [93] Munkejord, S.T., Evje, S. Flåtten, T.: *A MUSTA scheme for a nonconservative two-fluid model*. SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 31, pp. 2587-2622, 2009.
- [94] Murrone, A., Guillard, H.: *A five equation reduced model for compressible two phase flow problems*. Journal of Computational Physics. Vol. 202, pp. 664-698. 2005.
- [95] Nierhaus, T.: *Modeling and simulation of dispersed two-phase flow transport phenomena in electrochemical process*. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2009.
- [96] Noh, W. F., Woodward, P.: *SLIC (simple line interface calculation)*. In proceedings of the 5th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Twente University, Vol. 59, Springer, 1976.
- [97] Olsson, E., Kreiss, G.: *A conservative level set method for two phase flow*. Journal of Computational Physics, Vol. 210, pp. 225-246, 2005.
- [98] Olsson, E., Kreiss, G., Zhedi, S.: *A conservative level set method for two phase flow II*. Journal of computational physics, Vol. 225, pp. 785-807, 2007.

- [99] Osher, S., Sethian, J.A.: *Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations*. Journal of Computational Physics, Vol. 79, pp. 12-49, 1988.
- [100] Paillère, H., Corre, C., García Cascales, J.R.: *On the extension of the AUSM+ scheme to compressible two-fluid models*. Computers & Fluids, Vol. 32, pp. 891-916, 2003.
- [101] Paladino, E., Aguirre, J., Quintella, E.: *Developing multiphase models for liquid-liquid hydrocyclone flow*. 6th International Conference on Multiphase Flow, Leipzig, 2007.
- [102] Pericleous, K.A., Drake, S.N.: *An algebraic slip model of PHOENICS for multi-phase applications*. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [103] Pixers: *Fototapety*. Dostupné online na <https://pixers.cz/fototapety/water-drop-6929349>.
- [104] Popinet, S., Zaleski, S.: *A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 30, pp 775-793, 1999.
- [105] Prosperetti, A., Tryggvason, G.: *Computational methods for multiphase flow*. Cambridge University Press, 2009. ISBN 978-0-521-13861-1
- [106] Ransom, V.H.: *Numerical benchmark tests*. Multiphase science and technology, Vol. 3, 1987.
- [107] Reed, W.H., Hill, T.R.: *Triangular mesh methods for the neutron transport equation*. Technical report LA-UR-73-479, Los Alamos Scientific Laboratory, 1973.
- [108] Rider, W.J. Kothe, D.B.: *Stretching and tearing interface tracking methods*. Technical report, AIAA 95-1717. 1995.
- [109] Rothman, D.H., Keller, J.M.: *Immiscible cellular-automaton fluids*. Journal of Statistical Physics, Vol. 52, pp. 1119-1127, 1988.
- [110] Rudman, M.: *Volume-tracking methods for interfacial flow calculations*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 24, pp. 671-691, 1997.
- [111] Saurel, R., Abgrall, R.: *A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows*. Journal of Computational Physics, Vol. 150, pp. 425-467, 1999.
- [112] Scardovelli, R., Zaleski, S.: *Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow*. Annual Reviews Fluid Mechanics, Vol. 31, pp. 567-603, 1999.
- [113] Shepel, S.V., Smith, B.L.: *New finite-element/finite-volume level set formulation for modelling two-phase incompressible flows*. Journal of Computational Physics, Vol. 218, pp. 479-494, 2006.
- [114] Schellander, D., Schneiderbauer, S., Pirker, S.: *Numerical study of dilute and dense poly-dispersed gas-solid two-phase flows using an Eulerian and Lagrangian hybrid model*. Chemical Engineering Science, Vol. 95, pp. 107-118, 2013.
- [115] Schiller, L., Naumann. Z.: *A drag coefficient correlation*. VDI Zeitung, Vol. 77, 1935.
- [116] Skřehot, P., et al.: *Atlas oblaků*. Dostupné online na www.mraky.astronomie.cz
- [117] Stansby, P.K., Chegini, A., Barnes T.C.D.: *The initial stages of dam-break flow*. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 374, pp. 407-424, 1998.
- [118] Städtke, H.: *Gasdynamic aspects of two phase flow*. Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2006.
- [119] Städtke, H., Franchello, G., Worth, B.: *Numerical simulation of multi-dimensional two-phase flow based on flux vector splitting*. Nuclear Engineering and Design, Vol. 177, pp. 199-213, 1997.
- [120] Stewart, H.B., Wendroff, B.: *Two-phase flow: models and methods*. Journal of Computational Physics, Vol. 56, pp. 363-409, 1984.
- [121] Sussman, M., et al.: *An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows*. Journal of Computational Physics, Vol. 148, pp. 81-124, 1999.
- [122] Sussman, M., Puckett, E.G.: *A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows*. Journal of Computational Physics, Vol. 162, pp. 301-337, 2000.
- [123] Sussman, M., Smereka, P., Osher, S.: *A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow*. Journal of Computational Physics, Vol. 114, pp. 146-159, 1994.
- [124] Technická zařízení budov: *Tabulky a výpočty*. Dostupné online na www.tzb-info.cz/tabulky-a-vypocty
- [125] Temkin, S.: *Sound propagation in bubbly liquids. A review*. Naval Research Laboratory, Washington, 1989.
- [126] Tezduyar, T.E.: *Interface-tracking and interface-capturing techniques for finite element computation of moving boundaries and interfaces*. Computer Method in Applied Mechanics and

- Engineering, Vol. 195, pp. 2983-3000, 2006.
- [127] Tislej, I.: *Seminar on two-phase flow modeling*. Technical University of Catalonia, Heat and Mass Transfer Technological Center, 2006.
- [128] Tiwari, S., Kuhnert, J.: *Modeling of two-phase flows with free surface tension by finite pointset method (FPM)*. Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 203, pp.376-386, 2007.
- [129] Toumi, I.: *An upwind numerical method for two-fluid two-phase flow models*. Nuclear Science and Engineering, Vol. 123, pp. 147-168, 1996.
- [130] Toumi, I., Kumbaro, A.: *An approximate linearized Riemann solver for a two-fluid model*. Journal of Computational Physics, Vol. 124, pp. 286-300, 1996.
- [131] Utikar, R., et al.: *Hydrodynamic simulation of cyclone separators*. InTech, 2010. ISBN 978-953-7619-59-6
- [132] Vimmr, J.: *Matematické modelování proudění stlačitelné tekutiny ve vnitřní aerodynamice*. Disertační práce, KME FAV ZČU, Plzeň, 2002.
- [133] Vimmr, J., Bublík, O., Pecka, A.: *A parallel implementation of an implicit discontinuous Galerkin finite element scheme for fluid flow problems*. Advances in Engineering Software, Vol. 113, pp. 108-119, 2017.
- [134] Vimmr, J., et al.: *Experimental validation of numerical approach for free surface flow modelling based on lattice Boltzmann method*. Proceedings of the 7th European Conference on Computational Fluid Dynamics, 2018.
- [135] VŠCHT v Praze: *Počítačová dynamika tekutin (CFD) – historie*. Dostupné online na <https://www.vscht.cz/uchi/ped/cfd/cfd.historie.pdf>
- [136] Wallis, G.B.: *One-dimensional two-phase flow*. McGraw-Hill, New York, 1969.
- [137] Wei, J., et al.: *The gas-solid flow characteristics of cyclones*. Powder Technology, Vol. 308, pp. 178-192, 2017.
- [138] Wikipedia: *Heun's method*. Dostupné online na http://en.wikipedia.org/wiki/Heun's_method
- [139] Wikipedia: *History of fluid mechanics*. Dostupné online na http://en.wikipedia.org/wiki/History_of_fluid_mechanics
- [140] Wilcox, D.C.: *Reassessment of the scale determining equation for advanced turbulence models*. AIAA Journal, Vol. 26, pp. 1299-1310, 1988.
- [141] Wilcox, D.C.: *Turbulence modeling for CFD*. DCW Industries, California, 1994. ISBN 0-9636051-0-0
- [142] Wood, A.B.: *A textbook of sound*. The MacMillan Company, New York, 1932.
- [143] Yeom, G.S., Chang, K.S.: *A modified HLLC-type Riemann solver for the compressible six-equation two-fluid model*. Computers & Fluids, Vol. 76, pp. 86-104, 2013.
- [144] Yuan, C, et al.: *Quadrature-based moment methods for polydisperse multiphase flow modeling*. Graduate theses and dissertation 13540, Iowa State University, 2013.
- [145] Yuan, H.-Z., et al.: *A simple mass-conserved level set method for simulation of multiphase flows*. Physics of Fluids, Vol. 30, 2018.
- [146] Zeng, Z. X.: *A new turbulence modulation in second-order moment two-phase model and its application to horizontal channel*. Journal of Hydrodynamics, Vol. 20, pp. 331-338, 2008.
- [147] Zuber, N., Findlay, J.A.: *Average volumetric concentration in two-phase flow systems*. Journal of Heat Transfer, Vol. 87, pp. 453-468, 1965.

Publikace autora

- [I] Plánička, S.: *Numerická schémata pro určení nevazkého toku čtyřrovnicevého modelu dvoufázového proudění*. Sborník rozšířených abstraktů Studentské vědecké konference FAV 2017.
- [II] Plánička, S., Vimmr, J.: *Convective flux schemes for numerical solution of two-phase flows*. Proceedings of the 31st Computational Mechanics conference, 2015.
- [III] Plánička, S., Vimmr, J.: *Metodika návrhu olejových separátorů*. Souhrnná výzkumná zpráva: NTIS-VP3-0003/2013, NTIS, Plzeň, 2013.

- [IV] Plánička, S., Vimmr, J.: *Numerical simulation of free surface flows using a three-equation model*. Proceedings of the 23rd international conference Engineering Mechanics, 2017.
- [V] Plánička, S., Vimmr, J.: *Numerical simulations of multiphase flow in oil separator*. Proceedings of the 28th Computational Mechanics conference, 2012.