

**České vysoké učení technické v Praze
Fakulta strojní**



Disertační práce

2021

Ing. Vladimír Hric

**České vysoké učení technické v Praze
Fakulta strojní**



**Numerické řešení proudění mokré páry
s nerovnovážnou kondenzací**

Disertační práce

Autor: **Ing. Vladimír Hric**

Obor: **Matematické a fyzikální inženýrství**

Školitel: **doc. Ing. Jan Halama, Ph.D.**

Rok: **2021**

Prohlášení

Prohlašuji, že předkládanou disertační práci jsem vypracoval samostatně a použil pouze uvedené prameny a literaturu. Současně dávám svolení k tomu, aby tato práce byla umístěna ve vysokoškolské knihovně ČVUT a byla používána ke studijním účelům.

V Praze dne: 2. dubna 2021
Vladimír Hric

Poděkování

Rád bych na tomto místě poděkoval vedoucímu práce panu doc. Ing. Janu Halamovi za odborné vedení, cenné rady a podnětné připomínky při vzniku této práce.

Abstrakt

Disertační práce se zabývá matematickým modelováním a numerickým řešením problematiky proudění mokré páry s nerovnovážnou kondenzací ve 3D. Matematický model sestává z dvou hlavních částí. První část je systém nevazkých Eulerových rovnic popisujících vývoj směsi páry a rozptýlených kapek. Druhá část modelu je systém čtyř momentových rovnic popisujících bilanci kapalně fáze. Množství kapalně fáze je vyjádřeno pomocí objemového zlomku kapalně fáze, jenž je získán z jednoho momentu distribuční funkce pro velikost kapek. Objemový zlomek, případně jeho ekvivalent hmotnostní zlomek (vlhkost), je použit jako vazba mezi termodynamickými parametry směsi a parametry plynné a kapalně fáze.

Hlavním přínosem práce je implementace reálné stavové rovnice páry podle IA-PWS a její porovnání se stavovou rovnicí dokonalého plynu. Prodloužení výpočetního času z důvodu komplexní stavové rovnice je řešeno pomocí bi-kvadratické interpolace pro nezávislé parametry hustota a vnitřní energie. Reálná stavová rovnice je zohledněna ve výpočtu kritického poloměru kapek, rychlosti vzniku nových kapek kritické velikosti (nukleační rychlost) a modelu růstu kapek. Vybraný model pro růst kapek zohledňuje i různé režimy proudění z hlediska velikosti kapek (model kontinua a částicový model). V modelu byla použita klasická teorie nukleace.

Pro numerické řešení byla použita metoda konečných objemů prvního řádu v prostoru. Ve všech případech se počítalo stacionární řešení. Numerický tok byl počítán schématem HLLC. Časová diskretizace úplného systému rovnic byla realizována ve dvou krocích. V prvním kroku proběhla implicitní LU-SGS časová integrace pro konvektivní členy a ve druhém kroku proběhla explicitní Rungova-Kuttova metoda vyššího řádu přesnosti pro zdrojové členy. Pro numerické experimenty byl vyvinut vlastní software pro tento specializovaný typ proudění ve 3D na nestrukturovaných sítích (jazyk C).

Uvedený matematický model a způsob numerického řešení byl použit na vybrané případy proudění v dýzách a parních turbínách. Porovnání reálné a ideální stavové rovnice bylo ukázáno na nízkotlaké Barschdorffově dýze a vysokotlaké Bakhtarově a Gyarmathyho dýze. Pro proudění v turbínách byla použita Whitova geometrie lopatek pro nízkotlaké režimy. Výsledky simulací s reálnou stavovou rovnicí ukázaly větší shodu s experimentálním měřením než v případě ideální stavové rovnice.

Abstract

Presented dissertation is dedicated to mathematical modeling and numerical solution of wet steam flow with non-equilibrium condensation in 3D. Mathematical model consists of two parts. The first part is the system of inviscid Euler equations describing dynamics of mixture of steam and dispersed water droplets. The second part is composed of four moment equations approximating balance of liquid phase. Liquid phase dispersed in a mixture is represented by volume fraction, for which one of the moments is used. The same volume fraction or equivalently mass fraction is used for calculation of mixture thermodynamic properties.

The main contribution of the dissertation is implementation of real gas equation of state according to IAPWS releases and comparison of real gas and perfect gas models in CFD simulations. Implementing complex equation of state into CFD code results in the prolongation of computation time. Therefore, alternative calculation of real gas thermodynamic properties by means of bi-quadratic interpolation and table look-up method is used. Density and specific internal energy are used as independent variables in such calculation. Important quantities such as critical radius of droplets, droplet growth and nucleation of new droplets are consistently calculated by the real gas equation of state. Selected droplet growth model takes into account possibilities of different flow regimes in view of the droplets sizes (continuum model and free-molecular flow model). The so-called classical nucleation theory is used for estimating the rate of nucleation of new droplets.

Numerical model is based on finite volume method framework. In all cases we are interested in stationary state only. Numerical fluxes are calculated by HLLC scheme without linear or higher reconstruction. For the time evaluation we used time operator splitting method. The first time operator solves homogeneous convective part of equations by implicit LU-SGS scheme. The second and last time operator solves the source terms (nonhomogeneous part) part of equations by explicit Runge-Kutta method of higher order. To carry out numerical simulations in-house CFD code was developed. The code works on unstructured meshes with the basic elements.

Our mathematical model of condensing wet steam flow was validated on selected geometries of nozzles with available experimental data. Numerical solutions were carried out for one geometry of nozzle in low-pressure regime and two geometries in high-pressure regime. In the case of flow in turbines in low-pressure regime, the blade geometry provided by White is used. Obtained numerical results are in good qualitative accordance with experimental data. However, reliable nucleation and droplet growth model within wide pressure range still need improvement.

Obsah

1 Úvod	13
1.1 Téma práce a motivace	13
1.2 Cíle práce	14
1.3 Literární rešerše	15
1.3.1 Klasifikace dvoufázového proudění	15
1.3.2 Matematické modelování disperzního proudění	16
1.3.3 Kondenzace v dýzách	17
1.3.4 Kondenzace v parních turbínách	20
1.3.5 Popis stavového chování	23
1.4 Struktura práce	26
2 Kondenzace	27
2.1 Charakteristika fázového přechodu při kondenzaci	27
2.2 Energetická bilance a rovnováha heterogenního systému	29
2.3 Vývoj kapky a její kritická velikost	31
2.4 Práce při formování kapky a energetická bariéra	33
2.5 Nukleace	39
2.5.1 Klasická teorie nukleace	40
2.5.2 Rychlost nukleace	41
2.6 Růst kapek	44
3 Matematický model	53
3.1 Eulerovy rovnice pro reálný plyn	53
3.1.1 Konzervativní tvar	53
3.1.2 Nekonzervativní tvar s tlakem	57
3.1.3 Nekonzervativní tvar s entropií	58
3.2 Stavová rovnice	60
3.2.1 Obecně o stavové rovnici	60
3.2.2 Úplná a neúplná formulace stavové rovnice	61
3.2.3 Rovnice IAPWS-95 v úplné formulaci	61
3.2.4 Kubická rovnice v úplné formulaci	62
3.2.5 Rovnice pseudo-dokonalého plynu v úplné formulaci	63
3.2.6 Speciální stavová rovnice pro CFD	64

3.2.7	Interpolační metoda pro reálný plyn	65
3.2.8	Termofyzikální vlastnosti kapalné fáze	65
3.3	Eulerovy rovnice pro směs	67
3.4	Rovnice kapalné fáze	68
3.5	Finální model proudění	71
4	Numerické řešení	73
4.1	Metoda konečných objemů	73
4.2	Numerický tok - schéma HLLC	74
4.3	Časová diskretizace	79
4.3.1	Časová integrace systému konvekce	80
4.3.2	Časová integrace systému kondenzace	81
4.3.3	Algoritmus pro zdrojový člen	82
4.4	Okrajové podmínky	82
5	Výsledky numerických simulací	85
5.1	Výsledky s nízkým provozním tlakem	85
5.1.1	Barschdorffova dýza	85
5.1.2	Výsledky proudění v nízkotlaké turbíně - White	92
5.2	Výsledky s vyšším provozním tlakem	97
5.2.1	Bakhtarova dýza	97
5.2.2	Gyarmathyho dýza	101
6	Závěr	109
	Publikace autora	111
	Ostatní literatura	113

Seznam obrázků

- 1.1 Typický průběh veličin v dýze při proudění s kondenzací [13]. Plná čára je průběh statického tlaku (p/p_0). Jemnější čárkovaná čára je průběh podchlazení (ΔT). Hrubší čárkovaná čára je průběh rychlosti nukleace nových kapek (J). Čerchovaná čára představuje průběh vlhkosti (y). . . 18
- 1.2 Typický průběh expanze páry v dýze do metastabilní oblasti [55]. . . 19
- 1.3 Základní termodynamické parametry při vysokotlakém experimentu [39]. (1) parametry dodávané páry, vyšrafovaná oblast nahoře vlevo: stagnační podmínky na vstupu do dýz (2)-(4) expanzní křivka, (3) počátek nukleace, (5) oblast počátku nukleace v případě nízkých tlaků. 20
- 1.4 Ukázka porovnání spektra velikosti kapek v dýze a turbíně. 21
- 1.5 Příklad expanze páry v nízkotlaké turbíně (5 stupňů) [37]. V režimu mokré páry pracuje turbína plně v posledních dvou stupních a částečně ve 3. stupni. 22

- 2.1 Vyobrazení spinodálních křivek (jemnější čárkovaná čára) v rovnovážném diagramu vody. Rovnoběžná osa měrný objem, svislá osa tlak. Hrubší čárkovaná čára náleží reálné izobaro-izotermě. Metastabilní oblast pro vyznačenou izotermu je křivka (v)-(g). Převzato z [52], [69]. 29
- 2.2 Izolovaný heterogenní systém pro energetickou bilanci. (1) kapalná fáze, (2) pára. 30
- 2.3 Veličina $\ln(S)$ a její aproximace. Teplota 300 K. 34
- 2.4 Veličina $\ln(S)$ a její aproximace. Teplota 400 K. 35
- 2.5 Veličina $\ln(S)$ a její aproximace. Teplota 550 K. 36
- 2.6 Práce formování kapky v závislosti na poloměru kapky. Nízký tlak. Teplota 300 K. 37
- 2.7 Práce formování kapky v závislosti na poloměru kapky. Střední tlak. Teplota 400 K. 38
- 2.8 Práce formování kapky v závislosti na poloměru kapky. Vyšší tlak. Teplota 500 K. 38

2.9	Vyobrazení křivek v p-T diagramu vody: spinodální křivka (červená), praktický limit v metastabilní oblasti s rovnovážnou vlhkostí 5% (modrá), hranice platnosti speciální plynové rovnice IAPWS-95 s hustotou $\rho \leq 55 \text{ kg/m}^3$ (růžová), saturační křivka (černá), hranice platnosti rovnice plyné fáze IAPWS-97 (černá čerchovaná), křivka tání (černá tečkovaná). Zobrazení vybraných bodů v metastabilní oblasti (černá kolečka) pro tab. 2.1.	39
2.10	Rozměry molekuly vody.	40
2.11	Model interakce kapek s monomery podle Szilárda a Farkase.	41
2.12	Rychlost růstu kapek při nízkém tlaku.	49
2.13	Detail obr. 2.12.	49
2.14	Knudsenovo číslo při nízkém tlaku.	50
2.15	Rychlost růstu kapek při vyšším tlaku.	50
2.16	Detail obr. 2.15.	51
2.17	Knudsenovo číslo při vyšším tlaku.	51
3.1	Hustota kapalné fáze v závislosti na teplotě.	66
3.2	Entalpie kapalné fáze v závislosti na teplotě.	66
3.3	Entropie kapalné fáze v závislosti na teplotě.	67
3.4	Povrchové napětí vody v závislosti na teplotě.	67
3.5	Szilárdův-Farkasův model nukleace.	69
4.1	Numerický tok stěnou	75
4.2	Schéma HLLC	75
4.3	Godunovův rozklad	79
4.4	Stěna na hranici oblasti (barevně zvýrazněná) s vnějším normálovým vektorem \mathbf{n} . Buňka vlevo L uvnitř výpočetní oblasti. Virtuální buňka vpravo R (ghost cell).	83
5.1	Vyobrazení kanálu pro experimentální měření [20] (vlevo). Geometrie kanálu pro CFD výpočty s využitím symetrie (vpravo).	85
5.2	Barschdorffova dýza: Izočáry Machova čísla, zvuková čára $M = 1$ (tlustá plná čára), saturační oblast $S = 1$ (tlustá přerušovaná čára).	86
5.3	Barschdorffova dýza: Izočáry vlhkosti.	86
5.4	Barschdorffova dýza: Izočáry nukleačního čísla.	86
5.5	Barschdorffova dýza: Izočáry průměrného poloměru kapek.	87
5.6	Barschdorffova dýza: Průběh statického tlaku a průměrného poloměru kapek podél osy dýzy.	87
5.7	Barschdorffova dýza: Průběh teploty páry a objemového zlomku kapalné fáze podél osy dýzy.	87
5.8	Barschdorffova dýza: Průběh Knudsenova čísla v ose dýzy.	88
5.9	Kompresní faktor v ose dýzy.	89
5.10	Tlak v ose dýzy.	89

5.11	Teplota v ose dýzy.	89
5.12	Machovo číslo v ose dýzy.	90
5.13	Poloha sonické křivky ($M = 1$) a kolmé rázové vlny. Na pozadí použitá síť (2D nestrukturovaná trojúhelníková).	90
5.14	Hustota v ose dýzy.	90
5.15	Průběh statického tlaku vztaženého k stagnačnímu tlaku v ose dýzy. Detail v nukleační oblasti.	92
5.16	Průběh Machova čísla v ose dýzy. Detail v nukleační oblasti.	92
5.17	Průměrný poloměr kapek podél osy dýzy.	93
5.18	Průběh vlhkosti podél osy dýzy.	93
5.19	Skica testovacího zařízení (vlevo). Náhled geometrie lopatkového kanálu (vpravo).	93
5.20	Průběh statického tlaku na povrchu lopatky (vlevo). Detail (vpravo).	94
5.21	Machovo číslo. Zobrazení kontury $M = 1$	95
5.22	Vlhkost. Vyznačení saturační hranice $S = 1$	95
5.23	Průměrná velikost kapek [nm].	96
5.24	Kondenzační zóna. Izočáry nukleačního čísla.	96
5.25	Izočáry podchlazení $\Delta T > 0$	97
5.26	Skica geometrie dýz S, M a L v experimentu Bakhtara a Zidiho.	97
5.27	Schéma testovacího zařízení v experimentu Bakhtara a Zidiho.	98
5.28	Napočítané Knudsenovo číslo podél osy dýzy.	99
5.29	Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií S.	100
5.30	Průběh teplotní difference ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií S.	100
5.31	Průběh stupně přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií S.	101
5.32	Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií S.	101
5.33	Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií M.	102
5.34	Průběh teplotní difference ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií M.	102
5.35	Průběh stupně přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií M.	103
5.49	Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh Knudsenova čísla na horní stěně.	103
5.36	Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií M.	104
5.37	Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií L.	104
5.38	Průběh teplotní difference ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií L.	105
5.39	Průběh stupně přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií L.	105

5.40 Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií L.	106
5.41 Schéma testovacího zařízení (vlevo). Geometrie všech dýz (vpravo).	106
5.42 Řez výpočetní sítí pro numerický výpočet dýzy 4/B s podmínkami 20B.	107
5.43 Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Izočáry Machova čísla. Oblast $M = 1$ (plná křivka). Oblast $S = 1$ (přerušovaná křivka).	107
5.44 Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Izočáry vlhkosti.	107
5.45 Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Nukleační číslo.	107
5.46 Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Velikost kapek.	108
5.47 Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh tlaku a velikosti kapek na horní stěně.	108
5.48 Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh teploty páry a objemového zlomku kapalné fáze na horní stěně.	108

Seznam tabulek

2.2	Režimy proudění podle Knudsenova čísla.	46
2.1	Parametry v metastabilním stavu	52
4.1	Algoritmus výpočtu zdrojových členů	82
5.1	Seznam použitých stavových rovnic a jejich reziduální Helmholtzova funkce.	89
5.2	Porovnání časové náročnosti numerického výpočtu s různými stavovými rovnicemi.	90
5.3	Hodnoty vybraných parametrů.	91
5.4	Geometrické parametry dýz S, M a L.	98
5.5	Počítané případy. Okrajové podmínky.	98

Faint, illegible text, possibly bleed-through from the reverse side of the page. The text is arranged in several paragraphs and appears to be a formal document or report.

Použité značení

\dot{P}	rychlost expanze
J	rychlost nukleace; jakobián toku v nekonzervativní formulaci
r_c	kritický poloměr kapky
\dot{r}	rychlost růstu kapky
G	Gibbsův potenciál
P	statický tlak
S	entropie; reálný saturační poměr; rychlost vlny
T	termodynamická teplota
V	objem
Q	sdělené teplo
σ	povrchové napětí
A	povrch kapky
W	práce objemových sil; minimální práce pro vytvoření kapky
U	vnitřní energie
μ	chemický potenciál
n	látkové množství
r	poloměr kapky
γ	bezrozměrná Gibbsova energie
ρ_1, ρ_L	hustota kapalné fáze
v_1	molární hustota kapalné fáze
S°	ideální saturační poměr
L	latentní teplo kondenzace
T_0	saturační teplota
F	volná energie
W_V	objemová část práce při tvoření kapky
W_A	povrchová část práce při tvoření kapky
A_c	kritický povrch kapky
χ, y	vlhkost
z	kompresní faktor (poměr)
ρ_2, ρ_V	hustota parní fáze

N	počet molekul
N_c	kritický počet molekul
$C(N)$	koncentrace N-merů
I	výsledný tok molekul
$\varphi(N)$	kondenzační koeficient pro N-mer
$\epsilon(N)$	koeficient vypařování pro N-mer
r_N	poloměr kapky obsahující N molekul
K	kinetický činitel ve vztahu pro rychlost nukleace
C^e	rovnovážná koncentrace monomerů
J_{iso}	klasická (izotermická) rychlost nukleace
ξ_C	Courtneyho korekce nukleačního růstu
ξ_K	Kantrowiczova korekce nukleačního růstu
ν	pomocná proměnná v Kantrowiczovy korekci
α_r	součinitel přenosu tepla mezi kapkou a okolní párou
ρ_2, ρ_V	hustota parní fáze
\bar{l}	střední volná dráha molekul
d	průměr kapky
N_V	molekulární hustota páry
μ_V	dynamická viskozita páry
\bar{v}	střední rychlost molekul
Kn	Knudsenovo číslo
$f(N)$	četnost srážek monomerů s kapkou o velikosti N
$g(N)$	četnost ubývání monomerů z kapky o velikosti N
$\rho_{V,0,r}$	rovnovážná hustota par kapky
T_L	teplota kapky
p_0, p_{sat}	saturační tlak
T_0, T_{sat}	saturační teplota
h_V	entalpie páry
h_L	entalpie kapalné fáze
λ_V	součinitel teplotní vodivosti páry
\dot{r}_{fm}	rychlost růstu kapky v molekulárním režimu
\dot{r}_{cont}	rychlost růstu kapky v režimu kontinua
\mathbf{U}	vektor konzervativních proměnných
t	čas
x	normálový směr
y	tečná souřadnice
z	tečná souřadnice
\mathbf{F}	vektor toků konzervativních proměnných
u	normálová složka vektoru rychlosti
v, w	tečné složky vektoru rychlosti
E	celková energie
U_i	i-tá složka vektoru konzervativních proměnných
e	měrná vnitřní energie

A	Jacobiho matice normálového toku
α	derivace tlaku podle hustoty
β	derivace tlaku podle vnitřní energie
V	součet kvadrátů složek rychlosti
H	celková entalpie
λ	vlastní číslo; spektrální poloměr
a	rychlost zvuku
K	pravostranný vlastní vektor
W	vektor primitivních proměnných
L	levostranný vlastní vektor
A_i	vnější parametry homogenního systému
F_i	obecné označení stavové funkce
c_p°	izobarická měrná tepelná kapacita ideálního plynu
c_v°	izochorická měrná tepelná kapacita ideálního plynu
f	specifická Helmholtzova funkce
f°	ideální část Helmholtzovy funkce
f^r	reziduální část Helmholtzovy funkce
ϕ	bezrozměrná Helmholtzova funkce
κ	isentropický součinitel ideálního plynu
f_n	hustota distribuční funkce kapek s molekulami
δ	Diracova funkce
μ_k	k-tý moment distribuční funkce f
Q_k	k-tý specifický moment distribuční funkce f
ζ	objemový podíl kapalné fáze
S	zdrojový vektor
V_i	objem výpočetní buňky i
\hat{F}	numerický tok
R_i	reziduum buňky i
Δt_i	lokální časový krok buňky i
h_0	stagnační entalpie
s_0	stagnační entropie
p_0	stagnační tlak
T_0	stagnační teplota
J_{num}	nukleační číslo

Použité konstanty

$\mathcal{R} = 8.314 \text{ J/mol/K}$	univerzální plynová konstanta
$R = 461.5 \text{ J/kg/K}$	specifická plynová konstanta pro vodu
$k_B = 1.380649 \times 10^{-23} \text{ J/K}$	Boltzmanova konstanta
$m_1 = k_B/R = 2.9917 \times 10^{-26} \text{ kg}$	Hmotnost molekuly vody
$d_1 = 2.75 \times 10^{-10} \text{ m}$	srážkový kolizní průměr molekuly vody

Kapitola 1

Úvod

1.1 Téma práce a motivace

Dizertační práce se věnuje matematickému modelování proudění mokré páry s nerovnovážnou kondenzací. Jedná se o případ dvoufázového proudění. K nerovnovážné kondenzaci dochází při rychlé expanzi mokré páry v dýzách a turbínách, kde tato expanze je příliš rychlá na to, aby pára zkondenzovala na horní mezní křivce. Při nerovnovážné kondenzaci dojde k začátku kondenzace až při jistém stupni přesycení, tj. až v metastabilní oblasti. Kondenzace páry se v turbínách a podobných zařízeních negativně projevuje zejména přídatnými ztrátami a tím pádem nižší celkovou účinností turbíny. Dalším negativem je eroze lopatek proudem narážejících kapek na náběžné hraně lopatek. Eroze významně snižuje životnost lopatky a navíc může měnit geometrii hrdla lopatkového kanálu. Na povrchu lopatky se tvoří film kapaliny, který je tlačěn k odtokové hraně, kde se od povrchu lopatky odtrhává a dochází k vzniku větších sekundárních kapek. Z uvedených důvodů je při navrhování turbínových stupňů použití simulačních nástrojů modelující kondenzaci prakticky nutnost.

V práci uvažujeme zjednodušené režimy dvoufázového proudění. Uvažujeme nevazké proudění a tedy systém Eulerových rovnic popisující časoprostorový vývoj proudění ve zkoumané výpočetní oblasti. Dalším zjednodušením je především jednotný tlak směsi a společná rychlost proudění nezkondenzované páry a kapalné vody. Toto zjednodušení vede na model proudění sestávající z Eulerových rovnic pro mokrou páru (směs) a dodatečném systému popisující bilanci kapalné fáze. Výhodou je, že všechny numerické postupy platné pro jednofázový Eulerův systém můžeme použít i pro dvoufázové proudění mokré páry. Odlišnost je pouze ve výpočtu termodynamických parametrů, kde musíme přidat závislost na dalším parametru. Nejčastěji je tímto parametrem vlhkost, tedy hmotnostní zlomek kapalné fáze, případně to je objemový zlomek kapalné fáze.

Termodynamický popis páry pomocí modelu dokonalého plynu lze realizovat pouze u přibližných výpočtů pro tlaky do maximálně 1 bar. Proto je tato práce také věnována implementaci vhodného modelu reálného plynu do matematického modelu proudění.

Nejpřesněji lze termodynamiku vody popsat sadou rovnic IAPWS (International Association for the Properties of Water and Steam). Tato implementace ale vnáší značné prodloužení výpočtů. Proto se v práci mimo implementace IAPWS zabýváme i rychlou metodou výpočtů termodynamických veličin pomocí interpolačních 2D spline funkcí. V práci je konkrétně použita bi-kvadratická interpolace.

Důležitou součástí dizertační práce byl vývoj vlastního CFD kódu implementujícího model nevazkého proudění mokré páry s nerovnovážnou kondenzací a reálnou termodynamikou tak, jak je popsáno v této práci. Software pracuje s nestrukturovanou sítí se základními 3D elementy typu čtyřstěn, prisma, pyramida a šestistěn. Ke generování sítí je použit volný nástroj Gmsh [34].

1.2 Cíle práce

Dizertační práce má tyto cíle

1. Implementovat stavovou rovnici reálného plynu do vlastního CFD kódu

Přesným popisem termodynamického stavu vody se zabývá organizace IAPWS. Pro model reálného plynu použijeme tzv. speciální rovnici pro plynnou fázi, která je součástí rovnic IAPWS-95. Tato rovnice je doporučena pro extrapolaci do metastabilní oblasti. Její implementace vnáší do rovnic nelinearitu. Nevyhneme se proto použití vhodné metody pro řešení soustavy nelineárních algebraických rovnic.

2. Porovnat stavovou rovnici dokonalého plynu s rovnicí reálného plynu

Cílem je porovnat proudové pole a parametry kapalně fáze pro tyto dva případy stavové rovnice.

3. Realizovat rychlejší výpočet termodynamických parametrů reálného plynu

Implementace stavové rovnice IAPWS sice přináší přesný popis termodynamiky páry, ale výpočetní čas se značně prodlouží. Cílem je proto použít rychlejší výpočet pomocí vhodné interpolace.

4. Analyzovat a zohlednit reálnou termodynamiku v modelech rychlosti nukleace a růstu kapek

Klasická teorie nukleace uvažuje model ideálního plynu. Uvedeme model nukleačního růstu, který zohledňuje kompresní faktor reálného plynu. Definujeme zde také saturační poměr pro reálný plyn.

5. Numerickými simulacemi porovnat výsledky použitého matematického modelu s dostupnými experimenty včetně oblastí s vyšším provozním tlakem

1.3 Literární rešerše

Problematika matematického modelování proudění s fázovým přechodem v průmyslových zařízeních jako jsou dýzy a turbíny je značně obsáhlá a zasahuje do několika oborů. Jedná se zejména o oblast termodynamiky fázových přechodů, teorii proudění v transonických režimech jak kontinua tak částic a pokročilou numerickou matematiku. Protože v našem případě dochází pouze k proudění směsi plynné a kapalné fáze, omezíme problematiku vícefázového proudění na dvě fáze a budeme mluvit o dvoufázovém proudění.

1.3.1 Klasifikace dvoufázového proudění

Mechanika tekutin a přenos tepla v případě dvoufázového proudění je mnohem komplikovanější než v jednofázovém případě. Problematiku komplikuje vzájemná interakce obou fází včetně fázového rozhraní. Navíc se v mnoha případech dostáváme za hranici platnosti modelu kontinua. U jednofázového proudění rozeznáváme tři základní režimy proudění. Jde o laminární režim, laminární režim s přechodem do turbulence a plně vyvinutý turbulentní režim. V dvoufázovém proudění je režimů, resp. typu proudění mnohem více. V základním dělení podle typů fází rozeznáváme dvoufázové proudění

- kapalná fáze + pevná fáze
- plynná fáze + pevná fáze
- plynná fáze + kapalná fáze

Podle struktury fázového rozhraní a topografie obou fází rozeznáváme tři standardní režimy dvoufázového proudění (konkrétní příklady k těmto režimům lze nalézt v monografii od Ishiio [46])

- separované proudění

Ve zkoumané oblasti jsou obě fáze jednoznačně rozlišitelné a jasně oddělené fázovým rozhraním. Výpočetní oblast je vždy striktně oddělena na oblast první fáze a oblast druhé fáze. Současný výskyt obou fází v dílčím výpočetním objemu je nepřipustná. V matematických modelech je vždy do určité míry zaveden samotný popis tohoto rozhraní. Běžně se používá buď metoda sledování rozhraní anebo metoda detekce rozhraní.

- smíšené (přechodové) proudění

V tomto případě je přesné zachycení fázového rozhraní náročné. Ustupuje se od toho a používá se zjednodušení ve formě jisté míry homogenizace dvoufázového proudění. Na rozdíl od separovaného proudění zde v libovolné části sledovaného objemu připouštíme přítomnost obou fází.

- disperzní proudění

Proudění mokré páry je právě příkladem disperzního režimu dvoufázového proudění. V nerovnovážném případě obsahují vždy popis podílu sekundární fáze v objemu celé směsi obou fází. Problematika proudění mokré páry s nerovnovážnou kondenzací spadá do tohoto typu proudění. Může se jednat jak o hmotnostní podíl (vlhkost) tak i o objemový podíl. Hustotu mokré páry ρ lze pomocí hmotnostního (χ) a objemového podílu (ζ) stanovit z jednotlivých hustot obou fází (kapalná ρ_1 , plynná ρ_2) pomocí těchto vztahů

$$\frac{1}{\rho} = \frac{\chi}{\rho_1} + \frac{1 - \chi}{\rho_2} \quad (1.1)$$

$$\rho = \zeta \rho_1 + (1 - \zeta) \rho_2 \quad (1.2)$$

Vazba mezi hustotou směsi a hustotou kapalně fáze je následující

$$\rho \chi = \rho_1 \zeta \quad (1.3)$$

Extenzivní termodynamické veličiny směsi jsou dány lineární kombinací veličin příslušných fází, kde koeficienty jsou hmotnostní podíly. Například entalpie směsi se stanoví tímto způsobem

$$h = \chi h_1 + (1 - \chi) h_2 \quad (1.4)$$

1.3.2 Matematické modelování disperzního proudění

V nejkompaktnějším případě potřebujeme odděleně pro každou fázi modelovat zákony zachování hmoty, hybnosti a energie. V eulerovském popisu se používá dobře známý systém Navierových-Stokesových rovnic, případně systém Eulerových rovnic pro nevazké proudění. Vazba mezi parametry fází a směsi je obvykle prostřednictvím vlhkosti.

- Jedno-tekutinový rovnovážný model

Jedná se o nejjednodušší model modelování kondenzace. Je tvořen systémem zákonů zachování pro hmotu, hybnost a energii směsi (mokrě páry). Nejsou použity žádné dodatečné rovnice pro kapalnou fázi. Předpokládá se, že při dosažení saturační křivky dochází k okamžité kondenzaci bez prodlevy. S určitou modifikací jsme tento model použili v této práci [1].

- Dvou-tekutinový nerovnovážný model (two-fluid model)

Jedná se o nejkompaktnější model v eulerovském přístupu. Tím, že pro každou fázi se používá vlastní systém zákonů zachování, lze modelovat i rozdílnou rychlost kapek a páry. Běžnou praxi je používat jednotný tlak pro obě fáze. Tento model použit v práci Dykase a Wróblewskeho [27], [28], [84].

- Jedno-tekutinový nerovnovážný model (one-fluid model, mixture model)

V tomto případě je pohybová a energetická rovnice pro obě fáze tvořících směs společná. Nejčastěji i rovnice kontinuity je rovněž společná pro celou směs. Výsledná soustava rovnic pro směs je doplněna o další rovnice modelující vývoj podílu jedné fáze ve směsi. Kvůli požadavkům na vysokou robustnost a nižších nároků na výpočetní výkon je právě tento přístup používán v CFD výpočtech komplikovaného proudění v turbínách a podobných zařízeních. V reálných výpočtech se model neobejde bez modelování turbulence.

Detailní porovnání jedno-tekutinového a dvou-tekutinového modelu je provedeno například v práci Younga [88], Wróblewského a Dykase [85]. Největším rozdílem obou metod je v predikci velikosti kapek. Ve výpočtech turbínových stupňů obvykle jedno-tekutinový model dával kapky zhruba o 40% menší než v případě dvou-tekutinového modelu. Co se týká tlakového pole a polohy počátku kondenzace, oba dva modely poskytují podobné výsledky. Zhruba stejné hodnoty byly dosahovány i pro hodnoty vlhkosti.

Jedno-tekutinový nerovnovážný model

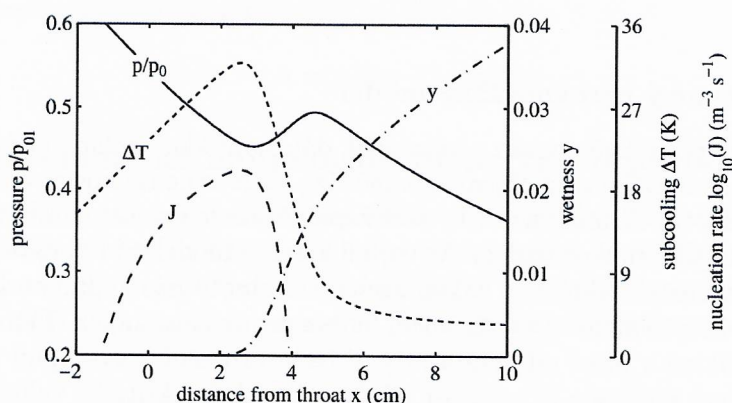
Tento model je podrobně popsán v knize [68], dále například v článku od Younga [88]. Obvykle se zanedbává vlastní objem kapalné fáze. Dále se neuvažuje povrchová energie jednotlivých kapek. Termodynamický stav kapalné fáze je vyhodnocován v saturačním stavu, obvykle jako funkce teploty. Vývoj vlhkosti je modelován dodatečnou rovnicí, případně rovnicemi. Jedná se o zákon zachování hmoty pro kapalnou fázi ve tvaru rovnic zachování pro momenty distribuční funkce pro velikost kapek. Tyto rovnice jsou uvedeny například v práci od Whita [81]. V těchto rovnicích vystupují signifikantní veličiny rychlost nukleace J , rychlost nárůstu kapek \dot{r} a kritická velikost kapek r_c . Pro tyto tři veličiny je nutné dodat vhodný vztah. Nejproblematictější je model růstu kapek, jelikož na pravých stranách momentových rovnic se vyskytují integrály v jejichž argumentech je vztah pro \dot{r} obsažen. Nejjednodušší způsob je implementace konstantní funkce pro růst kapek (výpočet průměrné velikosti). Složitějším přístupem je ponechat obecný vztah pro růst kapek a integraci provést numericky pomocí množiny vybraných poloměrů kapek. Tento druhý přístup je ukázán v práci Gerbera [33].

1.3.3 Kondenzace v dýzách

Nižší provozní tlaky

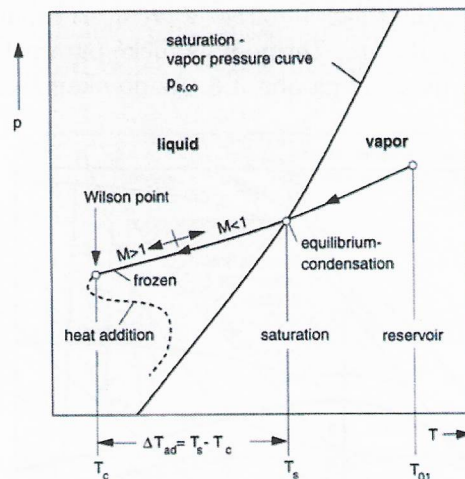
Na obr. 1.1 je typický průběh vybraných fyzikálních veličin podél osy dýzy při proudění s nerovnovážnou kondenzací. Na vstupu do dýzy je pára obvykle v přehřátém stavu. V dýze dochází k postupnému urychlování proudu. Při nadzvukovém výstupu má dýza konvergentní vstupní část a divergentní výstupní část. Ve vstupní části je

expanze podzvuková, ve výstupní části dochází k nadzvukové expanzi. Přidruženým jevem urychlování proudu je kontinuální pokles tlaku. Při určité teplotě tlak klesá pod saturační hodnotu tlaku při této teplotě a z hlediska termodynamického stavu se proudící médium dostává do metastabilní oblasti, viz obr. 1.2. Z důvodu rychlé expanze a existence energetické bariéry dochází k počátku kondenzace ve formě nukleace kapek kritické velikosti až při dostatečně velkém podchlazení. V dýzách je toto maximální podchlazení kolem 30 K. Pokud na vstupu je pára suchá, dojde k začátku kondenzace obvykle ve výstupní části. Při adiabatickém proudění dojde fázovým přechodem k uvolnění latentního tepla, které je následně absorbováno párou. Důsledkem je zvýšení teploty páry, zbrzdění proudu a nárůst tlaku. Pro tento nárůst tlaku se často používá pojem kondenzační ráz. Nárůstem tlaku a teploty spěje proudící pára k rovnovážnému stavu. Místo maximálního podchlazení se nazývá Wilsonův bod. Wilson byl první, který experimentem potvrdil podchlazení páry [83]. Wilsonův bod nemusí odpovídat maximálnímu nukleačnímu růstu ani minimálnímu tlaku. Poloha tohoto bodu závisí při daných vstupních podmínkách na rychlosti expanze $\dot{P} = -d(\ln p)/dt$. Průběh tlaku v místě kondenzace ovlivňuje rychlost nukleace nových kapek a jejich následný růst do makroskopických rozměrů. Čím je růst již existujících



Obr. 1.1: Typický průběh veličin v dýze při proudění s kondenzací [13]. Plná čára je průběh statického tlaku (p/p_0). Jemnější čárkovaná čára je průběh podchlazení (ΔT). Hrubší čárkovaná čára je průběh rychlosti nukleace nových kapek (J). Čerchovaná čára představuje průběh vlhkosti (y).

kapek rychlejší, tím je i rychlejší návrat do rovnovážného stavu. Zkrácení tohoto času má dále za důsledek zpomalení rychlosti vzniku nových kapek v metastabilní oblasti. Důsledkem je pak menší počet kapek, jež ale mají větší velikost. Správné zachycení průběhu tlaku a velikosti kapek v porovnání s experimentálním měřením je jedním z hlavních cílů vývoje matematických modelů proudění s kondenzací. Při snižování teploty na vstupu do dýzy dojde k posunutí počátku kondenzace ve směru



Obr. 1.2: Typický průběh expanze páry v dýze do metastabilní oblasti [55].

proti proudu (směrem k vstupní hranici) a nárůst tlaku v důsledku kondenzace bude mít strmější průběh. Při dalším snižování vstupní teploty může docházet i k oscilacím, jež mají praktický význam hlavně při proudění v turbínách. Oscilacím při proudění s kondenzací se věnuje např. práce [10]. Nukleační zóna se obvykle definuje jako zóna kde $J \in [0.01, 1] J_{max}$. Hodnota nukleačního růstu J je úměrná počtu vzniklých kapek, zatímco hodnota rychlosti růstu \dot{r} ovlivňuje hodnotu vlhkosti (hmotnostního zlomku kapalně fáze). Dříve vzniklé kapky v nukleační zóně jsou exponovány v metastabilním prostředí po delší dobu než kapky vzniklé později, proto i jejich velikost na výstupu z dýzy je větší. Nutno poznamenat, že při dostatečně nízkých teplotách a tlacích byly provedeny i experimenty s nukleací v oblasti pevné fáze (tvorba ledu), viz [80].

G. Hill ve své práci [41] uvedl 1D model proudění včetně analýzy modelu růstu kapek. Se svým modelem dosáhl dobré shody s dříve provedenými experimenty.

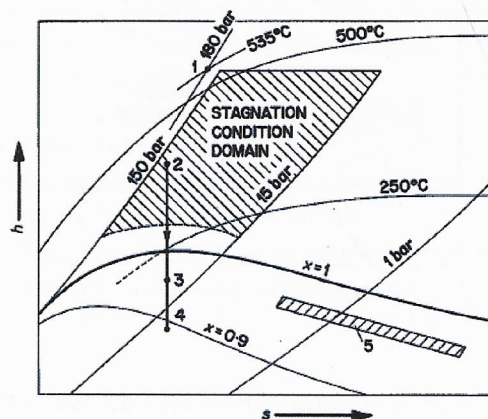
Vyšší provozní tlaky

Impulz pro experimentální zkoumání kondenzace v dýzách při vyšších provozních tlacích vzešel z potřeby zvyšování účinnosti parních turbín v jaderných elektrárnách.

Guo a kol. [36] provedli jako první experimentální měření v dýze s podzvukovým režimem na výstupu a při vyšším tlaku (stagnační vstupní hodnota tlaku byla 35 až 62 bar). Následně tyto experimenty použili pro validaci numerických modelů v 1D a 3D. Jak zdůrazňují, pára v těchto zařízeních vstupuje již saturovaná případně pouze mírně v přehřátém stavu. Z toho důvodu dochází ke kondenzaci mnohem dříve než u případů s nižším tlakem. Navíc, protože jsme na začátku expanze, proudění zůstává

podzvukové. Geometrie dýzy je podobná s Gyarmathyho experimentem [38].

Gyarmathy provedl experimentální měření proudění mokré páry v dýzách při vyšších tlacích v [39], [38]. Hodnoty vstupního stagnačního tlaku dosahovali hodnot až 150 bar. Počátek nukleace v přesycené oblasti byl pozorován v pásmu 3.5 – 5 % rovnovážné vlhkosti při rozsahu tlaků 5–50 bar a rychlosti expanze 10000–200000 s⁻¹. Velikost kapek byla řádově 10⁻⁸ m. Termodynamické parametry s expanzní křivkou v tomto experimentu jsou uvedeny na obr. 1.3. Až do okamžiku nukleace je proudění



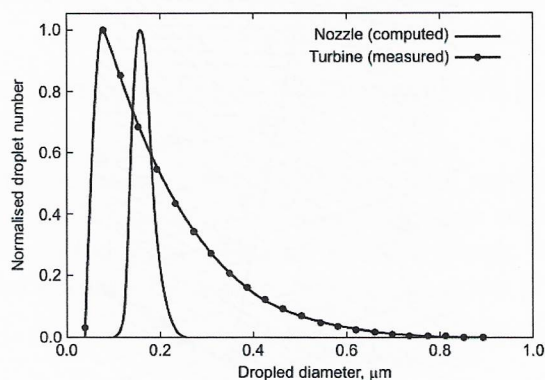
Obr. 1.3: Základní termodynamické parametry při vysokotlakém experimentu [39]. (1) parametry dodávané páry, vyšrafovaná oblast nahoře vlevo: stagnační podmínky na vstupu do dýzy (2)-(4) expanzní křivka, (3) počátek nukleace, (5) oblast počátku nukleace v případě nízkých tlaků.

isentropické. V nukleační oblasti dochází k mírnému nárůstu entropie (na obr. 1.3 není tento nárůst rozeznatelný). Dále od nukleační oblasti ve směru proudu je expanze opět isentropická. Numerické simulace pro tento experiment provedl například Azzini v [16] a Furusawa v [32]. V obou případech použili jedno-tekutinový matematický model se 4 dodatečnými rovnicemi pro kapalnou fázi.

1.3.4 Kondenzace v parních turbínách

Kondenzační parní turbína je klíčový komponent elektráren různého typu, kde slouží ke konverzi energie. Jde např. o elektrárny jaderné, uhelné a plynové. V posledních letech je zvýšený zájem o budování elektráren s obnovitelným zdrojem energie (biomasa, geotermální, solární a jiné). I v těchto typech elektráren ale parní turbína zůstává a přispívá hlavním dílem k výsledné účinnosti elektrárny. Uhelné elektrárny si i navzdory environmentálním problémům drží nadále dominantní postavení v Evropě i ve světě. Přítomnost kondenzačních oblastí stěžuje výpočet účinnosti a spolehlivosti parní turbíny.

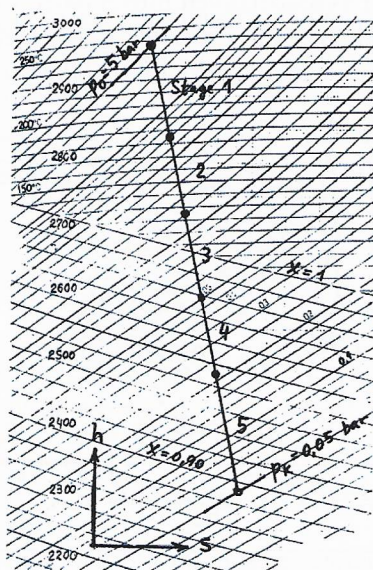
Proudění v nízkotlakých i vysokotlakých dílech parní turbíny je značně odlišné od proudění v geometricky mnohem jednodušších dýzách. Jenom pro porovnání na obr. 1.4 je ukázka spektra velikosti kapek v dýze a nízkotlaké turbíně, viz [68], [89]. Zatímco



Obr. 1.4: Ukázka porovnání spektra velikosti kapek v dýze a turbíně.

výstupní vlhkost je u dýz většinou nepřevyšuje 5% u vysokotlakých turbín jaderných elektráren to může být i 18%. Proudění v turbínových stupních je silně nestacionární a tří-dimenzionální. Tato skutečnost značně komplikuje experimentální zkoumání, jenž je časově i ekonomicky velmi nákladné. Z toho důvodu je zkoumání pomocí numerických simulací velmi důležité. Proudící pára přechází do metastabilní oblasti v nízkotlakové části. Obvykle to jsou poslední 2-3 stupně turbíny v případě nízkotlakých turbín. V případě vysokotlakých turbín mohou v metastabilní oblasti být dokonce všechny stupně turbíny. Poslední stupně se vyznačují velmi dlouhými lopatkami, kdy délka přesahuje 1m. Obvodová rychlost těchto lopatek je pak nadzvuková. Nadzvukové proudové pole je citlivé na uvolnění latentního tepla při kondenzaci. Kondenzace může potom významně měnit strukturu rázových vln a může být příčinou vzniku oscilací. V proudovém poli dochází k primární a sekundární kondenzaci. K primární kondenzaci dochází přechodem rychle expandující páry do metastabilní oblasti, kde v objemu páry (případně na nečistotách) vznikají menší kapky. Velikost kapky je zhruba $(1 - 2) \mu m$. Tyto kapky se vyznačují tím, že jsou unášeny proudem páry. Nicméně v místech s větším zakřivením proudnic dochází k odtrhnutí některých kapek (max. 10%) od hlavního proudu a jejich ulpívání na povrchu lopatek. Vznikají tak vodní filmy a jejich rozpad je příčinou sekundární kondenzace. Sekundární kapky jsou mnohem větší než primární. Jejich velikost bývá v desítkách až stovkách μm . Sekundární kapky také nesledují hlavní proud a dopadají na lopatky rotoru, které se pohybují často nadzvukovou rychlostí. Způsobují tím jejich mechanickou erozi, což má za následek významné zkrácení životnosti lopatky. K erozi dochází zejména na náběžné hraně v okolí sací strany. Aktivní ochrana proti vzniku sekundárních kapek spočívá v odsávání vodních filmů. Pasivní ochrana spočívá např. v různých návarech odolných vůči mechanickému poškozování. Tyto návary se dělají na špičkách lopatek.

Tímto přináší změnu geometrie lopatkového kanálu a následně i změnu v proudovém poli. Typický průběh expanze v Mollierovém diagramu pro 5-stupňovou nízkotlakou turbínu je na obr. 1.5.



Obr. 1.5: Příklad expanze páry v nízkotlaké turbíně (5 stupňů) [37]. V režimu mokré páry pracuje turbína plně v posledních dvou stupních a částečně ve 3. stupni.

Prvním kdo důsledně popsal problematiku proudění mokré páry v turbínách byl Gyarmathy. Jeho dizertační práce [37] přinesla důležité vztahy pro výpočet energetických ztrát, model růstu kapky, aproximativní výpočet termodynamických parametrů kapalné fáze v metastabilní oblasti a další. Další významná práce pokrývající širší rozsah v dané problematice je monografie Moora a Sieverdinga [58]. Mimo nezbytné termodynamiky se v ní autoři zabývají experimentálním měřením v dýzách a turbínách. Je zde také popsán kompletně matematický model v 1D případě.

Kondenzační ztráty

Kondenzační ztráty (ztráty vlhkostí páry) jsou jedním z mnoha typů energetických ztrát při proudění páry v turbínových stupních. K vytvoření této ztráty dochází při tepelné a mechanické interakci mezi kapalnou a plynnou fází.

Celková ztráta vlhkosti páry je tvořena těmito dílčími ztrátami, viz [61]

- Termodynamická ztráta při fázové přeměně (přenosem hmoty, přenosem tepla a samotnou nukleací)
- Odporová ztráta vzniklá třením mezi primárními a sekundárními kapkami a párou

- Ztráta dopadem velkých kapek na rotující lopatky
- Ztráta urychlením sekundárních kapek okolní párou
- Ztráta odstředěním sekundárních kapek ve formě vodního filmu směrem od osy hřídele
- Ztráty nepřímo způsobené vlhkostí (změna charakteru proudového pole, rázových vln a pod.)

Z těchto dílčích ztrát se na celkové ztrátě vlhkosti podílí největší mírou termodynamická ztráta. Nejdůležitější parametry z hlediska vlivu na celkovou ztrátu vlhkosti jsou hodnota vlhkosti a především spektrum velikosti kapek. K vyčíslení ztráty od vlhkosti η_w se používá klasický Baumannův empirický vztah [21]

$$\eta_w = \eta_d(1 - \alpha_B y_m) \quad (1.5)$$

kde η_d je účinnost bez vlivu kondenzace, y_m je střední vlhkost získaná vhodným způsobem a α_B je Baumannův faktor. Podle nejnovějších zkoumání se hodnota Baumannova faktoru pohybuje v rozmezí (0.4–2.5), viz např. [61], [50]. Dlouho se při návrzích turbínových stupňů používala hodnota $\alpha_B = 1$, tedy každé procento vlhkosti přispívá jedním procentem ke snížení celkové účinnosti. Kromě experimentálních měření za účelem vyhodnocení ztrát se ve velké míře uplatňují čitě numerické experimenty. Příkladem je např. práce J. Starzmana [73].

Práce věnované numerickým simulacím s přechodovým modelem

S. Dykas a kol. ve své publikaci [26] použili systém nevazkých Eulerových rovnic pro popis proudění mokré páry jako směsi. Tento systém doplnili o další 2 rovnice pro vlhkost a počet kapek. Navíc přidali i třetí rovnici, ve které modelovali heterogenní kondenzaci při předem definované koncentraci sférických nečistot se známou velikostí. Tyto tři dodatečné rovnice představují systém zachování hmoty pro kapalnou fázi. Tímto modelem nelze modelovat velikostní spektrum kapek, získá se vždy pouze jedna průměrná velikost (mono-disperzní model). Jako stavovou rovnici pro páru použili vlastní přístup ve formě tzv. lokální reálné stavové rovnici. Výchozí rovnice je pro kompresní faktor a má dva členy. Ostatní veličiny se získají přístupem, který je popsán i například v této monografii [60]. V práci použili klasickou teorii nukleace doplněnou o Youngův model růstu kapek. Teplota kapek byla modelována algebraickou rovnicí podle Gyarmathyho. Jako validační příklad použili Whitovu lopatku statoru [82] v nízkotlakém režimu.

1.3.5 Popis stavového chování

Nejjednodušší přístup v podobě stavové rovnice ideálního plynu, případně o něco složitější v podobě kubické stavové rovnice nelze při numerických simulacích s mokrou

párou spolehlivě použít. Při nízkých tlacích se dlouhou dobu při výpočtech turbínových stupňů akceptoval přístup s tzv. náhradním plynem. Je to model ideálního plynu s přepočítanými konstantami podle konkrétních okrajových podmínek. S rozvojem výpočetní techniky se už v současnosti používají pouze specializované stavové rovnice umožňující počítat termodynamické parametry s přesností srovnatelnou s chybou měření získaných experimentálních dat. Eliminace nejistoty ve výpočtech termodynamických parametrů je velmi důležitým požadavkem při posuzování jiných nejistot obsažených např. v modelu nukleace a růstu kapek. Dříve to byla například viriální stavová rovnice se dvěma viriálními koeficienty B a C pro kompresní faktor $z = p/(\rho RT)$ dle Vukaloviče, viz monografie [76]. Podobnou rovnici použil Young [86] s novým tvarem pro třetí viriální koeficient.

Nejpřesnější stavová rovnice pro vodu byla vytvořena asociací IAPWS. Nejdříve to byla rovnice IAPWS-95 ([79], [64]) pro dvojici nezávislých proměnných hustota a teplota (ρ, T) . Výhodou je její použitelnost v celé oblasti kapalně a plynné fáze. Nevýhodou značná výpočetní náročnost. Později byla tato rovnice přetransformována do nezávislých proměnných tlak a teplota (p, T) s pouze celočíselnými exponenty, čímž se výpočetní náročnost o něco snížila, zatímco chyba vzrostla jenom nepatrně. Tato sada stavových rovnic IAPWS-97 ([77], [65], [78]) je rozdělena do několika oblastí. V našem případě je nejdůležitější oblast 1 pro kapalnou fázi, oblast 2 pro plynnou fázi a oblast 3 pro kapalnou i plynnou fázi. V metastabilní oblasti za horní mezní křivkou nejsou k dispozici experimentální data. Z toho důvodu se spoléhá na extrapolaci rovnice přehřáté páry do oblasti mokré páry. Bakhtar [17] ukázal, že viriální rovnice je vhodnější pro extrapolaci do metastabilní oblasti než rovnice typu IAPWS-95, která v metastabilní oblasti vykazuje nefyzikální chování. Proto byla v rámci IAPWS-95 vyvinuta speciální stavová rovnice pro oblast plynu a metastabilní oblast. Její použitelnost je omezena zejména maximální hustotou $\rho = 55 \text{ kg/m}^3$. Na saturační křivce tomu odpovídá přibližně tlak $p = 99.3 \text{ bar}$ a teplota $T = 583.6 \text{ K}$. Nad touto hustotou se dá použít původní rovnice IAPWS-95. V případě IAPWS-97 existuje transformovaná verze speciální plynové rovnice IAPWS-95 s omezením na maximální tlak $p = 100 \text{ bar}$. Nad tímto tlakem je doporučeno použít výchozí rovnici pro oblast 2. Jak už bylo řečeno, velkou nevýhodou těchto komplexních rovnic je jejich výpočetní náročnost. Tato náročnost se projevuje jednak přímo v explicitním výpočtu jednotlivých parametrů a jednak nepřímo ve formě nutnosti používat řešiče nelineárních algebraických rovnic (např. Newtonova metoda).

V nejideálnějším případě potřebujeme v CFD výpočtech implementovat stavovou rovnici pro nezávislou dvojici hustota a vnitřní energie (ρ, e) . Tuto ideální sadu nezávislých proměnných použil J. Hrubý a představil novou stavovou rovnici pro bezrozměrnou entropii, viz [45]. Z tohoto termodynamického potenciálu lze pouhými derivacemi získat ostatní veličiny podobně jako tomu je u bezrozměrné volné energie (IAPWS-95) a bezrozměrné volné entalpii (IAPWS-97). Oblast použitelnosti je omezena minimální entropií $s = 7.5 \text{ kJ/kgK}$. Této hodnotě entropie odpovídá na horní mezní křivce zhruba tlak $p = 0.66 \text{ bar}$ a teplota $T = 361.4 \text{ K}$. Proto je její

použitelnost omezena pouze na nízkotlaké výpočty. Pro oblast vyšších tlaků vyvinul Hrubý hybridní přístup ve tvaru kvadratické spline interpolace pro vnitřní energii a analytické funkce pro hustotu, viz [44]. Pro tuto metodu je oblast platnosti až do minimální entropie $s = 5.6 \text{ kJ/kgK}$, čemuž odpovídají tyto hodnoty na horní mezní křivce: $p = 10.2 \text{ bar}$, $T = 585.9 \text{ K}$.

O předchozím způsobu výpočtu mluvíme jako o výpočtu pomocí globální funkce, která se dá použít v celém svém rozsahu platnosti. V současnosti je nejrychlejším způsobem výpočtu tzv. výpočet pomocí tabulek, tj. použití lokálních funkcí. Jejich výrazným způsobem uměle zmenšená oblast platnosti dovoluje zjednodušení funkčních vztahů. Oblast v rovině nezávislých proměnných (vhodně transformovaných) se rozdělí do několika podoblastí, přičemž v každé takové dílčí oblasti jsou uchovány lokální parametry nutné pro výpočet pomocí spline interpolace, případně pomocí aproximace Taylorovým rozvojem. Druhý zmiňovaný případ byl vypracován Miyagawou a Hillem, viz [56], [57], s označením TTSE (Tabular Taylor Series Expansion Method). Tato metoda byla použita v Dentnovém CFD kódu, viz [42]. V každé buňce (i, j) jsou uchovány koeficienty Taylorova rozvoje až do druhého řádu (celkem 6 koeficientů)

$$\begin{aligned} z(x, y) = & z_{i,j} + \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_{i,j} (x - x_i) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} \right)_{i,j} (x - x_i)^2 \\ & + \left(\frac{\partial z}{\partial y} \right)_{i,j} (y - y_j) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 z}{\partial y^2} \right)_{i,j} (y - y_j)^2 \\ & + \left(\frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} (x - x_i)(y - y_j) \end{aligned} \quad (1.6)$$

Aproximace se provádí kolem středu buňky. Nevýhodou metody je nespojitost derivací na hranicích lokálních buněk, což za jistých okolností může negativně ovlivňovat konvergenci výpočtů. Tuto nevýhodu odstraňuje aproximace dvourozměrným interpolačním spline polynomem. Pro CFD účely je nejvhodnější bi-kvadratická spline interpolace, která zaručuje spojitost prvních derivací na hranicích interpolačních buněk. Podrobný popis metody lze nalézt v monografii od Spätha [72]. IAPWS vydalo doporučení k použití této metody, viz [62]. Pro každou lokální buňku (i, j) se uchovává 9 koeficientů $a_{i,j,k,l}$

$$z(x, y) = \sum_{k=1}^3 \sum_{\ell=1}^3 a_{i,j,k,l} (x - x_i)^{k-1} (y - y_j)^{\ell-1} \quad (1.7)$$

Jiná interpolace pomocí bi-kubických spline funkcí byla použita v práci De Lorenza [53]. Využitím lokálních metod výpočtu ať už užitím Taylorových řad nebo interpolačních spline se lze z hlediska výpočetní náročnosti přiblížit modelu dokonalého plynu.

1.4 Struktura práce

Organizace této dizertační práce je následující. V části 2 uvedeme termodynamický popis metastabilní oblasti a popíšeme základní veličiny použité v systému kapalné fáze. Jedná se o vztahy pro rychlost nukleace, růst kapek a kritickou velikost kapky.

Část 3 je věnována popisu Eulerova nevazkého systému ve 3D pro případ komplexní stavové rovnice. Uvedeme popis použitého matematického modelu pro proudění mokré páry s nerovnovážnou kondenzací včetně systému rovnic pro vývoj kapalné fáze. Dále zde bude popsán způsob výpočtů termodynamických parametrů.

V části 4 popíšeme kompletní aparát použitého numerické řešení matematického modelu, tak jak je implementováno ve vlastním software.

Dosažené výsledky numerických simulací a jejich porovnání s dostupnými experimentálními měřeními uvedeme v části 5. Výběr představuje několik nízkotlakých i vysokotlakých dýz a nízkotlakých turbínových lopatek.

V závěrečné části 6 zhodnotíme dosažené výsledky a představíme možnosti dalšího vývoje.

Kapitola 2

Kondenzace

V kapitole 3 bude představen matematický model proudění mokré páry s nerovnovážnou kondenzací. Tento model obsahuje soustavu nehomogénních nelineárních hyperbolických parciálních diferenciálních rovnic. Zdrojová část těchto rovnic obsahuje signifikantní veličiny jako nukleační rychlost J , kritická velikost kapky r_c a rychlost růstu kapek \dot{r} . Tato část je zhruba řečeno věnována modelům pro tyto tři veličiny a dále popisu termodynamiky s tím související. Z hlediska stavové rovnice se pokud možno nebudeme držet modelu ideálního plynu.

2.1 Charakteristika fázového přechodu při kondenzaci

Uvažujeme jednosložkový dvoufázový systém kapalina-pára. Pojem pára budeme používat pro plynné skupenství vody, jenž je schopno kondenzovat. Při kondenzaci dochází k přeměně jistého množství páry na kapalinu. Směs těchto dvou fází tvoří heterogenní systém, na jehož rozhraní se některé vlastnosti fází mění skokově o konečnou hodnotu.

Průběh fázového přechodu můžeme rozdělit do čtyř etap [91]. První etapa je přechod systému do metastabilního resp. přesyceného stavu. Toho se může dosáhnout například rychlou expanzí páry v dýze nebo lopatkovém kanálu. Druhou etapou je vznik miniaturních zárodků nové fáze. Příčinou vzniku těchto zárodků jsou fluktuace termodynamických veličin kolem jejich středních hodnot. Tato druhá etapa se nazývá nukleace a probíhá výhradně v metastabilní oblasti. Zahrnuje jak homogenní nukleaci tak i heterogenní nukleaci. Třetí etapou je růst nové fáze až do makroskopických měřítek. Poslední etapa je relaxační proces fázového přechodu, při němž může docházet ke změně struktury nové fáze (patří sem např. proces aglomerace).

Kondenzace patří k fázovým přechodům prvního druhu, při nichž existují nespojitosti prvních derivací Gibbsova termodynamického potenciálu podle svých přirozených proměnných, tj. tlaku a teploty. Z vyjádření elementární změny Gibbsova

potenciálu G pomocí spojené první a druhé věty termodynamiky ve tvaru

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_P dT + \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_T dP = -SdT + VdP \quad (2.1)$$

vyplývá, že tyto skokové změny se týkají entropie a objemu

$$\Delta S = - \left[\frac{\partial(\Delta G)}{\partial T} \right]_P \quad (2.2)$$

$$\Delta V = \left[\frac{\partial(\Delta G)}{\partial P} \right]_T \quad (2.3)$$

Skoková změna entropie ΔS má za následek uvolnění, resp. pohlcení určitého množství tzv. latentního tepla $\Delta Q = T\Delta S$. Při kondenzaci, za stejného tlaku a teploty, je jak objem tak entropie kapalná fáze (V_1, S_1) menší než je tomu v případě plynné fáze (V_2, S_2) a platí

$$\Delta S = S_1 - S_2 < 0 \quad (2.4)$$

$$\Delta V = V_1 - V_2 < 0 \quad (2.5)$$

Při kondenzaci se tedy latentní teplo uvolňuje (zde užíváme zavedenou konvenci, že množství tepla, které systém opouští je záporné)

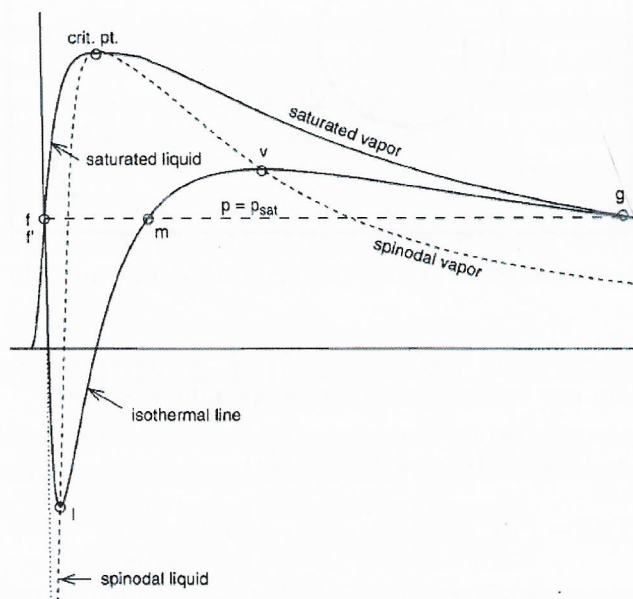
$$\Delta Q = T\Delta S < 0 \quad (2.6)$$

Tento zdroj tepla může podstatným způsobem ovlivnit lokální charakter proudění.

Metastabilní oblast

Významnou vlastností fázových přechodů prvního druhu je skutečnost, že umožňují dosažení tzv. metastabilních stavů. Metastabilní stav je udržitelný i při překročení hranice rovnovážného fázového přechodu. Tato rovnovážná hranice přechodu je určena koexistenční křivkou obou fází (saturační křivka). Metastabilní stav je udržitelný pouze pro malé fluktuace. Při větších fluktuacích se už stává nestabilním. Pára tak při daném tlaku může existovat i při svém podchlazení pod saturační teplotu – jedná se o metastabilitu vzhledem ke kapalná fáze. Pára se stává v tomto případě přesycenou. Míra přesycenosti se může charakterizovat např. poměrem tlaku páry k tlaku nasycených par kapaliny nad rovinným povrchem anebo rozdílem chemických potenciálů obou fází. V rovnovážném p - T diagramu je metastabilní oblast zprava omezena saturační křivkou a zleva je omezena spinodální křivkou, viz obr. 2.1. Tyto dvě mezní křivky metastabilní oblasti se potkávají v kritickém bodě. V oblasti nad kritickou izotermou už koexistence plynné a kapalná fáze není možná. Ve vnitřku metastabilní oblasti musí být splněna podmínka mechanické stability

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T < 0 \quad (2.7)$$



Obr. 2.1: Vyobrazení spinodálních křivek (jemnější čárkovaná čára) v rovnovážném diagramu vody. Rovnoběžná osa měrný objem, svislá osa tlak. Hrubší čárkovaná čára náleží reálné izobaro-izotermě. Metastabilní oblast pro vyznačenou izotermu je křivka (v)-(g). Převzato z [52], [69].

Spinodála spojuje body, ve kterých je tato derivace nulová a mění zde znaménko (jsou to lokální extrémy izoterm). Nalevo od spinodály existence plynného skupenství už není možná (je porušena podmínka termodynamické stability). Dochází k tzv. spinodálnímu rozpadu fáze bez účasti nukleace.

2.2 Energetická bilance a rovnováha heterogenního systému

Uvažujme izolovaný heterogenní jednosložkový systém, ve kterém jsou kapky vody (fáze 1) rozptýleny v páře (fáze 2). Značení fází přebíráme ze značení stabilních oblastí dle IAPWS. Tyto fáze se stýkají v mezivrstvě (fázovém rozhraní), viz obr. 2.2. Tloušťka mezivrstvy je řádově v nm. V této úvaze ale tloušťku mezivrstvy zanedbáme, což má za důsledek její nulový objem a nulové množství hmoty (počet částic). Charakteristickým rozměrem (extenzivním parametrem) mezivrstvy bude potom její plocha. Vzájemná interakce obou fází přes stykovou plochu vstoupí do energetické bilance prostřednictvím povrchového napětí.

Budeme zkoumat formování kapky v objemu páry. Energetická bilance systému je vyjádřena spojeným prvním a druhým termodynamickým principem ve tvaru



Obr. 2.2: Izolovaný heterogenní systém pro energetickou bilanci. (1) kapalná fáze, (2) pára.

úplného diferenciálu pro vnitřní energii heterogenního systému

$$\begin{aligned} dU &= \sum_{i=1,2} (TdS + dW + dW_{ost} + \mu dn)_i \\ &= (TdS - PdV + \sigma dA + \mu dn)_1 + (TdS - PdV + 0 + \mu dn)_2 \end{aligned} \quad (2.8)$$

V této bilanci představuje výraz $dW = -PdV$ práci vykonanou podsystémem (fází) prostřednictvím skalárního tlaku P a výraz dW_{ost} představuje práci podsystému vykonanou všemi ostatními zobecněnými silami kromě tlaku. Stav rovnováhy uvedeného systému můžeme charakterizovat minimem vnitřní energie systému, pro které platí $dU = 0$ a to při současném splnění vedlejších podmínek $V_1 + V_2 = V = konst.$, $S_1 + S_2 = S = konst.$ Tyto vedlejší podmínky jsou splněny již v předpokladech o izolovaném systému. Molární množství hmoty se rovněž nemění, tedy platí $n_1 + n_2 = n = konst.$ Dosazením $dV_2 = -dV_1$, $dS_2 = -dS_1$, $dn_2 = -dn_1$ do rovnice $dU = 0$ dostaneme

$$dU = (T_1 - T_2)dS_1 - \left(P_1 - P_2 - \sigma \frac{dA}{dV_1} \right) dV_1 + (\mu_1 - \mu_2)dn_1 = 0 \quad (2.9)$$

Při $dV_1 \neq 0$, $dS_1 \neq 0$ a $dn_1 \neq 0$ musí v rovnováze být splněno

$$T_1 = T_2 \quad (2.10)$$

$$\mu_1 = \mu_2 \quad (2.11)$$

$$P_1 = P_2 + \frac{2\sigma}{r} \quad (2.12)$$

V poslední rovnici jsme využili vztahu pro sférické rozhraní $\frac{dA}{dV} = 2/r$. Tato rovnice se nazývá Laplaceova-Youngova a umožňuje určit tlak uvnitř kapky, známe-li tlak v nejbližším okolí a povrchové napětí na rozhraní. Tyto podmínky představují teplotní, chemickou a silovou (mechanickou) rovnováhu.

Existence povrchového napětí na fázovém rozhraní má tendenci zmenšovat povrch kapky. První zárodky nové fáze mohou vznikat již v stabilní oblasti páry, tedy při tlaku nižším než saturačním. Příčinou toho jsou fluktuace termodynamických veličin. Kdyby tlak uvnitř kapky nebyl větší než tlak okolní páry v důsledku povrchového napětí, potom by docházelo k rychlému zániku kapky. Při tlakovém rozdílu se zárodek kapky může přenést až za hranici stability plynné fáze, tedy do meta-stabilní oblasti. Další vývoj kapky závisí od určitých podmínek, které budou specifikovány v dalším textu.

2.3 Vývoj kapky a její kritická velikost

Vývoj kapky určuje afinita kondenzačního procesu, jež je definována jako rozdíl chemických potenciálů kapalně a plynné fáze při téže teplotě. Směřování ke stabilnějšímu stavu při procesu kondenzace vyžaduje splnění nerovnosti

$$\Delta\mu_{12} = \mu_1(P_1, T) - \mu_2(P_2, T) \leq 0 \quad (2.13)$$

Dosažením Laplaceovy-Youngovy rovnice pro tlak P_1 lze afinitu přepsat do tvaru

$$\Delta\mu_{12} = \mu_1\left(P_2 + \frac{2\sigma}{r}, T\right) - \mu_2(P_2, T) \leq 0 \quad (2.14)$$

Při malých rozměrech kapky $r < r_c$ je tlak uvnitř kapky značně větší než tlak okolní páry. I když je závislost chemického potenciálu na tlaku kapalně vody mnohem menší než v případě páry, postačuje to na narušení podmínky (2.13). Důsledkem je vypařování kapky. Při větších rozměrech kapky ($r > r_c$) již tlakový příspěvek od povrchového napětí nestačí vyrovnat chemický potenciál plynné fáze a dochází ke kondenzaci. Kritická velikost kapky r_c je určena obecně nelineární implicitní rovnicí

$$\Delta\mu_{12} = \mu_1\left(P_2 + \frac{2\sigma}{r_c}, T\right) - \mu_2(P_2, T) = 0 \quad (2.15)$$

Z této rovnice vyjádříme kritický poloměr v explicitním tvaru následujícím postupem. Funkci $\mu_1(P, T)$ nahradíme jejím Taylorovým rozvojem

$$\mu_1(P + \Delta P, T) = \mu_1(P, T) + \frac{\partial\mu_1}{\partial P}(P, T)\Delta P + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\mu_1}{\partial P^2}(P, T)(\Delta P)^2 + \mathcal{O}(\Delta P^3) \quad (2.16)$$

Dosažením Taylorova rozvoje do rovnice (2.15) bude tato rovnice lineární vzhledem k poloměru kapky pouze v případě nestlačitelné kapaliny. Pro nestlačitelnou kapalinu budou v Taylorovém rozvoji pouze první dva členy nenulové. Za konstantní teploty totiž platí

$$\left(\frac{\partial\mu}{\partial P}\right)_T = v \quad (2.17)$$

$$\left(\frac{\partial^2\mu}{\partial P^2}\right)_T = \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T = 0 \quad (2.18)$$

Provedeme-li rozvoj chemického potenciálu nestlačitelné kapalně fáze μ_1 kolem bodu $[P_2, T]$, dostaneme náhradu

$$\mu_1\left(P_2 + \frac{2\sigma}{r}, T\right) \approx \mu_1(P_2, T) + v_1(P_2, T) \frac{2\sigma}{r} \quad (2.19)$$

a pro kritický poloměr dostaneme explicitní vyjádření

$$r_c = r_c(P_2, T) = \frac{2\sigma v_1}{\mu_2 - \mu_1} \quad (2.20)$$

Kritický poloměr kapky se tedy vyhodnocuje při tlaku páry P_2 a společné teploty $T_1 = T_2 = T$. Rozdíl chemických potenciálů $\mu_2(P_2, T) - \mu_1(P_2, T)$ lze upravit následovně

$$\begin{aligned} \mu_2(P_2, T) - \mu_1(P_2, T) &= \mu_2(P_2, T) - \mu_2(P_0, T) - (\mu_1(P_2, T) - \mu_1(P_0, T)) \\ &= \Delta\mu_2 - \Delta\mu_1 \end{aligned} \quad (2.21)$$

V rovnovážném stavu totiž platí $\mu_1(P_0, T) = \mu_2(P_0, T)$, kde $[P_0, T]$ je bod fázové rovnováhy (bod saturační křivky). Chemický potenciál μ je v proměnných (P, T) roven specifickému Gibbsovu potenciálu $g(P, T)$. Využitím nestlačitelnosti kapalně fáze dostaneme pro změny chemických potenciálů vztahy

$$\Delta\mu_2 = \Delta\mu_2^o + \Delta\mu_2^r = \mathcal{R}T \ln\left(\frac{P_2}{P_0}\right) + \mathcal{R}T(\Delta\gamma^r) = \mathcal{R}T \ln(S) \quad (2.22)$$

$$\Delta\mu_1 = v_1(P_2 - P_0) \quad (2.23)$$

Veličina \mathcal{R} je univerzální plynová konstanta, $\mathcal{R} = 8.314 \text{ J/mol/K}$, a je spojena s užitím molárních veličin. Výraz $\Delta\mu_2^o$ představuje změnu chemického potenciálu páry mezi stavy $[P_2, T]$ a $[P_0, T]$ při použití stavové rovnice ideálního plynu. Výraz $\Delta\mu_2^r$ představuje reziduální změnu chemického potenciálu páry. Člen $\Delta\gamma^r = \frac{\Delta g^r}{\mathcal{R}T}$ představuje změnu bezrozměrné reziduální Gibbsovy energie mezi přesyceným a nasyceným stavem. Pro ideální plyn je $\Delta\gamma^r = 0$. Pro míru přesycenosti páry S jsme v předešlém vyjádření použili vztah

$$S = \frac{P_2}{P_0} \exp(\Delta\gamma^r) = S^o \exp(\Delta\gamma^r) \quad (2.24)$$

$$S^o = \frac{P_2}{P_0} \quad (2.25)$$

kde S^o je přesycení páry ve stavu ideálního plynu. Pro reálný plyn je v metastabilním stavu vždy $\Delta\gamma^r < 0$ a tudíž $S < S^o$. Pro kritický poloměr dostaneme

$$r_c = \frac{2\sigma v_1}{\mu_2 - \mu_1} = \frac{2\sigma v_1}{\mathcal{R}T \ln(S) - v_1(P_2 - P_0)} \quad (2.26)$$

Jak ukazuje tabulka 2.1, člen $\Delta\mu_1$ lze zanedbat. Jeho příspěvek je mnohem nižší než reziduální příspěvek $\Delta\mu_2^r$. Pro povrchové napětí v tomto klasickém odvození navíc

uvažujeme, že nezávisí na poloměru. Proto položíme $\sigma = \sigma_\infty$, kde σ_∞ je povrchové napětí kapalně fázové s rovinným povrchem. Finální rovnice pro výpočet kritického poloměru kapky použitá v našem matematickém modelu je tedy v tomto tvaru

$$r_c = r_c(P_2, T) = \frac{2\sigma_\infty v_1}{\Delta\mu_2} = \frac{2\sigma_\infty}{\rho_1 \mathcal{R}T \ln(S)} \quad (2.27)$$

$$\sigma_\infty = \sigma_\infty(T)$$

$$\rho_1 = \rho_1(T)$$

$$S = S(P_2, T)$$

Veličina v_1 je molární hustota kapalně fázové s jednotkou mol/m³. Pokud místo kritického poloměru r_c budeme uvažovat obecně poloměr kapky r , tak rovnice (2.27) představuje Kelvinovu rovnici mechanické rovnováhy kapky.

Výraz $\ln(S^\circ)$ někteří autoři nahrazují aproximací s využitím Clausiovy-Clapeyronovy rovnice. Tato náhrada má tento tvar

$$\ln(S^\circ) \approx \frac{\bar{L}(T_0 - T)}{\mathcal{R}T_0 T} \quad (2.28)$$

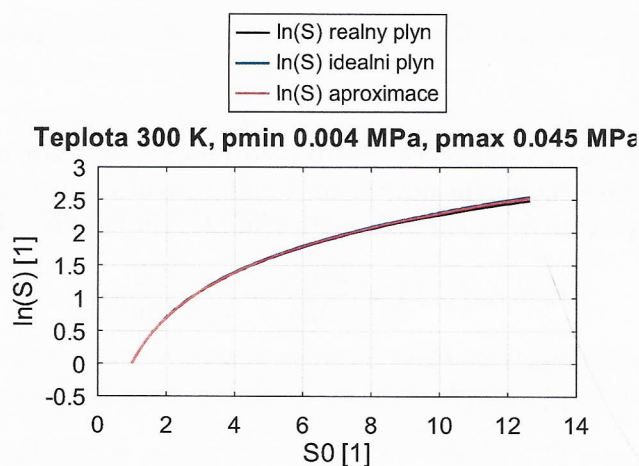
kde \bar{L} je výparné teplo počítané při teplotě \bar{T} , kde \bar{T} je aritmetický průměr teplot T a T_0 . Dalšími zjednodušeními bylo zanedbání objemu kapalně fázové vůči objemu plynně fázové a použití rovnice ideálního plynu. Pokud aproximujeme reálnou hodnotu $\ln(S)$ výrazem (2.28), tak vlastní numerické experimenty potvrdily, že maximální relativní chyba nepřesáhne 2% a to v celém rozsahu tlaků platnosti speciální plynové rovnice IAPWS-95 až po praktickou hranici metastability. Postupně na obr. 2.3 ($T = 300$ K), 2.4 ($T = 400$ K) a 2.5 ($T = 550$ K) jsou vyobrazeny průběhy $\ln(S)$, $\ln(S^\circ)$ a aproximace $\ln(S)$ pomocí rovnice (2.28). Tlakový rozsah resp. rozsah S° je vždy od saturační hodnoty až po praktickou mez metastability (vlhkost 5%). I z těchto průběhů je vidět, že aproximace (2.28) je oprávněná.

2.4 Práce při formování kapky a energetická bariéra

V této části odvodíme vratnou práci potřebnou k vytvoření zárodku kapalně fázové (kapky) v objemu přesycené páry. Tuto práci následně použijeme při odvození nukleační rychlosti J v další části.

Uvažujeme izolovaný systém při konstantní teplotě $T_1 = T_2 = T$ a konstantním objemu $V_1 + V_2 = V$. Rovněž látkové množství se nemění, tedy $n = n_1 + n_2$. Změnu stavu systému při izochoricko-izotermickém procesu je nejhodnější charakterizovat pomocí volné energie F . V počátečním stavu je v systému pouze pára a volná energie systému je

$$F_0 = -PV + \mu_2 n \quad (2.29)$$



Obr. 2.3: Veličina $\ln(S)$ a její aproximace. Teplota 300 K.

Po zformování kapky je stav systému

$$F_{12} = -P_1 V_1 + \mu_1 n_1 - P_2 V_2 + \mu_2 n_2 + \sigma A \quad (2.30)$$

Uvažovali jsme přitom, že povrch kapky má nulový objem a nulové látkové množství. Dále učiníme předpoklad, že tlak páry se formováním kapky nemění $P_2 \approx P$. Dosazením uvedených předpokladů dostaneme pro změnu volné energie

$$\Delta F = F_{12} - F_0 = -V_1(P_1 - P_2) + n_1(\mu_1 - \mu_2) + \sigma A \quad (2.31)$$

Při konstantní teplotě a objemu je změna volné energie rovna práci všech vnějších sil kromě tlaku. Minimální práce pro vytvoření kapky je tedy

$$W = \Delta F \quad (2.32)$$

V případě nestlačitelné kapalně fáze lze pro rozdíl tlaků použít

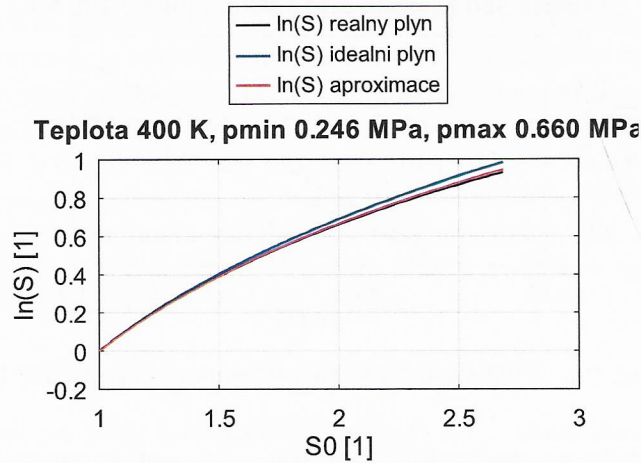
$$P_1 - P_2 \approx \frac{\mu_1(P_1, T) - \mu_1(P_2, T)}{v_1(T)} \quad (2.33)$$

V tomto případě je $v_1 = V_1/n_1$ molární hustota kapalně fáze, $[v_1] = \text{m}^3/\text{mol}$ a $[\mu] = \text{J}/\text{mol}$. Po dosazení a úpravě dostaneme pro práci

$$W = W_V + W_A \quad (2.34)$$

$$W = -n_1 [\mu_2(P_2, T) - \mu_1(P_2, T)] + \sigma A \quad (2.35)$$

Rozdíl $\mu_2(P_2, T) - \mu_1(P_2, T)$ lze dostatečně aproximovat výrazem $\Delta\mu_2 = \mu_2(P_2, T) - \mu_2(P_0, T)$, viz rovnice (2.21). Z látkového množství můžeme přejít k hmotnosti pomocí



Obr. 2.4: Veličina $\ln(S)$ a její aproximace. Teplota 400 K.

transformace $\mathcal{M} = m/n$, kde \mathcal{M} je molární hmotnost. Hmotnost zformované kapky o poloměru r a hustoty ρ_1 je $m_1 = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho_1$. Potom pro práci dostaneme

$$W = -m_1 \Delta\mu_2 + \sigma A \quad (2.36)$$

$$W = -\frac{4}{3}\pi r^3 \rho_1 \Delta\mu_2 + \sigma 4\pi r^2 \quad (2.37)$$

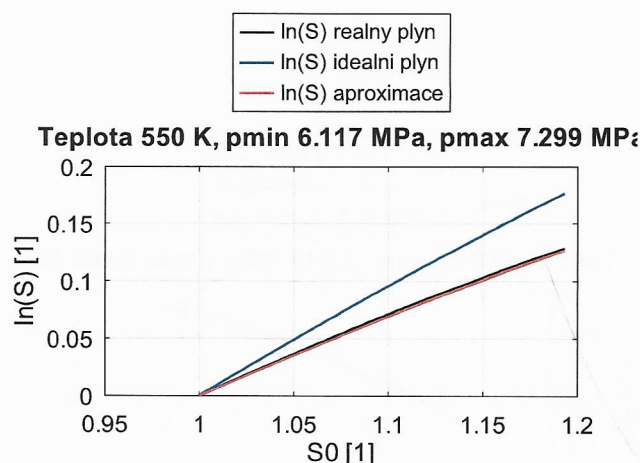
a v tomto případě je $[\rho_1] = \text{kg}/\text{m}^3$, $[\mu] = \text{J}/\text{kg}$ a $[\sigma] = \text{N}/\text{m}$. Povrchový člen W_A je při $\sigma > 0$ vždy kladný a způsobuje tedy vzrůst potenciálu, zatímco objemová část W_V je v metastabilní oblasti vždy záporná a je příčinou úbytku potenciálu. Směřování ke stabilnímu stavu je charakterizováno zmenšováním potenciálu. Při $S > 1$ je stabilní kapalná fáze za podmínky překonání energetické bariéry W_c . Nestabilní rovnováha mezi zánikem a růstem kapalně fáze nastane při $r = r_c$. Při nadkritické velikosti kapky $r > r_c$ tedy probíhá kondenzace. Naopak při $r < r_c$ je kapalná fáze nestabilní (stabilní je plynná fáze) a dochází k vypařování kapky až do jejího zániku. V oblasti přehřáté páry, tedy při $S < 1$ je objemový i povrchový příspěvek práce kladný a stabilní je pouze plynná fáze. Růst kapalně fáze lze charakterizovat nerovností

$$\frac{\partial W}{\partial r} < 0 \quad (2.38)$$

a kritický stav (stav nestabilní rovnováhy) rovností

$$\frac{\partial W}{\partial r} = 0 \quad (2.39)$$

Tyto dvě podmínky znamenají, že funkce $W = W(r)$ nabývá v $r = r_c$ svého maxima. Z poslední rovnice lze dostat kritický poloměr r_c , jenž vyjde shodně s rovnicí (2.27).



Obr. 2.5: Veličina $\ln(S)$ a její aproximace. Teplota 550 K.

Dosazením kritického poloměru do výrazu pro práci dostaneme práci pro vytvoření kritické kapky, tj. nukleační (energetickou) bariéru

$$W_c = W(r_c) = \frac{1}{3}\sigma A_c = \frac{4}{3}\pi r_c^2 \sigma \quad (2.40)$$

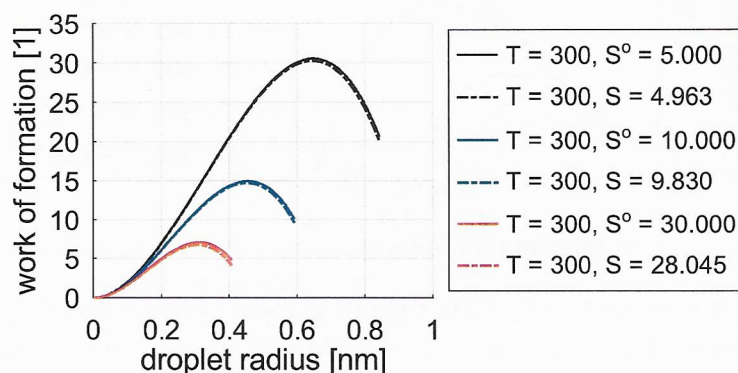
Tabulka 2.1 uvádí několik důležitých parametrů při formování kapalně fáze. Vstupem je dvojice [teplota, ideální saturační poměr] ($[T, S^\circ]$). Tlak páry v metastabilním stavu je počítán jako $P_2 = S^\circ P_0(T)$, kde P_0 je saturační tlak při teplotě T . Pro každou teplotu T jsou vybrány tři hodnoty S° . Celkem tedy máme 9 dvojic $[P_2, T]$. Další počítané parametry jsou nukleační bariéra W_c (reálný plyn) a W_c° (ideální plyn), kritický poloměr r_c a r_c° , ekvivalentní počet molekul N_c a N_c° , kompresní poměr $z = \frac{p}{\rho RT}$ a procentuální podíl reziduální objemové části práce při formování kapky $(W_V)_2^\circ$ vůči celkové objemové části W_V a procentuální podíl objemové části při formování kapky připadající na izotermickou kompresi kapky ze saturačního tlaku na tlak páry $(W_V)_1$ vzhledem k celkové objemové části W_V . Jsou vybrány tři teploty. První teplota $T = 300\text{K}$ odpovídá nízkým tlakům páry, druhá teplota $T = 400\text{K}$ odpovídá středním tlakům páry a třetí teplota $T = 500\text{K}$ odpovídá vyšším tlakům páry. Tabulce jsou přidružené průběhy práce při formování kapky v závislosti na poloměru kapky. Plnou čarou je vykreslena práce v případě reálného plynu, přerušovanou čarou průběh práce v případě ideálního plynu. Rozdíly se zvětšují se vzrůstajícím tlakem, resp. se zmenšujícím se kompresním poměrem.

Jednotlivé body $[P_2, T]$ jsou vyobrazeny také na obr. 2.9. V tomto obrázku je černou barvou postupně zleva vyobrazena křivka tání/tuhnutí, křivka kondenzace/vypařování a křivka hranice platnosti rovnice IAPWS-97 pro oblast 2. Průsečíkem křivky tání a kondenzace je trojný bod vody. Saturační křivka je zakončena v kritickém bodě. Růžová křivka představuje hranici inverzní izochory $\rho_2 = 55 \text{ kg/m}^3$, což je horní limita platnosti speciální rovnice pro oblast přehřáté páry IAPWS-95.

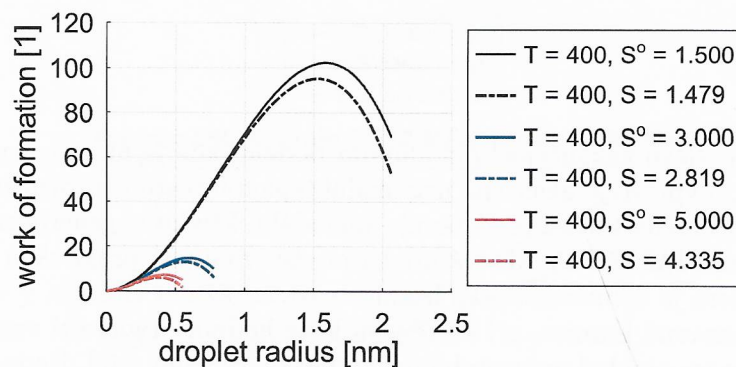
Tato křivka je vlevo zakončena spinodálním bodem, kde je nulová derivace tlaku podle hustoty, a vpravo je ukončena maximální teplotou platnosti rovnice IAPWS-97 pro oblast 2. Červená křivka představuje spinodální křivku vygenerovanou pomocí speciální rovnice IAPWS-95. Modrá křivka představuje tzv. praktickou hranici metastability, která je definovaná jako hranice s rovnovážnou vlhkostí $\chi = 5\%$. Je to empiricky stanovená hranice, při které jsou ještě hodnoty rychlosti vzniku nových kapek malé na to, aby byl meta-stabilní stav páry udržitelný, [45]. Body této křivky v p-T diagramu se určí následovně. Pro daný tlak p a vlhkost $\chi = 5\%$ se spočítá rovnovážná entalpie mokré páry h podle vztahu

$$h(p, \chi) = \chi h'(p) + (1 - \chi) h''(p) \quad (2.41)$$

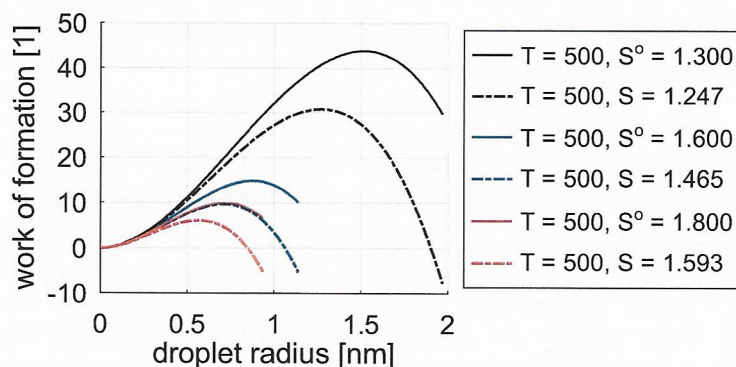
kde $()'$ značí stav na dolní mezní křivce ($\chi = 1$) a $()''$ značí stav na horní mezní křivce ($\chi = 0$). Tato entalpie h se přiřadí entalpii páry v metastabilním stavu a následně se dopočítá teplota $T(p, h)$.



Obr. 2.6: Práce formování kapky v závislosti na poloměru kapky. Nízký tlak. Teplota 300 K.

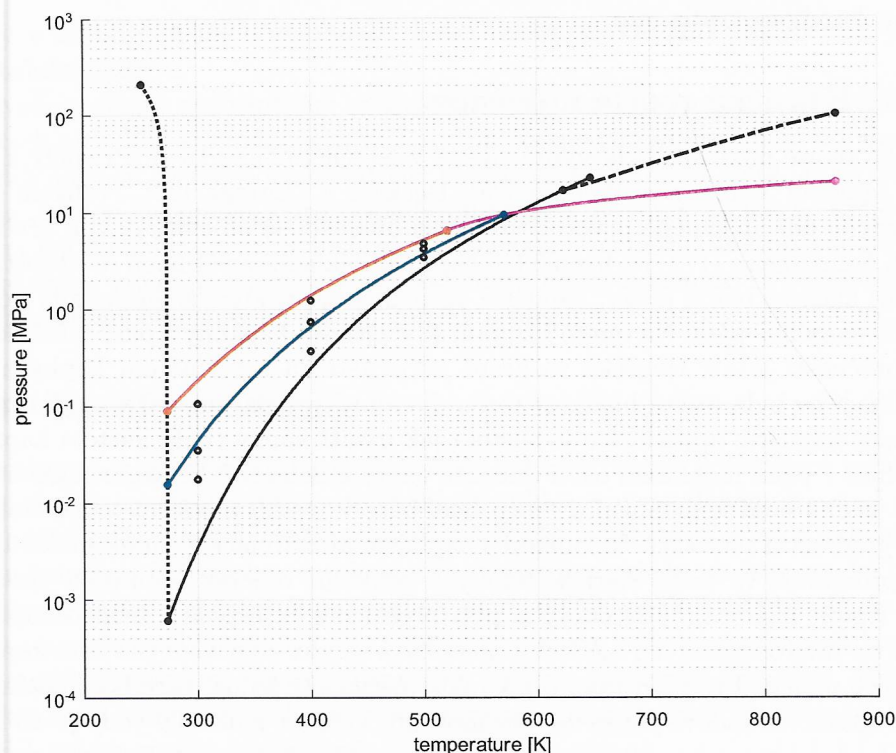


Obr. 2.7: Práce formování kapky v závislosti na poloměru kapky. Střední tlak. Teplota 400 K.



Obr. 2.8: Práce formování kapky v závislosti na poloměru kapky. Vyšší tlak. Teplota 500 K.

Závěrem shrňme představu o energetické bariéře. Důvodem proč při expanzi páry v dýze pod saturační křivku nedojde ihned ke kondenzaci je existence energetické bariéry zapříčiněné povrchovým členem práce nutné při zformování kapky W_A . V metastabilním stavu má systém lokální minimum termodynamického potenciálu (volné energie). Při přechodu z metastabilního stavu do stabilního stavu musí systém překonat jistou bariéru, která je charakterizována lokálním maximem volné energie a systém v tomto stavu je nestabilním vzhledem k jakýmkoliv fluktuacím. Stabilní rovnováha je charakterizována globálním minimem termodynamického potenciálu. Čím více je systém v metastabilním stavu, tím menší je bariéra přechodu do stabilního stavu. V pravém okolí spinodální křivky tato bariéra vymizí úplně, viz obr. 2.1.



Obr. 2.9: Vyobrazení křivek v p-T diagramu vody: spinodální křivka (červená), praktický limit v metastabilní oblasti s rovnovážnou vlhkostí 5% (modrá), hranice platnosti speciální plynové rovnice IAPWS-95 s hustotou $\rho \leq 55 \text{ kg/m}^3$ (růžová), saturační křivka (černá), hranice platnosti rovnice plynové fáze IAPWS-97 (černá čerchovaná), křivka tání (černá tečkovaná). Zobrazení vybraných bodů v metastabilní oblasti (černá kolečka) pro tab. 2.1.

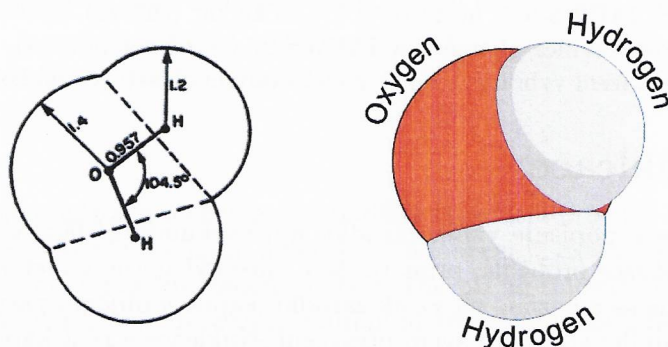
2.5 Nukleace

Teorie nukleace popisuje vznik zárodků nové sekundární fáze v objemu primární fáze. Aby nukleace proběhla, primární fáze musí být nutně v metastabilním stavu. V našem případě se omezíme na vznik zárodků kapek v objemu páry. Pára se dostává do metastabilního stavu při svém přesycení. Nukleace a růst kapalně fáze jsou dva mechanismy spojené s fázovým přechodem prvního druhu. Rozlišujeme dva základní typy nukleace – homogenní a heterogenní. V obou případech dochází k vytvoření miniaturního nukleačního jádra, neboli shluku molekul sekundární fáze. V případě homogenní nukleace tato jádra vznikají samovolně fluktuacemi termodynamických veličin. Z toho důvodu se tento případ nukleace nazývá i spontánní. Homogenní nukleace se považuje za náhodný proces jak v prostoru tak v čase [49]. U heterogenní nukleace se prvotní shluk molekul objeví na přítomných cizích tělesech (mohou to být např. různé nečistoty ale i samotná stěna dýzy). Nukleační bariéra je u heterogenní nukleace mnohem nižší než u homogenní nukleace. To znamená, že při

stejně nukleační rychlosti je pro homogenní kondenzaci nutno dosáhnout mnohem většího přesycení. Proto v přírodním světě prakticky výhradně převažuje heterogenní nukleace, zatímco homogenní je vlastní pro různá technická zařízení jako jsou dýzy, turbíny, letadlová křídla, atd.

2.5.1 Klasická teorie nukleace

Klasická teorie nukleace byla vypracována v letech 1925 až 1943. Přispěly k tomu práce zejména Völmera a Webera [75], Beckera a Döringa [22], Frenkela [30] a Zeldovitche [90]. Nicméně prvotní zmínky o nukleaci se objevily dávno předtím v pracích Fahrenheita (1721) a hlavně Gibbse [35]. Základní myšlenkou (a nedostatkem zároveň) klasické teorie je tzv. kapilární aproximace, při které se neuvažuje tloušťka rozhraní kapalina–pára. Na tomto rozhraní se vlastnosti kapaliny a páry mění skokově. Ve skutečnosti je ale tloušťka rozhraní porovnatelná s rozměrem kapky a lepší aproximací by byla určitá hladkost termodynamických parametrů v okolí rozhraní. V případě kapilární aproximace je hustota jak uvnitř kapky (tedy hustota kapaliny), tak rovněž v jejím nejbližším okolí (hustota páry) konstantní. Ve skutečnosti hustota uvnitř kapky není konstantní a tento fakt bere v úvahu moderní teorie nukleace (např. gradientní metoda). V souladu s kapilární aproximací se shluk molekul nové fáze aproximuje ve tvaru sférické kapky a fyzikální veličiny popisující vlastnosti kapky (např. hustota a povrchové napětí) vychází z extrapolace makroskopického popisu do mikroskopických měřítek. Zanedbává se vliv zakřivení povrchu kapky na povrchové napětí. Pro představu o jak malá měřítká se jedná, zárodky kapalné fáze mohou obsahovat řádově pouze desítky molekul. Velikost molekuly vody je asi 2.75Å , přičemž 1Å (anstrom) je 10^{-10}m . Při těchto rozměrech je jasné, že popis modelem kontinua bude pouze hrubou aproximací skutečnosti. Klasická teorie rovněž uvažuje,



Obr. 2.10: Rozměry molekuly vody.

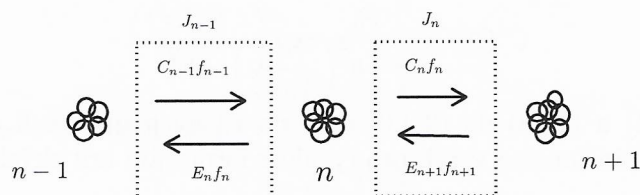
že počáteční formování shluku molekul kritické velikosti je izotermický proces. Tedy teplota tohoto kritického shluku se modeluje teplotou páry v jeho nejbližším okolí. Dalším nedostatkem klasické teorie je to, že nerespektuje limitně zánik nukleační

bariéry v nejbližším okolí spinodály, která udává maximální přesycenost páry v metastabilním stavu.

Navzdory těmto nedostatkům se klasická teorie nukleace prosadila v praktických výpočtech proudění s nerovnovážným fázovým přechodem a je schopna po vhodných korekcích alespoň částečně kvantitativně popsat experimentální data. Je to robustní metoda, kterou lze použít i pro případy nukleace v jiných systémech. Výhodou je zejména její flexibilita a jednoduchost v porovnání s modernějšími přístupy. Použití klasické teorie vyžaduje pouze znalost základních termodynamických parametrů jako je povrchové napětí, hustota, saturační tlak a pod.

2.5.2 Rychlost nukleace

Po seznámení se s nukleační bariérou v části 2.4 a kritickým poloměrem v části 2.3, přistoupíme k uvedení vztahu pro rychlost nukleace v ustáleném stavu J . Tento vztah udává počet nově vytvořených kapek kritické velikosti ($r = r_c$) v jednotkovém objemu primární fáze za časovou jednotku. Uvažujeme zjednodušený model bilance koncentrace kapek s počtem N molekul (N-mer), $C(N)$, podle Szilárda a Farkase [29]. V tomto modelu uvažujeme, že kapka interaguje pouze s jednotlivými molekulami páry (monomery) a v jednom časovém okamžiku pouze s jedním monomerem. Vzájemná interakce mezi jednotlivými N-mery se neuvažuje. Tento model je vyobrazen na obr. 2.11. Bilanci lze zapsat následovně



Obr. 2.11: Model interakce kapek s monomery podle Szilárda a Farkase.

$$\frac{dC(N)}{dt} = I(N-1) - I(N) \quad (2.42)$$

kde $I(N)$ je výsledný tok molekul (tzv. nukleační proud) z N-meru na (N+1)-mer a je dán jako rozdíl mezi kondenzačním tokem a vypařovacím tokem pomocí následující rovnice

$$I(N) = \phi(N)C(N) - \epsilon(N+1)C(N+1) \quad (2.43)$$

V této rovnici je $\phi(N)$ kondenzační koeficient pro N-mer a $\epsilon(N)$ je koeficient vypařování pro N-mer. Kondenzační koeficient určuje frekvenci srážek monomerů, jejichž rychlost v proudovém poli je aproximována Maxwellovým-Boltzmannovým rozložením, s povrchem N-merů pohybujících se rychlostí stejného rozložení. Podle kinetické

teorie plynů je tento kondenzační koeficient ve tvaru

$$\phi(N) = C(1) 4\pi(r_N + r_1)^2 \left[\frac{k_B T}{2\pi} \left(\frac{1}{m_N} + \frac{1}{m_1} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.44)$$

kde $C(1)$ je koncentrace monomerů, m_N a r_N je hmotnost a poloměr N-meru, m_1 a r_1 je hmotnost a poloměr monomeru. Pro koncentraci monomerů použijeme

$$C(1) = C(0) \exp\left(-\frac{W(1)}{k_B T}\right) \quad (2.45)$$

V této rovnici je $C(0)$ koncentrace tzv. nukleačních míst, tj. míst na kterých může začít nukleace (v podstatě to jsou molekuly primární fáze). V klasické teorii nukleace se obvykle pokládá $C(0) = (\rho_N)_V$ a $W(1) = 0$. Pro molekulární hustotu $(\rho_N)_V$ se použije termická rovnice reálného plynu s kompresním faktorem z , takže

$$C(1) = (\rho_N)_V = \frac{p}{zk_B T} \quad (2.46)$$

V ustáleném stavu je pravá strana rovnice (2.42) nulová a tedy

$$I(N-1) = I(N) = I(N_c) = J \quad (2.47)$$

Koeficient vypařování $\epsilon(N)$ určíme ze stavu rovnováhy $I^e(N) = 0$. Dostaneme [74]

$$\epsilon(N) = \phi^e(N) \frac{C^e(N)}{C^e(N+1)} \quad (2.48)$$

$$C^e(N) = \frac{P_0}{z_0 k_B T} \exp\left(-\frac{W(N)}{k_B T}\right) \quad (2.49)$$

Dosazením (2.44) a (2.48) do (2.43), dále po různých úpravách a aproximacích popsaných v [74] dostaneme vztah pro rychlost formování kritických kapek

$$J = K \exp\left(-\frac{W_c}{k_B T}\right) \quad (2.50)$$

kde K je tzv. kinetický činitel daný vztahem

$$K = \phi(N_c) C^e(1) Z \quad (2.51)$$

ve kterém $\phi(N_c)$ je kondenzační koeficient kapky kritické velikosti a získáme ho dosazením N_c do rovnice (2.44) při zanedbání výrazů r_1 vůči $(r_N)_c$ a $1/(m_N)_c$ vůči $1/m_1$

$$\phi(N_c) = C(1) 4\pi r_c^2 \left(\frac{k_B T}{2\pi m_1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.52)$$

Pro koncentraci monomerů v rovnovážném stavu máme

$$C^e(1) \approx C(1) \quad (2.53)$$

zatímco Courtney použil

$$C^e(1) \approx C(1) \frac{1}{S} \quad (2.54)$$

Parametr Z je Zeldovichův tzv. nerovnovážný činitel

$$Z = \left[- \left(\frac{\partial^2 W(N)}{\partial N^2} \right)_{N=N_c} \right]^{\frac{1}{2}} (2\pi k_B T)^{-\frac{1}{2}} \quad (2.55)$$

Užitím

$$\frac{\partial}{\partial N} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial N} = \frac{\partial}{\partial N} \frac{1}{(\rho_N)_L 4\pi r^2} \quad (2.56)$$

a následnou dvojitou derivací rovnice (2.37) dostaneme

$$Z = \frac{1}{(\rho_N)_L 2\pi r_c^2} \left(\frac{\sigma_\infty}{kT} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.57)$$

Veličina $(\rho_N)_L$ je molekulární hustota kapalně fáze, $\rho_N = V/N$, pro kterou platí $(\rho_N)_L = \rho_L/m_1$, kde $[\rho_L] = kg/m^3$ a m_1 je hmotnost jedné molekuly vody. Dosazením vztahů (2.52), (2.53) a (2.57) do (2.51) dostaneme pro kinetický činitel ve verzi s tlakem

$$K = \left(\frac{p}{zk_B T} \right)^2 \frac{1}{\rho_L} \sqrt{\frac{2\sigma m_1}{\pi}} \quad (2.58)$$

případně ve verzi s hustotou páry

$$K = \frac{\rho_V^2}{\rho_L} \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_1^3}} \quad (2.59)$$

Pro rychlost nukleace dle klasické teorie nakonec dostaneme vztah

$$J_{iso} = \frac{\rho_V^2}{\rho_L} \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_1^3}} \exp\left(-\frac{W_c}{k_B T}\right) \quad (2.60)$$

Korekce nukleačního růstu

Vztah pro rychlost nukleace (2.60) podle klasické teorie byl odvozen za jistých zjednodušujících předpokladů. V praktických výpočtech se používá korigovaný vztah pro rychlost nukleace. Existuje celá řada korekcí, nicméně při proudění páry v dýžích a turbínách se používá hlavně Courtneyho a Kantrowitzova korekce. Korigovanou rychlost nukleace můžeme zapsat ve tvaru

$$J = \sum_i \xi_i J_{iso} \quad (2.61)$$

kde ξ_i je vybraný soubor korekcí. Courtneyho korekce zohledňuje rovnovážnou koncentraci monomerů (2.54) v (2.51) a korekce je v tomto tvaru [24]

$$\xi_C = \frac{1}{S} \quad (2.62)$$

Korigovaná rychlost nukleace je tím nižší čím větší je saturační poměr S .

Kantrowitzova korekce [47] zjednodušeným způsobem zohledňuje rozdílnou teplotu kapek a teplotu okolní páry. Rozdílem teplot vznikne přenos tepla, který původní klasická teorie zanedbala. Ve vztahu pro $I(N)$ v rovnici (2.43) je jak kondenzační koeficient $\phi(N)$, tak koeficient vypařování $\epsilon(N+1)$ určován při stejné teplotě páry $T = T_V$. Kantrowicz v koeficientu vypařování nahradil teplotu T teplotou kapky T_L . Kantrowiczova korekce je v tomto tvaru [12]

$$\xi_K = \frac{1}{1 + \nu} \quad (2.63)$$

$$\nu = \frac{\rho_V R}{\alpha_r} \sqrt{\frac{RT_V}{2\pi}} \frac{L}{RT_V} \left(\frac{L}{RT_V} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.64)$$

Veličina ν je pomocnou veličinou, α_r je součinitel přenosu tepla mezi párou a povrchem kapky a L je latentní teplo při kondenzaci počítané při teplotě páry T_V . Kantrowitzova korekce zohledňující rozdílnou teplotu povrchu kapek snižuje výslednou rychlost nukleace podobně jako korekce Courtneyho.

Výsledný vztah pro rychlost nukleace zohledňující uvedené korekce použitý v numerických simulacích je následující

$$J = \xi_C \xi_K J_{iso} \quad (2.65)$$

2.6 Růst kapek

Rychlost nukleace nám umožňuje modelovat počet nově vzniklých kapek kritické velikosti. Při svém vzniku mají kapky díky velmi malé velikosti teplotu okolní páry. Při pokračující expanzi páry teplota páry dále klesá a to rychleji než teplota kapek. Vzniklý teplotní gradient způsobí přenos tepla mezi oběma fázemi. Následná rychlost růstu kapky závisí na rychlosti přenosu uvolněného latentního tepla z objemu kapky do obklopujícího prostředí páry. Hlavním problémem při získání vztahu pro růst kapek je skutečnost, že kapky nabývají široké spektrum velikostí a to od několika nm při jejich vzniku až do několika μm v závěrečné fázi jejich vývoje například na výstupu z oblasti. Při větších rozměrech kapek v prostředí páry lze použít úvahu o kontinuu, zatímco při malých rozměrech předpoklad kontinua není splněn a měl by se použít molekulární (čisticový, statistický) popis. Velikost kapky zohledníme podobnostním Knudsenovým číslem Kn , jenž dává do poměru střední volnou dráhu molekul páry mezi vzájemnými srážkami $\bar{\ell}$ a charakteristický rozměr kapky (její

průměr)

$$Kn = \frac{\bar{\ell}}{d} = \frac{\bar{\ell}}{2r} \quad (2.66)$$

Střední volná dráha molekul

Podle kinetické teorie plynů (KTP) je střední volná dráha molekul dána vztahem [59]

$$\bar{\ell} = \frac{1}{\sqrt{2}N_V\pi d_1^2} \quad (2.67)$$

kde $N_V = N/V$ je molekulární hustota páry a d_1 je srážkový (kolizní) průměr molekuly vody, který zhruba odpovídá jejímu průměru. Pro molekulu vody se uvádí $d_1 = 0.275 \text{ nm}$. Výraz pro N_V lze upravit na $N_V = \rho R/k_B$. Tento vztah platí bez ohledu na kompresní faktor, tedy jak pro ideální plyn, tak i pro reálný plyn. Po dosazení do předešlého vztahu bude střední volná dráha molekul dána jako

$$\bar{\ell} = \frac{k_B}{\sqrt{2}\pi d_1^2 R} \frac{1}{\rho} = K \frac{1}{\rho} \quad (2.68)$$

V tomto vztahu je konstanta $K \approx 8.903 \times 10^{-8}$ a střední volná dráha molekul je nepřímě úměrná hustotě. Další možnost jak určit střední volnou dráhu je vyjít ze vztahu pro dynamickou viskozitu opět podle KTP

$$\mu = \frac{1}{3}\rho\bar{v}\bar{\ell} \quad (2.69)$$

kde \bar{v} je střední rychlost molekul a pro ní KTP odvozuje vztah

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_1}} \quad (2.70)$$

kde $m_1 = k_B/R$ je hmotnost jedné molekuly vody. Potom pro střední volnou dráhu lze použít vztah

$$\bar{\ell} = C \frac{\mu}{\rho \bar{v}} = D \frac{\mu}{\rho \sqrt{RT}} \quad (2.71)$$

kde C a D jsou konstanty. Stejný vztah používá i precizněji odvozený model podle Chapmana a Enskog. Pro konstantu D dle standardního odvození v KTP dostaneme hodnotu

$$D = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \approx 1.880 \quad (2.72)$$

zatímco model Chapman–Enskog uvádí

$$D = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{32}{5\pi} \approx 1.276 \quad (2.73)$$

Nejasnost kolem konstanty D potvrzují hodnoty uváděné v různých publikacích. Hodnotu (2.72) uvádí McCallum [54], Moore–Sieverding uvádí $D = 1.5$ [58], Young uvádí $D = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \approx 1.253$ [87].

V této práci použijeme pro střední volnou dráhu molekuly vztah (2.71) s konstantou D (2.72)

$$\bar{\ell} = \frac{3}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mu}{\rho} \frac{1}{\sqrt{RT}} \quad (2.74)$$

Pro Knudsenovo číslo pak použijeme

$$Kn = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mu}{\rho} \frac{1}{\sqrt{RT}} \frac{1}{r} \quad (2.75)$$

Režimy proudění podle Knudsenova čísla

Podle hodnoty Kn rozeznáváme tři základní režimy proudění, viz tab. (2.2). Jsou to dva extrémní případy a jeden přechodový. V prvním extrémním případě při $Kn \rightarrow \infty$ jde o tzv. molekulární režim. Kapky jsou malé a jejich růst je řízen srážkami molekul páry s jejich povrchem. Opačný extrém nastává při $Kn \rightarrow 0$. Kapky jsou mnohem větší než při jejich vzniku a jejich růst je řízen difuzí. Mezi těmito extrémny se nachází třetí přechodový režim. Z fyzikálních principů lze odvodit vztahy pro růst kapek pro oba extrémní případy. Růst v přechodovém režimů se modeluje výhradně pomocí interpolace mezi limitními případy, přičemž interpolace je vždy funkcí Knudsenova čísla. Většina případů proudění v dýzách a turbínách patří právě do přechodového režimu.

Tab. 2.2: Režimy proudění podle Knudsenova čísla.

Režim	Knudsenovo číslo
kontinuum	$Kn \ll 1$ ($Kn < 0.01$)
přechodový	$Kn = \mathcal{O}(1)$
molekulární	$Kn \gg 1$ ($Kn > 10$)

Detailní model růstu kapek vyžaduje uvažovat přenos hmoty, hybnosti a energie mezi kapalnou fází a obklopující párou se zohledněním Knudsenova čísla. V této práci přistoupíme k určité redukci složitosti, což je v praktických aplikacích celkem běžné a dostačující. Budeme uvažovat, že kapka je unášena proudem páry a její rychlost je tudíž stejná jako rychlost páry. Tímto odpadá přenos hybnosti. Náš růst kapek bude tedy vycházet ze simultánního řešení rovnic přenosu hmoty a energie mezi kapalnou a plynnou fází.

Růst kapek v molekulárním režimu

Růstový model kapky v molekulárním režimu získáme z její bilanční rovnice pro zachování hmoty. Přenos hmoty má v tomto režimu totiž na růst kapky podstatný vliv. Pro tuto bilanci je potřeba znát teplotu povrchu kapky. Tato teplota se získá z dodatečné bilance energie pro kapku. V této práci se energetické rovnici vyhneme a teplotu kapky budeme modelovat jednoduchým způsobem.

Bilanci hmoty pro kapku lze zapsat tímto způsobem

$$\frac{dm_N}{dt} = [f(N) - g(N)] m_1 \quad (2.76)$$

kde $f(N)$ je četnost srážek monomerů s kapkou o velikosti N molekul připadající na jednotkovou plochu a jednotku času (můžeme srovnat se vztahem (2.52)) a $g(N)$ je četnost ubývání monomerů z kapky na jednotku plochy a časovou jednotku. Pro $f(N)$ a $g(N)$ použijeme vztahy z kinetické teorie plynů [48]

$$f(N) = 4\pi r_N^2 \frac{1}{m_1} \sqrt{\frac{R}{2\pi}} \rho_V \sqrt{T_V} \quad (2.77)$$

$$g(N) = 4\pi r_N^2 \frac{1}{m_1} \sqrt{\frac{R}{2\pi}} \rho_{(V,0,r)} \sqrt{T_L} \quad (2.78)$$

kde ρ_V je hustota páry, T_V je teplota páry, $\rho_{(V,0,r)}$ je rovnovážná hustota páry nad zakřiveným povrchem kapky s teplotou povrchu T_L . Po dosazení těchto dvou výrazů můžeme rovnici (2.76) přepsat do tvaru pro změnu poloměru

$$\frac{dr_N}{dt} = \frac{\rho_V}{\rho_L} \sqrt{\frac{RT_V}{2\pi}} \left(1 - \frac{\rho_{(V,0,r)}}{\rho_V} \sqrt{\frac{T_V}{T_L}} \right) \quad (2.79)$$

Hustota $\rho_{(V,0,r)}$ se získá ze stavové rovnice reálného plynu $f(\rho, p, T) = 0$ dosazením teploty T_L a tlaku $p_{(V,0,r)}$. Tlak $p_{(V,0,r)}$ se získá jako řešení Kelvinovy rovnice

$$p - p_0(T) \exp \left[\frac{\frac{2\sigma(T)}{r} + p - p_0(T)}{\rho_L(T)RT} - \Delta\gamma^r(p, T) \right] = 0 \quad (2.80)$$

Tato rovnice je nelineární vzhledem k tlaku $p = p_{(V,0,r)}$. Nicméně dostatečně přesné řešení se dá získat přístupem prediktor-korektor, kde prediktor vynechá členy $p - p_0(T)$ a $\Delta\gamma^r(p, T)$. Takto získaný tlak použije následně korektor.

Neznámou teplotu kapky T_L aproximujeme jiným způsobem než z dodatečné energetické rovnice. Výsledný vztah je následující

$$T_L = T_0 - (T_0 - T_V) \frac{r_c}{r} \quad (2.81)$$

Při této aproximaci je pro miniaturní kapky ($r \rightarrow r_c$) teplota kapky blízká teplotě okolní páry ($T_L \rightarrow T_V$). Teplota větších kapek ($r \gg r_c$) se blíží saturační teplotě při daném tlaku okolní páry ($T_L \rightarrow T_0$).

Dosažením získaného rovnovážného tlaku par nad povrchem kapky z rovnice (2.80) do stavové rovnice získáme odpovídající rovnovážnou hustotu par. Dosažením těchto dvou hodnot do rovnice (2.79) dostaneme rychlost růstu kapky v molekulárním režimu.

Růst kapek v režimu kontinua

V tomto režimu má na růst kapky největší vliv přenos energie mezi kapkou a okolní párou. Z toho důvodu vztah pro růst kapky získáme z energetické bilance

$$\frac{dQ_{\text{lat}}}{dt} = \frac{dQ_{\text{cond}}}{dt} \quad (2.82)$$

kde dQ_{lat}/dt je tok latentního tepla uvolněného při kondenzaci a $dQ_{\text{cond}}/dt =$ je tok tepla odvedeného z povrchu kapky vedením (uvažujeme, že kapka je v klidu vůči okolní páře). Pro tyto tepelné toky použijeme následující vztahy

$$\frac{dQ_{\text{lat}}}{dt} = (h_V - h_L) \frac{dm}{dt} \quad (2.83)$$

$$\frac{dQ_{\text{cond}}}{dt} = 4\pi r \lambda_V (T_L - T_V) \quad (2.84)$$

V rovnici (2.83) jsme zanedbali teplotní gradient uvnitř kapky ($dT/dr = 0$). Pokud mezi tyto dva tepelné toky dáme rovnost, získáme vztah pro růst kapky

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\lambda_V}{r} \frac{T_L - T_V}{\rho_L (h_V - h_L)} \quad (2.85)$$

Teplotu kapky T_L určíme opět ze vztahu (2.81).

Univerzální růst kapek

Růst kapek \dot{r} použitelný v celém rozsahu Knudsenova čísla získáme pomocí vhodné interpolace mezi molekulárním režimem a režimem kontinua. Podle [14] lze tuto interpolaci provést následujícím způsobem

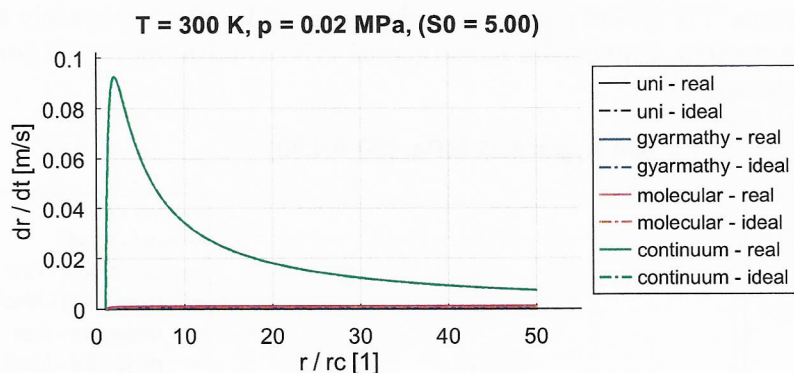
$$\dot{r} = \frac{\dot{r}_{\text{fm}} \dot{r}_{\text{cont}}}{\dot{r}_{\text{fm}} + \dot{r}_{\text{cont}}} \quad (2.86)$$

kde \dot{r}_{fm} je rychlost v molekulárním režimu a \dot{r}_{cont} je rychlost růstu v režimu kontinua. Stejnou interpolaci použil i Gyarmathy ve své práci [37], kde upravil model růstu kapek v režimu kontinua tím způsobem, že zavedl koeficient přenosu tepla v závislosti na Knudsenovém čísle. Jeho model růstu je dán tímto vztahem

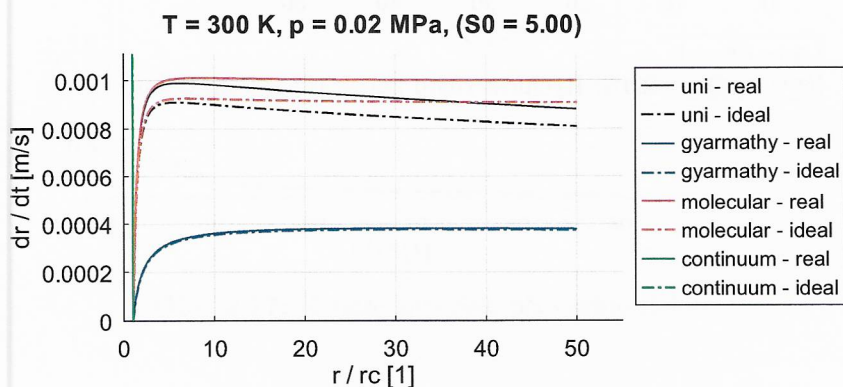
$$\dot{r} = \frac{\lambda_V}{r(1 + 3.18Kn)} \frac{T_L - T_V}{\rho_L (h_V - h_L)} \quad (2.87)$$

a pro teplotu kapek použil vztah 2.81.

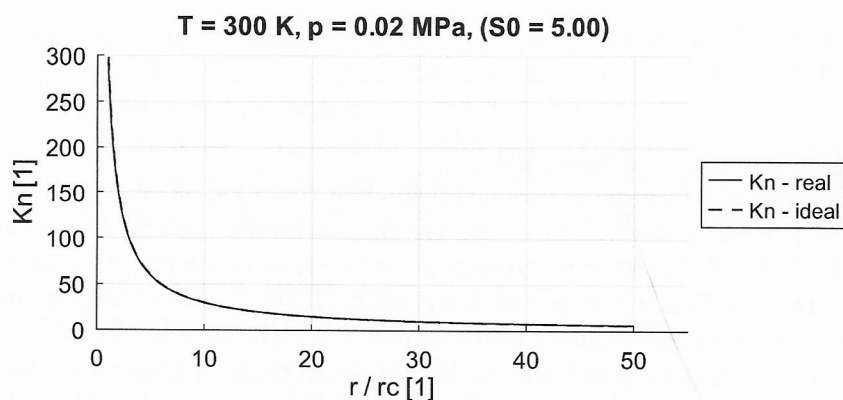
V následující části uvedeme porovnání modelů růstu kapek při nízkém a vyšším tlaku. Tlak p je vždy dopočítán ze zvolených parametrů teploty T a saturačního poměru S_0 . Poloměr kapky r je vztažen ke kritickému poloměru r_c , jenž závisí na teplotě T a tlaku p . Poměr r/r_c je zvolen v rozsahu [1, 50]. Z takto zvoleného poloměru je patrné, že ukazujeme rychlost růstu kapky v počáteční fázi růstu. Porovnáme celkem 4 modely růstu - molekulární, difúzní, univerzální a Gyarmathyho. Každý model je ještě počítán s modelem reálného plynu IAPWS a s modelem ideálního plynu. Na obr. 2.13 je průběh růstu kapky při nízkém tlaku $p = p(T, S_0)$, kde $T = 300\text{K}$ a $S_0 = 5$. Knudsenovo číslo Kn pro tento případ je na obr. 2.14. Nižší tlak znamená vysoké Knudsenovo číslo v počáteční fázi růstu. V tomto režimu je nejvhodnější molekulární model růstu. Difúzní model dává v porovnání s ostatními modely velmi vysoké hodnoty \dot{r} . Detail obr. 2.12 je na obr. 2.13. V tomto detailu je vynechán difúzní model růstu. Často používaný Gyarmathyho model dává nižší hodnoty růstu než univerzální model vzniklý kombinací molekulárního a difúzního modelu.



Obr. 2.12: Rychlost růstu kapek při nízkém tlaku.

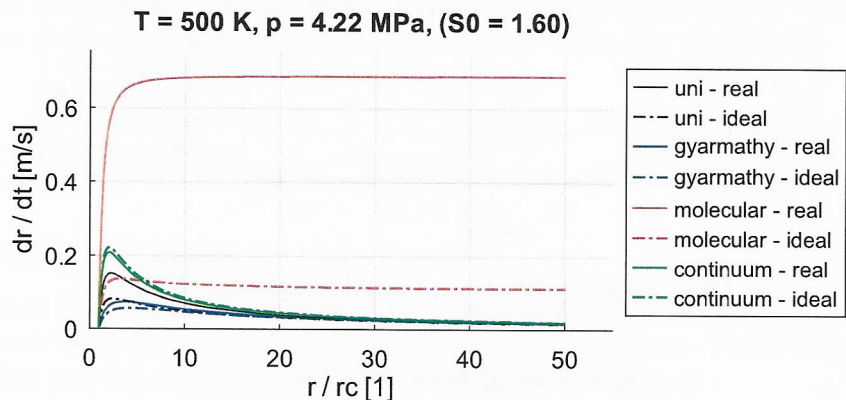


Obr. 2.13: Detail obr. 2.12.

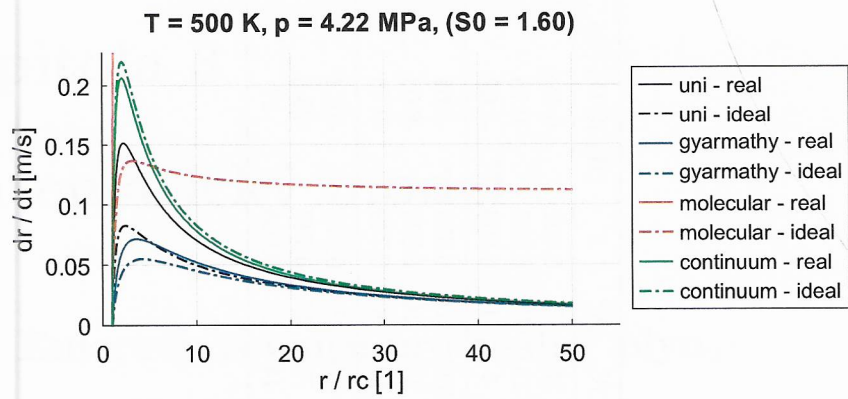


Obr. 2.14: Knudsenovo číslo při nízkém tlaku.

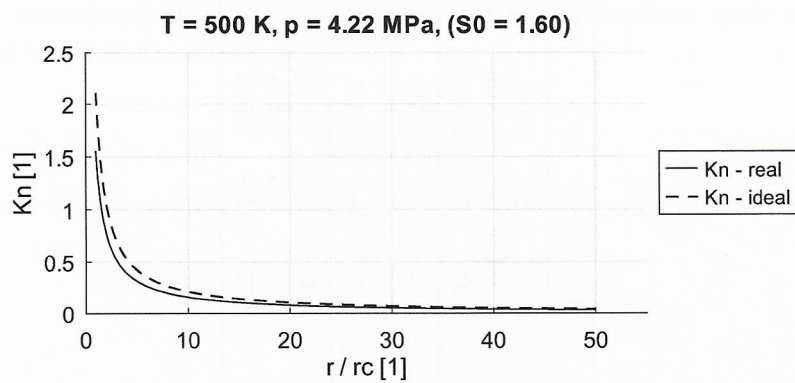
Pro vyšší tlak byly použité parametry teplota $T = 500K$ a ideální saturační poměr $S_0 = 1.6$. S rostoucím tlakem Knudsenovo číslo v blízkosti kritického poloměru klesá, viz obr. 2.17. Za těchto podmínek dává značně vyšší hodnoty růstu molekulární model. Průběh všech modelů je na obr. 2.16, detail bez molekulárního modelu je na obr. 2.16. Při vyšším tlaku je podle očekávání i mnohem větší rozdíl mezi ideálním a reálným plynem. Při vyšším poloměru kapky je $Kn < 1$ a všechny modely konvergují k difúznímu modelu. Univerzální model (černá křivka) dává opět vyšší hodnoty než Gyarmathyho model.



Obr. 2.15: Rychlost růstu kapek při vyšším tlaku.



Obr. 2.16: Detail obr. 2.15.



Obr. 2.17: Knudsenovo číslo při vyšším tlaku.

Tab. 2.1: Parametry v metastabilním stavu

$T[K]$	$P_2[MPa]$	S°	S	W_c/kT	W_c/kT	W_c/kT	$r_c[nm]$	$r_c[nm]$	N_c	N_c	N_c	z	$(W_V)_2^r/W_V[\%]$	$(W_V)_1/W_V[\%]$
300	0.0177	5.0	4.963	30.50	30.22	0.649	0.646	0.646	38	38	0.991		-0.458	0.0064
	0.0354	10.0	9.830	14.99	14.77	0.455	0.451	0.451	13	13	0.980		-0.75	0.0101
	0.106	30.0	28.045	7.05	6.77	0.312	0.306	0.306	4	4	0.909		-2.02	0.0223
400	0.369	1.5	1.479	102.17	95.08	1.586	1.530	1.530	523	470	0.956		-3.66	0.182
	0.737	3.0	2.819	14.58	12.97	0.599	0.565	0.565	28	24	0.895		-6.03	0.275
	1.23	5.0	4.335	7.29	6.05	0.424	0.386	0.386	10	8	0.749		-9.76	0.389
500	3.43	1.3	1.247	43.84	30.77	1.515	1.269	1.269	405	238	0.810		-19.4	1.91
	4.22	1.6	1.465	14.68	9.61	0.877	0.709	0.709	79	42	0.737		-23.6	2.21
	4.75	1.8	1.593	9.91	6.15	0.720	0.567	0.567	44	21	0.666		-27	2.42

Kapitola 3

Matematický model

3.1 Eulerovy rovnice pro reálný plyn

V této části uvedeme kompletní matematický model proudění nerovnovázně kondenzující mokré páry. Výsledný model se skládá z dvou částí. První část je systém Eulerových rovnic pro směs páry a kapek. Druhá část modelu je systém momentových rovnic pro popis kapalně fáze. Přitom uvažujeme pouze dva mechanismy ve vývoji kapalně fáze a to nukleaci a růst. Dále uvažujeme, že kapky jsou dokonale unášeny párou a vektor rychlosti kapek lze tedy nahradit vektorem rychlosti směsi.

3.1.1 Konzervativní tvar

Systém Eulerových rovnic vyjadřující zákony zachování hmoty, hybnosti a celkové energie v souřadném systému (x, y, z) , kde ale x je normálový směr a y, z jsou přidružené tangenciální směry je ve tvaru

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (3.1)$$

V této rovnici je vektor \mathbf{U} vektorem konzervativních proměnných,

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

přičemž ρ je hustota, u je složka vektoru rychlosti v normálovém směru, v a w jsou tangenciální složky rychlosti a $E = e + \frac{1}{2}V^2$ je celková energie systému. Veličina V je euklidovská norma vektoru rychlosti, $V^2 = u^2 + v^2 + w^2$. Vektor \mathbf{F} představuje tok konzervativních veličin hranicí systému

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix} = \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} U_2 \\ \frac{U_2^2}{U_1} + p(\mathbf{U}) \\ \frac{U_2 U_3}{U_1} \\ \frac{U_2 U_4}{U_1} \\ (U_5 + p(\mathbf{U})) \frac{U_2}{U_1} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Stavová rovnice vstupuje do tohoto systému prostřednictvím rovnice pro statický tlak. V tomto případě bude tlak funkce hustoty a vnitřní energie, $p = p(\rho, e)$. Stavová rovnice uzavírá Eulerovy rovnice. Pro další analýzu potřebujeme vyjádřit tlak jako funkci \mathbf{U} . Hustotu a vnitřní energii vyjádříme pomocí konzervativních proměnných následovně

$$\rho = \rho(\mathbf{U}) = U_1 \quad (3.4)$$

$$e = e(\mathbf{U}) = \frac{U_3}{U_1} - \frac{U_2^2 + U_3^2 + U_4^2}{2U_1^2} \quad (3.5)$$

Dále uvažujeme kvazilineární tvar Eulerových rovnic. Až na místa nespojitosti je tento systém ekvivalentní konzervativní formulaci.

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbb{A}(\mathbf{U}) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (3.6)$$

kde $\mathbb{A}(\mathbf{U})$ je jakobián normálového toku

$$\mathbb{A} = \mathbb{A}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -u^2 + \frac{\partial p}{\partial U_1} & 2u + \frac{\partial p}{\partial U_2} & \frac{\partial p}{\partial U_3} & \frac{\partial p}{\partial U_4} & \frac{\partial p}{\partial U_5} \\ -uv & v & u & 0 & 0 \\ -uw & w & 0 & u & 0 \\ u \left(\frac{\partial p}{\partial U_1} - H \right) & u \frac{\partial p}{\partial U_2} + H & u \frac{\partial p}{\partial U_3} & u \frac{\partial p}{\partial U_4} & u \left(1 + \frac{\partial p}{\partial U_5} \right) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Derivace tlaku podle konzervativních proměnných jsou v tomto tvaru

$$\frac{\partial p}{\partial U_i} = \frac{\partial p}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial U_i} + \frac{\partial p}{\partial e} \frac{\partial e}{\partial U_i} = \alpha_1 \frac{\partial p}{\partial U_i} + \beta_1 \frac{\partial e}{\partial U_i} \quad (3.8)$$

Po provedení derivací hustoty a vnitřní energie podle konzervativních proměnných dostaneme pro derivace tlaku

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p}{\partial U_1} &= \alpha_1 - \frac{\beta_1}{\rho}(E - V^2) = a^2 - \frac{\beta_1}{\rho}(H - V^2) & (3.9) \\
\frac{\partial p}{\partial U_2} &= -\frac{\beta_1}{\rho}u \\
\frac{\partial p}{\partial U_3} &= -\frac{\beta_1}{\rho}v \\
\frac{\partial p}{\partial U_4} &= -\frac{\beta_1}{\rho}w \\
\frac{\partial p}{\partial U_5} &= \frac{\beta_1}{\rho}
\end{aligned}$$

U derivace $\frac{\partial p}{\partial U_1}$ je alternativní vyjádření pomocí rychlosti zvuku, pro kterou platí $a^2 = \alpha_1 + \frac{\beta_1 p}{\rho^2}$. Jakobián toku ve směru normály

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -u^2 + \alpha_1 - \frac{\beta_1}{\rho}(E - V^2) & u(2 - \frac{\beta_1}{\rho}) & -v\frac{\beta_1}{\rho} & -w\frac{\beta_1}{\rho} & \frac{\beta_1}{\rho} \\ -uv & v & u & 0 & 0 \\ -uw & w & 0 & u & 0 \\ u[\alpha_1 - \frac{\beta_1}{\rho}(E - V^2) - H] & H - u^2\frac{\beta_1}{\rho} & -uv\frac{\beta_1}{\rho} & -uw\frac{\beta_1}{\rho} & u(1 + \frac{\beta_1}{\rho}) \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Vlastní čísla matice $\mathbb{A}(\mathbf{U})$ jsou následující

$$\lambda_1(\mathbf{U}) = u - a, \quad (3.11)$$

$$\lambda_2(\mathbf{U}) = \lambda_3(\mathbf{U}) = \lambda_4(\mathbf{U}) = u \quad (3.12)$$

$$\lambda_5(\mathbf{U}) = u + a \quad (3.13)$$

K nim přidružené pravostranné vlastní vektory jsou

$$\mathbf{K}_1(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 1 \\ u - a \\ v \\ w \\ H - ua \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_2(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ v \\ w \\ H - \frac{\rho a^2}{\beta_1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_3(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ v \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{K}_4(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ w \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_5(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 1 \\ u + a \\ v \\ w \\ H + ua \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Z důvodu násobnosti 3 vlastního čísla u představují vektory \mathbf{K}_3 a \mathbf{K}_4 tzv. zobecněné vlastní vektory. Protože jsou vlastní čísla reálná a přidružené vlastní vektory jsou lineárně nezávislé je systém Eulerových rovnic hyperbolický. Matici $\mathbb{A}(\mathbf{U})$ lze tzv. diagonalizovat. Platí

$$\mathbb{A} = \mathbb{K}^{-1} \mathbb{A} \mathbb{K} \quad (3.16)$$

$$\mathbb{A} = \mathbb{K} \mathbb{A} \mathbb{K}^{-1} \quad (3.17)$$

kde \mathbb{K} je matice vlastních vektorů umístěných do sloupců a \mathbb{A} je diagonální matice vlastních čísel.

Charakter j -té vlny, která šíří informaci s rychlostí λ_j zjistíme pomocí derivace této rychlosti ve směru vlastního vektoru \mathbf{K}_j . Pro jednotlivé vlny jsou tyto derivace následující

$$\frac{\partial \lambda_1(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \cdot \mathbf{K}_1 = -\frac{u}{\rho} - \left(\frac{\partial a}{\partial \rho} \right)_e - \left(\frac{\partial a}{\partial e} \right)_\rho \frac{p}{\rho^2} \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial \lambda_{2,3,4}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \cdot \mathbf{K}_{2,3,4} = 0 \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial \lambda_5(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \cdot \mathbf{K}_5 = -\frac{u}{\rho} + \left(\frac{\partial a}{\partial \rho} \right)_e + \left(\frac{\partial a}{\partial e} \right)_\rho \frac{p}{\rho^2} \quad (3.20)$$

Protože výraz v hranaté závorce je vždy kladný, vlny přidružené k λ_1 a λ_5 jsou ryze nelineární, zatímco vlny přidružené k $\lambda_{2,3,4}$ jsou lineární. Nelinearita v tomto významu znamená, že charakteristiky při průchodu diskontinuitou mění sklon. Pokud se sbíhají vytváří rázovou vlnu, pokud se rozbíhají tvoří expanzní vlnu.

Homogenita funkce toku \mathbf{F}

Pro dokonalý plyn platí, že vektorová funkce toků \mathbf{F} je homogenní 1. řádu. To znamená, že je splněna rovnost

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \mathbf{U} = \mathbb{A} \mathbf{U} \quad (3.21)$$

Tato podmínka přechází na podmínku pro tlak ve tvaru

$$p = \frac{\partial p}{\partial \mathbf{U}} \mathbf{U} = \rho \alpha_1 = \rho \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_e \quad (3.22)$$

$$p = \rho \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_e = \rho a^2 - p \frac{\beta_1}{\rho} = \rho a^2 - \frac{p (p_T)_\rho}{\rho c_v} = \frac{\rho - (p_T)_\rho}{c_p} a^2 \quad (3.23)$$

3.1.2 Nekonzervativní tvar s tlakem

Zavedeme transformaci z konzervativních proměnných $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E)^T$ do primitivních proměnných $\mathbf{W} = (\rho, u, v, w, p)^T$ s jakobiánem této transformace $J = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{W}}$. Pro složky vektoru $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{W})$ v nových souřadnicích platí

$$\begin{aligned} U_1 &= W_1 \\ U_2 &= W_1 W_2 \\ U_3 &= W_1 W_3 \\ U_4 &= W_1 W_4 \\ U_5 &= W_1 \left(e(W_1, W_5) + \frac{W_2^2 + W_3^2 + W_4^2}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.24)$$

K vyjádření jakobiánu je potřeba znát derivace vnitřní energie podle hustoty a podle tlaku. Tyto derivace mají jednoduchý tvar

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_p = \frac{\alpha_1}{\beta_1} \quad (3.25)$$

$$\left(\frac{\partial e}{\partial p} \right)_\rho = \frac{1}{\beta_1} \quad (3.26)$$

a pro jakobián a jeho inverzi dostaneme

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ u & \rho & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & \rho & 0 & 0 \\ w & 0 & 0 & \rho & 0 \\ E - \rho \frac{\alpha_1}{\beta_1} & \rho u & \rho v & \rho w & \frac{\rho}{\beta_1} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{u}{\rho} & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{v}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 \\ -\frac{w}{\rho} & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 \\ a^2 - \frac{\beta_1}{\rho}(H - V^2) & -u \frac{\beta_1}{\rho} & -v \frac{\beta_1}{\rho} & -w \frac{\beta_1}{\rho} & \frac{\beta_1}{\rho} \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Po transformaci dostaneme Eulerovy rovnice v kvazilineárním tvaru

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + A(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (3.29)$$

kde matice $A(\mathbf{W})$ je tzv. podobná matici $A(\mathbf{U})$

$$A(\mathbf{W}) = J^{-1}A(\mathbf{U})J = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & \rho a^2 & 0 & 0 & u \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

Vlastnost podobnosti má za důsledek, že vlastní čísla jsou stejná a pro j -tý vlastní vektor lze odvodit $K_j(\mathbf{W}) = J^{-1}K_j(\mathbf{U})$

$$\mathbf{K}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{a}{\rho} \\ 0 \\ 0 \\ a^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\rho} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\rho} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_5 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{a}{\rho} \\ 0 \\ 0 \\ a^2 \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

Levostranné vlastní vektory lze získat pomocí inverze matice \mathbf{K} , $L = K^{-1}$. Vlastní vektory potom mají tvar

$$\mathbf{L}_1 = \left(0, -\frac{\rho}{2a}, 0, 0, \frac{1}{2a^2}\right) \quad (3.32)$$

$$\mathbf{L}_2 = \left(1, 0, 0, 0, -\frac{1}{a^2}\right) \quad (3.33)$$

$$\mathbf{L}_3 = \left(0, 0, \rho, 0, 0\right) \quad (3.34)$$

$$\mathbf{L}_4 = \left(0, 0, 0, \rho, 0\right) \quad (3.35)$$

$$\mathbf{L}_5 = \left(0, \frac{\rho}{2a}, 0, 0, \frac{1}{2a^2}\right) \quad (3.36)$$

3.1.3 Nekonzervativní tvar s entropií

Zavedeme transformaci z konzervativních proměnných $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E)^T$ do primitivních proměnných $\mathbf{W} = (\rho, u, v, w, s)^T$ s jakobiánem této transformace $J = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{W}}$. Pro složky vektoru $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{W})$ v nových souřadnicích platí

$$U_1 = W_1 \quad (3.37)$$

$$U_2 = W_1 W_2$$

$$U_3 = W_1 W_3$$

$$U_4 = W_1 W_4$$

$$U_5 = W_1 \left(e(W_1, W_5) + \frac{W_2^2 + W_3^2 + W_4^2}{2} \right)$$

K vyjádření jakobiánu je potřeba znát derivace vnitřní energie podle hustoty a podle entropie. Tyto derivace mají následující tvar

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s = \frac{p}{\rho^2} \quad (3.38)$$

$$\left(\frac{\partial e}{\partial s}\right)_\rho = T \quad (3.39)$$

a pro jakobián a jeho inverzi dostaneme

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ u & \rho & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & \rho & 0 & 0 \\ w & 0 & 0 & \rho & 0 \\ H & \rho u & \rho v & \rho w & \rho T \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{u}{\rho} & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{v}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 \\ -\frac{w}{\rho} & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 \\ -\frac{H - v^2}{\rho T} & -\frac{u}{\rho T} & -\frac{v}{\rho T} & -\frac{w}{\rho T} & \frac{1}{\rho T} \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

Po transformaci dostaneme Eulerovy rovnice v kvazilineárním tvaru

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + A(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (3.42)$$

kde matice $A(\mathbf{W})$ je tzv. podobná matici $A(\mathbf{U})$

$$A(\mathbf{W}) = J^{-1}A(\mathbf{U})J = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 & 0 \\ \frac{a^2}{\rho} & u & 0 & 0 & \frac{\beta_1 T}{\rho} \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

Vlastnost podobnosti má za důsledek, že vlastní čísla jsou stejná a pro j -tý vlastní vektor lze odvodit $K_j(\mathbf{W}) = J^{-1}K_j(\mathbf{U})$

$$\mathbf{K}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{a}{\rho} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{a^2}{\beta_1 T} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\rho} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\rho} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_5 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{a}{\rho} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

Levostranné vlastní vektory lze získat pomocí inverze matice K , $L = K^{-1}$. Vlastní vektory potom mají tvar

$$\mathbf{L}_1 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\rho}{2a}, 0, 0, \frac{\beta_1 T}{2a^2} \right) \quad (3.45)$$

$$\mathbf{L}_2 = \left(0, 0, 0, 0, -\frac{\beta_1 T}{a^2} \right) \quad (3.46)$$

$$\mathbf{L}_3 = \left(0, 0, \rho, 0, 0 \right) \quad (3.47)$$

$$\mathbf{L}_4 = \left(0, 0, 0, \rho, 0 \right) \quad (3.48)$$

$$\mathbf{L}_5 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\rho}{2a}, 0, 0, \frac{\beta_1 T}{2a^2} \right) \quad (3.49)$$

V předchozích maticích/vektorech pro výrazy s β_1 platí následující rovnost $\beta_1 T = \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho$.

3.2 Stavová rovnice

V této části představíme vhodné modely stavové rovnice pro vodu. Jedná se o důležitou část v matematickém modelu proudění mokré páry s kondenzací. Budeme se zvláště zajímat o plynnou a kapalnou fázi. Nejjednodušším a nejméně přesným je model dokonalého plynu, který se řídí lineární závislosti tlaku na teplotě a hustotě, s konstantními hodnotami měrných tepelných kapacit c_p a c_v . Naproti tomu nejsložitějším a nejpřesnějším popisem je použití empirických mnohoparametrových funkcí. Při vhodné optimalizaci parametrů dokážou aproximovat termodynamické veličiny až na úroveň chyby jejich experimentálního měření [71]. Určitým kompromisem mezi přesností a výpočetní náročností mohou být například speciální kubické stavové rovnice. Často se pro přibližné výpočty používají modifikace parametrů dokonalého plynu podle okrajových podmínek počítaného problému, případně se tyto parametry upravují lokálně. Získá se tak jisté zpřesnění výpočtu s náročností porovnatelnou s dokonalým plynem. Pro tento typ stavové rovnice se používá označení pseudo-dokonalý plyn. Implementace multiparametrových stavových rovnic do modelu proudění má za následek výrazné prodloužení výpočtu. Hlavní parametry jsou totiž dány implicitně ve formě nelineární rovnice (nebo i soustavy nelineárních rovnic), kterou je nutno řešit vhodnou numerickou metodou. Výrazné zrychlení výpočtů je možné pomocí interpolačních splinů a tabelovaných hodnot.

3.2.1 Obecně o stavové rovnici

Makroskopický stav termicky homogenního systému v termodynamické rovnováze je určen teplotou a souborem vnějších parametrů A_1, \dots, A_n [51]. Funkci F_i , která udává závislost vnitřních parametrů systému a_1, \dots, a_n na vnějších parametrech a teplotě nazveme stavovou rovnicí

$$a_i = F_i(A_j, T) \quad (3.50)$$

Stavové rovnice reálné tekutiny se určují výhradně experimentálně. Příkladem stavové rovnice je klasická závislost $p = p(v, T)$ pro tlak jednoduchého homogenního systému nebo závislost $f = f(\rho, T)$ pro volnou energii systému. Každá stavová rovnice musí v limitě za nízkých tlaků přecházet na rovnici ideálního plynu $p = RT/v$ a musí splňovat podmínku termodynamické stability $(\partial p / \partial v)_T < 0$.

3.2.2 Úplná a neúplná formulace stavové rovnice

Stavové rovnice můžeme z hlediska formulace rozdělit do dvou základních skupin na tzv. neúplné a úplné. Neúplné jsou obvykle ve tvaru pro tlak $p = p(\rho, T)$ anebo ve tvaru pro kompresní faktor $z = z(\rho, T)$. Předchozí dva tvary se označují jako termická stavová rovnice. Jejich nevýhodou je, že pro získání kalorických veličin se musí integrovat a k tomu je potřeba dodat závislost měrné izobarické tepelné kapacity ve stavu ideálního plynu na teplotě $c_p^\circ = c_p^\circ(T)$, což se označuje jako kalorická stavová rovnice. Naproti tomu úplné stavové rovnice, např. ve formulaci pro volnou (Helmholtzovou) energii $f = f(\rho, T)$, se vyznačují tím, že všechny veličiny lze určit pouze ze znalosti funkce f a její derivací. Úplná stavová rovnice se skládá z dvou příspěvků $f = f^\circ + f^r$. Člen f° představuje příspěvek hypotetického ideálního plynu a obsahuje v sobě vztah pro c_p° . Druhý člen f^r je tzv. reziduální člen, jenž modeluje odchylku reálného plynu od ideálního chování. Tento člen v sobě zahrnuje explicitní vztah pro tlak.

3.2.3 Rovnice IAPWS-95 v úplné formulaci

Uvedeme příklad úplné stavové rovnice ve formulaci pro volnou energii f . Tato formulace je použita v našem CFD kódu, konkrétně jde o speciální rovnici páry pro metastabilní oblast, kterou lze ovšem použít i v oblasti přehřáté páry [79].

Ideální člen úplné formulace

Ideální člen $f^\circ = e^\circ - Ts^\circ$ lze odvodit integrací prvního zákona termodynamiky pro entropii a pomocí vztahu pro vnitřní energii ideálního plynu

$$ds^\circ = \frac{c_v^\circ}{T} dT - \frac{R}{\rho} d\rho \quad \rightarrow \quad s^\circ = s_0^\circ + \int_{T_{ref}}^T \frac{c_v^\circ}{T} dT - R \ln \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right) \quad (3.51)$$

$$de^\circ = c_v^\circ dT \quad \rightarrow \quad e^\circ = e_0^\circ + \int_{T_0}^T c_v^\circ dT \quad (3.52)$$

Dosazením do f° dostaneme

$$f^\circ = f^\circ(\rho, T) = e_0^\circ - Ts_0^\circ + \int_{T_0}^T c_v^\circ dT - T \int_{T_0}^T \frac{c_v^\circ}{T} dT + RT \ln \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right) \quad (3.53)$$

Integrovat můžeme po dosazení $c_v^\circ(T)$ a vhodném zvolení referenčních hodnot $(\bullet)_0$. Vztah pro $c_v^\circ(T)$ je k dispozici z experimentálních měření od různých autorů pro různé

látky. Pro vodu lze tento vztah najít např. zde [79]. Dále zavedeme bezrozměrnou volnou energii ideálního plynu $\phi^\circ = f^\circ/(RT)$ s bezrozměrnou hustotou $\delta = \rho/\rho_c$ a bezrozměrnou teplotou $\tau = T_c/T$. V případě rovnice IAPWS-95 pro metastabilní oblast je vztah pro ϕ° následující [23], [64]

$$\phi^\circ(\delta, \tau) = \ln(\delta) + n_1^\circ + n_2^\circ \tau + n_3^\circ \ln(\tau) + \sum_{i=4}^8 n_i^\circ \ln[1 - \exp(-\gamma_i^\circ \tau)] \quad (3.54)$$

Parametry této rovnice n_i° , γ_i° jsou uvedeny v citovaných pracích.

Reziduální člen úplné formulace

Reziduální člen f^r obsahuje relaci pro tlak $p = p(\rho, T)$. Pro tlak z prvního zákona termodynamiky ve tvaru $df = -sdT + p/\rho^2 d\rho$ platí

$$p = \rho^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} \right)_T = \rho^2 \left(\frac{\partial f^\circ + f^r}{\partial \rho} \right)_T = \rho RT + \rho^2 \left(\frac{\partial f^r}{\partial \rho} \right)_T \quad (3.55)$$

kde ρRT je tlak ideálního plynu. Použitím bezrozměrné volné energie ϕ , bezrozměrné hustoty δ a bezrozměrné teploty τ dostaneme pro reziduální bezrozměrnou volnou energii vztah

$$\phi^r = \phi^r(\delta, \tau) = \int_0^\delta \frac{z(\delta, \tau) - 1}{\delta} d\delta \quad (3.56)$$

Tento vztah je návodem jak z termické stavové rovnice pro tlak získat ekvivalentní formulaci pro reziduální volnou energii. V případě rovnice IAPWS-95 pro metastabilní oblast je reziduální funkce v tomto tvaru

$$\phi^r(\delta, \tau) = \sum_{i=1}^7 n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} \quad (3.57)$$

kde parametry n_i , d_i a t_i jsou uvedeny např. v [64].

3.2.4 Kubická rovnice v úplné formulaci

Uvedme příklad nejjednodušší van der Waalsovy kubické rovnice. Termická stavová rovnice pro tlak je v tomto tvaru

$$\left(p + \frac{a}{v^2} \right) (v - b) = RT \quad (3.58)$$

Tuto rovnici lze přepsat do tvaru pro kompresní faktor $z = z(\delta, \tau)$ následovně

$$z = \frac{1}{1 - B\delta} + C\delta\tau \quad (3.59)$$

$$B = b\rho_c \quad (3.60)$$

$$C = -\frac{a\rho_c}{RT_c} \quad (3.61)$$

Integrací dostaneme ekvivalentní reziduální volnou energii ve tvaru

$$\phi^r = -\ln(1 - B\delta) + C\delta\tau \quad (3.62)$$

Pro ideální část volné energie lze použít stejný vztah jako v případě rovnice IAPWS-95 pro metastabilní oblast, viz rovnice (3.54).

Podobně lze postupovat pro jinou kubickou rovnici Redlich-Kwong-Aungier [15], která je vhodná pro modelování termodynamických parametrů v turbostrojích. Rezi-
duální volná energie je v tomto tvaru [9]

$$\phi^r(\delta, \tau) = n\tau^t \ln(1 - d_1\delta) - \ln(1 - d_2\delta) \quad (3.63)$$

kde n , t , d_1 a d_2 jsou konstanty odvozené v uvedené citaci.

3.2.5 Rovnice pseudo-dokonalého plynu v úplné formulaci

Rovnice dokonalého plynu je nejběžnější stavová rovnice v numerických simulacích. V základní verzi s obecně platnými parametry (např. κ a c_p) ji nelze použít ve výpočtech, při kterých očekáváme neideální chování. Přesnost dokonalého plynu lze zlepšit, pokud jeho parametry modifikujeme ad-hoc ze zadaných okrajových podmínek. Při podzvukovém vstupu ze zadaných hodnot celkového tlaku p_0 a celkové teploty T_0 lze pomocí pomocné reálné stavové rovnice dopočítat ostatní stagnační parametry: hustotu ρ_0 , entalpii h_0 a entropii s_0 . Při podzvukovém výstupu se zadaným statickým tlakem p_2 předpokládáme isentropické proudění, proto $s_2 = s_0$. Z hodnot p_2 a s_2 lze opět použitím pomocné reálné stavové rovnice dopočítat ostatní veličiny na výstupu: hustotu ρ_2 , entalpii h_2 a teplotu T_2 . Pomocí uvedených veličin lze modifikovat dvě veličiny dokonalého plynu c_p a R tímto způsobem

$$\bar{c}_p = \frac{\Delta h}{\Delta T} = \frac{h_0 - h_2}{T_0 - T_2} \quad (3.64)$$

$$\bar{R} = \frac{1}{2} \left(\frac{p_0}{\rho_0 T_0} + \frac{p_2}{\rho_2 T_2} \right) \quad (3.65)$$

Pro modifikovanou hodnotu isentropického exponentu lze použít vztah pro ideální plyn

$$\bar{\kappa} = \frac{\bar{c}_p}{\bar{c}_p - \bar{R}} \quad (3.66)$$

Uveďme příklad tvaru funkce ϕ° pro dokonalý plyn. Pro ten platí $c_v^\circ = \frac{R}{\kappa-1}$. Po úpravách dostaneme

$$\phi^\circ = \ln(\delta) + n_1^\circ + n_2^\circ\tau + n_3^\circ \ln(\tau) \quad (3.67)$$

kde pro koeficienty n_i° platí

$$n_1^\circ = -\frac{s_0^\circ - c_v^\circ \ln(T_0) + R \ln(\rho_0)}{R} + \frac{c_v^\circ}{R} [1 - \ln(T_c)] + \ln(\rho_c) \quad (3.68)$$

$$n_2^\circ = \frac{e_0^\circ - c_v^\circ T_0}{RT_c} \quad (3.69)$$

$$n_3^\circ = \frac{c_v^\circ}{R} \quad (3.70)$$

Kalorickou stavovou rovnicí dokonalého plynu určuje dvojice parametrů. Může to být například dvojice κ , R . Známe-li tuto dvojici a referenční hodnoty vnitřní energie e_0° , entropie s_0° a teploty T_0 , potom lze pro dokonalý plyn použít úplnou stavovou rovnici $\phi = \phi^\circ$. Rovnice IAPWS-95 [64] uvádí tyto hodnoty koeficientů

$$n_1^\circ = -8.3204464837497 \quad (3.71)$$

$$n_2^\circ = 6.6832105275932 \quad (3.72)$$

$$n_3^\circ = 3.00632 \quad (3.73)$$

Referenční stav je stav syté páry v trojném bodě. Z těchto hodnot n_i° lze pomocí vztahů (3.68) - (3.70) spočítat parametry ideálního plynu pro vodní páru

$$c_v^\circ \approx 1387.47 \quad (3.74)$$

$$\kappa \approx 1.33 \quad (3.75)$$

3.2.6 Speciální stavová rovnice pro CFD

Rovnice je formulovaná pro bezrozměrnou entropii v tomto tvaru

$$\eta = \eta(\delta, \xi) = \eta^\circ(\delta, \xi) + \eta^r(\delta, \xi) \quad (3.76)$$

ve kterém ideální část entropie η° a reziduální část entropie η^r jsou dány těmito vztahy

$$\eta^\circ = \sum_{i=0}^9 c_i \xi^i - \ln \delta, \quad (3.77)$$

$$\eta^r = -\delta (b_1 + b_2 \xi^{-2} + b_3 \xi^{-4}), \quad (3.78)$$

s konstantami c_i a b_1 , b_2 , b_3 . Bezrozměrné nezávislé proměnné jsou

$$\delta = \frac{\rho}{\rho_c}, \quad \xi = \beta_2 - \frac{1}{\frac{U}{RT_c} - \beta_1}, \quad (3.79)$$

s konstantami β_1 , β_2 . Podrobnosti k této rovnici a procentální odchylky od experimentálních dat lze najít zde [45]. Pro následný výpočet tlaku a teploty lze odvodit tyto vztahy

$$p = \rho RT \left(1 - \delta \frac{\partial \eta^r}{\partial \delta} \right), \quad (3.80)$$

$$T = \frac{T_c}{(\beta_2 - \xi)^2 \frac{\partial \eta}{\partial \xi}}. \quad (3.81)$$

Uvedenou rovnici lze použít pouze při nižších tlacích. Hranice použitelnosti je dána minimální hodnotou entropie $s = 7.5$ kJ/kg/K. Při nižších hodnotách entropie odchylky postupně narůstají. Hlavní výhodou této stavové rovnice je skutečnost, že výpočet vnitřních toků ve výpočetní oblasti lze realizovat explicitním způsobem.

3.2.7 Interpolační metoda pro reálný plyn

Při výpočtech termodynamických veličin proudícího média se nejvíc výpočetního času spotřebuje na řešení algebraické rovnice pro tlak ze známých hodnot hustoty a vnitřní energie, $f(p, \rho, e) = 0$. V případě multiparametrových úplných stavových rovnic (např. IAPWS-95) je tato rovnice nelineární a k jejímu řešení je nutné užít iterační metody. Explicitní reálná stavová rovnice s nezávislými proměnnými hustota a vnitřní energie při vyšších tlacích zatím nebyla vyvinuta. Z toho důvodu je řešením užít interpolačních spline funkcí. Podle doporučení IAPWS použijeme bi-kvadratickou interpolaci s ekvidistantními kroky obdélníkové sítě [62]. Tato interpolace zaručí spojitost prvních derivací aproximovaných veličin. Jednotlivé spline funkce jsou vytvořeny následovně

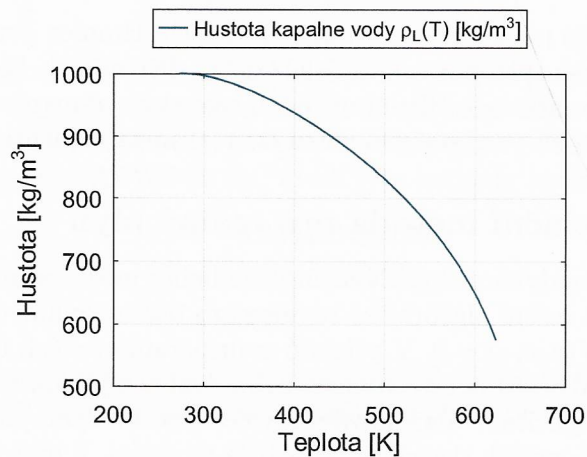
$$\bar{z}_{[i,j]}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 a_{ijmn} (\bar{x}_1 - \bar{x}_{1,i})^{m-1} (\bar{x}_2 - \bar{x}_{2,j})^{n-1} \quad (3.82)$$

kde \bar{x}_1 a \bar{x}_2 jsou transformované souřadnice, $\bar{z}_{[i,j]}$ je transformovaná aproximovaná veličina v buňce $[i, j]$, $\bar{x}_{1,i}$ a $\bar{x}_{2,j}$ jsou transformované hodnoty nezávislých proměnných v uzlu (i, j) a a_{ijmn} je celkem 9 koeficientů spline funkce, které mají lokální platnost v buňce $[i, j]$. Soubor všech koeficientů a_{ijmn} je získán řešením soustavy lineárních rovnic. Detaily k vytvoření této soustavy lze najít v [72]. Algoritmus výpočtu je následující. Vstupní hodnoty x_1 a x_2 se transformují na hodnoty \bar{x}_1 a \bar{x}_2 pomocí příslušných transformačních funkcí. Vyhledávacím algoritmem se zjistí lokace buňky $[i, j]$. Následně je pomocí vztahu (3.82) spočítána hodnota veličiny \bar{z} , která se následně zpětnou transformací přepočítá na finální hodnotu z . Konkrétní transformace pro hustotu ρ , vnitřní energii e a tlak p jsou uvedeny v [62]. Implementací uvedené SBTL metody se povedlo získat prakticky totožný výpočetní čas než při implementaci dokonalého plynu.

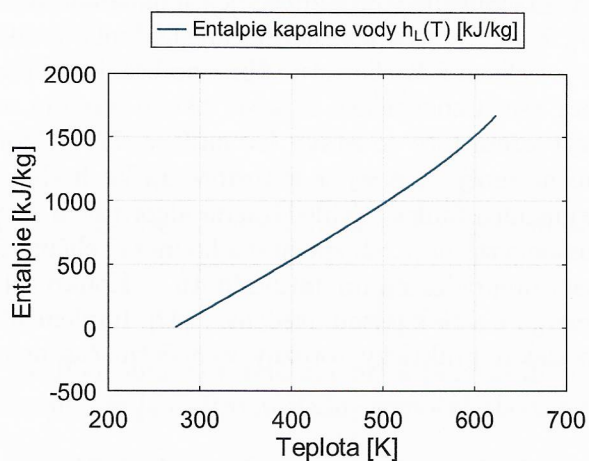
3.2.8 Termofyzikální vlastnosti kapalně fáze

Vlastnosti kapalně vody aproximujeme jejími saturačními hodnotami. Uvažujeme, že kapky jsou nestlačitelné a jejich vlastnosti závisí pouze na teplotě. Pro výpočet saturačních hodnot použijeme rovnice IAPWS-97 pro saturační křivku a rovnice pro kapalnou vodu (oblast 1) [78], [65]. Diskrétní průběhy aproximujeme metodou

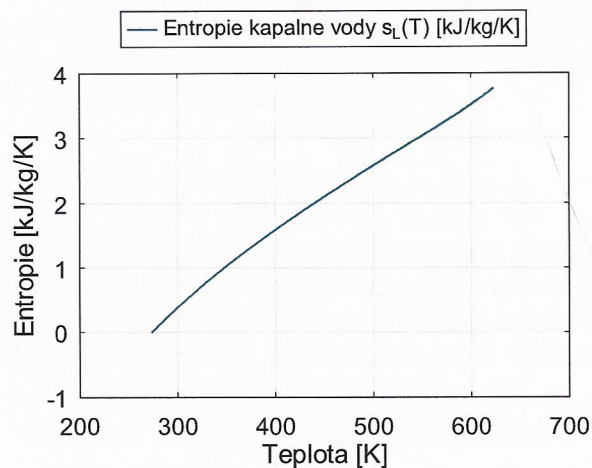
nejmenších čtverců. Na obr. 3.1 je průběh hustoty kapalné fáze, na obr. 3.2 je průběh entalpie a na obr. 3.3 je průběh entropie. Při teplotě $T = 273.15$ K máme nulové hodnoty entalpie a entropie, což jsou zvolené referenční hodnoty standardem IAPWS.



Obr. 3.1: Hustota kapalné fáze v závislosti na teplotě.

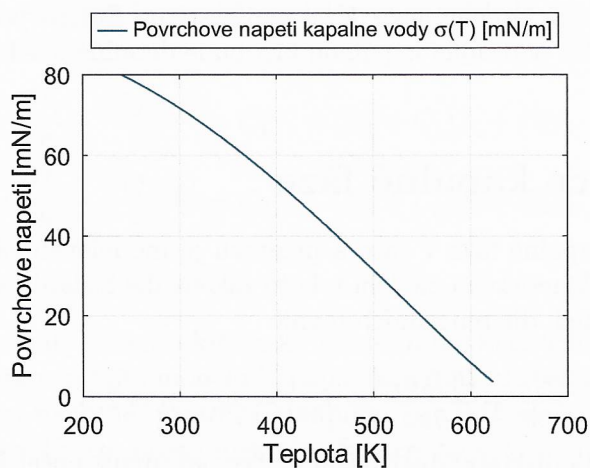


Obr. 3.2: Entalpie kapalné fáze v závislosti na teplotě.



Obr. 3.3: Entropie kapalné fáze v závislosti na teplotě.

Povrchové napětí počítáme opět z doporučené rovnice IAPWS [63]. Na obr. 3.4 je jeho průběh v závislosti na teplotě.



Obr. 3.4: Povrchové napětí vody v závislosti na teplotě.

3.3 Eulerovy rovnice pro směs

Uvažujeme klasický systém Eulerových rovnic ve formě bilančních rovnic pro hmotu, hybnost a celkovou energii pro směs. Tento systém je identický se systémem Eulerových rovnic pro reálný plyn. V konzervativním tvaru lze tento systém v normálovém směru zapsat následovně

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (3.83)$$

kde \mathbf{U} je vektor konzervativních proměnných pro směs

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{pmatrix} \quad (3.84)$$

V tomto vektoru je ρ hustota směsi, u resp. v a w jsou složky vektoru rychlosti směsi v normálovém směru res. tangenciálních směrech. Veličina E je celková energie směsi a je součtem vnitřní energie a kinetické energie, $E = e + \frac{V^2}{2}$, kde V je velikost vektoru rychlosti. Vektor \mathbf{F} představuje tok konzervativních veličin v normálovém směru

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix} \quad (3.85)$$

kde p je statický tlak směsi. Rovnice jsou uzavřeny stavovou rovnicí pro tlak $p = p_V(\rho_V, e_V)$. Hustotu páry ρ_V a vnitřní energii páry e_V získáme pomocí charakteristických veličin kapalně fáze. Uzavření systému Eulerových rovnic pro směs rozšířeného o systém popisující kapalnou fázi bude detailně uveden v poslední části této kapitoly.

3.4 Rovnice kapalně fáze

Vývoj množství kapalně fáze v čase a prostoru je modelován zákonem zachování hmoty. Vyjdeme z kinetického modelu tohoto zákona dle Szilárda a Farkase ve formě systému n parciálních diferenciálních rovnic

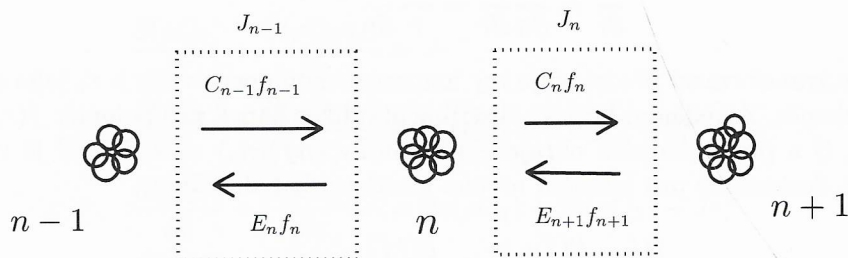
$$\frac{\partial f_n}{\partial t} + \frac{\partial (f_n u_j)}{\partial x_j} = J_{n-1} - J_n, \quad n = 2, 3, \dots \quad (3.86)$$

kde f_n je hustota diskretní distribuční funkce, jež určuje počet kapek obsahujících právě n molekul v jednotce objemu směsi a J_n je zdrojová funkce pozostávající z rychlosti kondenzace C_n a rychlosti vypařování E_n

$$J_n = C_n f_n - E_n f_{n+1} \quad (3.87)$$

Vztahy pro C_n a E_n jsou uvedeny např. v [43]. Zdrojová část na pravé straně rovnice uvažuje zjednodušený model interakce kapky s okolím, při kterém kapka

v jednom časovém okamžiku přijímá resp. odevzdává pouze jednu molekulu (tzv. monomer) vody. Vzájemné interakce n -merů (kapek tvořených n molekulami) nejsou povoleny. Představu o této interakci dává obrázek



Obr. 3.5: Szilárdův-Farkasův model nukleace.

Počet kapek obsahujících nanejvýš N molekul v jednotce objemu je určen diskrétní distribuční funkcí

$$F(N) = \sum_{n=2}^N f_n \quad (3.88)$$

V jednotlivých rovnicích kinetický model vypadá následovně

$$\frac{\partial f_2}{\partial t} + \frac{\partial(f_2 u_j)}{\partial x_j} = C_1 f_1 - (E_1 + C_1) f_1 + E_2 f_2 \quad (3.89)$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} + \frac{\partial(f_3 u_j)}{\partial x_j} = C_2 f_2 - (E_2 + C_2) f_2 + E_3 f_3 \quad (3.90)$$

⋮

Nutno poznamenat, že tento kinetický model nijak nerozlišuje mezi nukleací a růstem. Implementace tohoto modelu kapalně fáze by z hlediska časové náročnosti výpočtu bylo velmi náročné, proto přistoupíme ke zjednodušenému modelu. Pro dostatečně velké kapky lze místo diskrétní funkce $f_n(\mathbf{x}, t)$ použít spojitou funkci $f(n, \mathbf{x}, t)$ a zdrojový člen na pravé straně vhodně nahradit Taylorovým rozvojem. Zanedbáme-li všechny členy tohoto rozvoje až na člen lineární, dostaneme pro spojitou funkci velikosti kapek f jedinou rovnici. Tato tzv. kondenzační rovnice má tento tvar

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(f u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial(\dot{n} f)}{\partial n} \quad (3.91)$$

V této rovnici má \dot{n} význam průměrného růstu kapek, $\dot{n} = \alpha_n - \beta_n$. Tento model předpokládá $n > n_0$, kde n_0 je minimální velikost kapky. Ta se určuje obvykle jako $n_0 = \epsilon n_c$, kde n_c je kritická velikost a $\epsilon \in (1, 2]$. Pro $n \in [2, n_0)$ pokládáme $f = 0$, což znamená, že zanedbáme všechny kapky s počtem molekul v uvedeném rozsahu. Od

počtu kapek n přejdeme k ekvivalentnímu vyjádření velikosti kapky pomocí jejího poloměru r . Pro transformační vztah $r = r(n)$ a derivaci podle poloměru dostaneme

$$r = \left(\frac{nm_1}{\frac{4}{3}\pi\rho} \right)^{\frac{1}{3}} = r_1 n^{\frac{1}{3}} = r(n, r_1) \quad (3.92)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial r} = \frac{3n}{r} \frac{\partial}{\partial n} \quad (3.93)$$

v této transformaci představuje m_1 hmotnost monomeru vody a r_1 jeho ekvivalentní poloměr. Zavedením hustoty distribuční funkce kapek pro poloměr $f(r, \mathbf{x}, t) = \frac{3n}{r} f(n, \mathbf{x}, t)$ a po zohlednění okrajové podmínky $(\dot{n}f)(n_0) = J$, kde J je rychlost nukleace, dostaneme pro bilanční rovnici množství kapalné fáze

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial (f u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial (\dot{r}f)}{\partial r} + J\delta(r - r_0) \quad (3.94)$$

kde δ je Diracova funkce. Vidíme, že tento model řeší nukleaci a růst odděleně zavedením explicitních vztahů. Počet kapek s poloměrem menším než $r = \bar{r}$ je dán distribuční funkcí

$$F(\bar{r}) = \int_{r_0}^{\bar{r}} f(r, \mathbf{x}, t) dr \quad (3.95)$$

Zjevnou nevýhodou je apriorní neznalost hustoty distribuční funkce f . Proto přejdeme k další aproximaci zavedením k -tých momentů funkce f

$$\mu_k = \mu_k(\mathbf{x}, t) = \int f r^k dr, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.96)$$

Vynásobením kondenzační rovnice výrazem r^k a integrací tohoto součinu s využitím okrajových podmínek $f(r_0, \dots) = f(\infty, \dots) = 0$ dostaneme pro k -tý moment rovnici

$$\frac{\partial \mu_k}{\partial t} + \frac{\partial (\mu_k u_j)}{\partial x_j} = k \int_{r_0}^{\infty} \dot{r} f r^{k-1} dr + J r_c^k \quad (3.97)$$

K uzavření je potřeba vyjádřit integrál na pravé straně v uzavřeném tvaru. Propojení se systémem Eulerových rovnic pro směs suché páry a kapek je prostřednictvím hmotnostního zlomku kapalné fáze (vlhkosti), případně objemového zlomku kapalné fáze. S vlhkostí (objemovým zlomkem) souvisí poslední třetí moment μ_3 , proto v našem modelu použijeme první čtyři momenty pro $k = 0, 1, 2, 3$.

Pro uzavření se většinou používá konstatní náhrada $\dot{r}(r) \approx \dot{r}(\bar{r})$, kde \bar{r} je průměrný poloměr, pro který můžeme použít vztah $\bar{r} = \sqrt{\frac{\mu_2}{\mu_0}}$. V naší práci použijeme pro uzavření lineární aproximaci $\dot{r}(r) \approx a + br$, kde $a = \dot{r}(\bar{r}) - \bar{r}\dot{r}'(\bar{r})$ a $b = \dot{r}'(\bar{r})$. Pro derivaci růstu \dot{r}' použijeme analytický vztah. Dosazením do momentových rovnic a

zavedením substituce $\mu_k = \rho Q_k$, kde Q_k je specifický moment funkce f , dostaneme finální tvar momentových rovnic pro vývoj kapalně fáze

$$\frac{\partial(\rho Q_0)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Q_0 u_j)}{\partial x_j} = J \quad (3.98)$$

$$\frac{\partial(\rho Q_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Q_1 u_j)}{\partial x_j} = a(\rho Q_0) + b(\rho Q_1) + Jr_c \quad (3.99)$$

$$\frac{\partial(\rho Q_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Q_2 u_j)}{\partial x_j} = 2a(\rho Q_1) + 2b(\rho Q_2) + Jr_c^2 \quad (3.100)$$

$$\frac{\partial(\rho Q_3)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Q_3 u_j)}{\partial x_j} = 3a(\rho Q_2) + 3b(\rho Q_3) + Jr_c^3 \quad (3.101)$$

Pomocí uvedených momentů lze spočítat charakteristické parametry množství kapalně fáze. Celkový počet kapek v objemu V lze získat pomocí nultého momentu následovně

$$N = \rho Q_0 V \quad (3.102)$$

Pomocí posledního momentu μ_3 lze celkový objem kapalně fáze vyjádřit ve tvaru $V_L = \frac{4}{3}\pi\mu_3 V$, kde V je objem směsi. Potom pro objemový podíl kapalně fáze $\zeta = \frac{V_L}{V}$ a pro hmotnostní podíl kapalně fáze $\chi = \frac{m_L}{m}$ platí

$$\zeta = \frac{4}{3}\pi(\rho Q_3) \quad (3.103)$$

$$\chi = \frac{\rho_L}{\rho}\zeta = \frac{\frac{4}{3}\pi\rho_L(\rho Q_3)}{\rho} = \frac{4}{3}\pi\rho_L Q_3 \quad (3.104)$$

3.5 Finální model proudění

Výsledný model proudění s nerovnovážnou kondenzací získáme spojením Eulerových rovnic pro směs páry a kapek a momentových rovnic pro kapalnou fázi. Ve 3D v normálovém směru lze tento systém zapsat následovně

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial n} = \mathbf{S} \quad (3.105)$$

kde vektor konzervativních proměnných \mathbf{U} a vektor normálových toků konzervativních veličin \mathbf{F} je

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \\ \rho Q_0 \\ \rho Q_1 \\ \rho Q_2 \\ \rho Q_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \\ \rho Q_0 u \\ \rho Q_1 u \\ \rho Q_2 u \\ \rho Q_3 u \end{pmatrix} \quad (3.106)$$

Zdrojový vektor \mathbf{S} sestává z nukleační části a růstové části $\mathbf{S} = \mathbf{S}_J + \mathbf{S}_g$

$$\mathbf{S}_J = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ J \\ Jr_c \\ Jr_c^2 \\ Jr_c^3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_g = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ a\rho Q_0 + b\rho Q_1 \\ 2a\rho Q_1 + 2b\rho Q_2 \\ 3a\rho Q_2 + 3b\rho Q_3 \end{pmatrix} \quad (3.107)$$

Systém je uzavřen stavovou rovnicí pro výpočet tlaku p , vztahem pro výpočet rychlosti nukleace J a vztahy pro koeficienty a, b v linearizaci modelu růstu kapek $\dot{r} = a + br$. Tlak směsi uvažujeme totožný s tlakem páry, proto pro výpočet tlaku použijeme stavovou rovnici reálného plynu pro páru $p = p_V = p_V(\rho_V, e_V)$. Hustotu páry lze získat z objemového podílu

$$\rho_V = \frac{\rho - \alpha \rho_L}{1 - \alpha} \quad (3.108)$$

Kapitola 4

Numerické řešení

V této kapitole bude popsáno numerické řešení modelu proudění s konedenzací a jeho implementace do vlastního CFD kódu. Stručně popíšeme použitou metodu konečných objemů. Další část se věnuje způsobu prostorové diskretizace. Následně je popsána časová diskretizace a poslední část je věnována realizaci okrajových podmínek.

4.1 Metoda konečných objemů

Pro numerické řešení systému rovnic použijeme metodu konečných objemů. Jedná se o velmi rozšířenou metodu zejména pro problematiku proudění. Nejdříve se vhodně zvolená výpočetní oblast $\Omega \subset R^3$ pomocí výpočetní sítě rozdělí na konečnou množinu disjunktních objemů $\Omega_i \in \Omega$, kde $\Omega = \cup_{i=1}^{n_c} \Omega_i$, $\cap_{i=1}^{n_c} \Omega_i = \emptyset$ a n_c představuje celkový počet výpočetních buněk sítě. V našem případě použijeme nestrukturovanou síť se čtyřmi základními typy elementů - čtyřstěn, prisma, pyramida a šestistěn. V každém elementárním objemu sítě velikosti $V_i = \|\Omega_i\|$ je numerické řešení v čase t reprezentováno konstantní průměrnou hodnotou v tomto tvaru

$$\tilde{U}_i(t) = \frac{1}{V_i} \int_{\Omega_i} \mathbf{U}_i(\mathbf{x}, t) dV \quad (4.1)$$

Budeme uvažovat tzv. cell-centered přístup, při kterém je průměrný stav uvažován v těžišti objemu. V každém časovém okamžiku tak máme řešení reprezentováno množinou po částech konstantních stavů. Pro každý objem Ω_i platí výchozí systém rovnic v integrálním tvaru pro průměrný stav

$$\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial t} + \frac{1}{V_i} \int_{\partial \Omega_i} \mathbf{F}_i dA = \tilde{S}_i \quad (4.2)$$

kde \tilde{S}_i je v integrálním smyslu průměrný zdrojový člen v tomto tvaru

$$\tilde{S}_i(t) = \frac{1}{V_i} \int_{\Omega_i} \mathbf{S}_i(\mathbf{x}, t) dV \quad (4.3)$$

V dalším kroku následuje numerický výpočet normálového toku přes hranici objemu, při kterém je integrace přes celý povrch objemu nahrazena následujícím způsobem

$$\int_{\partial\Omega_i} \mathbf{F}_i dA \approx \sum_{j=1}^{(n_f)_i} \int_{\partial\Omega_{ij}} \mathbf{F}_{ij} dA \quad (4.4)$$

kde $(n_f)_i$ je počet stěn tvořících buňku Ω_i . Normálový tok přes stěnu $\partial\Omega_{ij}$ je počítán numericky obdélníkovou metodou. To znamená, že k výpočtu normálového toku potřebujeme znát pouze jeho hodnotu v těžišti příslušné stěny. Protože neznáme hodnotu \mathbf{U} v těžišti stěny, normálový tok aproximujeme pomocí tzv. schématu numerického toku, viz následující část. Označme numerický tok $\hat{\mathbf{F}}_{ij}$ a velikost stěny A_{ij} , kde $A_{ij} = \|\partial\Omega_{ij}\|$. Potom celkový normálový tok povrchem objemu budeme aproximovat následovně

$$\int_{\partial\Omega_i} \mathbf{F}_i dA \approx \sum_{j=1}^{(n_f)_i} \hat{\mathbf{F}}_{ij} A_{ij}. \quad (4.5)$$

Po provedení prostorové diskretizace ve formě výpočtů numerických toků dostaneme systém nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic pro neznámý vektor konzervativních proměnných $\tilde{\mathbf{U}}_i$

$$\frac{d\tilde{\mathbf{U}}_i}{dt} = -\frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^{(n_f)_i} \hat{\mathbf{F}}_{ij} A_{ij} + \tilde{\mathbf{S}}_i = \mathbf{R}_i + \tilde{\mathbf{S}}_i \quad (4.6)$$

kde \mathbf{R}_i je tzv. reziduum toků buňky Ω_i .

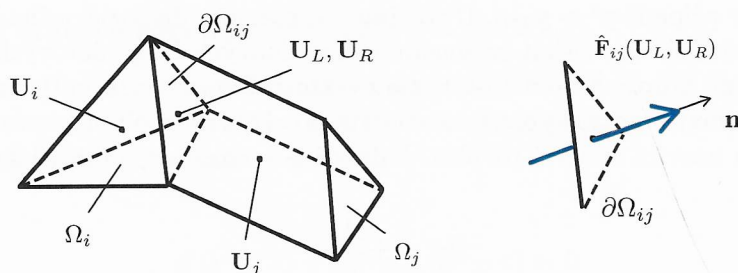
4.2 Numerický tok - schéma HLLC

Výpočet numerického toku přes stěnu konečného objemu provedeme jako přibližné řešení Riemannova problému v souřadném systému spojeného s těžištěm stěny a směrem x totožným s normálovým vektorem stěny. Stav vlevo \mathbf{U}_L a stav vpravo \mathbf{U}_R získáme vhodnou extrapolací z okolních buněk. V našem CFD kódu použijeme nejjednodušší konstantní extrapolaci

$$\hat{\mathbf{F}}_{ij} = \hat{\mathbf{F}}_{ij}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) \quad (4.7)$$

$$\mathbf{U}_L = \mathbf{U}_i \quad (4.8)$$

$$\mathbf{U}_R = \mathbf{U}_j \quad (4.9)$$

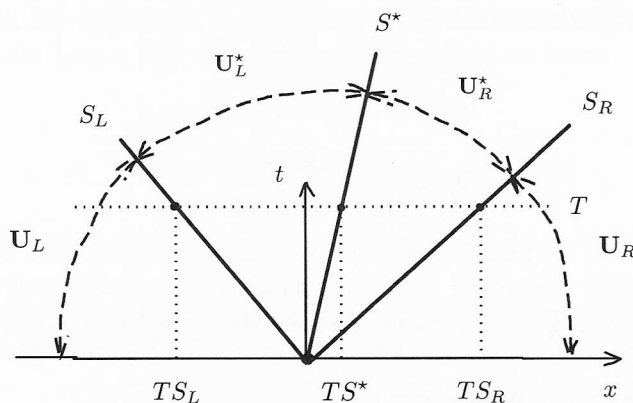


Obr. 4.1: Numerický tok stěnou

V následujícím textu budeme pro numerický tok na rozhraní používat značení $\mathbf{F}_{i+1/2}$. V případě schématu HLLC se z hlediska způsobu výpočtu numerického toku přes hranici buňky jedná o upwind metodu. Tok $\mathbf{F}_{i+1/2}$ se spočítá dosazením stavu systému $\mathbf{U}_{i+1/2}(\frac{x}{t} = 0)$

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1/2}(0)) \quad (4.10)$$

Stav $\mathbf{U}_{i+1/2}(0)$ se získá přibližným řešením lokálního Riemannova problému podél časové osy.



Obr. 4.2: Schéma HLLC

Řešení lokálního Riemannova problému se skládá ze 4 konstantních stavů U_L , U_R , U_L^* , U_R^* . Tyto stavy jsou separovány třemi vlnami s rychlostmi S_L (levá nelineární vlna), S_R (pravá nelineární vlna) a S^* (prostřední lineární vlna). Pro určení stavu odpovídajícímu $\frac{x}{t} = 0$ je klíčový výpočet těchto rychlostí. Pokud nelineární vlna je rázová, rychlost S je rychlost této rázové vlny. Pokud se jedná o expanzní vlnu, potom rychlostí S je rychlost čela expanzní vlny. Lze odvodit, že rychlost tzv. kontaktní vlny S^* lze určit pouze z hodnot S_L a S_R . Tedy $S^* = S^*(S_L, S_R)$. K selekci jedné ze čtyř oblastí tedy postačuje určit pouze dvojici S_L a S_R . Tyto rychlosti lze buď odhadnout přímo bez dalších dodatečných znalostí anebo nepřímou prostřednictvím přibližného

řešení tlaku v okolí kontaktní vlny p^* . Lepší výsledky poskytuje nepřímé řešení. V nepřímém řešení pokud je tlak p^* nižší než tlak vlevo resp. vpravo ($p^* \leq p_{L/R}$), potom jde o expanzní vlnu a řešení $S_{L/R}$ je triviální. Složitější to je v případě rázové vlny, což nastává v případě $p^* > p_{L/R}$. Uvažujme, že máme k dispozici odhad p^* . Potom lze rychlost rázové vlny získat ze soustavy Rankinových-Hugoniotových rovnic pro nespojitě řešení. Tuto soustavu dostaneme z vektorové rovnice $\Delta \mathbf{F} = \mathbf{0}$. Je vyjádřením zákona zachování hmoty, hybnosti a energie pro kontrolní objem s rázovou vlnou. Tento systém uzavírá stavová rovnice. Jednotlivé rovnice vypadají následovně

$$\Delta u = \pm \frac{\Delta p}{\bar{Q}} \quad (4.11)$$

$$\Delta v = -\frac{\Delta p}{\bar{Q}^2} \quad (4.12)$$

$$\Delta e = -p_{\text{avg}} \Delta v \quad (4.13)$$

V soustavě symbol Δ představuje rozdíl mezi stavem za rázovou vlnou a stavem před rázovou vlnou $\Delta(\bullet) = (\bullet)_{L/R}^* - (\bullet)_{L/R}$, spodní index $(\bullet)_{\text{avg}}$ značí aritmetický průměr stavů na obou stranách rázové vlny a symbol $\bar{\bullet}$ značí, že soustava platí v souřadném systému spojeného s rázovou vlnou. Znaménko $+$ je pro rázovou vlnu směřující ve směru normály (pravá vlna) a znaménko $-$ v opačném případě (levá vlna). Klíčová je třetí rovnice pro energii. Jejím úkolem je stanovit v^* pro dosažení do prvních dvou rovnic.

Uvažujme, že máme k dispozici odhad p^* a řešení v^* . Potom pro rychlost rázové vlny dostaneme explicitní vztah

$$S_{L/R} = u_{L/R} \pm v_{L/R} \bar{Q}_{L/R} \quad (4.14)$$

$$\bar{Q}_{L/R} = \left(-\frac{\Delta p_{L/R}}{\Delta v_{L/R}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.15)$$

Znaménko mínus na pravé straně je pro vlnu směřující vlevo a znaménko plus je pro vlnu směřující vpravo. K výpočtu rychlosti rázové vlny tedy vede cesta přes výpočet v^* z třetí energetické rovnice. Rozeberme tři případy stavové rovnice

Jednoduchá stavová rovnice $e = e(p, v)$

V tomto nejjednodušším případě, kdy máme stavovou rovnici v ideálním tvaru $p = p(v, e)$ dostaneme pro energii $e = \frac{pv}{\kappa-1}$. Lze jednoduchým způsobem odvodit následující explicitní vztah pro objem v^*

$$v^* = v \frac{1 + \kappa' \frac{p^*}{p}}{\kappa' + \frac{p^*}{p}} \quad (4.16)$$

kde $\kappa' = \frac{\kappa-1}{\kappa+1}$.

Komplexní stavová rovnice $e = e(v, T)$, $p = p(v, T)$

Reprezentantem může být například stavová rovnice IAPWS-95. Po dosazení vztahů pro energii $e = e(v, T)$ a tlak $p = p(v, T)$ dostaneme soustavu dvou nelineárních algebraických rovnic pro neznámé hodnoty v^* a T^*

$$e^*(v^*, T^*) - e + p_{\text{avg}}(v^* - v) = 0 \quad (4.17)$$

$$p^* - p^*(v^*, T^*) = 0 \quad (4.18)$$

Komplexní stavová rovnice $e = e(p, T)$

Reprezentantem může být například stavová rovnice IAPWS-97. Po dosazení vztahu pro energii $e = e(p, T)$ a objem $v = v(p, T)$ dostaneme jednu nelineární algebraickou rovnici pro neznámou hodnotu teploty T^*

$$e^*(p^*, T^*) - e + p_{\text{avg}}(v^*(p^*, T^*) - v) = 0 \quad (4.19)$$

Po jejím vyřešení spočteme objem v^* explicitně ze stavové rovnice.

V praktických 3D výpočtech se iteračnímu řešení chceme vyhnout. Pro rychlost rázové vlny odvodil Lax v [70] velmi jednoduchý odhad ve tvaru

$$S_L = u_{\text{avg}} - a_{\text{avg}} \quad (4.20)$$

$$S_R = u_{\text{avg}} + a_{\text{avg}} \quad (4.21)$$

$$(4.22)$$

Po provedení několika testů jsou rozdíly mezi tímto jednoduchým odhadem a iteračním řešením minimální. Z toho důvodu v našem CFD kódu upřednostníme Laxův výpočet.

Na závěr uvedeme algoritmus výpočtu numerického toku $\mathbf{F}_{i+1/2}$. Odvození vychází z Rankinových-Hugoniotových podmínek pro levou vlnu s rychlostí S_L a pravou vlnu s rychlostí S_R . Toto odvození platí obecně pro libovolnou stavovou rovnici. Stavová rovnice tak vstupuje pouze do výpočtů $S_{L/R}$, přičemž my jsme se tomu vyhnuli jiným přístupem. Numerický tok v normálovém směru pro schéma HLLC lze vypočítat podle následujícího algoritmu

1. Výpočet tlaku v kontaktní vlně (přibližný Riemannův řešic PVRS)

$$p^* = \max\{0, p_{\text{PVRS}}\} \quad (4.23)$$

$$p_{\text{PVRS}} = p_{\text{avg}} - \frac{1}{2}(u_R - u_L)\rho_{\text{avg}}a_{\text{avg}} \quad (4.24)$$

2. Výpočet rychlostí vln S_L, S_R (Lax)

$$S_L = \begin{cases} u_L - a_L & \dots & p^* \leq p_L \\ u_{\text{avg}} - a_{\text{avg}} & \dots & p^* > p_L \end{cases} \quad (4.25)$$

$$S_R = \begin{cases} u_R + a_R & \dots & p^* \leq p_R \\ u_{\text{avg}} + a_{\text{avg}} & \dots & p^* > p_R \end{cases} \quad (4.26)$$

3. Výpočet rychlosti kontaktní vlny S^*

$$S^* = \frac{p_R - p_L + \rho_L u_L (S_L - u_L) - \rho_R u_R (S_R - u_R)}{\rho_L (S_L - u_L) - \rho_R (S_R - u_R)} \quad (4.27)$$

4. Selekcce numerického toku

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & \dots & 0 \leq S_L \\ \mathbf{F}_L^* & \dots & S_L < 0 \leq S^* \\ \mathbf{F}_R^* & \dots & S^* < 0 < S_R \\ \mathbf{F}_R & \dots & 0 \geq S_R \end{cases} \quad (4.28)$$

5. Výpočet stavů \mathbf{U}_L^* a \mathbf{U}_R^* (pokud jsou potřeba)

$$\mathbf{U}_{L/R}^* = \rho_{L/R}^* \begin{pmatrix} 1 \\ u_{L/R}^* \\ v_{L/R}^* \\ w_{L/R}^* \\ E_{L/R}^* \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

$$\rho_{L/R}^* = \rho_{L/R} \frac{S_{L/R} - u_{L/R}}{S_{L/R} - S^*} \quad (4.30)$$

$$u_{L/R}^* = u_{L/R} - \frac{1}{\rho_{L/R}^*} \frac{p^* - p_{L/R}}{S^* - S_{L/R}} n_x \quad (4.31)$$

$$v_{L/R}^* = v_{L/R} - \frac{1}{\rho_{L/R}^*} \frac{p^* - p_{L/R}}{S^* - S_{L/R}} n_y \quad (4.32)$$

$$w_{L/R}^* = w_{L/R} - \frac{1}{\rho_{L/R}^*} \frac{p^* - p_{L/R}}{S^* - S_{L/R}} n_z \quad (4.33)$$

$$E_{L/R}^* = E_{L/R} - \frac{1}{\rho_{L/R}^*} \frac{p^* S^* - p_{L/R} u_{L/R}}{S^* - S_{L/R}} \quad (4.34)$$

6. Výpočet numerických toků po obou stranách kontaktní vlny \mathbf{F}_L^* a \mathbf{F}_R^* (pokud jsou potřeba)

$$\mathbf{F}_{L/R}^* = \mathbf{F}_{L/R} + S_{L/R} (\mathbf{U}_{L/R}^* - \mathbf{U}_{L/R}) \quad (4.35)$$

Připomínáme, že u je normálová rychlost, v a w jsou tangenciální složky rychlosti a \mathbf{F} je normálový tok.

4.3 Časová diskretizace

Výsledný matematický model proudění mokré páry s nerovnovážnou kondenzací v sobě zahrnuje dva jevy. Prvním jevem je konvekce (modeluje operátor rezidua $\mathbf{R}(\mathbf{U})$) a druhým jevem je kondenzace (modeluje operátor zdroje $\mathbf{S}(\mathbf{U})$). V semidiskrétním tvaru můžeme tento systém zapsat následovně

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{R}(\mathbf{U}) + \mathbf{S}(\mathbf{U}) \quad (4.36)$$

Rychlost nukleace J v zdrojové kondenzační části \mathbf{S} běžně nabývá hodnot mezi $\mathcal{O}(10^{10})$ a $\mathcal{O}(10^{20})$. K zachycení přírůstků kapalné fáze je tedy potřeba malý časový krok v oblastech s vysokým J . Protože konvektivní část a kondenzační část vyžadují různé časové kroky, přistoupíme k rozdělení systému na dva podsystemy modelující zvlášť konvekci a zvlášť kondenzaci. K rozkladu původního systému použijeme Godunovův rozklad prvního řádu přesnosti [11]. Původní systém upravíme tímto způsobem

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{U}^{n+1/2} - \mathbf{U}^{n+1/2} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = \mathbf{R} + \mathbf{S} \quad (4.37)$$

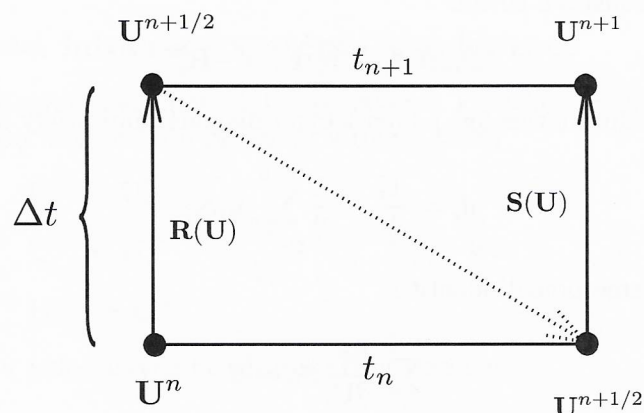
Potom pro konvektivní část dostaneme podsystem

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1/2} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = \mathbf{R} \quad (4.38)$$

a pro kondenzační část dostaneme podsystem

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^{n+1/2}}{\Delta t} = \mathbf{S} \quad (4.39)$$

Godunovův rozklad je znázorněn na obr. 4.3.



Obr. 4.3: Godunovův rozklad

Pro numerické řešení systémů (4.38) a (4.39) použijeme odlišné metody.

4.3.1 Časová integrace systému konvekce

Pro systém (4.38) použijeme implicitní LU-SGS schéma v stacionární verzi [31]. Toto chéma budeme uvažovat obecně pro integraci mezi časy t_n a t_{n+1} . Nepřehlédneme tudíž k časům uvedeným v (4.38). Pro i -tou buňku řešíme rovnici

$$\frac{V_i}{\Delta t_i} \Delta \mathbf{U}_i^n + \mathbf{R}_i^{n+1} = \mathbf{0} \quad (4.40)$$

kde $\Delta(\bullet)^n$ bude představovat diferenci $(\bullet)^{n+1} - (\bullet)^n$. Reziduum toků v novém čase t_{n+1} je \mathbf{R}_i^{n+1} a postupně ho upravíme tímto způsobem

$$\mathbf{R}_i^{n+1} = \Delta \mathbf{R}_i^n + \mathbf{R}_i^n \quad (4.41)$$

K výpočtu rezidua \mathbf{R}_i^n použijeme schéma HLLC popsané v části 4.2. Pro diferenci $\Delta \mathbf{R}_i^n$ použijeme centrální Rusanovovo schéma [66]. Podle tohoto schématu se numerický tok v normálovém směru počítá následovně

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_j) - \frac{1}{2}\lambda_{ij}(\mathbf{U}_j - \mathbf{U}_i) \quad (4.42)$$

kde λ_{ij} je odhad spektrálního poloměru Jacobiho matice normálového toku. K tomu použijeme Davisův odhad [25]

$$\lambda_{ij} = \max\{|u_i| + a_i, |u_j| + a_j\} \quad (4.43)$$

kde u_i , resp. u_j je normálová rychlost buňky i , resp. buňky j a a_i , a_j jsou příslušné rychlosti zvuku. Přírůstek $\Delta \mathbf{R}_i^n$ ještě aproximujeme výrazem

$$\Delta \mathbf{R}_i^n \approx \sum_j^{(n_f)_i} \frac{\partial \mathbf{F}_{ij}}{\partial \mathbf{U}_i^n} \Delta \mathbf{U}_i^n S_{ij} + \sum_j^{(n_f)_i} \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_j^n + \Delta \mathbf{U}_j^n) S_{ij} - \sum_j^{(n_f)_i} \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_j^n) S_{ij} \quad (4.44)$$

Použitím Rusanovova schématu (4.42) v předchozím vztahu pro přírůstek rezidua dostaneme tuto soustavu rovnic

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i^n + \Delta \sum_j \mathbf{F}_j = -\mathbf{R}_i^n \quad (4.45)$$

kde D_i je diagonální matice 5×5 s identickými diagonálními prvky d_i , pro které

$$d_i = \frac{V_i}{\Delta t_i} + \frac{1}{2} \sum_j^{(n_f)_i} \lambda_{ij} S_{ij} \quad (4.46)$$

Při odvození d_i jsme použili identitu

$$\sum_j^{(n_f)_i} \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{U}_i} S_{ij} = \mathbf{0} \quad (4.47)$$

kteřá platí pro uzavřený kontrolní objem. Výraz $\Delta_{\Sigma} \mathbf{F}_j$ představuje tento vztah

$$\Delta_{\Sigma} \mathbf{F}_j = \frac{1}{2} \sum_j^{(n_f)_i} [\mathbf{F}_j(\mathbf{U}_j^n + \Delta \mathbf{U}_j^n) - \mathbf{F}_j(\mathbf{U}_j^n) - \lambda_{ij} \Delta \mathbf{U}_j^n] S_{ij} \quad (4.48)$$

V tomto vztahu jsme uvažovali zjednodušení

$$\lambda_{ij}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_j^n + \Delta \mathbf{U}_j^n) \approx \lambda_{ij}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_j^n) \quad (4.49)$$

Lineární systém pro přírůstky $\Delta \mathbf{U}_i$ budeme řešit pomocí další aproximace. Pokud lineární systém uvážíme v zjednodušeném zápisu jako $A \Delta \mathbf{U}^n = \mathbf{b}$, kde $A = L + D + P$ je matice systému rozdělena na ostrou dolní trojúhelníkovou matici L , ostrou horní trojúhelníkovou matici P a diagonální matici D , potom tuto matici A aproximujeme následovně $A \approx (D + L)D^{-1}(D + P)$. To znamená, že jsme v aproximaci položili $LD^{-1}P = 0$. Výsledný systém

$$(D + L)D^{-1}(D + P)\Delta \mathbf{U}^n = \mathbf{b} \quad (4.50)$$

řešíme ve dvou krocích. Označme $D^{-1}(D + P)\Delta \mathbf{U}^n = \Delta \mathbf{U}^*$. V prvním kroku provedeme dopřednou iteraci pro $i = 1, \dots, n_c$

$$D\Delta \mathbf{U}^* = \mathbf{b} - L\Delta \mathbf{U}^* \quad (4.51)$$

ze které snadno určíme přírůstky $\Delta \mathbf{U}^*$. Ve druhém kroku provedeme zpětnou iteraci pro $i = n_c, \dots, 1$

$$D\Delta \mathbf{U}^n = D\Delta \mathbf{U}^* - P\Delta \mathbf{U}^n \quad (4.52)$$

ze které získáme vektor přírůstků konzervativních veličin $\Delta \mathbf{U}^n$ triviálním způsobem. Pro řešení v čase $t = t_{n+1}$ použijeme

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta \mathbf{U}^n \quad (4.53)$$

4.3.2 Časová integrace systému kondenzace

Pro časovou integraci systému (4.39) použijeme klasickou explicitní Rungovou-Kuttovou metodu m -tého řádu přesnosti v tomto tvaru

$$\mathbf{U}_i^{(0)} = \mathbf{U}_i^n \quad (4.54)$$

$$\mathbf{U}_i^{(k)} = \mathbf{U}_i^{(0)} + \alpha_k \frac{\Delta t_i}{V_i} \mathbf{S}(\mathbf{U}_i^{(k-1)}), \quad k = 1, \dots, m \quad (4.55)$$

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^m \quad (4.56)$$

kde koeficienty v jednotlivých fázích jsou dány vztahem

$$\alpha_k = \frac{1}{m - k + 1} \quad (4.57)$$

Pro ty výpočetní buňky, které se nacházejí ve výrazné kondenzační oblasti, použijeme $m = 4$. Jinak postačí $m = 2$.

4.3.3 Algoritmus pro zdrojový člen

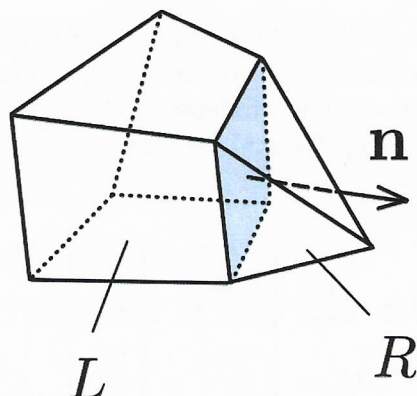
Výpočet zdrojových členů řídí dvojice veličin reálný saturační poměr S a kritická velikost kapek r_c . Pokud jsme z hlediska termodynamického stavu v přesycené metastabilní oblasti $S > 1$ a aktuální průměrný poloměr kapek je větší než kritická hodnota $\bar{r} > r_c$, probíhá současně nukleace $J \neq 0$ a růst kapek $\dot{r} > 0$. Při numerické implementaci jsme podmínku $S > 1$ nahradili podmínkou $S > 1 + \epsilon$, kde ϵ je zvolená konstanta. V našem případě $\epsilon = 10 \times 10^{-12}$. Pokud je $S < 1 - \epsilon$ nacházíme se v oblasti přehřáté páry. Existuje-li v daném okamžiku kapalná fáze, dochází k jejímu postupnému zániku procesem vypařování: $J = 0$, $\dot{r} < 0$. Jako rovnici vypařování jsme použili rovnici růstu kapek v režimu kontinua s teplotou kapky $T_L = T_{sat}$. V metastabilní oblasti při podkritické velikosti kapek dochází pouze k nukleaci, zánik kapek není v tomto případě modelován: $J \neq 0$, $\dot{r} = 0$. Algoritmus je uveden v tab. 4.1.

Tab. 4.1: Algoritmus výpočtu zdrojových členů

$S > (1 + \epsilon)$	$\bar{r} > r_c$	nukleace + růst	$J \neq 0, \dot{r} \neq 0$
	$\bar{r} \leq r_c$	pouze nukleace	$J \neq 0, \dot{r} = 0$
$S < (1 - \epsilon)$	$\bar{r} > 0$	vypařování	$J = 0, \dot{r} \neq 0$
	$\bar{r} = 0$	nic	$J = 0, \dot{r} = 0$
jinak	—	nic	$J = 0, \dot{r} = 0$

4.4 Okrajové podmínky

V našich výpočtech uvažujeme tyto typy okrajových podmínek: podzvukový vstup, podzvukový výstup, nadzvukový výstup, nevazká stěna a symetrie. Při numerické realizaci okrajových podmínek zohledníme hyperbolický charakter Eulerových rovnic. Každé stěně nacházející se na hranici oblasti přiřadíme buňku vlevo uvnitř oblasti (proti směru normálového vektoru stěny) a buňku vpravo (ve směru normálového vektoru), která je virtuální a nachází se ve vnějšku oblasti, viz obr. 4.4. Po získání úplného stavu ve virtuální buňce použijeme k výpočtu numerického toku stejné schéma jako u vnitřních stěn oblasti. Stav ve virtuální buňce získáme kombinací předepsání hodnot vybraných fyzikálních veličin zohledňujících vnější stav výpočetní oblasti a extrapolace z vnitřku oblasti.



Obr. 4.4: Stěna na hranici oblasti (barevně zvýrazněná) s vnějším normálovým vektorem \mathbf{n} . Buňka vlevo L uvnitř výpočetní oblasti. Virtuální buňka vpravo R (ghost cell).

Podzvukový vstup

Na vstupu uvažujeme pouze případ bez přítomnosti kapalně fáze, proto postačí uvažovat pouze systém Eulerových rovnic pro směs. Ve virtuální buňce musíme stanovit celkem 5 veličin. Při podzvukovém vstupu z teorie charakteristik je známo, že do oblasti vstupují celkem 4 charakteristiky, proto musíme předepsat 4 veličiny. Předepíšeme stagnační tlak p_0 , stagnační teplotu T_0 a dvě kartézské složky úhlu náběhu proudu α_0, β_0 . Poslední veličina je statický tlak p_R , který získáme pomocí extrapolace z vnitřku výpočetní oblasti, $p_R = p_L$. Stav ve virtuální buňce můžeme popsat pomocí následujícího vektoru

$$\mathbf{U}_R = \begin{pmatrix} \rho_R \\ u_{1R} \\ u_{2R} \\ u_{3R} \\ p_R \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

Předepsané okrajové podmínky využijeme ve výpočtu \mathbf{U}_R prostřednictvím vztahu pro stagnační entalpii, předpokladu isentropického proudění a stavové rovnice

$$h_0 = h_R(\rho_R, T_R) + \frac{1}{2} \|\mathbf{u}_R\|^2 \quad (4.59)$$

$$s_0 = s_R(\rho_R, T_R) \quad (4.60)$$

$$p_L = p_R(\rho_R, T_R) \quad (4.61)$$

Hustota ρ_R společně s teplotou T_R se získá řešením soustavy nelineárních algebraických rovnic (4.60), (4.61). Následně lze spočítat entalpii h_R a z rovnice (4.59)

explicitně určit velikost vektoru rychlosti $\|\mathbf{u}_R\|$. Posledním krokem je výpočet složek rychlosti u_{iR} pomocí dvou zadaných úhlů a velikosti rychlosti.

Podzvukový výstup

Princip je stejný jako u podzvukového vstupu. Opět musíme určit kompletně stav ve virtuálních buňkách přidružených stěnám na výstupní hranici. Při zohlednění směru šíření charakteristik musíme předepsat jednu veličinu. V našem případě to bude průměrný statický tlak \bar{p}_2 . Ostatní veličiny (celkově 8) musíme extrapolovat z přidružené vnitřní buňky L

$$\mathbf{U}_R = \begin{pmatrix} \rho_R \\ u_{1R} \\ u_{2R} \\ u_{3R} \\ p_R \\ Q_{0R} \\ Q_{1R} \\ Q_{2R} \\ Q_{3R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_L \\ u_{1L} \\ u_{2L} \\ u_{3L} \\ \bar{p}_2 \\ Q_{0L} \\ Q_{1L} \\ Q_{2L} \\ Q_{3L} \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

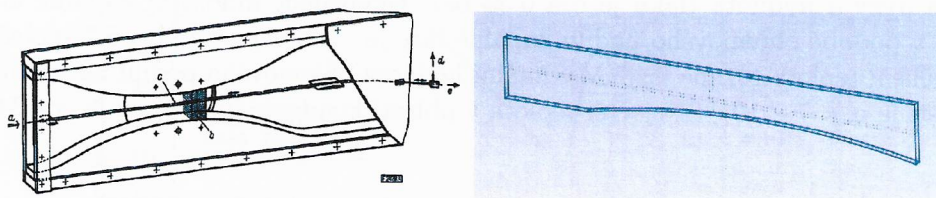
Kapitola 5

Výsledky numerických simulací

5.1 Výsledky s nízkým provozním tlakem

5.1.1 Barschdorffova dýza

Barschdorff publikoval experimentální měření proudění mokré páry v nízkotlaké dýze [20]. K dispozici je pouze rozložení statického tlaku podél osy dýzy. Měření velikosti kapek neprobíhalo. V experimentu bylo možno regulovat vstupní stagnační tlak až do 2 bar a vstupní stagnační teplotu. Dýza má konvergentně-divergentní profil vytvořený kruhovým obloukem s poloměrem 584 mm. Průřez dýzy je obdélníkový s konstantní šířkou podél celé délce 50 mm. Výška hrdla dýzy je 60 mm. Pro účely numerických výpočtů byla zvolena totožná délka konvergentní a divergentní části 120 mm. Konvergentní část je napojena na vstupní část s konstantním průřezem. Geometrie dýzy se ve směru šířky nemění, proto očekáváme rovinné proudění. Z toho důvodu je šířka dýzy pro CFD výpočty zmenšena.

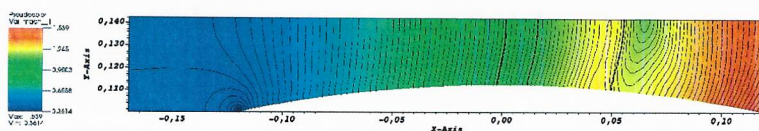


Obr. 5.1: Vyobrazení kanálu pro experimentální měření [20] (vlevo). Geometrie kanálu pro CFD výpočty s využitím symetrie (vpravo).

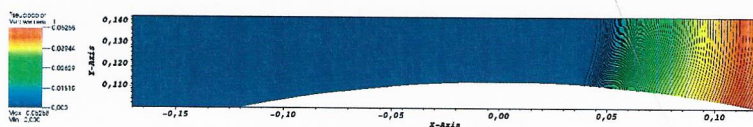
Výsledky s prezentovaným modelem

Výsledky byly publikovány ve vlastním článku [3].

Pro tento numerický výpočet byly nastaveny tyto okrajové podmínky: stagnační tlak $p_0 = 0.7839$ bar, stagnační teplota $T_0 = 380.55$ K, úhly náběhu vstupního



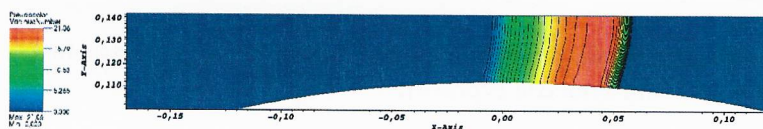
Obr. 5.2: Barschdorffova dýza: Izočáry Machova čísla, zvuková čára $M = 1$ (tlustá plná čára), saturační oblast $S = 1$ (tlustá přerušovaná čára).



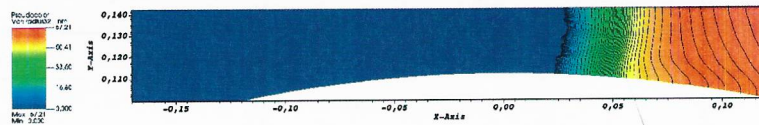
Obr. 5.3: Barschdorffova dýza: Izočáry vlhkosti.

proudu do dýzy $\alpha_0 = \beta_0 = 0^\circ$. Na vstupu uvažujeme suchou páru. Výstup z dýzy je nadzvukový.

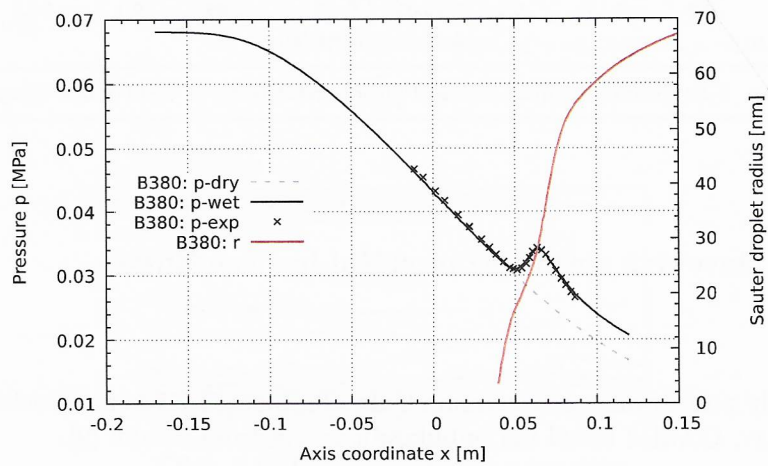
Představu o režimu proudění udává obr. 5.8, kde je průběh Knudsenova čísla podél osy dýzy. Nejmenší Knudsenovo číslo je kolem 1 a největší je cca 19. Proudění je tedy v kinetickém a přechodovém režimu. Prodové pole ve formě izočar Machova čísla je na obr. 5.2. Ve stejném obrázku je vyobrazena poloha zvukové čáry ($M = 1$) a místo saturačního stavu ($S = 1$), jenž odděluje oblast přehřáté páry a oblast páry v metastabilním stavu. Obr. 5.4 zobrazuje izočáry tzv. nukleačního čísla $J_{num} = \log_{10}(J + 1)$. Izočáry vlhkosti jsou vyobrazeny na obr. 5.3. Maximální vlhkost $\chi = 5,3\%$ je na výstupu z dýzy. Rozložení průměrného poloměru kapek $r_{32} = \sqrt{Q_3/Q_2}$ je na obr. 5.6. Největší kapky jsou opět na samém výstupu z dýzy a měří cca $0,069 \mu\text{m}$. Na stejném obrázku je rozložení statického tlaku podél osy dýzy. Byla dosažena velmi dobrá shoda s experimentálním měřením. Přerušovanou čarou je vyobrazena expanze při proudění hypoteticky suché páry bez uvažování kondenzace. Maximální nárůst tlaku v důsledku kondenzace (tzv. kondenzační ráz) a uvolnění latentního tepla při fázovém přechodu je ve vzdálenosti cca 65 mm od hrdla dýzy a hodnota tlaku je cca 0.34 bar. Ekvivalent množství kapalné fáze v dýze v podobě objemového podílu kapalné fáze je vyobrazen na obr. 5.7 společně s průběhem teploty plynné fáze. Maximální hodnota objemového podílu na výstupu z oblasti je $\alpha = 7 \times 10^{-6}$. Největší teplota v oblasti kondenzačního rázu je cca 340 K.



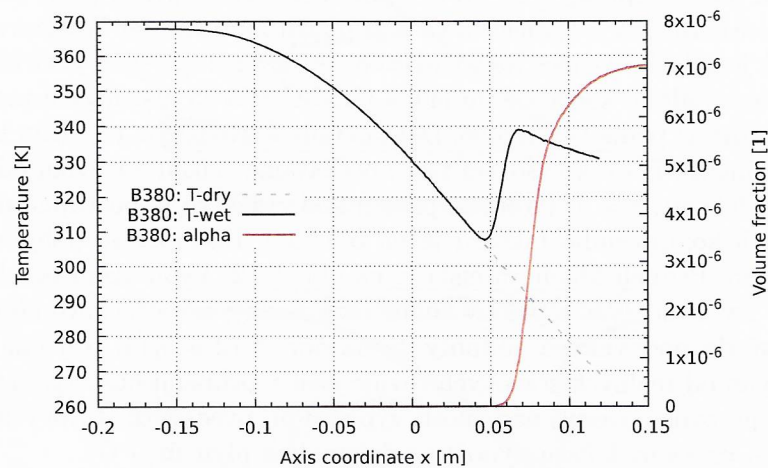
Obr. 5.4: Barschdorffova dýza: Izočáry nukleačního čísla.



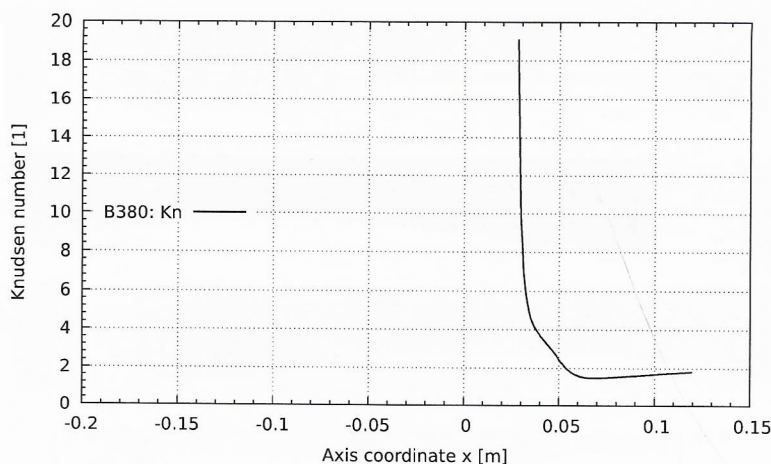
Obr. 5.5: Barschdorffova dýza: Izočáry průměrného poloměru kapek.



Obr. 5.6: Barschdorffova dýza: Průběh statického tlaku a průměrného poloměru kapek podél osy dýzy.



Obr. 5.7: Barschdorffova dýza: Průběh teploty páry a objemového zlomku kapalné fáze podél osy dýzy.



Obr. 5.8: Barschdorffova dýza: Průběh Knudsenova čísla v ose dýzy.

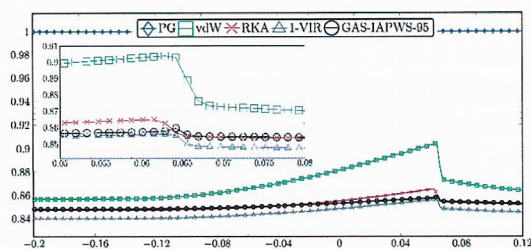
Porovnání stavových rovnic při proudění bez kondenzace

Výsledky byly publikovány ve vlastním článku [8]. Identický typ numerického experimentu pro tzv. GAMM kanál byl publikován ve vlastním článku [9].

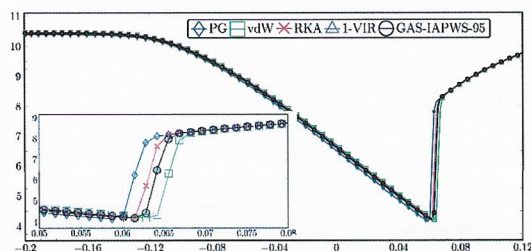
V článku [8] jsme provedli numerické výpočty proudění páry v Barschdorffově dýze bez kondenzace. Cílem bylo porovnat proudové pole při vyšším tlaku. Z toho důvodu byl stagnační tlak nastaven na $p_0 = 12$ MPa, stagnační teplota na $T_0 = 700$ K a protitlak na výstupu $p_2 = 10$ MPa. Mimo dokonalého plynu (PG) jsou použité stavové rovnice shrnuty v 5.1. Značení vdW je použito pro van der Waalovu kubickou rovnici, RKA je kubická rovnice Redlich-Kwong-Aungier [15], 1-VIR je viriální rovnice s tzv. druhým viriálním koeficientem [40] a GE-IAPWS-95 je označení pro speciální metastabilní rovnici podle IAPWS-95. Další detaily k uvedeným rovnicím lze najít ve zmíněných člancích. Při tak vysokém tlaku očekáváme velkou odchylku od ideálního kompresního faktoru $z = 1$. Grafická prezentace výsledků je postupně na obr. 5.9 - 5.14. Průběh kompresního faktoru je na obr. 5.9. Hodnoty se pohybují řádově kolem $z \approx 0.85$. Průběh Machova čísla je na obr. 5.12. Vyobrazení polohy sonické křivky $M = 1$ v hrdle dýzy a polohy kolmé rázové vlny, kde Machovo číslo přechází z nadzvukové do podzvukové hodnoty, je na obr. 5.12 a 5.13. Největší odchylky ideálního plynu od reálných stavových rovnic jsou v průběhu hustoty, viz obr. 5.14. V tab. 5.2 je porovnání časové náročnosti výpočtu při uvedených stavových rovnicích. Výsledky jsou vztaženy k času výpočtu s dokonalým plynem (PG).

Tab. 5.1: Seznam použitých stavových rovnic a jejich reziduální Helmholtzova funkce.

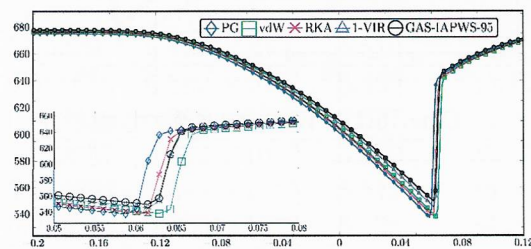
STAVOVÁ ROVNICE	Reziuální Helm. funkce $\phi^r(\delta, \tau)$
vdW	$\phi^r(\delta, \tau) = n\delta\tau - \ln(1 - d\delta)$ $n = -1.838708, d = 0.544802$
RKA	$\phi^r(\delta, \tau) = -n\tau^t \ln(1 - d_1\delta) - \ln(1 - d_2\delta)$ $n = 4.933962, t = 1.958391, d_1 = -0.377615, d_2 = 0.367840$
1-VIR	$\phi^r(\delta, \tau) = \delta \sum_{i=1}^4 n_i \tau^{t_i}$ $n_1 = 2.417351, n_2 = -3.042694, n_3 = -0.831048, n_4 = -0.013209$
GE-IAPWS-95	$\phi^r(\delta, \tau) = \sum_{i=1}^7 n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i}$



Obr. 5.9: Kompresní faktor v ose dýzy.



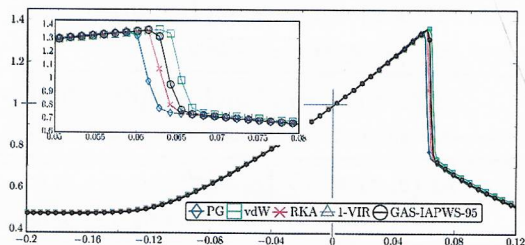
Obr. 5.10: Tlak v ose dýzy.



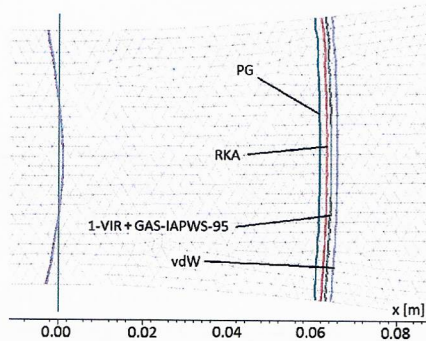
Obr. 5.11: Teplota v ose dýzy.

Tab. 5.2: Porovnání časové náročnosti numerického výpočtu s různými stavovými rovnicemi.

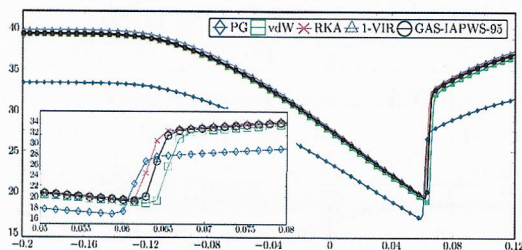
STAVOVÁ ROVNICE:	PG	vdW	RKA	1-VIR	GE-IAPWS-95
RELATIVNÍ ČAS:	1.00	2.67	3.78	5.23	7.52



Obr. 5.12: Machovo číslo v ose dýzy.



Obr. 5.13: Poloha sonické křivky ($M = 1$) a kolmé rázové vlny. Na pozadí použitá síť (2D nestrukturovaná trojúhelníková).



Obr. 5.14: Hustota v ose dýzy.

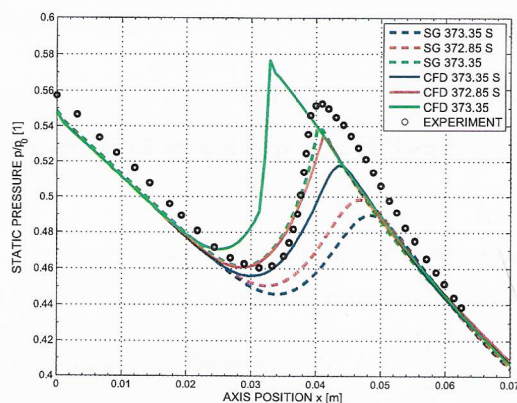
Vliv stavové rovnice a modifikace nukleačního růstu při proudění s kondenzací

Výsledky byly publikovány ve vlastním článku [2].

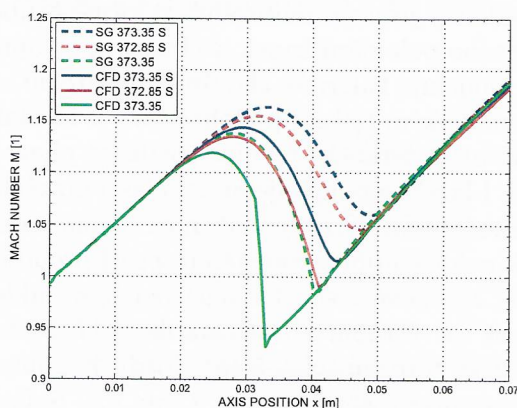
Při tomto numerickém experimentu jsme porovnali proudové pole v Barschdorffově dýze pro dva typy stavových rovnic. První stavová rovnice je speciální metastabilní rovnice IAPWS-95 (označení SG). Druhá stavová rovnice je rovnice publikovaná v práci J. Hrubého (CFD). Oba typy rovnic jsme použili při zadaném stagnačním tlaku $p_0 = 78390$ Pa. Vliv nejistoty stagnační teploty jsme testovali pro dvě hodnoty $T_0 = 373.35$ K a $T_0 = 372.85$ K. Třetím nastavením bylo ponechání původní stagnační teploty $T_0 = 373.35$ K a vypnutí Courtneyho korekce v rovnici pro nukleační rychlost. Výsledky jsou prezentovány ve formě průběhu statického tlaku, Machova čísla, průměrného poloměru kapek a vlhkosti postupně na obr. 5.15 - 5.18. Stavová rovnice CFD modeluje kalorické chování srovnatelně s rovnicí IAPWS. Její použití je ale limitováno nízkým tlakem podobně jako u ideálního plynu. Dá se říct, že rovnice CFD je ekvivalent termické rovnice ideálního plynu a kalorické rovnice s c_p závislým na teplotě. I když se pohybujeme v oblasti nízkých tlaků, prezentované výsledky ukazují nezanedbatelné rozdíly. Zahrnutí reálné termické stavové rovnice (SG) posouvá počátek nukleační oblasti směrem proti proudu. Výsledkem je vyšší maximální tlak a nižší Machovo číslo. Dřívější počátek nukleace má za důsledek přítomnost větších kapek na výstupní oblasti, viz obr. 5.17. Nicméně hodnoty vlhkosti na výstupu jsou praktické totožné (obr. 5.18), rozdíl je pouze v nukleační oblasti. Hodnoty vybraných parametrů jsou uvedeny v tab. 5.3. Snížení vstupní stagnační teploty má za následek větší podchlazení v nukleační oblasti, tím pádem i větší nukleační růst a posunutí počátku nukleace směrem proti proudu. Dřívější počátek nukleace má identické důsledky na velikost kapek a vlhkost a které jsme popsali v předchozím. Vypnutí Courtneyho korekce ve vztahu pro rychlost nukleace má za důsledek zvětšení hodnoty této veličiny, což samo o sobě znamená opět dřívější počátek kondenzace. V tomto případě se ale vynechání korekce projeví menším průměrem kapek na výstupu z oblasti.

Tab. 5.3: Hodnoty vybraných parametrů.

Případ	$y_{\max}[-]$	$\bar{r}_{\max}[\text{m}]$	$S_{\max}[-]$	$\Delta T_{\max}[\text{K}]$	$J_{\max}[\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}]$
CFD 373.35 C	0.053293	6.423×10^{-8}	5.510	35.53	1.111×10^{21}
CFD 372.85 C	0.053619	6.582×10^{-8}	5.469	35.44	1.044×10^{21}
CFD 373.35	0.053819	6.262×10^{-8}	5.087	34.20	1.468×10^{21}
SG 373.35 C	0.052957	6.244×10^{-8}	5.559	35.59	1.114×10^{21}
SG 372.85 C	0.053298	6.389×10^{-8}	5.519	35.50	1.053×10^{21}
SG 373.35	0.053576	6.056×10^{-8}	5.128	34.26	1.490×10^{21}



Obr. 5.15: Průběh statického tlaku vztaženého k stagnačnímu tlaku v ose dýzy. Detail v nukleační oblasti.

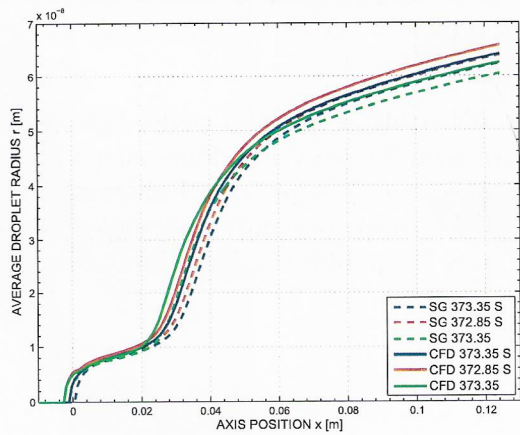


Obr. 5.16: Průběh Machova čísla v ose dýzy. Detail v nukleační oblasti.

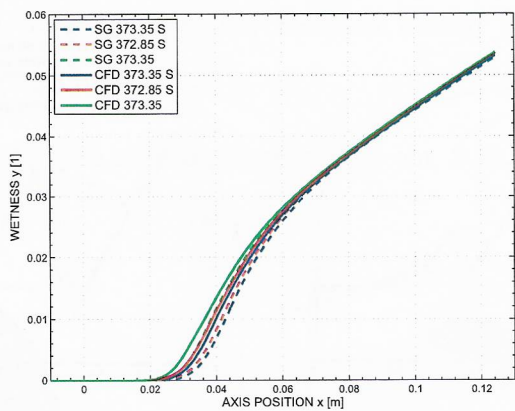
5.1.2 Výsledky proudění v nízkotlaké turbíně - White

Výsledky numerických výpočtů byly publikovány ve vlastním článku [5] a [1]. Výsledky pro jinou geometrii lopatkového kanálu byly publikovány ve vlastním článku [4].

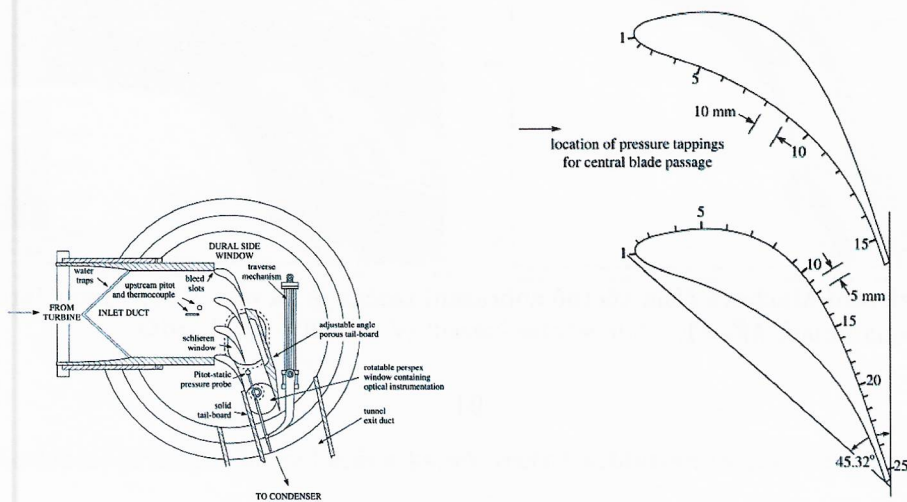
Experimentální měření, ke kterému se váží následující výsledky numerických výpočtů, bylo publikováno v článku [82]. Skica testovacího zařízení společně s vyobrazením geometrie lopatkového kanálu je na obr. 5.19. Lopatkový kanál je identickým modelem 5. stupně statoru 660 MW turbíny. Vybraný testovací případ má označení L1 a je ze série měření s teplotou na vstupu mírně nad saturační. Okrajové podmínky jsou následující: vstupní stagnační tlak $p_0 = 0.403$ bar, vstupní stagnační teplota $T_0 = 354$ K, výstupní průměrný statický tlak $p_2 = 0.0163$ bar, náběhové úhly vstupního proudu $\alpha_0 = \beta_0 = 0^\circ$. Dupočítané přechlazení je $\Delta T = 4.8$ K (v článku je nesprávně uvedena hodnota $\Delta T = 4.5$ K).



Obr. 5.17: Průměrný poloměr kapek podél osy dýzy.



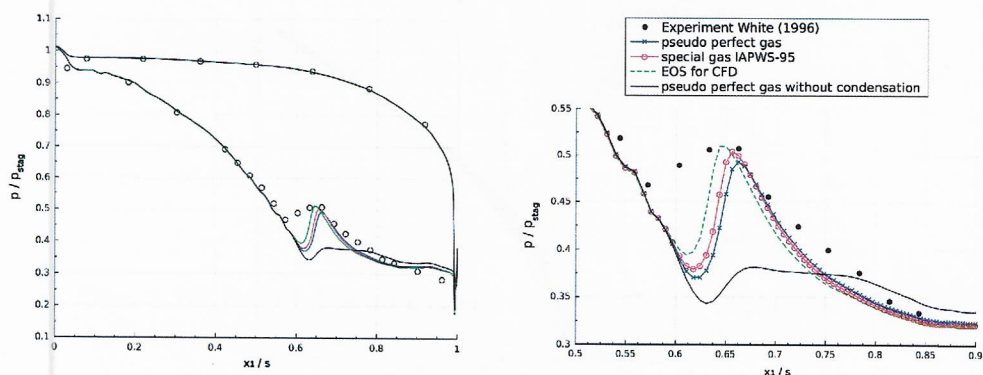
Obr. 5.18: Průběh vlhkosti podél osy dýzy.



Obr. 5.19: Skica testovacího zařízení (vlevo) ⁹³. Náhled geometrie lopatkového kanálu (vpravo).

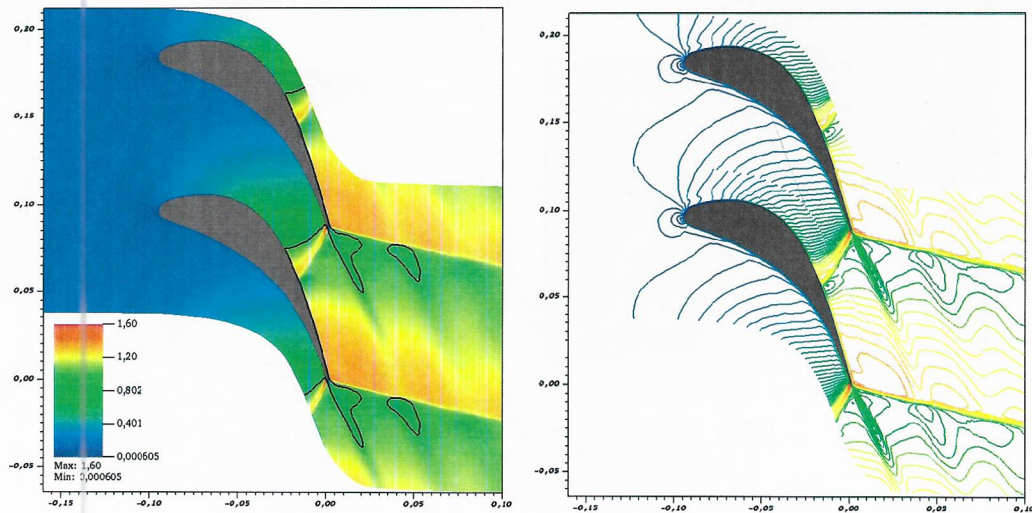
V numerických výpočtech byly použité tři stavové rovnice. Speciální rovnice IAPWS-95 pro metastabilní oblast, speciální stavová rovnice pro rychlé CFD výpočty J. Hrubého a rovnice dokonalého plynu s upravenými parametry. Úprava parametrů dokonalého plynu byla provedena na základě hodnot veličin z okrajových podmínek. Použité parametry jsou tyto: $\kappa = 1.3039$, $c_p = 1960.9 \text{ J/kg/K}$, $R = 457. \text{ J/kg/K}$.

Na obr. 5.20 je průběh statického tlaku podél tlakové a sací strany lopatky. Průběh tlaku na tlakové straně je ve velmi dobré shodě s experimentem. Na sací straně je průběh dobře zachycen až do počátku kondenzace. Počátek kondenzace je ve všech případech stavových rovnic posunutý směrem k výstupu z oblasti. Podobné zachycení kondenzační zóny byl publikován Dykasem [28], stejně tak i Whitem [67].



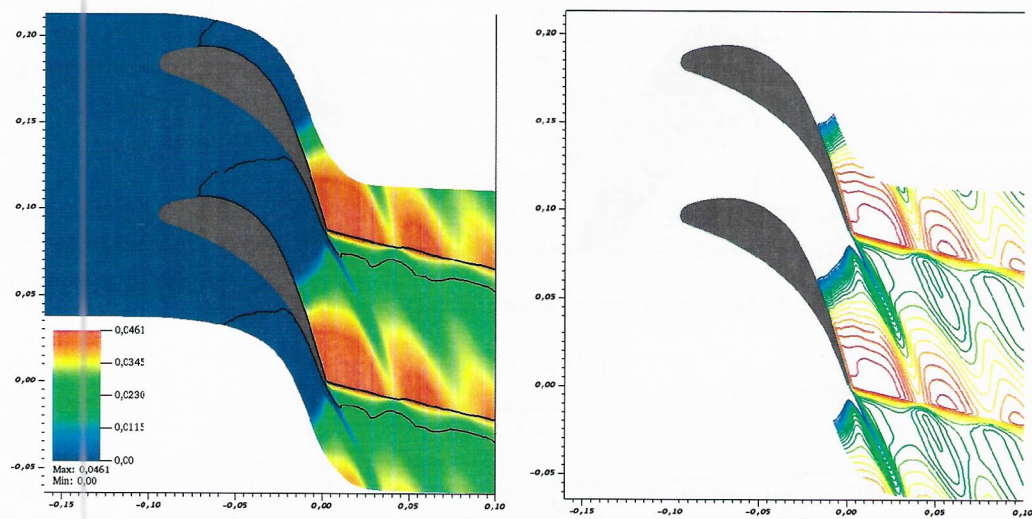
Obr. 5.20: Průběh statického tlaku na povrchu lopatky (vlevo). Detail (vpravo).

Rozložení Machova čísla včetně zobrazení izočár je na obr. 5.21. Plnou čarou je vyznačena oblast $M = 1$.



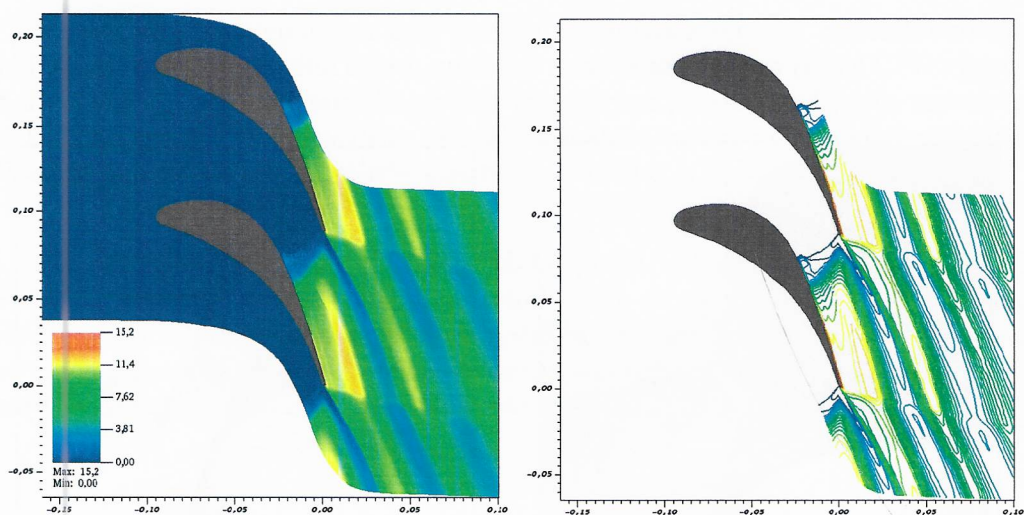
Obr. 5.21: Machovo číslo. Zobrazení kontury $M = 1$.

Rozložení vlhkosti včetně zobrazení izočár je na obr. 5.22. Plnou čarou je vyznačena saturační křivka $S = 1$.



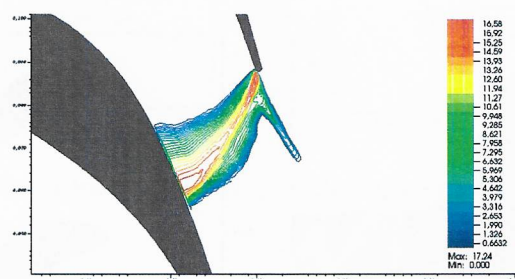
Obr. 5.22: Vlhkost. Vyznačení saturační hranice $S = 1$.

Rozložení průměrného poloměru kapek včetně zobrazení izočár je na obr. 5.23.



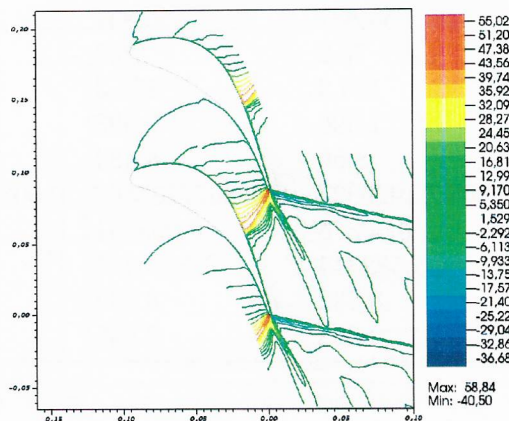
Obr. 5.23: Průměrná velikost kapek [nm].

Zobrazení oblasti kondenzace v lopatkovém kanálu ve formě izočár tzv. nukleačního čísla $\log_{10}(J + 1)$ je na obr. 5.24.



Obr. 5.24: Kondenzační zóna. Izočáry nukleačního čísla.

Na obr. 5.25 je zobrazení izočár teplotního rozdílu $\Delta T = T_{sat}(p) - T_V$. Kladné hodnoty ΔT odpovídají metastabilní oblasti. Záporné hodnoty ΔT zobrazují oblast přehřáté páry.



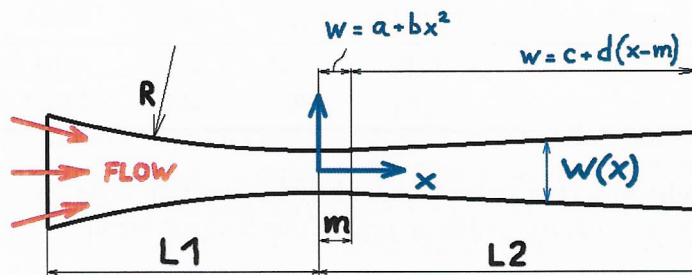
Obr. 5.25: Izočáry podchlazení $\Delta T > 0$.

5.2 Výsledky s vyšším provozním tlakem

5.2.1 Bakhtarova dýza

Výsledky byly prezentovány ve vlastním článku [7].

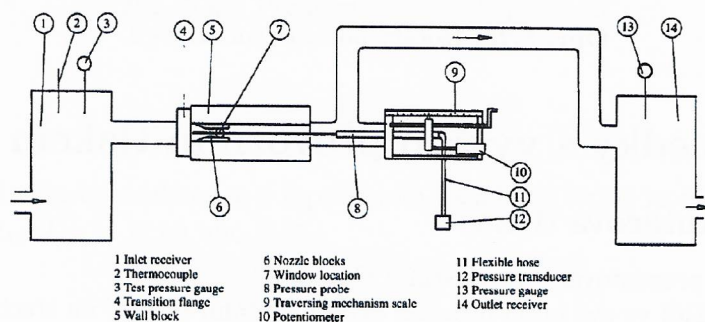
Bakhtar a Zidi ve své práci provedli experimentální měření na třech geometriích konvergentně-divergentních dýz při vyšších provozních tlacích v rozsahu vstupního stagnačního tlaku $p_0 = 2.5 - 3.5$ MPa [19], [18]. Dýzy jsou označeny písmeny S (small), M (medium) a L (large) a jejich geometrie je naznačena na obr. 5.26. Geometrické parametry jsou potom uvedeny v tab. 5.4. Parametry b a c jsme mírně upravili tak, aby byla zajištěna spojitost v místě $x = m$. Dýza s geometrií S byla navržena pro rychlost expanze $\dot{p} = -(1/p) dp/dt = 3000 s^{-1}$, dýza M pro rychlost expanze $\dot{p} = 5000 s^{-1}$ a dýza L pro rychlost expanze $\dot{p} = 10000 s^{-1}$. Divergentní část dýzy S se rozšiřuje pod úhlem $\tan^{-1}(d) \approx 1.6^\circ$, dýza M pod úhlem $\tan^{-1}(d) \approx 2.6^\circ$ a dýza L pod úhlem $\tan^{-1}(d) \approx 5.6^\circ$. Šířka dýz je 7.976 mm. Pro představu schéma testovacího zařízení je na obr. 5.27.



Obr. 5.26: Skica geometrie dýz S, M a L v experimentu Bakhtara a Zidiho.

Tab. 5.4: Geometrické parametry dýz S, M a L.

parameter	dýza S	dýza M	dýza L
L1 [mm]	55.837	55.837	55.837
L2 [mm]	76.2	76.2	76.2
R [mm]	114.3	114.3	114.3
m [mm]	1.596	2.593	5.584
a [mm]	8.56	8.484	8.484
b [1]	0.008771929825	0.008677207867	0.008757163324
b _{orig} [1]	0.00875	0.008751	0.008754
c [mm]	8.582344	8.5423425	8.7570576
c _{orig} [mm]	8.582	8.542	8.757
d [1]	0.028	0.045	0.0978



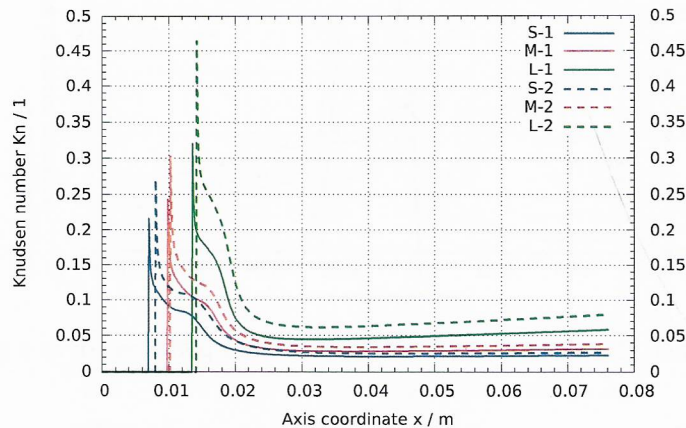
Obr. 5.27: Schéma testovacího zařízení v experimentu Bakhtara a Zidiho.

Vybrali jsme celkem 6 případů, pro každou geometrii 2 případy, viz tab. 5.5. Pro všechny vybrané případy jsou k dispozici experimentálně změřené průběhy statického tlaku. Data s velikostí kapek jsou k dispozici pro případy S2 a M1, M2.

Tab. 5.5: Počítané případy. Okrajové podmínky.

označení testu	parameter	dýza S	dýza M	dýza L
1	p_0 [MPa]	3.55	3.55	3.55
	T_0 [K]	542.2	548.6	562.4
2	p_0 [MPa]	2.86	2.86	2.51
	T_0 [K]	530.3	536.1	543.2

Průběh Knudsenova čísla získaný numerickým výpočtem je na obr. 5.28. Pohybuje se v rozsahu $Kn \in [0.01, 10]$, jedná se tedy o přechodový režim.



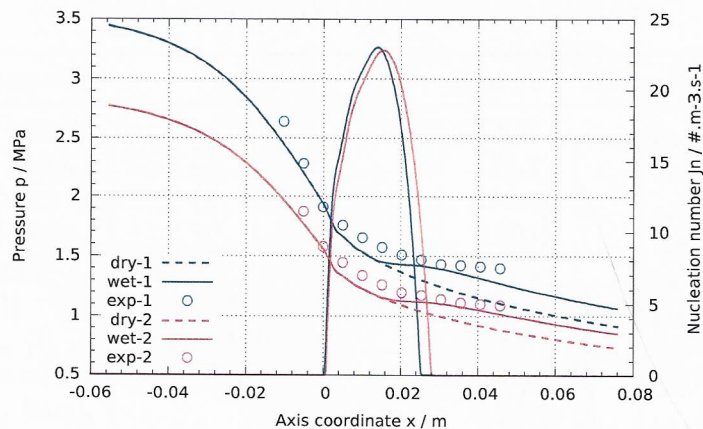
Obr. 5.28: Napočítané Knudsenovo číslo podél osy dýzy.

Geometrie S

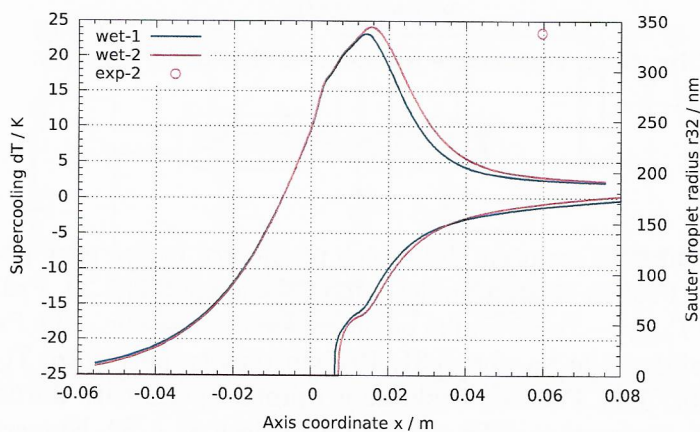
Obr. 5.29 - 5.32 ukazují rozložení důležitých parametrů mokré páry podél osy dýzy pro geometrii S. Průběh tlaku a nukleačního čísla je na obr. 5.29. Průběh teplotní difference $\Delta T = T_{sat}(p) - T_V$ středního poloměru kapek je na obr. 5.30. Průběh stupně přesycení S a vlhkosti je na obr. 5.31. Průběh teploty parní fáze T_V a Machova čísla M je na obr. 5.32. Počátek nukleace je oproti experimentu mírně posunut ve směru proudění. Posunutí je vidět na obou případech S1 a S2. Numerické výpočty daly nižší hodnoty expanzní rychlosti. Velikost kapek je z experimentu dostupná pouze pro případ S2. Numerický výpočet ukázal asi poloviční velikost v porovnání s experimentem (169 nm oproti 338 nm v místě $x = 0.057$ m). Největší přesycenost je v obou případech v místě cca $x = 0.018$ m a dosahuje hodnoty $S \approx 1.7$. Tomu odpovídá maximální podchlazení $\Delta T = 24$ K. Přerušovaná čára ukazuje průběh tlaku bez uvažování kondenzace. Maximální vlhkost na výstupu z dýzy je mezi 5.5% a 6%.

Geometrie M

Obr. 5.33 - 5.36 ukazují rozložení důležitých parametrů mokré páry podél osy dýzy pro geometrii M. Průběh tlaku a nukleačního čísla je na obr. 5.33. Průběh teplotní difference $\Delta T = T_{sat}(p) - T_V$ středního poloměru kapek je na obr. 5.34. Průběh stupně přesycení S a vlhkosti je na obr. 5.35. Průběh teploty parní fáze T_V a Machova čísla M je na obr. 5.36. Rozložení statického tlaku je v dobré shodě s experimentem, i když hodnoty jsou po celé délce dýzy mírně nižší. Velikost kapky je zhruba poloviční v porovnání s experimentem. Výstupní vlhkost je cca 6.5%.



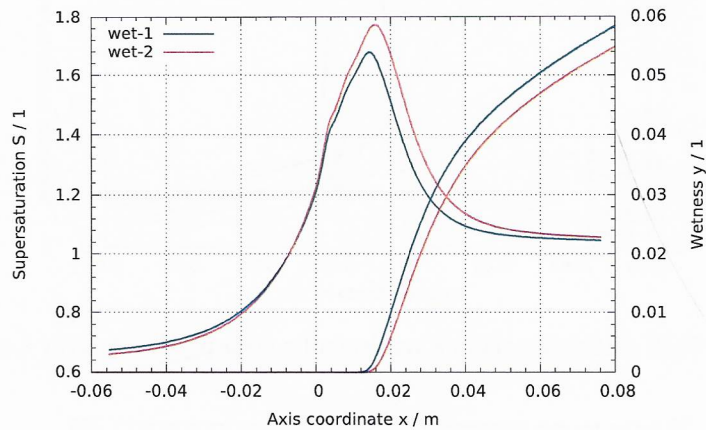
Obr. 5.29: Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií S.



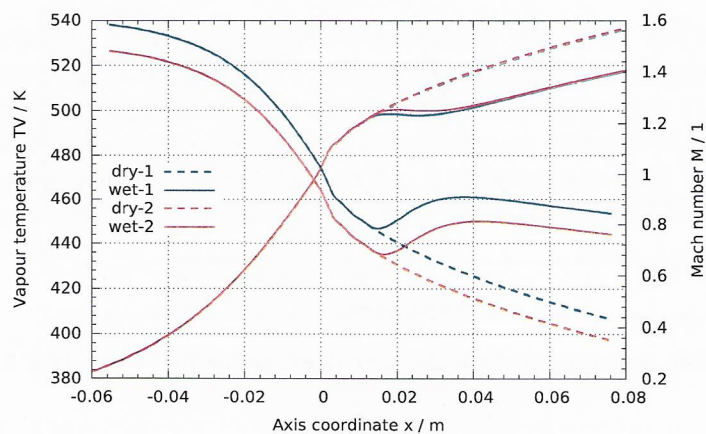
Obr. 5.30: Průběh teplotní difference ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií S.

Geometrie L

Obr. 5.37 - 5.40 ukazují rozložení důležitých parametrů mokré páry podél osy dýzy pro geometrii L. Průběh tlaku a nukleačního čísla je na obr. 5.37. Průběh teplotní difference $\Delta T = T_{sat}(p) - T_V$ středního poloměru kapek je na obr. 5.38. Průběh stupně přesycení S a vlhkosti je na obr. 5.39. Průběh teploty parní fáze T_V a Machova čísla M je na obr. 5.40. The final results are for nozzle L, cf. Fig. . In front of the nozzle throat the calculated expansion rates are smaller (pressure falls slowly). Droplet size measurement is not available, calculated sizes are close to 120 nm at the location $x = 0.057 m$. Wetness at exit location is in the range 7.5–8 %. Comparison of Knudsen number is in Fig. . In all cases its value is below 0.5, essential part is below 0.1, therefore flow is in continuum regime and this is the consequence of high pressure.



Obr. 5.31: Průběh stupně přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií S.

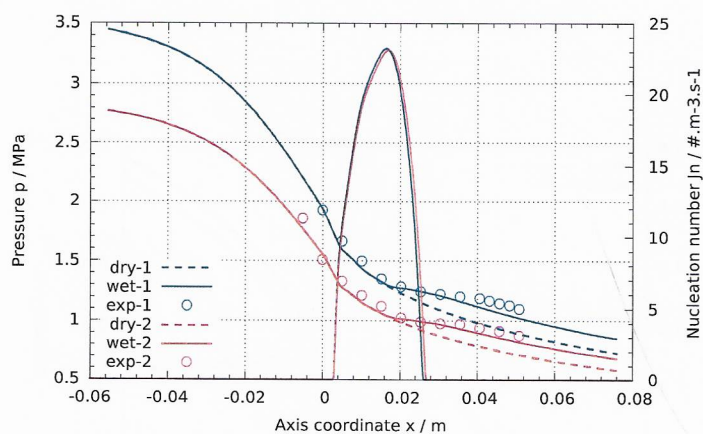


Obr. 5.32: Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií S.

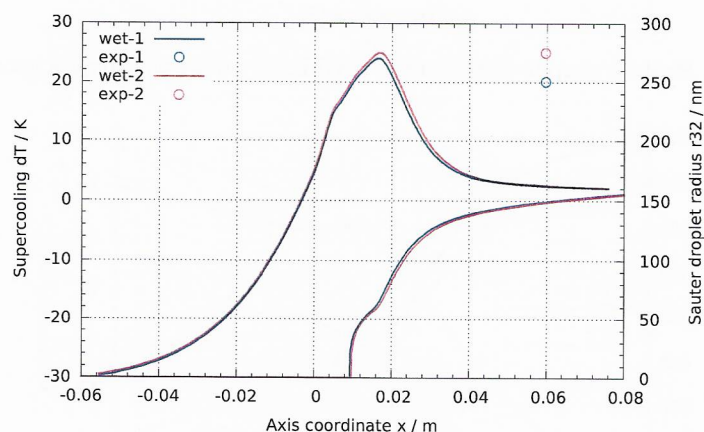
5.2.2 Gyarmathyho dýza

Výsledky byly publikovány ve vlastním článku [6].

Gyarmathy provedl rozsáhlou sérii experimentálního měření kondenzace v Lavalových dýzách při vyšším tlaku a výsledky publikoval zde [38]. Měření provedl na celkem 4 geometriích dýz. Následující numerické výsledky byly provedeny pro dýzu s označením 4/B, která byla navržena pro rychlost expanze $\dot{p} = 50000$ 1/s. Schéma experimentálního zařízení a geometrie všech měřených dýz je na obr. 5.41. Dýza 4/B má obdélníkový průřez s šířkou 20 mm. Délka konvergentní části je 20 mm, délka divergentní části je 30 mm. Výška spodního profilu dýzy je dána souřadnicemi $[x,y]$ uvedenými v originálním článku. Horní profil dýzy je vodorovný. Testovací případ má označení 20B. Okrajové podmínky jsou následující: vstupní stagnační tlak $p_0 = 4.043$ MPa, vstupní stagnační teplota $T_0 = 282.72$ °C, vstup bez přítomné

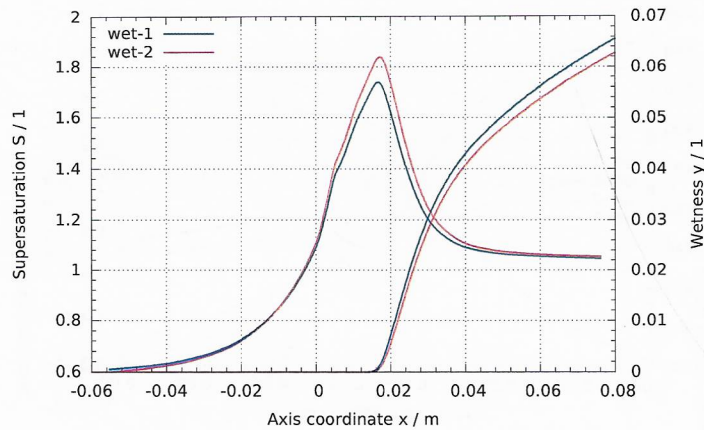


Obr. 5.33: Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií M.



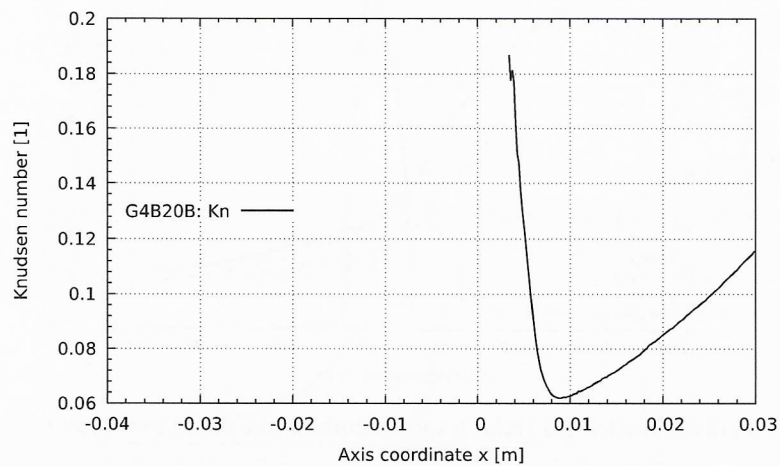
Obr. 5.34: Průběh teplotní difference ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií M.

kapalné fáze, nadzvukový výstup. Výpočetní síť byla vygenerovaná v software Gmsh [34] a je tvořena 38510 prizmatickými buňkami. Řez výpočetní sítí je na obr. 5.42. Použita stavová rovnice je speciální IAPWS-95 pro metastabilní oblast. Nukleační růst je korigován Courtneyho a Kantrowiczovou korekci. Na obr. 5.43 jsou vyobrazeny izočáry Machova čísla. Rovněž je vyznačena oblast $M = 1$ a saturační body $S = 1$. Rozložení vlhkosti je na obr. 5.44. Na výstupu dosahuje vlhkost hodnoty přibližně 12%. Nukleační číslo je vyobrazeno na obr. 5.45. Obrázek rovněž vyobrazuje oblast nukleace, která začíná těsně za hrdlem dýzy. Rozložení průměrné velikosti kapek je na obr. 5.46. Na výstupu z oblasti dosahují kapky v průměru velikost přibližně 65 nm. Následující obrázky ukazují rozložení příslušných veličin na horní vodorovné stěně dýzy. Na obr. 5.47 je rozložení statického tlaku a velikosti kapek na stěně. Přerušovanou čarou je zobrazen průběh tlaku. Počátek nukleace je oproti experimentu posunut

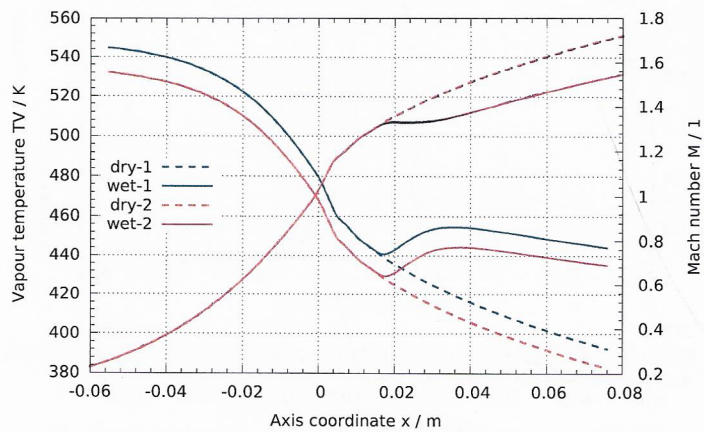


Obr. 5.35: Průběh stupně přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií M.

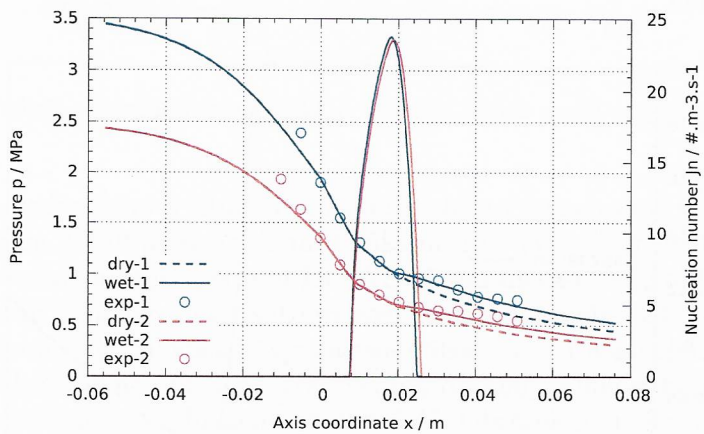
ve směru proudění, navíc absolutní hodnoty tlaku jsou nižší než experimentálně změřené hodnoty. Velikost kapek je v dobrém souladu s experimentem. Na výstupu z dýzy je velikost kapek přibližně 6.5×10^{-8} m. Průběh teploty páry T_V a objemového zlomku kapalně fáze ζ je na obr. 5.48. Přerušovanou čarou je vyobrazen průběh teploty páry při expanzi bez kondenzace. Obr. 5.49 ukazuje průběh Knudsenova čísla na stěně dýzy. Podle hodnoty jde o přechodový režim mezi molekulárním režimem a režimem kontinua.



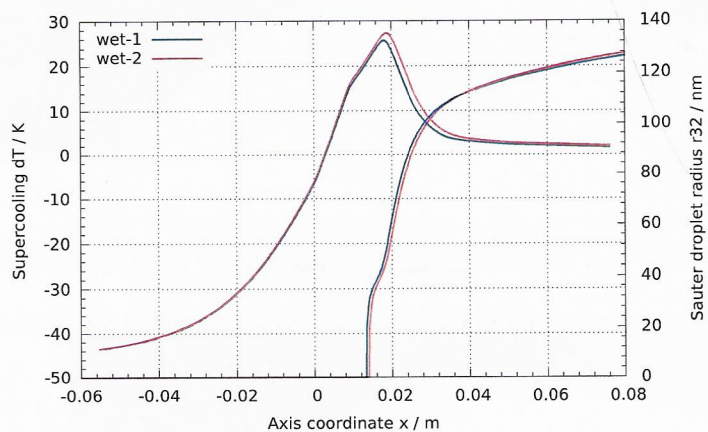
Obr. 5.49: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh Knudsenova čísla na horní stěně.



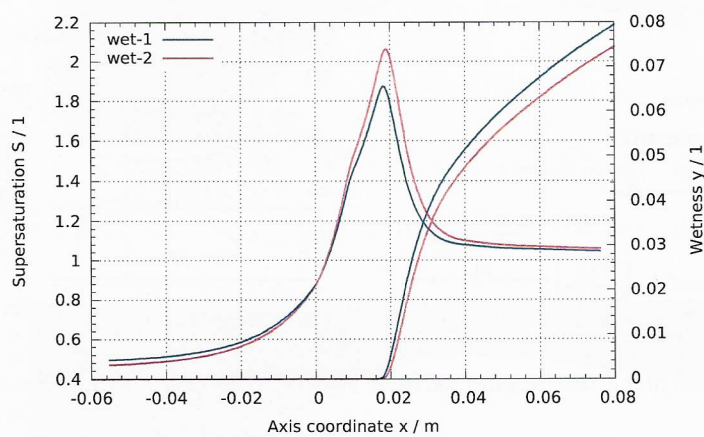
Obr. 5.36: Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií M.



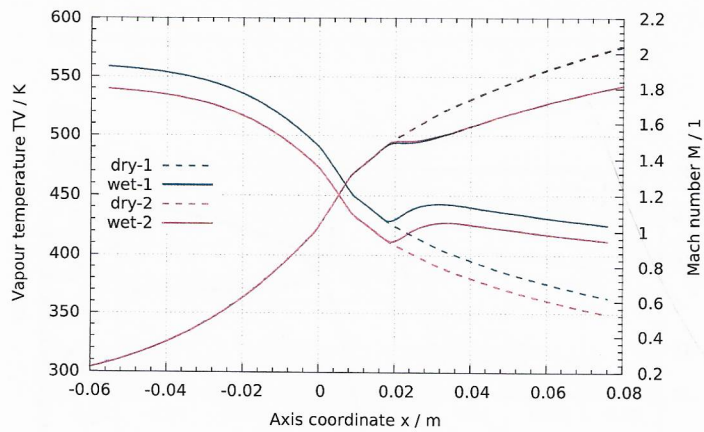
Obr. 5.37: Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií L.



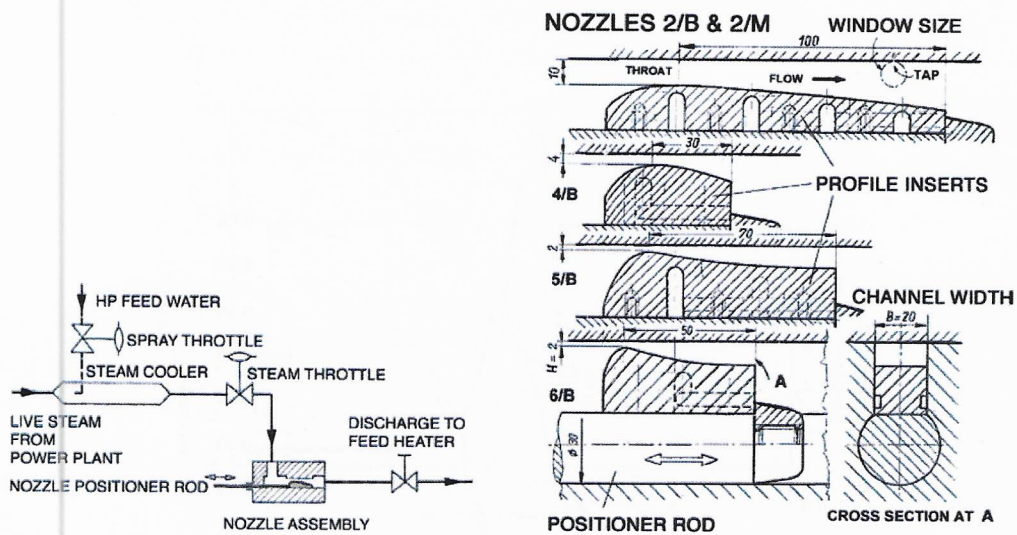
Obr. 5.38: Průběh teplotní difference ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií L.



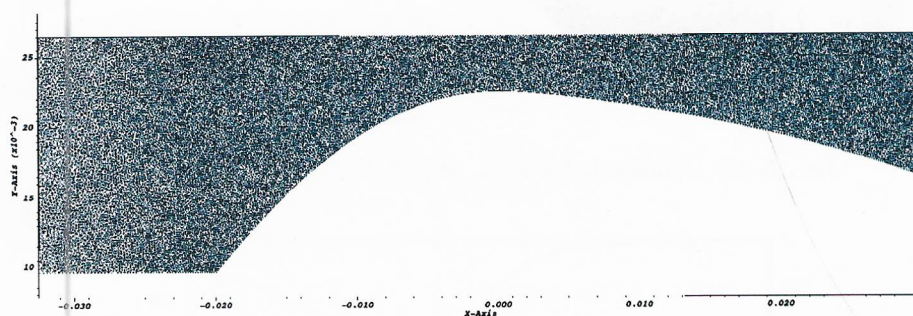
Obr. 5.39: Průběh stupně přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií L.



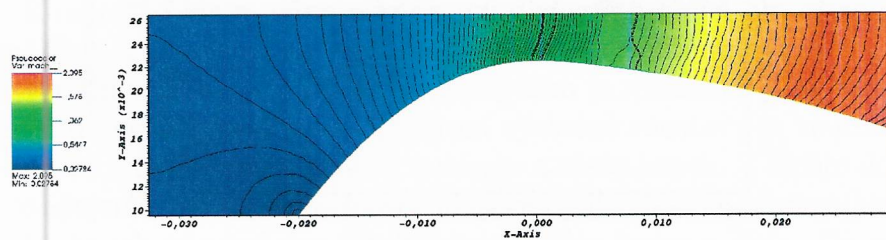
Obr. 5.40: Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií L.



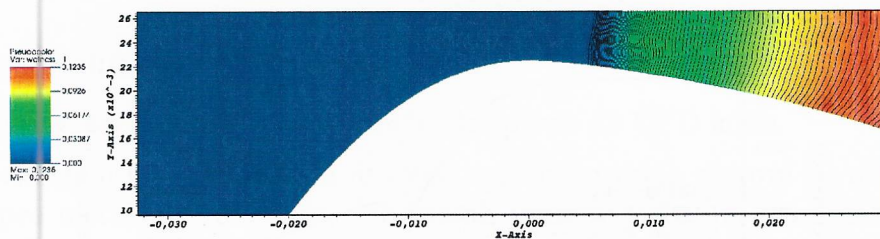
Obr. 5.41: Schéma testovacího zařízení (vlevo). Geometrie všech dýz (vpravo).



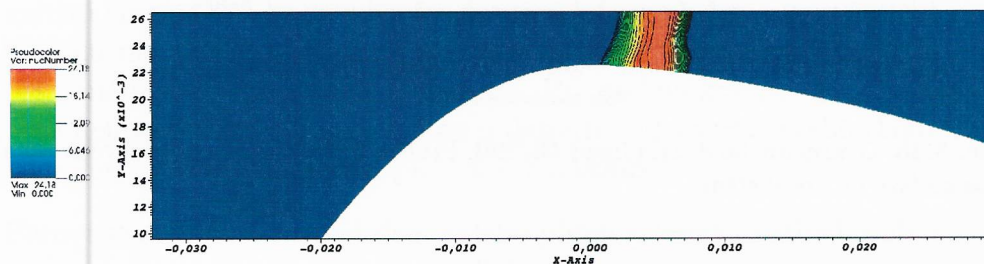
Obr. 5.42: Řez výpočetní sítí pro numerický výpočet dýzy 4/B s podmínkami 20B.



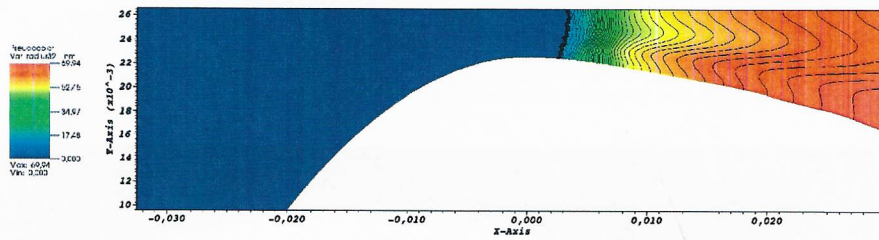
Obr. 5.43: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Izočáry Machova čísla. Oblast $M = 1$ (plná křivka). Oblast $S = 1$ (přerušovaná křivka).



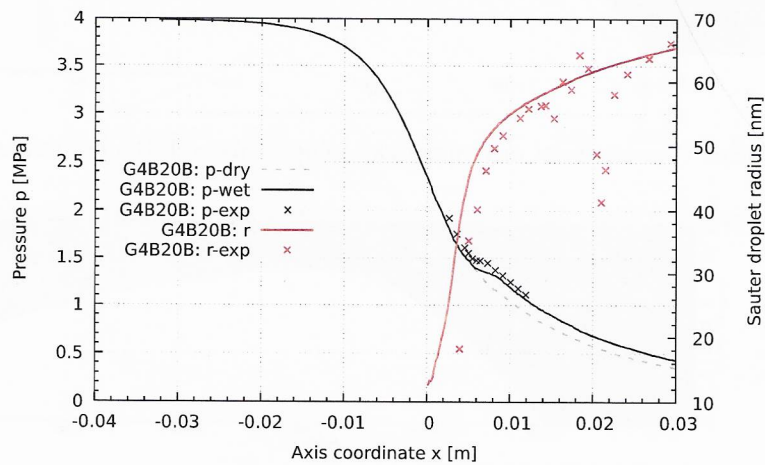
Obr. 5.44: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Izočáry vlhkosti.



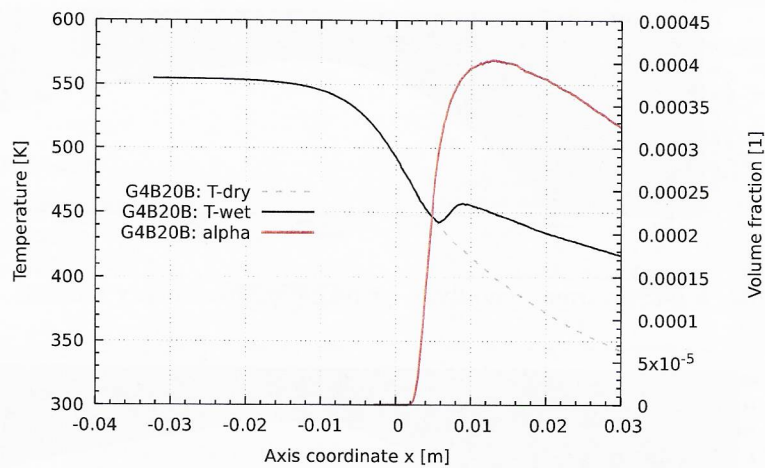
Obr. 5.45: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Nukleační číslo.



Obr. 5.46: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Velikost kapek.



Obr. 5.47: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh tlaku a velikosti kapek na horní stěně.



Obr. 5.48: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh teploty páry a objemového zlomku kapalné fáze na horní stěně.

Kapitola 6

Závěr

Práce je věnována matematickému modelování proudění mokré páry s nerovnovážnou kondenzací a reálnou termodynamikou. Byl zvolen vhodný model dvoufázového proudění. Konkrétně jde o jedno-tekutinový disperzní model pro směs primární a sekundární fáze. V prostorovém případě tento systém zahrnuje 5 rovnic zachování pro konzervativní veličiny celé směsi. Tento systém je rozšířen o 4 rovnice momentů distribuční funkce velikosti kapek. Uzavření výsledné soustavy je ve formě stavové rovnice pro páru a modelu pro rychlost nukleace a růstu kapek. V těchto dodatečných rovnicích uvažujeme vztah pro rychlost nukleace podle klasické teorie a kombinovaný model růstu kapek vhodný pro široký rozsah Knudsenova čísla. Do vztahu pro růst kapek dosazujeme průměrnou velikost kapek. Tento přístup je dostatečný pro proudění v dýžách. Nicméně u složitějších geometrií turbínových lopatek, kde je větší spektrum velikosti kapek, tento přístup již nemusí postačovat.

Zhodnocení cílů

1. Implementace stavové rovnice reálného plynu do CFD kódu

Ve vlastním CFD kódu byla úspěšně implementována stavová rovnice IAPWS-95 pro metastabilní oblast. Její rozsah použití (zejména maximální hustota $\rho = 55 \text{ kg/m}^3$) dostačoval pro okrajové podmínky ve vybraných případech. Ve vnitřku výpočetní oblasti bylo třeba řešit v každé výpočetní buňce jednu nelineární algebraickou rovnici pro teplotu při známých hodnotách hustoty a vnitřní energie. Na podzvukovém vstupu, kde uvažujeme isentropické proudění, bylo nutné řešit soustavu nelineárních rovnic pro neznámou hustotu a teploty při daném statickém tlaku a entropii. Při podzvukovém výstupu bylo nutné řešit nelineární rovnici pro teplotu z daných hodnot statického tlaku a hustoty. Výpočetní čas se prodloužil přibližně 7-násobně.

2. Porovnat stavovou rovnici dokonalého plynu s rovnicí reálného plynu

V práci jsme uvedli porovnání v případě modelu nukleace a modelu růstu kapek. Bylo ukázáno, že rozdíly nejsou zanedbatelné a rozdíl narůstá se zvětšujícím se

tlakem. Podle očekávání při nízkých tlacích do 1 *bar* lze v těchto kondenzačních vztazích použít rovnici ideálního plynu. V modelu rychlosti růstu kapek se ukázalo, že i při nízkých tlacích jsou nezanedbatelné rozdíly mezi reálnou a ideální stavovou rovnicí. Zmiňované veličiny nejvíce ovlivňují charakter tzv. nukleační zóny, ve které dochází k produkci nových kapek s inicializační kritickou velikostí. Numerické výpočty v části 5 potvrdily, že i při nízkých tlacích je nutné v praktických výpočtech proudění použít reálnou stavovou rovnici, nejlépe v některé formulaci podle organizace IAPWS, která se na modelování termofyzikálních vlastností vody specializuje.

3. Realizovat rychlejší výpočet termodynamických parametrů reálného plynu

Jako alternativní metoda výpočtů termodynamických parametrů páry byla použita bi-kvadratická interpolační metoda na samostatné čtyřúhelníkové síti. V každé buňce byly předem napočítány koeficienty (celkem 9) lokální kvadratické funkce pro nezávislou dvojici hustota a vnitřní energie. Ekvidistantní síť umožňuje rychlé vyhledávání bez nutnosti iterací. Uvedeným způsobem se dosáhla redukce výpočetního času na zhruba 1.5-násobek při výpočtech s ideálním plynem.

4. Numerickými simulacemi porovnat výsledky použitého matematického modelu s dostupnými experimenty včetně oblastí s vyšším provozním tlakem

Porovnali jsme výsledky numerických simulací s experimentálním měřením na jednom případě geometrie dýzy s nižším provozním tlakem (Barschdorff) a dvou geometriích dýzy při vyšším tlaku (Bakhtar, Gyarmathy). Jako poslední testovací případ byla vybrána Whitova geometrie lopatky statoru. S přihlédnutím na použitý jednoduchý matematický model lze považovat výsledky v případě nízkých tlaků za uspokojivé. Dosáhlo se dobré shody v průběhu statického tlaku, poloměru kapek i výstupní vlhkosti. Menší shody se dosáhlo v případě vyšších tlaků v dýzách, což se projevilo zejména na menším poloměru kapek. Problémem je již samotná absence experimentálních dat v metastabilní oblasti. Dalším problémem je model růstu kapek v širším okolí $Kn = 1$. Spolehlivý model zatím nebyl nalezen. Námi použitý model růstu v této tranzitní oblasti bude nutné dále vylepšit.

Budoucí cíle

V matematickém modelu bude nutné zohlednit rozdílnou rychlost proudících kapek ve formě dvou-tekutinového modelu proudění. Na to pak může navázat modelování vodního filmu na sací straně lopatek a jejich rozpad na sekundární kapky. V numerickém modelu bude nutné implementovat metodu s vyšším řádem v prostoru, např. přístup WENO. Rovněž je žádoucí místo nevazkých eulerových rovnic použít vhodný model turbulence, např. $k - \omega$ SST, případně $k - \omega$ TNT.

Publikace autora

- [1] J. Halama, V. Hric a M. Pátý. „Numerical solution of transonic flow of steam with non-equilibrium phase change using typical and simplified method“. In: *Applied Mathematics and Computation* 319 (2018), s. 499–509.
- [2] V. Hric a J. Halama. „Numerical Solution of 2D Wet Steam Flow with Non-equilibrium Condensation and Real Thermodynamics“. In: *Proceedings of the International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics 2014 (ICNAAM-2014)*. AIP Conference Proceedings. New York, US: AIP Conference Proceedings, 2015.
- [3] V. Hric a J. Halama. „Numerical Solution of Steam Flow in a Nozzle Using Different Non-equilibrium Condensation Models“. In: *Applied Mathematics and Computation* 272.3 (2016), s. 657–669.
- [4] V. Hric a J. Halama. „Numerical Solution of Transonic Wet Steam Flow in Blade-to-Blade Cascade with Non-equilibrium Condensation and Real Thermodynamics“. In: *EFM14 - Experimental Fluid Mechanics 2014*. EJP Web of Conferences. Liberec, CZ: Technical University of Liberec, 2015.
- [5] V. Hric a J. Halama. „Numerical Solution of Wet Steam Flow through Blade Cascade“. In: *Engineering Mechanics 2015*. Applied Mechanics and Materials. Pfaffikon, CH: Trans Tech Publications Inc., 2016.
- [6] V. Hric a J. Halama. „On the numerical solution of non-equilibrium condensation of steam in nozzles“. In: *Advances in Computational Mathematics* 45.4 (2019), s. 2147–2162.
- [7] V. Hric a J. Halama. „Performance of Simple Condensation Model in High-Pressures“. In: *Topical problems of fluid mechanics 2016*. Prague, CZ: Institute of Thermomechanics, AS CR, v.v.i., 2016, s. 59–68.
- [8] V. Hric, J. Halama a J. Fürst. „Numerical solution of inviscid transonic 2D flow in a nozzle using various non-ideal equations of state“. In: *Conference Topical Problems of Fluid Mechanics 2014*. Prague, CZ: Institute of Thermomechanics, AS CR, v.v.i., 2014.
- [9] V. Hric, J. Halama a J. Fürst. „Numerical solution of inviscid transonic flow in a channel with complex equation of state“. In: *Engineering Mechanics 2014*. Brno, CZ: Brno University of Technology, 2014.

Ostatní literatura

- [10] S. Adam a G. Schnerr. „Instabilities and bifurcation of non-equilibrium two-phase flows“. In: *J. Fluid. Mech.* 348.1 (1997), s. 1–28.
- [11] H. Holden et al. *Splitting methods for partial differential equations with rough solutions: analysis and Matlab programs*. European Mathematical Society, 2010.
- [12] F. Bakhtar et al. „Classical nucleation theory and its application to condensing steam flow calculations“. In: *Proc. IMechE*, 219(C), 1315–1333 (2005).
- [13] J. Starzmann et al. „Results of the International Wet Steam Modeling Project“. In: *J. Pow. En.* 232.5 (2018), s. 550–570.
- [14] P. Peeters et al. „Transitional droplet growth and diffusion coefficients“. In: *Int. J. Heat Mass Transfer*, 44, 181–193 (2001).
- [15] R. H. Aungier. „A fast, accurate real gas equation of state for fluid dynamic analysis applications“. In: *Journal of Fluids Engineering*, 117(2), 277–281 (2005).
- [16] L. Azzini a M. Pini. „Numerical investigation of high pressure condensing flows in supersonic nozzles“. In: *J. of Physics, Conf. Series* 821 (2017).
- [17] F. Bakhtar a M. Piran. „Thermodynamic properties of supercooled steam“. In: *Int. J. Heat Fluid Flow* 1.2 (1979), s. 53–62.
- [18] F. Bakhtar a K. Zidi. „Nucleation Phenomena in Flowing High-Pressure Steam Part 2: Theoretical Analysis“. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, 204(4), 233–242 (1990).
- [19] F. Bakhtar a K. Zidi. „Nucleation phenomena in flowing high-pressure steam: experimental results“. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power Engineering*, 203(3), 195–200 (1989).
- [20] D. Barschdorff. „Verlauf der Zustandsgrößen und gasdynamische Zusammenhänge bei der spontanen Kondensation reinen Wasserdampfes in Lavaldüsen“. In: *Forsch. Ing.-Wes.*, 37(5), 146–157 (1971).
- [21] K. Baumann. „Some recent developments in large steam turbine practice“. In: *J. Inst. Electr. Eng.* 59.302 (1921), s. 565–623.
- [22] R. Becker a W. Döring. „Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen“. In: *Ann. Phys.*, 416(8), 719–752 (1935).

- [23] J. R. Cooper. „Representation of the ideal-gas thermodynamic properties of water“. In: *International Journal of Thermophysics* 3.1 (1982), s. 35–43.
- [24] W. G. Courtney. „Remarks on homogeneous nucleation“. In: *J. Chem. Phys.*, 35(6), 2249–2250 (1961).
- [25] S. F. Davis. „Simplified second-order Godunov-type methods“. In: *SIAM J. Sci. and Stat. Comput.*, 9(3), 445–473 (1988).
- [26] S. Dykas. „Numerical calculation of the steam condensing flow“. In: *TASK Quarterly – scientific bulletin of Academic Computer Centre in Gdansk* 5.4 (2001), s. 267–279.
- [27] S. Dykas a W. Wróblewski. „Single- and two-fluid models for steam condensing flow modeling“. In: *International Journal of Multiphase Flow* 37.9 (2011), s. 1245–1253.
- [28] S. Dykas a W. Wróblewski. „Two-fluid model for prediction of wet steam transonic flow“. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 60, 88–94 (2013).
- [29] L. Farkas. „Keimbildungsgeschwindigkeit in übersättigten Dämpfen“. In: *Zeit. Phys. Chem.*, 125(1), 236–242 (1927).
- [30] J. Frenkel. „A general theory of heterophase fluctuations and pretransition phenomena“. In: *J. Chem. Phys.*, 7(7), 538–547 (1939).
- [31] J. Fürst. „Development of a coupled matrix-free LU-SGS solver for turbulent compressible flows“. In: *Computer and Fluids*, 172, 332–339 (2018).
- [32] T. Furusawa a S. Yamamoto. „Mathematical modeling and computation of high-pressure steam condensation in a transonic flow“. In: *J. of Fluid Science and Tech.* 12.1 (2017).
- [33] A. G. Gerber a A. Mousavi. „Application of quadrature method of moments to the polydispersed droplet spectrum in transonic steam flows with primary and secondary nucleation“. In: *App. Math. Mod.* 31.8 (2007), s. 1518–1533.
- [34] C. Geuzaine a J.-F. Remacle. „Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79.11 (2009), s. 1309–1331.
- [35] Gibbs. „On the equilibrium of heterogeneous substances“. In: *Trans. Connect. Acad.*, 3, 343–524 (1878).
- [36] T. Guo et al. „High pressure subsonic nucleation in 1D nozzles – experimental study“. In: *Int. J. Heat Fluid Flow* Volume 1B: Marine; Microturbines, Turbochargers and Small Turbomachines; Steam Turbines (2014).
- [37] G. Gyarmathy. „Grundlagen einer Theorie der Nassdampfturbine“. Dis. pr. Eidgenössischen Technischen Hochschule in Zürich, 1962.

- [38] G. Gyarmathy. „Nucleation of steam in high-pressure nozzle experiments“. In: *J. of Pow. Ener.*, 219(6), 511–521 (2005).
- [39] G. Gyarmathy et al. „Spontaneous condensation of steam at high pressure: first experimental results“. In: *Inst. Mech. Engrs., Heat and Fluid Flow in Steam and Gas Turbine Plant Conf. Publ.* 3 (1973), s. 182–186.
- [40] A. H. Harvey a E. W. Lemmon. „Correlation for the second virial coefficient of water“. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 33.1 (2004), s. 369–376.
- [41] P. G. Hill. „Condensation of water vapour during supersonic expansion in nozzles“. In: *J. Fluid Mech.* 25.3 (1966), s. 593–620.
- [42] P. G. Hill, K. Miyagawa a J. D. Denton. „Fast and accurate inclusion of steam properties in two- and three-dimensional steam turbine flow calculations“. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science* 214.7 (2000), s. 903–919.
- [43] V. Holten a M. E. H. van Dongen. „Comparison between solutions of the general dynamic equation and the kinetic equation for nucleation and droplet growth“. In: *Journal of Chemical Physics* 130.1 (2009), 014102:1–8.
- [44] J. Hrubý. „A computationally efficient and accurate numerical representation of thermodynamic properties of steam and water for computations of non-equilibrium condensing steam flow in steam turbines“. In: *EPJ Web of Conferences* 25 (2014).
- [45] J. Hrubý, J. Pátek a M. Duška. „An analytical formulation of thermodynamic properties of dry and metastable steam suitable for computational fluid dynamics modelling of steam turbine flows“. In: *J. Power and Energy*, 228(2), 120–128 (2014).
- [46] M. Ishii a T. Hibiki. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. 2. vyd. Springer, 2011.
- [47] A. Kantrowitz. „Nucleation in very rapid vapor expansions“. In: *J. Chem. Phys.*, 19(9), 1097–1100 (1951).
- [48] D. Kashchiev. *Nucleation - basic theory with applications*. Elsevier, 2000.
- [49] K. Kelton. *Nucleation in condensed matter, volume 15*. Elsevier, 2010.
- [50] F. Kreitmeier et al. „Experimental and numerical analyses of relaxation processes in LP steam turbines“. In: *Proc. Inst. Mech. Eng. Part C J. Mech. Eng. Sci* 219.12 (2005), s. 1411–1436.
- [51] J. Kvasnica. *Termodynamika*. Státní nakladatelství technické literatury Praha, 1965.
- [52] J. H. Lienhard a A. Karimi. „Homogeneous nucleation and the spinodal line“. In: *J. Heat Transfer*, 103(1), 61–64 (1981).

- [53] M. D. Lorenzo. „Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques métastables“. Dis. pr. Université Paris-Saclay, Ecole Polytechnique, 2018.
- [54] M. McCallum. „The flow of wet steam in a one-dimensional nozzle“. In: *Int. J. for Num. Meth. in Eng.*, 44(12), 1807–1821 (1999).
- [55] G. E. A. Meier a G. H. Schnerr. *Control of flow instabilities and unsteady flows*. Springer, 1996.
- [56] K. Miyagawa a P. G. Hill. „A tabular Taylor series expansion method for fast calculation of steam properties“. In: *J. of Eng. for Gas Turb. and Pow.* 119.2 (1997), s. 485–491.
- [57] K. Miyagawa a P. G. Hill. „Rapid and Accurate Calculation of Water and Steam Properties Using the Tabular Taylor Series Expansion Method“. In: *J. Eng. Gas Turbines Power* 123.3 (2001), s. 707–716.
- [58] M.J. Moore a C.H. Sieverding. *Two-phase steam flow in turbines and separators*. McGraw-Hill Book Company, 1976.
- [59] J. Novák. *Fyzikální chemie*. VŠCHT Praha, 2016.
- [60] J. P. Novák. *Termodynamické vlastnosti plynů*. VŠCHT Praha, 2007.
- [61] V. Petr a M. Kolovratník. „Wet steam energy loss and related Baumann rule in low pressure steam turbines“. In: *J Power and Energy* 228.2 (2014), s. 206–215.
- [62] The International Association for the Properties of Water a Steam. *Guideline on the Fast Calculation of Steam and Water Properties with the Spline-Based Table Look-Up Method (SBTL) (IAPWS G13-15)*. Tech. zpr. IAPWS, 2015.
- [63] The International Association for the Properties of Water a Steam. *Revised release on surface tension of ordinary water substance (IAPWS R1-76(2014))*. Tech. zpr. IAPWS, 2014.
- [64] The International Association for the Properties of Water a Steam. *Revised release on the IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use (IAPWS R6-95(2018))*. Tech. zpr. IAPWS, 2018.
- [65] The International Association for the Properties of Water a Steam. *Revised release on the IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam (IAPWS R7-97(2012))*. Tech. zpr. IAPWS, 2012.
- [66] V. V. Rusanov. „The calculation of the interaction of non-stationary shock waves and obstacles“. In: *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.*, 1(2), 267–279 (1961).

- [67] S. Senoo a A. J. White. „Numerical simulations of unsteady wet steam flows with non-equilibrium condensation in the nozzle and the steam turbine“. In: *Proceedings of ASME 2006 2nd Joint U.S.-European Fluids Engineering Summer Meeting Collocated With the 14th International Conference on Nuclear Engineering*, 1(A,B), 757–767 (2006).
- [68] S. Senoo a A. J. White. „Analysis and design of wet-steam stages“. In: Elsevier, 2016. Kap. 9.
- [69] N. Shamsundar a J. H. Lienhard. „Equations of state and spinodal lines – a review“. In: *Nuclear Engineering and Design*, 141, 269–287 (1993).
- [70] J. Smoller. *Shock waves and reaction – diffusion equations*. 2nd. Springer, 1983.
- [71] R. Span. *Multiparameter equations of state*. Springer, 2000.
- [72] H. Späth. *Two dimensional spline interpolation algorithms*. 1. vyd. A K Peters/CRC Press, 1993.
- [73] J. Starzmann et al. „Wetness loss prediction for a low pressure steam turbine using computational fluid dynamics“. In: *Proc IMechE Part A: J Power and Energy* 228.2 (2014), s. 216–231.
- [74] H. Vehkamäki. *Classical Nucleation Theory in Multicomponent Systems*. Springer, 2006.
- [75] M. Volmer a A. Weber. „Keimbildung in übersättigten Gebilden“. In: *Zeit. Phys. Chem.*, 119(1), 277–301 (1926).
- [76] M. P. Vukalovich. *Thermodynamic properties of water and steam*. 6. vyd. 1958.
- [77] W. Wagner et al. „The IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam“. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 122.1 (2000), s. 150–184.
- [78] W. Wagner a H.-J. Kretzschmar. *International steam tables*. 3. vyd. Springer, 2019.
- [79] W. Wagner a A. Pruss. „The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use“. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 31.2 (2002), s. 387–535.
- [80] P. P. Wegener a A. A. Pouring. „Experiments on condensation of water vapor by homogeneous nucleation in nozzles“. In: *Physics of Fluids* 7.3 (1964), s. 352–361.
- [81] A. J. White a M. J. Hounslow. „Modelling droplet size distributions in poly-dispersed wet-steam flows“. In: *Int. J. of Heat and Mass Trans.* 43.11 (2000), s. 1873–1884.

- [82] A. J. White, J. B. Young a P. T. Walters. „Experimental Validation of Condensing Flow Theory for a Stationary Cascade of Steam Turbine Blades“. In: *Philosophical Transactions: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 354, 59–88 (1996).
- [83] C. T. R. Wilson. „Condensation of water vapour in the presence of dust-free air and other gases“. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society a Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 189.0 (1897), s. 265–307.
- [84] W. Wróblewski a S. Dykas. „Two-fluid model with droplet size distribution for condensing steam flows“. In: *Energy (Oxford)* 106 (2016), s. 112–120.
- [85] W. Wróblewski, S. Dykas a T. Chmielniak. „Models for water steam condensing flows“. In: *Archives of Thermodynamics* 33.1 (2012), s. 67–86.
- [86] J. B. Young. „An Equation of State for Steam for Turbomachinery and Other Flow Calculations“. In: *J. Eng. Gas Turbines Power* 110.1 (1988), s. 1–7.
- [87] J. B. Young. „The condensation and evaporation of liquid droplets at arbitrary Knudsen number in the presence of an inert gas“. In: *Int. J. Heat Mass Transfer*, 36(11), 2941–2956 (1993).
- [88] J. B. Young. „The fundamental equations of gas-droplet multiphase flow“. In: *Int. J. Multiphase Flow* 21.2 (1995), s. 175–191.
- [89] J. B. Young. „Two-dimensional, nonequilibrium, wet-steam calculations for nozzles and turbine cascades“. In: *J. Turbomach.* 114.3 (1992), s. 569–579.
- [90] J. B. Zeldovich. „On the theory of new phase formation, cavitation“. In: *Acta Physicochim.*, 18(1), 1–22 (1943).
- [91] A. C. Zettlemoyer. *Nucleation*. Marcel Dekker Inc., 1969.

Dodatek oprav

Oprava použitého značení

symbol	[jednotka]	veličina
\dot{P}	$[s^{-1}]$	rychlost expanze
J	$[m^{-3}s^{-1}]$	rychlost nukleace
J		jakobián toku v nekonzervativní formulaci - matice
r_c	$[m]$	kritický poloměr kapky
\dot{r}	$[ms^{-1}]$	rychlost růstu kapky
G	$[Jkg^{-1}]$	Gibbsův potenciál
P	$[Pa]$	statický tlak
S	$[Jkg^{-1}]$	měrná entropie
S	$[1]$	reálný saturační poměr
S	$[ms^{-1}]$	rychlost vlny
T	$[K]$	termodynamická teplota
V	$[m^3]$	objem
Q	$[Jkg^{-1}]$	měrné sdělené teplo
σ	$[Nm^{-1}]$	povrchové napětí
A	$[m^2]$	povrch kapky
W	$[J]$	práce objemových sil, minimální práce pro vytvoření kapky
U	$[Jkg^{-1}]$	měrná vnitřní energie
μ	$[Jmol^{-1}]$	chemický potenciál
n	$[mol]$	látkové množství
r	$[m]$	poloměr kapky
γ	$[1]$	bezrozměrná Gibbsova energie
ρ_1, ρ_L	$[kgm^{-3}]$	hustota kapalné fáze
v_1	$[molm^{-3}]$	molární hustota kapalné fáze
ρ_2, ρ_V	$[kgm^{-3}]$	hustota parní fáze
S°	$[1]$	ideální saturační poměr
L	$[Jkg^{-1}]$	latentní teplo kondenzace
T_0	$[K]$	saturační teplota

F	$[Jkg^{-1}]$	měrná volná energie
W_V	$[J]$	objemová část práce při tvoření kapky
W_A	$[J]$	povrchová část práce při tvoření kapky
A_c	$[m^2]$	kritický povrch kapky
χ, y	$[1]$	vlhkost
z	$[1]$	kompresní faktor (poměr)
N	$[1]$	počet molekul
N_c	$[1]$	kritický počet molekul
$C(N)$	$[m^{-3}]$	koncentrace N-merů
I	$[m^{-3}s^{-1}]$	výsledný tok molekul
$\varphi(N)$	$[1]$	kondenzační koeficient pro N-mer
$\epsilon(N)$	$[1]$	koeficient vypařování pro N-mer
r_N	$[m]$	poloměr kapky obsahující N molekul
K	$[1]$	kinetický činitel ve vztahu pro rychlost nukleace
C^e	$[m^{-3}]$	rovnovážná koncentrace monomerů
J_{iso}	$[m^{-3}s^{-1}]$	klasická (izotermická) rychlost nukleace
ξ_C	$[1]$	Courtneyho korekce nukleačního růstu
ξ_K	$[1]$	Kantrowiczova korekce nukleačního růstu
ν	$[1]$	pomocná proměnná v Kantrowiczové korekci
α_r	$[Wm^{-2}K^{-1}]$	součinitel přenosu tepla mezi kapkou a okolní párou
\tilde{l}	$[m]$	střední volná dráha molekul
d	$[m]$	průměr kapky
N_V	$[m^{-3}]$	molekulární hustota páry
μ_V	$[Pas]$	dynamická viskozita páry
\bar{v}	$[ms^{-1}]$	střední rychlost molekul
Kn	$[1]$	Knudsenovo číslo
$f(N)$	$[1]$	četnost srážek monomerů s kapkou o velikosti N
$g(N)$	$[1]$	četnost ubývání monomerů z kapky o velikosti N
$\rho_{V,0,r}$	$[kgm^{-3}]$	rovnovážná hustota par kapky
T_L	$[K]$	teplota kapky
p_0, p_{sat}	$[Pa]$	saturační tlak
T_0, T_{sat}	$[K]$	saturační teplota
h_V	$[Jkg^{-1}]$	měrná entalpie páry
h_L	$[Jkg^{-1}]$	měrná entalpie kapalné fáze
λ_V	$[Wm^{-1}K^{-1}]$	součinitel teplotní vodivosti páry
\dot{r}_{fm}	$[ms^{-1}]$	rychlost růstu kapky v molekulárním režimu
\dot{r}_{cont}	$[ms^{-1}]$	rychlost růstu kapky v režimu kontinua
\mathbf{U}		vektor konzervativních proměnných
t	$[s]$	čas
x		normálový směr - vektor
y	$[m]$	tečná souřadnice
z	$[m]$	tečná souřadnice

F		vektor toků konzervativních proměnných
u	$[ms^{-1}]$	normálová složka vektoru rychlosti
v, w	$[ms^{-1}]$	tečné složky vektoru rychlosti
E	$[J]$	celková energie
U_i		i-tá složka vektoru konzervativních proměnných
e	$[Jkg^{-1}]$	měrná vnitřní energie
A		Jacobiho matice normálového toku
α	$[Nmkg^{-1}]$	derivace tlaku podle hustoty
β	$[kgm^{-3}]$	derivace tlaku podle vnitřní energie
V	$[m^2]$	součet kvadrátů složek rychlosti
H	$[Jkg^{-1}]$	celková měrná entalpie
λ	$[1]$	vlastní číslo; spektrální poloměr
a	$[ms^{-1}]$	rychlost zvuku
\mathbb{K}		pravostranný vlastní vektor
W		vektor primitivních proměnných
\mathbb{L}		levostranný vlastní vektor
A_i		vnější parametry homogenního systému
F_i		obecné označení stavové funkce
c_p°	$[Jkg^{-1}K^{-1}]$	izobarická měrná tepelná kapacita ideálního plynu
c_v°	$[Jkg^{-1}K^{-1}]$	izochorická měrná tepelná kapacita ideálního plynu
f	$[Jkg^{-1}]$	specifická Helmholtzova funkce
f°	$[Jkg^{-1}]$	ideální část Helmholtzovy funkce
f^r	$[Jkg^{-1}]$	reziduální část Helmholtzovy funkce
ϕ	$[1]$	bezrozměrná Helmholtzova funkce
κ	$[1]$	isentropický součinitel ideálního plynu
f_n	$[m^{-3}]$	hustota distribuční funkce kapek s molekulami
δ	$[1]$	Diracova funkce
μ_k	$[m^{k-3}]$	k-tý moment distribuční funkce f
Q_k	$[m^k kg^{-1}]$	k-tý specifický moment distribuční funkce f
ζ	$[1]$	objemový podíl kapalně fáze
S		zdrojový vektor
V_i	$[m^3]$	objem výpočetní buňky i
$\hat{\mathbf{F}}$		numerický tok
\mathbf{R}_i		reziduum buňky i
Δt_i	$[s]$	lokální časový krok buňky i
h_0	$[Jkg^{-1}K^{-1}]$	stagnační entalpie
s_0	$[Jkg^{-1}K^{-1}]$	stagnační entropie
p_0	$[Pa]$	stagnační tlak
T_0	$[K]$	stagnační teplota
J_{num}	$[1]$	nukleační číslo

Oprava textu

str. 100 - odstavec Geometrie L

Obr. 5.37 - 5.40 ukazují rozložení důležitých parametrů mokré páry podél osy dýzy pro geometrii L. Průběh tlaku a nukleačního čísla je na obr. 5.37. Průběh teplotní difference $\Delta T = T_{sat}(p) - T_V$ a středního poloměru kapek je na obr. 5.38. Průběh stupně přesycení S a vlhkosti je na obr. 5.39. Průběh teploty parní fáze T_V a Machova čísla M je na obr. 5.40. Na výstupu z výpočetní oblasti mají kapky poloměr zhruba 125 nm pro oba případy 1 a 2. Vlhkost na výstupu dosahuje v případě 1 hodnoty 8%, v případě 2 hodnoty zhruba 7.5%. Největší podchlazení dosahuje hodnoty zhruba 25 K v místě $x = 0.018 m$. Pára zůstává v přesyceném stavu i na výstupu, kde podchlazení dosahuje hodnoty $\Delta T = 1 K$.

str. 62 - rovnice 3.74

$$c_v^{\circ} \approx 1387.47 \text{ Jkg}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

str. 75

Výpočet tlaku v kontaktní vlně přibližným Riemannovým řešičem PVRS (Primitive Variable Riemann Solver), [74].

str. 83

Pro tento numerický výpočet byly nastaveny tyto okrajové podmínky: ...

str. 84

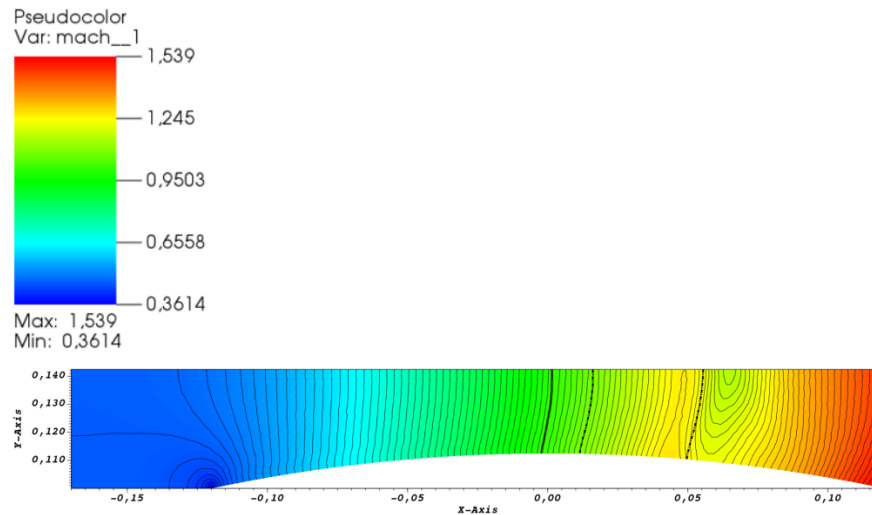
Proudové pole ve formě izočar ...

str. 89

Nicméně hodnoty vlhkosti na výstupu jsou prakticky totožné.

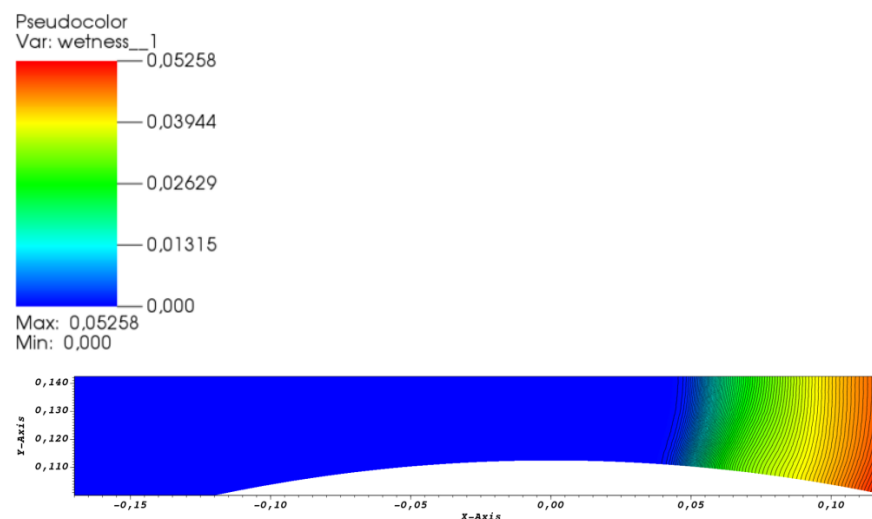
Oprava obrázků

obr. 5.2, str. 86



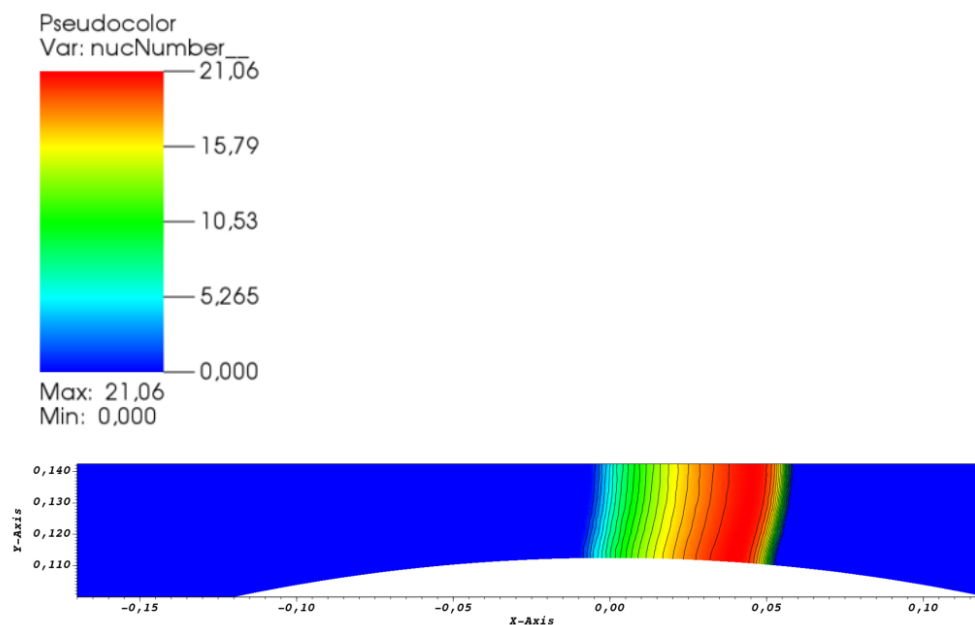
Barschdorffova dýza: Izočáry Machova čísla, zvuková čára $M = 1$ (tlustá plná čára), saturační oblast $S = 1$ (tlustá přerušovaná čára).

obr. 5.3, str. 86



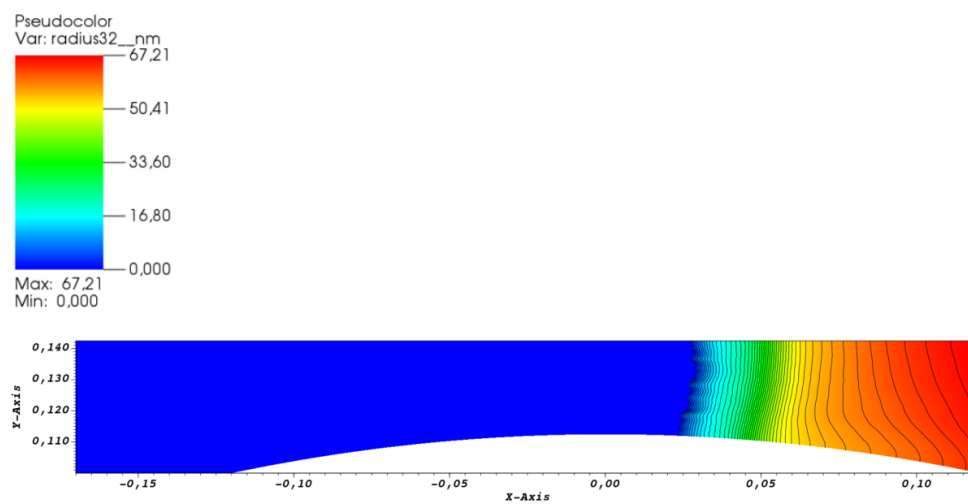
Barschdorffova dýza: Izočáry vlhkosti.

obr. 5.4, str. 86



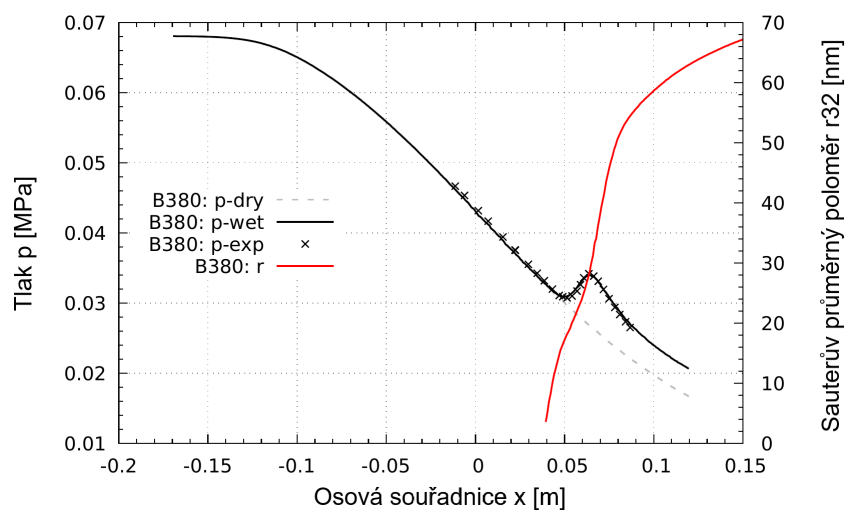
Barschdorffova dýza: Izočáry nukleačního čísla.

obr. 5.5, str. 87



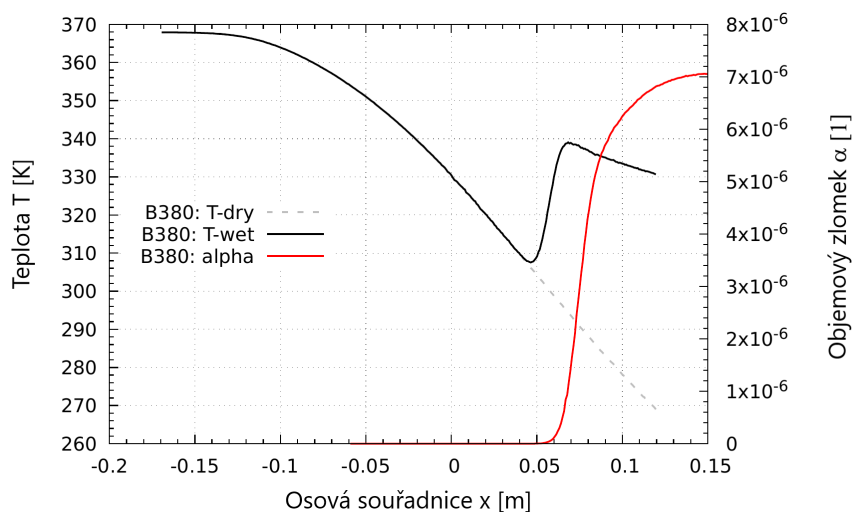
Barschdorffova dýza: Izočáry průměrného poloměru kapek.

obr. 5.6, str. 87



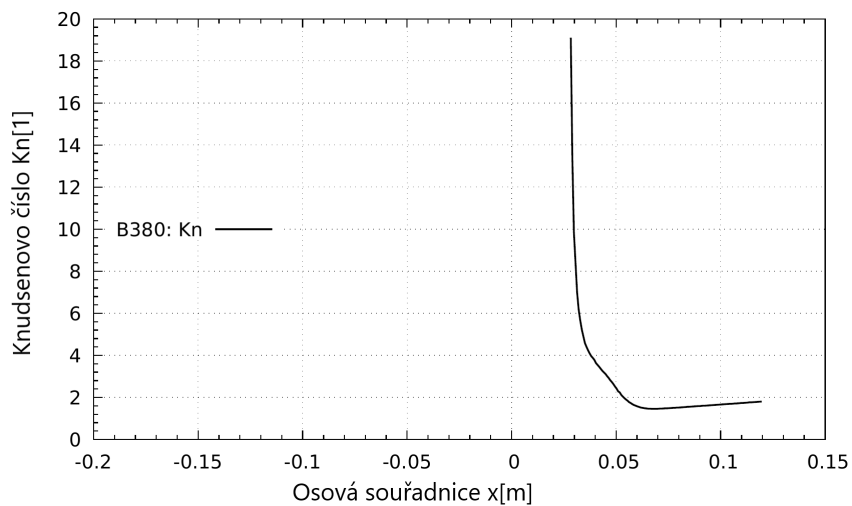
Barschdorffova dýza: Průběh statického tlaku a průměrného poloměru kapek podél osy dýzy.

obr. 5.7, str. 87



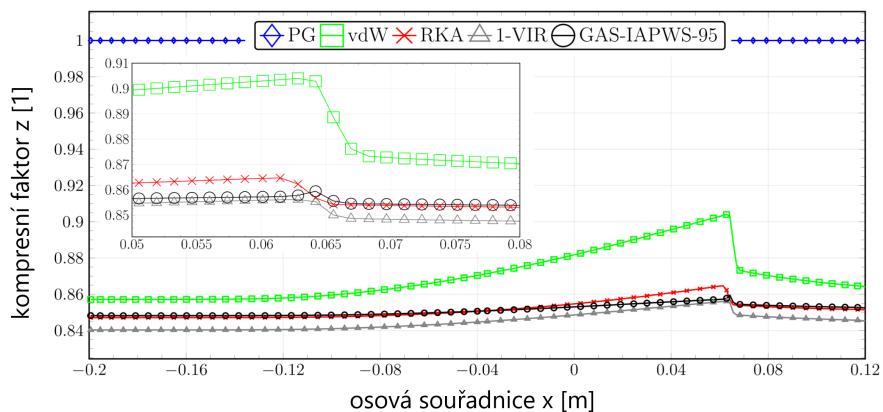
Barschdorffova dýza: Průběh teploty páry a objemového zlomku kapalně fáze podél osy dýzy.

obr. 5.8, str. 88



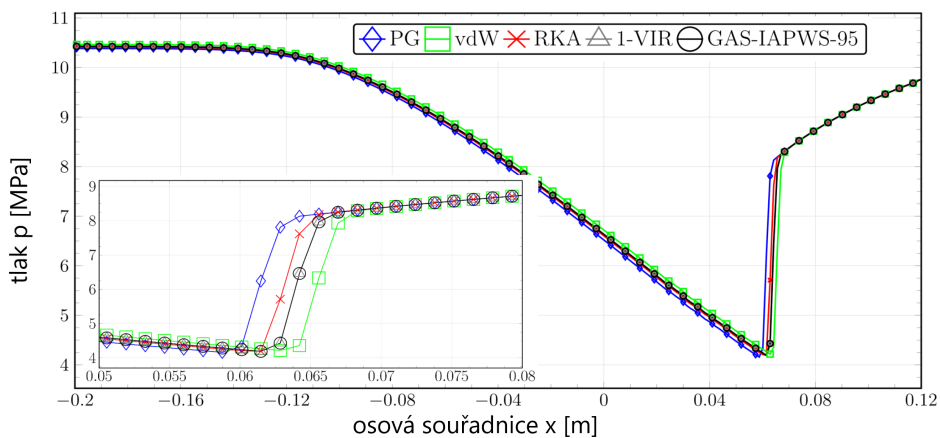
Barschdorffova dýza: Průběh Knudsenova čísla v ose dýzy.

obr. 5.9, str. 89



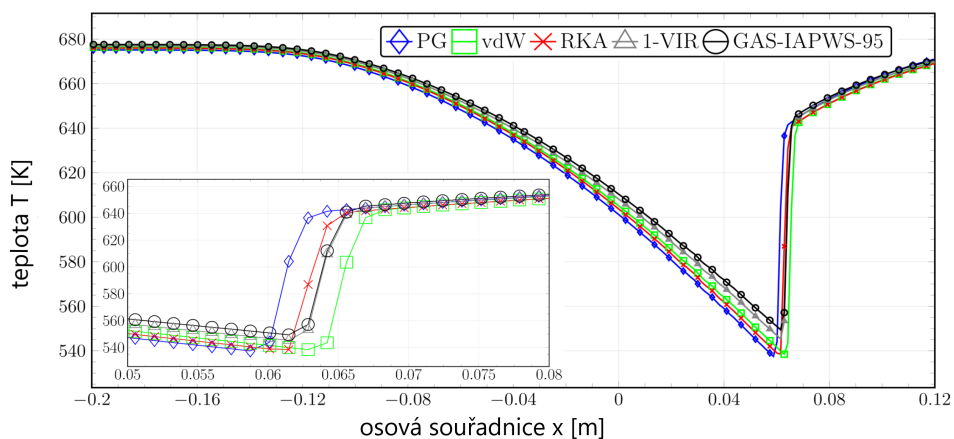
Kompresní faktor v ose dýzy.

obr. 5.10, str. 89



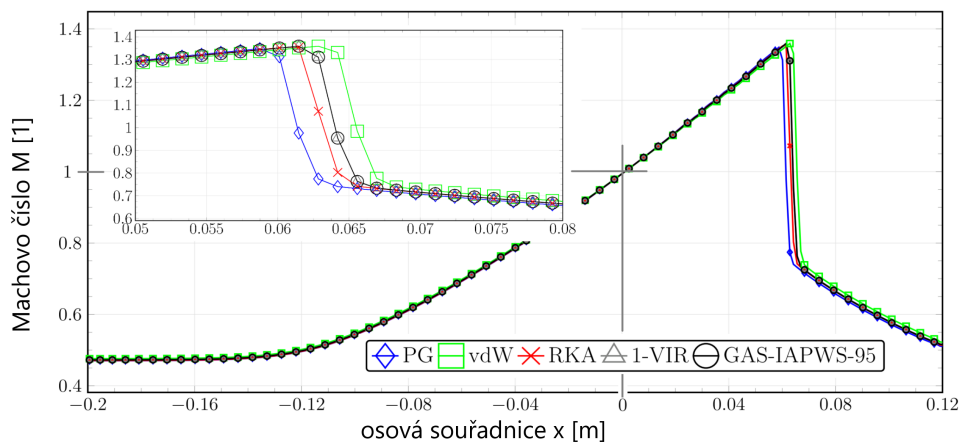
Tlak v ose dýzy.

obr. 5.11, str. 89



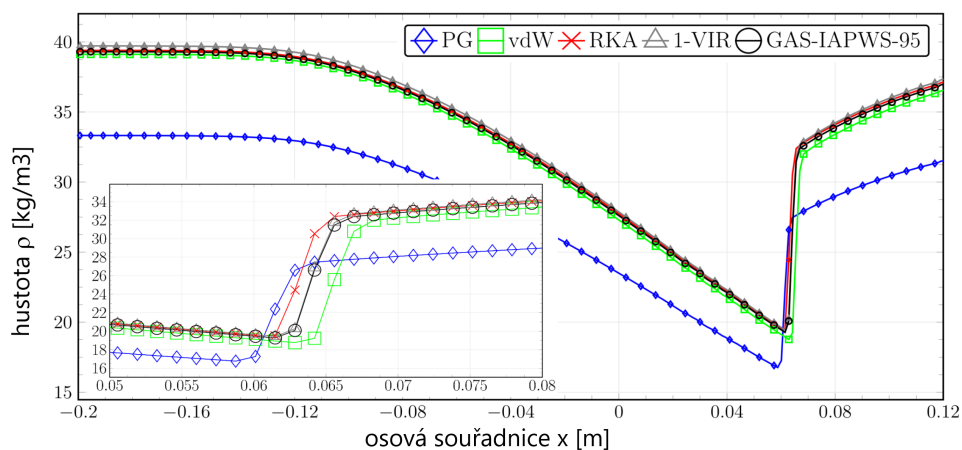
Teplota v ose dýzy.

obr. 5.12, str. 90



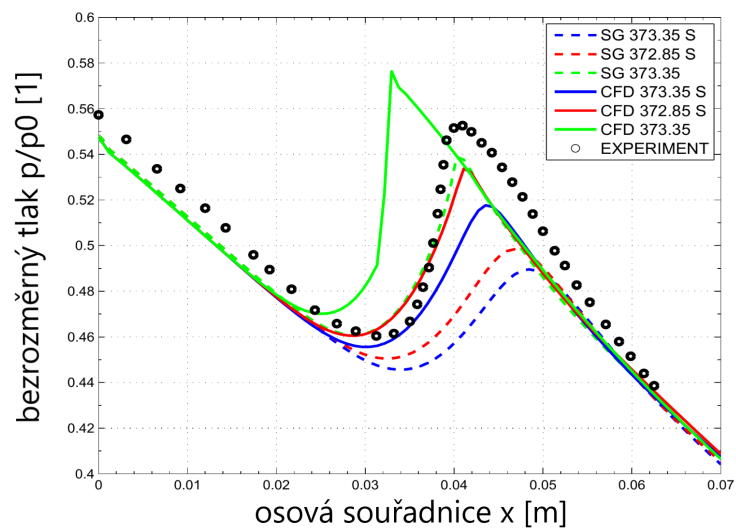
Machovo číslo v ose dýzy.

obr. 5.14, str. 90



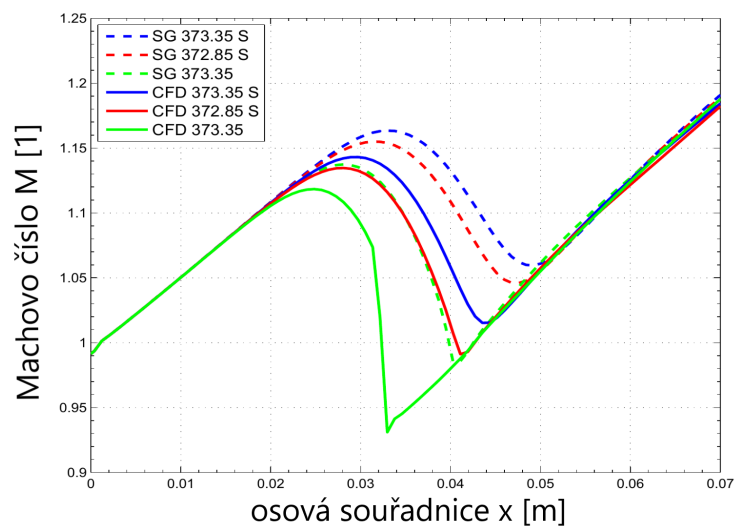
Hustota v ose dýzy.

obr. 5.15, str. 92



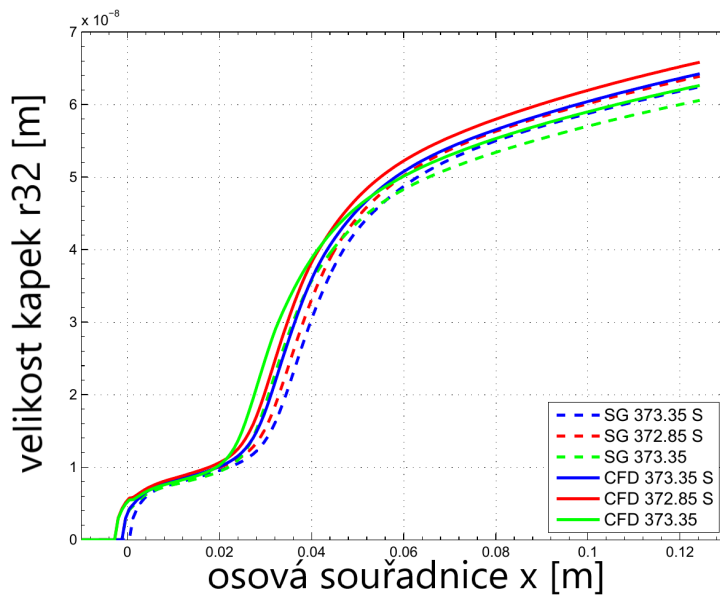
Průběh statického tlaku vztáženého k stagnačnímu tlaku v ose dýzy. Detail v nukleační oblasti.

obr. 5.16, str. 92



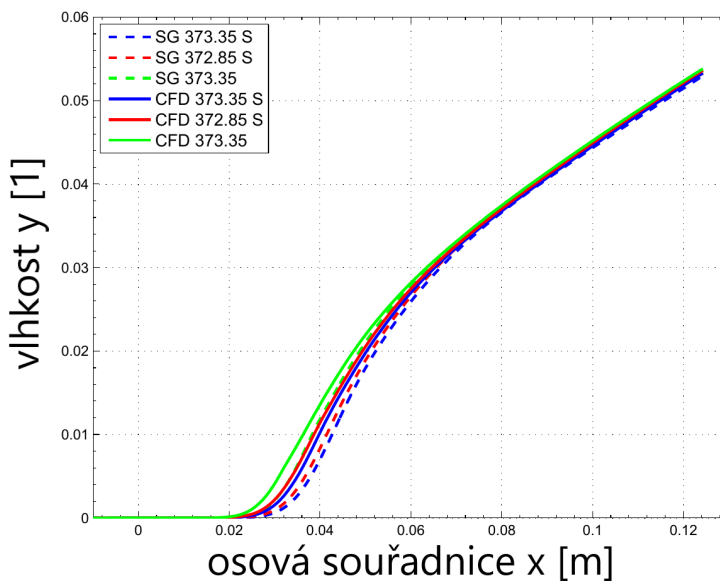
Průběh Machova čísla v ose dýzy. Detail v nukleační oblasti.

obr. 5.17, str. 93

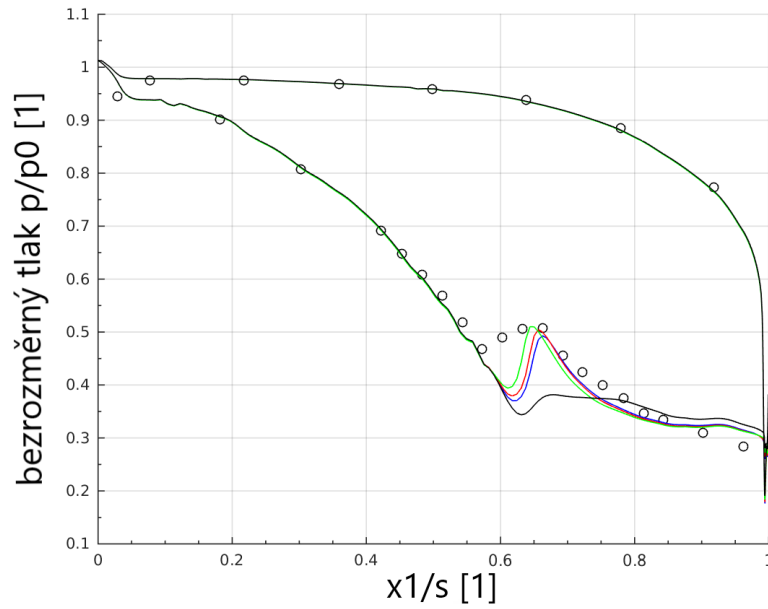


Průměrný poloměr kapek podél osy dýzy.

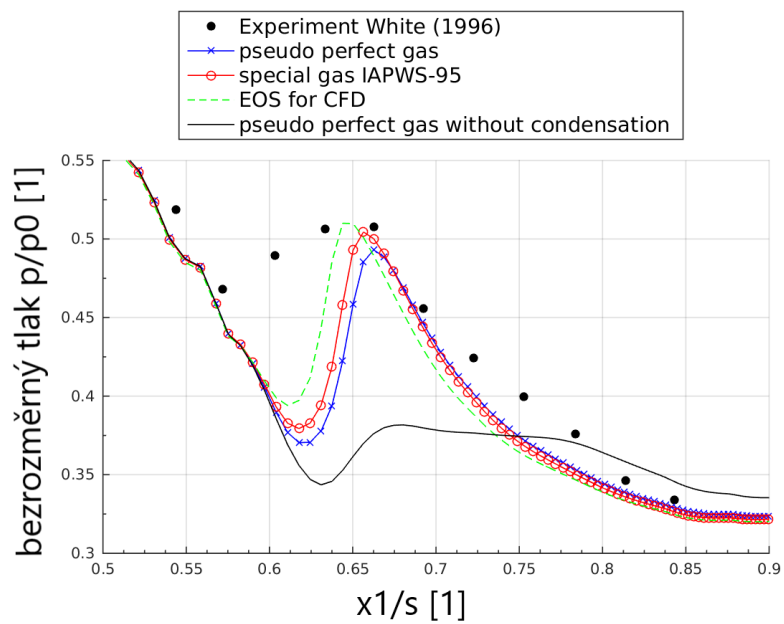
obr. 5.18, str. 93



Průběh vlhkosti podél osy dýzy.

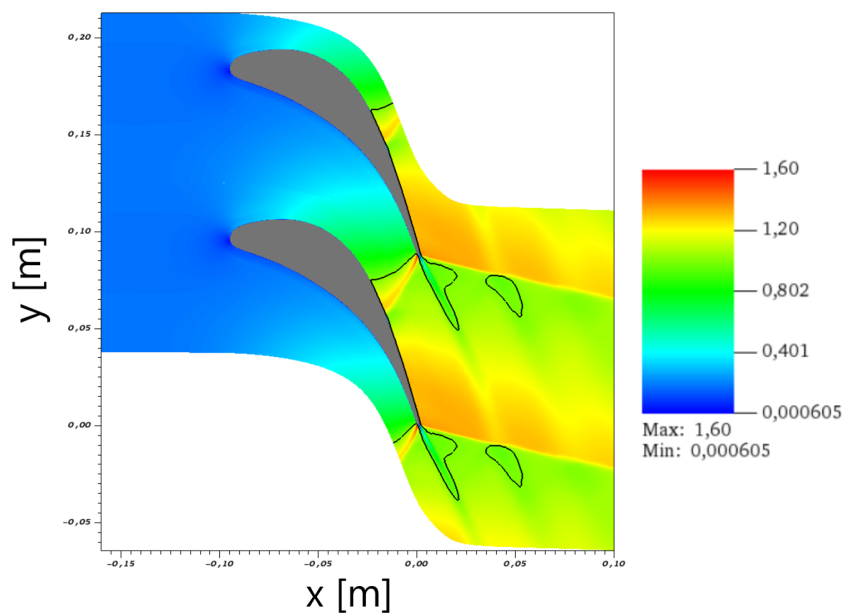


Průběh statického tlaku na povrchu lopatky.

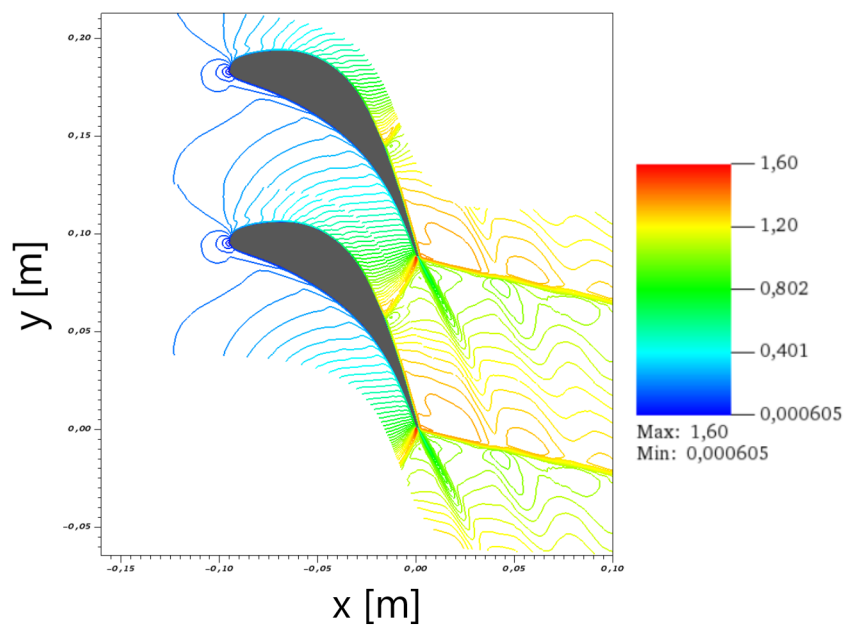


Průběh statického tlaku na povrchu lopatky - detail.

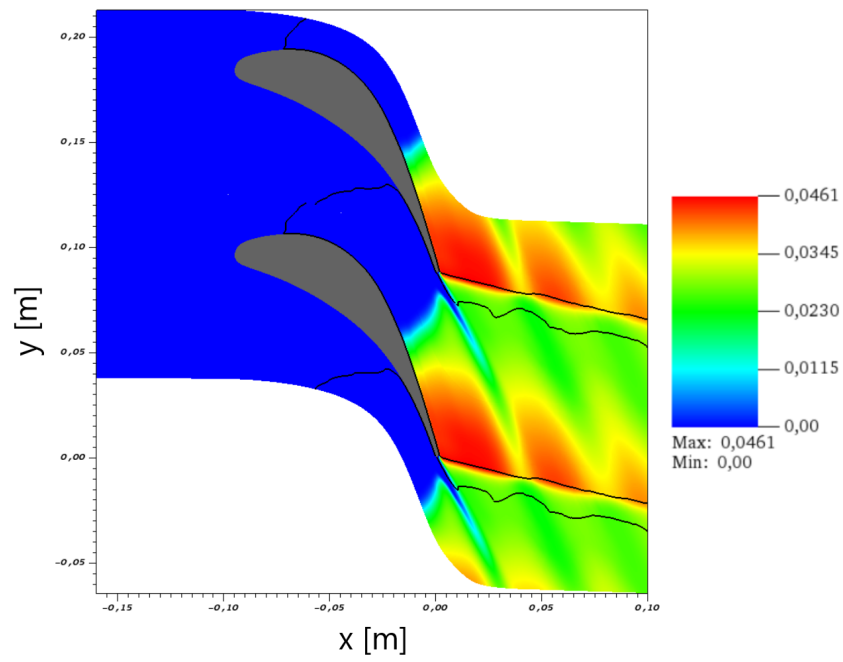
obr. 5.21, str. 95



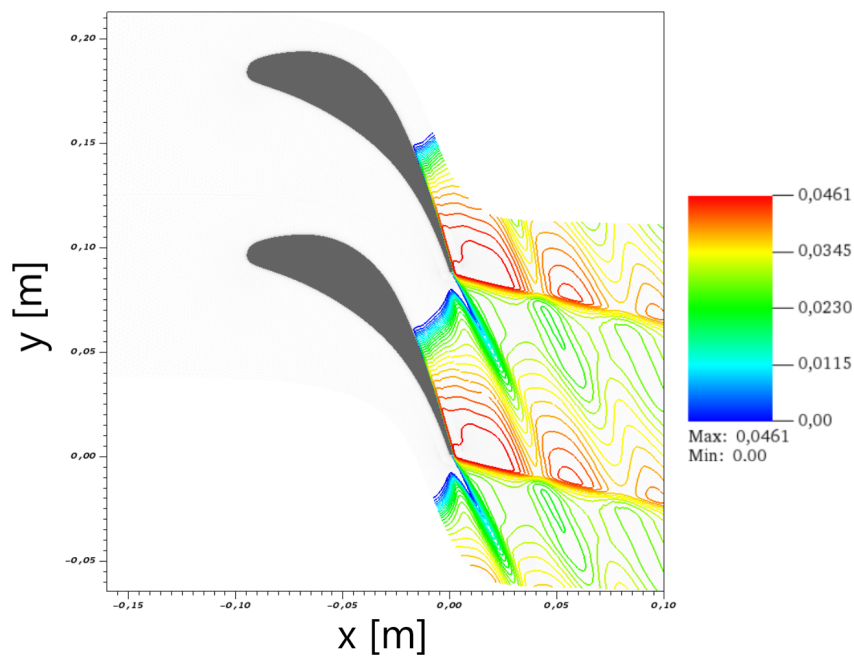
Machovo číslo. Zobrazení kontury $M = 1$.



Izočáry Machova čísla.

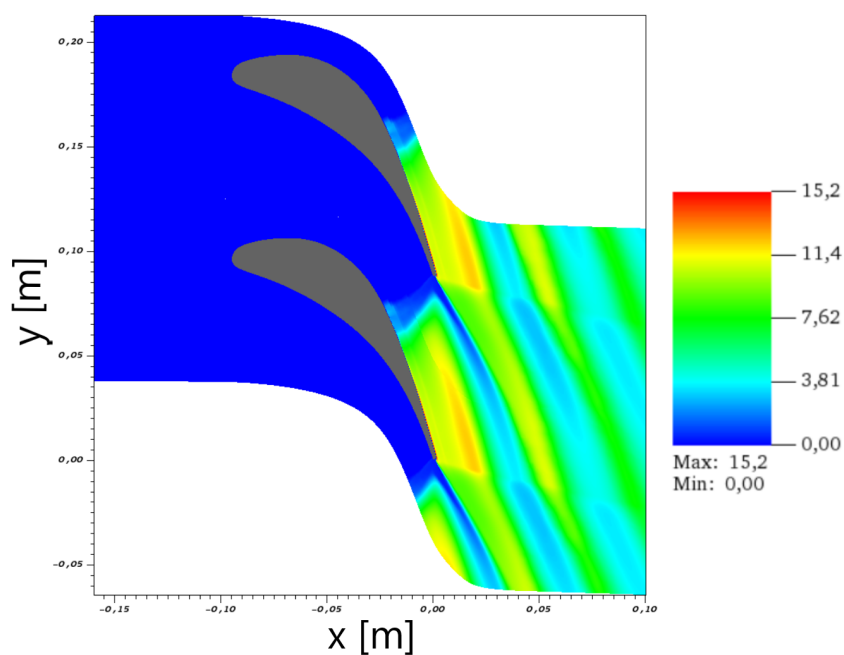


Vlhkost. Vyznačení saturační hranice $S = 1$.

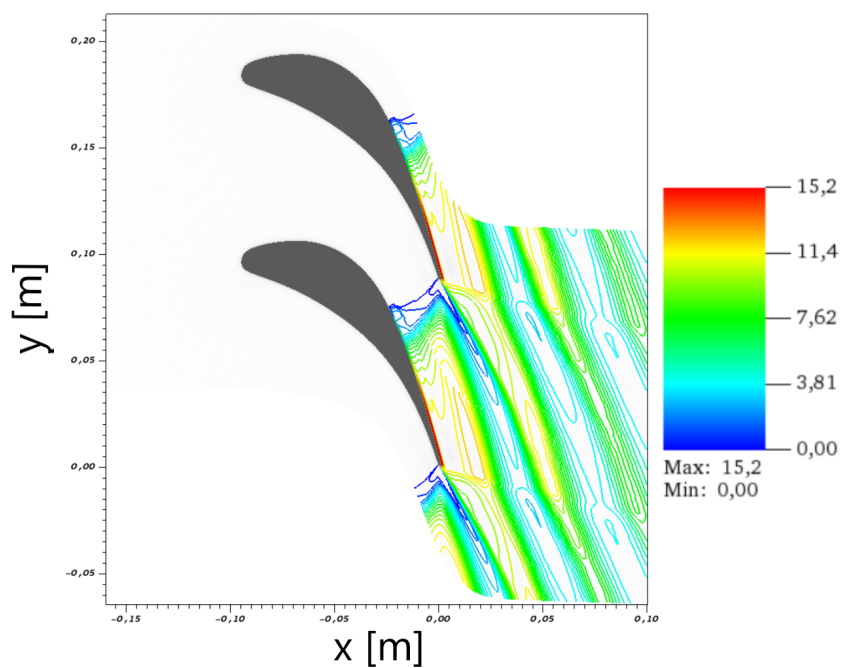


Izočáry vlhkosti.

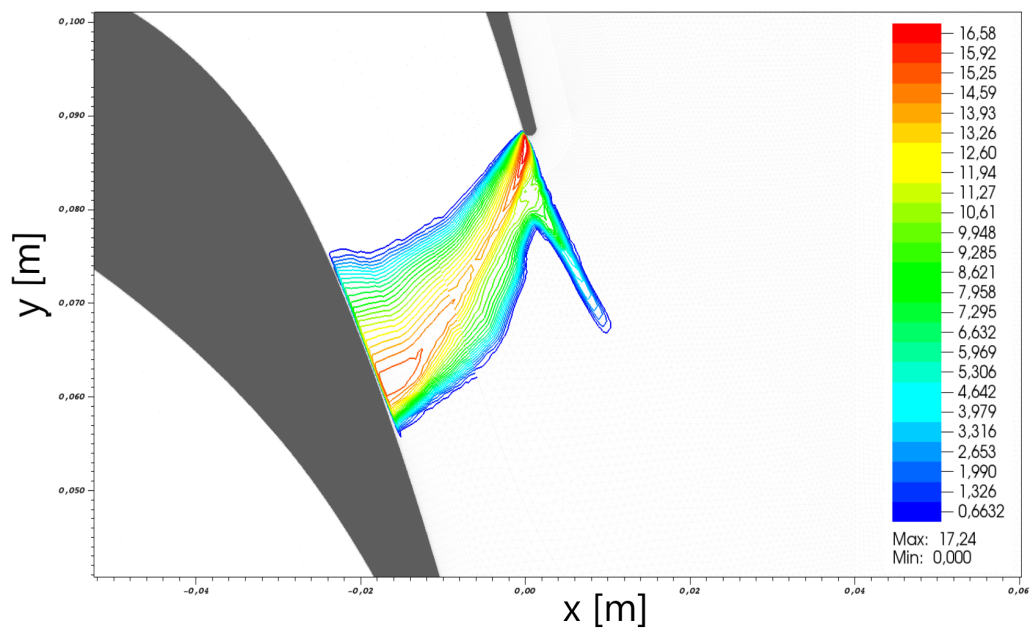
obr. 5.23, str. 96



Průměrná velikost kapek [nm].

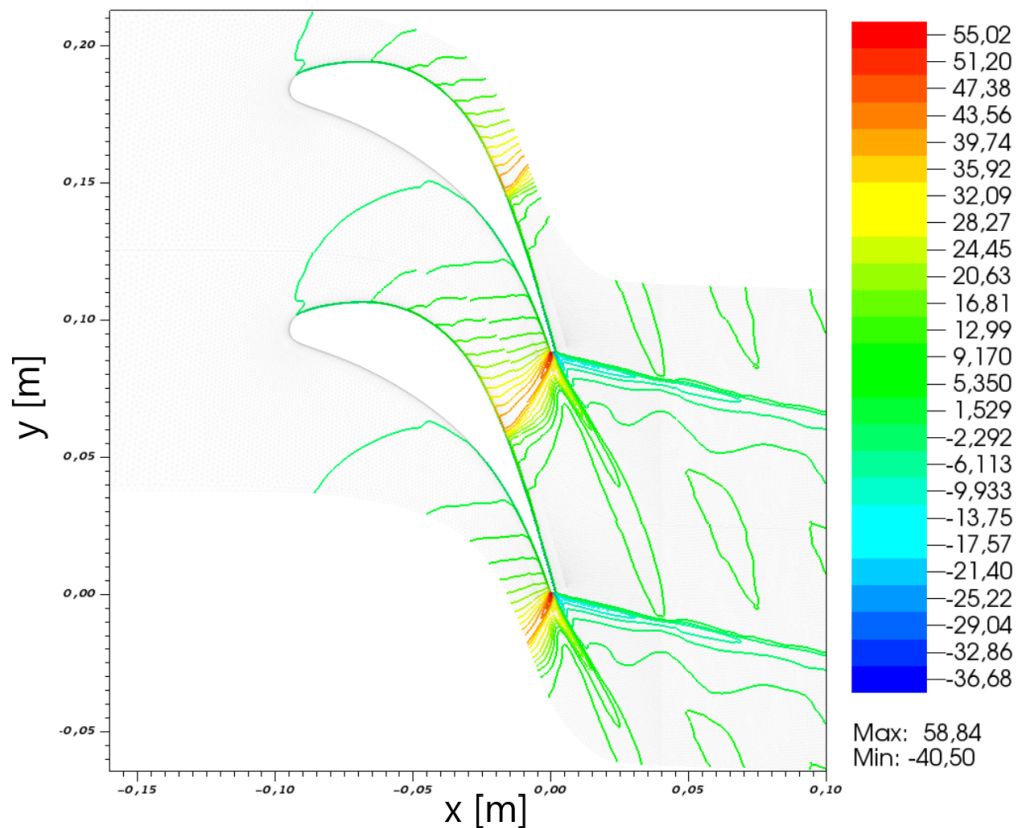


Průměrná velikost kapek [nm] - izočáry.



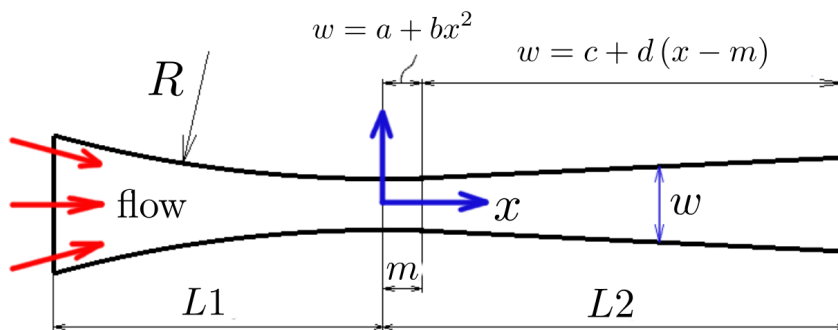
Kondenzační zóna. Izočáry nukleárního čísla.

obr. 5.25, str. 97



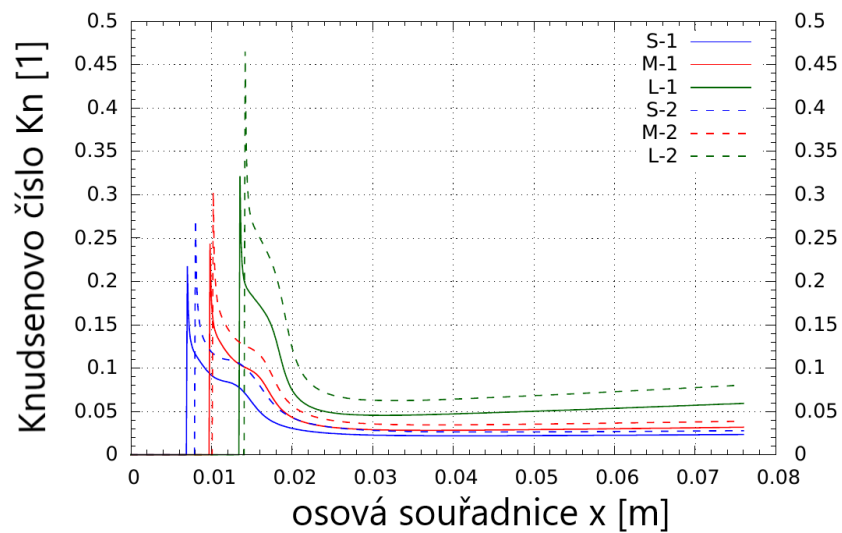
Izočáry podchlazení $\Delta T > 0$.

obr. 5.26, str. 97

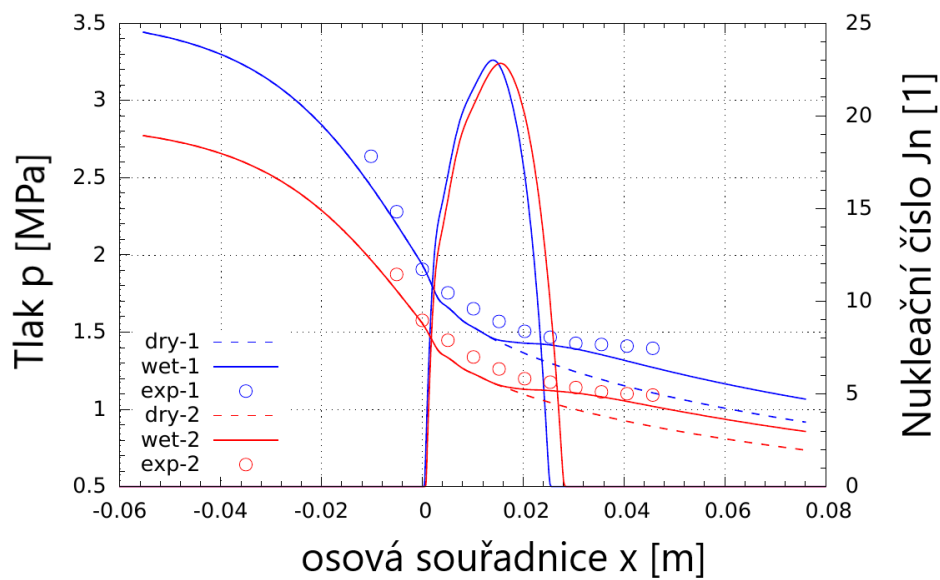


Skica geometrie dýz S, M a L v experimentu Bakhtara a Zidiho.

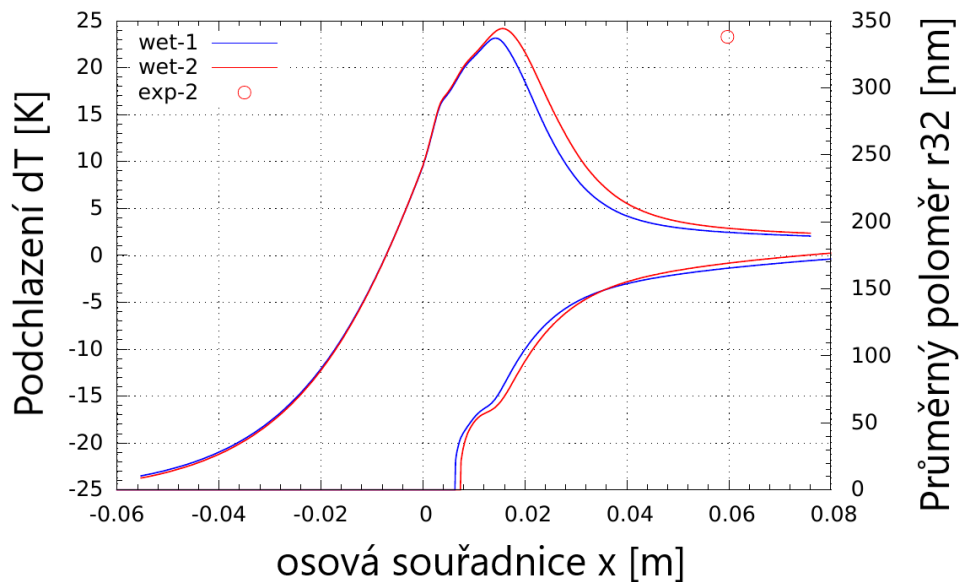
obr. 5.28, str. 99



obr. 5.29, str. 100

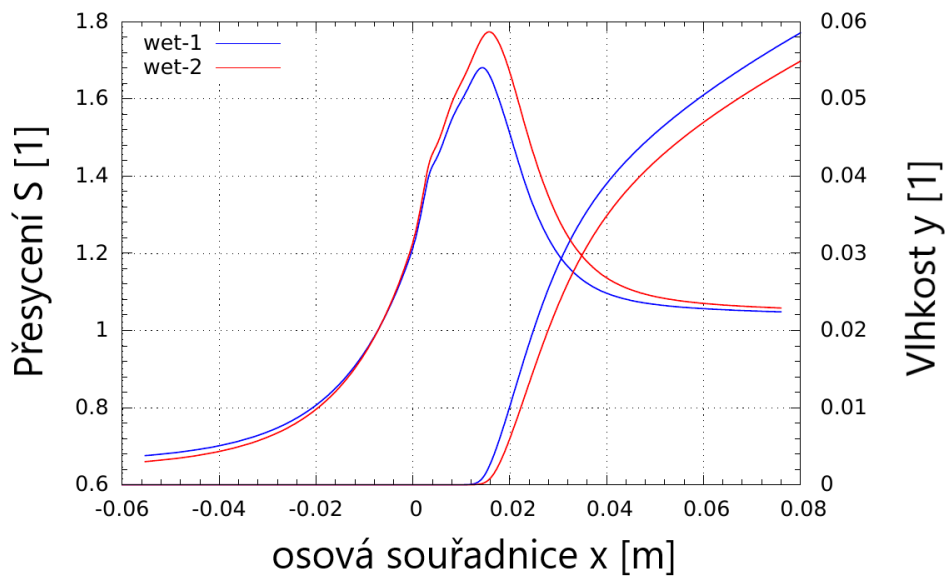


obr. 5.30, str. 100



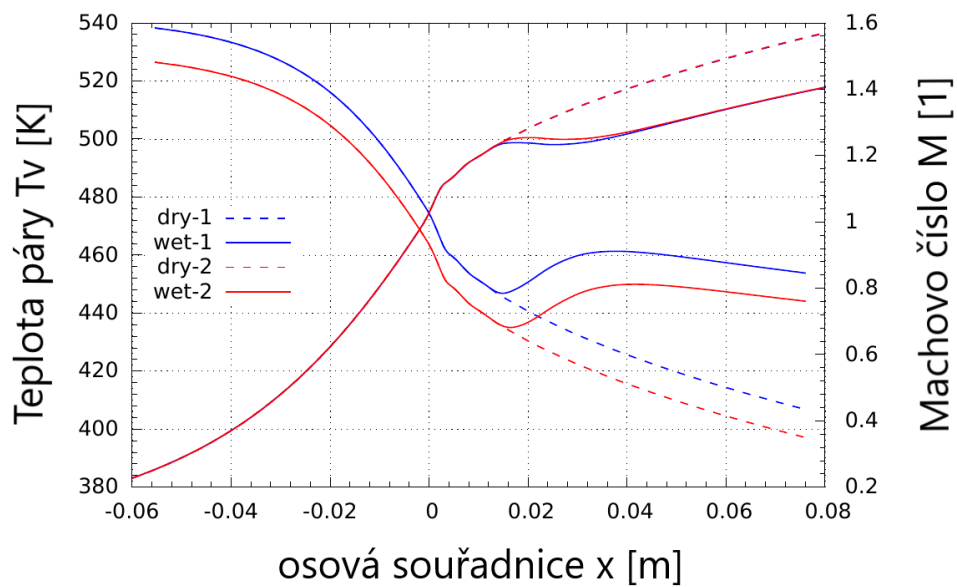
Průběh podchlazení ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií S.

obr. 5.31, str. 101



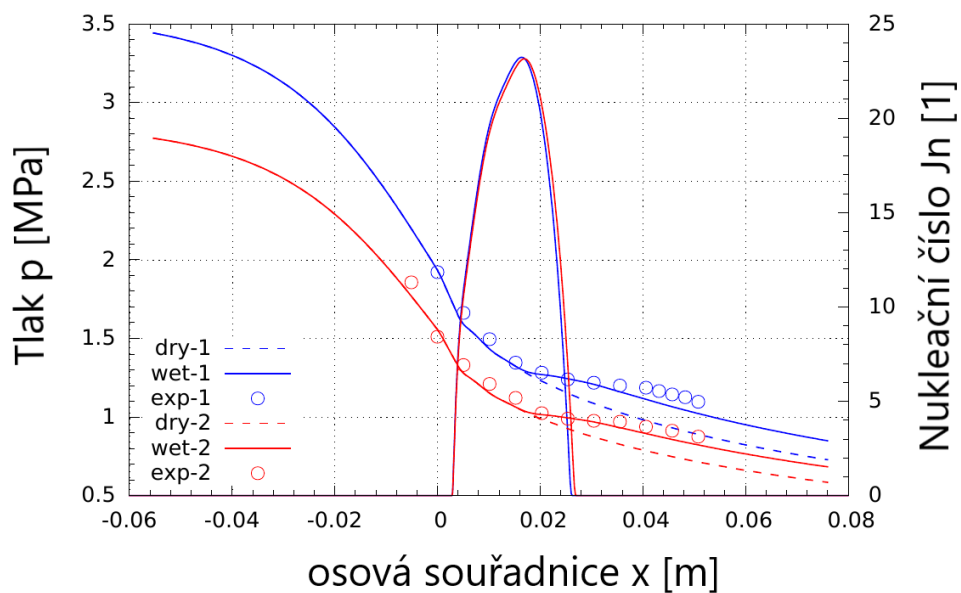
Průběh přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií S.

obr. 5.32, str. 101



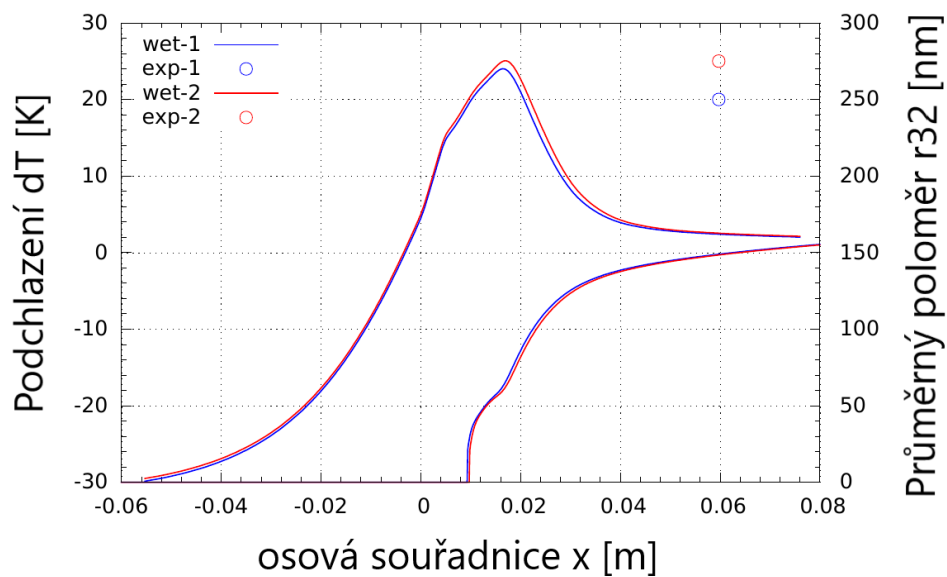
Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií S.

obr. 5.33, str. 102



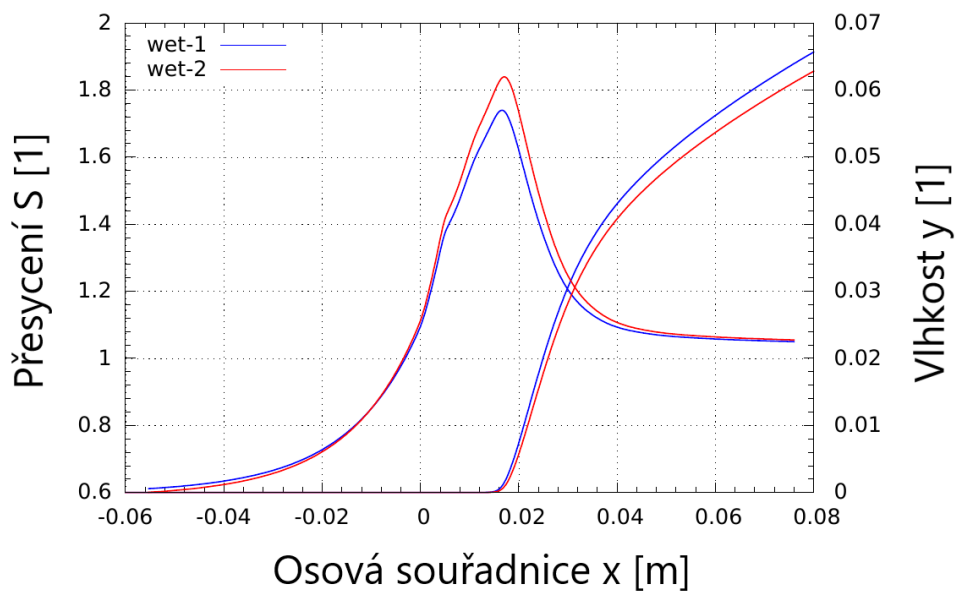
Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií M.

obr. 5.34, str. 102



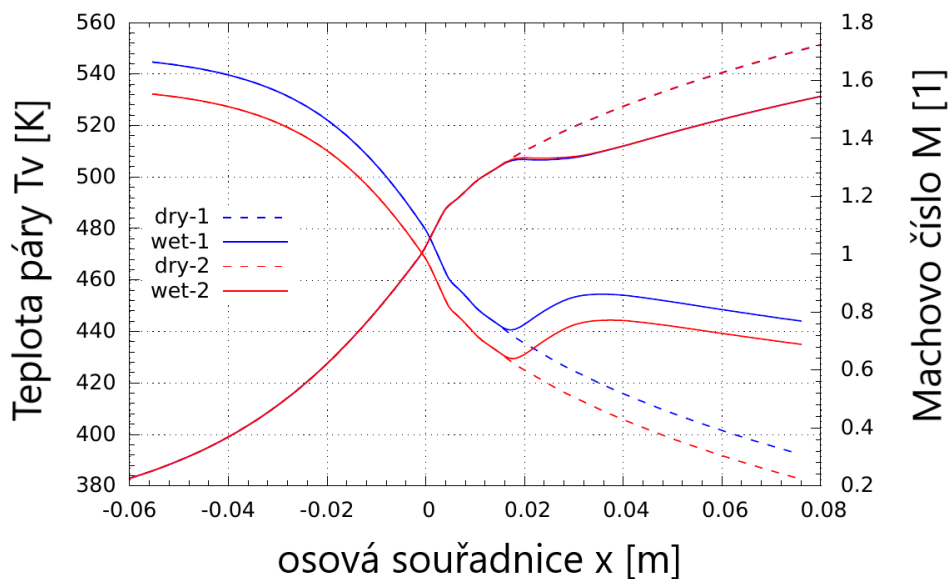
Průběh podchlazení ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií M.

obr. 5.35, str. 103



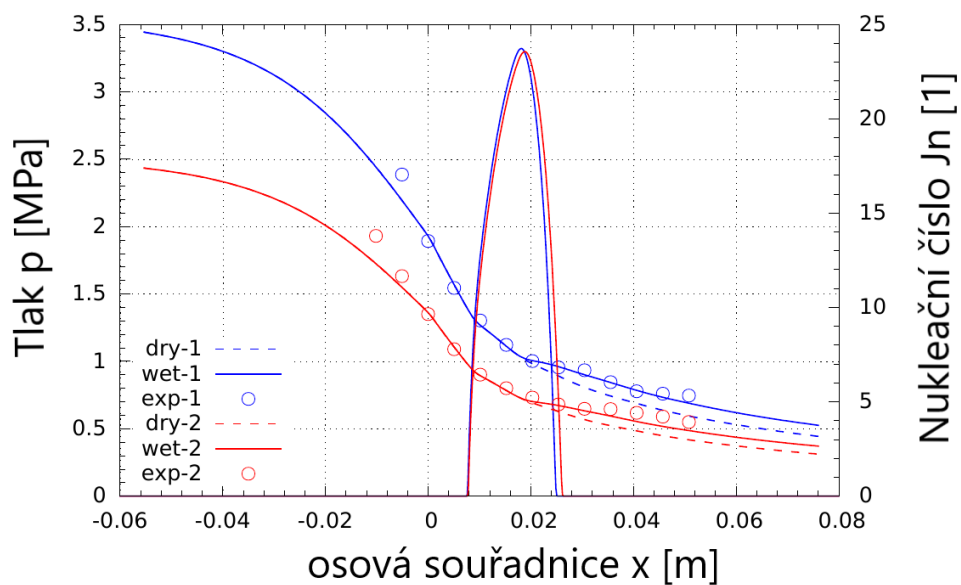
Průběh přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií M.

obr. 5.36, str. 104



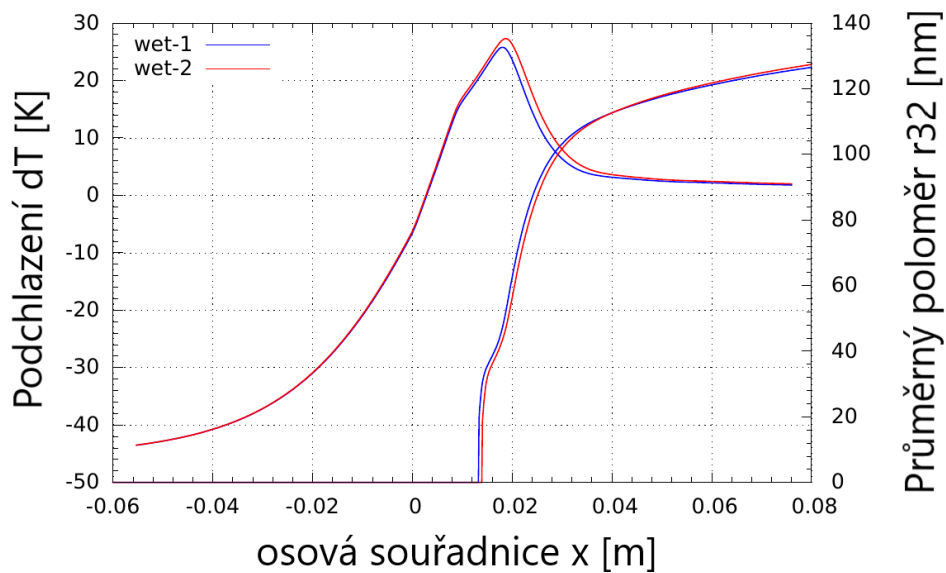
Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií M.

obr. 5.37, str. 104



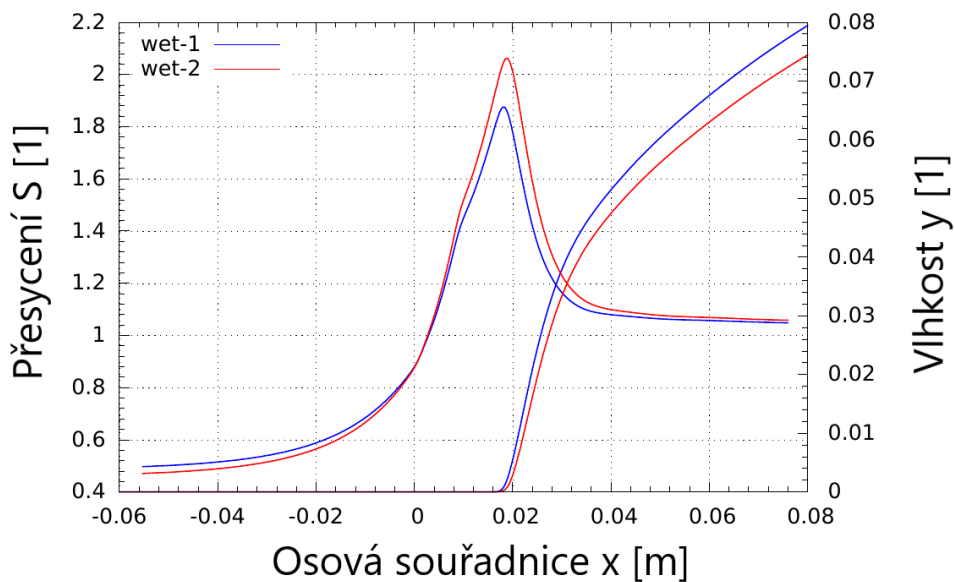
Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií L.

obr. 5.38, str. 105



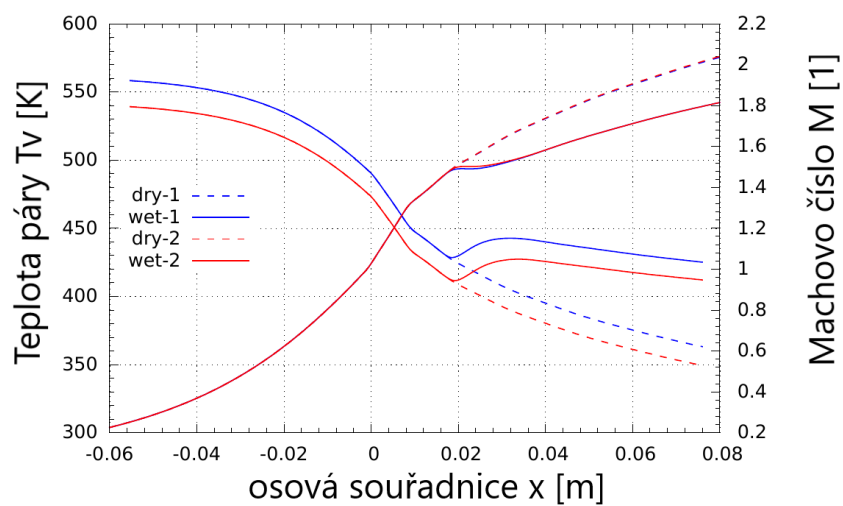
Průběh podchlazení ΔT a velikosti kapek podél osy dýzy s geometrií L.

obr. 5.39, str. 105



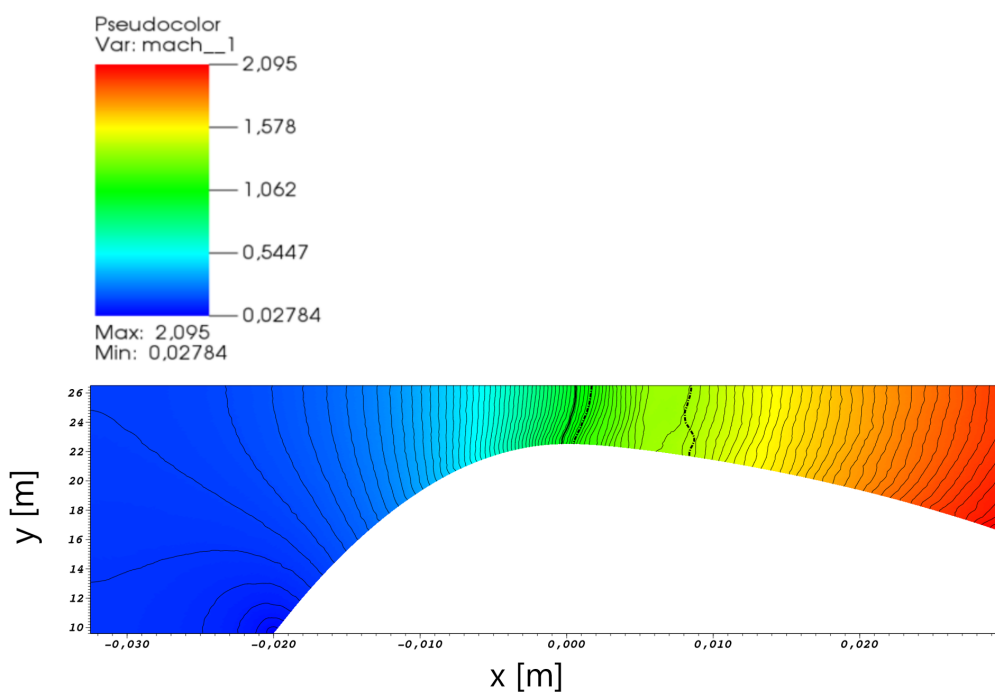
Průběh přesycení S a vlhkosti podél osy dýzy s geometrií L.

obr. 5.40, str. 106



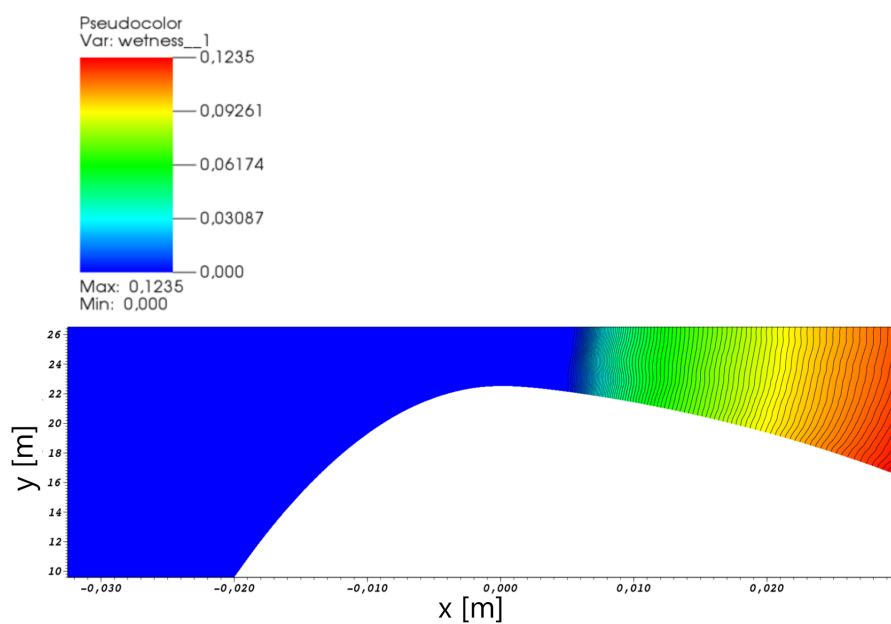
Průběh teploty primární fáze T_V a Machova čísla podél osy dýzy s geometrií L.

obr. 5.43, str. 107



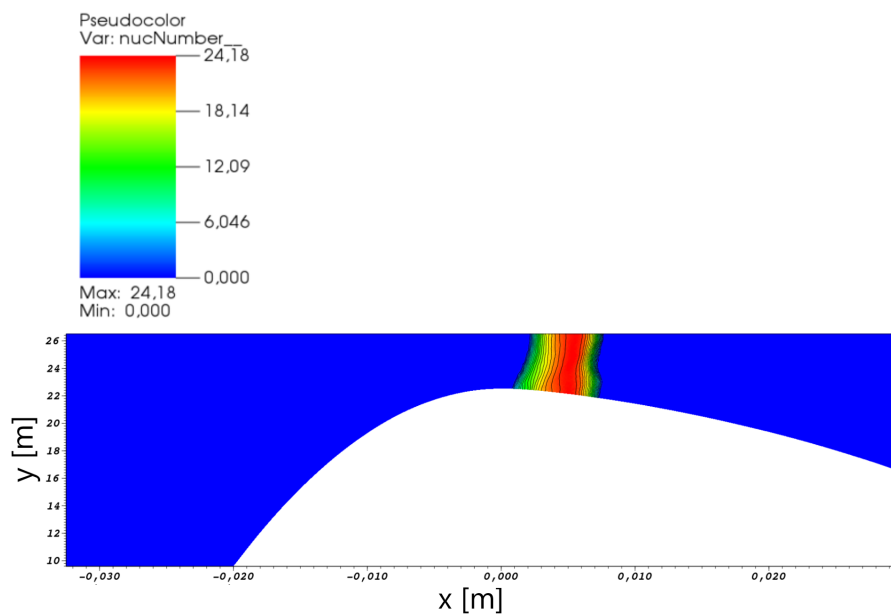
Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Izočáry Machova čísla. Oblast $M = 1$ (plná křivka). Oblast $S = 1$ (přerušovaná křivka).

obr. 5.44, str. 107



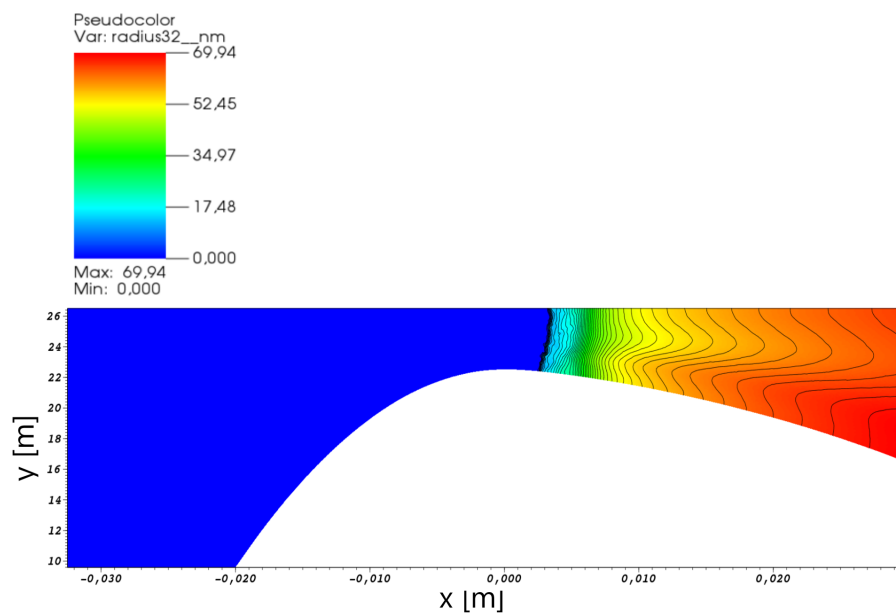
Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Izočáry vlhkosti.

obr. 5.45, str. 107



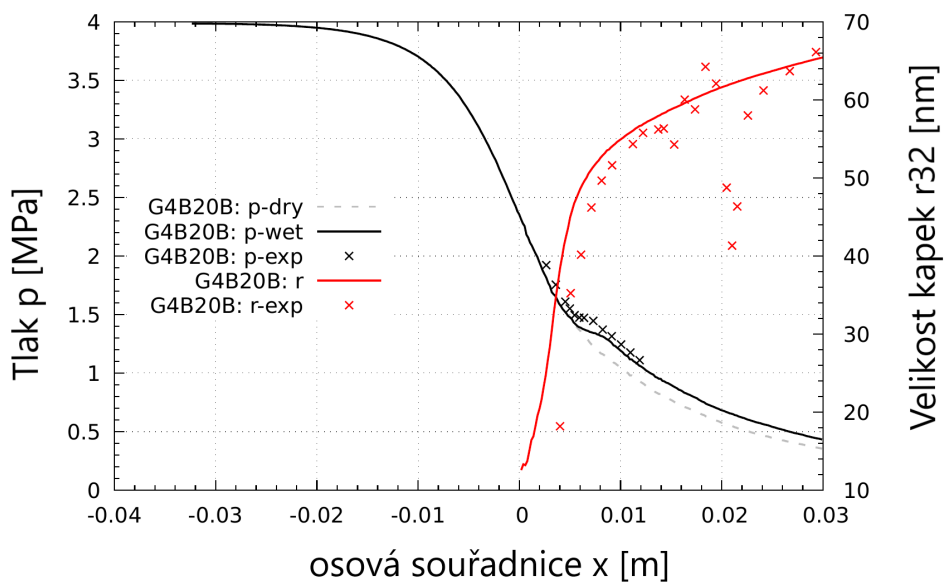
Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Nukleační číslo.

obr. 5.46, str. 108



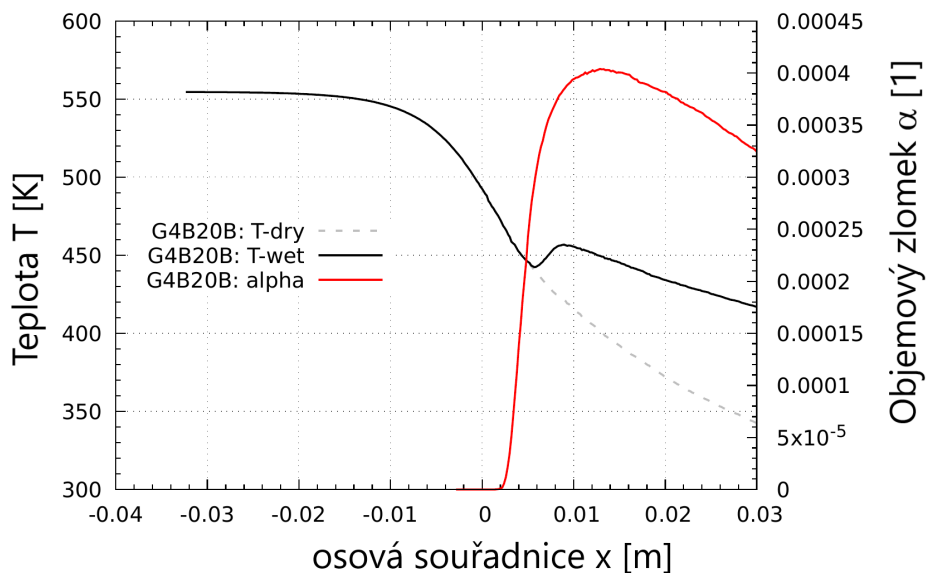
Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Velikost kapek.

obr. 5.47, str. 108



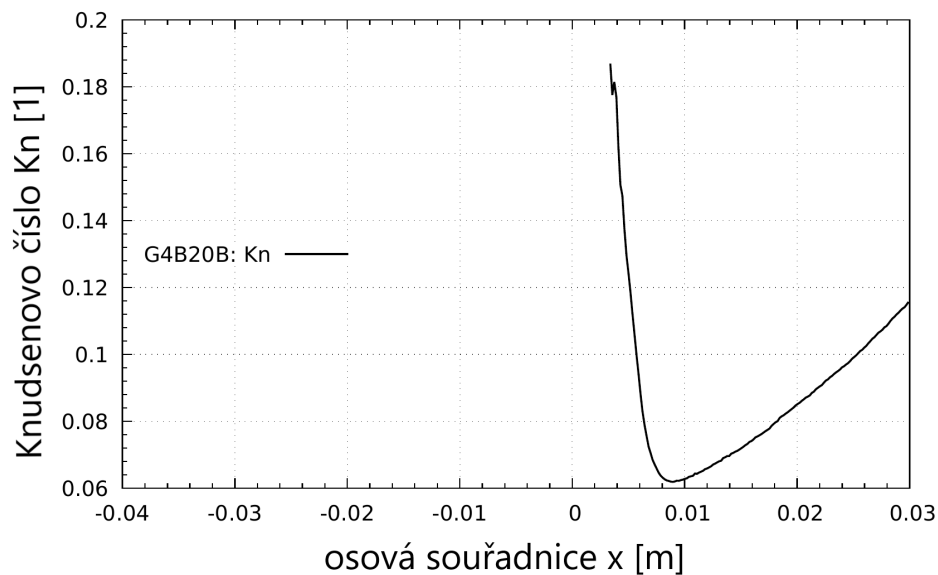
Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh tlaku a velikosti kapek na horní stěně.

obr. 5.48, str. 108



Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh teploty páry a objemového zlomku kapalné fáze na horní stěně.

obr. 5.49, str. 103



Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh Knudsenova čísla na horní stěně.