

STUDIE ŠÍŘENÍ ZNEČIŠTĚNÍ V MÍSTNOSTI

Diplomová práce

Studijní program:N2301 – Strojní inženýrstvíStudijní obor:3901T003 – Aplikovaná mechanika

Autor práce: Vedoucí práce: **Bc. Tomáš Kořínek** doc. Ing. Karel Fraňa, Ph.D.



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI Fakulta strojní Akademický rok: 2014/2015

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jmeno a přijmení:	
Osobní číslo:	1
Studijní program:]
Studijní obor:	4
Název tématu:	202
Zadávající katedra:	

Bc. Tomáš Kořínek S12000447 N2301 Strojní inženýrství Aplikovaná mechanika Studie šíření znečištění v místnosti Katedra energetických zařízení

Zásady pro vypracování:

Práce řeší problematiku šíření znečišťujících látek v prostředí.

- 1. Zpracování dosavadních teoretických poznatků a možnosti CFD v této problematice.
- 2. Otestování nastavení výpočtů s ohledem na koncentrace znečišťující látky, testování turbulentních modelů.
- 3. Sestavení jednoduchého experimentálního modelu (zkušebního prostoru) a uskutečnění měření šíření plynu CO_2 v tomto prostoru.
- 4. Porovnání experimentů a výsledků numerické simulace.

Rozsah grafických prací: příloha do 20 stran Rozsah pracovní zprávy: max. 80 stran Forma zpracování diplomové práce: tištěná Seznam odborné literatury:

[1] BURROUGHS, H., E., 2011. Managing Indoor Air Quality. Taylor and Francis. ISBN-10: 1439870144, ISBN-13: 978-1439870143.

[2] ANGUI, L., YINGXIN, Z., YUGUO, L. Proceedings of the 8th International Symposium on Heating, Ventilation and Air Conditioning, Volume 1: Indoor and Outdoor Environment, Series: Lecture Notes in Electrical Engineering, Vol. 261. ISBN 978-3-642-39584-0.

[3] MURAKAMI, S., KATO, S. a ZENG, J., 1998. Numerical simulation of contaminant distribution around a modeled human body: CFD study on computational thermal manikin. Part II. ASHRE Transaction 104-2.

Vedoucí diplomové práce:

doc. Ing. Karel Fraňa, Ph.D. Katedra energetických zařízení

Datum zadání diplomové práce: Termín odevzdání diplomové práce: 26. května 2016

25. února 2015

Petr Lenfeld děkan



doc. Ing. Václav Dvořák, Ph.D. vedoucí katedry

V Liberci dne 25. února 2015

Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 - školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL, v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Diplomovou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Současně čestně prohlašuji, že tištěná verze práce se shoduje s elektronickou verzí, vloženou do IS STAG.

Datum 20.5.2075

Podpis

Konnach

Declaration

I have been notified of the fact that Copyright Act NO. 121/2000 Coll. Applies to my thesis in full, in particular Section 60, School Work.

I am fully aware that the Technical University of Liberec is not interfering in my copyright by using my thesis for the internal purposes of TUL.

If I use my thesis or grant a licence for its use, I am aware of the fact that I must inform TUL of this fact, in this case TUL has the right to seek that I pay the expenses invested in the creation of my thesis to the full amount.

I compiled the thesis on my own with the use of the acknowledged sources and on the basis of consultation with the head of the thesis and a konsultant.

Date

Signature

Anotace

Tato práce se zabývá studií šíření znečišťujících látek v místnosti. V práci je obsažena krátká motivace o tom, proč je důležité se této problematice věnovat. Velký důraz je věnován rešerši současných studií na téma využití CFD v problematice šíření znečišťujících látek. Detailně je zde popsán matematický model sloužící k samotnému popisu šíření znečištění v místnosti, který vychází z Eulerova popisu proudění vazké tekutiny. Prvotní ověření matematického modelu je provedeno na jednoduché doméně, kde je řešeno šíření plynu SF₆. Porovnány jsou hodnoty koncentrace SF₆ získané z numerické simulace s hodnotami z experimentu, kde tyto hodnoty jsou převzaty z práce L. Ricciardiho. Druhé ověření matematického modelu se týká šíření plynu CO₂ během spalování etanolu. Pro toto ověření byla vybudována zkušební komora, ve které byly měřeny hodnoty koncentrace CO_2 v čase. Součástí práce je i citlivostní studie vlivu nastavení matematického modelu na hodnoty koncentrace. Citlivostní studie vlivu nastavení použitého řešiče.

Klíčová slova: znečištění vzduchu, kvalita vnitřního ovzduší, výpočetní dynamika tekutin, oxid uhličitý, spalování předem nesmíseného paliva.

Annotation

This thesis deals with study of air pollution dispersion indoor. Thesis contains short motivation, why is important to take care with this issue. Great emphasis is dedicated to a search of actual studies in using CFD for air pollution dispersion indoor. There is a detail description of a mathematical model. The model is based on Eulerian description of viscous fluid flow. The first validation of the mathematical model is done on a simple case, where dispersion of SF₆ is solved. Concentration of SF₆ obtained from numerical simulation is compared with experimental data from L. Ricciardi. The second validation is focused to CO₂ spreading after combustion of ethanol. A testing chamber was built for this validation, where concentration of CO₂ was measured in time. Some sensitivity studies are done, where influences of numerical settings on concentration of CO₂ are tested. Sensitivity studies are focus to a selection of a turbulence model, a time step, mesh quality, a modification of the turbulence model and settings of the used solver.

Key words: air pollution, indoor air quality, computational fluid dynamics, carbon dioxide, non-premix combustion.

Poděkování

Tato diplomová práce byla vytvořena za podpory Evropského projektu CZ.1.07/2.3.00/20.0139 "Budování excelentního vědeckého týmu pro experimentální a numerické modelování v mechaniky tekutin a termodynamice".

Rád bych poděkoval doc. Ing. Karlu Fraňovi Ph.D. za cenné rady a vedení v mé diplomové práci. Dále bych chtěl poděkovat Ing. Miloši Müllerovi Ph.D. za pomoc při experimentu. Velké poděkování také patří mým rodičům a kamarádům, kteří mě během studia podporovali.

Obsah

Prohlášení	1
Declaration	3
Anotace	4
Annotation	5
Poděkování	6
Seznam použitých symbolů	9
Seznam obrázků	11
Seznam tabulek	13
1. Úvod	14
2. Rešerše současných studií	15
3. Teorie šíření plynných znečišť ujících látek v místnosti	19
3.1 Vyjádření koncentrací	19
3.2 Termodynamický systém	
3.3 Bilanční rovnice	
3.4 Modelování turbulence	
3.4.1 RANS modely turbulence	23
3.4.2 Korekce turbulentních modelů	24
3.5 Transport znečišť ující látky	
3.5.1 Fickův model difuze	
3.5.2 Difuzivita ve vícesložkovém systému	
3.5.3 Difuzivita v dvojsložkovém systému (Binární difuzivita)	
3.5.4 Úplná vícesložková difuze	
3.5.5 Koeficient termální difuze	
3.6 Šíření vzájemně reagujících látek	
3.6.1 Finite-rate model	
3.6.2 Eddy-Dissipation model	
3.6.3 Model spalování se směšovacím zlomkem	
3.7 Způsoby měření koncentrace CO ₂	
3.7 Způsoby měření koncentrace CO₂3.8 Validace matematického modelu	
 3.7 Způsoby měření koncentrace CO₂ 3.8 Validace matematického modelu 4 Popis experimentu 	

4.2 Experiment pro spalování etanolu5 Numerická simulace	39 45
 5.1 Numerická simulace pro nereagující proud 5.2 Numerická simulace pro spalování etanolu 6 Výsledky pro nereagující proud 	45 46 49
 6.1 Porovnání s experimentem 6.2 Výška jetu 6.3 Výsledky z numerické simulace 6.4 Vliv turbulentní difuze 6.5 Vliv korekce turbulentního modelu 	49 51 52 57 58
 6.6 Vliv nastavení řešiče 7 Výsledky pro spalování etanolu	59 60
 7.1 Porovnaní s experimentem 7.2 Výsledky z numerické simulace 7.3 Vliv sítě 7.4 Vliv časového kroku 8 Závěr 	60 67 69 69 70
Literatura	73
Přílohy	75
Příloha A Příloha B Příloha C Příloha D Příloha E Příloha F	75 76 77 79 81 83

Seznam použitých symbolů

Značka	Veličina	Jednotka
$[X_i]$	parciální molární hustota i-té složky	1
a	teplotní vodivost	m^2/s
Ar	Arrheniův pre exponent	1
a _{ij}	počet atomů složky i v elementu j	1
c _i	hmotnostní koncentrace látky i	mg/m ³
$C_{j,r}$	molární koncentrace složky j v reakci t	1
c _p	měrné teplo za konst. tlaku	$J/(kg \cdot K)$
d	vstupní průměr	m
$D_{T,i}$	koeficient termální difuze	m^2/s
D _{i,j}	binární difuzní koeficient	m^2/s
$D_{i,m}$	difuzní koeficient složky i ve směsi	m^2/s
D _t	turbulentní difuzivita	m^2/s
Er	aktivační energie	J
f	směšovací zlomek	1
f'	fluktuační část směšovacího zlomku	1
$ar{f}$	středovaný směšovací zlomek	1
Fr	Frodeho číslo	1
g	gravitační zrychlení	m/s^2
Н	celková entalpie	J
J	molekulární tok	$kg/(m^2 \cdot s)$
k	kinetická energie	J
k _{b,r}	konstanta zpětné četnosti reakce r	1
k _{f,r}	konstanta dopředné četnosti reakce r	1
k _b	Boltzmanova konstanta	J/K
Le	Lewisovo číslo	1
m	celková hmotnost	kg
М	celková molární hmotnost	kg/kmol
m _i	hmotnost i-té složky	kg
M_{i}	molární hmotnost i-té složky	kg/kmol
m _j	hmotnost všech atomů v elementu j	kg
n	celkové látkové množství	kmol
n _i	látkové množství i-té složky	kmol
p(f)	pravděpodobnost směšovacího zlomku	1
pa	atmosferický tlak	Pa
p_i	parciální tlak i-té složky	Pa
р	tlak	Pa
R	univerzální plynová konstanta	J/(K·kmol)
$\widehat{R}_{i,r}$	Arrheniův molární podíl	1
Т	teplota	Κ
u	rychlost	m/s
V_i	objem i-té složky	m ³
V	celkový objem	m ³
Vk	atomový difuzní objem	m^3
X _i	molární zlomek i-té složky	1

Yi	hmotnostní zlomek i-té složky	1
Z	výška jetu	m
Zj	hmotnostní zlomek elementu j	1

Řecké symboly	Popis	Jednotka
$(\epsilon/k_b)_{ij}$	Lennard-Jonesův parametr pro směs	Κ
3	rychlost disipace	m^2/s^3
ϕ_i	objemový zlomek i-té složky	1
λ	tepelná vodivost	$W/(m \cdot K)$
Γ	efekt třetí strany	1
μ	molekulární viskozita	Pa·s
μ_t	turbulentní viskozita	Pa·s
η' _{j,r}	exponent četnosti reaktant v reakci r	1
η" _{j,r}	exponent četnosti produktu v reakci r	1
ω	specifická rychlost disipace	1/s
$\Omega_{\rm d}$	difuzní kolizní integrál	1
ρ	celková hustota	kg/m ³
$ ho_i$	parciální hustota i-té složky	kg/m ³
σ_{ij}	Lennard-Jonesův parametr pro směs	Å
τ_{ij}	tenzor vazkých napětí	Pa

Zkratka	Popis
CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direct Numerical Simulation
LES	Large Eddy Simulation
LFL	Lean Flammability Limit
PDF	Probability Density Function
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RNG	Re-Normalisation Group
RSM	Reynolds Stress Model
SSG-RSM	Speziale Sarkar Gatski Reynolds Stress
	Model
SST	Shear Stress Transport
UFL	Upper Flammability Limit

Seznam obrázků

Obr. 2-1: Schematické znázornění Weschlerova experimentu [9].

Obr. 2-2: Závislost koncentrace VOC v čase pro různé případy [10].

Obr. 2-3: Schéma Einbergovi měřicí místnosti [11].

Obr. 2-4: Kontury objemové koncentrace Chlorinu z práce M. Siddiquiho [12].

Obr. 2-5: Závislost koncentrace v čase od Sklavounose [13].

Obr. 2-6: Kontury koncentrace SF6 pro druhou doménu ze studie L. Ricciardiho [7].

Obr. 5.1-1: Závislost koeficientu difuze na teplotě při atmosférickém tlaku.

Obr. 3.6-1: Závislost teploty na středovaném směšovacím zlomku při nulové odchylce směšovacího zlomku.

Obr. 3.6-2: Závislost objemového zlomku CO (vlevo) a CO₂ (vpravo) na středovaném směšovacím zlomku při nulové odchylce směšovacího zlomku.

Obr. 3.7-1: Schéma elektroakustického čidla (zdroj:www.codychame.cz).

Obr. 3.7-2: Schéma elektrochemického čidla (zdroj:www.kimo.fr).

Obr. 3.7-3: Schéma měření pomocí NDIR čidla (zdroj:www.kimo.fr).

Obr. 3.7-4: Absorpční spektrum IR záření pro vybrané látky (Zdroj R. G. Fleagle, J. A. Businger [2006]).

Obr. 3.8-1: Schématické znázornění validace podle Bainesova vztahu.

Obr. 3.8-2: Schématické znázornění zjištění výšky jetu z numerické simulace.

Obr. 4.2-1: Rozměry zkušební komory.

Obr. 4.2-2: Zkušební komora pro měření koncentrace CO₂ při spalování etanolu.

Obr. 4.2-3: Přístroj KIMO AQ 200.

Obr. 4.2-4: Přístroj SprintIR.

Obr. 4.2-5: Termoanemometrická sonda a dataloger Almemo.

Obr. 4.2-6: Analyzátor spalin testo 340.

Obr. 4.2-7: Průběh experimentu při spalování etanolu.

Obr. 4.2-8: Vizualizace proudění pomocí lineárního laseru a kouře.

Obr. 5.1-1: Schéma zkoumaného prostoru (vlevo) a výpočetní síť (vpravo.

Obr 5.2-1: Zkoumaná doména a výpočetní síť zkoumaného prostoru.

Obr. 6.1-1: Graf průběhu koncentrace SF₆ v čase pro spodní rovinu

Obr. 6.1-2: Graf průběhu koncentrace SF₆ v čase pro střední rovinu.

Obr. 6.1-3: Graf porovnání hodnot ve spodní rovině z numerické simulace a experimentu pro fázi vypouštění SF6 (vlevo) a fázi se zavřeným vstupem SF6 (vpravo).

Obr. 6.2-1: Graf závislosti hustoty na výšce při prvních 60 s pro turbulentní model k-ε Realizable.

Obr. 6.2-2: Graf závislosti výšky jetu v čase pro jednotlivé turbulentní modely.

Obr. 6.3-1: Kontury hmotnostní koncentrace látky SF6 v čase pro turbulentní model k-ε Realizable.

Obr. 6.3-2: Isokontury 4% hmotnostní koncentrace látky SF6 v čase pro turbulentní model k-ε Realizable.

Obr. 6.3-3: Porovnání kontur hmotnostní koncentrace látky SF_6 pro turbulentní model k- ϵ RNG (vlevo) a k- ϵ Realizable (vpravo).

Obr. 6.3-4: Kontury rychlosti s normovanými vektory rychlosti pro jednotlivé turbulentní modely (A: k- ε Standard, B: k- ε RNG, C: k- ε Realizable, D: k- ω SST) v rovině symetrie v čase 900 s.

Obr. 6.3-5: Kontury lokálního Reynoldsova čísla pro jednotlivé turbulentní modely (A: k- ε Standard, B: k- ε RNG, C: k- ε Realizable, D: k- ω SST) v rovině symetrie, čas 900 s. Obr. 6.3-6: Kontury turbulentní viskozity pro jednotlivé turbulentní modely (A: k- ε Standard, B: k- ε RNG, C: k- ε Realizable, D: k- ω SST) v rovině symetrie v čase 900 s.

Obr. 6.3-7: Kontury produkce turbulentní energie pro jednotlivé turbulentní modely (A: k-ε Standard, B: k-ε RNG, C: k-ε Realizable, D: k-ω SST) v rovině symetrie, čas 900 s.

Obr. 6.4-1: Kontury poměru molekulární a turbulentní difuze pro jednotlivé turbulentní modely (A: k-ε Standard, B: k-ε RNG, C: k-ε Realizable, D: k-ω SST) v rovině symetrie v čase 900 s.

Obr. 6.5-1: Graf vlivu korekce turbulentního modelu na koncentraci SF_6 v čase pro spodní rovinu (vlevo) a pro střední rovinu (vpravo).

Obr. 6.6-1: Graf vlivu nastavení řešiče na koncentraci SF_6 v čase pro spodní rovinu (vlevo) a pro střední rovinu (vpravo).

Obr. 7.1-1: Závislost koncentrace CO₂ v čase pro jednotlivé turbulentní modely a pro bod P2.

Obr. 7.1-2: Závislost koncentrace CO₂ v čase pro bod P1(vlevo) a P3 (vpravo).

Obr. 7.1-3: Závislost koncentrace CO₂ v čase pro bod P4.

Obr. 7.1-4: Průběh poměru hodnot z numerické simulace a z experimentu.

Obr. 7.1-5: Graf porovnání hodnot z numerické simulace a z experimentu pro bod P2.

Obr. 7.1-6: Graf porovnání teoretické hodnoty množství CO_2 a hodnoty z numerické simulace pro turbulentní model k- ϵ Realizable.

Obr. 7.1-7: Závislost teploty na vzdálenosti od středu nádobky s palivem pro čas t=360s a výšku 3 cm nad nádobkou pro jednotlivé turbulentní modely.

Obr. 7.1-8: Grafy závislosti teploty pro turbulentní model k-ε Realizable (vlevo) a k-ε Standard (vpravo).

Obr. 7.1-9: Průběh vertikální rychlosti v čase během experimentu.

Obr. 7.1-10: Závislost rychlosti na vzdálenosti od středu nádobky v čas 360 s pro jednotlivé turbulentní modely.

Obr. 7.1-11: Charakter plamene získaný z experimentu a z numerické simulace.

Obr. 7.1-12: Charakter proudění v blízkosti plamen získaný z numerické simulace (vlevo) a z experimentu (vpravo).

Obr. 7.2-1: Kontury objemové koncentrace plynu CO_2 v čase pro turbulentní model k- ϵ Realizable.

Obr. 7.2-2: Kontury objemové koncentrace plynu CO v čase pro turbulentní model k-ε Realizable.

Obr. 7.2-3: Kontury rychlosti v čase t=360 s pro turbulentní model k-ε Realizable.

Obr. 7.3-1: Závislost koncentrace CO_2 v čase pro bod P1 (vlevo) a P2 (vpravo) a různé sítě.

Obr. 7.4-1: Závislost koncentrace CO₂ v čase pro bod P1 (vlevo) a P2 (vpravo) a různé časové kroky.

Seznam tabulek

Tabulka 4.1-1: Vybrané vlastnosti plynu SF₆ při teplotě 15 °C.

Tabulka 4.1-2: Poloha měřených bodů.

Tabulka 4.2-1: Vybrané vlastnosti etanolu při teplotě 25 °C.

Tabulka 4.2-2: Poloha měřených bodů.

Tabulka 5.1-1: Rozměry, umístění vstupů a výstupů.

Tabulka 5.2-1: Vstupní parametry pro simulaci.

1. Úvod

Mnoho prací se zabývá účinky běžně se vyskytujících znečišťujících látek na člověka, ale málo z nich se zabývá tím jak se šíří v prostoru. Toto téma je stále více a více aktuální vzhledem k času, který lidé tráví v uzavřených špatně větraných prostorách. Zdrojem znečišťujících látek v místnosti může být například topný zdroj, nábytek, koberec, dezinfekční prostředky, tiskárna, konstrukční materiál, provoz budovy a případně jiné další v místnosti se běžně vyskytující zařízení. Zdroj znečištění se nemusí nezbytně nacházet v místnosti a znečišťující látka může do místnosti vnikat díky přirozenému větrání. Znečišťující látky vyskytující se v ovzduší můžeme rozdělit na plynné a částečkové. Mezi částečkové řadíme jak pevné látky, tak ty kapalné. Znečišťujícími látky mohou být například azbest, formaldehyd, oxid uhelnatý, oxid uhličitý, olovo, radon a další.

Tato práce se zabývá popisem šíření plynné znečišťující látky v místnosti. Je zde detailně popsán matematický model popisující šíření plynné látky ve vzduchu. Na rozdíl od šíření znečišťujících látek v atmosféře, kde se používají zjednodušené matematické modely založené na Gaussově normálovém rozdělení, se u šíření v místnosti využívá detailní Eulerův popis pro šíření látky v prostoru. A to z důvodu, že u atmosférických modelů se nepředpokládá vliv šířené látky na proudění vzduchu a lze tedy aplikovat tento model na již známé proudové pole. U šíření v místnosti musíme počítat proudové pole současně s modelem pro šíření znečišťující látky.

Matematický model byl otestován na jednoduché doméně a výsledky z numerické simulace byly porovnány s výsledky z experimentu od L. Ricciardiho [1]. Na stejné doméně bylo provedeno několik citlivostních studií. Vliv turbulentního modelu a nastavení řešiče na hodnoty koncentrace znečišťující látky byl součástí této studie.

Pro vlastní ověření matematického modelu byla vybudována zkušební komora, ve které byly měřeny hodnoty koncentrace CO₂ během spalování etanolu. Kromě koncentrace CO₂ byly měřeny další veličiny, jako například teplota a rychlost.

2. Rešerše současných studií

Tato kapitola je věnována studiím, které se zabývaly šířením znečišťujících látek v prostoru, zejména pak možnostmi matematického modelování. Většina prací zabývající se modelováním šíření znečištění v místnosti používá Eulerův model a nejpoužívanějším RANS turbulentním modelem je model k-ε Standard.

V nedávné studii od C. Weschlera [2] bylo potvrzeno, že ozon přítomný v místnosti chemicky reaguje s organickými a anorganickými sloučeninami a produkty těchto reakcí je různorodá škála volných radikálů. Volné radikály jsou mnohem nebezpečnější než látky, ze kterých se tvoří. Jeho práce zahrnovala simulace chemických reakcí v místnosti pomocí modelu bilance hmoty za předpokladu dokonalého mísení. V jeho pozdější práci se dále zabýval CFD simulací tvorby těchto látek pro různé kombinace chemických sloučenin a porovnáním výsledků z numerické simulace s experimentem, kde dosáhl dobré shody mezi experimentem a numerickou simulací. Obrázek 2-1 schematicky zobrazuje zkoumaný prostor. Turbulence byla v numerické simulaci modelována pomocí RANS modelu k-ε Standard.



Obr. 2-1: Schematické znázornění Weschlerova experimentu [9].

Vliv větrání na koncentraci prchavých organických sloučenin (dále jen VOC) šířících se z nového koberce zkoumal Deng a spol [3]. Jeho práce byla zaměřena na strategii větrání místnosti s novým kobercem. Deng zjišťoval rozložení koncentrace VOC v závislosti na četnosti a intenzitě větrání místnosti. Na základě rozložení koncentrace v čase ustanovil minimální dobu po, kterou je potřeba nechat místnost větrat aby koncentrace VOC byla pod požadovaným limitem. Závislost koncentrace VOC v čase je na obrázku 2-2. Turbulenc0e byla v numerické simulaci modelována pomocí RANS modelu k-ɛ Standard.



Obr. 2-2: Závislost koncentrace VOC v čase pro různé případy [10].

Rozmístění koncových prvků klimatizace má velký vliv na šíření znečištění v klimatizované místnosti. Gery Einberg [4] se ve své disertační práci zabýval rozmístěním těchto prvků a jejich vlivem na šíření tuhých znečišťujících látek. Další pozorované parametry byly teplota a rychlost proudění vzduchu v místnosti, což jsou další dva velmi důležité parametry pro návrh klimatizačního zařízení. Einberg dosáhl dobré shody mezi experimentem a numerickou simulací. Turbulence byla v numerické simulaci modelována pomocí RANS modelu k-ε Standard. Obrázek 2-3 zobrazuje schématické uspořádání měřicího prostoru, který Einberg použil.



Obr. 2-3: Schéma Einbergovi měřicí místnosti [11].

Šíření znečištění v místnosti používané pro průmyslové aplikace bylo tématem práce M. Siddiquiho a spol [5]. Ten se zabýval šířením Chlorinu ve ventilované místnosti. Turbulence byla v numerické simulaci modelována pomocí RANS modelu k- ε Standard. Výsledek numerické simulace provedené Siddiquihym je na obrázku 2-4.



Obr. 2-4: Kontury objemové koncentrace Chlorinu z práce M. Siddiquiho [12].

Vliv turbulentních modelů na rozložení koncentrace znečišťující látky v prostoru zkoumal S. Sklavounos a F. Rigas [6]. Sklavounos porovnával turbulentní modely k- ϵ , k- ω a RSM. Výsledkem této studie bylo, že turbulentní modely k- ϵ , k- ω SST a SSG-RSM mají tendenci nadhodnocovat maximální koncentrace znečišťující látky a k- ω Standard podhodnocovat maximální hodnotu koncentrace znečišťující látky. Dalším poznatkem bylo, že s turbulentním modelem SSG-RSM dosáhneme stejných hodnot koncentrace znečišťující látky jako pro dvourovnicové turbulentní modely a jediný rozdíl je v delším výpočetním času pro turbulentní model SSG-RSM. Závislost koncentrace v čase získaná Sklavounosem je na obrázku 2-5.



Obr. 2-5: Závislost koncentrace v čase od Sklavounose [13].

Šíření těžkého plynu v místnosti bylo součástí studie L. Ricciardiho [1], kde znečišťujícím plynem byl nejedovatý fluorid sýrový, který substituoval mnohem nebezpečnější plyn fluorid uranový. Cílem jeho studie bylo ověření matematického modelu a vliv nastavení okrajových podmínek na hodnoty koncentrace znečišťující látky. Testování modelu bylo provedeno na zjednodušené doméně reprezentující prázdnou místnost a výsledky z testování byly aplikovány na mnohem větší doménu. Výsledky testování jsou na obrázku 2-6.



Obr. 2-6: *Kontury koncentrace* SF₆ pro druhou doménu ze studie L. Ricciardiho [7].

3. Teorie šíření plynných znečišť ujících látek v místnosti

Tato kapitola je věnována základní vztahům a bilančním rovnicím potřebným k popisu šíření znečišťující látky v místnosti a v neposlední řadě způsobu měření koncentrace plynu CO₂.

3.1 Vyjádření koncentrací

Zde jsou uvedeny základní vztahy pro vyjádření koncentrace látek a převod mezi nimi. Jsou zde uvedeny nejčastější způsoby vyjádření koncentrace dané látky. Koncentrace plynných látek v ovzduší se uvádí v objemových koncentracích, ale při modelování řešíme hmotnostní koncentrace, proto je potřeba je po simulaci převést. Nejčastěji bývají koncentrace plynných látek vyjádřeny v jednotce ppm, případně ppb, kde 1 ppm odpovídá jedné miliontině celku a 1ppb zase jedné miliardtině celku a to z důvodu lepší interpretace hodnoty.

Molární zlomek i-té složky

$$X_{i} = \frac{n_{i}}{n} = \frac{n_{i}}{\sum_{j=1}^{k} n_{j}'}$$
(3.1-1)

 n_i je látkové množství i-té složky ve směsi, n je celkové látkové množství směsi a k je počet složek směsi. Z uvedené vztahu lze snadno odvodit, že suma všech molárních zlomků je rovna 1.

Hmotnostní zlomek i-té složky

$$Y_{i} = \frac{m_{i}}{m} = \frac{m_{i}}{\sum_{j=1}^{k} m_{j}},$$
(3.1-2)

kde m_i je hmotnost i-té složky ve směsi, m je celková hmotnost směsi a k je počet složek směsi. Opět zde platí, že suma všech hmotnostních zlomků je rovna 1.

Objemový zlomek i-té složky

$$\varphi_i = \frac{V_i}{V} = \frac{V_i}{\sum_{j=1}^k V_j},\tag{3.1-3}$$

 V_i je objem i-té složky ve směsi, V je celkový objem a k je počet složek směsi. V případě směsi ideálních plynů je objemový zlomek roven molárnímu $\phi_i=X_i$. Molární hmotnost i-té složky

$$M_i = \frac{m_i}{n_i},\tag{3.1-4}$$

$$M = \sum_{i=1}^{k} M_i. {(3.1-5)}$$

Převod hmotnostního zlomku na molární zlomek

Dosazením vztahu pro molární hmotnost do vztahu pro molární zlomek získáme výsledný převod mezi hmotnostním a molárním zlomkem

$$X_{i} = \frac{n_{i}}{n} = \frac{\frac{m_{i}}{M_{i}}}{\sum_{j=1}^{k} \frac{m_{j}}{M_{j}}}.$$
(3.1-6)

Hmotnostní zlomek elementů

Pokud se hmota složek mění v důsledku chemické reakce, hmota elementů je konzervativní. Označíme m_j jako hmotu všech atomů v elementu j obsaženou ve všech molekulách systému. Pokud aij je počet atomů v elementu j v molekule složek i a Mj je molární hmotnost atomu, tak lze hmotu všech atomů j v systému napsat jako

$$m_j = \sum_{i=1}^k \frac{a_{i,j}M_j}{M_i} m_{i,j} = 1, 2, \dots, k,$$
 (3.1-7)

k je celkový počet elementů v systému. Hmotnostní zlomek elementu j je pak

$$Z_j = \frac{m_j}{m} = \sum_{i=1}^k \frac{a_{i,j}M_j}{M_i} Y_i = \frac{M_j}{M} \sum_{i=1}^k a_{i,j} X_i.$$
(3.1-8)

Parciální molární hustota

Jde o další veličinu vyjadřující koncentraci a konkrétně se jedná o počet molů na jednotku objemu

$$[X_i] = \frac{n_i}{\nu},\tag{3.1-9}$$

$$\frac{n}{v} = \sum_{i=1}^{k} [X_i]. \tag{3.1-10}$$

Parciální hustota

Je-li hustota definována jako p=m/V, pak lze parciální hustotu zapsat následovně

$$\rho_i = \frac{m_i}{v} = \rho Y_i. \tag{3.1-11}$$

Převod hmotnostní koncentrace na objemový podíl v ppmv

$$ppmv_i = c_i \frac{RT_n}{M_i p_n},\tag{3.1-12}$$

kde c_i je hmotnostní koncentrace látky i v mg/m³, index n značí normálový stav.

3.2 Termodynamický systém

Vzhledem k tomu, že náš zkoumaný systém je tvořen okolním vzduchem a znečišťující látkou, případně skupinou látek, je potřeba definovat vztah mezi jednotlivými stavovými veličinami pomocí stavové rovnice.

V případě systému ideálních plynů lze ze stavové rovnice vyjádřit parciální tlak pro jednotlivé složky jako

$$p_i = \frac{n_i RT}{V} = [X_i] RT = \frac{\rho Y_i}{M_i} RT,$$
 (3.2-1)

R je univerzální plynová konstanta R=8314 J/(kmol·K)

Daltonův zákon říká, že celkový tlak je roven součtu parciálních tlaků. To vede ke stavové rovnici směsi ideálních plynů.

$$p = \sum_{i=1}^{k} p_i = n \frac{RT}{V} = \frac{\rho RT}{M}.$$
 (3.2-2)

3.3 Bilanční rovnice

Níže jsou uvedeny rovnice popisující proudění směsi vazkých stlačitelných tekutin. V rovnicích je užito Einsteinovo sumační pravidlo pro zjednodušení zápisu.

Zákon zachování hmotnosti

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0.$$
(3.3-1)

Zákon zachování hybnosti

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + f_i, \qquad (3.3-2)$$

kde τ_{ij} značí tenzor vazkých napětí a f_i jsou objemové síly.

Zákon zachování energie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho H u_j) = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij}u_i) - \frac{\partial q_j}{\partial x_j},$$
(3.3-3)

kde H je celková entalpie a q_j je tepelný tok.

Transportní rovnice pro znečišťující plynnou látku

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y u_j) = -\frac{\partial J}{\partial x_i} + S + R, \qquad (3.3-4)$$

kde Y je hmotnostní podíl, J je molekulární tok, S je produkční člen, R je produkce látky díky chemické reakci. V případě, kdy neuvažujeme chemickou reakci mezi plyny, je tento člen nulový.

3.4 Modelování turbulence

Vzhledem k tomu, že většina proudění v technických aplikacích a přírodních jevech je turbulentní, je potřeba při modelování daného problém s touto skutečností počítat. V zásadě rozlišujeme tři základní směry modelování turbulence.

Tím první je tzv. přímý přístup, který přímo numericky řeší soubor pohybových rovnic. Označován bývá zkratkou DNS (Direct Numerical Simulation). Bohužel klade značné nároky na výpočetní výkon z důvodu velmi husté výpočetní sítě, zejména v blízkosti obtékaných stěn.

Druhý způsob je založen na předpokladu, že turbulentní transport hmotnosti hybnosti a energie je zprostředkován velkými víry, z toho název LES (Large Eddy Simulation). LES řeší filtrované rovnice Navier-Stokesovy rovnice, které oddělí víry s velikostí menší než je šířka filtru. Filtrované pohybové rovnice jsou řešeny metodou přímé numerické simulace a pohyb malých vírů je modelován pomocí tzv. subgrid modelu.

Další způsob spočívá v tzv. statistickém přístupu, kde okamžité hodnoty nestacionárních veličin jsou rozděleny na střední a fluktuační část. Pohybové rovnice jsou pak řešeny pro střední hodnoty závisle proměnných. Středované rovnice jsou označovány RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) a tímto názvem je označována i

samotná metoda řešení turbulence. Soustava středovaných rovnice není uzavřená a musí být doplněna tzv. modelem turbulence. Způsob provedení Reynoldsova středování je v Příloze E.

3.4.1 RANS modely turbulence

Jak již bylo zmíněno, středované pohybové rovnice je potřeba doplnit modelem turbulence. Zatím neexistuje univerzální turbulentní model, který by šel použít pro všechny případy. Volba turbulentního modelu závisí na charakteru turbulentního proudu. V této diplomové práci byly testovány především dvourovnicové turbulentní modely vycházející z Boussinesquovy hypotézy o turbulentní viskozitě. Podle této hypotézy jsou Reynoldsova napětí úměrná středním gradientům rychlosti analogicky, jak je tomu u vazkých napětí. Na rozdíl od molekulární viskozity vyjadřuje turbulentní viskozita vlastnost proudění a ne vlastnost proudící tekutiny.

k-ɛ Standard

Jeden z nejznámějších a nejpoužívanějších turbulentních modelů. Model byl navržen v roce 1974 Launderem a Spaldingem. Hlavní předpoklad je plně turbulentní proudění s vysokým Reynoldsovým číslem. K nadměrné difuzi dochází u velkého zakřivení proudu, u rotace proudu, odtržení proudění a u nízkých Reynoldsových čísel.

k-ε RNG

Turbulentní model k-ε RNG je podobný modelu k-ε Standard ale obsahuje několik zlepšení. Tento turbulentní model byl odvozen statistickou metodou renormalizačních grup. Má vyšší přesnost pro vířivé prodění a pro velké rychlosti deformace. Analyticky odvozená diferenciální rovnice pro efektivní viskozitu a analytický vztah pro turbulentní Prandtlovo číslo činí tento model přesnější a spolehlivější pro širší oblast turbulentního proudění než pro k-ε Standard.

k-ɛ Realizable

Tento model se od ostatních liší modifikovanou transportní rovnicí pro turbulentní disipaci, která byla odvozena z exaktní rovnice pro transport střední kvadratické fluktuace vířivosti. Další odlišností je jiná formulace pro turbulentní viskozitu. Tento model ovšem není příliš vhodný pro situace simulující otáčení míchadla.

k-ω SST

Turbulentní model k- ω SST vychází z turbulentního modelu k- ω , který byl definován Wilcoxem. Jde o kombinaci turbulentních modelů k- ω a k- ε . V případě řešení v blízkosti stěny je aktivován model k- ω a ve volném proudu k- ε . Díky tomuto vylepšení je tento model přesnější oproti původnímu k- ω Standard.

Transportní rovnice k jednotlivým turbulentním modelům jsou popsány v Příloze F.

3.4.2 Korekce turbulentních modelů

Tato práce se zabývá i vlivem nastavení turbulentního modelu na hodnoty koncentrace znečišťující látky. Níže jsou uvedeny dvě základní korekce, které byly otestovány.

Modifikace na vířivost

Tato modifikace upravuje hodnotu turbulentní viskozity. Upravená hodnota turbulentní viskozity je pak

$$\mu_t = \mu_{t0} \cdot \left(\alpha_S, \Omega, \frac{k}{\varepsilon} \right), \tag{3.4-1}$$

kde $\alpha_s=0,07$ a pro silně vířivé proudění se doporučuje tuto hodnotu zvýšit, Ω je charakteristické číslo vířivosti.

Korekce na zakřivení proudu

Tato korekce se projeví v členu produkce turbulentní energie

$$f_{rotace} = (1 + c_{r1}) \frac{2r^*}{1 + r^*} [1 - c_{r1} tan^{-1} (c_{r2} \tilde{r})] - c_{r1}, \qquad (3.4-2)$$

3.5 Transport znečišť ující látky

Kromě základních bilančních rovnic je, v případě kdy řešíme další látky, potřeba vyjádřit bilanci této látky. Zde je indexem i označena znečišťující látka. Bilancováním hmotnostního podílu této látky dostaneme transportní rovnici pro i-tou složku

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho u Y_i) = -\nabla \cdot J_i + S_i + R_i, \qquad (3.5-1)$$

kde \vec{u} je vektor rychlosti, ρ je hustota směsi, Y_i je hmotnostní zlomek složky i, J_i je tok hmoty složky i, S_i je míra produkce složky i ze zdroje a R_i je míra produkce složky i z chemické reakce.

Dále je potřeba vyjádřit molekulární tok hmoty. Jeden způsob je pomocí Fickova zákona, který se hodí pro většinu aplikací. Ovšem existují aplikace, pro které se hodí spíše úplný vícesložkový difuzní model využívající Maxwell-Stephanovi rovnice.

3.5.1 Fickův model difuze

Zde je potřeba zmínit odlišnosti pro laminární a turbulentní proud. Kde pro případ laminárního proudění je vztah pro molekulární tok hmoty následující

$$J_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T}.$$
(3.5-2)

U turbulentního proudění se ve vztahu pro molekulární tok objeví člen zodpovědný za tok hmoty v důsledku turbulence. Níže je uveden vztah, který postihuje tok hmoty v případě turbulentního proudění. Je zde také obsažen člen postihující molekulární tok z důsledku teplotního gradientu.

$$J_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{S_{ct}}\right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T}, \qquad (3.5-3)$$

 $D_{i,m}$ je difuzní koeficient pro složku i ve směsi, S_{ct} je turbulentní Schmidtovo číslo $(\frac{\mu_t}{\rho D_t}$, kde μ_t je turbulentní viskozita a D_t je turbulentní difuzivita), $D_{T,i}$ je koeficient termální difuze.

Vztah pro molekulární tok hmoty (3.5-3) lze bez problému využít v případě že $Y_i \ll 1$ pro všechny i, kromě nosného plynu. Význam vlivu turbulentní difuze je také zahrnut v této práci a výsledek této studie je v podkapitole 4.4.

3.5.2 Difuzivita ve vícesložkovém systému

V případě vícesložkového systému je potřeba určit celkový difuzní koeficient složky i. Celkový difuzní koeficient složky i lze vyjádřit jako

$$D_{i,m} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j, j \neq i} \left(\frac{X_j}{D_{ij}}\right)},\tag{3.5-4}$$

kde X_i je objemový zlomek složky i , D_{ij} je binární difuzivita. U dvousložkového systému je difuzní koeficient pro danou složku $D_{i,m}$ roven binárnímu koeficientu D_{ij} .

3.5.3 Difuzivita v dvojsložkovém systému (Binární difuzivita)

V této podkapitole je uveden způsob výpočtu koeficientu difuze pro dva plyny při běžných tlacích. U kapalin a plynů o vysokém tlaku je výpočet difuzního koeficientu mnohem komplikovanější. Jeden ze způsobů výpočtu binární difuzivity je pomocí Chapman-Enskogova vztahu [8], ten byl získán řešením Bolztmannovi rovnice a vyplývá z kinetické teorie

$$\boldsymbol{D}_{ij} = \frac{3}{16} \frac{\left(\frac{4\pi k_B T}{M_{ij}}\right)^{1/2}}{n_0 \pi \sigma_{ij}^2 \Omega_D} f_D, \qquad (3.5-5)$$

 M_i,M_j -molekulární hmotnost složky i a j, $M_{ij}=2[(1/M_i)+(1/M_j)]^{-1}$, k je Boltzmanova konstanta, T je absolutní teplota, Ω_D je difuzní kolizní integrál, $\sigma_{i j}$ je charakteristická délka mezimolekulárního síly, f_D je korekční člen (pokud je M_i a M_j stejného řádu, je f_D mezi 1 a 1,02), n_0 je molární hustota. Dosazením zákona pro ideální plyn a $f_D=1$, dostaneme tvar:

$$\boldsymbol{D}_{ij} = \frac{0.00266T^{3/2}}{pM_{ij}^{1/2}\sigma_{ij}^2\Omega_D},$$
(3.5-6)

 D_{ij} je difuzní koeficient [cm²/s], T je teplota , p je tlak, σ_{ij} je charakteristická délka, Ω_D je difuzní kolizní integrál. Hodnoty Lennard-Jonesových parametrů pro směs jsou

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} \left(\sigma_i + \sigma_j \right), \tag{3.5-7}$$

$$(\varepsilon/k_B)_{ij} = \sqrt{(\varepsilon/k_B)_i (\varepsilon/k_B)_j}, \qquad (3.5-8)$$

kde σ a (ϵ/k) jsou Lennard-Jonesovy parametry pro dané složky.

Analytická aproximace Ω_D podle Neufelda [8]

$$\Omega_D = \frac{1.06036}{T_D^{*0.1561}} + \frac{0.1930}{\exp(0.47635 \cdot T_D^*)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996 \cdot T_D^*)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411 \cdot T_D^*)}, \quad (3.5-9)$$

$$T_D^* = \frac{T}{(\varepsilon/k_B)_{ij}}.$$
(3.5-10)

Další způsob výpočtu koeficientu difuze je podle Fullera [9], který pro výpočet používá difuzní objemy látek, níže je tento vztah uveden

$$D_{ij} = \frac{0.001T^{1.75} \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j}\right)}{p\left\{ (\sum_i v_k)^{1/3} + (\sum_j v_k)^{1/3} \right\}},$$
(3.5-11)

 v_k jsou atomové difuzní objemy, které jsou sečteny přes všechny atomy, skupiny a strukturální prvky v každé difundující složce. Hodnoty difuzních objemů vybraných látek jsou v příloze B.

Porovnání výpočtů koeficientů difuze pro systém vzduch-CO₂ je zobrazeno v obrázku č -1, kde jsou uvedeny i hodnoty koeficientu difuze získané z experimentu, který provedl T. R. Marrero a E. A. Mason [10]. Lze vidět, že pro hodnoty do 700 K jsou hodnoty koeficientu takřka totožné, ale pro vyšší hodnoty teploty se koeficient difuze podle Chapmanova-Enskogova vztahu začíná lišit.



Obr. 5.1-1: Závislost koeficientu difuze na teplotě při atmosférickém tlaku.

3.5.4 Úplná vícesložková difuze

Tato metoda výpočtu difuzního koeficientu se hodí zejména pro případy, kde difuze dominuje ve skrze laminární proudění. Tento model se proto nehodí pro turbulentní proudění. Níže je uveden jeden z možných zápisů Maxwell-Stephanovi rovnice [11]

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} \frac{X_i X_j}{D_{ij}} \left(\vec{V}_j - \vec{V}_i \right) = \vec{d}_i - \frac{\nabla T}{T} \sum_{\substack{j=1\\j\neq 1}}^{N} \frac{X_i X_j}{D_{ij}} \left(\frac{D_{T,j}}{\rho_j} - \frac{D_{T,i}}{\rho_i} \right), \tag{3.5-12}$$

kde X značí objemový zlomek, \vec{V} je difuzní rychlost, \mathbf{D}_{ij} jsou binární difuzní koeficienty pro i-tou složku v j-té, D_T je koeficient termální difuze. Dosazením za difuzní rychlost $\vec{J}_i = \rho_i \vec{V}_i$ a tvrzením, že Maxwellovi difuzní koeficienty jsou rovny difuzním koeficientům, je získána upravená rovnice

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} \frac{X_i X_j}{\boldsymbol{p}_{ij}} \left(\frac{\vec{J}_j}{\rho_j} - \frac{\vec{J}_i}{\rho_i} \right) = \nabla X_i - \frac{\nabla T}{T} \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} \frac{X_i X_j}{\boldsymbol{p}_{ij}} \left(\frac{D_{T,j}}{\rho_j} - \frac{D_{T,i}}{\rho_i} \right).$$
(3.5-13)

Následně lze vyjádřit vztah pro tok hmoty

$$\vec{J}_{i} = -\sum_{j=1}^{N-1} \rho D_{i,j} \nabla Y_{j} - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T}, \qquad (3.5-14)$$

Y_j značí hmotnostní zlomek složky j

Koeficient difuze získáme řešením níže uvedené soustavy

$$D_{ij} = [A]^{-1}[B] \tag{3.5-15}$$

$$A_{ii} = -\left(\frac{X_i}{D_{iN}}\frac{M_m}{M_N} + \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} \frac{X_j}{D_{ij}}\frac{M_m}{M_i}\right)$$
(3.5-16)

$$A_{ij} = X_i \left(\frac{1}{D_{ij}} \frac{M_m}{M_j} - \frac{1}{D_{iN}} \frac{M_m}{M_N} \right)$$
(3.5-17)

$$B_{ii} = -\left[X_i \frac{M_m}{M_N} + (1 - X_i) \frac{M_m}{M_i}\right]$$
(3.5-18)

$$B_{ij} = X_i \left(\frac{M_m}{M_j} - \frac{M_m}{M_N}\right) \tag{3.5-19}$$

$$M_m = \left(\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i}\right) \tag{3.5-20}$$

3.5.5 Koeficient termální difuze

V případě neizotermního systému je potřeba znát koeficient termální difuze. Níže je uveden vztah pro Soretův difuzní koeficient [12]. Ten zapříčiní to, že těžší molekuly budou difundovat méně než lehké molekuly směrem k zahřívaným plochám.

$$D_{T,i} = -2,59 \cdot 10^{-7} \cdot T^{0,659} \cdot \left(\frac{M_i^{0,511} X_i}{\sum_{i=1}^N M_i^{0,511} X_i} - Y_i\right) \cdot \left(\frac{\sum_{i=1}^N M_i^{0,511} X_i}{\sum_{i=1}^N M_i^{0,489} X_i}\right).$$
(3.5-21)

3.6 Šíření vzájemně reagujících látek

V případě modelování šíření látek, které mezi sebou navzájem reagují, je potřeba tuto skutečnost zahrnout do matematického modelu. Produkci dané látky lze zahrnout do transportní rovnice pro danou látku díky zdrojovému členu. Existuje několik řešení tohoto členu, kde v této kapitole budou uvedeny ty nejčastější z nich. Je zde také uveden odlišný případ řešení reagujících látek a to případ oxidace paliva.

3.6.1 Finite-rate model

První řešení je počítání zdrojového členu pomocí Arrheniova vyjádření. Tento model předpokládá laminární plamen a zanedbává turbulentní fluktuace plamene, není tudíž vhodný pro turbulentní plameny. Je potřeba zmínit, že tento model může počítat turbulentní proudění, ovšem plamen je považován za laminární.

Zdrojový člen chemické složky i je ve skrze reakci počítán jako suma Arrheniových reakčních zdrojů přes počet reakcí N_R. Zdrojový člen je pak ve tvaru

$$R_i = M_i \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r}, \qquad (3.6-1)$$

kde M_i je molekulární hmotnost i-té složky a $\hat{R}_{i,r}$ je Arrheniův molární podíl vzniku a zániku složky i v reakci r.

V případě nevratné reakce je molární podíl

$$\widehat{R}_{i,r} = \Gamma(\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \left(k_{f,r} \prod_{j=1}^{N} [C_{j,r}]^{(\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r})} \right),$$
(3.6-2)

kde $C_{j,r}$ je molární koncentrace složky j v reakci r, $\eta'_{j,r}$ je exponent četnosti reaktantu j v reakci r a $\eta''_{j,r}$ exponent četnosti produktu j v reakci r.

Pro vratnou reakci

$$\widehat{R}_{i,r} = \Gamma(\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \left(k_{f,r} \prod_{j=1}^{N} [C_{j,r}]^{(\eta'_{j,r})} - k_{b,r} \prod_{j=1}^{N} [C_{j,r}]^{(\nu''_{j,r})} \right), \quad (3.6-3)$$

kde Γ reprezentuje efekt třetí strany v reakční četnosti

$$\Gamma = \sum_{j}^{N} \gamma_{j,r} C_j, \qquad (3.6-4)$$

Konstanta dopředné četnosti pro reakci r je počítána z Arrheniova vztahu

$$k_{f,r} = A_r T^\beta e^{-\frac{E_r}{RT}},\tag{3.6-5}$$

kde A_r je Arrheniův pre-exponent, β je bezrozměrný exponent teploty a E_r je aktivační energie.

V případě, že se jedná o vratnou reakci, může být konstanta zpětné četnosti pro reakci r počítána z konstanty dopředné četnosti.

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r},$$
(3.6-6)

kde K_r je funkce závislá na entropii a entalpii dané složky.

Další možností je výpočet z Arrheniova vztahu

$$k_{b,r} = A_{b,r} T^{\beta} e^{-\frac{E_{b,r}}{RT}}$$
(3.6-7)

kde A_{b,r} je Arrheniův pre-exponent a E_{b,r} je aktivační energie.

3.6.2 Eddy-Dissipation model

Kromě modelu konečných podílů existuje další možnost jak řešit reagující proud a to pomocí Eddy-Dissipation modelu. Na rozdíl od předchozího modelu je určen pro případ spalování paliva. Předpokládá rychlé hoření některých paliv a turbulentní mísení paliva s okysličovadlem. Model vychází z práce Magnussena a Hjertagera [13]. Produkční člen je dán menším z výrazů

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,r} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \mathbf{R} \left(\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right), \qquad (3.6-8)$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,r} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum p Y_p}{\sum_j^N v''_{j,r} M_{w,j}},$$
(3.6-9)

kde Y_p je hmotnostní zlomek produktu P, Y_R je hmotnostní zlomek reaktantu R, A a B jsou konstanty.

Existuje ještě model, který rozšiřuje Eddy-Dissipation model o vložený chemický mechanismus v turbulentním proudu. Tento model bývá označován jako Eddy-Dissipation koncept (EDC) a je opět dílem Magnussena a Hjertagera [14].

3.6.3 Model spalování se směšovacím zlomkem

Toto je naprosto odlišný způsob řešení reagujícího proudu a je určen pro spalování předem nesmíseného paliva. V této kapitole byla zavedena skalární veličina směšovací zlomek, ten je pro všechny složky systému v daném prostoru stejný. Směšovací zlomek, který vyjadřuje okamžitý termochemický stav tekutiny lze zapsat jako

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,okysličovadlo}}{Z_{i,palivo} - Z_{i,okysličovadlo}},$$
(3.6-10)

kde Z_i jsou elementární hmotností zlomky, které byly definovány v kapitole pojednávající o základních vztazích.

Tento zlomek lze stejně jako rychlost rozdělit na část středovanou a fluktuační. Zde je opět použito Favrovo hmotnostně podmíněné středování. Směšovací zlomek lze tedy napsat jako

$$f = \tilde{f} + f', \qquad (3.6-11)$$

kde \tilde{f} je středovaný směšovací zlomek a f' je jeho fluktuační část.

Transportní rovnice středovaného směšovacího zlomku je ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \, \tilde{f} \right) + \nabla \cdot \left(\rho \vec{u} \, \tilde{f} \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_l + \mu_t}{\sigma_t} \nabla \, \tilde{f} \right) + S_m + S_{user}, \qquad (3.6-12)$$

kde μ_l je laminární viskozita a μ_t je turbulentní viskozita, zdrojový člen S_m značí přenos hmoty z kapiček paliva na plynnou fázi nebo reagující částice (např. uhlí). S_{user} je uživatelem definovaný zdrojový člen.

Rovněž lze napsat transportní rovnici pro odchylku směšovacího zlomku $\overline{f'^2}$, ta je ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \widetilde{f'^2} \right) + \nabla \cdot \left(\rho \widetilde{v} \widetilde{f'^2} \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_l + \mu_t}{\sigma_t} \nabla \widetilde{f'^2} \right) + C_g \mu_t \left(\nabla \widetilde{f} \right)^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{f'^2} + S_{user}, (3.6-13)$$

modelové konstanty jsou σ_t =0,85, Cg=2,86, Cd=2

V případě užití LES se transportní rovnice neřeší pro odchylku směšovací zlomku ale je modelována jako

$$\widetilde{f'}^2 = C_{var} L_s^2 \left| \nabla \widetilde{f} \right|^2, \qquad (3.6-14)$$

kde Cvar je konstanta subgridního modelu, Ls je délka subgridního měřítka.

Střední hodnotu skalární veličiny jako je teplota a elementární hmotnostní zlomek složky získáme ze vztahu

$$\bar{\phi}_i = \int_0^1 p(f)\phi_i(f)df,$$
 (3.6-15)

Podobně lze vypočítat hustotu

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^1 \frac{p(f)}{\rho(f)} df,$$
(3.6-16)

Pravděpodobnost směšovacího zlomku je dána

$$p(f) = \frac{f^{\alpha - 1}(1 - f)^{\beta - 1}}{\int f^{\alpha - 1}(1 - f)^{\beta - 1}df},$$
(3.6-17)

kde exponenty α a β jsou

$$\alpha = \tilde{f} \left[\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{f'^2} - 1 \right], \tag{3.6-18}$$

$$\beta = (1 - \tilde{f}) \left[\frac{\tilde{f}(1 - \tilde{f})}{f'^2} - 1 \right].$$
(3.6-19)

Pro tento spalovací model platí jistá omezení. První omezení je, že chemický systém musí být difundujicího typu s palivovým vstupem a vstupem okysličovadla, Lewisovo číslo musí být jednotkové, pouze jeden typ paliva a okysličovadla je dovolen a hlavně proud musí být turbulentní. Vztah pro Lewisovo číslo

$$Le = \frac{a}{D_{i,m}},\tag{3.6-20}$$

kde a je teplotní vodivost ($a=\lambda/(c_p \cdot \rho)$) a D_{i,m} je koeficient difuze.

Jak již bylo zmíněno, tak hodnoty koncentrací látek jsou získány ze směšovacího zlomku pomocí tzv. PDF tabulky. Tato tabulka musí být vypočtena před spuštěním samotné numerické simulace a hodnoty v tabulce se při numerické simulaci nemění. Důležitým parametrem pro tvorbu PDF tabulky je horní limit hoření (UFL), který je odlišný pro jednotlivá paliva, a značí maximální poměr mezi palivem a okysličovadlem při kterém ještě dochází k hoření. Použité palivo byl etanol, kde UFL=0,19. Vliv UFL na hodnoty teploty je zobrazen na obrázku 3.6-1. Vliv UFL na teplotu je prakticky minimální.



Obr. 3.6-1: Závislost teploty na středovaném směšovacím zlomku při nulové odchylce směšovacího zlomku.

Vliv hodnoty UFL na objemovou koncentraci látek CO (vlevo) a CO₂ (vpravo) je na obrázku 3.6-2. Plyn CO₂ má pro jednotlivé hodnoty UFL prakticky stejný průběh, ale u plynu CO je vliv výraznější. Zajímavý fakt je, že v případě plynu CO₂ jsou hodnoty objemového zlomku vyšší pro nižší hodnoty UFL, ale pro plyn CO je to přesně naopak.



Obr. 3.6-2: Závislost objemového zlomku CO (vlevo) a CO₂ (vpravo) na středovaném směšovacím zlomku při nulové odchylce směšovacího zlomku.

3.7 Způsoby měření koncentrace CO₂

Existuje několik principů měření koncentrace CO_2 ve vzduchu, v této podkapitole jsou uvedeny některé z nich.

Elektroakustická čidla - pracují na principu změny kmitočtu ultrazvuku v měřící části čidla. Koncentrace pak závisí na této změně.



Obr. 3.7-1: Schéma elektroakustického čidla (zdroj:www.codychame.cz).

Elektrochemická čidla - jsou složená z elektrochemického článku s tuhým elektrolytem. Na elektrodách pak dochází ke spotřebě kyslíku a vzniku elektromotorické síly. Tato síla je měřena pomocí speciálního čidla a na základě
velikosti této síly se pak zjišťuje koncentrace CO_2 ve vzduchu. Tato čidla měří koncentraci až od 400ppm a běžná koncentrace CO_2 ve vzduchu je kolem 350ppm, hodí se tedy spíše pro aplikace s vyšší hodnotou koncentrace CO_2 . Tato čidla obvykle obsahují autokalibrační funkci, která zajistí dlouhodobější spolehlivost.



Obr. 3.7-2: Schéma elektrochemického čidla (zdroj:www.kimo.fr).

NDIR čidla - jedná se o čidla pracující na principu měření útlumu infračerveného záření. Čidlo se skládá ze zdroje a detektoru infračerveného záření. Signál z detektoru se dále zpracovává a na základě útlumu záření se pak vypočte koncentrace CO₂. Tyto čidla jsou oproti ostatním nejpřesnější, měří od nulové hodnoty, hodí se i pro vysoké koncentrace, jsou také stabilnější, ale jsou zároveň dražší než předchozí typy.



Obr. 3.7-3: Schéma měření pomocí NDIR čidla (zdroj:www.kimo.fr).

Při měření koncentrace CO₂ pomocí NDIR čidla je potřeba dodržet podmínky stanovené výrobcem přístroje. Jednou z těchto podmínek je měření při relativní vlhkosti menší jak 95%. To je z důvodu, že absorpční pásmo pro některé vlnové délky je shodné jak pro CO₂ tak pro vodní páru. Vliv vlnové délky na absorpci IR záření je zobrazeno na obrázku 3.7-4. Při relativní vlhkosti vyšší než dovolená hranice, by mohlo docházet ke zkreslení naměřené hodnoty koncentrace. Z těchto poznatků vyplývá nutnost kontroly Stránka | 35

relativní vlhkosti v měřeném prostoru pro zamezení chyby měření. Právě v případě spalovaní paliva, kdy jedním z produktů je vodní pára, je potřeba toto kontrolovat a případnou vyšší vlhkost odvádět.



Obr. 3.7-4: Absorpční spektrum IR záření pro vybrané látky (Zdroj R. G. Fleagle, J. A. Businger [2006]).

3.8 Validace matematického modelu

Pro ověření správnosti matematického modelu je nejčastěji voleno porovnání s experimentem. V případě problematiky kontroly kvality vnitřního prostředí (vzduchu) se porovnávají hodnoty tlaku, teploty, rychlosti a to v závislosti na čase i poloze. V případě znečišťujících látek porovnáváme hodnotu koncentrace. Dále můžeme porovnávat hodnoty získané z teoretických vztahů jak s hodnotami z numerické simulace, tak s hodnotami z experimentu.

Validace pomocí Frodeho čísla

V případě, že se vstupní otvor znečišťující látky nachází ve svislé poloze a látka vystupuje směrem vzhůru, lze použít Bainesův empirický vztah [15] stanovující závislost výšky dosahu proudu na Frodeho čísle. Baines odvodil tento vztah na základě experimentu, kde vstřikoval slanou vodu do nádrže s běžnou sladkou vodou. Na obrázku 3.8-1 je tato validace schematicky vyobrazena.



Obr. 3.8-1: Schématické znázornění validace podle Bainesova vztahu.

Limitem této validace je použití v případě, že znečišťující látka je těžší než okolní prostředí a zároveň s ním za běžných podmínek nereaguje. Frodeho číslo značí poměr setrvačných a vztlakových sil, níže je uveden výpočet tohoto čísla

$$Fr = \frac{\rho_{inj} \cdot u_{inj}^2}{g \cdot d_{inj} \cdot (\rho_o - \rho_{inj})},$$
(3.8-1)

kde ρ_{inj} značí hustotu znečišťující látky, ρ_o je hustota okolí, g je gravitační zrychlení, d_{inj} je vstupní otvor trysky a u_{inj} je vstupní rychlost. Bainesův vztah pro výšku proudu je následující

$$z = 1,74 \cdot d_{inj} \cdot \sqrt{Fr}. \tag{3.8-2}$$

Zjištění výšky jetu z výsledků numerické simulace jak pak provedeno pomocí grafu závislosti hustoty na výšce od podlahy místnosti v ose výstupní trysky. Výška odpovídá bodu, kde dochází k prvnímu přechodu ve směru od vyšší hustoty z konvexní části na konkávní. Princip tohoto zjišťování je uveden na obrázku 3.8-2.



Obr. 3.8-2: Schématické znázornění zjištění výšky jetu z numerické simulace. Stránka | 37

4 Popis experimentu

4.1 Experiment pro nereagující proud

Již zmíněná validace matematického modelu s hodnotami z experimentu byla také v této práci provedena. Pro první případ nereagujícího proudu byly použity výsledky z práce Laurenta Ricciardiho [1]. Ten řešil šíření fluoridu sýrového (SF₆) ve větrané místnosti. SF₆ je bezbarvý, anorganický, nereaktivní plyn, který je na rozdíl od jiných fluoridů síry nejedovatý, ale jde o skleníkový plyn. Hlavní využití tohoto plynu je při výrobě polovodičů, jako dielektrikum v transformátorech a mimo jiné také pro sledování míry ventilace a pohybu vzduchu v budovách. Tabulka 4.1-1 zobrazuje vybrané vlastnosti tohoto plynu při podmínkách 1,013 bar a 15 °C. Zde je vidět, že SF₆ je přibližně 5 krát těžší než vzduch.

Molekulární hmotnost	146,060 g/mol
Hustota	$5,650 \text{ kg/m}^3$
Měrné teplo při konstantním tlaku	0,098 kJ/(mol·K)
Měrné teplo při konstantním objemu	0,089 kJ/(mol·K)
Viskozita	1,377·10 ⁻⁴ Pa·s
Tepelná vodivost	11,627 mW/(m·K)
Rychlost zvuku	138,5 m/s
Lennard-Jonesův parametr (ɛ/k _b)	222,1 K
Lennard-Jonesův parametr σ	5,128 Å

Tabulka 4.1-1: Vybrané vlastnosti plynu SF₆ při teplotě 15 °C.

Polohy bodů, ve kterých Ricciardi měřil koncentraci plynu SF₆, jsou uvedeny v tabulce 4.1-2. Hodnota, která byla porovnávána, byla prostorově zprůměrovaná hodnota koncentrace pro body B1-B4 je průměrná hodnota označena B_{mean} a pro M1-M4 je označena M_{mean} .

Bod	Poloha [x, y, z] (m)	Bod	Poloha [x, y, z] (m)
B1	[-1;-1;+0,55]	M1	[0;-1;+1,5]
B2	[+1;-1,5;+0,55]	M2	[-1;0;+1,5]
B3	[+1;+1;+0,55]	M3	[0;+1;+1,5]
B4	[-1;+1,5;+0,55]	M4	[+1;0;+1,5]

Tabulka 4.1-2: Poloha měřených bodů.

4.2 Experiment pro spalování etanolu

Druhý případ, který reprezentoval šíření CO₂ při spalování etanolu byl validován pomocí hodnot z vlastního experimentu. Některé vybrané vlastnosti paliva jsou uvedeny v tabulce 4.2-1. Experiment byl uskutečněn ve vybudované zkušební komoře, která byla sestavena z polykarbonátových desek a zpevněna hliníkovými profily. Spoje PC desek byly utěsněny silikonovým tmelem, kromě přední otvíratelné části. Rozměry zkušební komory jsou zobrazeny na obrázku 4.2-1. Ve středu zkušební komory byla umístěna nádobka s palivem.

Chemický vzorec	C ₂ H ₅ OH
Molekulární hmotnost	46,070 g/mol
Hustota	785 kg/m ³
Měrné teplo při konstantním tlaku	0,112 kJ/(mol·K)
Viskozita	$1,074 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$
Tepelná vodivost	171 mW/(m·K)
Teplota vznícení	366 °C
Horní limit hoření (UFL)	19 %
Dolní limit hoření (LFL)	3 %

Tabulka 4.2-1: Vybrané vlastnosti etanolu při teplotě 25 °C.



Obr. 4.2-1: Rozměry zkušební komory.

Stránka | 39

Sestavená zkušební komora je vyobrazena na obrázku 4.2-2, kde lze vidět i umístění nádobky s palivem. Nastavitelný držák sloužil jak pro upevnění sondy na měření koncentrace CO₂ tak pro sondu na měření rychlosti.



Obr. 4.2-2: Zkušební komora pro měření koncentrace CO₂ při spalování etanolu.

Body ve kterých byly měřeny koncentrace plynu CO_2 jsou v tabulce 4.2-2. Bod, ve kterém byla měřena rychlost, se nacházel na souřadnicích [+0,025; +0,20; 0]. Počátek souřadného systému byl umístěn ve středu palivové nádobky. Jak lze vidět tak bod P4 se nacházel v ose palivové nádobky a sensor byl upevněn k horní stěně, tak že vstupní část čidla byla namířena proti nádobce s palivem.

Bod	Poloha[x; y; z] (m)
P1	[+0,25;+0,25;0]
P2	[+0,30;+0,50;0]
P3	[+0,25;+0,70;0]
P4	[0;+0,90;0]

Tabulka 4.2-2: Poloha měřených bodů.

Pro měření koncentrace CO₂ byly použity 2 přístroje různých výrobců. Oba přístroje jsou založeny na NDIR principu.

Tím prvním byl přístroj AQ 200 od francouzského výrobce KIMO. Rozsah měřených hodnot koncentrace CO_2 0-5000 ppmv. Podmínky měření, co se týče teploty 0-50 °C a relativní vlhkosti do 95 %. Přesnost přístroje ±0,3 % z čtené hodnoty nebo

±50 ppmv, rozlišovací schopnost 1 ppmv a frekvence snímání 0,33 Hz. Přístroj je vyobrazen na obrázku 4.2-3.



Obr. 4.2-3: Přístroj KIMO AQ 200.

Druhým přístrojem byl sensor SprintIR od britské firmy Gas Sensing. Rozsah měřených hodnot 0-50000 ppmv. Podmínky měření, co se týče teploty 0-50 °C a relativní vlhkosti do 95 %. Přesnost přístroje ± 5 % z čtené hodnoty nebo ± 70 ppmv, rozlišovací schopnost 10 ppmv a frekvence snímání 10 Hz. Přístroj je vyobrazen na obrázku 4.2-4.



Obr. 4.2-4: Přístroj SprintIR.

Rychlost byla měřena termoanemometrickým čidlem FVAD35TH4 od německého výrobce Ahlborn. Pro záznam hodnot byl použit dataloger Almemo 2890-9 od stejného výrobce. Rozsah měřených hodnot 0,08 až 2 m/s při rozlišení 0,001 m/s. Přesnost přístroje ± 1 % z čtené hodnoty nebo $\pm 0,04$ m/s . Průměr sondy 6 mm, délka sondy 2310 mm, držák a kabel 1,5 m. Termoanemometr s datalogerem je na obrázku 4.2-5.



Obr. 4.2-5: Termoanemometrická sonda a dataloger Almemo (zdroj: www.ahlborn.de).

Měření teploty bylo provedeno pomocí analyzátoru spalin testo 340 od německého výrobce Testo AG. Rozsah měřených hodnot pro teplotu -40 až +1200 °C. Rozlišení přístroje 0,1 °C, přesnost ±0,5 °C (pro teploty do 99 °C) a ±0,5 % (pro zbytek rozsahu). Rozsah měřených hodnot pro koncentraci CO 0 až 10000 ppmv při rozlišení 1 ppmv. Přesnost přístroje ±10 ppmv nebo 10 % (pro 0-200 ppmv), ±20 ppmv nebo 5% z čtené hodnoty (pro 201-2000 ppmv) a ±10 % (pro 2001-10000 ppmv). Přístroj je vyobrazen na obrázku 4.2-6.



Obr. 4.2-6: Analyzátor spalin testo 340 a přesná váha KERN.

Postup experimentu:

Prvním krokem bylo přesné odměření použitého paliva. Odměření paliva bylo provedeno pomocí injekční stříkačky. Injekční stříkačka s palivem byla 5 krát zvážena na přesné váze a po naplnění nádobky palivem byla prázdná injekční stříkačka opět 5 krát zvážena. Obě měření byla zprůměrována a rozdíl těchto hodnot určoval množství použitého paliva. Průměrné množství paliva bylo 1,37 g.

Kromě množství paliva byl dalším měřeným parametrem čas. Začátek měření času byl definován zažehnutím paliva, konec měření byl definován úplným dohořením paliva. Z hodnot množství paliva a času hoření byl vypočten hmotnostní tok, který dále posloužil jako okrajová podmínka pro numerickou simulaci. Průměrná doba hoření 1,37 g paliva byla 360 s. Po zažehnutí směsi byla zkušební komora uzavřena a dodatečně utěsněna lepicí páskou. Fotografie pořízená při experimentu je na obrázku 4.2-7, kde jde vidět nádobka s palivem a přístroj AQ 200.



Obr. 4.2-7: Průběh experimentu při spalování etanolu.

Po dohoření paliva byl oddělán přední kryt a zkušební komora byla ponechána účinku přirozeného větrání, dokud hodnota koncentrace neklesla minimálně pod hodnotu 800 ppmv koncentrace CO₂. Nádobka na palivo byla zchlazena na pokojovou teplotu pomocí hliníkové desky, na kterou byla položena. To bylo z důvodu dodržení stejných počátečních podmínek pro všechna měření. Vzhledem k odlišné počáteční hodnotě koncentrace CO_2 byly všechny naměřené hodnoty poníženy o počáteční hodnotu koncentrace, která byla pro jednotlivá měření rozdílná. To usnadnilo také porovnání s výsledky z numerické simulace, kde byla nastavena nulová počáteční koncentrace CO_2 ve výpočetní doméně.

Ze souboru naměřených hodnot byla vyloučena měření, pro která se hmotnostní tok výrazně lišil. Bylo provedeno 10 měření pro každý bod, s tím že vyloučené byly pouze 2 hodnoty a to pro bod P1 a P2. V obou případech docházelo k rychlejšímu vyhoření paliva. Rychlejší vyhoření mohlo být způsobeno nedostatečným, případně neprovedeným zchlazení palivové nádobky.

Vizualizace proudění ve zkušebním prostoru byla provedena pomocí lineárního laseru, kamery a kouře. Kouř byl ve zkušebním prostoru vytvořen pomocí malé dýmovnice. Laserový řez byl namířen tak aby procházel středem zkušební komory, kde se nacházela nádobka s palivem. Kamera byla umístěna tak, že osa objektivu byla kolmá na vytvořený laserový řez. Na obrázku 4.2-8 je snímek pořízený z této vizualizace, ten byl pro potřeby dalšího porovnání upraven do černobílého spektra.



Obr. 4.2-8: Vizualizace proudění pomocí lineárního laseru a kouře.

5 Numerická simulace

5.1 Numerická simulace pro nereagující proud

Zkoumaný prostor byl jednoduchá místnost s dvěma vstupy čerstvého vzduchu, jedním vstupem SF₆ a dvěma výstupy znečištěného vzduchu. Vstupy byly definované konstantní rychlostí. Vstupní rychlost čerstvého vzduchu byla 1 m/s a vstupní rychlost znečišťující látky byla 36 m/s. Výstupní okrajová podmínka typu outflow. Rozměry prostoru a místa vstupů a výstupů jsou zobrazeny na obrázku 5.1-1 vlevo, kde souřadný systém byl umístěn ve středu podlahy místnosti. Průměr vstupní trysky plynu SF₆ byla 0,005 m a výška trysky 0,15 m. Tabulka 5.1-1 uvádí rozměry a umístění otvorů vstupu vzduchu a výstupní otvory.

Název	Rozměry v m (výška × šířka)	Umístění středu [x; y; z]
Vstup vzduchu 1	0,1×0,15	[-1;-2;+2,5]
Vstup vzduchu 2	0,1×0,15	[+1;-2;+2,5]
Výstup 1	0,1×0,15	[-1;+2;+0,55]
Výstup 2	0,1×0,15	[+1;+2;+0,55]

Tabulka 5.1-1: Rozměry, umístění vstupů a výstupů.

Pro numerickou simulaci byla vytvořena nestrukturovaná tetrahedrální síť odpovídající ½ zkoumaného prostoru. Síť je zobrazena na obrázku 5.1-1 vpravo.



Obr. 5.1-1: Schéma zkoumaného prostoru (vlevo) a výpočetní síť (vpravo.

Velikost elementu v blízkosti vstupů a výstupů byl 1mm, ve zbytku výpočetní domény byl 10mm. Zjemnění sítě bylo také provedeno v ose vstupu plynu SF₆. Při tvorbě sítě bylo vycházeno z práce L. Ricciardiho [1], který provedl citlivostní analýzu

na velikost elementu. Výsledkem analýzy bylo, že 10 mm je ideální poměr mezi rychlostí výpočtu a přesností řešení.

Výpočet byl proveden ve třech po sobě jdoucích fázích:

- výpočet ustáleného proudění v místnosti se zavřeným vstupem znečišť ující látky
- nestacionární výpočet proudění v místnosti s otevřeným vstupem znečišťující látky
- nestacionární výpočet proudění v místnosti se zavřeným vstupem znečišťující látky

Řešič byl zvolen Pressure based a nastavení výpočtu tlaku-rychlosti bylo primární nastaveno na Coupled, kromě studie vlivu nastavení řešiče, kde byl nastaven i SIMPLE. Byly otestovány jak turbulentní modely k-ε, tak i turbulentní model k-ω SST. Diskretizační schéma pro gradient bylo použito Green-Gauss node based, pro tlak Standard a pro ostatní proměnné UPWIND druhého řádu.

Časový krok pro nestacionární výpočty byl nastaven na 1 s, kde bylo opět vycházeno z analýzy od Ricciardiho [1]. Délka časového úseku pro transientní výpočet s otevřeným vstupem byla 900 s a stejně tak i pro transientní výpočet se zavřeným vstupem. Celkový čas byl 1800 s.

5.2 Numerická simulace pro spalování etanolu

Pro numerickou simulaci byla vytvořena strukturovaná hexahedrální výpočetní síť, která odpovídá ¼ zkoumaného prostoru. Zjemnění bylo provedeno v místě palivového vstupu a také v prostoru nad ním. Pro dodržení zákona zachování hmoty byla přidána výstupní okrajová podmínka v dolní části výpočetní domény. Jako vstupní okrajová podmínka byl zvolen hmotnostní tok. Hodnota hmotnostního toku byla určena z experimentu, kdy byla změřena hmotnost paliva a čas po který palivo hořelo. Tento postup byl před každým měřením koncentrace CO₂ při spalování několikrát opakován pro minimalizaci chyby měření. Hmotnostní tok se nelišil o více jak 3% pro jednotlivá měření. Obrázek 5.2-1 popisuje zkoumanou doménu včetně umístění vstupů a výstupů.



Obr 5.2-1: Zkoumaná doména a výpočetní síť zkoumaného prostoru.

Tabulka 5.2-1 uvádí vstupní parametry do numerické simulace. Ty byly získány z experimentu. Vzhledem k výpočtu ¹/₄ domény byl hmotnostní tok nastaven na hodnotu $0,95 \cdot 10^{-3}$ g/s. Vnitřní průměr nádobky byl 30 mm. Výstupní okrajová podmínka byla typu outflow. Výška výstupní mezery byla 5 mm.

Množství paliva	1,37 g
Doba hoření	360 s
Hmotnostní tok	$3,8\cdot10^{-3}$ g/s

Tabulka 5.2-1: Vstupní parametry pro simulaci.

Byl použit Pressure based řešič a nastavení výpočtu tlaku-rychlosti bylo zvoleno metodou SIMPLE. Stejně jako v předchozí studii pro nereagující proud byly otestovány turbulentní modely k- ε a turbulentní model k- ω SST. Diskretizační schéma pro gradient bylo použito Green-Gauss node based, pro tlak a ostatní proměnné UPWIND druhého řádu.

Časový krok byl primárně nastaven na 0,5 s a maximální počet iterací na jeden časový krok byl 200. Vliv časového kroku na hodnoty koncentrace CO2 byl součástí této práce a výsledky z této studie jsou uvedeny v kapitole 7.4.

Spalování bylo řešeno pomocí modelu spalování pro předem nesmísené palivo, který využívá PDF tabulku. Vstupními hodnotami pro vytvoření tabulky bylo složení paliva a okysličovadla, kde pro palivo bylo nastaveno 100 % etanolu a pro okysličovadlo směs zastoupená 79 % dusíku a 21 % kyslíku. Dalším vstupním parametrem byl horní limit hoření UFL, který pro etanol je 19 %. Počáteční hodnoty paliva a okysličovadla pro vytvoření PDF tabulky byly nastaveny na 25 °C.

Vytvořená PDF tabulka obsahovala 24 složek. Graf na obrázku 5.2-2 zobrazuje závislost objemové koncentrace vybraných látek na středovaném směšovacím zlomku.



Obr. 5.2-2: Graf závislosti objemové koncentrace vybraných látek na středovaném směšovacím zlomku.

6 Výsledky pro nereagující proud

6.1 Porovnání s experimentem

V této kapitole jsou porovnány výsledky z numerické simulace s výsledky z měření provedené L. Ricciardim [1]. V první části jsou porovnány hodnoty koncentrace SF₆, měřené v několika rovinách. Porovnávaná hodnota je průměrná hodnota získaná ze 4 bodů v každé měřené rovině. Polohy měřených bodů jsou uvedeny ve 4. kapitole v tabulce 4.1-2. Průměrná hodnota koncentrace pro spodní rovinu je označována B_{mean} a pro střední rovinu M_{mean} .

Průběh koncentrace látky SF₆ v čase pro spodní rovinu je na obrázku 6.1-1 a pro střední rovinu na obrázku 6.1-2. Pro fázi vypouštění plynu SF₆ do místnosti je průběh koncentrace prakticky lineární a je dosaženo velmi dobré shody mezi výsledky z numerické simulace a výsledky z experimentu. U fáze, kdy byl zavřený vstup plynu SF6 a pro případ spodní roviny, dochází v případě experimentu nejprve k pozvolnému snižování koncentrace plynu SF₆ a po čas 1400 s k rychlému poklesu koncentrace. Oproti tomu u hodnot z numerické simulace dochází stále k pozvolnému klesání. Jediný turbulentní model, který má viditelný rychlejší pokles koncentrace, je model k-ε Realizable. Pro střední rovinu dochází k okamžitému snížení koncentrace. Průběh hodnot koncentrace plynu SF₆ získaných z numerické simulace je pro turbulentní modely k-ε podobný. Turbulentní model k-ω SST má průběh koncentrace pozvolnější a příliš neodpovídá průběhu získanému z experimentu.



Obr. 6.1-1: Graf průběhu koncentrace SF₆ v čase pro spodní rovinu



Obr. 6.1-2: *Graf průběhu koncentrace* SF₆ v čase pro střední rovinu.

Obrázek 6.1-3 zobrazuje graf porovnávající hodnoty získaných z numerické simulace a z experimentu pro fázi vypouštění plynu SF₆ (vlevo) a se zavřeným vstupem plynu SF₆ (vpravo) ve spodní rovině. Je porovnávána hodnota v čase z numerické simulace a z experimentu, kde čím blíže bude daný bod u přímky, tím více se budou hodnoty shodovat. Pro fázi vypouštění je shoda numerické simulace s experimentem velice dobrá. Naproti tomu výsledky z fáze se zavřeným vstupem příliš neodpovídají. Jediné přiblížení je u hodnot vysoké koncentrace SF₆.



Obr. 6.1-3: *Graf porovnání hodnot ve spodní rovině* (Bmean) z numerické simulace a experimentu pro fázi vypouštění SF₆ (vlevo) a fázi se zavřeným vstupem SF₆ (vpravo).

6.2 Výška jetu

Jak již bylo zmíněno v předchozí kapitole, tak další možností validace matematického modelu je pomocí Frodeho čísla a z něj vypočtené výšky. Dosazením do vzorce pro Frodeho číslo (3.8-1) dostaneme

$$Fr = \frac{6.2 \cdot 30^2}{9.81 \cdot 0.005 \cdot (6.2 - 1.2)} = 22752.$$
(6.2-1)

Následně dosazením Frodeho čísla do vztahu pro výpočet výšky jetu

$$z = 1,74 \cdot 0,005 \cdot \sqrt{22752} = 1,31 \, m. \tag{6.2-2}$$

K této hodnotě je potřeba přičíst výšku vstupní trysky.

$$z_{celkem} = z + z_0 = 1,31 + 0,15 = 1,46 m.$$
 (6.2-3)

Graf závislosti hustoty na výšce je zobrazen na obrázku 6.2-1. Jsou zde uvedeny hodnoty pro prvních 60 vteřin, kde jde vidět postupné ustálení výšky jetu na dané hodnotě. Z grafu vyplívá, že k růstu výšky dochází do času vypouštění 30 vteřin, po tomto čase se výška jetu ustálí. Grafy závislosti hustoty na výšce pro ostatní turbulentní modely jsou v příloze C.



Obr. 6.2-1: *Graf závislosti hustoty na výšce při prvních* 60 s pro turbulentní model k-ε *Realizable.*

Stránka | 51

Jak se mění výška jetu pro jednotlivé turbulentní modely, je zobrazeno na obrázku 6.2-2. Nejlepší shoda s hodnotou získanou z Frodeho čísla je dosažena u turbulentního modelu k- ε Realizable, kde se výška drží přibližně na stejné hodnotě. Jediná odchylka je v posledním časovém úseku, kde došlo k zaplnění místnosti plynem SF₆ do takové míry, že zasahuje nad úroveň dosahu jetu. Zajímavý jev lze pozorovat u turbulentního modelu k- ε RNG, kde došlo k poklesu výšky jetu během vypouštění a následně opět k růstu výšky dosahu jetu. Turbulentní modely k- ε Standard a k- ω SST mají přibližně konstantní výšku jetu po celou dobu napouštění.



Obr. 6.2-2: Graf závislosti výšky jetu v čase pro jednotlivé turbulentní modely.

6.3 Výsledky z numerické simulace

První část této podkapitoly je věnována zobrazení koncentrace znečišťující látky v místnosti. V případě, že znečišťující látka je mnohem těžší než vzduch je vhodné vykreslovat hmotnostní koncentraci znečišťující látky.

Obrázek 6.3-1 zobrazuje kontury hmotnostní koncentrace látky SF6 v rovině symetrie pro turbulentní model k-ɛ Realizable. Lze pozorovat, že dochází k postupnému zaplnění místnosti znečišťujícím plynem až do určité úrovně. Po dosažení zmíněné úrovně se pouze zvyšuje koncentrace pod touto úrovní a nedochází k šíření plynu nad tuto úroveň.



Obr. 6.3-1: Kontury hmotnostní koncentrace látky SF6 v čase pro turbulentní model k-ε Realizable.

Limitní hodnoty pro znečišťující látky jsou dány objemovým či hmotnostním poměrem. Vykreslením isokontur hmotnostního zlomku dané látky můžeme pozorovat oblast překračující daný limit. Na obrázku 6.3-2 jsou tyto isokontury vykresleny pro 4% hmotnostní podíl znečišťující látky. K významnému rozšíření oblasti s vyšší koncentrací plynu dochází až po čase 500 s.



Obr. 6.3-2: Isokontury 4% hmotnostní koncentrace látky SF6 v čase pro turbulentní model k-ε Realizable.

Stránka | 53

Zajímavé je porovnání kontur hmotnostních koncentrací plynu SF6 pro jednotlivé turbulentní modely. Na obrázku 6.3-3 jsou porovnány kontury pro turbulentní model k-ε RNG a k-ε Realizable. Model RNG nedosahuje takové výšky zasažené oblasti jako model Realizable.



Obr. 6.3-3: Porovnání kontur hmotnostní koncentrace látky SF_6 pro turbulentní model k- ε RNG (vlevo) a k- ε Realizable (vpravo).

Rychlostní pole, získané ze simulace pro jednotlivé turbulentní modely, je zobrazeno na obrázku 6.3-4. Vektory rychlosti jsou normované na jednotkovou velikost z důvodu lepší přehlednosti. Prakticky zde nejsou patrné velké rozdíly v rychlostním poli mezi jednotlivými turbulentními modely.



Obr. 6.3-4: Kontury rychlosti s normovanými vektory rychlosti pro jednotlivé turbulentní modely (A: k- ε Standard, B: k- ε RNG, C: k- ε Realizable, D: k- ω SST) v rovině symetrie v čase 900 s.

Vykreslením hodnot lokálního Reynoldsova čísla (Obrázek 6.3-5) lze vidět rozdíly nejen mezi turbulentními modely k- ε a k- ω , ale také mezi jednotlivými typy modelu k- ε . Nejvíc patrný rozdíl je u modelu k- ε RNG, který na rozdíl od modelů k- ε Standard a k- ε RNG má oblast vyšší hodnoty Reynoldsova čísla v horní části zkoumaného prostoru.



Obr. 6.3-5: *Kontury lokálního Reynoldsova čísla pro jednotlivé turbulentní modely (A: k-ε Standard, B: k-ε RNG, C: k-ε Realizable, D: k-ω SST) v rovině symetrie, čas 900 s.*

Při vykreslení kontur turbulentní viskozity (Obrázek 6.3-6) jsou patrné rozdíly mezi jednotlivými turbulentními modely. Oproti ostatním modelům nemá turbulentní model k-ε Standard tak velkou hodnotu turbulentní viskozity v jádru jetu. Stejný rozdíl je patrné také u kontur produkce turbulentní energie na obrázku 6.3-7.



Obr. 6.3-6: Kontury turbulentní viskozity pro jednotlivé turbulentní modely (A: k- ε Standard, B: k- ε RNG, C: k- ε Realizable, D: k- ω SST) v rovině symetrie v čase 900 s.

Stránka | 56



Obr. 6.3-7: *Kontury produkce turbulentní energie pro jednotlivé turbulentní modely (A: k-ε Standard, B: k-ε RNG, C: k-ε Realizable, D: k-ω SST) v rovině symetrie, čas 900 s.*

6.4 Vliv turbulentní difuze

Jedním ze zkoumaných vlivů byl také vliv turbulentní difuze a jako nejlepší způsob se jeví porovnat mezi sebou koeficient molekulární a turbulentní difuze. Vzhledem k tomu, že zkoumaný systém je isotermický a rozdíly tlaku bude minimální, bude koeficient molekulární difuze prakticky neměnný. Podíl molekulární a turbulentní difuze je na obrázku 6.4-1.



Obr. 6.4-1: Kontury poměru molekulární a turbulentní difuze pro jednotlivé turbulentní modely (A: k- ε Standard, B: k- ε RNG, C: k- ε Realizable, D: k- ω SST) v rovině symetrie v čase 900 s.

Stránka | 57

Jak lze vidět, je vliv molekulární difuze oproti turbulentní difuzi zanedbatelný. Zajímavé je, že turbulentní modely k- ε mají oblast s nízkou turbulentní difuzí v místě změny koncentrace plynu SF₆, ale turbulentní model k- ω SST tuto oblast nemá. Odlišnost hodnot turbulentní difuze v blízkosti stěny mezi modely k- ε a k- ω SST je z důvodu nižší přesnosti v blízkosti stěny právě pro turbulentní modely k- ε .

6.5 Vliv korekce turbulentního modelu

První korekce turbulentního modelu je modifikace na zakřivení proudu. Druhou korekcí turbulentního modelu je korekce na vířivost. Korekce byly použity na turbulentní model k- ϵ RNG a zkoumaná byla fáze napouštění plynu SF₆ do místnosti.

Vliv korekce na hodnoty koncentrace je zanedbatelný, jak lze pozorovat z grafů na obrázku 6.5-1. Jediný vliv je od času 500 s, kde pro střední rovinu došlo k poklesu koncentrace při použití korekce na zakřivení proudu. Pokud vezmeme v potaz to, že výška jetu pro turbulentní model k-ɛ RNG byla nestabilní po čas vypouštění a právě v čase 500 s došlo k opětovnému navýšení výšky, lze předpokládat, že tato modifikace měla vliv právě na výšku jetu.



Obr. 6.5-1: Graf vlivu korekce turbulentního modelu na koncentraci SF_6 v čase pro spodní rovinu (vlevo) a pro střední rovinu (vpravo).

Modifikace na vířivost nemá na hodnoty koncentrace vliv. Jediná odchylka je v čase 600 s, kde je koncentrace pro modifikovaný turbulentní model vyšší.

6.6 Vliv nastavení řešiče

Testované nastavení se týkalo problematiky výpočtu tlaku-rychlosti. Pro testování vlivu byl zvolen turbulentní model k- ϵ RNG. Vliv nastavení řešiče na koncentraci plynu SF₆ v místnosti je vidět na obrázku 6.6-1.



Obr. 6.6-1: *Graf vlivu nastavení řešiče na koncentraci* SF_6 v čase pro spodní rovinu (vlevo) a pro střední rovinu (vpravo).

Hodnoty koncentrace SF_6 se prakticky neliší. Odchylka v koncentracích byla menší než 1%. Lze konstatovat, že jediný vliv je na výpočetní čas, který byl pro řešič SIMPLE vyšší. Vzhledem k zanedbatelnému vlivu nastavení řešiče na hodnoty koncentrace nebyla další nastavení testována.

Tato studie umožnila porovnat metodiku řešení pomocí CFD (turbulentní modely, nastavení řešiče, korekce modelu), neboť byl k dispozici experiment a výsledky z měření. Z této studie vyplývá, že vliv nastavení řešiče a korekce turbulentního modelu jsou zanedbatelné. Největší vliv na hodnoty koncentrace má turbulentní model, kde nejlepší shody dosáhly turbulentní modely k-ε. Jako nejlepší turbulentní model vyšel z této studie model k-ε Realizable.

7 Výsledky pro spalování etanolu

7.1 Porovnání s experimentem

Graf na obrázku 7.1-1 porovnává hodnoty objemové koncentrace CO₂ v bodě P2. Hodnoty získané z numerické simulace vychází znatelně větší než hodnoty získané z experimentu. Zajímavý je rozdíl mezi jednotlivými turbulentními modely, kde dochází k poklesu trendu růstu koncentrace CO₂. Tento pokles nastává pro jednotlivé turbulentní modely v jinou dobu.



Obr. 7.1-1: Závislost koncentrace CO_2 v čase pro jednotlivé turbulentní modely a pro bod P2.

Pro lepší přehlednost byly dále porovnávány jen hodnoty z experimentu pro přístroj SprintIR a turbulentní model k- ϵ Realizable. Obrázek 7.1-2 zobrazuje průběh koncentrace CO₂ v čase pro bod P1 vlevo a bod P3 vpravo.



Obr. 7.1-2: Závislost koncentrace CO₂ v čase pro bod P1(vlevo) a P3 (vpravo).

Stránka | 60

V bodě P3 se sensor nacházel v ose hoření a byl připevněn ke stropu měřicí komory, kde čidlo bylo nasměrováno směrem dolu. Odchylka hodnot koncentrace CO₂ získaných z experimentu od hodnot z numerické simulace je podobná jako pro body P2 a P3.



Obr. 7.1-3: Závislost koncentrace CO₂ v čase pro bod P4.

Vzhledem k odchylce hodnot z numerické simulace od hodnot z experimentu, byl porovnán poměr hodnot z numerické simulace s hodnotami z experimentu pro měřené body. Jak lze vidět na obrázku 7.1-4, je poměr těchto hodnot pro body P2, P3 a P4 od jistého času konstantní.



Obr. 7.1-4: Průběh poměru hodnot z numerické simulace a z experimentu.

Jiné vyjádření odchylky hodnot z numerické simulace od hodnot z experimentu je zobrazeno na obrázku 7.1-5. Na grafu jsou porovnánu hodnoty pro bod P2. Odchylka hodnot je konstantní.



Obr. 7.1-5: Graf porovnání hodnot z numerické simulace a z experimentu pro bod P2.

Porovnání celkového množství CO_2 ve zkušební komoře je zobrazeno na obrázku 7.1-6. Hodnoty jsou brány pro celkové množství plynu CO_2 ve zkušební komoře. Hodnoty teoretického výpočtu jsou získány z rovnice pro ideální spalování etanolu, kde produkty reakce je pouze CO_2 a H₂O. Jde vidět, že oproti hodnotám z numerické simulace jsou hodnoty z teoretického výpočtu nižší. Z toho vyplývá, že při numerické simulaci vzniká více CO_2 v porovnání s teoretickým výpočtem a to přibližně 2,5 krát.



Obr. 7.1-6: *Graf porovnání teoretické hodnoty množství* CO_2 *a hodnoty z numerické simulace pro turbulentní model k-* ε *Realizable (vlevo) a poměr těchto hodnot (vpravo).*

Poměr hodnot z numerické simulace a z teoretického výpočtu je přibližně stejný. Lze tedy předpokládat, že odchylka je díky přepočtu hodnot směšovacího zlomku na hodnoty objemové koncentrace CO₂ z PDF tabulky. Program ANSYS Fluent má omezené možnosti, co se týče vstupních parametrů pro tvorbu PDF tabulky a změnou Stránka | 62 některých vstupních parametrů nebylo dosaženo snížení koncentrace CO₂ ve výpočetní doméně.

Další ověření matematického modelu bylo porovnání teploty plamene. Místo měření bylo zvoleno na základě výsledků z numerické simulace, kde nejvyšší teplota byla ve vzdálenosti 1,5 cm od středu nádobky. Výška měření byla zvolena s ohledem na velikost měřící sondy. Měření nebylo kontinuální, ale bylo provedeno v několika krátkých úsecích. To bylo z důvodu použití analyzátoru spalin pro měření teploty, který zároveň měří i složení spalin pomocí odsátí vzduchu z místa měření.

Graf na obrázku 7.1-7 zobrazuje průběh teploty směrem od středu nádobky s palivem pro čas t=360 s. Turbulentní modely k- ε mají stejný průběh teploty, oproti turbulentnímu modelu k- ω SST. Ten má místo s nejvyšší teplotou posunuté dále od středu než tomu je u modelů k- ε . Maximální teplota, ve výšce 3cm nad nádobkou, vychází pro turbulentní model k- ω SST mnohem menší než pro modely k- ε . Teplota změřená v měřící komoře je o 70 K vyšší než teplota získaná z numerické simulace.



Obr. 7.1-7: Závislost teploty na vzdálenosti od středu nádobky s palivem pro čas t=360s a výšku 3 cm nad nádobkou pro jednotlivé turbulentní modely.

V čase 360 s po zažehnutí paliva byl průběh teploty ve vzdálenosti od středu nádobky pro turbulentní modely k-ε stejný, ovšem průběh teploty v čase byl pro jednotlivé modely rozdílný. Graf na obrázku 7.1-8 ukazuje porovnání teploty pro turbulentní model k-ε Realizable a k-ε Standard, kde lze pozorovat pokles teploty a

následný růst během hoření. Tento pokles je z důvodu nestálosti plamene během hoření. U experimentu k takovým nestálostem nedocházelo, jediná nestálost byla v mírném pohybu plamene kolem středu.



Obr. 7.1-8: *Grafy závislosti teploty pro turbulentní model k-ε Realizable (vlevo) a k-ε Standard (vpravo).*

Kromě měření teploty plamene, byla měřena také rychlost proudění. Měření bylo provedeno termoanemometrickou sondou a byla měřena vertikální složka rychlosti. Místo měření bylo zvoleno 20 cm nad nádobkou z důvodu vysokých teplot v blízkosti plamene. Vzdálenost sondy od středu nádobky byla 2,5 cm.

Průběh rychlosti v čase je na obrázku 7.1-9, jsou zde vyobrazeny dva záznamy z měření. Na těchto dvou záznamech lze pozorovat, že v první polovině rychlost jen mírně osciluje a v druhé polovině je pohyb plamene výraznější. Vzhledem k použití symetrických podmínek v numerické simulaci, nelze tento jev v numerické simulaci zachytit. Průměrná rychlost byla spočtena ze všech provedených měření, nejen z měření zde vyobrazených.



Obr. 7.1-9: Průběh vertikální rychlosti v čase během experimentu.

Průběh rychlosti získaný z numerické simulace je na obrázku 7.1-10. Turbulentní modely k- ε RNG a k- ε Realizable mají shodný průběh rychlosti. Turbulentní model k- ε Standard má nižší maximální rychlost oproti ostatním modelům. Nejvyšší vertikální rychlost má turbulentní model k- ω SST, ale oproti ostatním modelům má mnohem strmější pokles rychlosti s rostoucí vzdáleností od středu nádobky.



Obr. 7.1-10: Závislost rychlosti na vzdálenosti od středu nádobky v čas 360 s pro jednotlivé turbulentní modely.

Další porovnávaný parametr byl charakter plamene. Plamen se při experimentu příliš neměnil, jak již bylo zmíněno výše, tak docházelo pouze k mírnému pohybu do stran. Tuto skutečnost lze přisoudit rozdílnému množství kyslíku v okolí plamene. Obrázek 7.1-11 zobrazuje charakter plamene získaný z numerické simulace a

z experimentu. Nejlepší shody dosáhl turbulentní model k- ε Realizable. Turbulentní model k- ω SST má největší strukturu plamene, kde výška je 4 násobná oproti turbulentním modelům k- ε .



Obr. 7.1-11: Charakter plamene získaný z experimentu a z numerické simulace.

Porovnání charakteru proudění ve zkušební komoře získaného z numerické simulace a z experimentu je na obrázku 7.1-12. Zde jde vidět, že charakter proudu je pro oba případy podobný.



Obr. 7.1-12: Charakter proudění v blízkosti plamene získaný z numerické simulace (vlevo) a z experimentu (vpravo).

7.2 Výsledky z numerické simulace

V této podkapitole jsou zobrazeny výsledky z numerické simulace pro spalování etanolu. Většina výsledků je pro turbulentní model k-ε Realizable. Průběh kontur objemové koncentrace v čase je zobrazen na obrázku 7.2-1. Díky tomu, že měřicí prostor nebyl zatížen dalším vstupem vzduchu, dochází k postupnému zaplnění měřicího prostoru plynem CO₂.



Obr. 7.2-1: Kontury objemové koncentrace plynu CO_2 v čase pro turbulentní model k- ε *Realizable.*

Kontury koncentrace CO v čase jsou zobrazeny na obrázku 7.2-2. Je zde vidět, že plyn CO se nešíří a je všechen zoxidován. Při experimentu byla maximální naměřená hodnota 50 ppmv CO u podlahy zkušební komory ve vzdálenosti 50 mm od nádobky s palivem a 12 ppmv v místě bodu P1.



Obr. 7.2-2: *Kontury objemové koncentrace plynu CO v čase pro turbulentní model k-ε Realizable.*

Kontury s vektory rychlosti v čase t=360 s jsou vyobrazeny na obrázku 7.2-3. Jde vidět, že k urychlení proudu dochází těsně nad plamenem a s rostoucí výškou dochází k postupnému zpomalování a rozšiřování jádra proudu. Dále lze pozorovat výskyt víru v horní části výpočetní domény.



Obr. 7.2-3: *Kontury rychlosti v čase t=360 s pro turbulentní model k-ε Realizable.*

Stránka | 68

7.3 Vliv sítě

Důležitý parametr při numerické simulaci je kvalita výpočetní sítě, kde v této práci byl testován vliv sítě na hodnoty koncentrace CO₂. Byla vytvořena nová síť s větším počtem elementů, označená jako síť 2. Síť 2 byla zjemněna zvětšením počtu elementů ve střední části. V blízkosti stěn a vstupu byl počet elementů shodný pro síť 1 a síť 2. Síť 1 má celkový počet elementů 130250 a síť 2 má celkový počet elementů 171550. Grafy na obrázku 7.3-1 zobrazují průběh koncentrace CO₂ v bodech P1 a P2. Vliv sítě na hodnoty koncentrace je zanedbatelný.



Obr. 7.3-1: Závislost koncentrace CO_2 v čase pro bod P1 (vlevo) a P2 (vpravo) a různé sítě.

7.4 Vliv časového kroku

Dalším testovaným parametrem byl vliv časového kroku na hodnoty koncentrace CO_2 . Předchozí studie byly počítány s časovým krok 0,5 s. Jak je patrné z obrázku 7.4-1 vliv časového kroku na hodnoty koncentrace CO_2 je zanedbatelný. Malá odchylka byla pouze pro časový krok 0,25 s a pro bod P1, v ostatních bodech se hodnoty prakticky nelišily. Turbulentní model použitý v této studii byl k- ϵ Realizable.



Obr. 7.4-1: Závislost koncentrace CO₂ v čase pro bod P1 (vlevo) a P2 (vpravo) a různé časové kroky.

Stránka | 69

8 Závěr

Tato diplomová práce se zabývá problematikou šíření znečišťujících látek v místnosti a možnosti využití CFD v této problematice. Nalezení matematického modelu popisujícího šíření znečišťující látky a jeho ověření s hodnotami získanými z experimentu byl hlavní cíl této práce. Numerické simulace byly provedeny v programu Ansys Fluent 15.

První část práce je věnována rešerši současných studií týkajících se právě využití CFD v problematice šíření znečišťujících látek. Poznatky z těchto studií byly použity pro nastavení numerické simulace a při návrhu zkušebního prostoru. Pro prvotní ověření matematického modelu byl vybrán případ šíření plynu SF₆, který řešil Ricciardi [1].

Matematický model, jehož základem je soustava bilančních rovnic popisující proudění vazké tekutiny, řeší jak šíření látek vzájemně nereagujících tak vzájemně reagujících. Tento model byl popsán ve třetí kapitole. Detailně byla popsána rovnice, která řeší transport znečišťující látky. Dále zde byly porovnány způsoby výpočtu koeficientu molekulární difuze, včetně srovnání hodnot získaných Ζ teoretického výpočtu s hodnotami z experimentu. Dva způsoby řešení členu produkce znečišť ující látky z důsledku chemické reakce, kde každý používá jiný princip výpočtu, byly uvedeny v podkapitole týkající se šíření vzájemně reagujících látek. Dále byl popsán jiný způsob řešení šíření reagujících látek a to model spalování předem nesmísené směsi. U tohoto modelu je klíčová předem vytvořená PDF tabulka, u které byla otestována citlivost na vstupní parametr, kterým byl horní limit hoření. Vliv tohoto parametru nebyl tak velký na hodnoty teploty a hodnoty koncentrace plynu CO₂, avšak daleko větší byl vliv na hodnoty koncentrace plynu CO.

Vlastní experiment pro spalování etanolu byl proveden na vlastnoručně vybudované zkušební komoře. V té byly měřeny nejen koncentrace plynu CO₂, ale také rychlost a teplota. Pro eliminaci chyby při měření byla ověřována hodnota relativní vlhkosti ve zkušební komoře, která během měření nepřekročila horní mez doporučeného rozsahu přístroje na měření koncentrace CO₂. Bylo pozorováno, že plamen je během spalování prakticky stálý a že dochází pouze k mírnému pohybu špičky plamene. Vizualizace proudění ve zkušební komoře byla posledním měřením, které bylo v rámci experimentu provedeno.
Pro případ nereagujícího proudu bylo dosaženo velmi dobré shody výsledků z numerické simulace s výsledky získanými z experimentu. Pro fázi vypouštění plynu SF₆ do místnosti byla dobrá shoda pro všechny turbulentní modely, ale pro případ reprezentující postupné snižování koncentrace plynu SF₆ v místnosti měl turbulentní model k- ω SST pozvolnější průběh koncentrace SF₆. Z toho vyplývá, že tento model není příliš vhodný pro případy, kdy dochází k postupnému snižování koncentrace znečišťující látky v místnosti. Jako nejlepší volba se jevil turbulentní model k- ε Realizable, který měl nejlepší shodu hodnoty výšky jetu z numerické simulace s hodnotou z teoretického vztahu. Turbulentní model k- ε RNG měl proměnnou výšku jetu v čase, což vedlo také k proměnné výšce oblasti s vyšší koncentrací znečišťující látky je použití isoploch koncentrace znečišťující látky, protože dávají nejlepší přehled o oblasti s vyšší koncentrací znečišťující látky je použití isoploch koncentrace znečišťující látky, protože dávají nejlepší přehled o vyší koncentrací znečišťující látky.

Případ, kdy byly měřeny hodnoty koncentrace při spalování etanolu, neměl tak dobrou shodu hodnot koncentrace plynu CO₂ získaných z numerické simulace a z experimentu. Hodnoty koncentrace z numerické simulace vycházeli přibližně 2,5 krát vyšší než ty z experimentu. Při ověření celkového množství plynu CO₂ bylo zjištěno, že hodnoty z numerické simulace jsou 2,5 krát větší než hodnoty teoretické koncentrace při ideálním spalování. Vykreslením poměru hodnot z numerické simulace a z experimentu bylo zjištěno, že poměr je v čase prakticky konstantní. Použitý matematický model predikuje správné šíření znečišťující látky, pouze vlivem modelu spalování dochází k nadměrné tvorbě plynu CO₂ při spalování. Tato chyba nemusí být v samotném modelu, ale může být do modelu vnesena vytvořenou PDF tabulkou. Program Ansys Fluent neposkytuje příliš možností pro ovlivnění hodnoty koncentrace plynu CO₂. Ověření matematického modelu nebylo jen z hlediska hodnot koncentrací CO₂, ale také porovnání teploty plamene, rychlosti proudění ve zkušební komoře a struktury plamene. Zde bylo dosaženo dobré shody mezi výsledky z numerické simulace a z experimentu. Nejlepší shody bylo dosaženo pro turbulentní model k-ɛ Realizable a k-ɛ RNG. Posledním porovnávaným parametrem byl obraz proudění ve zkušební komoře, kde charakter proudu při experimentu byl podobný tomu z numerické simulace.

Možné další pokračování zkoumání této problematiky by mohlo být otestování dalších paliv pro případ šíření znečišťujícího plynu po spalování nebo tvorba vlastní PDF tabulky. Dalším možným směrem by mohlo být otestování spalovacího modelu na reálné doméně, Tou by mohla být například kuchyně s plynovým sporákem. Otestování modelování turbulence metodou LES se jeví jako další směr v oblasti numerické simulace šíření znečištění v místnosti. Simulace postupného uvolňování znečišťující látky z konstrukčních materiálů budovy by mohla být další zajímavá oblast výzkumu.

Literatura

- L. Ricciardi, C. Prévost, L. Bouilloux, R. Sestier-Carlin "Experimental and numerical study of heavy gas dispersion in a ventilated room" J. Hazard. Mater. 152 (2008) 493-505.
- [2] CJ. Weschler "Ozone in Indoor Environments: Concentration and Chemistry" Indoor Air 10(2000) 269-288.
- [3] B. Deng, Ch. N. Kim "CFD simulation of VOCs concentrations in a resident building with new carpet under different venatilation strategies" Journal of Building and Environment 42 (2007) 297-303.
- [4] G. Einberg "Air diffusion and solid contaminant behaviour in room ventilation a CFD based integrated Approach" KTH Industrial Engineering and Management, 2005.
- [5] M. Siddiqui, S. Jayanti, T. Swaminathan "CFD analysis of dense gas dispersion in indoor environment for risk assessment" J. Hazard. Mater. 209-210 (2012) 177-185.
- [6] S. Sklavounos, F. Rigas Swaminathan "Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles" J. Hazard. Mater A108 (2004) 9-20.
- [7] J. Příhoda, P. Louda "Matematické modelování turbulentního proudění" Nakladatelství ČVUT, Praha. 2007.
- [8] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, J. P. OConnell. "The Properties of gases and liquids." McGraw-Hill, New York. 2001.
- [9] E. N. Fuller, K. Ensley, J. C. Giddings "Diffusion of Halogenated Hydrocarbons in Helium. The effect of structure oncollision cross sections" J. Phys. Chem. 73 (1969) 3679-3685.
- [10] T. R. Marrero, E. A. Mason "Gaseous Diffusion Coefficients" J. Phys. Chem. 1 (1972) 3-116.
- [11] H. J. Merk. "The Macroscopic Equations for Simultaneous Heat and Mass Transfer in Isotropic, Continuous and Closed Systems" Journal of Fluids Mechanics vol.5, 1959.
- [12] K. K. Y. Kuo. "Principles of Combustion" John Wiley and Sons, New York. 1986.

- [13] B. F. Magnussen a B. H. Hjertager "On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion" In 16th Symp. (Int'l.) on Combustion. The Combustion Institute. 1976.
- [14] B. F. Magnussen a B. H. Hjertager "On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow "In 16th Symp. (Int'l.) on Combustion. The Combustion Institute. 1976.
- [15] W. D. Baines, J. S. Turner, I. H. Campbell "Turbulent fountains in an open chamber" J. Fluid Mech. 212 (1990) 557-592.

Přílohy

Příloha A

Tabulka Lennard-Jonesových parametrů pro vybrané prvky a sloučeniny.

	σ[Å]	ε/k _b [K]		σ[Å]	ε/k _b [K]
Ar	3,542	93,3	Cl ₂	4,217	316,0
Kr	3,655	178,9	Br ₂	4,296	507,9
He	2,551	10,22	I ₂	5,160	474,2
Ne	2,820	32,8	СО	3,690	91,7
Xe	4,047	231,0	CO_2	3,941	195,2
H_2	2,827	59,7	N_2O	3,828	232,4
O ₂	3,467	106,7	NH ₃	2,900	558,3
N_2	3,798	71,4	H ₂ O	2,641	809,1
F ₂	3,357	112,6	SF ₆	5,128	222,1
SO ₂	4,112	335,4	Air	3,617	97,0

Příloha B

Tabulka atomových difuzních objemů pro vybrané prvky a difuzních objemů pro některé sloučeniny.

	Atomový difuzní		Atomový difuzní
	objem v _k 's [cm ³]		objem v _k 's [cm ³]
С	15,9	F	14,7
Н	2,31	Cl	21,0
0	6,11	Br	21,9
Ν	4,54	Ι	29,8
S	22,9		

	Difuzní objem ∑v _k 's		Difuzní objem ∑v _k 's
	[cm ³]		[cm ³]
He	2,67	СО	18,0
Ne	5,98	CO_2	26,7
Ar	16,2	N ₂ O	35,9
Kr	24,5	NH ₃	20,7
Xe	32,7	H ₂ O	13,1
H ₂	6,12	SF ₆	71,3
D ₂	6,84	Cl_2	38,4
N2	18,5	Br ₂	69,0
O ₂	16,3	SO_2	41,8
Air	19,7		

Příloha C

Grafy závislostí hustoty na výšce pro jednotlivé turbulentní modely pro případ nereagujícího proudu.





Stránka | 77





Příloha D

Grafy závislosti teploty v čase a vzdálenosti od středu nádobky pro případ spalování etanolu.









Příloha E

Reynoldsovo středování bilančních rovnic

Reynoldsovo středování veličin je založeno na statistickém přístupu. Tento přístup vychází z toho, že okamžitou hodnotu veličiny lze rozdělit na střední hodnotu a fluktuační složku. Rovnice níže popisuje toto rozdělení

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \tag{E-1}$$

kde $\overline{\phi}$ je střední hodnota a ϕ' je fluktuační složka. Nezávisí-li střední hodnota na volbě počáteční hodnoty času, tak se jedná o ergodický stacionární proces. Střední hodnotu pak získáme časovým středováním okamžité veličiny

$$\bar{\phi} = \lim_{\Delta t \to \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \phi(t) dt.$$
 (E-2)

V případě, že budeme středovat fluktuační složku, tak vyjde

$$\overline{\phi}' = \lim_{\Delta t \to \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \phi'(t) dt = 0.$$
(E-3)

Středovaná rovnice zachování hmotnosti pro stlačitelné turbulentní proudění má tvar

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \bar{u}_i + \overline{\rho' u'_i} \right) = 0$$
(E-4)

a rovnice zachování hybnosti

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \bar{u}_i + \overline{\rho' u'_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j + \bar{u}_i \overline{\rho' u'_i} \right) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\tau}_{ij} - \bar{u}_j \overline{\rho' u'_i} - \bar{\rho} \overline{u'_i u'_j} - \overline{\rho' u'_i u'_j} \right).$$
(E-5)

Výše uvedené rovnice obsahují výrazy s fluktuacemi hustoty, pro zjednodušení výpočtu se aplikuje Favrovo hmotnostně podmíněné středování definované výrazem

$$\tilde{u}_i = \frac{\overline{\rho u_i}}{\overline{\rho}},\tag{E-6}$$

kde \bar{u}_i je časově středovaná veličina a \tilde{u}_i označuje hmotnostně podmíněné středování. Okamžitou hodnotu lze pak získat

$$u_i = \tilde{u}_i + u'_i. \tag{E-7}$$

Úplný postup aplikace hmotnostně podmíněného středování na bilanční rovnice je popsán v publikaci od J. Příhody a P. Loudy [7].

Stránka | 81

Dosazení výše uvedeného vztahu za okamžité hodnoty dostaneme středovanou rovnici zachování hmotnosti

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0$$
(E-8)

a středovanou rovnici zachování hybnosti

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j) = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u'_{l}u'_{j}}).$$
(E-9)

Zavedením Boussinesqovy hypotézy o turbulentní vazkosti lze rozepsat člen $-\overline{\rho' u'_{l} u'_{l}}$ jako

$$-\overline{\rho u'_{l} u'_{l}} = \mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \overline{\rho u'_{k} u'_{k}}, \tag{E-10}$$

kde turbulentní viskozita je dána vztahem

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon}.$$
 (E-11)

Veličina k je turbulentní energie, ε je rychlost disipace a C_{μ} je modelová konstanta.

Příloha F

Turbulentní modely

k-ɛ Standard

Transportní rovnice pro kinetickou energii a disipaci kinetické energie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}k\tilde{u}_j) = P_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - \bar{\rho}\varepsilon,$$
(F-1)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\varepsilon\tilde{u}_j) = \frac{\varepsilon}{k}C_{\varepsilon 1}P_k + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right] - \frac{\varepsilon}{k}C_{\varepsilon 2}\bar{\rho}\varepsilon, \quad (F-2)$$

kde $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k , σ_ϵ jsou modelové konstanty a vztah pro produkci turbulentní energie je

$$P_{k} = \mu_{t} \left(\frac{\partial \tilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \tilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} \right) \frac{\partial \tilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho}k + \mu_{t} \frac{\partial \tilde{u}_{l}}{\partial x_{l}} \right) \frac{\partial \tilde{u}_{k}}{\partial x_{k}}.$$
 (F-3)

k-ε RNG

Transportní rovnice pro kinetickou energii a disipaci kinetické energie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}k\tilde{u}_j) = P_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{kRNG}} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - \bar{\rho}\varepsilon,$$
(F-4)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\varepsilon\tilde{u}_j) = \frac{\varepsilon}{k}C_{\varepsilon 1}P_k + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon RNG}}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right] - \frac{\varepsilon}{k}C_{\varepsilon 2}\bar{\rho}\varepsilon - R_{\varepsilon}, \quad (F-5)$$

kde vztah pro $R_\epsilon\, je$

$$R_{\varepsilon} = \frac{C_{\mu}\overline{\rho}\eta^3(1-\eta/4,38)}{1+\beta\eta^3}\frac{\varepsilon^2}{k},\tag{F-6}$$

k-ɛ Realizable

Transportní rovnice pro kinetickou energii a disipaci kinetické energie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}k\tilde{u}_j) = P_k + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right] - \bar{\rho}\varepsilon,$$
(F-7)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\varepsilon\tilde{u}_j) = \frac{\varepsilon}{k}C_{\varepsilon 1}P_k + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right] - \frac{\varepsilon}{k - \sqrt{\nu\varepsilon}}C_{\varepsilon 2}\bar{\rho}\varepsilon + \bar{\rho}\varepsilon SC_1. \quad (F-8)$$

Vztah pro turbulentní viskozitu

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon}.$$
 (F-9)

V tomto případě je C_{μ} funkce na rozdíl od předchozích dvou turbulentních modelů, kde se jednalo o konstantu. Vztah pro C_{μ} je

Stránka | 83

$$C_{\mu} = \frac{1}{A_0 + A_S \frac{kU^*}{\varepsilon}},\tag{F-10}$$

kde

$$U^* = \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \widetilde{\Omega}_{ij}\widetilde{\Omega}_{ij}},\tag{F-11}$$

$$\widetilde{\Omega}_{ij} = \overline{\Omega_{ij}} - \varepsilon_{ijk}\omega_k. \tag{F-12}$$

Modelové konstanty A0 a As jsou dány

$$A_0 = 4,04; \quad A_S = \sqrt{6}cos\phi,$$
 (F-13)

$$\phi = \frac{1}{3}\cos^{-1}\left(\sqrt{6}W\right),\tag{F-14}$$

$$W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\tilde{S}^3},\tag{F-15}$$

$$\tilde{S} = \sqrt{S_{ij}S_{ij}},\tag{F-16}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right).$$
(F-17)

k-ω SST

Transportní rovnice pro kinetickou energii a specifickou disipaci kinetické energie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}k\tilde{u}_j) = P_k + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right] - \beta^*\bar{\rho}k\omega,$$
(F-18)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\omega\tilde{u}_j) = \gamma \frac{\omega}{k} C_{\varepsilon 1} P_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] - D_\omega - \beta \bar{\rho}\omega^2, \quad (F-19)$$

kde turbulentní viskozita je vypočtena ze vztahu

$$\mu_t = \gamma^* \bar{\rho} \frac{k}{\omega},\tag{F-20}$$

modelová konstanta γ^* je rovna jedné. Pokud je zahrnuta úprava pro nízká Reynoldsova čísla, tak se jedná o funkci závislou na turbulentním Reynoldsově čísle, které lze vyjádřit jako

$$Re_t = \frac{\overline{\rho}k}{\omega\mu}.$$
 (F-21)