

**ČESKÉ VYSOKÉ
UČENÍ TECHNICKÉ
V PRAZE**

**FAKULTA
STROJNÍ**



**TEZE
DISERTAČNÍ
PRÁCE**

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

FAKULTA STROJNÍ

ÚSTAV TECHNICKÉ MATEMATIKY

TEZE DISERTAČNÍ PRÁCE

*Numerické řešení proudění mokré páry
s nerovnovážnou kondenzací*

Ing. Vladimír Hric

Doktorský studijní program: Strojní inženýrství

Studijní obor: *Matematické a fyzikální inženýrství*

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

Teze disertace k získání akademického titulu "doktor", ve zkratce "Ph.D."

Praha

říjen 2021

Název anglicky: *Numerical solution of wet-steam flow with non-equilibrium condensation*

Disertační práce byla vypracována v kombinované formě doktorského studia na Ústavu technické matematiky Fakulty strojní ČVUT v Praze.

Disertant: Ing. Vladimír Hric
Ústav technické matematiky, Fakulta strojní ČVUT v Praze
Karlovo nám. 13, Praha 2, 121 35

Školitel: doc. Ing. Jan Halama, Ph.D.
Ústav technické matematiky, Fakulta strojní ČVUT v Praze
Karlovo nám. 13, Praha 2, 121 35

Oponenti: prof. Ing. Pavel Šafařík, CSc.
doc. Ing. Jan Vimmr, Ph.D.
doc. Ing. Marek Brandner, Ph.D.

Teze byly rozeslány dne: 08-0²-2022

Obhajoba disertace se koná dne 09-03-2022 v 10:00 hod.

v zásadě v rámci 1. ET v oboru Fakulta strojní ČVUT v Praze,
Technická 4, Praha 6

před komisí pro obhajobu disertační práce ve studijním oboru *Matematické a fyzikální inženýrství*.

S disertací je možno se seznámit na oddělení vědy a výzkumu Fakulty strojní ČVUT v Praze, Technická 4, Praha 6.

doc. Ing. Jiří Füst, Ph.D.
předseda oborové rady oboru *Matematické a fyzikální inženýrství*
Fakulta strojní ČVUT v Praze

Obsah

1 Úvod	2
2 Kondenzace	3
2.1 Rychlost nukleace	4
2.1.1 Korekce nukleačního růstu	4
2.2 Růst kapek	4
2.2.1 Univerzální růst kapek	4
3 Matematický model	6
3.1 Eulerovy rovnice pro reálný plyn v konzervativním tvaru	6
3.2 Stavová rovnice IAPWS-95 v úplné formulaci	7
3.2.1 Reziduální člen úplné formulace	7
3.3 Interpolační metoda pro reálný plyn	8
3.4 Termofyzikální vlastnosti kapalné fáze	8
3.5 Finální model proudění	8
4 Numerické řešení	9
4.1 Metoda konečných objemů	9
4.2 Numerický tok - schéma HLLC	9
4.3 Časová diskretizace	10
4.3.1 Časová integrace systému konvekce	10
4.3.2 Časová integrace systému kondenzace	11
5 Výsledky numerických simulací	11
5.1 Výsledky s nízkým provozním tlakem	11
5.1.1 Barschdorffova dýza	11
5.1.2 Vliv stavové rovnice a modifikace nukleačního růstu při proudění s kondenzací	11
5.2 Výsledky proudění v nízkotlaké turbíně - White	11
5.3 Výsledky s vyšším provozním tlakem	13
5.3.1 Bakhtarova dýza	13
5.3.2 Gyarmathyho dýza	15
6 Závěr	16
Publikace autora	17
Ostatní literatura	18

1 Úvod

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. V práci uvažujeme nevazké proudění a tedy systém Eulerových rovnic popisující časoprostorový vývoj proudění ve zkoumané výpočetní oblasti.

Dizertační práce má tyto cíle

1. Implementovat stavovou rovnici reálného plynu do vlastního CFD kódu
2. Porovnat stavovou rovnici dokonalého plynu s rovnicí reálného plynu
3. Realizovat rychlejší výpočet termodynamických parametrů reálného plynu
4. Analyzovat a zohlednit reálnou termodynamiku v modelech rychlosti nukleace a růstu kapek
5. Numerickými simulacemi porovnat výsledky použitého matematického modelu s dostupnými experimenty včetně oblastí s vyšším provozním tlakem

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.

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 (mokrý páry). Nejsou použity žádné dodatečné rovnice pro kapalnou fázi. S určitou modifikací jsme tento model použili v této práci [1].

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

Pro každou fázi používá vlastní systém zákonů zachování. Lze modelovat i rozdílnou rychlost kapek a páry.

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

V tomto případě je pohybová a energetická rovnice pro obě fáze tvořících směs společná. Výsledná soustava rovnic pro směs je doplněna o další rovnice modelující vývoj podílu jedné fáze ve směsi.

Na vstupu do dýzy je pára obvykle v přehřátém stavu. V dýze dochází k postupnému urychlování proudu. Ve vstupní části je expanze podzvuková, ve výstupní části dochází k nadzvukové expanzi. Přidruženým jevem urychlování proudu je kontinuální pokles tlaku. Z důvodu rychlé expanze a existence energetické bariéry dochází k počátku kondenzace ve formě nukleace kapek kritické velikosti až při dostatečně velkém podchlazení. 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. Průběh tlaku v místě kondenzace ovlivňuje rychlost nukleace nových kapek a jejich následný růst do makroskopických rozměrů. Čím je růst již existujících 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.

Gyarmathy provedl experimentální měření proudění mokré páry v dýzách při vyšších tlacích v [16], [15]. 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 $5 - 50 \text{ bar}$ a rychlosti expanze $10000 - 200000 \text{ s}^{-1}$. Velikost kapek byla řádově 10^{-8} m . Až do okamžiku nukleace je proudění isentropické. V nukleační oblasti dochází k mírnému nárůstu entropie. Dále od nukleační oblasti ve směru proudu je expanze opět isentropická. Numerické simulace pro tento experiment provedl například Azzini v [10] a Furusawa v [14]. V obou případech použili jedno-tekutinový matematický model se 4 dodatečnými rovnicemi pro kapalnou fázi.

Proudění v nízkotlakých i vysokotlakých dílech parní turbíny je značně odlišné od proudění v geometricky mnohem jednodušších dýzách. Zatímco 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. 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. V proudovém poli dochází k primární a sekundární kondenzaci. 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.

Nejpřesnější stavová rovnice pro vodu byla vytvořena asociací IAPWS. Nejdříve to byla rovnice IAPWS-95 ([24], [19]) pro dvojici nezávislých proměnných hustota a teplota (ρ, T) . Výhodou je její použitelnost v celé oblasti kapalně a plynné fáze. Nevýhodou značná výpočetní náročnost. 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 [11] 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 $\rho = 55 \text{ kg/m}^3$.

Pro CFD účely je nevhodnější bi-kvadratická spline interpolace, která zaručuje spojitost prvních derivací na hranicích interpolačních buněk. Podrobný popis metody lze nalézt v monografii od Spätha [22]. IAPWS vydalo doporučení k použití této metody, viz [18].

2 Kondenzace

Kondenzace patří k fázovým přechodům prvního druhu, při nichž existují nespojitosti prvních derivací Gibbsova termodynamického potenciálu podle svých přirozených proměnných, tj. tlaku a teploty. 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 kapalně fáze (V_1, S_1) menší než je tomu v případě plynné fáze. Při kondenzaci se tedy latentní teplo uvolňuje. Tento zdroj tepla může podstatným způsobem ovlivnit lokální charakter proudění. Významnou vlastností fázových přechodů prvního druhu je skutečnost, že umožňují dosažení tzv. metastabilních stavů. Pára tak při daném tlaku může existovat i při svém podchlazení pod saturační teplotu – jedná se o metastabilitu vzhledem ke kapalně fáze.

2.1 Rychlost nukleace

Tato veličina udává počet nově vytvořených kapek kritické velikosti ($r = r_c$) v jednotkovém objemu primární fáze za časovou jednotku. Vztah pro rychlost formování kritických kapek je následovný

$$J = K \exp\left(-\frac{W_c}{k_B T}\right) \quad (1)$$

kde K je tzv. kinetický činitel daný vztahem

$$K = \phi(N_c) C^e(1) Z \quad (2)$$

Pro kinetický činitel ve verzi s tlakem dostaneme

$$K = \left(\frac{p}{zk_B T}\right)^2 \frac{1}{\rho_L} \sqrt{\frac{2\sigma m_1}{\pi}} \quad (3)$$

případně ve verzi s hustotou páry

$$K = \frac{\rho_V^2}{\rho_L} \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_1^3}} \quad (4)$$

Pro rychlost nukleace dle klasické teorie nakonec dostaneme vztah

$$J_{iso} = \frac{\rho_V^2}{\rho_L} \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_1^3}} \exp\left(-\frac{W_c}{k_B T}\right) \quad (5)$$

2.1.1 Korekce nukleačního růstu

Existuje celá řada korekcí, nicméně při proudění páry v dýzách a turbínách se používá hlavně Courtneyho a Kantrowitzova korekce. Korigovanou rychlost nukleace můžeme zapsat ve tvaru

$$J = \sum_i \xi_i J_{iso} \quad (6)$$

kde ξ_i je vybraný soubor korekcí. Courtneyho korekce zohledňuje rovnovážnou koncentraci monomerů. Kantrowitzova korekce [17] zjednodušeným způsobem zohledňuje rozdílnou teplotu kapek a teplotu okolní páry.

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

$$J = \xi_C \xi_K J_{iso} \quad (7)$$

2.2 Růst kapek

Rychlost nukleace nám umožňuje modelovat počet nově vzniklých kapek kritické velikosti. 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.

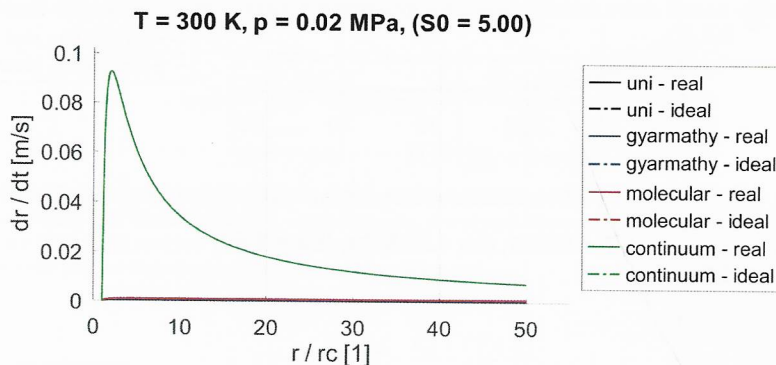
2.2.1 Univerzální růst kapek

Růst kapek \dot{r} použitelný v celém rozsahu Knudsenova čísla získáme pomocí vhodné interpolace mezi molekulárním režimem a režimem kontinua. Podle [9] lze tuto interpolaci provést následujícím způsobem

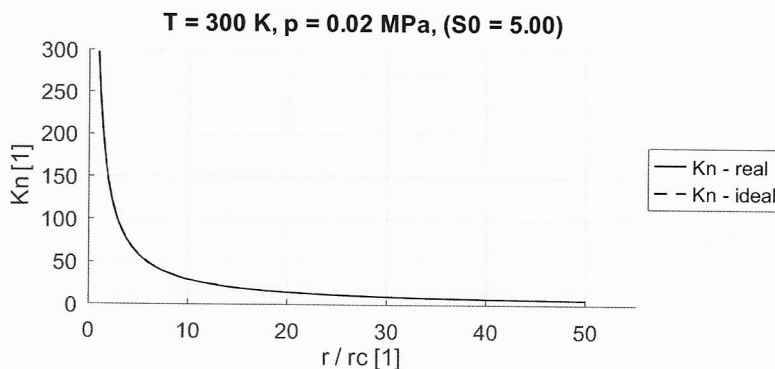
$$\dot{r} = \frac{\dot{r}_{\text{fm}} \dot{r}_{\text{cont}}}{\dot{r}_{\text{fm}} + \dot{r}_{\text{cont}}} \quad (8)$$

kde \dot{r}_{fm} je rychlost v molekulárním režimu a \dot{r}_{cont} je rychlost růstu v režimu kontinua.

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 $[1, 50]$. Na obr. 1 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. Nižší tlak znamená vysoké Knudsenovo číslo v počáteční fázi růstu. V tomto režimu je nevhodnější molekulární model růstu. Difúzní model dává v porovnání s ostatními modely velmi vysoké hodnoty \dot{r} .

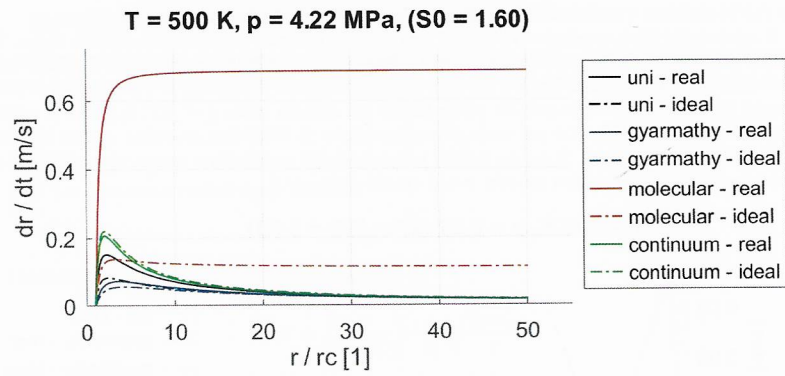


Obr. 1: Rychlost růstu kapek při nízkém tlaku.

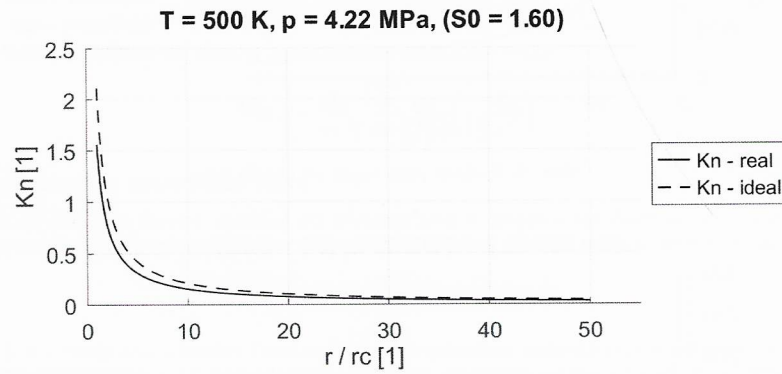


Obr. 2: Knudsenovo číslo při nízkém tlaku.

Pro vyšší tlak byly použité parametry teplota $T = 500\text{K}$ a ideální saturační poměr $S_0 = 1.6$. S rostoucím tlakem Knudsenovo číslo v blízkosti kritického poloměru klesá, viz obr. 4. Za těchto podmínek dává značně vyšší hodnoty růstu molekulární model. Průběh všech modelů je na obr. 3. 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.



Obr. 3: Rychlost růstu kapek při vyšším tlaku.



Obr. 4: Knudsenovo číslo při vyšším tlaku.

3 Matematický model

3.1 Eulerovy rovnice pro reálný plyn v konzervativním tvaru

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

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (9)$$

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

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{pmatrix} \quad (10)$$

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

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix} = \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} U_2 \\ \frac{U_2^2}{U_1} + p(\mathbf{U}) \\ \frac{U_2 U_3}{U_1} \\ \frac{U_2 U_4}{U_1} \\ (U_5 + p(\mathbf{U})) \frac{U_2}{U_1} \end{pmatrix} \quad (11)$$

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

$$\rho = \rho(\mathbf{U}) = U_1 \quad (12)$$

$$e = e(\mathbf{U}) = \frac{U_3}{U_1} - \frac{U_2^2 + U_3^2 + U_4^2}{2U_1^2} \quad (13)$$

3.2 Stavová 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 [24].

3.2.1 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

$$p = \rho^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} \right)_T = \rho^2 \left(\frac{\partial f^o}{\partial \rho} + f^r \right)_T = \rho RT + \rho^2 \left(\frac{\partial f^r}{\partial \rho} \right)_T \quad (14)$$

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

$$\phi^r = \phi^r(\delta, \tau) = \int_0^\delta \frac{z(\delta, \tau) - 1}{\delta} d\delta \quad (15)$$

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

$$\phi^r(\delta, \tau) = \sum_{i=1}^7 n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} \quad (16)$$

kde parametry n_i , d_i a t_i jsou uvedeny např. v [19].

3.3 Interpolační metoda pro reálný plyn

Podle doporučení IAPWS použijeme bi-kvadratickou interpolaci s ekvidistantními kroky obdélníkové sítě [18]. Tato interpolace zaručí spojitost prvních derivací aproximovaných veličin. Jednotlivé spline funkce jsou vytvořeny následovně

$$\bar{z}_{[i,j]}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 a_{ijmn} (\bar{x}_1 - \bar{x}_{1,i})^{m-1} (\bar{x}_2 - \bar{x}_{2,j})^{n-1} \quad (17)$$

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 [22].

3.4 Termofyzikální vlastnosti kapalné fáze

Vlastnosti kapalné 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) [23], [20].

3.5 Finální model proudění

Výsledný model proudění s nerovnováhou 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

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial n} = \mathbf{S} \quad (18)$$

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

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \\ \rho Q_0 \\ \rho Q_1 \\ \rho Q_2 \\ \rho Q_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \\ \rho Q_0 u \\ \rho Q_1 u \\ \rho Q_2 u \\ \rho Q_3 u \end{pmatrix} \quad (19)$$

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

$$\mathbf{S}_J = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ J \\ Jr_c \\ Jr_c^2 \\ Jr_c^3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_g = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ a\rho Q_0 + b\rho Q_1 \\ 2a\rho Q_1 + 2b\rho Q_2 \\ 3a\rho Q_2 + 3b\rho Q_3 \end{pmatrix} \quad (20)$$

System 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

$$\rho_V = \frac{\rho - \alpha \rho_L}{1 - \alpha} \quad (21)$$

4 Numerické řešení

4.1 Metoda konečných objemů

Pro numerické řešení systému rovnic použijeme metodu konečných objemů. Budeme uvažovat tzv. cell-centered přístup, při kterém je průměrný stav uvažován v těžišti objemu. Po provedení prostorové diskretizace ve formě výpočtů numerických toků dostaneme systém nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic pro neznámý vektor konzervativních proměnných $\tilde{\mathbf{U}}_i$

$$\frac{d\tilde{\mathbf{U}}_i}{dt} = -\frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^{(n_f)_i} \hat{\mathbf{F}}_{ij} A_{ij} + \tilde{\mathbf{S}}_i = \mathbf{R}_i + \tilde{\mathbf{S}}_i \quad (22)$$

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

4.2 Numerický tok - schéma HLLC

V našem CFD kódu použijeme nejjednodušší konstantní extrapolaci.

$$\hat{\mathbf{F}}_{ij} = \hat{\mathbf{F}}_{ij}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) \quad (23)$$

$$\mathbf{U}_L = \mathbf{U}_i \quad (24)$$

$$\mathbf{U}_R = \mathbf{U}_j \quad (25)$$

Tok $\mathbf{F}_{i+1/2}$ se spočítá dosazením stavu systému $\mathbf{U}_{i+1/2}(\frac{x}{t} = 0)$

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1/2}(0)) \quad (26)$$

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

Řešení lokálního Riemannova problému se skládá ze 4 konstantních stavů $\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L^*, \mathbf{U}_R^*$. Tyto stavy jsou separovány třemi vlnami s rychlostmi S_L (levá nelineární vlna), S_R (pravá nelineární vlna) a S^* (prostřední lineární vlna). Uvažujeme, že máme k dispozici odhad p^* . Potom lze rychlost rázové vlny získat ze soustavy Rankinových-Hugoniotových rovnic pro nespojitě řešení

$$\Delta u = \pm \frac{\Delta p}{Q} \quad (27)$$

$$\Delta v = -\frac{\Delta p}{Q^2} \quad (28)$$

$$\Delta e = -p_{\text{avg}} \Delta v \quad (29)$$

Klíčová je třetí rovnice pro energii. Jejím úkolem je stanovit v^* pro dosažení do prvních dvou rovnic. Uvažujeme, že máme k dispozici odhad p^* a řešení v^* . Potom pro rychlost rázové vlny dostaneme explicitní vztah

$$S_{L/R} = u_{L/R} \pm v_{L/R} \bar{Q}_{L/R} \quad (30)$$

$$\bar{Q}_{L/R} = \left(-\frac{\Delta p_{L/R}}{\Delta v_{L/R}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (31)$$

K výpočtu rychlosti rázové vlny tedy vede cesta přes výpočet v^* z třetí energetické rovnice.

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

Po dosažení vztahu pro energii $e = e(p, T)$ a objem $v = v(p, T)$ dostaneme jednu nelineární algebraickou rovnici pro neznámou hodnotu teploty T^*

$$e^*(p^*, T^*) - e + p_{\text{avg}}(v^*(p^*, T^*) - v) = 0 \quad (32)$$

Pro rychlost rázové vlny odvodil Lax v [21] velmi jednoduchý odhad ve tvaru

$$S_L = u_{\text{avg}} - a_{\text{avg}} \quad (33)$$

$$S_R = u_{\text{avg}} + a_{\text{avg}} \quad (34)$$

$$(35)$$

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

4.3 Časová diskretizace

K rozkladu původního systému použijeme Godunovův rozklad prvního řádu přesnosti [8].

4.3.1 Časová integrace systému konvekce

Výsledný systém

$$(D + L)D^{-1}(D + P)\Delta\mathbf{U}^n = \mathbf{b} \quad (36)$$

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

$$D\Delta\mathbf{U}^\bullet = \mathbf{b} - L\Delta\mathbf{U}^\bullet \quad (37)$$

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

$$D\Delta\mathbf{U}^n = D\Delta\mathbf{U}^\bullet - P\Delta\mathbf{U}^n \quad (38)$$

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

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta\mathbf{U}^n \quad (39)$$

4.3.2 Časová integrace systému kondenzace

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

$$\mathbf{U}_i^{(0)} = \mathbf{U}_i^n \quad (40)$$

$$\mathbf{U}_i^{(k)} = \mathbf{U}_i^{(0)} + \alpha_k \frac{\Delta t_i}{V_i} \mathbf{S}(\mathbf{U}_i^{(k-1)}), \quad k = 1, \dots, m \quad (41)$$

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^m \quad (42)$$

kde koeficienty v jednotlivých fázích jsou dány vztahem

$$\alpha_k = \frac{1}{m - k + 1} \quad (43)$$

5 Výsledky numerických simulací

5.1 Výsledky s nízkým provozním tlakem

5.1.1 Barschdorffova dýza

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

Rozložení průměrného poloměru kapek $r_{32} = \sqrt{Q_3/Q_2}$ je na obr. 5. Největší kapky jsou 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. 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.

5.1.2 Vliv stavové rovnice a modifikace nukleačního růstu při proudění s kondenzací

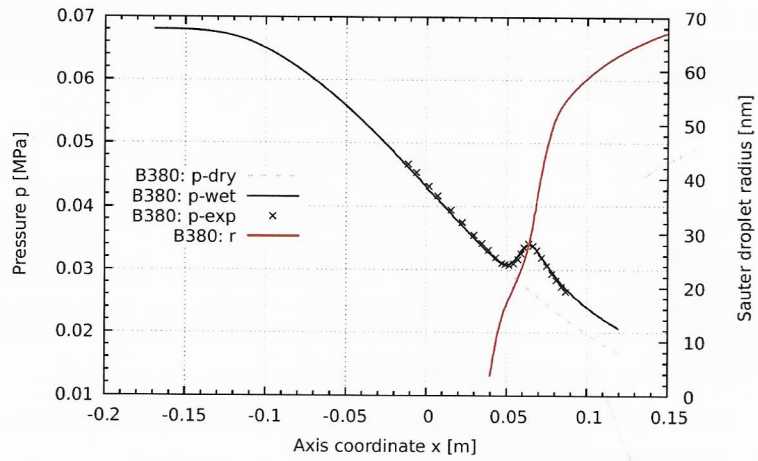
Výsledky byly publikovány ve vlastním článku [2].

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 (označená 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 a průměrného poloměru kapek na obr. 6. 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.

5.2 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].

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

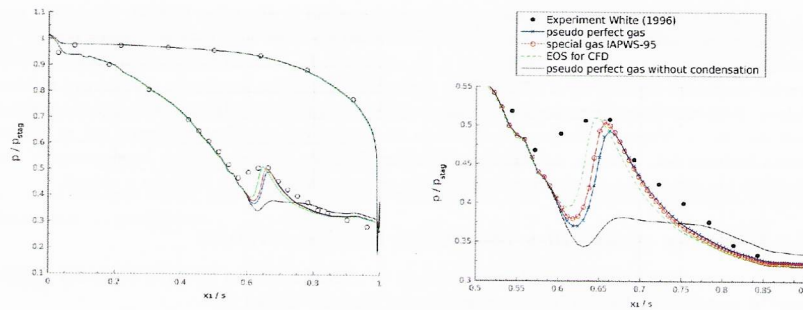


Obr. 5: Barschdorffova dýza: Průběh statického tlaku a průměrného poloměru kapek podél osy dýzy.

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).

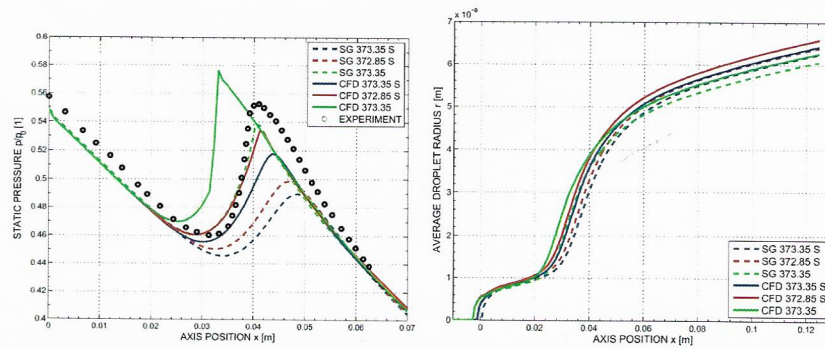
V numerických výpočtech byly použité tři stavové rovnice. Speciální rovnice IAPWS-95 pro metastabilní oblast, speciální stavová rovnice pro rychlé CFD výpočty J. Hrubého a rovnice dokonalého plynu s upravenými parametry. Úprava parametrů dokonalého plynu byla provedena na základě hodnot veličin z okrajových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

Na obr. 7 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.



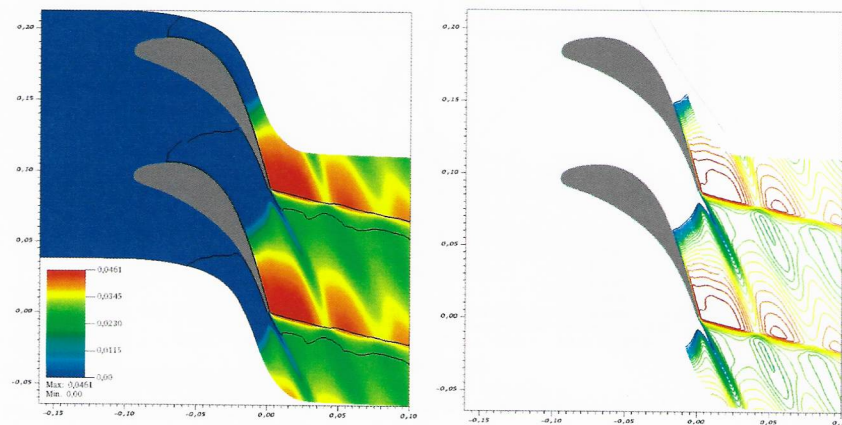
Obr. 7: Průběh statického tlaku na povrchu lopatky (vlevo). Detail (vpravo).

Rozložení vlhkosti včetně zobrazení izočár je na obr. 8. Plnou čarou je vyznačena saturační



Obr. 6: Průběh statického tlaku vztaženého k stagnačnímu tlaku v ose dýzy (vlevo). Průměrný poloměr kapek podél osy dýzy (vlevo) (vpravo).

krivka $S = 1$.



Obr. 8: Vlhkost. Vyznačení saturační hranice $S = 1$.

5.3 Výsledky s vyšším provozním tlakem

5.3.1 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 [13], [12]. Dýzy jsou označeny písmeny S (small), M (medium) a L (large).

Vybrali jsme celkem 6 případů, pro každou geometrii 2 případy, viz tab. 1. Pro všechny vybrané případy jsou k dispozici experimentálně změřené průběhy statického tlaku. Data s velikostí kapek

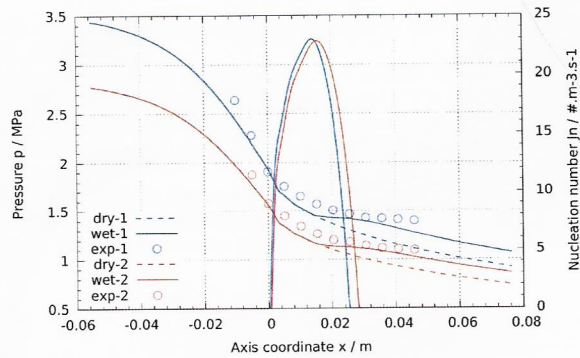
jsou k dispozici pro případy S2 a M1, M2.

Tab. 1: 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

Geometrie S

Obr. 9 ukazuje průběh tlaku a nukleačního čísla. 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%.



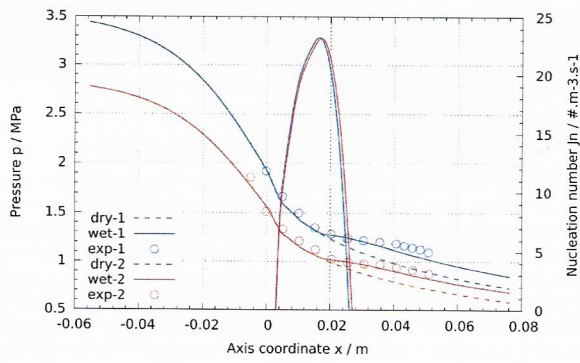
Obr. 9: Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií S.

Geometrie M

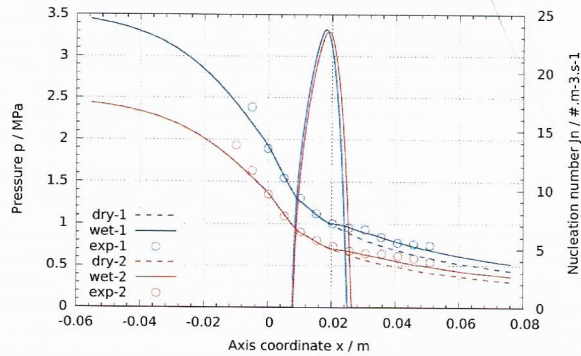
Obr. 10 ukazuje průběh tlaku a nukleačního čísla. Rozložení statického tlaku je v dobré shodě s experimentem, i když hodnoty jsou po celé délce dýzy mírně nižší. Velikost kapky je zhruba poloviční v porovnání s experimentem. Výstupní vlhkost je cca 6.5%.

Geometrie L

Obr. 11 ukazuje průběh tlaku a nukleačního čísla. Vlhkost na výstupu dosahovala hodnot 7.5–8%.



Obr. 10: Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií M.

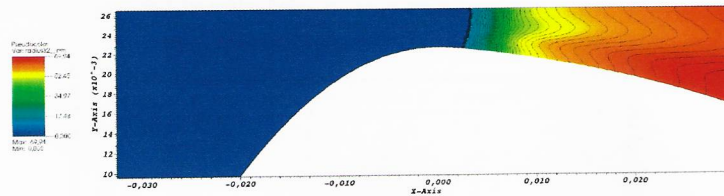


Obr. 11: Průběh statického tlaku a nukleačního čísla podél osy dýzy s geometrií L.

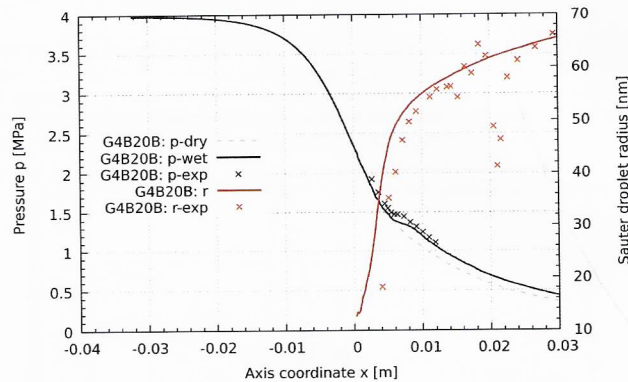
5.3.2 Gyarmathyho dýza

Výsledky byly publikovány ve vlastním článku [6].

Následující numerické výsledky byly provedeny pro dýzu s označením 4/B-20B. Okrajové podmínky jsou následující: vstupní stagnační tlak $p_0 = 4.043$ MPa, vstupní stagnační teplota $T_0 = 282.72$ °C, vstup bez přítomné kapalné fáze, nadzvukový výstup. Použita stavová rovnice je speciální IAPWS-95 pro metastabilní oblast. Nukleační růst je korigován Courtneyho a Kantrowiczovou korekcí. Rozložení průměrné velikosti kapek je na obr. 12. Na výstupu z oblasti dosahují kapky v průměru velikost přibližně 65 nm. Na obr. 13 je rozložení statického tlaku a velikosti kapek na horní stěně. Velikost kapek je v dobrém souladu s experimentem. Na výstupu z dýzy je velikost kapek přibližně 6.5×10^{-8} m.



Obr. 12: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Velikost kapek.



Obr. 13: Gyarmathyho dýza, případ 4B/20B. Průběh tlaku a velikosti kapek na horní stěně.

6 Závěr

Práce je věnována matematickému modelování proudění mokré páry s nerovnováznou 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 dýzách. 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 zanedbatelné rozdíly mezi reálnou a ideální stavovou rovnicí. Zmiňované veličiny nejvíce ovlivňují charakter tzv. nukleační zóny, ve které dochází k produkci nových kapek s inicializační kritikou 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 biquadratická interpolační metoda na samostatné čtyřúhelníkové síti. V každé buňce byly předem napočítány koeficienty (celkem 9) lokální kvadratické funkce pro nezávislou veličinou 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 dýžích, 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. Námí 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 nezávislých 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.

Ostatní literatura

- [8] H. Holden et al. *Splitting methods for partial differential equations with rough solutions: analysis and Matlab programs*. European Mathematical Society, 2010.
- [9] P. Peeters et al. „Transitional droplet growth and diffusion coefficients“. In: *Int. J. Heat Mass Transfer*, 44, 181–193 (2001).
- [10] L. Azzini a M. Pini. „Numerical investigation of high pressure condensing flows in supersonic nozzles“. In: *J. of Physics, Conf. Series* 821 (2017).
- [11] F. Bakhtar a M. Piran. „Thermodynamic properties of supercooled steam“. In: *Int. J. Heat Fluid Flow* 1.2 (1979), s. 53–62.
- [12] 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).
- [13] 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).
- [14] 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).
- [15] G. Gyarmathy. „Nucleation of steam in high-pressure nozzle experiments“. In: *J. of Pow. Ener.*, 219(6), 511–521 (2005).
- [16] 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.
- [17] A. Kantrowitz. „Nucleation in very rapid vapor expansions“. In: *J. Chem. Phys.*, 19(9), 1097–1100 (1951).

- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] 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.
- [21] J. Smoller. *Shock waves and reaction - diffusion equations*. 2nd. Springer, 1983.
- [22] H. Späth. *Two dimensional spline interpolation algorithms*. 1. vyd. A K Peters/CRC Press, 1993.
- [23] W. Wagner a H.-J. Kretzschmar. *International steam tables*. 3. vyd. Springer, 2019.
- [24] 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.

Abstrakt

Disertační práce se zabývá matematickým modelováním a numerickým řešením problematiky proudění mokré páry s nerovnováznou 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 kapalné fáze. Množství kapalné fáze je vyjádřeno pomocí objemového zlomku kapalné 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 kapalné fáze. Hlavním přínosem práce je implementace reálné stavové rovnice páry podle IAPWS 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). 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. Výsledky simulací s reálnou stavovou rovnicí ukázaly větší shodu s experimentálním měřením než v případě ideální stavové rovnice a to zejména v průběhu tlaku a vlhkosti. Méně přesná byla predikce velikosti kapek.

Summary

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. 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). 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 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.