

České vysoké učení technické v  
Praze

Fakulta strojní



Matematické modelování v technice  
Ústav technické matematiky

# Model proudění vícesložkové směsi v raketovém motoru

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Vypracoval: Bc. Vítězslav Putna  
Vedoucí práce: doc. Ing. Jan Halama Ph.D.  
Rok: 2023

## I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: **Putna** Jméno: **Vítězslav** Osobní číslo: **483231**  
Fakulta/ústav: **Fakulta strojní**  
Zadávající katedra/ústav: **Ústav technické matematiky**  
Studijní program: **Aplikované vědy ve strojním inženýrství**  
Specializace: **Matematické modelování v technice**

## II. ÚDAJE K DIPLOMOVÉ PRÁCI

Název diplomové práce:

**Model proudění vícesložkové směsi v raketovém motoru**

Název diplomové práce anglicky:

**Model of flow of multicomponent mixture in rocket engine**

Pokyny pro vypracování:

1. Sestavení vhodného modelu pro popis proudění vícesložkové směsi v raketovém motoru s uvažováním fázové změny paliva.
2. Formulace řešené úlohy. Volba oblasti a okrajových podmínek dle reálné technické aplikace.
3. Návrh, naprogramování a odladění vhodné numerické metody.
4. Simulace vybraných případů proudění v raketovém motoru. Rozbor a vhodná prezentace výsledků.

Seznam doporučené literatury:

Numerická simulace proudění I, J. Fořt, K. Kozel, J. Fürst, J. Halama, J. Dobeš, ČVUT v Praze, 2005  
Numerické metody řešení problémů proudění I, K. Kozel, J. Fürst, ČVUT v Praze, 2001  
Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction 3rd Edition, E. F. Toro, Springer, 2009  
Fundamentals of Rocket Propulsion, D.P. Mishra CRC Press, Taylor & Francis 2017

Jméno a pracoviště vedoucí(ho) diplomové práce:

**doc. Ing. Jan Halama, Ph.D. ústav technické matematiky FS**

Jméno a pracoviště druhé(ho) vedoucí(ho) nebo konzultanta(ky) diplomové práce:

Datum zadání diplomové práce: **20.04.2023**

Termín odevzdání diplomové práce: **13.08.2023**

Platnost zadání diplomové práce: \_\_\_\_\_

doc. Ing. Jan Halama, Ph.D.  
podpis vedoucí(ho) práce

prof. Ing. Jiří Fürst, Ph.D.  
podpis vedoucí(ho) ústavu/katedry

doc. Ing. Miroslav Španiel, CSc.  
podpis děkana(ky)

## III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Diplomant bere na vědomí, že je povinen vypracovat diplomovou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v diplomové práci.

22.05.2023  
Datum převzetí zadání

Podpis studenta

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci s názvem "Model proudění vícesložkové směsi v raketovém motoru" vypracoval samostatně pod vedením doc. Ing. Jana Halamy a s použitím literatury uvedené na konci mé diplomové práce.

V Praze dne .....

.....

Bc. Vítězslav Putna

## **Poděkování**

Na tomto místě bych rád poděkoval vedoucímu diplomové práce doc. Ing. Janu Halamovi Ph.D. za cenné rady, odborný dohled, vstřícnost a čas, který mi věnoval.

Bc. Vítězslav Putna

*Název práce:*

**Model proudění vícesložkové směsi v raketovém motoru**

*Autor:* Bc. Vítězslav Putna

*Studijní program:* Matematické modelování v technice

*Druh práce:* Diplomová práce

*Vedoucí práce:* doc. Ing. Jan Halama Ph.D.

Ústav technické matematiky, Fakulta strojní, České vysoké učení  
technické v Praze

*Konzultant:* —

*Bibliografické údaje:* počet stran: 74  
počet kapitol: 4  
počet obrázků: 52  
počet tabulek: 6

*Abstrakt:* Práce je věnována modelování vícesložkového proudění s rozptýlenou fází a spalováním. Model je aplikován na spalování v raketovém motoru a predikci jeho parametrů.

*Klíčová slova:* raketový motor, spalování, transport kondenzované fáze, odpařování kondenzované fáze, eulerův popis kapiček, lagrangův popis kapiček

*Title:*

**Model of flow of multicomponent mixture in rocket engine**

*Author:* Bc. Vítězslav Putna

*Abstract:* This work is dedicated to multicomponent flow modeling with dispersed phase and combustion. Model is then applied to flow in a rocket engine and its parameters are simulated.

*Key words:* rocket engine, combustion, condensed phase transport, euler droplet description, lagrange droplet description

# Obsah

## Úvod

<b>1</b>	<b>Model plynné a rozptýlené fáze</b>	<b>1</b>
1.1	Rovnice popisující proudění plynné fáze . . . . .	1
1.1.1	Zákon zachování hmoty . . . . .	2
1.1.2	Zákon zachování hybnosti . . . . .	3
1.1.3	Zákon zachování energie . . . . .	4
1.1.4	Model kvazi-2D proudění . . . . .	5
1.2	Popis rozptýlené fáze . . . . .	9
1.2.1	Eulerův popis . . . . .	10
1.2.2	Lagrangeův popis . . . . .	13
1.3	Rozdělení velikostí kapiček a model frakcí . . . . .	15
1.4	Coupling plynné a rozptýlené fáze . . . . .	17
1.4.1	Euler-Euler . . . . .	17
1.4.2	Euler-Lagrange . . . . .	18
1.5	Finální formulace . . . . .	18
1.5.1	Euler-Euler model . . . . .	18
1.5.2	Euler-Lagrange model . . . . .	19
<b>2</b>	<b>Fyzikální model</b>	<b>21</b>
2.1	Energie stlačitelné tekutiny . . . . .	21
2.1.1	Ideální plyn . . . . .	21
2.1.2	Kvazi-ideální plyn . . . . .	22
2.1.3	Korekce stavového chování díky kapalně fázi . . . . .	23
2.1.4	Další modely stavového chování . . . . .	26
2.2	Modely interakce tekutiny a rozptýlené fáze . . . . .	26
2.2.1	Dynamické efekty . . . . .	26
2.2.2	Výměna tepla . . . . .	29
2.2.3	Odpařování osamělé kapky . . . . .	31
2.2.4	Odpařování při varu . . . . .	35
2.3	Chemické reakce . . . . .	36
2.3.1	Model nekonečně rychlé chemie . . . . .	37

2.4	Vlastnosti směsi . . . . .	38
<b>3</b>	<b>Numerické řešení</b>	<b>40</b>
3.1	Metoda konečných objemů . . . . .	40
3.1.1	Aplikace metody konečných objemů . . . . .	42
3.2	Numerické toky . . . . .	43
3.2.1	Lax Friedrichs . . . . .	44
3.2.2	HLL . . . . .	44
3.2.3	Kurganov Tadmora . . . . .	45
3.2.4	AUSM . . . . .	46
3.2.5	Lineární rekonstrukce . . . . .	47
3.2.6	Slope limity . . . . .	48
3.3	Časová integrace . . . . .	49
3.3.1	Explicitní vs. implicitní metody . . . . .	49
3.3.2	Jednokrokové metody . . . . .	50
3.3.3	Víceprokové metody . . . . .	51
3.4	Použité metody . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Výsledky numerických simulací</b>	<b>53</b>
4.1	Odpařování kapalná fáze v kanálu . . . . .	53
4.2	Spalování v komoře raketového motoru . . . . .	61
4.2.1	Výsledky pro monodisperzi v Lagrangeově a Eulerově popisu . . . . .	62
4.2.2	Normální rozdělení kapiček . . . . .	67
4.2.3	Vliv velikosti kapiček na spalování . . . . .	68
4.2.4	Vliv vstupní rychlosti kapiček . . . . .	69
4.3	Délka potřebná na spálení kapiček . . . . .	70
	<b>Seznam použitých zdrojů</b>	<b>75</b>

## Seznam obrázků

1	Schématiké znázornění komory a trysky raketového motoru . . . . .	
1.1	Kontrolní oblast . . . . .	1
1.2	Geometrie oblasti a kontrolní objem . . . . .	5
1.3	Kontrolní oblast . . . . .	6
1.4	Přístupy diskretizace rozptýlené fáze . . . . .	9

1.5	Rozptýlená fáze . . . . .	10
1.6	Lagrangeovská částice . . . . .	14
1.7	Hustota početního toku a její diskretizace . . . . .	16
1.8	Hustota hmotnostního toku a její diskretizace . . . . .	16
2.1	Oblast s rozptýlenou kapalnou fází . . . . .	24
2.2	Chování směsi při izotermické kompresi pro různé hmotnostní zlomky	25
2.3	Koeficient aerodynamického odporu . . . . .	28
2.4	Teplota kapičky a okolního plynu . . . . .	30
2.5	Průběhy teploty a hmotnostního zlomku pro odpařování z kapičky . .	32
3.1	Oblast diskretizována na konečné objemy . . . . .	40
3.2	Oblast integrace HLL schématu . . . . .	44
3.3	Konstantní průběh po objemu a lineárně rekonstruovaný průběh . . .	47
4.1	Úloha proudění vzduchu a kapiček vody . . . . .	53
4.2	Teplota plynné fáze a kapiček . . . . .	57
4.3	Rychlost plynné a kapalné fáze . . . . .	57
4.4	Poloměr kapiček . . . . .	58
4.5	Hmotnostní tok z odpařujících se kapiček . . . . .	58
4.6	Průběhy teploty kapiček v závislosti na síti pro Eulerův a Lagrangeův popis . . . . .	59
4.7	Průběhy rychlosti kapiček v závislosti na síti pro Eulerův a Lagrangeův popis . . . . .	60
4.8	Problém spalování v raketovém motoru . . . . .	61
4.9	Teplota v raketovém motoru pro monodisperzi . . . . .	63
4.10	Rychlost spalin a kapiček v raketovém motoru pro monodisperzi . . .	63
4.11	Složení v raketovém motoru pro monodisperzi . . . . .	64
4.12	Hmotnostní tok z kapalné fáze v raketovém motoru pro monodisperzi	65
4.13	Poloměr kapiček v raketovém motoru pro monodisperzi . . . . .	65
4.14	Střední poloměr kapiček pro různý počet frakcí . . . . .	67
4.15	Závislost tahu na velikosti kapiček . . . . .	68
4.16	Vliv vstupní rychlosti kapiček na tah raketového motoru . . . . .	69
4.17	Délka potřebná na úplné vyhoření kapiček . . . . .	70

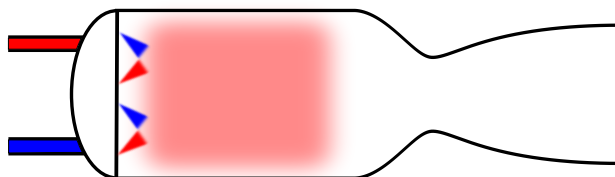


# Seznam tabulek

1.1	Euler-Euler coupling . . . . .	17
1.2	Euler-Lagrange coupling . . . . .	18
4.1	Vstupní data pro příklad odpařování kapiček vody v kanálu . . . . .	56
4.2	Doba výpočtu pro Eulerův a Lagrangeův popis kapiček . . . . .	59
4.3	Vstupní data pro proudění v raketovém motoru . . . . .	62
4.4	Porovnání teploty pro analytický a numerický výpočet . . . . .	66
4.5	Porovnání rychlosti pro analytický a numerický výpočet . . . . .	66

# Úvod

Tato práce je věnována modelování proudění, spalování a transportu kapalné fáze v chemickém raketovém motoru. Chemický raketový motor je na první pohled jednoduché zařízení, které přeměňuje vnitřní energii spalín na kinetickou energii. Spaliny se v raketovém motoru produkují chemickou reakcí paliva a okysličovadla, která také uvolní velké množství energie. Konstrukce raketových motorů jsou různé, ale základní princip je u všech stejný, smíšení paliva a okysličovadla v komoře raketového motoru, jejich reakce a poté přeměna vnitřní na kinetickou energii pomocí konvergentně divergentní geometrie kterou nazýváme tryska.



Obr. 1: Schématické znázornění komory a trysky raketového motoru

Proudění v raketovém motoru je velice komplikované, trojrozměrné turbulentní proudění s velkými gradienty tlaku i teploty. Palivo a okysličovadlo mohou být do spalovací komory přivedeny v plynné nebo kapalné fázi, takže řešený problém zahrnuje popis vícefázového proudění. Kapičky paliva i okysličovadla spolu navzájem mohou interagovat, dochází k jejich kontaktu, spojení nebo rozpadu. Problém obsahuje i řešení chemických reakcí, které představují velké množství dodatečných diferenciálních rovnic. Ty často ztěžují numerické řešení. Celá problematika je velice komplikovaná a její plné řešení by vyžadovalo velké výpočetní nároky.

Při prvotním vývoji je nutné návrh analyzovat a upravovat. To je možné provést za použití analytických vztahů, ale ty mohou být nedostatečné. Cílem je vytvořit výpočetní nástroj, který umožňuje popsat důležité jevy, analyzovat prvotní návrhy a nevyžaduje velké výpočetní nároky. Z tohoto důvodu byl sestaven zjednodušený

matematický model popisující plynnou a rozptýlenou kapalnou fázi. Komplikované chemické reakce byly nahrazeny zjednodušeným modelem.

Po vytvoření tohoto modelu bude výpočetní kód aplikován na příklad odpařování kapiček vody a na spalování v raketovém motoru. Budou analyzovány vlivy velikosti kapiček a jejich vstupní rychlosti na tah motoru. Dále bude analyzována potřebná délka na úplné odpaření a spálení paliva pro různé velikosti kapiček a různé tlaky v komoře.

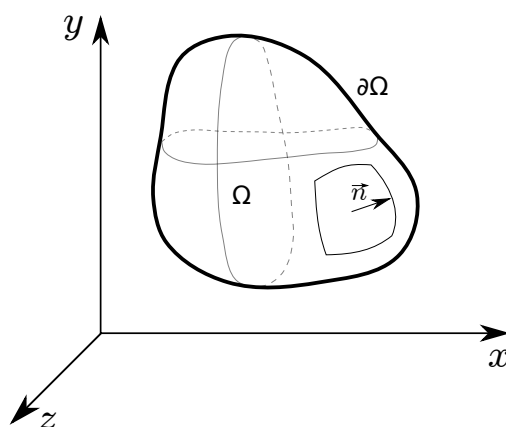
# Model plynné a rozptýlené fáze

Aby bylo možné problémy proudění řešit, je třeba je matematicky popsat. Popis by se měl odvíjet od požadavků, které na model klademe, ať už se jedná o dimenzi problému nebo různé fyzikální jevy, které se snažíme zachytit. Pro zde řešený problém byl zvolen model nevazkého proudění stlačitelné tekutiny. Model byl dále zjednodušen v dimenzi a je řešen pouze jako kvazi-2D. Toto zjednodušení bylo zvoleno z důvodu symetrie a charakteru řešených problémů.

## 1.1 Rovnice popisující proudění plynné fáze

Řešené rovnice vycházejí ze základních fyzikálních principů, zákonů zachování. Ty lze formulovat pro materiálový objem. Tato formulace ale není vhodná pro řešení metodou konečných objemů, proto se bude tato práce zabývat Eulerovským popisem plynné fáze.

Použité rovnice lze odvodit za pomoci bilance toků a zdrojů. V tomto postupu je vymezen kontrolní objem jako omezená oblast obr. 1.1.



Obr. 1.1: Kontrolní oblast

Nechť  $\phi$  je hustota nějaké zkoumané veličiny. Celkové množství je označeno jako  $\Phi$  a je definováno následovně.

$$\Phi = \iiint_{\Omega} \phi d\Omega \quad (1.1)$$

Časová změna celkového množství v kontrolním objemu je způsobena zdroji v kontrolním objemu a tokem přes hranici.

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\Omega} \phi d\Omega = - \oint_{\partial\Omega} \phi \vec{u} \cdot \vec{n} dS + \iiint_{\Omega} Q d\Omega \quad (1.2)$$

Za předpokladu nezávislosti  $\Omega$  na čase je možné zaměnit derivaci a integrál na levé straně rovnice. V opačném případě by přibyl člen reprezentující pohyb hranice. Poté je aplikována Gaussova věta.

$$\iiint_{\Omega} \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \vec{u}) - Q \right] d\Omega = 0 \quad (1.3)$$

Aby integrál v rov. (1.3) existoval, musí být argumentem funkce spojitá skoro všude na omezené oblasti  $\Omega$ . Aby bylo možné přejít k diferenciální formě tj. aby integrand byl samotný roven nule, požadujeme aby rov. (1.3) byla splněna na libovolné oblasti  $\Omega$ . Poté lze diferenciální tvar vyjádřit následovně.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \vec{u}) = Q \quad (1.4)$$

Na rov. (1.4) jsou kladeny striktnější požadavky než na rov. (1.3), funkce  $\phi$  musí být spojitá v každém bodě. Díky těmto přísnějším požadavkům je pro metodu konečných objemů používána integrální forma zákonů zachování, které dovolují i řešení s nepojitostmi. Zde uvedený postup bude použit k odvození matematické formulace zákonů zachování.

### 1.1.1 Zákon zachování hmoty

Rovnice kontinuity vyjadřuje fyzikální princip zachování hmoty (pokud pomineme jaderné reakce a podobné jevy). V Lagrangeově popisu lze rovnici kontinuity zapsat následovně.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega^*(t)} \rho(\vec{x}, t) d\vec{x} = 0 \quad (1.5)$$

Zde  $\Omega^*(t) \subset \mathbb{R}^n$  značí časově proměnné materiálové těleso obsahující stále stejné materiálové body. Rovnice kontinuity v této formě říká, že hmota obsažená v materiálovém tělese je konstantní v čase. Jak už bylo zmíněno, vzhledem k použití metody konečných objemů je vhodnější Eulerova formulace v kontrolním objemu  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ . K její matematické formulaci se lze dostat mnoha způsoby, například použitím zmíněné bilance na kontrolním objemu.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.6)$$

Zde rov. (1.6) je s nulovým zdrojovým členem. Pro popis řešených problémů v této práci je užitečnější formulace nehomogenní rovnice rov. (1.7). Ta nemusí nutně vyjadřovat zachování hmoty jako celku, ale například zachování chemické složky nebo frakce rozptýlené fáze.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = f(\vec{x}, \vec{u}, t) \quad (1.7)$$

### 1.1.2 Zákon zachování hybnosti

Matematickou formulaci zákona zachování hybnosti lze získat obdobným přístupem jako u zákona zachování hmoty. Při bilanci hybnostních toků v konečném objemu je také nutné aplikovat tlakové a objemové síly na element. Výsledkem je rov. (1.8). Při odvození byly vypuštěny vazké členy. Při jejich uvažování bychom získali Navier-Stokesovy rovnice.

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u_i \vec{u}) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \rho f_i \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (1.8)$$

V rov. (1.8)  $f_i$  značí  $i$ -tou složku vektoru zrychlení. Tento zdrojový člen může popisovat vnější gravitační pole nebo také nesetrvačné účinky jako odstředivou sílu. Pokud rov. (1.8) rozepíšeme do složek, získáme soustavu parciálních diferenciálních rovnic rov. (1.9).

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} + \frac{\partial \rho uw}{\partial z} = \rho f_x$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho v u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2 + p}{\partial y} + \frac{\partial \rho v w}{\partial z} &= \rho f_y \\ \frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial \rho w u}{\partial x} + \frac{\partial \rho w v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w^2 + p}{\partial z} &= \rho f_z\end{aligned}\tag{1.9}$$

### 1.1.3 Zákon zachování energie

Pro získání formulace zákona zachování energie lze postupovat obdobně jako u předchozích formulací, je ovšem potřeba nejprve energii zadefinovat. Celková energie tekutiny se skládá z vnitřní, kinetické a potenciální energie (vzhledem k nízké hustotě plynů je potenciální energie zanedbávána).

$$e = u + \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \vec{u}^T\tag{1.10}$$

V rov. (1.10) je celková energie vztažena na jednotku hmotnosti. Vnitřní energie je označena  $u$ . Její definice záleží na zvoleném modelu chování plynu. Nejjednodušší variantou je model ideálního plynu, vnitřní energie je potom pouze funkcí teploty.

Po definici celkové energie v kontrolním objemu lze postupovat bilancí energetických toků přes hranici objemu. Pro případ celkové energie je třeba zohlednit tok energie spojený s tokem hmoty přes hranici, výkon povrchových sil na hranici kontrolního objemu, výkon vnitřních sil v kontrolním objemu, difuzní tok energie a zdroje v kontrolním objemu. Výsledkem této bilance je následující rovnice.

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho e + p)\vec{u}) = \rho \vec{f} \cdot \vec{u} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho \dot{Q}\tag{1.11}$$

Při odvození rov. (1.11) byl vypuštěn člen výkonu vazkových členů. Při finální formulaci budou dále zanedbány členy spojené s výkonem objemových sil a difuzním tokem energie.

Za účelem jednoduššího zápisu lze zavést celkovou energii tekutiny vztaženou na jednotku objemu. Tato veličina se totiž už v rov. (1.11) vyskytuje.

$$E = \rho e\tag{1.12}$$

Energetická rovnice aplikací rov. (1.12) a zanedbáním výkonu objemových sil a difuzního toku energie přejde na finální formulaci, která bude nadále používána.

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + p)\vec{u}) = \rho\dot{Q} \quad (1.13)$$

### 1.1.4 Model kvazi-2D proudění

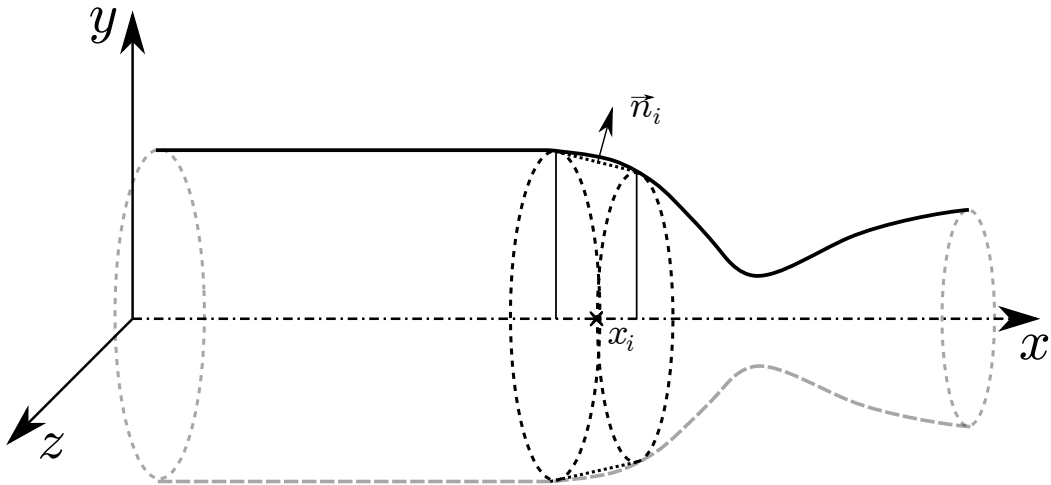
Tato práce se zabývá modelováním proudění v raketovém motoru. Již zmíněné rovnice jsou k popisu proudění naprosto dostatečné, ovšem vzhledem ke geometrii a cíli této práce řešit zjednodušený model jsou moc obecné. Proto již uvedené rovnice budou zjednodušeny a upraveny na model proudění v trubici nekonstantního průřezu. Zjednodušený model je odvoze pro jednosložkový problém, ten dále bude rozšířen pro více složek.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}) = 0 \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u_i \vec{u}) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0 \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + p)\vec{u}) = \rho\dot{Q} \quad (1.16)$$

Dále budou rovnice integrované přes oblast  $\Omega$  vyznačenou na obr. 1.2. Oblast je zvolena tak, aby představovala komolý kužel s podstavou kolmou na osu geometrie.



Obr. 1.2: Geometrie oblasti a kontrolní objem

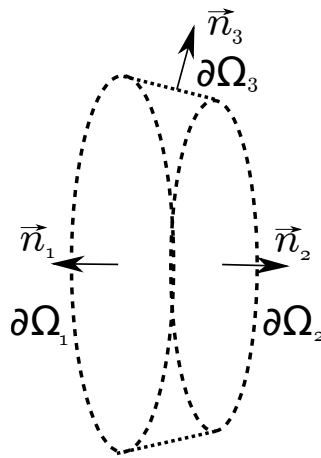


## Zákon zachování hmoty

Zákon zachování hmoty je integrován přes kontrolní oblast, a dále je aplikována Gaussova věta.

$$\iiint_{\Omega} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) \right] d\Omega = 0 \quad (1.17)$$

$$\iiint_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + \iint_{\partial\Omega} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dS = 0$$



Obr. 1.3: Kontrolní oblast

Hranice oblasti je rozdělena na tři části  $\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2 \cup \partial\Omega_3$ . Díky podmínce neprostupnosti stěny tj.  $\partial\Omega_3$ , platí  $\vec{u} \cdot \vec{n} = 0$ .

$$\iiint_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + \iint_{\partial\Omega_1} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dS + \iint_{\partial\Omega_2} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dS + \underbrace{\iint_{\partial\Omega_3} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dS}_{=0} = 0$$

V reálném proudění je hustota i rychlost různá po průřezu trubice. Zde je uvažována střední hodnota po průřezu. Díky tomuto předpokladu lze výraz dále zjednodušit.

$$\iiint_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + (\rho u S(x))_2 - (\rho u S(x))_1 = 0$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \rho}{\partial t} \underbrace{\left( \iint_{S(x)} dS \right)}_{S(x)} dx + \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \rho u S(x)}{\partial x} dx = 0$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \left( \frac{\partial S(x) \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u S(x)}{\partial x} \right) dx = 0 \quad (1.18)$$

Pro rov. (1.18) platí stejné předpoklady jako byly uvedeny v úvodní části pro rov. (1.3). Převod do diferenciální formulace přináší přísnější požadavky na hledanou funkci. Diferenciální forma je získána na platnosti rov. (1.18) pro libovolnou oblast.

$$\frac{\partial S(x) \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u S(x)}{\partial x} = 0 \quad (1.19)$$

### Zákon zachování hybnosti

Stejně jako u zákona zachování hmoty je integrována hybnostní rovnice v ose  $x$  na kontrolním objemu  $\Omega$ . Poté je použita Gaussova věta.

$$\iiint_{\Omega} \left[ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{u}) + \frac{\partial p}{\partial x} \right] d\Omega = 0 \quad (1.20)$$

$$\iiint_{\Omega} \frac{\partial \rho u}{\partial t} d\Omega + \iint_{\partial\Omega} \rho u \vec{u} \cdot \vec{n} dS + \iint_{\partial\Omega} p n_x dS = 0$$

Jako u předchozího odvození se konvektivní člen dá rozdělit členy po jednotlivých částech hranice oblasti. Díky podmínce neprostupnosti hranice vypadne konvektivní člen přes stěnu oblasti.

$$\underbrace{\iiint_{\Omega} \frac{\partial \rho u}{\partial t} d\Omega}_{\text{změna hybnosti v objemu}} + \underbrace{(S\rho u^2)_2 - (S\rho u^2)_1}_{\text{konvektivní tok hybnosti}} + \underbrace{\iint_{\partial\Omega_1} p n_x dS + \iint_{\partial\Omega_2} p n_x dS}_{\text{tok hybnosti vlivem tlaku}} + \underbrace{\iint_{\partial\Omega_3} p n_x dS}_{\text{tok hybnosti vlivem změny geometrie}} = 0 \quad (1.21)$$

Čtvrtý a pátý člen lze zjednodušit předpokladem o rovnoměrném rozložení tlaku v průřezu. Poslední člen je třeba detailněji analyzovat. Začneme nejprve popisem plochy tvořící hranici oblasti na obr. 1.2.

Plochu popíšeme parametrizací  $P : M \rightarrow \mathbb{R}^3$ ,  $M \subset \mathbb{R}^2$  rov. (1.22),

$$P(x, \phi) = \begin{cases} x \\ r(x)\cos(\phi) \\ r(x)\sin(\phi) \end{cases} \quad x \in \langle 0, l \rangle, \quad \phi \in \langle 0, 2\pi \rangle \quad (1.22)$$

Pro danou parametrizaci lze najít normálový vektor dle rov. (1.23).

$$\vec{n} = \frac{\frac{\partial P}{\partial t} \times \frac{\partial P}{\partial \phi}}{\left\| \frac{\partial P}{\partial t} \times \frac{\partial P}{\partial \phi} \right\|_2} = \left( \frac{-\dot{r}}{\sqrt{1+\dot{r}^2}}, \frac{\cos(\phi)}{\sqrt{1+\dot{r}^2}}, \frac{\sin(\phi)}{\sqrt{1+\dot{r}^2}} \right) \quad (1.23)$$

$$\begin{aligned} \iint_{\partial\Omega_3} pn_x dS &= \iint_M pn_x \left\| \frac{\partial P}{\partial t} \times \frac{\partial P}{\partial \phi} \right\|_2 dM \\ &= \iint_M p \frac{\dot{r}}{\sqrt{1+\dot{r}^2}} r \sqrt{1+\dot{r}^2} dM = - \iint_M pr\dot{r} dM \end{aligned}$$

Je nutné dodefinovat oblast M. Množina M by měla být zobrazena rov. (1.22) na  $\partial\Omega_3$ . Proto je  $M = \langle x_1, x_2 \rangle \times \langle 0, 2\pi \rangle$ .

$$- \int_{x_1}^{x_2} \int_0^{2\pi} pr\dot{r} d\phi dx = - \int_{x_1}^{x_2} 2\pi r\dot{r} p dx = - \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial S}{\partial x} p dx \quad (1.24)$$

Když je poslední člen rov. (1.21) znám, je možné pokračovat v odvození rovnice pro hybnost. Dále je uvažována závislost hybnosti a tlaku pouze na axiální souřadnici. Dalším důležitým předpokladem je v čase neproměnná geometrie. Tento efekt by mohl být uvažován za cenu dalšího členu.

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial S(x)\rho u}{\partial t} dx + [S(x)(\rho u^2 + p)]_2 - [S(x)(\rho u^2 + p)]_1 - \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial S}{\partial x} p dx &= 0 \\ \int_{x_1}^{x_2} \left[ \frac{\partial \rho u S(x)}{\partial t} + \frac{\partial S(x)(\rho u^2 + p)}{\partial x} - p \frac{\partial S(x)}{\partial x} \right] dx &= 0 \end{aligned} \quad (1.25)$$

Výraz musí platit pro libovolný kontrolní objem, proto i integrand musí být nulový.

$$\frac{\partial \rho u S(x)}{\partial t} + \frac{\partial S(x)(\rho u^2 + p)}{\partial x} = p \frac{\partial S(x)}{\partial x} \quad (1.26)$$

## Energetická rovnice

Odvození energetické rovnice je stejné jako u zákona zachování hmoty. Výsledná rovnice v integrální formě má následující tvar.

$$\int_{x_1}^{x_2} \left[ \frac{\partial ES(x)}{\partial t} + \frac{\partial S(x)(E+p)u}{\partial x} \right] dx = 0 \quad (1.27)$$

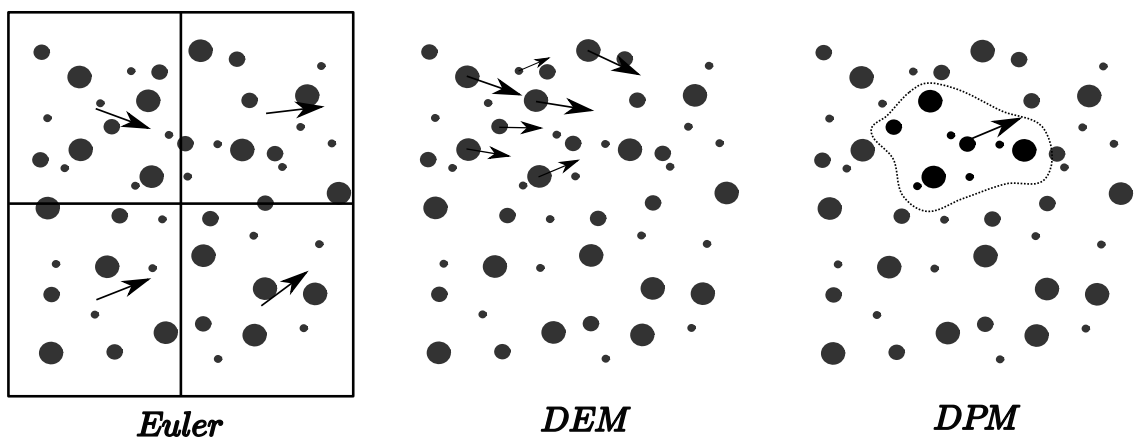
Opět na základě nezávislosti volby kontrolního objemu musí být integrand roven nule a získáme diferenciální tvar energetické rovnice.

$$\frac{\partial ES(x)}{\partial t} + \frac{\partial S(x)(E+p)u}{\partial x} = 0 \quad (1.28)$$

Takto stanovené rovnice pro proudění stlačitelné tekutiny musí být uzavřeny definicí celkové energie tekutiny, která spojuje tlak, rychlost a teplotu tekutiny.

## 1.2 Popis rozptýlené fáze

V této práci se rozptýlenou fází rozumí kapalná fáze ve formě kapiček v proudovém poli. Rozptýlená fáze je modelována dvěma způsoby, jako Eulerovské pole a jako množina Lagrangeovských bodů. Lagrangeovský popis lze formulovat dvěma způsoby. Pokud sledujeme každou částici, jedná se o DEM (Discrete Element Method), pokud jsou sledovány jen skupiny kapiček jedná se o DPM (Discrete Parcel Method).

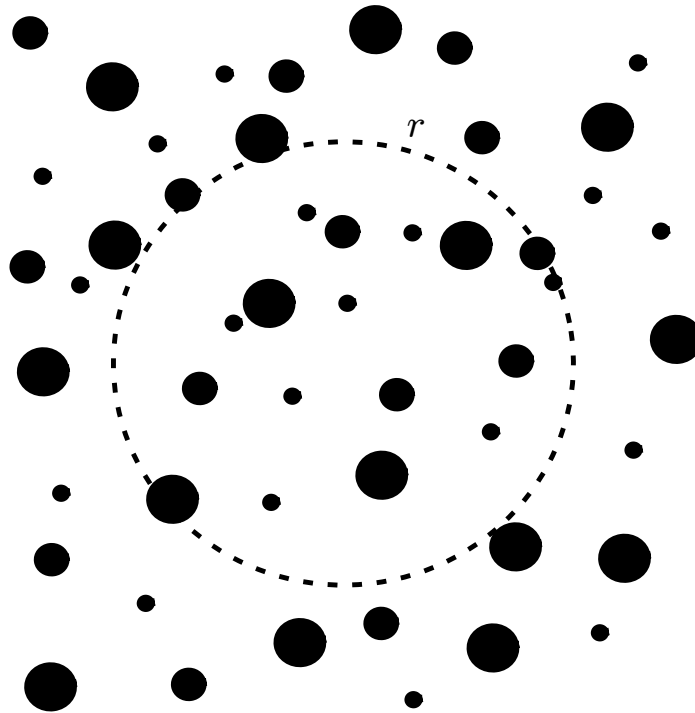


Obr. 1.4: Přístupy diskretizace rozptýlené fáze

Vzhledem k velkému množství kapiček byla zvolena DPM.

### 1.2.1 Eulerův popis

V rámci popisu vlastností rozptýlené fáze bude modelována hustota rozptýlené hmoty, hustota počtu částic, hustota hybnosti a hustota energie. Hustotou není myšlena v případě rozptýlené fáze materiálová vlastnost ale koncentrace rozptýlené fáze v kontrolním objemu.



Obr. 1.5: Rozptýlená fáze

Na obrázku 1.5 je znázorněno rozložení rozptýlené fáze. Pro popis je zavedena proměnná  $\chi$  popisující hmotnostní koncentraci v kontrolním objemu. Vzhledem k bodovému charakteru rozložení hmoty je potřeba použít objemové středování. Proto byla v oblasti zvolena kulová kontrolní oblast s poloměrem  $r$ . Hmotnostní koncentraci v kontrolní oblasti lze vyjádřit následovně.

$$\chi_d = \frac{1}{V_r} \sum_{i=0}^{N(r)} m_i \quad (1.29)$$

Zde  $V_r$  je objem kontrolní oblasti,  $N(r)$  je počet částic v kontrolní oblasti a  $m_i$  je hmotnost  $i$ -té částice. Cílem je volit poloměr oblasti takový, že další zvětšení poloměru nemá vliv na hmotnostní koncentraci. Na druhou stranu je třeba zachytit změny v proudovém poli, takže velikost kontrolní oblasti musí být menší než jistá charakteristická velikost proudového pole.

Popis rozptýlené fáze pomocí hmotnostní koncentrace není jedinou možností, další možnost představuje objemový zlomek. Necht' rozptýlená fáze má celkový objem  $V_d$ , spojitá fáze  $V_c$ . Objemový zlomek potom lze definovat následovně.

$$\alpha_d = \frac{V_d}{V_d + V_c} = \frac{V_d}{V} \quad (1.30)$$

Vztah mezi hmotnostní koncentrací a objemovým zlomkem lze vyjádřit z definice hmotnostní koncentrace.

$$\chi_d = \frac{m_d}{V} = \frac{m_d}{V} \frac{V_d}{V_d} = \frac{m_d}{V_d} \frac{V_d}{V} = \rho_d \alpha_d$$

Zde  $\alpha_d$  značí objemový zlomek (v tomto případě rozptýlené fáze) a  $\rho_d$  materiálovou hustotu rozptýlené fáze.

### Zákon zachování hmoty pro rozptýlenou fázi

Pro získání matematického vyjádření pro zachování rozptýlené fáze je použita už dříve zmíněná metoda bilance toku na kontrolním objemu. Změna celkového množství rozptýlené fáze je ovlivněna pouze tokem přes hranici kontrolní oblasti nebo objemovým zdrojem např. odpařováním nebo kondenzací. Tuto bilanci vyjadřuje rov. (1.31).

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\Omega} \chi d\Omega = - \oiint_{\partial\Omega} \chi \vec{u}_d \cdot \vec{n} dS + \iiint_{\Omega} \Gamma_{\chi} d\Omega \quad (1.31)$$

Za předpokladu v čase neměnné oblasti  $\Omega$  lze zaměnit derivaci s integrálem, poté je použita Gaussova věta a výraz je upraven na finální tvar.

$$\iiint_{\Omega} \left[ \frac{\partial \chi}{\partial t} + \nabla \cdot (\chi \vec{u}_d) - \Gamma_{\chi} \right] d\Omega = 0 \quad (1.32)$$

Výraz rov. (1.32) platí pro libovolnou oblast  $\Omega$ , proto je jeho nulovost splněna pouze pro nulový integrand.

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \nabla \cdot (\chi \vec{u}_d) = \Gamma_{\chi} \quad (1.33)$$

Člen v rov. (1.33) popisuje zdroj nebo zánik hmoty rozptýlené fáze.

$$\Gamma_{\chi} = N\dot{m} \quad (1.34)$$

Později bude ukázáno, jak je  $\dot{m}$  formulován pro různé modely odpařování.

### Početní hustota rozptýlené fáze

Znalost počtu částic je důležitá z hlediska modelování změny velikosti kapiček. Při znalosti počtu a hmotnosti částic nebo jejich koncentrací a materiálové hustoty spolu s předpokladem sférických částic je možné určit jejich poloměr.

$$r = \sqrt[3]{\frac{3\chi}{4N\rho}}$$

Matematická formulace a její odvození je analogické hmotnostní koncentraci, proto bude uveden až finální tvar.

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot (N\vec{u}_d) = \Gamma_N \quad (1.35)$$

Zdrojový člen v rov. (1.35) modeluje vznik nebo ztrátu počtu kapiček, dovoluje také popsat rozpad nebo spojení částic. V této práci jsou tyto efekty zanedbány ( $\Gamma_N = 0$ ).

### Zákon zachování hybnosti pro rozptýlenou fázi

Zákon zachování hybnosti pro rozptýlenou fázi je formulován jako transportní rovnice pro hybnost. Na rozdíl od spojitě fáze je zde zanedbán vliv tlakového gradientu. Tento předpoklad byl uvažován na základě malé velikosti kapiček. Jsou také zanedbány další vlivy jako například tíha. U rozptýlené fáze je zájem popsat její brzdění nebo urychlování vlivem aerodynamického odporu. Tento jev je modelován zdrojovým členem. Zákon zachování hybnosti rozptýlené fáze ve směru  $x$  je vyjádřen rov. (1.36).

$$\frac{\partial \chi u_{di}}{\partial t} + \nabla \cdot (\chi u_{di} \vec{u}_d) = \Gamma_{\chi u} \quad (1.36)$$

Zde,  $\vec{u}_d = (u_d, v_d, w_d)^T$  značí vektor rychlosti rozptýlené fáze.  $\Gamma_{\chi u}$  popisuje zdroj hybnosti rozptýlené fáze.

$$\Gamma_{\chi u} = NF_{Dx} = \frac{N}{2} \rho_f (u_f - u_d) |u_f - u_d| AC_D \quad (1.37)$$

V rov. (1.37)  $\rho_f$  je hustota plynné fáze,  $A$  je průřez částice a  $C_D$  je koeficient aerodynamického odporu.

## Zákon zachování energie pro rozptýlenou fázi

Zákon zachování energie je pro rozptýlenou fázi realizován jako zachování vnitřní energie. Vnitřní energie rozptýlené fáze je definována následovně a je funkcí pouze teploty.

$$e_d = \int_{T_{ref}}^T \chi c(T) dT = \bar{c}\chi(T - T_{ref}) \quad (1.38)$$

Zde  $c(T)$  a  $\bar{c}$  značí tepelnou kapacitu rozptýlené fáze závislou na teplotě a její reprezentativní hodnotu pro určitý interval teplot.

Zákon zachování energie může být poté formulován jako v předchozím případě ve formě transportní rovnice pro vnitřní energii.

$$\frac{\partial \chi e_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\chi e_d \vec{u}_d) = \Gamma_{e_d} \quad (1.39)$$

Zdrojový člen vnitřní energie reprezentuje přenos tepla do nebo z rozptýlené fáze. Tímto způsobem bude modelována změna teploty kapiček vlivem sdílení tepla s plynnou fází a také ztráta energie vlivem odpařování.

$$\Gamma_{e_d} = N(\dot{Q} + \dot{m}h_{vap}) \quad (1.40)$$

### 1.2.2 Lagrangeův popis

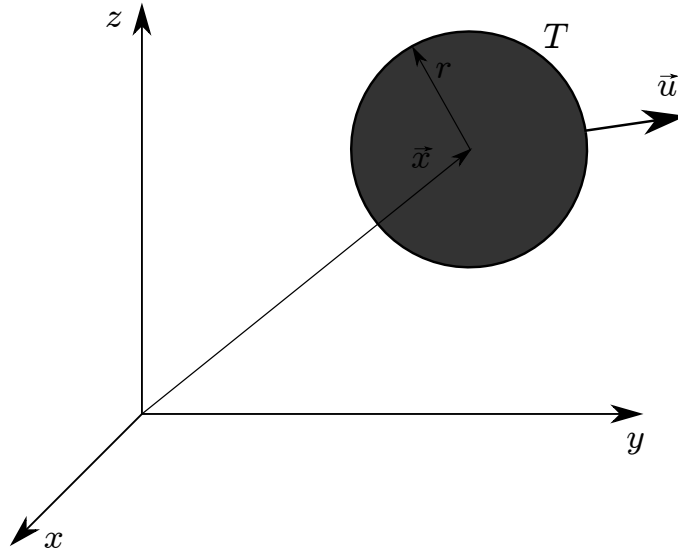
Při popisu v Lagrangeově formalismu je každé skupině kapiček přidělena poloha, rychlost, poloměr, teplota a počet kapiček ve skupině. Řešení takto formulovaného problému vede na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic.

#### Poloha

Skupina kapiček je popsána jejich hmotným středem, rychlosti kapiček ve skupině jsou uvažovány jako stejné. Pohyb skupiny poté lze popsat jako pohyb hmotného bodu a pro částici pohybující se rychlostí  $\vec{u}$  platí, že derivace polohového vektoru se rovná vektoru rychlosti.

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u} \quad (1.41)$$





Obr. 1.6: Lagrangeovská částice

## Rychlost

Na kapičky ve skupině působí odporová síla. Vzhledem ke stejné velikosti a rychlosti kapiček je tato síla na všechny kapičky stejná. Změnu rychlosti jedné kapičky lze vyjádřit z Newtonova zákona síly.

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \frac{1}{m} \vec{F}_D \quad (1.42)$$

## Poloměr

Změna hmotnosti kapičky je možná pouze tokem hmoty přes její hranici, ať už se jedná o kondenzaci nebo odpařování. Pokud je celkový tok přes hranici vyjádřen jako  $\dot{m}_b$ , lze změnu hmotnosti vyjádřit následovně.

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_b$$

Kapičky mohou mít obecný tvar, ale budou uvažovány jen sférické kapičky. Potom lze předchozí vztah upravit na diferenciální rovnici pro změnu poloměru v čase.

$$\frac{dr}{dt} = \frac{1}{4\pi r^2 \rho} \dot{m}_b \quad (1.43)$$

## Teplota

Popis teploty kapičky lze získat ze zákona zachování energie. V tomto případě je uvažována pouze vnitřní energie. Dále je předpokládáno, že kapička nekoná žádnou práci. Je uvažován tepelný tok a vliv odpařování. Zákon zachování energie poté lze zapsat ve formě.

$$mC \frac{dT}{dt} = \dot{Q}_d + \dot{m}h_{vap} \quad (1.44)$$

Změnu teploty v čase lze poté snadno vyjádřit následovně.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{mC} (\dot{Q}_d + \dot{m}_d h_{vap}) \quad (1.45)$$

## 1.3 Rozdělení velikostí kapiček a model frakcí

V předchozí části byly uvedeny rovnice popisující vývoj monodisperzní kapičkové fáze. Otázkou je, jak modelovat kapičky, které jsou reprezentovány jistou distribuční funkcí popisující jejich počet v závislosti na poloměru. Jednou z možností je momentová metoda, kdy jsou přidány transportní rovnice pro momenty daného rozdělení. V této práci byl vybrán jiný přístup. Rozdělení je diskretizováno na konečný počet subintervalů a ty jsou poté řešeny jako monodisperze.

Nechť má kapičková fáze například normální rozdělení  $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$  se střední hodnotou  $\mu$  a směrodatnou odchylkou  $\sigma$ . Rozložení počtu kapiček v závislosti na poloměru lze poté vyjádřit následovně.

$$\dot{n}(r) = \frac{N_0}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(r-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (1.46)$$

V rov. (1.46) vystupuje neznámá konstanta, která škáluje maximum normálního rozdělení. Tato konstanta je předem neznámá, ale je možné ji určit při znalosti celkového hmotnostního toku kapiček. Ten je v technické aplikaci známý. Celkový hmotnostní tok lze vyjádřit jako.

$$\dot{m}_{total} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4}{3} \pi r^3 \rho \frac{N_0}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(r-\mu)^2}{2\sigma^2}} dr = \frac{4}{3} \pi \rho N_0 \int_{-\infty}^{\infty} r^3 \mathcal{N}(\mu, \sigma) dr = \frac{4}{3} \pi \rho N_0 \mu^3 \quad (1.47)$$

Zde  $\rho$  značí hustotu kapiček. Na pravé straně vystupuje třetí obecný moment

normálního rozdělení. Tento moment lze vyjádřit za pomoci střední hodnoty a směrodatné odchylky.

$$\mu_3 = \mu^3 + 3\mu\sigma^2 \quad (1.48)$$

Pokud je  $\mu_3$  známé, tak je možné vyjádřit neznámou konstantu  $N_0$ .

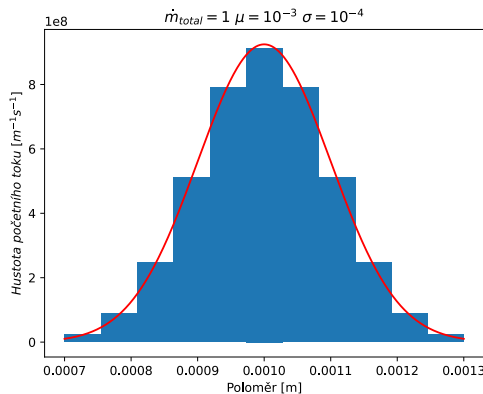
$$N_0 = \frac{3\dot{m}_{total}}{4\pi\rho\mu_3} \quad (1.49)$$

Nyní už je možné popsat rozložení počtu kapiček v závislosti na poloměru pro daný hmotnostní tok, střední hodnotu a směrodatnou odchylku normálního rozdělení. Dalším možným přístupem je konstrukce rozdělení pro hmotnostní tok.

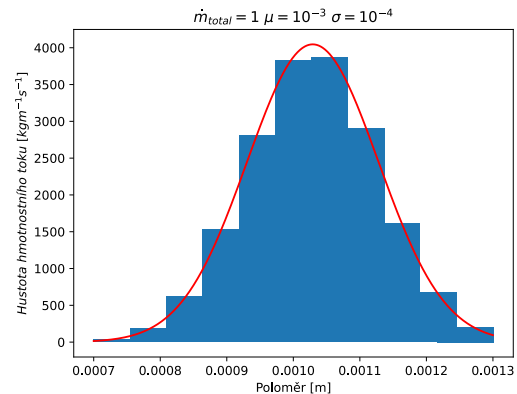
$$\dot{m}(r) = \frac{4}{3}\pi\rho\frac{N_0r^3}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(r-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (1.50)$$

I když jsou oba přístupy ekvivalentní, zadání hmotnostního toku a středního poloměru je v technické aplikaci praktičtější.

Při diskretizaci bylo rozdělení omezeno na interval  $(\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma)$ . Takto omezený interval umožní popis dominantních poloměrů a zanedbá extrémní hodnoty vzdálené od střední hodnoty. Dále je tento interval rovnoměrně rozdělen na  $N$  subintervalů. V subintervalech je numericky nalezena střední hodnota a množství kapiček. Na obr. 1.7 a obr. 1.8 jsou vyneseny grafy diskrétního a spojitého rozdělení hustoty početního a hmotnostního toku pro uvedené parametry.



Obr. 1.7: Hustota početního toku a její diskretizace



Obr. 1.8: Hustota hmotnostního toku a její diskretizace

Normální rozdělení nemusí být vhodné pro modelování reálného vstřikování, další možností je log-normální nebo Roslin-Rammler rozdělení. Dvojice získané diskretizací

$(r_i, \dot{m}_i)$  pro  $i = 1, \dots, N$  jsou použity pro okrajovou podmínku kapičkové fáze.

## 1.4 Coupling plynné a rozptýlené fáze

Rovnice popisující obě fáze jsou svázány zdrojovými členy reprezentujícími přenos hmoty, hybnosti a energie. Vazba může být jednostranná nebo oboustranná. Oboustranný coupling může při numerickém řešení způsobit komplikace se stabilitou a oscilacemi. Z tohoto důvodu byl v jistých případech oboustranný coupling nahrazen jednostranným.

### 1.4.1 Euler-Euler

V Eulerově popisu zavedeme značení  $N_E$  jako počet kapičkových frakcí. Do zdrojových členů plynné fáze se promítnou všechny frakce, tedy pro  $i = 1, \dots, N_E$ . Členy ve třetím sloupci tab. 1.1 se vztahují k jedné frakci o početní koncentraci  $N$ , rychlosti  $u_d$  a teplotě  $T_d$ . Hmotnostní tok z jedné kapičky je označen  $\dot{m}_d$ , tepelný tok z kapičky  $\dot{Q}_d$  a síla aerodynamického odporu působící na kapičku  $F_D$ .

Vazba mezi hmotou plynné a kapičkové fáze je oboustranná, hmota odcházející z kapičky je přidána plynné fázi. Hybnost je přenášena díky odpaření. Odpařená hmota z kapičky má stejnou rychlost jako kapička sama, hybnost s ní spojená je přičtena k hybnosti plynné fáze. Přenos hybnosti vlivem aerodynamického odporu byl zanedbán. Toto zjednodušení bylo aplikováno kvůli problémům se stabilitou za vyšších objemových zlomků kapalné fáze. K výměně energie dochází přestupem tepla mezi kapičkou a okolím a také vlivem odpaření a následné výměny hmoty a energie s ní spojenou. Při odpařování kapalné fáze je také odebráno kapičce latentní teplo.

<b>Euler-Euler</b>		
	Plynná fáze	Kapalná fáze
Hmota	$\sum_{i=1}^{N_E} N_i \dot{m}_{di}$	$-N \dot{m}_d$
Hybnost	$\sum_{i=1}^{N_E} N_i u_{di} \dot{m}_{di}$	$-N(u_d \dot{m}_d + F_D)$
Energie	$\sum_{i=1}^{N_E} N_i (\dot{Q}_{di} + \dot{m}_{di} C T_{di})$	$-N(\dot{Q}_d + \dot{m}_d (h_{vap} + C T_d))$

Tab. 1.1: Euler-Euler coupling

## 1.4.2 Euler-Lagrange

V DPM formulaci je zavedeno  $N_L$  jako celkový počet skupin kapiček. Stejně jako v předchozí části  $\dot{m}_d$  je hmotnostní tok z kapičky,  $F_D$  je aerodynamický odpor a  $\dot{Q}_d$  je tepelný tok z kapičky. Na rozdíl od Eulerova popisu jsou zde proměnné kapičkové fáze odlišné od popisu plynné fáze. Skupina kapiček je popsána poloměrem, polohou, rychlostí a teplotou. Tyto vlastnosti mají jednotlivé kapičky ve skupině společné. Skupina obsahuje  $n$  kapiček.

Poloměr je popsán zmíněným vztahem rov. (1.43), poloha s rychlostí rov. (1.41) a rov. (1.42) a teplota vztahem rov. (1.45). V tab. 1.2 vystupuje velikost kontrolního objemu  $V$ . Při numerickém řešení  $V$  reprezentuje konečný objem.

Euler-Lagrange		
	Plynná fáze	Kapalná fáze
Hmota/poloměr	$\sum_{i=1}^{N_L} \frac{n_i}{V} \dot{m}_{di}$	$-\frac{1}{4\pi r^2 \rho_d} \dot{m}_d$
Hybnost/rychlost	$\sum_{i=1}^{N_L} \frac{n_i}{V} u_{di} \dot{m}_{di}$	$\frac{1}{m} \vec{F}_D$
Energie/teplota	$\sum_{i=1}^{N_L} \frac{n_i}{V} (\dot{Q}_{di} + \dot{m}_{di} C T_{di})$	$-\frac{1}{mC} (\dot{Q}_d + \dot{m}_d h_{vap})$

Tab. 1.2: Euler-Lagrange coupling

## 1.5 Finální formulace

Nyní, když byly uvedeny všechny ronice popisující jak plynnou tak rozptýlenou fázi, je možné řešenou úlohu formulovat jako Euler-Euler nebo jako Euler-Lagrange model. Obě formulace sdílí Eulerovský popis plynné fáze, která je řešena jako již uvedený jednorozměrný model proudění v trubici o proměnném průřezu.

### 1.5.1 Euler-Euler model

V následujících rovnicích  $S(x)$  značí proměnný průřez trubice,  $\bar{\rho}$  je hmotnostní koncentrace definována za pomoci objemového zlomku kapiček  $\bar{\rho} = (1 - \alpha_d)\rho$ . Počet chemických složek je  $n_{comp}$ . Chemické složky jsou transportovány a chemické reakce jsou modelovány zdrojovým členem. Chemické složky mohou také vznikat vlivem odpařování kapalně fáze. V případě modelování kapiček více složek bude třeba doplnit další rovnice (dalších  $N_E$  rovnic).

$$\frac{\partial S(x)\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial S(x)\bar{\rho}u}{\partial x} = \sum_{i=1}^{N_E} N_i \dot{m}_{di} \quad (1.51)$$

$$\frac{\partial S(x)Y_i\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial S(x)Y_i\bar{\rho}u}{\partial x} = \Gamma_{Y_i}, \quad i = \{1, 2, \dots, n_{comp}\} \quad (1.52)$$

$$\frac{\partial S(x)\bar{\rho}u}{\partial t} + \frac{\partial S(x)(\bar{\rho}u^2 + p)}{\partial x} = p \frac{\partial S(x)}{\partial x} + \sum_{i=1}^{N_E} N_i u_{di} \dot{m}_{di} \quad (1.53)$$

$$\frac{\partial S(x)\bar{\rho}e}{\partial t} + \frac{\partial S(x)(\bar{\rho}e + p)u}{\partial x} = \sum_{i=1}^{N_E} N_i (\dot{Q}_{di} + \dot{m}_{di} CT_{di}) \quad (1.54)$$

Pro každou kapičkovou frakci jsou přidány čtyři další rovnice reprezentující zachování hmoty, počtu kapiček, hybnosti a energie.

$$\frac{\partial S(x)\chi}{\partial t} + \frac{\partial S(x)\chi u_d}{\partial x} = -N \dot{m}_d \quad (1.55)$$

$$\frac{\partial S(x)N}{\partial t} + \frac{\partial S(x)N u_d}{\partial x} = \Gamma_N \quad (1.56)$$

$$\frac{\partial S(x)\chi u_d}{\partial t} + \frac{\partial S(x)\chi u_d^2}{\partial x} = -N(u_d \dot{m}_d + F_D) \quad (1.57)$$

$$\frac{\partial S(x)\chi e_d}{\partial t} + \frac{\partial S(x)\chi e_d u_d}{\partial x} = -N(\dot{Q}_d + \dot{m}_d(h_{vap} + CT_d)) \quad (1.58)$$

Definice energie plynné a kapičkové fáze bude doplněna v další kapitole. Zdrojový člen počtu kapiček je zde formálně ponechán, ale při výpočtech není vznik a zánik kapiček uvažován.

## 1.5.2 Euler-Lagrange model

Rovnice popisující plynnou fázi jsou stejné jako pro Euler-Euler model až na zdrojové členy, ty jsou formulovány pro skupiny lagrangeovských kapiček.

$$\frac{\partial S(x)\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}uS(x)}{\partial x} = \sum_{i=1}^{N_L} \frac{n_i}{V} \dot{m}_{di} \quad (1.59)$$

$$\frac{\partial S(x)Y_i\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial S(x)Y_i\bar{\rho}u}{\partial x} = \Gamma_{Y_i}, \quad i = \{1, 2, \dots, n_{comp}\} \quad (1.60)$$

$$\frac{\partial S(x)\bar{\rho}u}{\partial t} + \frac{\partial S(x)(\bar{\rho}u^2 + p)}{\partial x} = p\frac{\partial S(x)}{\partial x} + \sum_{i=1}^{N_L} \frac{n_i}{V} u_{di}\dot{m}_{di} \quad (1.61)$$

$$\frac{\partial S(x)\bar{\rho}e}{\partial t} + \frac{\partial S(x)(\bar{\rho}e + p)u}{\partial x} = \sum_{i=1}^{N_L} \frac{n_i}{V} (\dot{Q}_{di} + \dot{m}_{di}CT_{di}) \quad (1.62)$$

Každá skupina kapiček je popsána následujícími rovnicemi. Tato soustava obyčejných diferenciálních rovnic je řešena pro každou skupinu.

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{1}{4\pi r^2 \rho_d} \dot{m}_d \quad (1.63)$$

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}_d \quad (1.64)$$

$$\frac{d\vec{u}_d}{dt} = \frac{1}{m} \vec{F}_D \quad (1.65)$$

$$\frac{dT_d}{dt} = -\frac{1}{mC} (\dot{Q}_d + \dot{m}_d h_{vap}) \quad (1.66)$$

# Fyzikální model

Matematická formulace již byla uvedena v předchozí kapitole. Nyní budou diskutovány modely fyzikálního chování jak plynné tak rozptýlené fáze. Dále bude popsána interakce kapiček a plynné fáze. Budou uvedeny použité modely pro přenos tepla, dynamické efekty odpařování a spalování.

## 2.1 Energie stlačitelné tekutiny

Jak již bylo uvedeno, energie stlačitelné tekutiny byla zavedena v rov. (1.10). Ovšem nebyla ještě uvedena formulace vnitřní energie plynné fáze. Definice vnitřní energie je závislá na použitém modelu stavového chování.

### 2.1.1 Ideální plyn

Ideální plyn je model chování plynu, který předpokládá dokonalou stlačitelnost a konstantní tepelné kapacity. Vnitřní energie a entalpie jsou funkcí pouze teploty. Platí Mayerův vztah pro tepelné kapacity a specifickou plynovou konstantu. Tepelné kapacity jsou konstantní a lze je odvodit pomocí Mayerova vztahu a izoentropického mocnitele.

$$c_v = \frac{r}{\kappa - 1} \quad c_p = \frac{\kappa r}{\kappa - 1} \quad (2.1)$$

V případě ideálního plynu platí známá stavová rovnice.

$$p = \rho r T \quad (2.2)$$

V rov. (2.2)  $r$  je specifická plynová konstanta definována jako  $r = R/M_m$ . Vnitřní energie vztažená na jednotku objemu je v případě ideálního plynu pouze



funkcí teploty a platí následující vztahy.

$$\rho u = \rho c_v T = \frac{r}{\kappa - 1} \rho T = \frac{p}{\kappa - 1} \quad (2.3)$$

$$\rho h = \rho c_p T = \frac{\kappa r}{\kappa - 1} \rho T = \frac{\kappa p}{\kappa - 1} \quad (2.4)$$

Pokud je takto definovaná vnitřní energie na jednotku objemu dosazena do rov. (1.10) a rov. (1.12), je možné získat vztah pro celkovou energii stlačitelné tekutiny.

$$\rho e = E = \rho u + \frac{1}{2} \rho \vec{u} \cdot \vec{u} \quad (2.5)$$

$$E = \frac{p}{\kappa - 1} + \frac{1}{2} \rho \vec{u} \cdot \vec{u} \quad (2.6)$$

$$p = (\kappa - 1) \left( E - \frac{1}{2} \rho \vec{u} \cdot \vec{u} \right) \quad (2.7)$$

Získaná rov. (2.6) dovoluje z rychlosti a energie vypočítat tlak. Energie je přímo proměnná a rychlost lze snadno dopočítat.

## 2.1.2 Kvazi-ideální plyn

Model kvazi-ideálního plynu má mnoho společných vlastností jako ideální plyn. Stavové chování je stejné a řídí se stavovou rovnicí ideálního plynu rov. (2.2) a vnitřní energie je také funkcí pouze teploty. Rozdíl nastává v tepelných kapacitách, které již nejsou konstantní ale jsou také závislé na teplotě. Vzhledem k této závislosti jsou vnitřní energie a entalpie definovány následovně.

$$u = \int_{T_{ref}}^T c_v(T) dT \quad h = \int_{T_{ref}}^T c_p(T) dT \quad (2.8)$$

Pro závislost tepelných kapacit na teplotě existují analytické modely i naměřená data. V této práci budou používána data z experimentálních měření. Ta jsou ovšem dána ve formě tabulky a přesto, že je možno při numerickém řešení v tabulce dohledávat, nebyl tento přístup přijatelný. Data budou proložena polynomem a ten lze poté zintegrovat a získat přímo aproximaci entalpie a vnitřní energie.

$$c_p = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4 + fT^5 \quad (2.9)$$

$$c_v = a' + b'T + c'T^2 + d'T^3 + e'T^4 + f'T^5 \quad (2.10)$$

Vzhledem k lepší dostupnosti dat pro tepelnou kapacitu za konstantního tlaku bude následující odvození provedeno s použitím entalpie. Definice celkové entalpie a entalpie vztažené na jednotku objemu je uvedena v následujícím vztahu.

$$H = U + pV \quad h = u + \frac{p}{\rho} \quad (2.11)$$

Pokud je vnitřní energie ve formě rov. (2.11) dosazena do rov. (2.5) a měrná entalpie je vyjádřena dle rov. (2.8) za použití aproximace tepelné kapacity, získáme vztah.

$$\rho e = E = \rho h(T) - p + \frac{1}{2} \rho \vec{u} \cdot \vec{u}$$

$$E = \rho \left( aT + \frac{1}{2} bT^2 + \frac{1}{3} cT^3 + \frac{1}{4} dT^4 + \frac{1}{5} eT^5 + \frac{1}{6} fT^6 \right) - p + \frac{1}{2} \rho \vec{u} \cdot \vec{u} \quad (2.12)$$

Pokud je aplikována stavová rovnice ideálního plynu, lze získat nelineární rovnici pro teplotu. Řešením této rovnice lze při znalosti energie, rychlosti a hustoty určit teplotu.

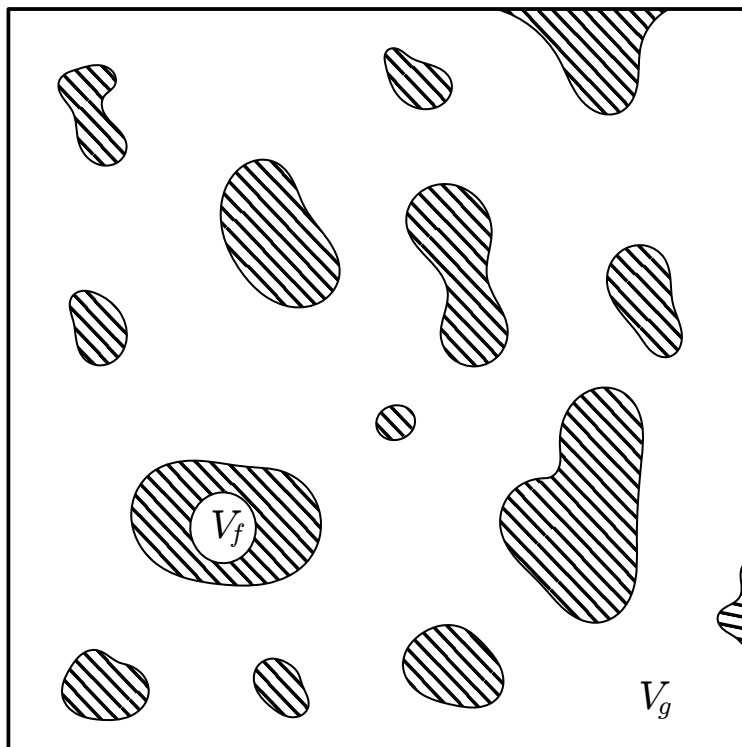
$$aT + \frac{1}{2} bT^2 + \frac{1}{3} cT^3 + \frac{1}{4} dT^4 + \frac{1}{5} eT^5 + \frac{1}{6} fT^6 - rT = \frac{1}{\rho} \left( E - \frac{1}{2} \rho \vec{u} \cdot \vec{u} \right) \quad (2.13)$$

Tato rovnice bude řešena numericky Newton-Rhapsonovou metodou. Je zřejmé, že řešení proudění s modelem kvazi-ideálního plynu je výpočetně náročnější než ideální plyn. Ovšem tento náročnější model je nutné využít kvůli velkému rozmezí teplot při spalování, na kterém není možné uvažovat tepelné kapacity jako konstantní. Pro získání tlaku je po vyřešení rov. (2.13) použita stavová rovnice.

### 2.1.3 Korekce stavového chování díky kapalně fázi

Modely ideálního i kvazi-ideálního plynu uvažují dokonalou stlačitelnost, ovšem plyn s rozptýlenou kapalnou fází není dokonale stlačitelný. Při vyšším objemovém zlomku kapalně fáze by tento postup vedl k chybnému řešení. Je vymezena oblast obsahující jak plynnou tak kapalnou fázi 2.1. Objem plynné fáze je  $V_g$  a objem kapalně fáze je  $V_f$ . Hmotnosti obou fází jsou  $m_g$  a  $m_f$ . Tlak je pro kapalnou i

plynnou fází stejný, teplota je také uvažovaná stejná pro obě fáze, ale toto omezení není nutné.



Obr. 2.1: Oblast s rozptýlenou kapalnou fází

Tlak plynné fáze je vyjádřen ze stavové rovnice v následující formě.  $V_f$  je zde konstantní, kapalina je považována za nestlačitelnou. Z rov. (2.14) je vidět, že celkový objem směsi  $V$  není možné libovolně stlačovat.

$$p = \frac{m_g r T}{V_g} = \frac{m_g r T}{V - V_f} \quad (2.14)$$

Pro praktické výpočty a použití ve výpočetním kódu by bylo vhodnější převést rov. (2.14) na měrný tvar.

$$p = \frac{m_g r T}{V - V_f} = \frac{\frac{1}{V} m_g r T}{\frac{1}{V} (V - V_f)} = \frac{\bar{\rho}_g}{1 - \alpha_f} r T = \frac{1}{\alpha_g} \bar{\rho}_g r T \quad (2.15)$$

Vyjádření v rov. (2.15) obsahuje objemový zlomek plynné fáze  $\alpha_g$ . Tato veličina se ovšem mění v průběhu komprese díky rozdílné stlačitelnosti obou fází. Vhodnějším parametrem je hmotnostní zlomek, protože hmotnost obou fází se při expanzi nebo kompresi nemění. Je zavedeno.

$$Z_g = \frac{m_g}{m}, \quad Z_f = \frac{m_f}{m}, \quad Z_g + Z_f = 1 \quad (2.16)$$

Otázkou nyní je, jaký je vztah mezi objemovým a hmotnostním zlomkem.

$$Z_g = \frac{m_g}{m_g + m_f} = \frac{\rho_g V_g}{\rho_g V_g + \rho_f V_f} = \frac{1}{1 + \frac{\rho_f V_f}{\rho_g V_g}}$$

Podíl objemů fází lze upravit na následující vztah.

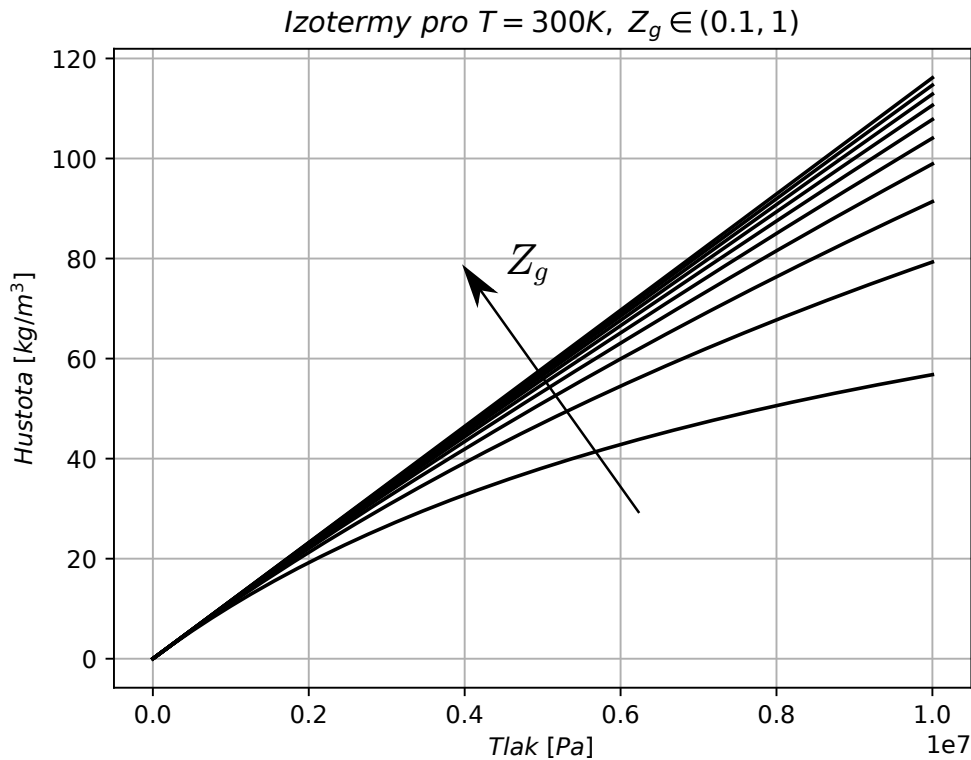
$$\frac{V_f}{V_g} = \frac{V_f + V_g}{V_g} - 1 = \frac{1}{\alpha_g} - 1$$

$$Z_g = \frac{1}{1 + \frac{\rho_f}{\rho_g} \left( \frac{1}{\alpha_g} - 1 \right)}, \quad \alpha_g = \frac{1}{\frac{\rho_g}{\rho_f} \left( \frac{1}{Z_g} - 1 \right) + 1} \quad (2.17)$$

Dosazením rov. (2.17) do rov. (2.15) a aplikací stavové rovnice pro plynnou fázi po několika úpravách získáme.

$$p = \frac{\bar{\rho}_g r T}{1 - \frac{\bar{\rho}_g}{\rho_f} \left( \frac{1}{Z_g} - 1 \right)} \quad (2.18)$$

Na 2.2 jsou vyneseny izotermy pro různé hmotnostní zlomky.



Obr. 2.2: Chování směsi při izotermické kompresi pro různé hmotnostní zlomky

### 2.1.4 Další modely stavového chování

Zatím zmíněné modely se řídily stavovou rovnicí ideálního plynu. Pro zachycení komplexnějšího chování je možné využít i složitější modely. Například Van der Waalsova rovnice respektuje vlastní objem částic a kohezní síly mezi částicemi.

$$p = \frac{nRT}{V_m - nb} - \frac{an^2}{V_m^2} \quad (2.19)$$

Vylepšením Van der Waalsovy rovnice je Redlich-Kwongova rovnice, která má být přesnější v oblasti teplot vyšších než kritické.

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{\sqrt{T}V_m(V_m - b)} \quad (2.20)$$

Obecně lze formulovat stavovou rovnici zavedením kompresibilitního faktoru, který představuje odchylku od ideálního chování.

$$Z = \frac{pV}{nRT} \quad (2.21)$$

## 2.2 Modely interakce tekutiny a rozptýlené fáze

V této části bude popsána interakce kapiček s okolní plynnou fází. Interakcí je myšleno sdílení hmoty, hybnosti a energie. Budou popsány různé modely, které budou při výpočtech aplikovány. Pro všechny další modely je uvažován sférický tvar kapiček.

### 2.2.1 Dynamické efekty

Na těleso pohybující se v tekutině působí aerodynamická síla, její vyjádření již bylo uvedeno v rov. (1.37). Otázkou je, jak popsat koeficient aerodynamického odporu. Jeho velikost je silně závislá na relativním Reynoldsově čísle a tvaru tělesa. Relativní Reynoldsovo číslo je definováno následovně.

$$Re_r = \frac{|u - u_d|d}{\nu} \quad (2.22)$$

Zde  $u$  je rychlost okolního plynu,  $u_d$  je rychlost kapičky,  $d$  je charakteristický rozměr, v případě kapiček je to průměr a  $\nu$  je kinematická viskozita okolního plynu.

Kapičky se v proudovém poli vyskytují ve velkém rozsahu poloměrů i rychlostí. Od velkých kapiček s velkým rozdílem rychlosti oproti plynné fázi po malé kapičky pohybující se téměř s plynem. To znamená, že rozsah Reynoldsových čísel může být značný a je potřeba volit model, který je schopen popsat koeficient aerodynamického odporu na potřebném intervalu. Vycházíme ze zjednodušujících předpokladů a tvaru a pohybu kapiček, které jsou dokonale sférické po celou dobu jejich existence. Tekutina tvořící kapičku je v klidu vzhledem ke svému hmotnému středu. Při obtékání kapky dochází vlivem tření na povrchu k pohybu kapaliny a vytvoření víru. Koeficient odporu lze v tomto případě vypočítat z Hadamard-Rybczynski modelu odporu.

Pro nízká Reynoldsova čísla vazké efekty převažují a proudění kolem kapičky lze popsat jako Stokesovo. Na základě tohoto předpokladu lze vyjádřit koeficient odporu pro  $Re_r < 1$  jako.

$$C_D = \frac{24}{Re} \quad (2.23)$$

Režim proudění za takto malého Reynoldsova čísla může nastat pro malé kapičky. Lepší aproximací je Oseenovo řešení, které uvažuje setrvačné efekty prvního řádu. Tato aproximace je platná pro  $Re_r < 5$ .

$$C_D = \frac{24}{Re} \left( 1 + \frac{3}{16} Re \right) \quad (2.24)$$

Tento model dovoluje vyšší Reynoldsova čísla, ale jeho interval validity není dostatečný pro použití v této práci. Dále budou uvedeny empirické modely, které dobře korelují s experimentálními daty. Jednoduchým empirickým modelem je Ingebo (1956) [4].

$$C_D = \frac{27}{Re^{0.84}} \quad (2.25)$$

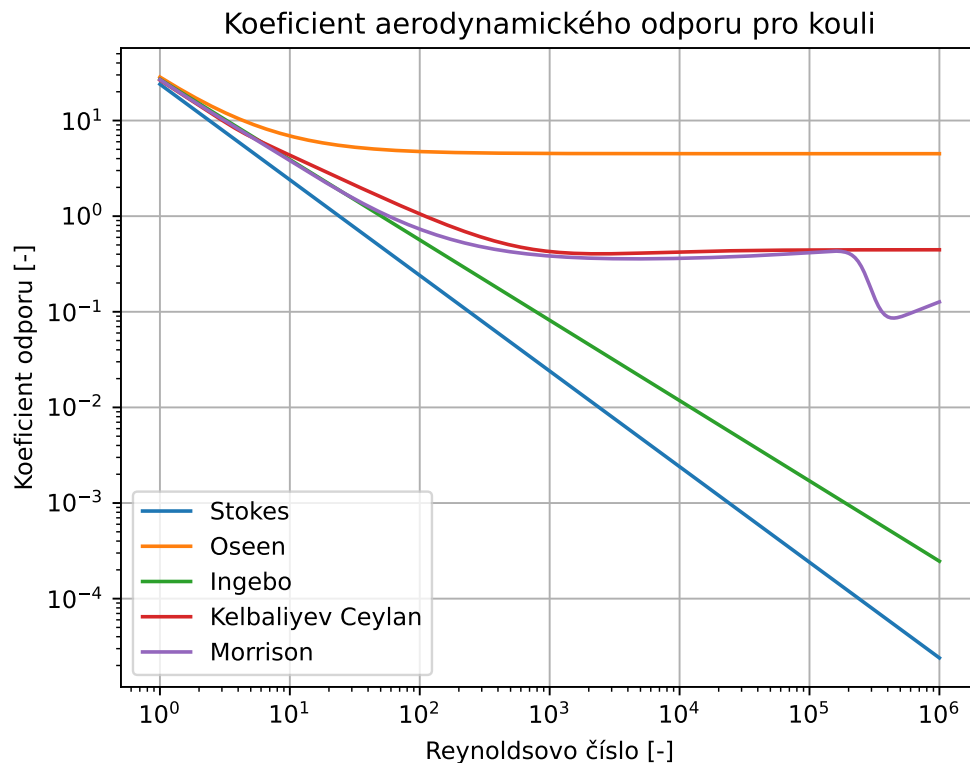
Kelbaliyev a Ceylan [2] navrhli model, který je validní do odtržení proudu. Toto odtržení u koule a válce způsobuje výrazný pokles koeficientu odporu.

$$C_D = \frac{24}{Re} \left[ 1 + 18.5 Re^{3.6} + \left( \frac{Re}{2} \right)^{1/30} \right] + \frac{4}{9} \frac{Re^{4/5}}{330 + Re^{4/5}} \quad (2.26)$$

Propracovanější model představuje Morrison (2016) [3]. Model je validní v intervalu  $Re \in (2, 10^6)$ .

$$C_D = \frac{24}{Re} + \frac{2.6 \left( \frac{Re}{5} \right)}{1 + \left( \frac{Re}{5} \right)^{1.52}} + \frac{0.411 \left( \frac{Re}{2.63 \cdot 10^5} \right)^{-7.94}}{1 + \left( \frac{Re}{2.63 \cdot 10^5} \right)^{-8}} + \frac{0.25 \left( \frac{Re}{10^6} \right)}{1 + \left( \frac{Re}{10^6} \right)} \quad (2.27)$$

Na rozdíl od ostatních je tento model schopný zachytit i náhlý pokles odporu vlivem odtržení proudění. Závislost koeficientu aerodynamického odporu na Reynoldsově čísle je pro různé modely vynesena na následujícím grafu.



Obr. 2.3: Koeficient aerodynamického odporu

Na obrázku 2.3 je vidět, že k popisu koeficientu odporu na velkém intervalu Reynoldsových čísel jsou vhodné modely rov. (2.26) a rov. (2.27). Ostatní modely jsou vhodnější pro nižší Reynoldsova čísla.

Je mnoho dalších efektů, které ovlivňují aerodynamický odpor na kapičku, například vliv zředění okolního média (Knudsenovo číslo) nebo vliv Machova čísla. Rotace kapičky má také vliv na odporový koeficient a způsobuje působení Magnusovy síly. Kapička v proudovém poli bude deformována a odporový koeficient se bude také měnit. Tato deformace může dokonce způsobit rozpad kapičky. Významný vliv má také odpařování z kapičky (Blowing effect). Podle [1] je v praxi použitelná korelace dle Eisenklam (1967) [5] definována následovně.

$$C_D = \frac{C_{D0}}{1 + B} \quad (2.28)$$

Kde B značí Spaldingovo číslo (Blowing number).

## 2.2.2 Výměna tepla

Výměna tepla je důležitý jev ovlivňující odpařování a pohyb kapiček. Transport energie může probíhat z plynné fáze do kapalně nebo naopak a je zprostředkován konvekcí, difuzí a radiací. Nejprve bude analyzován difuzivní přenos tepla mezi kapičkou v klidu a okolím. Jsou uvažovány jisté předpoklady, které ulehčí analytické řešení.

- Problém je sféricky symetrický a stacionární
- Je zanedbán konvektivní přenos  $\vec{u} = \vec{0}$
- Vlastnosti plynné fáze jsou konstantní
- Kapička je osamělá a teplota v kapičce je rovnoměrně rozložená

Transport energie v plynné fázi je vyjádřen ve sférických souřadnicích bez zjednodušujících předpokladů následovně.

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \rho c_p T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (2.29)$$

Aplikací zjednodušujících předpokladů je získána diferenciální rovnice popisující difuzivní transport energie v radiálním směru.

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \lambda \frac{dT}{dr} \right) = 0 \quad (2.30)$$

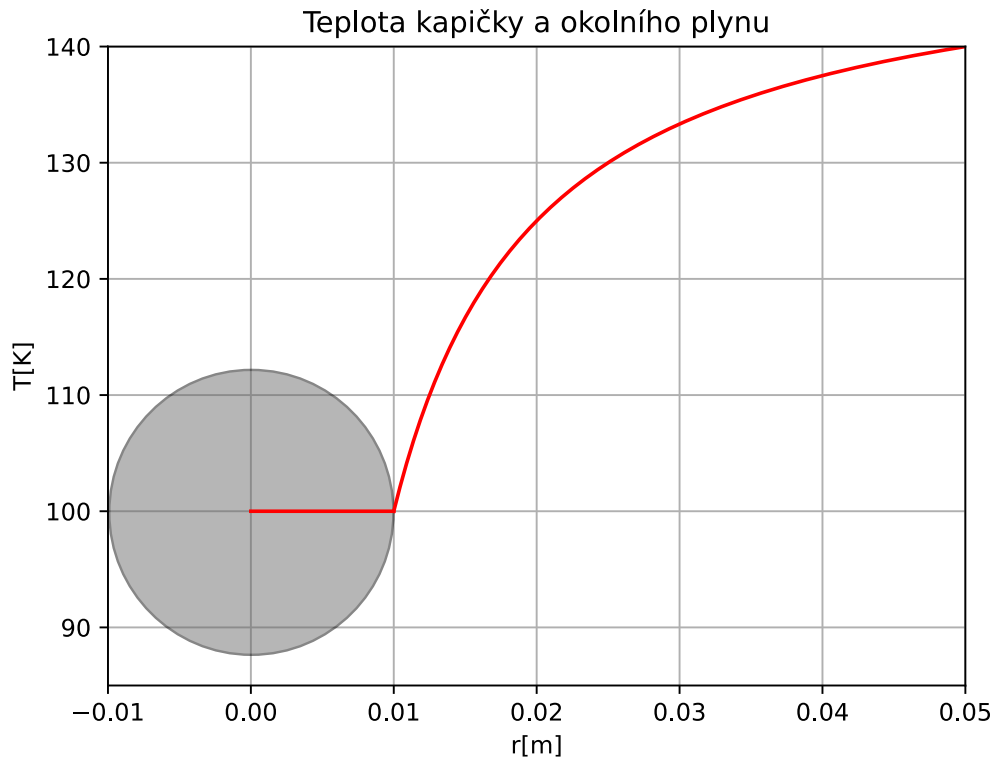
Tato rovnice může být přímo integrována a aplikací okrajových podmínek získáme rozložení teploty v plynné fázi.

$$T(r_d) = T_d \quad \lim_{r \rightarrow \infty} T(r) = T_\infty \quad (2.31)$$

$$T(r) = \frac{r_d}{r} (T_d - T_\infty) + T_\infty \quad (2.32)$$

Rozložení teploty v kapce a v okolním plynu je vyneseno na následujícím grafu 2.4 pro  $r_d = 0.01$ ,  $T_d = 100$  a  $T_\infty = 150$ .





Obr. 2.4: Teplota kapičky a okolního plynu

Tepelný tok hranicí mezi kapičkou a okolím lze vyjádřit jako.

$$\dot{Q} = 4\pi r_d^2 \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r_d} = 4\pi r_d \lambda (T_\infty - T_d) \quad (2.33)$$

Při tomto odvození nebyl uvažován vliv vzájemného pohybu kapičky a okolního plynu, také odpařování z kapičky nebylo uvažováno. Vliv konvektivního přenosu tepla je popsán Nusseltovým číslem. Tepelný tok přes hranici kapky lze poté vyjádřit jako.

$$\dot{Q} = 2\pi Nu r_d \lambda (T_\infty - T_d) \quad (2.34)$$

Pro případ nulové vzájemné rychlosti mezi kapičkou a okolím platí vztah rov. (2.33), aby tento přechod byl zachován i pro rov. (2.34), musí být Nusseltovo číslo pro čistě difuzivní přenos rovno  $Nu = 2$ . Pro vyjádření Nusseltova číslo je možné použít semiempirické korelace jako například Ranz-Marshallův vztah.

$$Nu = 2 + 0.6 Re_r^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.35)$$

### 2.2.3 Odpařování osamělé kapky

Pro modelování chování rozptýlené kapalně fáze existuje mnoho modelů různé složitosti. Cílem je popsat, jak dochází k přenosu energie a hmoty mezi kapkou a okolím. V pořadí rostoucí složitosti je možné dle [6] modely klasifikovat následovně.

- Konstantní teplota kapaliny (často teplota varu).
- Nekonečná tepelná vodivost kapaliny, teplota proměnná v čase.
- Sféricky symetrické zahřívání kapaliny.
- Model efektivní tepelné vodivosti kapaliny (korekce pro proudění v kapce).
- Model víru v kapce (popisuje proudění v kapce).
- Plné řešení Navier-Stokes rovnic.

#### Spaldingův model odpařování [7]

Tento model uvažuje směs dvou látek, kde jedna je v kapalně fázi a je transportována do druhé difuzí a konvekcí (Stefan flow). Takto formulovaný problém lze popsat následující soustavou parciálních diferenciálních rovnic.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \vec{u}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i)$$

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \rho c_p T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (2.36)$$

Rovnice v rov. (2.36) reprezentují zachování celkové hmoty, zachování i-té složky a zachování energie. Budou uvažovány zjednodušující předpoklady, které usnadní analytické řešení.

- Stacionární řešení
- Sféricky symetrický problém
- Vlastnosti plynné fáze jsou konstantní a jsou vyjádřeny pro  $T_{ref}$
- Kapička je osamělá a teplota v kapičce je rovnoměrně rozložená

Na základě těchto předpokladů lze rov. (2.36) vyjádřit jako.

$$\dot{m} = 4\pi r^2 \rho u_r = 4\pi r_s^2 \rho u_{r_s} = konst.$$

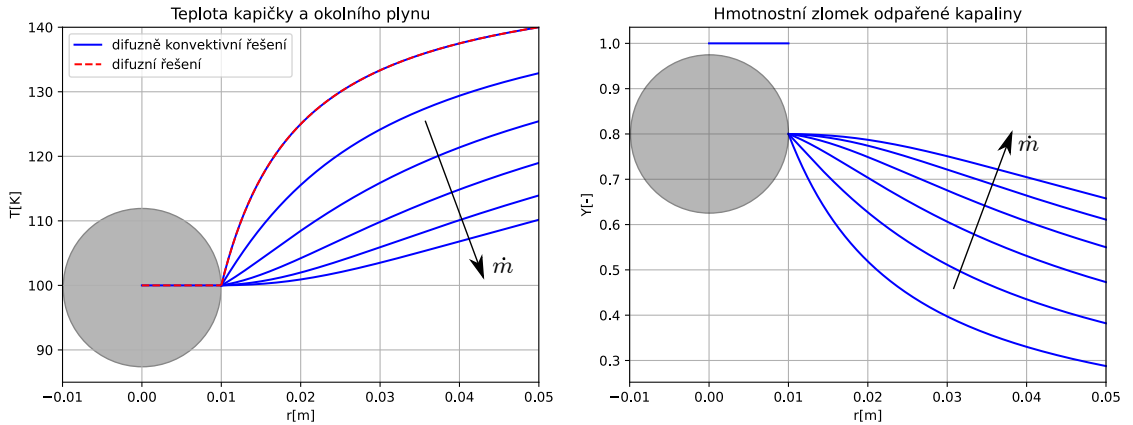
$$\rho u_r \frac{dY_i}{dr} = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \rho D \frac{dY_i}{dr} \right)$$

$$\rho u_r c_p \frac{dT}{dr} = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \lambda \frac{dT}{dr} \right) \quad (2.37)$$

Rovnice zachování celkové hmoty je zde použita pro zjednodušení konvektivních členů. Tyto rovnice lze analyticky vyřešit a získat průběhy teploty a koncentrace odpařené složky. Z těchto průběhů lze poté získat vyjádření hmotnostního toku z kapičky.

$$T(r) = \frac{T_d - T_\infty}{1 - e^{-\frac{\dot{m} c_p}{4\pi \lambda r_d}}} \left( 1 - e^{-\frac{\dot{m} c_p}{4\pi \lambda r}} \right) + T_\infty$$

$$Y(r) = \frac{Y_d - Y_\infty}{1 - e^{-\frac{\dot{m}}{4\pi \rho D r_d}}} \left( 1 - e^{-\frac{\dot{m}}{4\pi \rho D r}} \right) + Y_\infty \quad (2.38)$$



Obr. 2.5: Průběhy teploty a hmotnostního zlomku pro odpařování z kapičky

Hmotnostní tok z kapičky lze vyjádřit jako součet konvektivního a difuzního toku na hranici kapičky.

$$\dot{m} = 4\pi r_d^2 \rho u_{r_d} = 4\pi r_d^2 \left( \rho u_{r_d} Y_d - \rho D \frac{dY}{dr} \Big|_{r_d} \right) \quad (2.39)$$

Po dosazení derivace rov. (2.38) lze vyjádřit hmotnostní tok následovně.

$$\dot{m} = -4\pi r_d D \rho \ln(B_M + 1), \quad B_M = \frac{Y_s - Y_\infty}{1 - Y_s} \quad (2.40)$$

Hmotnostní tok lze za předpokladu  $T_d = T_b$ , že teplota kapičky je rovná teplotě varu tekutiny, vyjádřit z tepelného toku do kapičky.

$$\dot{Q} = -4\pi r_d^2 \lambda \left. \frac{dT}{dr} \right|_{r_d} = \dot{m} h_{vap} \quad (2.41)$$

Pravá strana rovnice vyjadřuje, že tepelný tok vstupující do kapky je využit plně na odpaření hmoty.

$$\dot{m} = -\frac{4\pi \lambda r_d}{c_p} \ln(B_T + 1), \quad B_T = \frac{c_p(T_\infty - T_d)}{h_{vap}} \quad (2.42)$$

Konstanta  $B_M$  je Spaldingovo hmotnostní číslo a  $B_T$  je Spaldingovo teplotní číslo. Je možné uvažovat teplotu kapalné fáze menší než teplotu varu a použít stejný přístup jako pro rov. (2.42), Spaldingovo teplotní číslo poté má tvar.

$$B_T = \frac{c_p(T_\infty - T_b)}{h_{vap} + c_l(T_b - T_d)} \quad (2.43)$$

### Empirické korelace

Vztahy rov. (2.40) a rov. (2.42) nerespektují vzájemný pohyb kapky a okolního plynu. Dalším možným přístupem je popis hmotnostního a tepelného toku za pomoci podobnostních čísel a jejich korelací pro daný případ. Sherwoodovo a Nusseltovo popisují poměr konvektivního a difuzivního přenosu hmoty a tepla.

$$Sh = \frac{h_m L}{D}, \quad Nu = \frac{h_T L}{\lambda} \quad (2.44)$$

Zde  $h_m$  je koeficient přestupu hmoty,  $h_T$  koeficient přestupu tepla,  $D$  je difuzivita a  $\lambda$  je koeficient tepelné vodivosti.  $L$  je charakteristický rozměr, pro kapky  $L = 2r_d$ . Tepelný tok je možné vyjádřit pomocí vztahu rov. (2.34). Hmotnostní tok je vyjádřen díky analogii mezi přenosem tepla a hmoty.

$$\dot{m} = 2\pi r_d Sh D \rho (Y_\infty - Y_d) \quad (2.45)$$

$$\dot{Q} = 2\pi r_d Nu \lambda (T_\infty - T_d) \quad (2.46)$$

Korelace pro Sherwoodovo a Nusseltovo číslo jsou formulovány dle [8], aby popsaly vliv proudění okolo kapky a efekty toku z kapky. Některé korelace jsou uvedeny.

$$Nu = \frac{2 + 0.57Re^{1/2}Pr^{1/3}}{(1 + B_f)^{0.7}}$$

$$B_f = \frac{c_p(T_\infty - T_d)}{h_{vap}} \left( 1 - \frac{|\dot{q}_d|}{|\dot{q}_c|} \right) \quad (2.47)$$

Zde  $|\dot{q}_d|$  je tepelný tok přivedený na ohřátí kapky a  $|\dot{q}_c|$  je celkový tepelný tok přivedený konvekcí.

$$Sh = \frac{2 + 0.87Re^{1/2}Sc^{1/3}}{(1 + B_M)^{0.7}} \quad (2.48)$$

Parametr  $B_M$  je již uvedené Spaldingovo hmotnostní číslo.

### Stav na rozhraní kapalně a plynné fáze

Při analýze přenosu hmoty mezi kapkou a okolím byly aplikovány okrajové podmínky pro hmotnostní zlomky ve formě známých hodnot. Hmotnostní zlomek ve volném proudě vychází z řešení rovnic transportu hmoty, ale hmotnostní zlomek na rozhraní kapky a plynu musí být nalezen jinak. Tato hodnota vychází z fázové rovnováhy mezi kapalnou a plynnou fází. Tento vztah je možné popsat Clausius-Clapeyronovou rovnicí.

$$\frac{dp_A}{dT} = \frac{\Delta H}{T\Delta V} \quad (2.49)$$

Zde  $p_A$  je parciální tlak par složky A,  $\Delta H$  je molární výparná entalpie,  $R_u$  je univerzální plynová konstanta a  $\Delta V$  je rozdíl molárního objemu obou fází. Clausius-Clapeyronovou rovnici lze v této formě upravit za předpokladu výrazně menšího molárního objemu kapalně fáze  $V_{gas} \gg V_{liq}$  a za předpokladu ideálního chování páry. Za těchto předpokladů získáme následující rovnici.

$$\frac{d \ln(p_A)}{dT} = \frac{\Delta H}{R_u T} \quad (2.50)$$

Pokud je výparná entalpie považována za konstantní, rov. (2.50) je integrována a získáme.

$$\ln \frac{p_A}{p_{ref}} = \frac{\Delta H}{R_u} \left( \frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_d} \right) \quad (2.51)$$

Integrační konstanta zde vystupuje ve formě  $p_{ref}$  a  $T_{ref}$ . Tyto hodnoty jsou voleny například jako atmosferický tlak a teplota varu za atmosferického tlaku. Hledaný hmotnostní zlomek je možné vyjádřit za pomoci Daltonova zákona.

$$\frac{p_A}{p} = Y_A \frac{\bar{M}}{M_A} \quad (2.52)$$

Zde,  $p$  je tlak směsi,  $\bar{M}$  je molární hmotnost směsi a  $M_A$  je molární hmotnost odpařované látky. Na základě uvedených vztahů lze hmotnostní zlomek páry na povrchu kapičky zapsat následovně.

$$Y_A = \frac{M_A p_{ref}}{\bar{M} p} e^{\frac{\Delta H}{R_u} \left( \frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_d} \right)} \quad (2.53)$$

Při řešení této rovnice je nutné zohlednit, že na výpočet  $\bar{M}$  je třeba znát hmotnostní zlomky všech přítomných složek. Molární hmotnost směsi bude definována v následujících kapitolách.

## 2.2.4 Odpařování při varu

Pokud by přenos tepla byl formulován jako v předchozí sekci, bylo by možné dosáhnout teploty vyšší než je teplota varu. To není v kontextu této práce možné. Přesný popis tohoto problému by vyžadoval řešení teplotního rozložení uvnitř kapičky [16], takové řešení by dovolovalo rozlišit rychlé nebo pomalé zahřívání a jeho vliv na odpar z kapičky. Protože cílem této práce je vytvořit zjednodušený model, bude tento vliv varu aproximován. Bude zaveden koeficient reprezentující vliv varu kapičky.

$$\phi = \frac{|\dot{q}_e|}{|\dot{q}_c|} \quad (2.54)$$

Zde  $\dot{q}_e$  je tepelný tok na odpaření kapičky a  $\dot{q}_c$  je tepelný tok na ohřev. První jednoduchou možností je volit  $\phi$  pouze na základě teploty kapky a teploty varu kapičky.

$$\phi = \begin{cases} 0 & T_d < T_b \\ 1 & T_d \geq T_b \end{cases} \quad (2.55)$$

Zde  $T_b$  je teplota varu kapičky. Tento přístup se neosvědčil a při numerickém výpočtu způsoboval oscilace v teplotě kapičky. Dalším krokem byla lineární aproximace skokové změny  $\phi$ .

$$\phi = \begin{cases} 0 & T_d < T_{low} \\ \frac{T_d - T_{low}}{T_b - T_{low}} & T_{low} \leq T_d < T_b \\ 1 & T_d \geq T_b \end{cases} \quad (2.56)$$

V tomto případě byla zavedena další teplota  $T_{low}$ , která představuje dolní limit vlivu varu. Teplota  $T_{low}$  byla volena co nejbližší  $T_b$  tak, aby oscilace v řešení byly tlumeny. Tento přístup se ukázal jako efektivní. Tato aproximace není hladká, proto byl navržen přechod pomocí polynomu třetího řádu.

$$\phi = \begin{cases} 0 & T_d < T_b \\ aT^3 + bT^2 + cT + d & T_{low} \leq T_d < T_b \\ 1 & T_d \geq T_b \end{cases} \quad (2.57)$$

Koeficienty a, b, c, d byly vypočteny na základě  $C^1(< T_{low}, T_b >)$  napojení. Tento přístup utlumil efektivně oscilace, a proto byl použit v následujících výpočtech.

## 2.3 Chemické reakce

Modelování chemických reakcí je důležité z hlediska změny složení a následné změny vlastností látek. V této práci je popisován proces spalování, což je chemická reakce, kdy palivo reaguje s okysličovadlem za vzniku produktů. Tento proces doprovází vznik tepla, a tak i růst teploty spalin. Reakce probíhají jistou rychlostí. V chemii je tato rychlost popsána rychlostní konstantou k. Tato rychlostní konstanta je popsána Arrheniovým zákonem ve tvaru.

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (2.58)$$

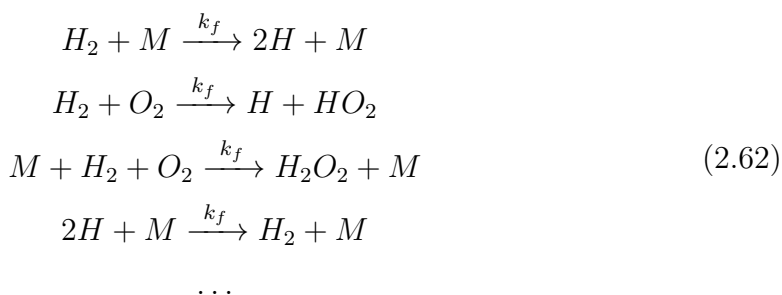
Kde  $E_a$  je aktivační energie, A je frekvenční faktor, R je plynová konstanta a T je termodynamická teplota. Změna koncentrace v čase závisí na rychlostní konstantě, koncentraci reaktantů a řádu samotné reakce. Například pro reakci.



Pro tuto reakci druhého řádu lze změnu molární koncentrace  $C_A$  a  $C_B$  zapsat následovně.

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{dC_B}{dt} = -k_f C_A C_B \quad (2.60)$$

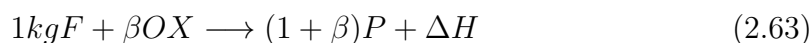
Výše uvedená reakce je takzvanou jedнокrokovou reakcí, ovšem reakce při spalování jsou takzvaně vícekové. Například reakce kyslíku a vodíku je popsána následující rovnicí rov. (2.61), ale reálná reakce je souborem mnoha jedнокrokových reakcí, které dohromady tvoří reakční systém.



Rovnice v rov. (2.62) jsou částí modelu [9], který obsahuje celkem 72 rovnic a 9 chemických složek. Pokud by byl uvažován celý systém reakcí, musela by být řešena soustava 9 nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic. Rovnice tohoto typu často vykazují stiff chování, které komplikuje jejich numerické řešení.

### 2.3.1 Model nekonečně rychlé chemie

Jak již bylo uvedeno, numerické řešení chemických reakcí pro komplikovanější reakční systém může být numericky náročné. Proto v této práci bude kinetika chemických reakcí zanedbána a reakce budou považovány za nekonečně rychlé. Toto zjednodušení je založeno na úvaze, že charakteristická rychlost chemických reakcí je mnohem vyšší než charakteristická rychlost dalších jevů, například odpařování či proudění. Reakční systém bude aproximován jedнокrokovou reakcí zjednodušující mnoho chemických složek na 3 (palivo, okysličovadlo a produkty). Reakční rovnice je vyjádřena v hmotnostní formě,  $\Delta H$  značí zdroj tepla při reakci.





Dále je zaveden poměr, který vyjadřuje kolik oksličovadla je třeba na spálení 1 kg paliva. Tento poměr může vyjadřovat stechiometrický.

$$\beta = \frac{m_{OX}}{m_F} \quad (2.64)$$

Množství zreagovaného paliva se odvíjí od dostupného oksličovadla k reakci, množství oksličovadla je poté úměrné množství spáleného paliva.

$$\begin{aligned} \Delta m_F &= \min \left( m_F, \frac{m_{OX}}{\beta} \right) \\ \Delta m_{OX} &= \beta \Delta m_F \end{aligned} \quad (2.65)$$

## 2.4 Vlastnosti směsi

Zmíněné složky paliva, oksličovadla a produktů jsou ve skutečnosti směsi dalších látek a jejich fyzikální vlastnosti musí být definovány. Složení paliva, oksličovadla a produktů také musí být definováno. Palivo a oksličovadlo jsou za nízkých teplot stabilní, ale při zvýšené teplotě dochází k rozkladu a změně složení. Tato změna má za následek změnu fyzikálního chování např. tepelné kapacity. K výpočtu rovnovážného složení a fyzikálních vlastností byla využita knihovna Cantera [10].

Entalpie, tepelná kapacita, isoentropický exponent a specifická plynová konstanta jsou vypočteny následovně pomocí hmotnostního zlomku paliva, oksličovadla a produktů.

$$\begin{aligned} h(T) &= \sum_i Y_i h_i(T), \quad i = F, OX, P \\ c_p(T) &= \sum_i Y_i c_{pi}(T) \\ \kappa &= \sum_i Y_i \kappa_i \\ r &= \sum_i Y_i r_i \end{aligned} \quad (2.66)$$

Tepelná vodivost a viskozita pro směs jsou definovány jako vážený průměr pomocí molárních zlomků.

$$\begin{aligned} \lambda(T) &= \sum_i X_i \lambda_i(T), \quad i = F, OX, P \\ \mu(T) &= \sum_i Y_i \mu_i(T) \end{aligned} \quad (2.67)$$

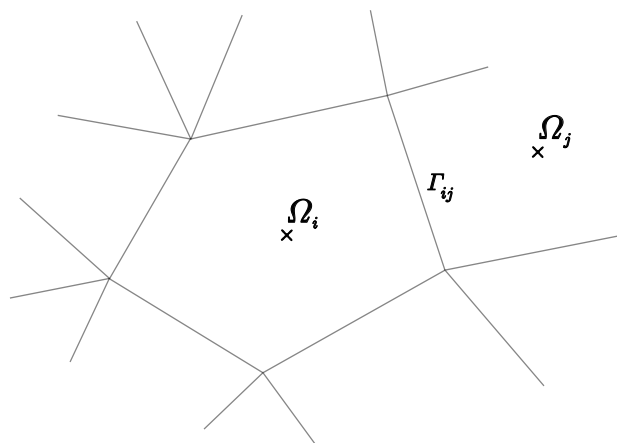
Tepelná vodivost a viskozita složek byla opět získána pomocí knihovny Cantera, jisté nedostupné sločeniny byly doplněny pomocí online databáze NIST [12]. Zde použité modely pro směsi jsou velice jednoduché, pro přesnější popis je možné využít [11].

# Numerické řešení

Tato kapitola bude věnována numerickým metodám použitým k řešení problému proudění popsanému v první a druhé kapitole.

## 3.1 Metoda konečných objemů

Metoda konečných objemů je založena na rozdělení výpočetní oblasti na suboblasti (konečné objemy), přes které jsou poté integrovány zákony zachování. To umožňuje převést původní parciální diferenciální rovnici na soustavu algebraických rovnic.



Obr. 3.1: Oblast diskretizována na konečné objemy

Oblast řešení  $G$  je rozdělena na konečný počet podoblastí  $\Omega_i$  (konečný objem). Jejich tvar je volen tak, aby  $G = \bigcup_i \Omega_i$ , tj. aby  $G$  bylo pokryto. Konečné objemy jsou obvykle voleny jako mnohostěny. Vzájemné průniky konečných objemů splňují následující.

$$\Omega_i \cap \Omega_j = \begin{cases} \text{stěna, } \Gamma_{ij}, & j \in \mathcal{N}_i \\ \text{hrana, } e \\ \text{bod, } x \\ \emptyset \end{cases} \quad (3.1)$$

Každému konečnému objemu je přiřazeno těžiště, velikost, seznam indexů stěn  $\mathcal{S}$  a seznam indexů sousedních objemů (buněk)  $\mathcal{N}$ . Hranice oblasti  $G$  musí být po částech lineární, aby byla aproximovatelná množinou konečných objemů. To ovšem není často možné.

Metoda konečných objemů bude ukázána na nehomogenní skalární rovnici, která může popisovat nelineární transport se zdrojovým členem. Problém je řešen na  $G \subset \mathbb{E}^3$  s p. č. hladkou hranicí.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{f}(u) = q \quad (3.2)$$

Rovnice rov. (3.2) je integrována po  $\Omega_i$  s hranicí  $\partial\Omega_i = \bigcup_{j \in \mathcal{N}_i} (\Gamma_{ij})$ , kde  $\mathcal{N}_i$  je množina indexů sousedních buněk.

$$\iiint_{\Omega_i} \left[ \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{f}(u) \right] d\Omega = \iiint_{\Omega_i} q d\Omega \quad (3.3)$$

Na tento výraz je aplikována Gaussova věta a věta o střední hodnotě, dále je uvažováno, že oblast  $\Omega$  se nemění v čase. V opačném případě by bylo třeba aplikovat Leibnitzovo integrální pravidlo.

**Věta 1 (Gauss Ostrogradského)** *Nechť funkce  $\vec{f} = (U, V, W)$  má spojité všechny parciální derivace v oblasti  $G \subset \mathbb{E}^3$ ,  $Q \subset G$  je uzavřená, jednoduchá a po částech hladká plocha orientovaná jednotkovým vektorem vnější normály. Potom platí.*

$$\iiint_Q \nabla \cdot \vec{f} dV = \iint_{\partial Q} \vec{f} \cdot \vec{n} dS \quad (3.4)$$

*Pro opačně orientovanou plochu by přibýlo znaménko mínus.*

Po aplikaci získáme.

$$\mu(\Omega_i) \frac{d}{dt} (\bar{u}_i) + \iint_{\partial\Omega_i} \vec{f} \cdot \vec{n} dS = \mu(\Omega_i) \bar{q}_i$$

Jak již bylo uvedeno, konečné objemy jsou mnohostěny. Proto lze plošný integrál dále upravit.

$$\mu(\Omega_i) \frac{d}{dt}(\bar{u}_i) + \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \oint_{\Gamma_{ij}} \vec{f} \cdot \vec{n} dS = \mu(\Omega_i) \bar{q}_i$$

Argument plošného integrálu vyjadřující elementární tok přes hranici konečného objemu je nahrazen numerickou aproximací  $\mathcal{F}(\bar{u}_i, \bar{u}_j)$ . Poté lze vyjádřit problém v semidiskrétní formě.

$$\frac{d}{dt}(\bar{u}_i) = \frac{-1}{\mu(\Omega_i)} \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \mathcal{F}(\bar{u}_i, \bar{u}_j) |\Gamma_{ij}| + \bar{q}_i \quad (3.5)$$

Získáváme soustavu obyčejných diferenciálních rovnic, které lze řešit už běžnou metodou např. pomocí Eulerova explicitního schématu.

### 3.1.1 Aplikace metody konečných objemů

Metoda konečných objemů bude použita pro jednorozměrný problém definovaný v 1.1.4. Výpočetní oblast je rotačně symetrická a diskretizace je provedena v axiálním směru. Každému konečnému objemu je přiřazen jeho střed, velikost stěn a objem. Na rozdíl od předchozí ukázky metody konečných objemů, zde není řešena skalární rovnice. Řešený systém rovnic byl uveden v 1.5, a nyní bude použit ve vektorové formě, je zavedeno.

$$\begin{aligned} \vec{W} &= [\bar{\rho}, Y_1 \bar{\rho} \dots, \bar{\rho} u, \bar{\rho} e, \chi, N, \chi u_d, \chi e_d \dots]^T \\ \vec{F} &= [\bar{\rho} u, Y_1 \bar{\rho} u \dots, \bar{\rho} u^2 + p, (\bar{\rho} e + p) u, \chi u_d, N u_d, \chi u_d^2, \chi e_d u_d \dots]^T \\ \vec{Q} &= [\Gamma_m, \Gamma_{Y_1} \dots, p S'(x) + \Gamma_{\rho u}, \Gamma_e, \Gamma_\chi, \Gamma_N, \Gamma_{\chi u}, \Gamma_{\chi e} \dots]^T \end{aligned} \quad (3.6)$$

Řešený problém lze za pomoci rov. (3.6) formulovat následovně.

$$\frac{\partial S(x) \vec{W}}{\partial t} + \frac{\partial S(x) \vec{F}(\vec{W})}{\partial x} = \vec{Q} \quad (3.7)$$

Tuto rovnici je nyní možné integrovat po konečném objemu, který je v popisu jednorozměrné úlohy pouze interval  $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ .

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ \frac{\partial S(x) \vec{W}}{\partial t} + \frac{\partial S(x) \vec{F}(\vec{W})}{\partial x} - \vec{Q} \right] dx = 0 \quad (3.8)$$

Je aplikována integrace per partes na člen s prostorovou derivací a je zaměněno pořadí časové derivace a integrálu.

$$\frac{d}{dt} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S(x) \vec{W} dx + (S(x) \vec{F}(\vec{W}))_{x_{i+1/2}} - (S(x) \vec{F}(\vec{W}))_{x_{i-1/2}} = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \vec{Q} dx \quad (3.9)$$

Integrály jsou vyjádřeny za pomoci věty o střední hodnotě a střední hodnota je aproximována hodnotou v těžišti konečného objemu.

$$\frac{d}{dt} (\vec{W})_i = \frac{-1}{S(x_i)(x_{i+1/2} - x_{i-1/2})} [(S\vec{F})_{x_{i+1/2}} - (S\vec{F})_{x_{i-1/2}}] + (\vec{Q})_i \quad (3.10)$$

Výsledek je analogický s obecnou formulací metody konečných objemů, což dává smysl. Formulace numerického toku je zde také stejná. Tato semidiskrétní forma je dále řešena za pomoci metod pro obyčejné diferenciální rovnice.

## 3.2 Numerické toky

V předchozí kapitole byl zaveden numerický tok na hranici konečného objemu. Numerický tok je aproximací exaktního na hranici a závisí na hodnotách v obou objemech.

$$f(u)|_{i+1/2} \approx \mathcal{F}(u_{i+1}, u_i) \quad (3.11)$$

Numerický tok je zaveden, protože při řešení jsou známy pouze hodnoty ve středech objemů a nikoli v celé oblasti. Po numerickém toku vyžadujeme jisté vlastnosti, aby byla zaručena konvergence numerické aproximace k exaktnímu řešení.

**Definice 1 (Konzistence numerického toku)** Řekneme, že numerický tok  $\mathcal{F} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  je konzistentní s tokem  $f$  právě tehdy, když je  $f$  Lipschitzovsky spojitá a  $\mathcal{F}(\bar{u}, \bar{u}) = f(\bar{u})$ . Tedy když  $\exists K > 0$  takové, že  $\forall u, v, \bar{u} \in \mathbb{R}$  a platí.

$$|\mathcal{F}(u, v) - f(\bar{u})| \leq K \max(|u - \bar{u}|, |v - \bar{u}|) \quad (3.12)$$

### 3.2.1 Lax Friedrichs

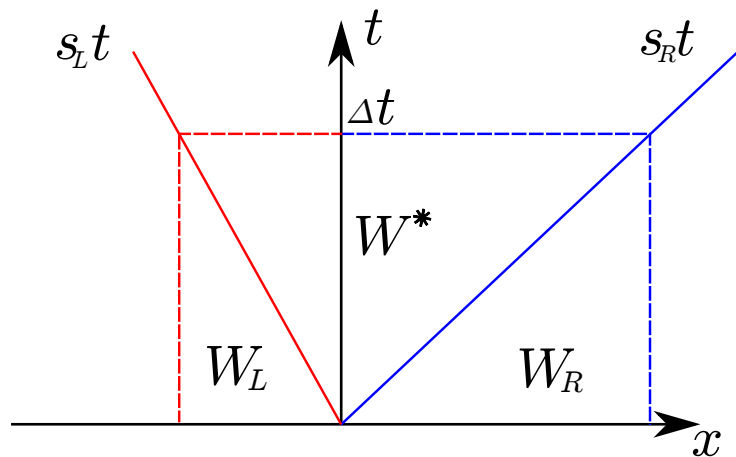
První zjevnou možností, jak získat hodnotu toku na hranici, je použít střední hodnotu mezi středy objemů. Tento postup vede na centrální schéma, které je nestabilní. Centrální schéma je možné upravit přidáním umělé vazkosti ve tvaru druhé derivace, a tím je získáno stabilní schéma.

$$\mathcal{F}(W_L, W_R) = \frac{1}{2}(\mathcal{F}_R + \mathcal{F}_L) - \varepsilon \frac{\Delta x}{2\Delta t}(W_R - W_L) \quad (3.13)$$

Lax Friedrichsovo schéma je v této formě modifikováno pomocí koeficientu  $\varepsilon \in \langle 0, 1 \rangle$ , který dovoluje upravit vliv druhé derivace. Toto schéma je pouze prvního řádu a vnáší do řešení chybu vlivem numerické vazkosti.

### 3.2.2 HLL

Dalším jednoduchým schématem je Harten Lax van Leerovo (HLL) schéma. Toto jednoduché schéma vychází z aproximace řešení Riemannova problému s jedním mezistavem. V čase nula jsou oblasti  $W_R$  a  $W_L$  odděleny nespojitostí, která se vyvíjí v čase vznikem mezistavu  $W^*$ . Rychlost šíření rozruchu od místa nespojitosti je charakterizována rychlostí  $s_r$  směrem vpravo a  $s_l$  vlevo. Oblast časoprostoru vyjadřující šíření informace od bodu nespojitosti je na následujícím obrázku pro  $s_R > 0$ ,  $s_L < 0$ .



Obr. 3.2: Oblast integrace HLL schématu

Numerický tok je definován v závislosti na znaménku  $s_R$  a  $s_L$ . Numerický tok pro 3 různé konfigurace je v rov. (3.14).

$$\mathcal{F}(W_L, W_R) = \begin{cases} F(W_L) & s_L \geq 0 \\ \frac{s_R F(W_L) - s_L F(W_R) + s_R s_L (W_R - W_L)}{s_R - s_L} & s_L < 0 \leq s_R \\ F(W_R) & s_R < 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

Schéma pro krajní případy, kdy polopřímky  $s_R t$  a  $s_L t$  směřují do stejného kvadrantu přechází na jednoduché upwind schéma. Rychlosti šíření  $s_R$  a  $s_L$  lze vyjádřit za pomoci vlastních čísel jakobiánů toků.

$$\begin{aligned} s_L &= \min(u_L - c_L, u_R - c_R) \\ s_R &= \max(u_L + c_L, u_R + c_R) \end{aligned} \quad (3.15)$$

HLL schéma existuje v dalších variantách, jako například HLLC, které uvažuje dva mezistavy.

### 3.2.3 Kurganov Tadmoro

Kurganov Tadmorovo schéma je schéma centrálního charakteru a stejně jako Lax Friedrichsovo je stabilizováno přidáním numerické viskozity. Vliv numerické viskozity je pro toto schéma menší díky volbě koeficientu  $a$ .

$$\mathcal{F}(W_L, W_R) = \frac{F(W_R) + F(W_L)}{2} - \frac{a}{2}(W_R - W_L) \quad (3.16)$$

Schéma používá hodnoty na levé a pravé straně od hranice. Pokud se jedná o metodu prvního řádu, jsou použity přímo hodnoty ve středech buňek. Pro druhý řád přesnosti jsou použity zrekonstruované hodnoty na rozhraní. Člen  $a$  je definován na základě nejvyšší lokální rychlosti. Dle práce v [13] je tento koeficient definován následovně.

$$a = \max \left[ \rho \left( \frac{\partial F}{\partial W}(W_L) \right), \rho \left( \frac{\partial F}{\partial W}(W_R) \right) \right] \quad (3.17)$$

Zde  $\rho$  je spektrální poloměr. Derivace toku podle proměnné systému vyjadřuje jakobián toku. Pro Eulerovy rovnice lze tento vztah vyjádřit následovně.

$$a = \max(\max(|u_L + c_L|, |u_L - c_L|), \max(|u_R + c_R|, |u_R - c_R|)) \quad (3.18)$$



### 3.2.4 AUSM

Advective Upstream Splitting Method pracuje na základě rozdělení toku na konvektivní a tlakovou část, které jsou poté uchopeny zvlášť.

$$F(W) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ \rho e u \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ p \\ 0 \end{bmatrix} = F_C(W) + F_p(W) \quad (3.19)$$

$F_p$  značí tlakovou a  $F_C$  konvektivní část toku. Všechny prvky vektoru konvektivního toku mají společný člen  $u$ , pokud je  $u$  vyjádřeno na základě rychlosti zvuku a Machova čísla.

$$F_C(W) = cM \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

Definice Machova čísla je pozměněna tak, aby dovolovala záporné hodnoty. To znamená, že Machovo číslo vyjadřuje i směr proudění. Pro konvektivní tok je použita metoda upwind na základě znaménka Machova čísla.

$$F_C = \begin{cases} c_i M_{i+1/2} [\rho, \rho u, \rho e]_i^T & M_{i+1/2} > 0 \\ c_{i+1} M_{i+1/2} [\rho, \rho u, \rho e]_{i+1}^T & M_{i+1/2} \leq 0 \end{cases} \quad (3.21)$$

Machovo číslo na rozhraní je vypočteno na základě okolních hodnot.

$$M_{i+1/2} = \mathcal{M}^+(M_i) + \mathcal{M}^-(M_{i+1}) \quad (3.22)$$

Interpolační funkce  $\mathcal{M}^\pm$  lze definovat různě, jedna z možností je následující.

$$\mathcal{M}^+(M) = \begin{cases} 0 & M < -1 \\ \frac{1}{4}(M+1)^2 & M \in \langle -1, 1 \rangle \\ M & M > 1 \end{cases} \quad (3.23)$$

$$\mathcal{M}^-(M) = \begin{cases} M & M < -1 \\ -\frac{1}{4}(M-1)^2 & M \in \langle -1, 1 \rangle \\ 0 & M > 1 \end{cases} \quad (3.24)$$

Tlak na rozhraní je definován obdobně. Jsou zavedeny interpolační funkce  $\mathcal{P}^\pm$ .

$$p_{i+1/2}(M, p) = \mathcal{P}^+(M_i)p_i + \mathcal{P}^-(M_{i+1})p_{i+1} \quad (3.25)$$

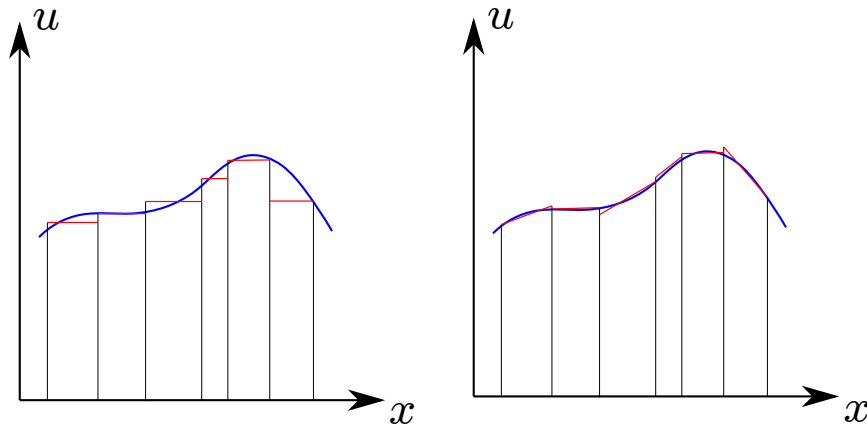
$$\mathcal{P}^+(M) = \begin{cases} 0 & M < -1 \\ \frac{1}{4}(M+1)^2(2-M) & M \in \langle -1, 1 \rangle \\ 1 & M > 1 \end{cases} \quad (3.26)$$

$$\mathcal{P}^-(M) = \begin{cases} 1 & M < -1 \\ \frac{1}{4}(M-1)^2(2+M) & M \in \langle -1, 1 \rangle \\ 0 & M > 1 \end{cases} \quad (3.27)$$

Tlaková část toku na hranici je dána pouze tlakem  $p_{i+1/2}$ . Poté, co jsou oba toky vypočteny a sečteny, je získán finální numerický tok, který lze aplikovat při řešení. AUSM existuje v mnoha formulacích např. AUSM+ nebo AUSM+up, tyto metody řeší jisté problémy AUSM schématu, jako jsou třeba oscilace při nízké rychlosti.

### 3.2.5 Lineární rekonstrukce

Při použití metody konečných objemů byl uvažován konstantní průběh veličiny po objemu. Rekonstrukce dovoluje průběh veličiny popsat v tomto případě jako lineární funkci, což dává lepší odhad hodnot na hranici buněk respektující průběh veličiny.



Obr. 3.3: Konstantní průběh po objemu a lineárně rekonstruovaný průběh

Při použití rekonstruovaných hodnot ve vyjádření numerického toku je použita dvojice hodnot  $(W_i^+, W_{i+1}^-)$  namísto  $(W_i, W_{i+1})$ . Znaménko + představuje rekonstruovanou hodnotu v pravé části objemu a - v levé. Obecně lze hodnotu po objemu definovat následovně.

$$u_i(x) = u_i + \nabla u \cdot (\vec{x} - \vec{x}_i) \quad (3.28)$$

Otázkou zůstává, jak rekonstruované hodnoty získat. Pokud je uvažována lineární rekonstrukce, je třeba najít gradient veličiny v konečném objemu. Přístupů je více, je možné použít například Gauss-Ostrogradského větu nebo metodu nejmenších čtverců. V případě jednorozměrného problému lze postupovat jednodušším způsobem. Pro výpočet derivace hledané veličiny  $u$  je možné použít dopřednou, zpětnou nebo centrální formuli.

$$\begin{aligned} u' &= \frac{u_{i+1} - u_i}{h} && \text{dopředná} \\ u' &= \frac{u_i - u_{i-1}}{h} && \text{zpětná} \\ u' &= \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} && \text{centrální} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Zde  $h$  označuje vzdálenost mezi středy sousedních objemů. Tyto vztahy platí pouze pro rovnoměrnou síť. Pro jednorozměrný problém je zavedena rekonstruovaná veličina analogicky k rov. (3.28).

$$u_i(x) = u_i + u'_i(x - x_i) \quad (3.30)$$

Stavy na hranici konečného objemu lze vyjádřit následovně.

$$\begin{aligned} u_{i+1/2}^- &= u_i + u'_i(x_{i+1/2} - x_i) \\ u_{i-1/2}^+ &= u_i + u'_i(x_{i-1/2} - x_i) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Pokud by tyto zrekonstruované hodnoty byly použity při výpočtu, řešení by pravděpodobně selhalo. Problémem je, že rekonstrukce může vyvolat oscilace, které povedou k selhání numerické metody. Tento problém je možné vyřešit použitím limiterů.

### 3.2.6 Slope limitery

Slope limiter jak název napovídá je způsob, jak omezit vliv rekonstrukce (velikost derivace/gradientu v objemu) na základě určitých podmínek. Příbuzným termínem je flux limiter (limiter toku), který dovoluje "přepínat" mezi schémata vyššího a nižšího řádu. Dovoluje získat přesnost v místech, kde je možné použít metodu vyššího řádu a robustnost schématu nižšího řádu v problematických místech (nespojivosti).

Pro metodu konečných objemů je slope limiting přirozenější a dle práce [14] jsou si s flux limitingem ekvivalentní, díky tomu lze limity přeformulovat do slope formy. Této problematice je věnována práce [15]. Zde bude uvedeno jen několik jednoduchých limiterů.

$$\begin{aligned}
 \phi_{min} &= \min \left( \frac{2}{R+1}, \frac{2R}{R+1} \right) \\
 \phi_{VA} &= \frac{2R}{R^2+1} \\
 \phi_{VL} &= \frac{4R}{(R+1)^2} \\
 \phi_{BJ} &= \min \left( 1, \frac{4}{R+1}, \frac{4R}{R+1} \right)
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Proměnná  $R$  vyjadřuje podíl dopředné ku zpětné diferenci.

$$R = \frac{u_{i+1} - u_i}{u_i - u_{i-1}} \tag{3.33}$$

Rekonstruovaný limitovaný průběh veličiny  $u$  lze vyjádřit následovně.

$$u_i(x) = u_i + \phi u'(x - x_i) \tag{3.34}$$

Takto upravená formulace už lze použít při numerickém výpočtu, ale jistá opatření jsou při řešení občas potřeba jako třeba snížení CFL čísla.

### 3.3 Časová integrace

Metoda konečných objemů byla formulována v semidiskrétním tvaru rov. (3.10) jako soustava obyčejných diferenciálních rovnic. Tyto rovnice budou integrovány v čase numerickou metodou. Existuje velké množství možných metod k řešení obyčejných diferenciálních rovnic, budou zde ukázány jen jednoduché příklady.

#### 3.3.1 Explicitní vs. implicitní metody

Hlavním rozdílem explicitní a implicitní metody je, z jaké časové vrstvy vychází výpočet dalšího kroku. Mějme diferenciální rovnici.

$$\frac{du}{dt} = f(t, u) \quad (3.35)$$

Pokud je časová derivace aproximována dopřednou diferencí a pravá strana je vyčíslena v již známé časové vrstvě  $n$ , platí.

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = f(t^n, u^n) \quad (3.36)$$

Takovou numerickou metodu nazveme explicitní. Pokud by pravá strana byla vyčíslena v neznámé časové vrstvě, tzn.

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = f(t^{n+1}, u^{n+1}) \quad (3.37)$$

Potom nazvu numerickou metodu implicitní. Řešení takové metody by vyžadovalo řešení soustavy rovnic, oproti jednoduchému vyčíslení pro explicitní metodu. Implicitní metody mají jisté výhody ve stabilitě, ale jejich implementace pro nelineární  $f(t, u)$  může být náročná. V této práci budou používány pouze explicitní metody.

### 3.3.2 Jednokrokové metody

Jako jednokrokové metody jsou označovány metody, které pro výpočet následujícího kroku používají pouze hodnotu z minulého kroku. Metoda může při výpočtu použít mezikroky.

#### Eulerova metoda

Eulerova metoda již byla zmíněna, jedná se o jednoduchou metodu prvního řádu.

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_n, y_n) \quad (3.38)$$

Tato metoda je jednoduchá na implementaci a v této práci je používána, ovšem její nízká přesnost omezuje její použitelnost. Pro získání dobrých výsledků je třeba malý krok, což je výpočetně náročné.

#### Metody Runge-Kutta

Metody typu Runge-Kutta jsou množinou jednokrokových metod, které mohou být různého řádu přesnosti. Populární je metoda RK4 čtvrtého řádu přesnosti. RK1

je známá Eulerova metoda. Metoda RK4 je formulována následovně.

$$\begin{aligned}
 u_{n+1} &= u_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
 k_1 &= f(t_n, u_n) \\
 k_2 &= f\left(f_n + \frac{h}{2}, u_n + h\frac{k_1}{2}\right) \\
 k_3 &= f\left(f_n + \frac{h}{2}, u_n + h\frac{k_2}{2}\right) \\
 k_4 &= f(t_n + h, u_n + hk_3)
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

RK4 je sice čtvrtého řádu, ale její výpočet vyžaduje vyčíslit 4 kroky, což může být v případě řešení velké soustavy rovnic nevýhodné.

### Heunova metoda

Heunova metoda je někdy nazývána modifikovanou Eulerovou metodou. Výpočet spočívá v kroku Eulerovou metodou, a poté jeho korekce implicitní metodou druhého řádu.

$$\begin{aligned}
 \tilde{u}_{n+1} &= u_n + hf(t_n, u_n) \\
 u_{n+1} &= u_n + \frac{h}{2}[f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, \tilde{u}_{n+1})]
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

Schéma tohoto typu se nazývá prediktor-korektor. Metoda je druhého řádu a vyžaduje výpočet jednoho mezikroku.

### 3.3.3 Vícekrokové metody

Vícekrokové metody využívají pro výpočet následujícího kroku více předchozích vrstev. Obecně lze tuto metodu zapsat následovně.

$$\sum_{j=0}^s a_j u_{n+j} = h \sum_{j=0}^s b_j f(t_{n+j}, u_{n+j}) \tag{3.41}$$

Podle volby koeficientů  $a_j$  a  $b_j$  se liší různé metody, ty mohou být explicitní i implicitní. Pro explicitní metody platí  $b_s = 0$ . Příkladem explicitní více krokové metody je Adams-Bashforthova. Mezi implicitní patří Adams-Moultonova a BDF metoda.

## Adams-Bashforthova metoda

Koeficienty pro Adams-Bashforthovu metodu jsou voleny tak, aby byla explicitní  $b_s = 0$ , aby  $a_s = 1$ ,  $a_{s-1} = -1$ ,  $a_{s-2} = 0 \dots$ . Koeficienty  $b_j$  jsou voleny tak, aby metoda byla řádu  $s$ . Pro ilustraci je uvedena Adams-Bashforthova metoda druhého řádu.

$$u_{n+2} = u_{n+1} + h \left( \frac{3}{2}f(t_{n+1}, u_{n+1}) - \frac{1}{2}f(t_n, u_n) \right) \quad (3.42)$$

Výhodou této metody je, že druhý řád je výpočetně "zadarmo". Pokud je člen  $f(t_n, u_n)$  uložen z předchozího kroku, tak je třeba už vyčíslit pouze jeden člen. Tento princip lze rozšířit i pro metody vyššího řádu.

## 3.4 Použité metody

Pro numerické toky bylo uvedeno více metod, všechny zmíněné byly při výpočtech otestovány. Při výpočtech bylo na plynnou fázi použito schéma AUSM s lineární rekonstrukcí za použití limiteru dle van Albada. Pro rozptýlenou kapalnou fázi se osvědčilo schéma HLL opět s lineární rekonstrukcí a stejným limiterem jako u plynné fáze. Pro časovou integraci byla z důvodu jednoduchosti zvolena Eulerova explicitní metoda.

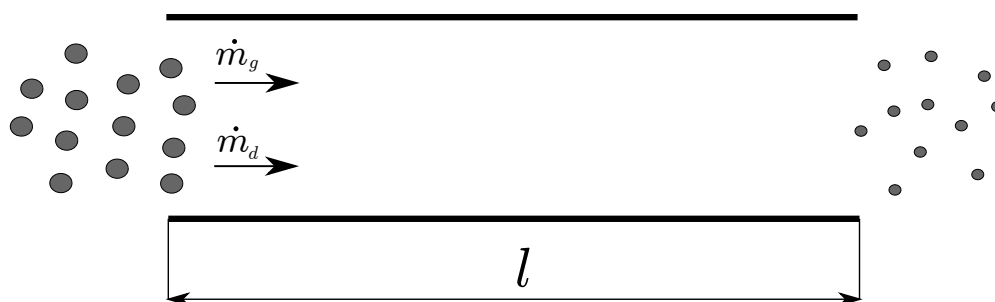
# Výsledky numerických simulací

## 4.1 Odpařování kapalná fáze v kanálu

Jako první příklad užití v této práci vyvinutého kódu je proudění v potrubí s odpařováním kapalná fáze ve formě kapiček. Výpočet byl proveden s Lagrangeovským i Eulerovským popisem kapalná fáze a výsledky budou porovnány.

### Definice úlohy

Úloha je geometricky jednoduchá, jedná se pouze o trubici s konstantním průměrem a danou délkou. Potrubím proudí plynná fáze s hmotnostním tokem  $\dot{m}_g$  a monodisperze kapiček o poloměru  $r_d$  a s hmotnostním tokem  $\dot{m}_d$ .



Obr. 4.1: Úloha proudění vzduchu a kapiček vody

Řešená úloha je popsána při Eulerově popisu rozpýlené fáze rovnicemi uvedenými v 1.5.1. Plynná fáze popsána rovnicemi rov. (1.51) až rov. (1.54). Pro tento příklad byly řešeny dvě chemické složky a to vzduch a voda. Voda se vyskytuje ve dvou skupenstvích, v plynném jako pára a v kapalném jako samotné kapičky vody. Celý systém rovnic pro plynnou fázi tvoří rovnice kontinuity pro obě složky,



rovnice hybnosti a energetická rovnice, celkem 4 rovnice. U rozptýlené kapalně fáze záleží, zdali je modelována jako monodisperze či nikoli. V tomto příkladu se jedná o monodisperzi, a tím všechny kapičky modelujeme jednou frakcí popsanou soustavou rovnic rov. (1.55) až rov. (1.58).

Při Lagrangeovském popisu rozptýlené fáze je plynná fáze popsána soustavou rov. (1.59) až rov. (1.62). Ty se od rovnic pro Eulerovskou rozptýlenou fází liší formulací zdrojových členů. Pro tento příklad byly vynechány zdrojové členy chemických reakcí. Každá skupina Lagrangeovských kapiček je popsána soustavou rovnic rov. (1.63) až rov. (1.66). Celkový počet řešených rovnic je tedy 4 plus počet Lagrangeovských skupin (řádově tisíce).

Látky vstupují se stejnou teplotou a s rychlostním rozdílem. Vstupní složení bylo voleno tak, aby tvořilo směs s 50% vlhkostí. Kapičky by měly dosáhnout rovnovážné teploty, která může být ověřena jako teplota vlhkého teploměru (wet bulb temperature).

## Okrajové a počáteční podmínky

### Plynná fáze

Pro plynnou fází chceme předepsat celkový hmotnostní tok. Proudění je subsonické a díky hyperbolickému charakteru řešených rovnic je třeba přenášet informaci o proudovém poli proti směru proudění. Korektní způsob tohoto přenosu by byly Riemannovy invarianty, ale zde byl zvolen přenos statického tlaku. Na vstupu jsou předepsány následující veličiny.

$$vstup : \{ \dot{m}, T, \vec{Y} \}$$

Je předepsána velikost hmotnostního toku, teplota proudu a složení ve formě hmotnostních zlomků. Pro aplikaci okrajové podmínky je nutné vypočítat všechny veličiny řešeného problému  $[\rho, \dots, \rho u, e]^T$ . Ty jsou vypočteny následovně. Přenesený tlak je označen  $\tilde{p}$ .

$$\begin{aligned}
\rho &= \frac{\tilde{p}}{\bar{r}T} \\
\rho u &= \frac{\dot{m}}{A} \\
\rho e &= \rho \bar{h}(T) + \frac{1}{2}\rho u^2 - \tilde{p}
\end{aligned} \tag{4.1}$$

Okrajová podmínka na výstupu pro plynnou fázi byla definována jako konstantní statický tlak. Tlak je implementován při výpočtu energie, ostatní proměnné jsou přeneseny.

*výstup* :  $\{p\}$

$$\rho e = \tilde{\rho} \bar{h}(\tilde{T}) + \frac{1}{2}\tilde{\rho} \tilde{u}^2 - p \tag{4.2}$$

Vlnkou jsou označeny proměnné, které jsou přenášeny.

## Kapalná fáze

Jako u plynné fáze i pro kapalnou je předepsán celkový hmotnostní tok. Rovnice popisující proudění rozptýlené fáze jsou advekční rovnice, které jsou také hyperbolické. V tomto případě je ale informace přenášena pouze jedním směrem, a proto je na vstupu třeba předepsat všechny proměnné.

$$*vstup* : \{\dot{m}, T, u_d, r_d\} \tag{4.3}$$

Řešené proměnné systému jsou poté vypočteny následovně. Zadané hodnoty odpovídají jedné kapičkové frakci.

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{\dot{m}}{A u_d} \\
\chi u_d &= \frac{\dot{m}}{A} \\
\chi e_d &= \chi C T
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Na výstupu je použita nulová Neumannova okrajová podmínka respektující chování řešené soustavy. To znamená, že hodnoty jsou přeneseny do okrajové buňky.

## Parametry

V této sekci jsou uvedeny použité parametry pro odpařování kapiček vody v proudu vzduchu. Vzhledem k nízkému teplotnímu rozsahu byly parametry všech složek brány při pokojové teplotě (konstantní).

Průřez potrubí A	$1 \text{ m}^2$	Tepelná kapacita $c_p^A$	$1004 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Délka potrubí l	$5 \text{ m}$	Tepelná vodivost $k^A$	$0,03 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Hmotnostní tok $\dot{m}_g$	$100 \text{ kgs}^{-1}$	Viskozita $\nu^A$	$1,81 \cdot 10^{-5} \text{ Pas}$
Hmotnostní tok $\dot{m}_d$	$0,01 \text{ kgs}^{-1}$	Tepelná kapacita $c_p^S$	$1864 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Vstupní teplota $T_{in}$	$300 \text{ K}$	Tepelná vodivost $k^S$	$0,018 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Výstupní tlak $p_{out}$	$101325 \text{ Pa}$	Viskozita $\nu^S$	$9,72 \cdot 10^{-6} \text{ Pas}$
Vs. hm. zlomek $Y_A$	0,99	Výparné teplo $h_{vap}^S$	$2257 \text{ kJkg}^{-1}$
Vs. hm. zlomek $Y_S$	0,01	Tepelná kapacita $c_p^S$	$4182 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$
		Difuzivita $D_{SA}$	$2,42 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

Tab. 4.1: Vstupní data pro příklad odpařování kapiček vody v kanálu

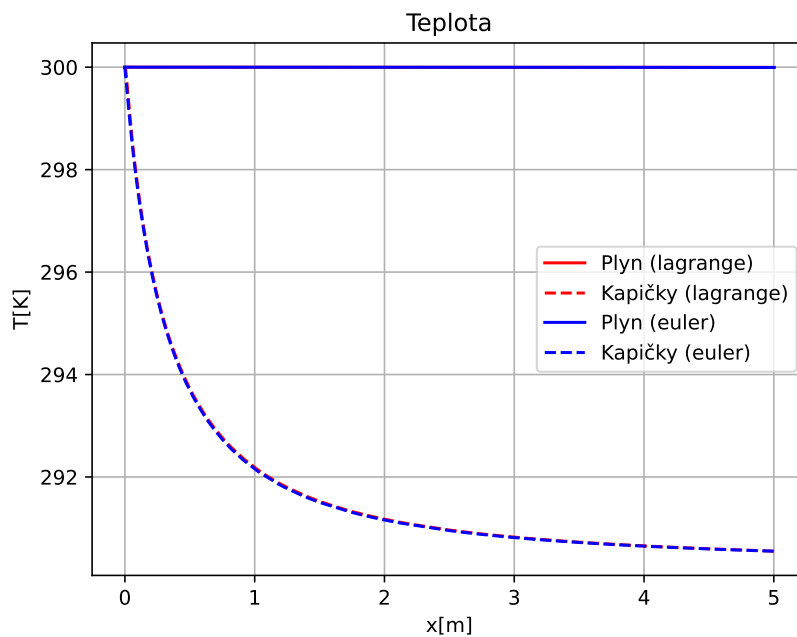
Vlastnosti vzduchu a vodní páry byly získány pomocí termodynamické databáze NIST [12]. Složka vodní pára je označena indexem S, vzduch indexem A. Difuzivita vodní páry a vzduchu byla odečtena z [20].

## Numerické řešení

Pro numerický tok plynné fáze bylo zvoleno AUSM schéma s lineární rekonstrukcí. Pro rozptýlenou fázi byl tok zvolen odlišně. Bylo zvoleno HLL schéma bez rekonstrukce. Tato kombinace bude mít za následek nižší řád přesnosti než dva. Tento přístup byl zvolen kvůli problémům s oscilacemi při řešení metodami druhého řádu. Pro časovou diskretizaci byla použita Eulerova explicitní metoda.

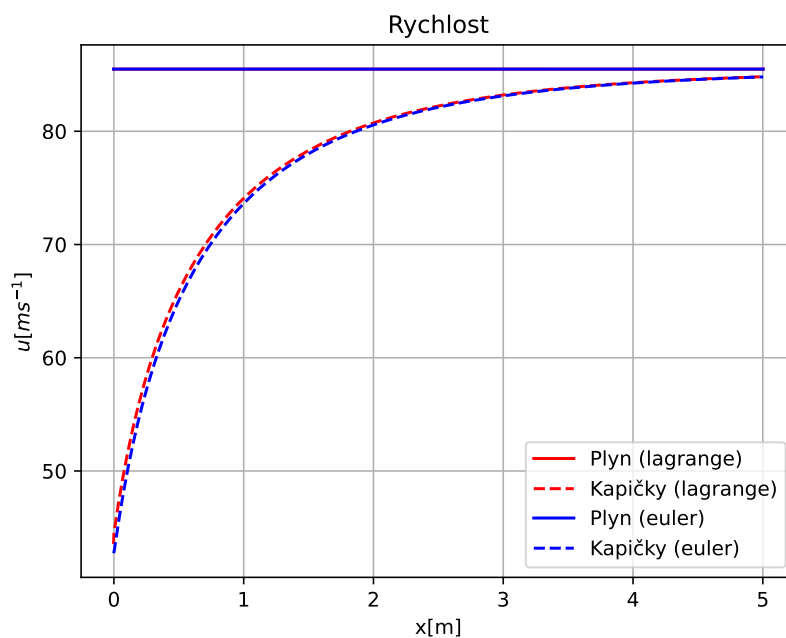
## Výsledky

Výpočet byl proveden na třech (rovnoměrných) sítích, (500, 1000, 2000 buňek). Doba výpočtu obou formulací byla časována a bude porovnána. Následující data jsou výsledky výpočtu na nejjemnější síti.



Obr. 4.2: Teplota plynné fáze a kapiček

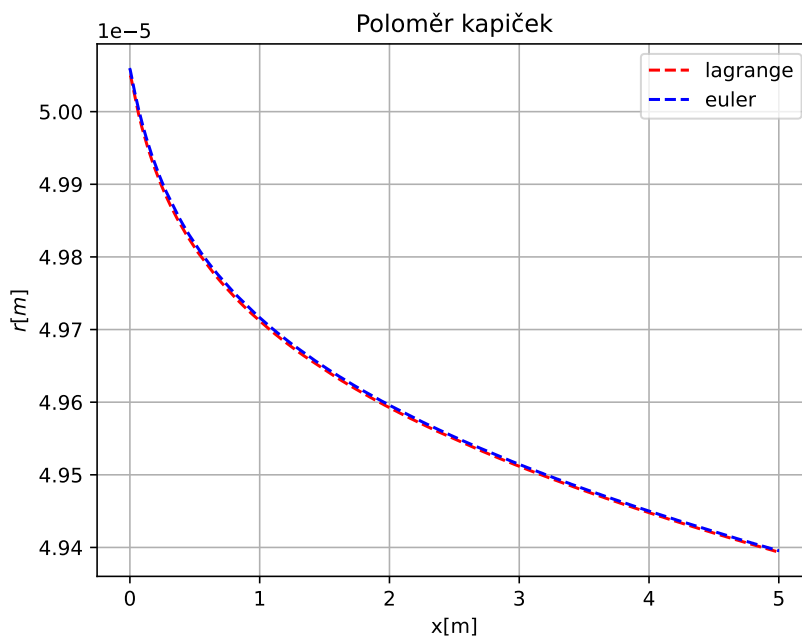
Teplota plynné fáze a kapiček je na obr. 4.2. Průběhy Eulerova a Lagrangeova popisu se překrývají a jsou těžko rozeznatelné.



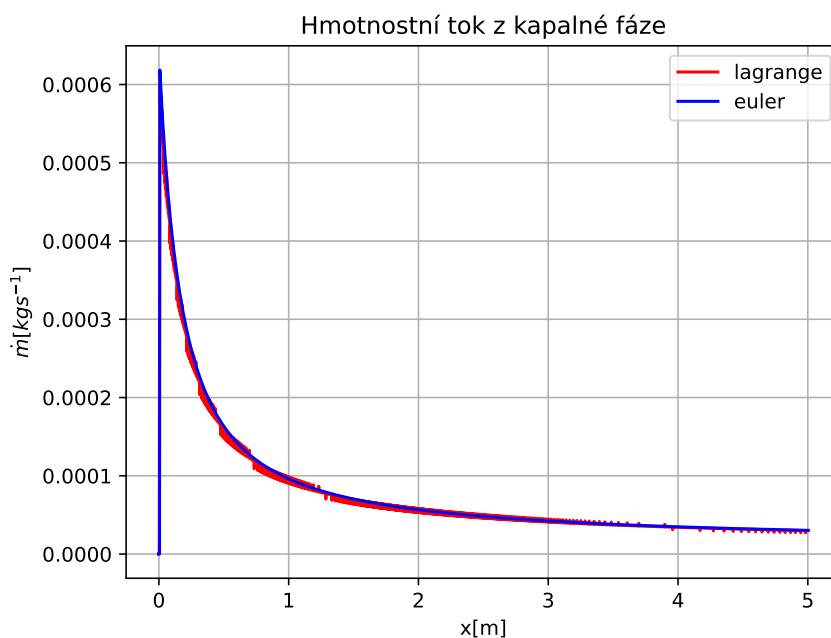
Obr. 4.3: Rychlost plynné a kapalné fáze

V průběhu rychlosti je rozdíl obou formulací už viditelný, avšak průběhy mají

stejný trend a blíží se ke stejné hodnotě. Rozdíly mohou být způsobeny rozdílnou diskretizací rozptýlené fáze.



Obr. 4.4: Poloměr kapiček



Obr. 4.5: Hmotnostní tok z odpařujících se kapiček

Poloměr kapiček klesá vlivem odpařování. Pokles je nejvýraznější na počátku,

kdy je rozdíl rychlostí nejvyšší a rychlost odpařování také. Jak rychle přestupuje hmota z kapiček do plynné fáze, je viditelné na obr. 4.5. Hmotnostní tok pro Lagrangeův popis vykazuje jisté oscilace, ty jsou způsobeny nízkým počtem kapičkových skupin.

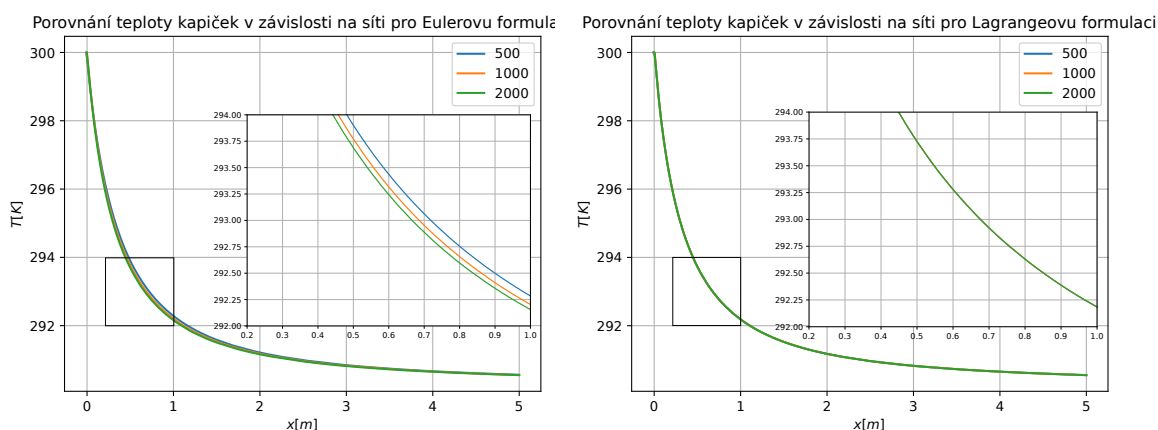
Počet buněk	Euler [s]	Lagrange [s]
500	113.849	483.549
1000	448.380	1327.065
2000	1796.257	4951.106

Tab. 4.2: Doba výpočtu pro Eulerův a Lagrangeův popis kapiček

Doba výpočtu je uvedena v následující tabulce tab. 4.2. Je vidět, že Lagrangeův popis je výpočetně náročnější i při použití paralelizace. Výpočet byl také proveden pro monodisperzi. Pro větší množství kapičkových frakcí by byl Eulerův popis náročnější.

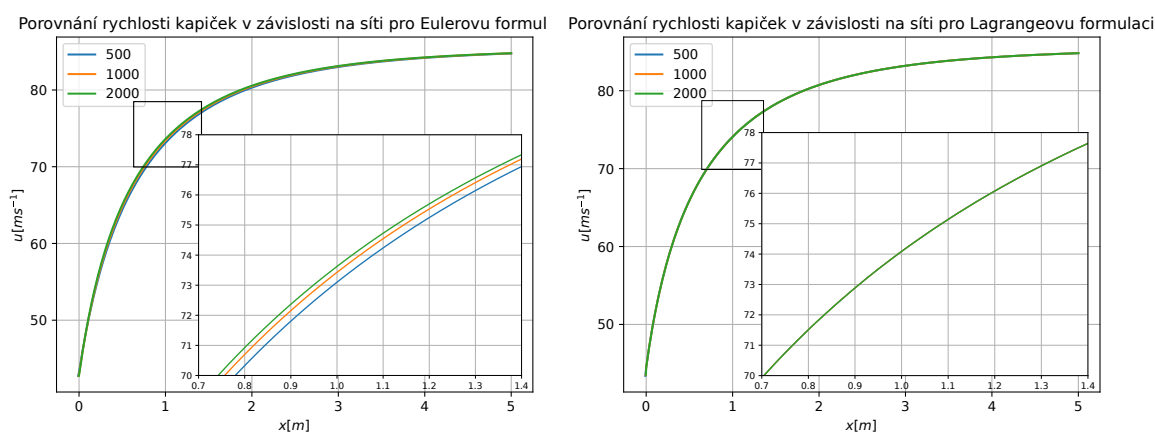
## Diskuze výsledků

Jak již bylo zmíněno, průběhy obou formulací se rozumně shodují. Ovšem to, jak se výsledky podobají realitě, je ještě otázkou. Průběhy by bylo ideální porovnat s experimentálními daty. Lze také porovnat konečnou teplotu kapiček, ta by měla dosáhnout rovnovážné teploty za odpařování zvané jako teplota vlhkého teploměru. Pro zmíněná vstupní data je teplota vlhkého teploměru rovna 292.7 K, tato teplota byla získána pomocí online nástroje [21]. Konečná teplota kapiček je ovšem 290.5 K. Rychlostní průběh kapiček vykazuje ustalování na rychlosti okolního plynu.



Obr. 4.6: Průběhy teploty kapiček v závislosti na síti pro Eulerův a Lagrangeův popis

Porovnání výsledků pro různé výpočetní sítě je uvedeno na obr. 4.6. Pro Eulerův popis kapiček je vidět dobrá shoda řešení. Pro jemnější sítě se řešení navzájem přibližují. U Lagrangeova popisu jsou řešení navzájem nerozlišitelná a zdá se, že Lagrangeovský popis kapiček není závislý na výpočetní síti. Nezávislost na síti se může zdát jako očekávaná, protože kapičky jsou pouze Lagrangeovské. Ovšem vzhledem k vazbě mezi kapičkou a okolním plynem jsou zdrojové členy ovlivňující vývoj kapičky na síti závislé. Je možné, že vliv sítě na kapičky v tomto případě je malý, díky pozvolnému průběhu řešení. V případě úlohy s velkými gradienty by se řešení už mohla lišit.

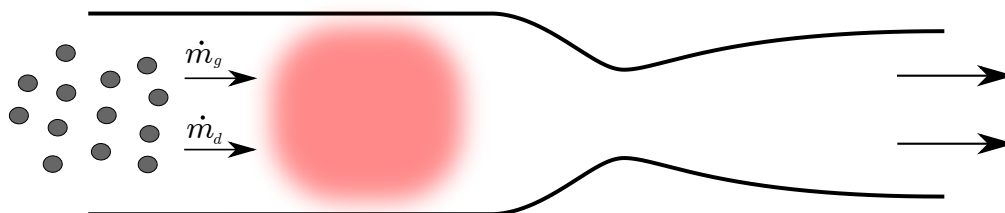


Obr. 4.7: Průběhy rychlosti kapiček v závislosti na síti pro Eulerův a Lagrangeův popis

Pro rychlost kapiček v Eulerově popisu jsou vidět stejné rozdíly jako u průběhu teploty. Řešení se pro zjemňující síť navzájem přibližují a rozdíl mezi nimi klesá. Tento závěr by měl být potvrzen i analýzou chyby. Výsledky pro Lagrangeovský popis jsou opět stejné pro všechny použité výpočetní sítě. Rozdíl řešení na hrubé a nejjemnější síti je v Eulerově popisu malý a Lagrangeově v podstatě nulový. Proto pro tento příklad je řešení na hrubé síti dostačující.

## 4.2 Spalování v komoře raketového motoru

Dalším příkladem aplikace výpočetního kódu je spalování v raketovém motoru. Geometrie je znázorněna na obr. 4.8. Palivo vstupuje vlevo ve formě kapiček s předepsaným hmotnostním tokem  $\dot{m}_F$ . Okysličovadlo vstupuje ze stejné strany v plynné fázi s hmotnostním tokem  $\dot{m}_{OX}$ . Kapky paliva jsou odpařovány, plynné palivo reaguje s okysličovadlem za vzniku tepla.



Obr. 4.8: Problém spalování v raketovém motoru

Horké spaliny poté procházejí konvergentní a divergentní částí trysky, kde jsou urychleny. Cílem je popsat proces odpařování a spálení paliva, proudění horkých spalin tryskou a analyzovat tah motoru. Jsou zavedeny tři chemické složky (produkty, okysličovadlo, palivo).

Rovnice popisující tento problém jsou identické s problémem odpařování kapiček vody v kanále. Jediným rozdílem oproti předchozímu příkladu je aplikace zdrojových členů chemických reakcí zprostředkovávající přeměnu složek a uvolnění energie.

### Okrajové a počáteční podmínky

Okrajové podmínky jsou definovány podobně jako u předchozí úlohy. Pro kapalnou fázi jsou definovány stejně. Výstup je realizován pro nadzvukové proudění nulovou Neumannovou podmínkou. V případě podzvukového je aplikován stejný postup se statickým tlakem jako u proudění v potrubí.

Počáteční podmínky byly voleny tak, aby aproximovaly výsledné proudění. Pomocí analytických vztahů byly vypočteny stavové veličiny v komoře, hrdle trysky a na výstupu trysky. Tyto body byly poté interpolovány lineární funkcí. Tento postup byl volen pro zkrácení doby výpočtu. Další důvodem byly nestability výpočtu při startu z klidných podmínek.



## Parametry

Vzhledem k velkému rozsahu teplot při výpočtu byly vlastnosti látek popsány jako polynomiální fity dat z databáze [12].

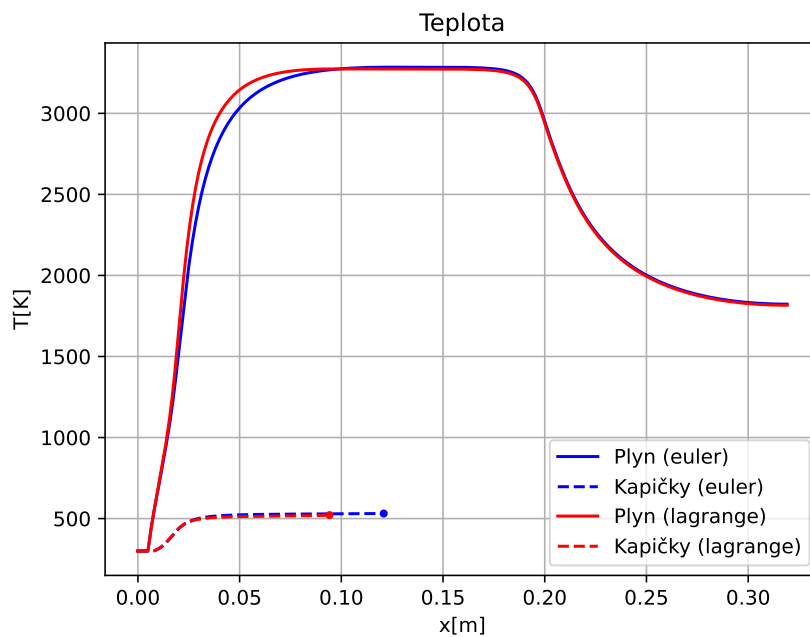
Hmotnostní tok $\dot{m}_{OX}$	$1.16368 \text{ kg s}^{-1}$
Hmotnostní tok $\dot{m}_F$	$0.176316 \text{ kg s}^{-1}$
Vstupní teplota $T_{in}$	300 K
Vstupní složení	$[0, 1, 0]^T$
Vstupní rychlost $u_d$	$5 \text{ m s}^{-1}$
Poloměr kapiček $r_d$	$70 \text{ }\mu\text{m}$
Stechiometrický poměr $\beta$	6.6

Tab. 4.3: Vstupní data pro proudění v raketovém motoru

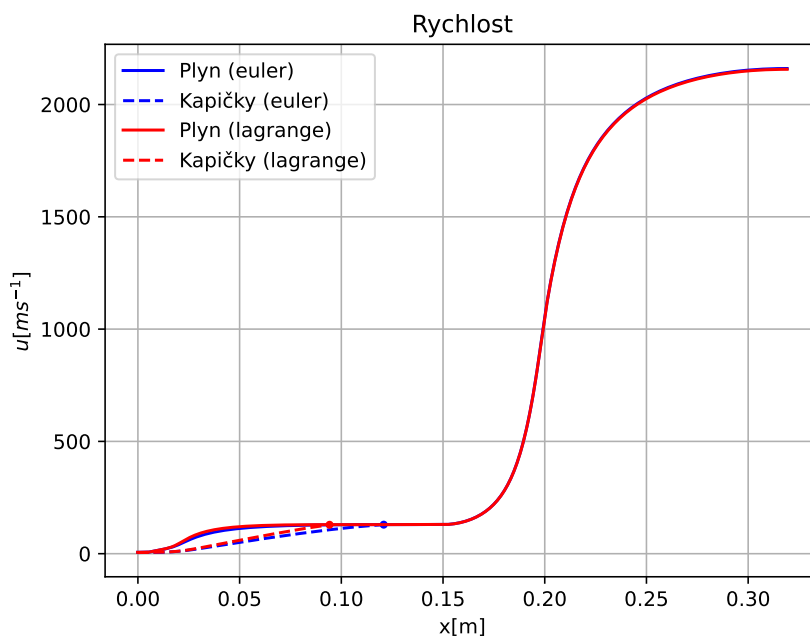
### 4.2.1 Výsledky pro monodisperzi v Lagrangeově a Eulerově popisu

Výpočet byl opět proveden na třech sítích o 500, 1000 a 2000 buňkách. Sít byla zkonstruována jako rovnoměrná. Pro první příklad byly kapičky uvažovány jako monodisperze. Výsledky pro monodisperzi budou poté porovnány pro obě formulace.

Průběh teploty je vidět na následujícím grafu. Prudký nárůst je způsoben energií uvolněnou při spalování. Po zbylé délce komory je teplota téměř konstantní, dokud plyn nedojde do trysky, kde vlivem urychlení teplota klesá. Teplota kapiček roste vlivem výměny tepla, dokud nedosáhne teploty varu. Eulerova formulace predikuje delší vzdálenost na úplné spálení kapiček a tím i odlišný průběh teploty v oblasti zahřívání.

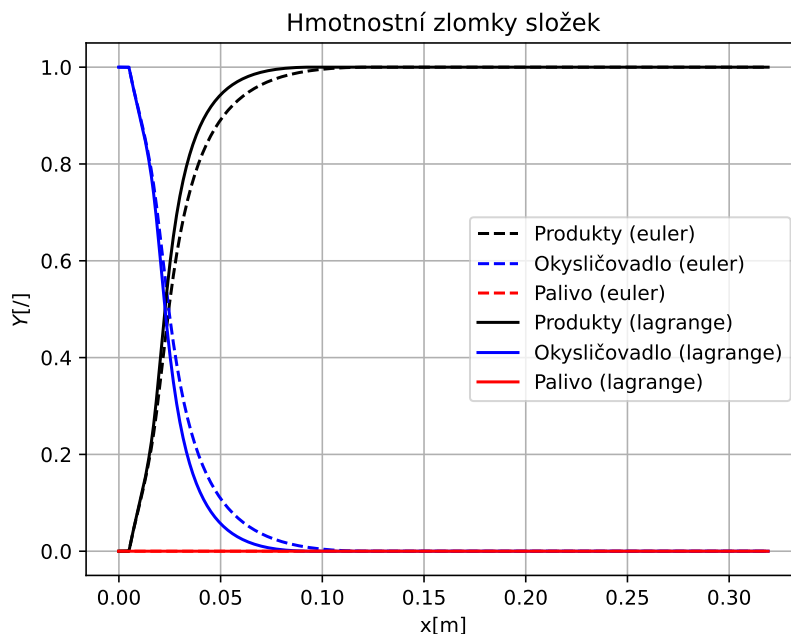


Obr. 4.9: Teplota v raketovém motoru pro monodisperzi



Obr. 4.10: Rychlost spalin a kapiček v raketovém motoru pro monodisperzi

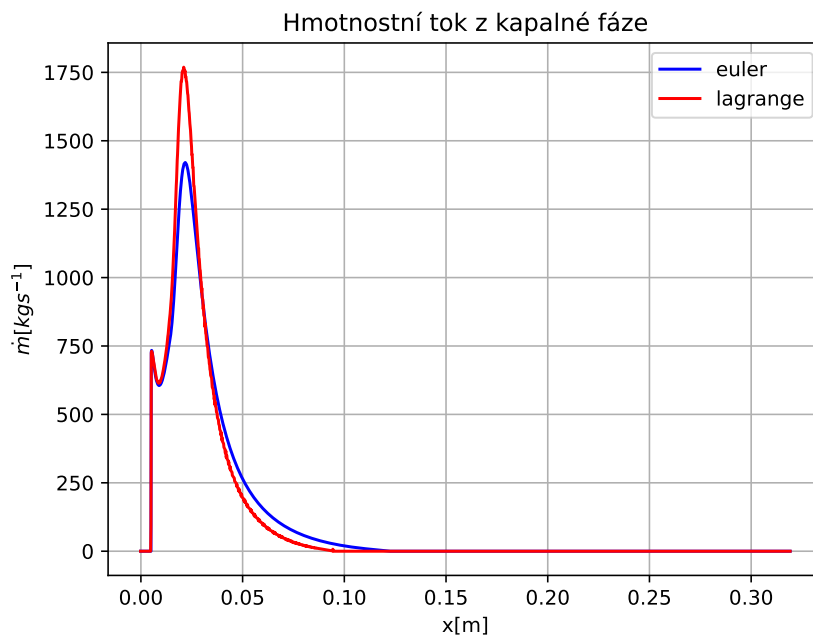
Rychlost plynu na obr. 4.10 monotonně roste nejprve vlivem odpařování z kapiček a poté vlivem urychlení v trysce. Kapičky jsou urychlovány aerodynamickým odporem, až dosáhnou rovnováhy s okolím v okamžiku úplného odpaření. Urychlení Eulerovsky popsaných kapiček je pomalejší.



Obr. 4.11: Složení v raketovém motoru pro monodisperzi

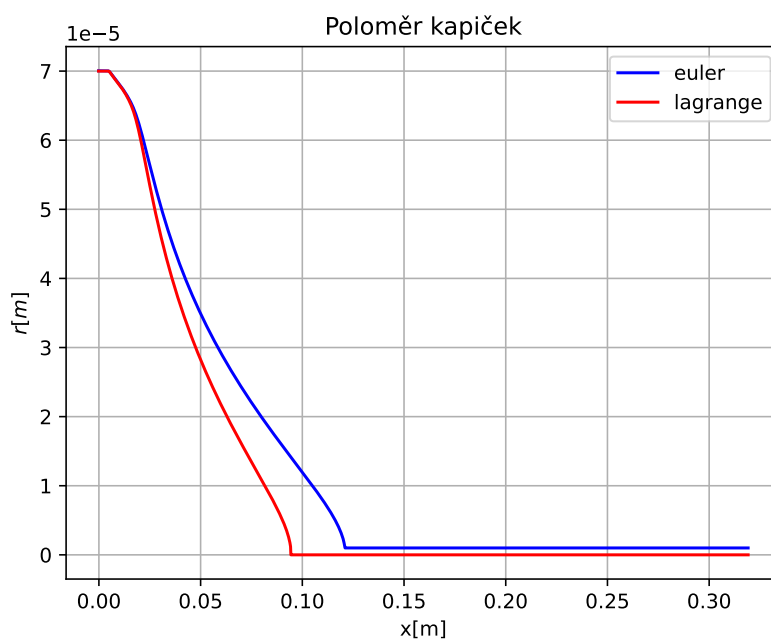
Úloha byla definována tak, aby došlo k úplnému spálení paliva. Takové chování je viditelné i z výsledku výpočtu. Hmotnostní zlomek paliva zůstává po délce komory nulový, což je zapříčiněno použitým modelem nekonečně rychlých chemických reakcí. Takové chování by při uvažování reakční kinetiky pravděpodobně nenastalo a v oblasti vypařování by se vyskytovala jistá koncentrace plynného paliva.

Hmotnostní tok z kapalně fáze je vynesena na grafu 4.12. Průběh vykazuje na vstupu do komory pokles toku a opětovný nárůst. Původ tohoto chování není jasný a je pravděpodobně spojen s definicí vstupní podmínky a modelu odpařování. Validita modelu v této oblasti je nejasná. V realitě je tato oblast ovlivněna vstříkem kapalného paliva a dalšími jevy. Proudové pole bude velmi turbulentní a můžou se zde vyskytovat recirkulační zóny. Rozdíl mezi Eulerovou a Lagrangeovou formulací je znatelný, Lagrangeova formulace dosahuje vyššího maximálního hmotnostního toku.



Obr. 4.12: Hmotnostní tok z kapalné fáze v raketovém motoru pro monodisperzi

Poloměr kapiček od vstupu monotonně klesá. K dohoření dojde v poloze 0,121 m pro Eulerovu a v 0,0944 m pro Lagrangeovu. Tato délka je při návrhu raketového motoru velice důležitá a diktuje potřebnou délku komory. Z tohoto důvodu budou vlivům ovlivňující tuto délku věnovány další výpočty.



Obr. 4.13: Poloměr kapiček v raketovém motoru pro monodisperzi

## Diskuze výsledků

Výsledky numerického výpočtu pro raketový motor jsou porovnány s analytickými vztahy. Analytické výpočty teploty v komoře vycházejí z chemické rovnováhy. Tyto výpočty byly provedeny za použití knihovny CANTERA [10]. Teplota v dalších částech geometrie je získána na základě zjednodušených vztahů, které předpokládají izoentropický děj a konstantní tepelnou kapacitu. V hrdle trysky a na výstupu se teploty již liší. Tento rozdíl je pravděpodobně způsoben předpokladem konstantní tepelné kapacity.

Poloha	Numerický výpočet [K]	Analytický výpočet [K]
Komora	3284	3200
Hrdlo	2945	2782
Výstup	1823	1527

Tab. 4.4: Porovnání teploty pro analytický a numerický výpočet

Rychlost byla získána za pomoci zjednodušených analytických vztahů. Analytický model uvažuje stagnační podmínky v komoře, a tak je rychlost nulová. Rychlosti v hrdle a na výstupu z trysky jsou v dobré shodě s numerickým výpočtem.

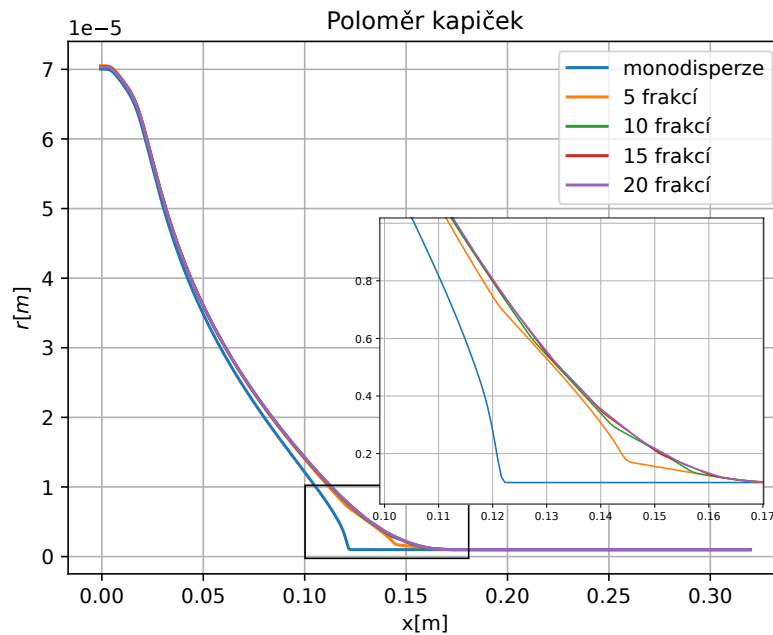
Poloha	Numerický výpočet [m/s]	Analytický výpočet [m/s]
Komora	130	0
Hrdlo	1060	1061
Výstup	2160	2125

Tab. 4.5: Porovnání rychlosti pro analytický a numerický výpočet

V oblasti interakce kapiček je obtížné nalézt analytické řešení. Existují jisté analytické přístupy například  $d^2$  pravidlo. Korektní validace výsledků by vycházela z experimentálních dat. Pro měření rychlosti odpařování osamocené kapičky existují experimentální metody. Například metoda "uchycené" kapky [22]. Ty ovšem nezahrnují interakci s okolními kapičkami. Měření v prostředí raketového motoru je v podstatě nereálné. Model odpařování by bylo možné validovat na předchozím příkladu 4.1.

## 4.2.2 Normální rozdělení kapiček

Všechny výpočty byly provedeny pro monodisperzi kapiček. V této sekci budou porovnány výsledky normálního rozdělení kapiček pro 5, 10, 15, 20 kapičkových frakcí. Normální rozdělení má střední hodnotu  $\mu = 70 \mu m$  a směrodatnou odchylku  $\sigma = 1 \mu m$ . Průběh středního poloměru kapiček je na následujícím grafu.



Obr. 4.14: Střední poloměr kapiček pro různý počet frakcí

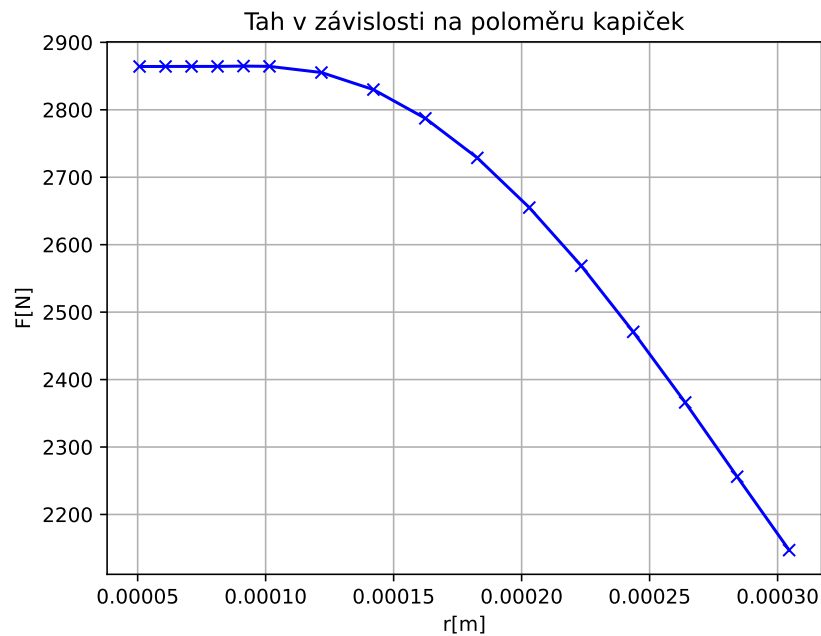
Rozdíl mezi monodisperzí a normálním rozdělením poloměru je jasně viditelné. Protože výpočet s velkým množstvím kapičkových frakcí je náročnější, je důležité vědět, kolik frakcí je potřeba k vhodnému popisu. Pro zde ukázaný příklad je vidět, že výpočty s vyšším počtem frakcí se překrývají. Výpočty s 15 a 20 frakcemi jsou téměř nerozeznatelné. Pro výpočet by stačil popis pomocí 10 frakcí, to nám poskytne požadovanou přesnost a nižší nároky na výpočetní čas. Ostatní veličiny jako rychlost, teplota nebo hmotnostní tok z kapalně fáze jsou pro monodisperzi a vícefrakční výpočty téměř identické.

### 4.2.3 Vliv velikosti kapiček na spalování

V této části bude popsán vliv velikosti kapiček na spalování a proudění v raketovém motoru. Výpočet bude proveden pro několik poloměrů a jejich vliv bude porovnán. Aby bylo možné kvantitativně hodnotit, jaký vliv má velikost kapiček na chod motoru, je zaveden tah následovně.

$$F = \dot{m}u_{out} \quad (4.5)$$

Tah byl vypočten pro všechny výsledky numerických výpočtů a byla získána následující závislost.

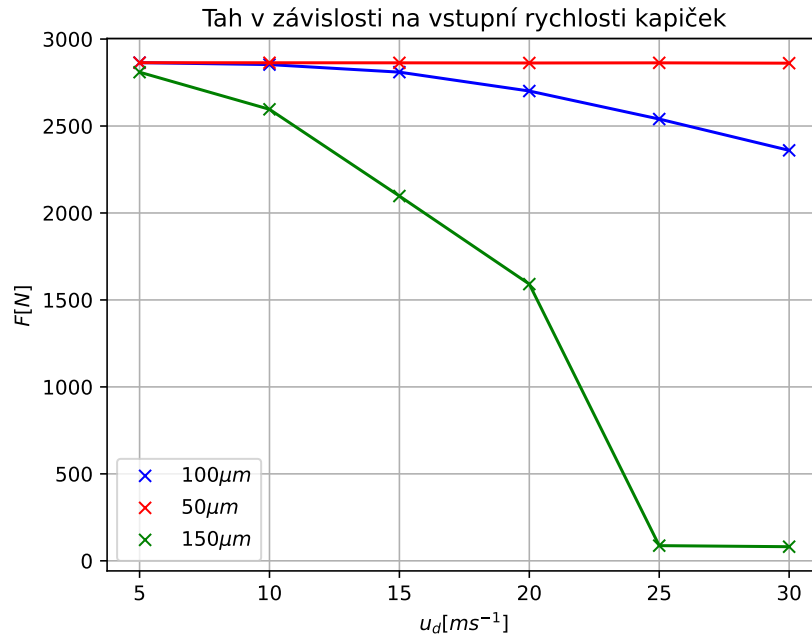


Obr. 4.15: Závislost tahu na velikosti kapiček

Závislost vykazuje pokles tahu s rostoucím poloměrem kapiček. Tento pokles je zapříčiněn neúplným využitím paliva. Pro poloměr kapiček menší než  $100 \mu m$  nedochází ke změně tahu. V reálné aplikaci by optimálním poloměrem kapiček bylo právě  $100 \mu m$ , větší poloměr by snižoval tah a pro menší poloměr je komora příliš dlouhá, což plýtvá materiálem a způsobuje vyšší ztráty. Pokud by model uvažoval i ztráty do okolí vlivem přenosu tepla, pozorovali bychom pokles tahu se snižujícím se poloměrem.

#### 4.2.4 Vliv vstupní rychlosti kapiček

Rychlost, kterou jsou kapičky vstříkovány do komory jistě ovlivňuje proces odpařování a spalování. Jak již bylo zmíněno v přechozí sekci, nedokonalé využití paliva snižuje výkon raketového motoru. Vliv vyšší rychlosti kapiček způsobí intenzivnější přenos hmoty a tepla, na druhou stranu díky vyšší rychlosti stráví kapičky v komoře méně času.



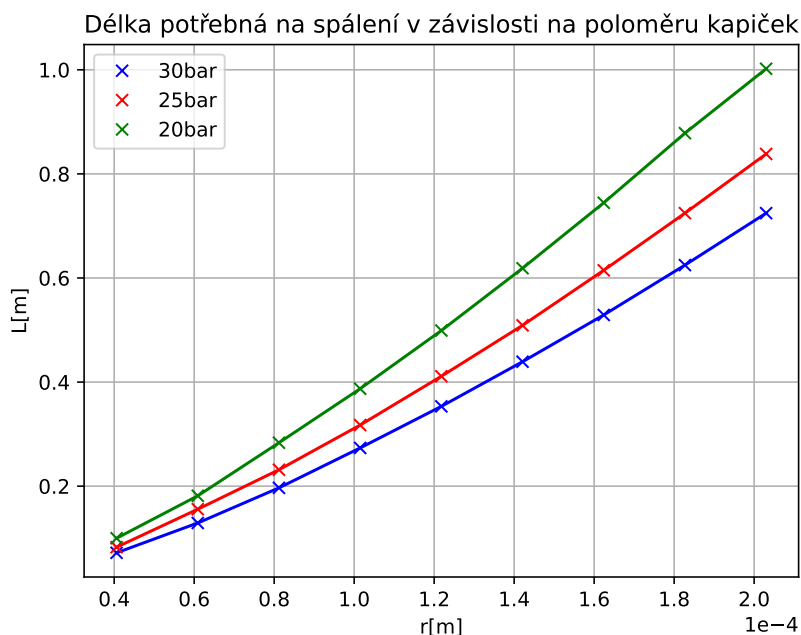
Obr. 4.16: Vliv vstupní rychlosti kapiček na tah raketového motoru

Jak je vidět z obr. 4.16, tah vykazuje pokles s rostoucí rychlostí kapiček. Pokles je způsoben nedostatečnou délkou komory, a tím neúplným vyhořením paliva. Pro největší kapičky a nejvyšší rychlosti numerické řešení vykazovalo špatnou konvergenci ke stacionárnímu řešení. Data vedoucí k tahu byla vypočtena z časově středovaných dat, proto rychle klesající trend pro největší kapičky nemusí být přesný.



### 4.3 Délka potřebná na spálení kapiček

Při návrhu délky spalovací komory raketového motoru je potřebná délka na odpaření a spálení důležitým faktorem. Je to parametr závislý na mnoha proměnných jako například poloměr kapiček, vstupní rychlost, tlak v komoře atd. Při návrhu je délka komory charakterizována pomocí geometrického parametru  $L^*$ , který je uveden pro různé kombinace paliv a okysličovadel. Jak je ale vidět z přechozích analýz, vliv velikosti kapiček a vstupní rychlosti je také důležitý. Z tohoto důvodu byla provedena řada výpočtů pro několik poloměrů a tři tlaky. Předchozí úloha byla modifikována, výpočetní oblast byla nahrazena prostým potrubím a tlak byl předepsán okrajovou podmínkou na výstupu.



Obr. 4.17: Délka potřebná na úplné vyhoření kapiček

Na obr. 4.17 je vynesena závislost délky potřebné na úplné odpaření a spálení kapiček paliva. Je zřejmé, že délka roste s poloměrem kapiček. To je očekávané chování, větší kapičky logicky potřebují více času na odpaření, a tím i větší délku. Délka je viditelně závislá na tlaku v komoře, s rostoucím tlakem délka na spálení klesá. Toto chování může být vysvětleno vyšší hustotou, a tím i efektivnějším přenosem hmoty.

# Závěr

Tato práce se věnovala vývoji zjednodušeného matematického modelu a jeho aplikaci na problematiku spalování v chemickém raketovém motoru. Byl použit model proudění stlačitelné tekutiny v trubici nekonstantního průřezu doplněný o zdrojové členy reprezentující výměnu hmoty, hybnosti a energie s okolní rozptýlenou kapalnou fází. Rozptýlená fáze byla popsána v Eulerově a v Lagrangeově popisu a výsledky obou přístupů byly porovnány. Model byl aplikován na příklad odpařování v trubici a na spalování v raketovém motoru. Pro druhý příklad byly provedeny analýzy chování tahu v závislosti na velikosti kapiček a na rychlosti jejich vstřikování. Dále byla provedena analýza délky potřebné na úplné spálení kapiček v závislosti na jejich poloměru a okolním tlaku.

Řešení problému odpařování v trubici vykazuje dobrou shodu pro Eulerův a Lagrangeův popis, řešení jsou téměř nerozeznatelná. Doba trvání výpočtu byla měřena pro obě metody a všechny výpočetní sítě. Lagrangeův popis se ukázal jako výrazně výpočetně náročnější i přes použitou paralelizaci. Přístup výpočetního řešení rozptýlené fáze v Lagrangeově popisu není vhodný. Pro schůdné řešení musel být počet Lagrangeovských skupin limitován na cca 20 000. Takové řešení vykazovalo špatnou konvergenci a náhodné oscilace. Při zvýšení počtu skupin zmíněné problémy polevily. Tento fakt demonstruje nutnost velkého množství Lagrangeovských skupin a potřebu vhodnějšího výpočetního nástroje. Vzhledem k nezávislému charakteru řešeného problému by mohlo být efektivní řešení pomocí GPU.

V druhém příkladu byl výpočetní kód aplikován na proudění a spalování v raketovém motoru. Výpočet byl proveden pro monodisperzi kapiček v Eulerově i Lagrangeově popisu. Výsledky vykazují znatelné rozdíly, které mohou být způsobeny rozdílným způsobem diskretizace. Pro porovnání vlivu monodisperze byl proveden výpočet s normálním rozdělením kapiček. Rozdělení bylo diskretizováno na 5, 10, 15 a 20 frakcí. Řešení s normálním rozdělením se viditelně liší od řešení s monodisperzí v závislosti poloměru kapiček, ta pro normální rozdělení klesá pomaleji, a tak jsou kapičky unášeny do větší vzdálenosti od vstupu. To demonstruje důležitost popisu rozdělení velikostí kapiček a vliv rozdělení na průběh spalovacího procesu. Výpočetní

kód byl dále využit k analýze efektů velikosti kapiček a rychlosti jejich vstupu do komory. Velikost kapiček má významný vliv na tah motoru. Ze závislosti na obr. 4.15 je znát, že s rostoucí velikostí kapiček tah klesá. Vstupní rychlost kapiček má podobný vliv a závislost je vynesena na obr. 4.16. Rychle se pohybující kapičky opustí spalovací komoru dříve, než se mohou odpařit, a tím snižují vyvozený tah. Vliv vstupní rychlosti je zesílen pro kapičky větších rozměrů a v krajním případě vyvolal téměř celkovou ztrátu tahu. Ztráta tahu díky tomu, že kapičky stráví nedostatečný čas ve spalovací komoře je principiálně v pořádku. Ovšem tento výsledek je vcelku extrémní a je třeba provést detailnější analýzy. Je nutné podotknout, že model zanedbává přenos tepla vlivem radiace a vzájemný kontakt kapiček. Oba tyto vlivy mohou ovlivnit proces spalování a jejich zahrnutí bude zajisté cílem další práce na výpočetním kódu. Délka potřebná na odpaření a spálení kapiček, jakožto důležitý parametr při návrhu raketového motoru, byla analyzována v závislosti na poloměru kapiček a na okolním tlaku. Potřebná délka roste s velikostí kapiček, s okolním tlakem roste s regresivním charakterem.

V momentální formě není výpočetní kód dostatečně flexibilní, aby jednoduše umožňoval další vývoj. Program byl v jisté míře optimalizován a paralelizován pomocí openMP, ale další optimalizace by byla vhodná. Byly použity běžné numerické metody, které nemusí být vhodné pro problémy tohoto typu. Například AUSM schéma vykazovalo jisté oscilace při nižších rychlostech, možným řešením je použití AUSM+ nebo AUSM+up. Metoda časové integrace byla zvolena jako nejjednodušší možná a pouze prvního řádu. Vhodnější metodou by mohla být zmíněná Adams-Bashforthova vícekroková metoda, nebo použití vícekrokových implicitních metod.

Cílem další práce je aplikace pokročilejších numerických metod, optimalizace a přidání dalších funkcí umožňující širší využití. Například řešení ztrát tepla do okolí, přidání modelu pohyblivé hranice například pro popis eroze nebo při použití na spalování v motoru na tuhé palivo. Popis kapiček by bylo možné doplnit o detailnější průběh teploty v kapičce, kontakt kapiček a přenos tepla radiací. Přes všechny možnosti dalšího vylepšení je potřeba dodat, že model je pouze jednorozměrný a v jistém okamžiku bude lepší použít vícerozměrné modely.

Přes všechny problémy tento jednoduchý výpočetní nástroj poskytl informace o komplexním procesu v raketovém motoru a umožnil odhadnout důležité parametry spalování, které mohou být aplikovány při prvotním návrhu. Pro výpočty nebyl potřeba zásadní výpočetný výkon a všechny byly provedeny na běžném laptopu.

# Použité symboly

$\Omega^*$	materiálové těleso
$\Omega$	konečný objem
$\vec{x} = [x, y, z]^T$	vektor souřadnic
$\vec{u} = [u, v, w]^T$	vektor rychlosti
$\vec{a} = [a_x, a_y, a_z]^T$	vektor zrychlení
$\vec{n}$	normálový vektor
$t$	čas
$\rho$	hustota
$e$	měrná energie
$T$	teplota
$p$	tlak
$\vec{f}$	vektor vnějších sil
$S(x)$	průřez trubice
$\chi$	hmotnostní koncentrace rozptýlené fáze
$N$	početní koncentrace rozptýlené fáze
$\alpha_d$	objemový zlomek rozptýlené fáze
$\rho_d$	materiálová hustota rozptýlené fáze
$\vec{F}$	vektor síly
$\vec{F}_D$	odporová síly
$C_D$	odporový koeficient
$\dot{Q}$	tepelný tok
$\dot{m}$	hmotnostní tok
$h_{vap}$	výparné teplo kapalné fáze
$c_p$	měrná tepelná kapacita za konstantního tlaku
$c_v$	měrná tepelná kapacita za konstantního objemu
$Re$	Reynoldsovo číslo
$Pr$	Prandtolovo číslo
$Nu$	Nusseltovo číslo
$Sh$	Sherwoodovo číslo

$\lambda$	koeficient tepelné vodivosti
$D$	difuzní koeficient
$\mu$	kinematická viskozita
$Y$	hmotnostní zlomek
$B_M$	Spaldingovo hmotnostní transportní číslo
$B_T$	Spaldingovo teplotní transportní číslo

# Seznam použitých zdrojů

- [1] CROWE, Clayton T. a John D. SCHWARZKOPF. Multiphase Flows with Droplets and Particles. 2nd Edition. CRC Press, 2011. ISBN 9780429106392.
- [2] KELBALIYEV, G. and Ceylan, K., Development of new empirical equations for estimation of drag coefficient, shape deformation, and rising velocity of gas bubbles or liquid drops. Chem. Eng. Commun. 194, 1623–1637, 2007.
- [3] MORRISON Faith, "Data Correlation for Drag Coefficient for Sphere" Department of Chemical Engineering, Michigan Technological University, Houghton, MI, [www.chem.mtu.edu/~fmorriso/DataCorrelationForSphereDrag2016.pdf](http://www.chem.mtu.edu/~fmorriso/DataCorrelationForSphereDrag2016.pdf)
- [4] INGEBO, Robert D. DRAG COEFFICIENTS FOR DROPLETS AND SOLID SPHERES IN CLOUDS ACCELERATING IN AIRSTREAMS. Lewis Flight Propulsion Laboratory, 1956.
- [5] EISENKLAM, P., S. ARUNACHALAM a J. WESTON. Evaporation rates and drag resistance of burning drops [online]. Imperial College London, 1967 [cit. 2023-06-19]. Dostupné z: doi:10.1016/S0082-0784(67)80197-8
- [6] SIRIGNANO, W. A. 1999 Fluid dynamics and transport of droplets and sprays. Cambridge University Press. 8, 127, 128
- [7] SPALDING, D. B. 1953 The combustion of liquid fuels. In 4th Symp. (Int.) on Combustion, pp. 847–864. The Combustion Institute, Pittsburgh. 128, 130, 131, 200
- [8] SAZHIN, Sergei. Droplets and Sprays. In: Droplets and Sprays. Springer-Verlag, 2014, s. 98-101. ISBN 1447169085.
- [9] DOUGHERTY E. P. and RABITZ H. "Computational Kinetic and Sensitivity Analysis of Hydrogen-Oxygen Combustion" J. Chem. Phys. 72, 6571 (1980)

- [10] GOODWIN David G., MOFFAT Harry K., SCHOEGL Ingmar, SPETH Raymond L., and WEBER Bryan W. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. <https://www.cantera.org>, 2022. Version 2.6.0. doi:10.5281/zenodo.6387882
- [11] KUO, Kenneth K. Principles of combustion. Second edition. New Jersey: John Wiley, 2005. ISBN 0-471-04689-2.
- [12] SHEN, V.K., SIDERIUS, D.W., KREKELBERG, W.P., and Hatch, H.W., Eds., NIST Standard Reference Simulation Website, NIST Standard Reference Database Number 173, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899, <http://doi.org/10.18434/T4M88Q>
- [13] KURGANOV, Alexander a Eitan TADMORE. New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Convection–Diffusion Equations. *Journal of Computational Physics*. 1999, 2000(160). Dostupné z: doi:10.1006/jcph.2000.6459
- [14] SPEKREIJSE, Stefan. <https://doi.org/10.2307/2008254>. *Mathematics of Computation*. 1987, 1987(49), 135-155. Dostupné z: doi:<https://doi.org/10.2307/2008254>
- [15] BERGER, Marsha, Michael AFTOSMIS a Scott MURMAN. Analysis of Slope Limiters on Irregular Grids [online]. [cit. 2023-07-06]. Dostupné z: doi:<https://doi.org/10.2514/6.2005-490>
- [16] SHAZIN, S. Modelling of heating, evaporation and ignition of fuel droplets: combined analytical, asymptotic and numerical analysis. *Journal of Physics*. 2005, 2005(22), 174–193. Dostupné z: doi:10.1088/1742-6596/22/1/012
- [17] SUTTON, George P. Rocket propulsion elements. Ninth edition. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, 2017. ISBN 9781118753651.
- [18] LEVEQUE, Randall J. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. 1. Cambridge University Press, 2002. ISBN 9780511791253.
- [19] LEVEQUE, Randall J. Numerical Methods for Conservation Laws. Second Edition. Basel: Birkhäuser, 1992. ISBN 3-7643-2723-5.
- [20] The Engineering ToolBox (2018). Air - Diffusion Coefficients of Gases in Excess of Air. [online] Available at: [https://www.engineeringtoolbox.com/air-diffusion-coefficient-gas-mixture-temperature-d\\_2010.html](https://www.engineeringtoolbox.com/air-diffusion-coefficient-gas-mixture-temperature-d_2010.html) [cit. 2023-07-24].

- [21] Wet Bulb Calculator. Omnicalculator [online]. [cit. 2023-07-24]. Dostupné z: <https://www.omnicalculator.com/physics/wet-bulb>
- [22] STERLYAGOV, A.N., V.N. LETUSHKO, M.I. NIZOVTSSEV a V. BORODULIN. Experimental study of the evaporation of suspended droplets of a water-ethanol solution. *Journal of Physics*. 2018, 2018(1128). Dostupné z: [doi:10.1088/1742-6596/1128/1/012055](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1128/1/012055)