

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
FAKULTA STROJNÍ

Diplomová práce

Numerické modelování proudění s pasivní příměsí

Jakub Tejchman

Matematické modelování v technice

Obor

Doc. Ing. Luděk Beneš, Ph.D.

vedoucí práce

2016

Praha

Poděkování

Rád bych poděkoval vedoucímu práce Ludku Benešovi za jeho cenné rady, osobní přístup a velkou trpělivost. Dále patří můj velký dík Viktoru Šípovi, který mi byl velkým rádcem v úpravách a nastavení numerického výpočtu a poskytl mi svou předešlou práci pro srovnání výsledků.

Abstrakt

Klíčová slova: CFD, LES, mezní vrstva atmosféry, pasivní skalár, OpenFOAM, Bousinesqova aproximace

V této práci je shrnuta teorie a následně jsou prezentovány výsledky výpočtu proudění v mezní vrstvě atmosféry (dále jen „MVA“) s pasivní příměsí. Rovnice pro transport pasivní příměsi byla autorem doprogramována do softwaru.

První část práce se věnuje popisu MVA, jsou uvedeny zákony zachování a systém Navierových Stokesových rovnic, který proudění v MVA popisuje. Dále je odvozena rovnice pro transport pasivní příměsi.

V další části práce je popsán matematický model, který je použit pro řešení úloh a jsou uvedeny hypotézy a aproximace, které zjednodušují řešený problém.

Pro výpočet turbulence byl použit LES model a celý výpočet byl uskutečněn metodou konečných objemů pomocí open source softwaru OpenFOAM.

Závěr práce je věnován výsledkům numerických výpočtů. Byla počítána 2D úloha pro proudění oblastí s pevnou překážkou. Byly použity tři různé LES modely turbulence a výpočet byl proveden pro různé vstupní rychlosti. Sledováno bylo pole rychlosti a hodnoty koncentrací pasivní příměsi, které se šířily ze šesti bodových zdrojů umístěných na zemi před překážkou. Následně byly výsledky porovnány s dostupnými výsledky a zhodnoceny příčiny rozdílného chování modelu.

Abstract

Key words: CFD, LES, atmospheric boundary layer, passive scalar, OpenFOAM, Boussinesq approximation

This thesis covers an overview of theory and numerical results of flows simulation in atmospheric boundary layer (ABL) with transport of passive scalar, this part was programmed in the software by author.

In the first part there is a description of governing Navier-Stokes equations which describe the ABL flows. The transport equation for passive scalar is also developed here. In the next part of the thesis there is a description of the used mathematical model for numerical simulation. Also hypothesis and approximations which simplify our model are mentioned here.

An open source software OpenFOAM was used for numerical simulation. As a numerical method the finite volume method was used and for handling turbulence the LES model was incorporated.

Last part of this thesis contains the results of calculations which were performed for 2D test case of flow over the barrier. 3 different LES turbulence models were tested for different inflow velocity profiles and values. Investigation of results was done for velocity field and concentration of passive scalar which came from six dot sources before the barrier. Our results were then compared with available results and causes of different behaviour were discussed.

Obsah

1	Použité značení a symboly	1
1.1	Základní použité matematické operátory a věty.....	4
2	Úvod.....	6
3	Atmosféra.....	8
3.1	Mezní vrstva atmosféry	8
3.2	Fyzika mezní vrstvy atmosféry	10
3.2.1	Zákony zachování	10
3.3	Transportní rovnice pro pasivní příměs.....	13
3.3.1	Sedimentace.....	15
3.4	Stabilita atmosféry	16
3.5	Shrnutí kapitoly 3	18
4	Matematika	20
4.1	Turbulence	20
4.1.1	Modely turbulence	20
4.1.2	Large Eddy Simulation.....	21
4.2	Použité numerické metody.....	28
4.2.1	Diskretizace	28
4.3	Hypotézy a aproximace použité v práci	33
4.3.1	Boussinesqova aproximace.....	34
5	Program OpenFOAM	37
5.1	Použité řešiče	37
5.1.1	Řešič Buoyant Boussinesq PimpleFoam	37
5.1.2	Řešič PimpleFoam	40
5.1.3	Vztah mezi rychlostí a tlakem	41
5.1.4	Realizace v OpenFOAM.....	41
5.1.5	Numerické řešiče	42
6	Porovnání s dostupnými výsledky	44

6.1	Rozdíly mezi porovnávanými řešiči	45
7	Aplikace a výsledky	49
7.1	Výpočetní oblast	49
7.2	Výpočetní síť	49
7.3	Okrajové podmínky	51
7.3.1	OP na vstupu	51
7.3.2	OP na výstupu	52
7.3.3	OP na zemi	52
7.3.4	OP na horní hranici	53
7.4	Zdroje pasivní příměsi	53
7.5	Výsledky testovacích výpočtů	53
7.5.1	Porovnání s dostupnými výsledky z jiných výpočtů	54
7.5.2	Porovnání řešičů BBPF a PF	60
7.5.3	Porovnání modelů turbulence	66
7.5.4	Průběh výpočtu	71
8	Závěr	73
9	Seznam použité literatury a zdrojů	76

Seznam obrázků

Obrázek 3.1 Vrstvy atmosféry [19]	8
Obrázek 4.1 Schéma kontrolních objemů	29
Obrázek 4.2 Schéma výpočetní sítě.....	30
Obrázek 7.1 Výpočetní síť.....	49
Obrázek 7.2 Detail sítě kolem překážky	50
Obrázek 7.3 Zdroje příměsi.....	53
Obrázek 7.4 Rychlostní pole PF.....	55
Obrázek 7.5 Rychlostní pole PF2.....	55
Obrázek 7.6 Rychlostní pole BBPF	55
Obrázek 7.7 Rychlostní pole ÚTMFS	56
Obrázek 7.8 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 50$	56
Obrázek 7.9 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 100$	57
Obrázek 7.10 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 200$	57
Obrázek 7.11 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 3 m nad povrchem	58
Obrázek 7.12 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 7 m nad povrchem	58
Obrázek 7.13 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 11 m nad povrchem	59
Obrázek 7.14 Rychlostní pole PF pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$	60
Obrázek 7.15 Rychlostní pole BBPF $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$	60
Obrázek 7.16 Rychlostní pole PF pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$	61
Obrázek 7.17 Rychlostní pole BBPF $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$	61
Obrázek 7.18 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$, $x = 50$	62
Obrázek 7.19 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$, $x = 50$	62
Obrázek 7.20 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$, $x = 100$	62
Obrázek 7.21 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$, $x = 100$	63
Obrázek 7.22 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$, $x = 200$	63
Obrázek 7.23 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$, $x = 200$	63
Obrázek 7.24 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 3 m nad povrchem	64

Obrázek 7.25 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 7 m nad povrchem	65
Obrázek 7.26 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 11 m nad povrchem	65
Obrázek 7.27 Rychlostní pole Smagorinsky	66
Obrázek 7.28 Rychlostní pole PF	66
Obrázek 7.29 Rychlostní pole PF2	67
Obrázek 7.30 Rychlostní pole k-omega	67
Obrázek 7.31 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 50$	68
Obrázek 7.32 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 100$	68
Obrázek 7.33 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 200$	69
Obrázek 7.34 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 3 m nad povrchem	70
Obrázek 7.35 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 7 m nad povrchem	70
Obrázek 7.36 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 11 m nad povrchem	71
Obrázek 7.37 Průběh reziduí	72

Seznam tabulek

Tabulka 7.1 Parametry hrubé sítě	50
Tabulka 7.2 Parametry jemné sítě	50

1 Použité značení a symboly

a	zrychlení
	advekční koeficient
A_f	plocha stěny KO
$[A]$	matice A
a_p	prvek matice A
C	konstanta v Rossbyho – Montgomeryho vztahu
	koncentrace příměsi
\bar{C}	Clarkův tenzor napětí
c_k, c_e	konstanty modelu Smagorinsky
C_c	korekční faktor pro sedimentační rychlost
Co	Courantovo číslo
c_p	měrná tepelná kapacita za konstantního tlaku
c_v	měrná tepelná kapacita za konstantního objemu
D	koeficient molekulární difuze
$D_{k_{eff}}, D_{\omega_{eff}}$	efektivní difuzivita v k - ω modelu turbulence
D_p	koeficient tlakové difuze
D_T	koeficient teplotní difuze
e	celková energie
f, F, G	označení obecné funkce
f	Coriolisův parametr
	objemová síla
f_c	zdrojová funkce pro pasivní příměs
F	numerický tok
F_G	gravitační síla
F_{VZ}	vztlaková síla
g	gravitační zrychlení
G	filtrovací funkce v LES modelu
h	entalpie
H	výška mezní vrstvy atmosféry
$\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$	jednotkové vektory ve směru os ortogonální báze

k	součinitel tepelné vodivosti turbulentní kinetická energie
L	rozměr oblasti
\bar{L}	Leonardův tenzor napětí
\vec{n}	normálový vektor
N	počet částic v objemu
p	tlak
p_0	hlavní složka veličiny v Boussinesqově aproximaci
p'	poruchová složka veličiny v Boussinesqově aproximaci
p_r	referenční tlak
\tilde{p}	kinematický tlak
q	tepelný tok
q_m	hmotnostní tok
R	měrná plynová konstanta poloměr částice příměsi
\bar{R}	Reynoldsův SGS tenzor napětí
Re	Reynoldsovo podobnostní číslo
\bar{s}	střední část veličiny s
s'	flukтуаční část veličiny s
\bar{S}	tenzor napětí velkých měřítek
S_c	Schmidtovo podobnostní číslo
u	vnitřní energie
u, v	složky rychlosti
\bar{u}, \bar{v}	střední části složky rychlosti
u', v'	flukтуаční části složky rychlosti
u_r	referenční rychlost
u^*	třecí rychlost
t	čas
T	absolutní teplota
v_s	sedimentační rychlosti
V	objem oblast v prostoru

∂V	hranice oblasti v prostoru
\bar{V}	uzávěr oblasti
z	výška oblasti
z_0	parametr drsnosti
α_{eff}	koeficient viskozity
α_ϕ	relaxační faktor
β	koeficient teplotní roztažnosti
γ	vertikální teplotní gradient
γ_a	suchoadiabatický gradient
δ_{ij}	Kroneckerovo delta
Δ	šířka filtru v LES modelu
ϵ	turbulentní disipace
θ	potenciální teplota
θ_0	hlavní složka veličiny v Boussinesqově aproximaci
θ'	poruchová složka veličiny v Boussinesqově aproximaci
κ	Von Kármánova konstanta
	Poissonova konstanta
λ	střední volná dráha částice
μ	dynamická viskozita
ν	kinematická viskozita
ν_{eff}	efektivní viskozita v k modelu turbulence
ν_{SGS}	SGS viskozita
$\vec{\xi}$	poziční vektor v LES modelu
ρ	hustota plynu
ρ_0	hlavní složka veličiny v Boussinesqově aproximaci
ρ'	poruchová složka veličiny v Boussinesqově aproximaci
ρ_k	kinematická hustota
ρ_p	hustota příměsi
ρ_t	hustota tekutiny – vzduchu
$\bar{\tau}$	tenzor napětí

$\bar{\tau}^r$	SGS reziduální tenzor napětí
ϕ	zeměpisná šířka
ϕ_p	hodnota veličiny v těžišti kontrolního objemu P
ϕ_f	hodnota veličiny na stěně KO
ψ	off-center koeficient Crank Nicolson metody
ω	poměrné specifické ztráty
Ω	úhlová rychlost otáčení země

Vektory jsou podle potřeby pro přehlednost textu značeny trojím způsobem:

\vec{u}, \mathbf{u}, u_i

1.1 Základní použité matematické operátory a věty

Operátor Nabra:

$$\nabla = \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad (1.1)$$

Gradient:

$$\nabla u = \hat{i} \frac{\partial u}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial u}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial u}{\partial z} = \left[\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z} \right]^T \quad (1.2)$$

Divergence:

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \quad (1.3)$$

Rotace:

$$\nabla \times \vec{v} = \det \begin{bmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ v_x & v_y & v_z \end{bmatrix} \quad (1.4)$$

Laplaceův operátor:

$$\Delta u = \nabla \cdot (\nabla u) \quad (1.5)$$

Gaussova věta:

Nechť $V \in R^3$ a \vec{n} je vnější jednotkovou normálou k hranici ∂V oblasti V . Potom pro každou diferencovatelnou funkci f platí:

$$\int_V \nabla \cdot f dx = \int_{\partial V} f \cdot \vec{n} ds \quad (1.6)$$

Reynoldsův transportní teorém:

Reynoldsův transportní teorém nám říká, že časová změna veličiny G v pohybujícím se objemu V je rovna součtu změn této veličiny ve fixním objemu a toku přes hranici objemu V .

$$\frac{d}{dt} \int_V G dx = \int_V \left(\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial G \vec{u}}{\partial \vec{x}} \right) dx \quad (1.7)$$

Použitím Greenovy formule dostaneme transportní teorém v následující formě:

$$\frac{d}{dt} \int_V G(x, t) dx = \int_V \frac{\partial G(x, t)}{\partial t} dx + \int_{\partial V} G(x, t) \vec{v} \cdot \vec{n} ds \quad (1.8)$$

2 Úvod

Tato práce popisuje možnosti využití open source softwaru OpenFOAM pro modelování proudění v mezní vrstvě atmosféry s pasivní příměsí.

Cílem práce bylo teoreticky popsat děje v atmosféře, sestavit vhodný matematický a výpočetní aparát, doprogramovat do softwaru transport pasivní příměsi a reálně vyzkoušet využití softwaru OpenFOAM na sérii testovacích příkladů. Následně byly výsledky porovnány s dříve provedenými výpočty provedenými na Ústavu technické matematiky Fakulty strojní ČVUT v Praze.

V první části práce jsou popsány děje v atmosféře a uvedeny zákony zachování a další vztahy, kterými se tyto děje popisují. Je zde také odvozena a popsána transportní rovnice pro pasivní příměs s uvažováním sedimentace a nastíněn problém stability atmosféry.

V této práci byla zvolena pro výpočet metoda konečných objemů s tlakovou korekcí. Turbulence je modelována LES metodou a testovali jsme zde tři sub grid scale modely turbulence. Jde o model *Smagorinsky*, jednorovnicový *k-model* a dvourovnicový *k-omega model*. Pro proudění v mezní vrstvě atmosféry přijímáme zjednodušující předpoklady, v našem případě jsme uvažovali vazké, nestlačitelné proudění bez vlivu Coriolisových sil a uvažována byla pouze neutrální stratifikace atmosféry.

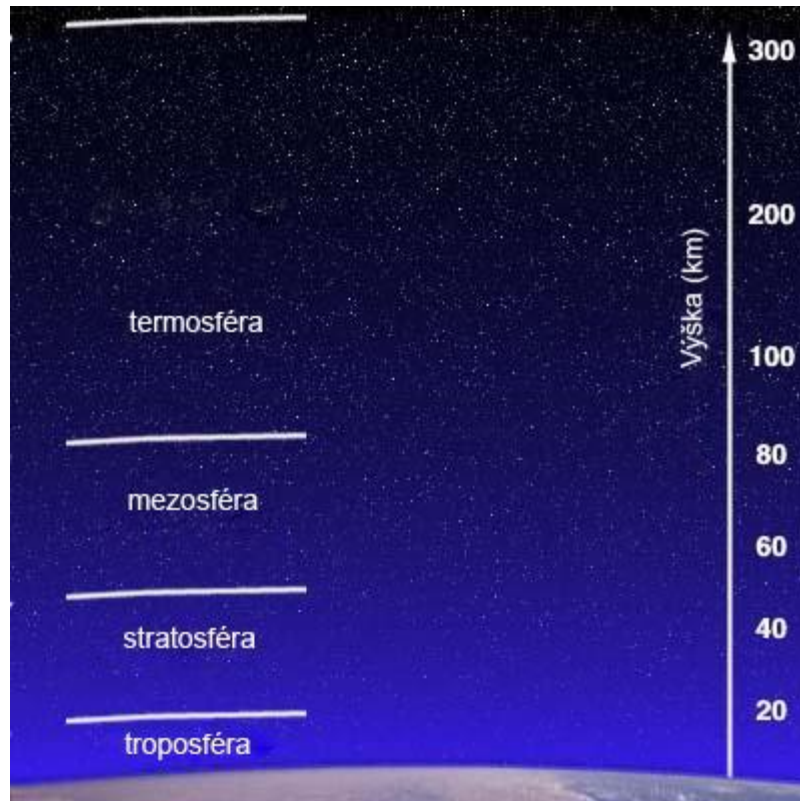
Pro výpočet proudového pole byly využity dva řešiče již implementované v softwaru OpenFOAM. Oba použité řešiče jsou sestaveny pro výpočet nestlačitelného proudění. První řešič – Buoyant Boussinesq Pimple Foam – využívá Boussinesqovu aproximaci a uvažuje vliv tíhové síly. Druhý použitý řešič – Pimple Foam – pracující s absolutními hodnotami tlaku a bez uvažování tíhových sil v momentových rovnicích. Do obou těchto řešičů byla doprogramována část pro transport pasivní příměsi.

Pro porovnání byla zvolena práce [13], která modeluje šíření pevných částic ze silniční komunikace. Výpočet byl proveden pro stejnou oblast, ale liší se jak použitý systém rovnic, tak použité metody. V případě srovnávané práce byla použita Boussinesqova aproximace a jinak implementován člen s gravitací. Turbulence modelována metodou RANS s *k-epsilon modelem* a je použita metoda umělé stlačitelnosti.

V závěrečné 7. kapitole jsou uvedena konkrétní nastavení počítaných úloh, kdy byly pro každý řešič počítány tři sady výpočtů lišící se velikostí vstupní rychlosti do oblasti. Jsou porovnávána proudová pole a hodnoty koncentrace příměsi v různých místech výpočetní oblasti. Všechny popisované výsledky jsou zde graficky zobrazeny a okomentovány.

3 Atmosféra

Atmosféra je vrstva plynné směsi nad povrchem Země, kterou můžeme rozdělit do několika podvrstev, např. podle obrázku 3.1. Pro náš případ je relevantní podvrstva nejbližší zemskému povrchu, která se nazývá troposféra, její tloušťka dosahuje hodnot od cca 7 kilometrů nad póly až po cca 20 kilometrů nad rovníkem. Typickou vlastností této vrstvy je teplotní stratifikace.



Obrázek 3.1 Vrstvy atmosféry [19]

3.1 Mezní vrstva atmosféry

MVA je vrstva vzduchu v troposféře těsně nad zemským povrchem. Je to oblast, kde již nelze zanedbat vliv vazkých sil, a je ovlivňována v krátkém časovém úseku přímo zemským povrchem. Projevuje se zde ohřev, ochlazování, tření, různé rozložení vlhkosti atd. Vyskytují se zde turbulence, které napomáhají přenosu tepla, hmoty a momentu. Vzhledem k tomu, že jsme touto částí atmosféry přímo obklopeni a děje se v ní většina přenosových a meteorologických jevů, je přirozené se jí nejvíce zabývat.

Definice: Mezní vrstva atmosféry je nejnižší část troposféry, ve které je pohyb určen rovnováhou smykového napětí se silou tlakovou, Coriolisovou, tíhovou a Archimedovou [7].

Tloušťka MVA je různá. Za určitých okolností (stabilní zvrstvení atmosféry nad nepřilíš členitým povrchem) může dosahovat tloušťky cca 500 m, naopak při nestabilním zvrstvení, např. v horských oblastech, až kolem 2 km. V oblastech nad rovným povrchem lze pro její odhad použít tzv. Rossbyho – Montgomeryho vztah

$$H = C \frac{u^*}{f} \quad (3.1)$$

kde u^* je tzv. třecí rychlost $u^* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho_t}}$, τ_0 je tangenciální napětí na stěně (zemi), ρ_t je hustota vzduchu, $C \in (0,15; 0,4)$ je konstanta a $f = 2\Omega \sin\phi$ je tzv. Coriolisův parametr, Ω úhlová rychlost otáčení Země a ϕ zeměpisná šířka.

Příklad: Odhad tloušťky MVA v ČR

Byly použity tyto hodnoty parametrů:

$$C = 0,4$$

$$\kappa = 0,41$$

$$u_r = 10 \text{ m s}^{-1}$$

$$z = 100 \text{ m}$$

$$d = 0 \text{ m}$$

$$z_0 = 0,1$$

$$\Omega = \frac{2 \cdot \pi}{24 \cdot 60 \cdot 60} \text{ s}^{-1}$$

$$\phi = \frac{50 \cdot \pi}{180} \text{ rad}$$

$$H = C \frac{u^*}{f} = C \cdot \frac{\kappa \cdot u_r}{\ln\left(\frac{z-d}{z_0}\right) \cdot 2\Omega \sin\phi} = 0,4 \cdot \frac{0,41 \cdot 10}{\ln\left(\frac{100-0}{0,1}\right) \cdot \frac{2 \cdot 2 \cdot \pi}{24 \cdot 60 \cdot 60} \sin\left(\frac{50 \cdot \pi}{180}\right)}$$

$$\mathbf{H = 2133 \text{ m}}$$

Vlastnosti MVA:

- Teplotní a hustotní stratifikace
- Velké výpočetní oblasti

- Velký rozsah měřítek pohybu
- Vliv Coriolisovy síly
- Velké hodnoty Reynoldsových čísel
- Výskyt turbulence

Je důležité si uvědomit, že rychlosti proudění v MVA jsou oproti rychlosti zvuku poměrně malé (jednotky až desítky m/s oproti cca $330 m/s$) a můžeme tak při popisu proudění v MVA zavést zjednodušující předpoklady, např., že toto proudění je nestlačitelné. Hustotu vzduchu můžeme tedy považovat buď za konstantní, nebo za funkci prostorových proměnných, popřípadě času při nestacionárním proudění. Použitá zjednodušení budou popsána v kapitole 4.3.

3.2 Fyzika mezní vrstvy atmosféry

Na proudění v atmosféře se můžeme dívat jako na pohyb tekutiny, který je charakterizován několika základními veličinami – rychlostí, hustotou, tlakem, teplotou a energií. Soustavu rovnic, která tento pohyb popisuje, odvodíme pomocí zákonů zachování.

3.2.1 Zákony zachování

Základními zákony, kterými se popisují pohyby v atmosféře, jsou tzv. zákony zachování:

1. Zákon zachování hmoty – rovnice kontinuity
2. Zákon zachování hybnosti – Navierovy – Stokesovy rovnice
3. Zákon zachování energie – rovnice energie nebo entalpie

Těmito zákony můžeme popsat vzájemnou závislost neznámých veličin – tlaku, rychlosti, energie a teploty.

Dále lze z hlediska termomechaniky atmosféru rozložit do více složek:

1. suchý vzduch
2. příměsi – např. voda, nečistoty.

Lze předpokládat, že suchý vzduch se chová jako ideální plyn, který je popsán stavovou rovnicí – viz dále.

Nyní popíšeme stručně každý z uvedených zákonů zachování. Bližší odvození lze najít v mnoha knihách věnujících se mechanice tekutin, např. v [3] nebo v [6].

3.2.1.1 Zákon zachování hmoty

Zákon zachování hmoty můžeme pro libovolný kontrolní objem V , který obsahuje látku o hustotě $\rho = \rho(\vec{x}, t)$ zapsat jako

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = 0 \quad (3.2)$$

Při uvažování dostatečné hladkosti příslušných funkcí a skutečnosti, že tato integrální rovnice (3.2) platí pro libovolný kontrolní objem, můžeme ji převést na rovnici diferenciální

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\vec{v}\rho) = 0 \quad (3.3)$$

Tento tvar zákona zachování hmoty se nazývá **rovnice kontinuity**.

3.2.1.2 Zákon zachování hybnosti

Zákon zachování hybnosti můžeme zapsat pomocí 2. Newtonova pohybového zákona pro libovolný kontrolní objem V , který obsahuje látku o hustotě $\rho = \rho(\vec{x}, t)$ pohybující se rychlostí \vec{v} a na něž působí síly \vec{F} jako

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV = \Sigma \vec{F} \quad (3.4)$$

Označme hustotu působících objemových sil jako \vec{f} a symbolem $\bar{\tau}$ Cauchyho tenzor napětí. Po aplikaci transportního teorému, Gaussovy věty a uvažování dostatečné hladkosti uvedených funkcí můžeme psát tuto rovnici v diferenciálním tvaru

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\vec{v}\vec{v})}{\partial \vec{x}} = \frac{-\partial p}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \bar{\tau}}{\partial \vec{x}} + \rho \vec{f} \quad (3.5)$$

Tyto rovnice se spolu s rovnicí kontinuity (3.3) nazývají Navierovy – Stokesovy rovnice (NS).

3.2.1.3 Zákon zachování energie

Energii e vztaženou na jednotku hmotnosti, která je definovaná jako součet vnitřní u a kinetické $\frac{\vec{v}^2}{2}$ energie tekutiny můžeme zapsat jako

$$e = u + \frac{\vec{v}^2}{2} \quad (3.6)$$

zákon zachování energie potom zapíšeme, s použitím \vec{q} jako tepelného toku, ve tvaru

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e \vec{v})}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial(\bar{\tau} \vec{v})}{\partial \vec{x}} + \rho \vec{q} + \rho \vec{f} \vec{v} \quad (3.7)$$

3.2.1.4 Stavová rovnice

Pro ideální plyn používáme známou stavovou rovnici. Pro plyn o jednotkovém objemu, hustotě ρ , absolutní teplotě T a měrné plynové konstantě

$R = 287 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ má tato rovnice tvar

$$p = \rho R T \quad (3.8)$$

Pracujme dále s touto rovnicí a s rovnicí energie. Pomocí měrných tepelných kapacit za konstantního tlaku a objemu c_p a c_v můžeme R vyjádřit jako

$$R = c_p - c_v \quad (3.9)$$

Pomocí těchto konstant můžeme definovat Poissonovu konstantu

$$\kappa = \frac{c_p}{c_v} > 1 \quad (3.10)$$

a entalpii h , kterou můžeme vyjádřit vztahem

$$h = c_p T \quad (3.11)$$

Děje v atmosféře můžeme považovat za adiabatické, tzn., že pro ně platí rovnice

$$\frac{p^\kappa}{T} = \text{konst.} \quad (3.12)$$

a z této rovnice vyplývá následující vztah

$$\frac{T}{T_1} = \left(\frac{p}{p_1}\right)^\kappa \quad (3.13)$$

Dále můžeme vyjádřit vnitřní energii pomocí výše uvedených vztahů jako

$$u = c_v T = c_p T - RT = h - \frac{p}{\rho} \quad (3.14)$$

Z předešlých rovnic můžeme definovat takzvanou **potenciální teplotu θ** .

Potenciální teplota je teplota plynu po adiabatické změně na referenční tlak p_r

$$\theta = T \left(\frac{p_r}{p}\right)^\kappa \quad (3.15)$$

Pro zemskou atmosféru je hodnota referenčního tlaku $P_r \approx 10^5 Pa$.

Pokud použijeme Fourierův zákon pro tepelnou vodivost se součinitelem tepelné vodivosti k

$$\vec{q} = -k \frac{\partial T}{\partial \vec{x}} \quad (3.16)$$

Pak rovnici energie (3.7) můžeme upravit pomocí výše odvozených vztahů a ne-
uvažování tepelných zdrojů na rovnici pro absolutní teplotu

$$\rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} (T \vec{v}) \right) = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(k \frac{\partial T}{\partial \vec{x}} \right) + \frac{\partial (\bar{\tau} \vec{v})}{\partial \vec{x}} \quad (3.17)$$

dále pro potenciální teplotu

$$\rho c_v \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} (\theta \vec{v}) \right) = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(k \frac{\partial \theta}{\partial \vec{x}} \right) + \frac{\partial (\bar{\tau} \vec{v})}{\partial \vec{x}} \quad (3.18)$$

3.3 Transportní rovnice pro pasivní příměs

Zabývejme se nyní transportem příměsí, tedy látky v proudu tekutiny, která je proudem unášena.

Obecně může látka během transportu reagovat s tekutinou nebo s ostatními látkami a tím ovlivňovat proudění. V této práci se ale budeme zabývat pouze nejjednodušší možností a to nereagujícím, nehygroskopickým aerosolem. Tuto látku budeme považovat za pasivní příměs, která je unášena od zdroje proudovým polem, s tekutinou nijak nereaguje a neovlivňuje tak samotné proudění.

Odvoďme nyní rovnici pro transport pasivní příměsi, převzato z [3].

Označme ρ_p hustotu příměsi a ρ_t hustotu tekutiny, koncentrace příměsi se může definovat poté jako

$$C = \frac{\rho_p}{\rho_p + \rho_t} \quad (3.19)$$

Vyděme nyní z rovnice kontinuity (3.3) a vyjádříme změnu hmotnosti příměsi jako následující součet hmotnostní produkce m_{vz} a toku m_{tok}

$$\frac{d}{dt} m_p = m_{vz} + m_{tok} \quad (3.20)$$

Pokud se v našem kontrolním objemu vyskytuje zdroj příměsi, jehož intenzitu vyjádříme pomocí zdrojové funkce f_c , pak můžeme hmotnostní produkci zapsat jako

$$m_{vz} = \int_V \rho_p \cdot f_c dV \quad (3.21)$$

pro tok hmotnosti přes hranici kontrolního objemu zavedeme hustotu hmotnostního toku jako \vec{q}_m , symbolem \vec{n} označíme vnější normálový vektor k hranici ∂V a poté tento člen zapíšeme jako

$$m_{tok} = - \int_{\partial V} \vec{q}_m \cdot \vec{n} ds \quad (3.22)$$

Po dosazení do výše uvedené rovnice (3.20) dostaneme vztah

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_p \cdot C dV = \int_V \rho_p \cdot f_c dV - \int_{\partial V} \vec{q} \cdot \vec{n} ds \quad (3.23)$$

Aplikací transportního teorému na levou část rovnice a za předpokladu, že funkce v integrálech jsou dostatečně spojité, můžeme napsat diferenciální tvar rovnice pro příměsi

$$\frac{\partial(\rho_p C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_p C \vec{v})}{\partial \vec{x}} = \rho_p f_c - \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{x}} \quad (3.24)$$

Vyjádříme nyní hustotu hmotnostního toku \vec{q}_m pomocí členů difuze molekulární D , teplotní D_T a tlakové D_p

$$\vec{q}_m = -\rho_p \left(D \frac{\partial C}{\partial \vec{x}} + D_T \frac{\partial T}{\partial \vec{x}} + D_p \frac{\partial p}{\partial \vec{x}} \right) \quad (3.25)$$

V atmosférickém proudění můžeme zanedbat poslední dva členy rovnice (3.25) a dostáváme transportní rovnici pro pasivní příměs v tomto tvaru

$$\frac{\partial(\rho_p C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_p C \vec{v})}{\partial \vec{x}} = \rho_p f_c + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(\rho_p D \frac{\partial C}{\partial \vec{x}} \right) \quad (3.26)$$

3.3.1 Sedimentace

Zavedme nyní tzv. sedimentační rychlost \vec{v}_s , která odpovídá ustálené pádové rychlosti v jinak klidném ovzduší. Pro její určení je nutné aproximovat velikosti a tvary částic aerosolu. Ty mohou být značně různorodé, v této práci zavádíme model částice aerosolu jako kouli o poloměru r a hustotě ρ_p , která se pohybuje v proudu tekutiny – vzduchu o hustotě ρ_t .

Sedimentační rychlost vyjádříme pomocí Stokesova vztahu

$$\vec{v}_s = \left(0, 0, -C_c \frac{2(\rho_p - \rho_t) \vec{g} r^2}{9\mu} \right) \quad (3.27)$$

kde C_c je korekční faktor daný vztahem

$$C_c = 1 + \lambda/r \left(2,34 + 1,05 e^{\frac{-0,39R}{\lambda}} \right) \quad (3.28)$$

a λ značí střední volnou dráhou částice v proudu vzduchu

$$\lambda = \frac{1}{\frac{\sqrt{2}\pi 4R^2 N}{V}} \quad (3.29)$$

Pokud uvažujeme konstantní hustotu příměsi, pak dostáváme následující transportní rovnici

$$\frac{\partial(C)}{\partial t} + \frac{\partial(C\vec{v})}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial(C\vec{v}_s)}{\partial \vec{x}} = f_c + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(D \frac{\partial C}{\partial \vec{x}} \right) \quad (3.30)$$

Pro výpočet byly použity následující hodnoty parametru:

$$\lambda = 0,066 \mu m$$

$$r = 10 \mu m$$

$$\rho_p = 1000 \text{ kgm}^{-3}$$

$$\rho_t = 1,24 \text{ kgm}^{-3}$$

$$g = 9,81 \text{ ms}^{-2}$$

$$\mu = 1,80 \text{ Pa s}$$

V praxi jsou sledovány částice označované jako PM10. Jsou to částice o průměru menším než $10 \mu m$, které jsou hodnoceny jako velmi škodlivé pro dýchací systém člověka [25]. Proto volíme tento rozměr i v našem modelu.

Poslední uvedená rovnice (3.30) byla doprogramována do výpočetního softwaru a budeme s ní dále pracovat v aplikační části.

3.4 Stabilita atmosféry

Atmosféra je charakteristická vertikálním rozložením teploty a hustoty a tento fakt má zásadní vliv na vertikální přenos hybnosti, tepla a příměsí. Pro pochopení stability atmosféry vyjděme z rovnováhy sil, které na částici pohybující se vertikálním směrem působí.

Mějme částici o objemu V a hustotě ρ_1 , která se nachází v prostředí o hustotě ρ_2 a působí na ni tíhové zrychlení \vec{g} . Celková síla působící na částici bude dána vektorovým součtem gravitační a vztlakové síly

$$\vec{F} = \vec{F}_G + \vec{F}_{VZ} \quad (3.31)$$

Celkovou sílu vyjádříme jako

$$\vec{F} = \vec{a}V\rho_1 \quad (3.32)$$

gravitační sílu ve tvaru

$$\vec{F}_G = \vec{g}V\rho_1 \quad (3.33)$$

a vztlakovou sílu pak vztahem

$$\vec{F}_{VZ} = -\vec{g}V\rho_2 \quad (3.34)$$

Výsledné zrychlení částice je poté dáno jako

$$\vec{a} = \vec{g} \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1} \quad (3.35)$$

Uvážíme-li dále, že daný děj je adiabatický, můžeme použít následující vztah

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{T_1}{T_2} \quad (3.36)$$

a následně upravit vztah (3.35) na tvar

$$\vec{a} = \vec{g} \frac{T_2 - T_1}{T_2} \quad (3.37)$$

Pro vrstvu atmosféry v blízkosti zemského povrchu – troposféru – je typický pokles teploty s narůstající nadmořskou výškou. Zavedeme zde vertikální teplotní gradient

$$\gamma = \frac{-\partial T}{\partial z} \quad (3.38)$$

Dále zavedeme tzv. suchoadiabatický (přesněji řečeno nenasyceně-adiabatický) gradient, tj. teplotní gradient suchého vzduchu

$$\gamma_a = \frac{-\vec{g}}{c_p} = 0,0098 \text{ Km}^{-1} \quad (3.39)$$

Vertikální pohyby částic se považují za adiabatické a suchoadiabatický gradient je teplotní gradient pro suchý (nenasycený) vzduch, při kterém nastává tzv. indiferentní stratifikace – viz dále.

Pokud nyní přesuneme částici z hladiny z_1 o teplotě T_1 a hustotě ρ_1 do hladiny $z_2 = z_1 + dz$ o teplotě T_2 a hustotě ρ_2 , částice se může chovat následujícími způsoby:

1. Částice zůstává na nové hladině z_2 – indiferentní stratifikace atmosféry

$$\gamma = \gamma_a \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0 \quad (3.40)$$

2. Částice se vrací do hladiny z_1 – stabilní stratifikace atmosféry

$$\gamma > \gamma_a \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial z} > 0 \quad (3.41)$$

3. Částice pokračuje v pohybu a zvětšuje svou výchylku z původní polohy – nestabilní stratifikace atmosféry

$$\gamma < \gamma_a \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial z} < 0 \quad (3.42)$$

3.5 Shrnutí kapitoly 3

Celkem jsme v této kapitole zavedli 1 rovnici kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\vec{v}\rho) = 0 \quad (3.43)$$

3 momentové rovnice pro 3 směry souřadného systému

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\vec{v}\vec{v})}{\partial \vec{x}} = \frac{-\partial p}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \bar{\tau}}{\partial \vec{x}} + \rho \vec{f} \quad (3.44)$$

a 1 rovnici pro energii – teplotu

$$\rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}}(T\vec{v}) \right) = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(k \frac{\partial T}{\partial \vec{x}} \right) + \frac{\partial(\bar{\tau}\vec{v})}{\partial \vec{x}} \quad (3.45)$$

Dostáváme tedy systém 5 rovnic pro 5 neznámých veličin ρ, u, v, w, T .

Dále jsme tento systém spojili stavovou rovnicí

$$p = \rho RT \quad (3.46)$$

a máme tak známý vztah pro výpočet hodnot tlaku. Tím se stává systém uzavřeným.

Dále jsme odvodili a přidali rovnici pro transport pasivní příměsi

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C \vec{v}}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial C \vec{v}_s}{\partial \vec{x}} = f_c + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(D \frac{\partial C}{\partial \vec{x}} \right) \quad (3.47)$$

4 Matematika

V této kapitole popíšeme řešení problému turbulence, použité numerické metody a zavedeme hypotézy a aproximace, které byly použity při výpočtech.

4.1 Turbulence

Turbulence je „režimem“ proudění tekutiny, kdy proudnice jednotlivých částí tekutiny jsou náhodné a tudíž nepředvídatelné.

Důležitým parametrem pro posouzení vlastností proudění je podobnostní Reynoldsovo číslo. Vyjádřeme řádově jeho hodnotu pro náš případ proudění v MVA:

- Rychlost proudění v oblasti dosahuje hodnot jednotek, maximálně desítek metrů za sekundu, tedy $\vec{u} \approx 10 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
- Rozměry oblasti v normálovém směru ke směru proudění jsou v jednotkách kilometrů, tedy $L \approx 10^3 \text{ m}$.
- Posledním parametrem pro určení Reynoldsova čísla je kinematická viskozita, její přibližná hodnota je $\nu \approx 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

Z těchto hodnot tedy můžeme řádově určit velikost Reynoldsova čísla

$$Re = \frac{\vec{u} \cdot L}{\nu} = \frac{10 \cdot 10^3}{10^{-5}} \approx 10^9 \quad (4.1)$$

Z tohoto údaje můžeme usoudit, že proudění v MVA je silně turbulentní a musíme tedy na tuto skutečnost brát ohled v našich výpočtech.

4.1.1 Modely turbulence

Pro výpočet turbulence lze použít mnoho přístupů. Od přímé numerické simulace DNS, přes kombinaci simulace a modelování LES, až po RANS modely.

DNS – Direct Numerical Simulation metoda aplikuje Navierovy – Stokesovy rovnice přímo na výpočet bez použití modelu turbulence. Pro zachycení jevů všech měřítek turbulence je tedy nutné použít dostatečně jemnou síť, která zachytí i nejmenší víry. Při uvážení velikostí výpočetních oblastí a Reynoldsových

čísel v atmosférickém proudění je použití DNS se současnou technikou v této oblasti v podstatě nemožné.

Poměrně často používanou metodou v atmosférickém proudění je **LES – Large Eddy Simulation**, tedy simulace velkých vírů. Jedná se o spojení přístupů DNS a turbulentního modelu, kdy jsou pohyby velkých měřítek přímo počítány z příslušných NS rovnic a pohyby malých měřítek jsou filtrovány podle měřítka sítě a počítány zvoleným modelem turbulence. Oproti DNS je tato metoda méně výpočtově náročná. Tato metoda je použita v této práci a dále se s ní hlouběji seznámíme v dalších kapitolách.

Momentálně asi nejpoužívanějším přístupem v modelování MVA je užití tzv. **RANS modelu – Reynolds Averaged Navier – Stokes equation model**. Při použití tohoto přístupu je proudové pole rozděleno na hlavní a flukтуаční části a hlavní část je přímo počítána ze středovaných rovnic. Rozdílem oproti LES modelu je rozdělení pole veličin podle fyzikálních hodnot, jako jsou kinetická energie a turbulentní disipace a ne podle vlastností sítě. Systém RANS rovnic není uzavřen a je třeba jej doplnit o tzv. uzávěr. To znamená, že jsme nuceni problém modelování turbulence na nějaké úrovni aproximovat. Výhodou je výrazně menší výpočtová náročnost ve srovnání s DNS i LES. Výpočet s RANS modelem lze také, oproti LES modelu, uskutečnit na hrubších sítích.

4.1.2 Large Eddy Simulation

Large Eddy Simulation – LES metoda vychází z předpokladu, že pohyby velkých měřítek (velké víry) jsou co do velikosti a energie výrazně větší než pohyby malých měřítek. Pohyby velkých měřítek se tedy podílejí největší měrou na přenosu látek prouděním. Toto vybízí řešit velké víry přímo řešením NS rovnic a parametricky modelovat pohyby malých měřítek pomocí turbulentní viskozity. Vliv malých vírů na velké víry je přenesen pomocí tzv. sub-grid scale (SGS) modelů.

4.1.2.1 LES filtry

V případě LES metody lze mluvit o rozdělení pole veličiny na hlavní část \bar{u} , která je přímo řešená a fluktuaci u' , která tvoří sub-grid část, tedy

$$u = \bar{u} + u' \quad (4.2)$$

Zavedme nyní tzv. filtrovací funkci $G(\Delta, \vec{x}, \vec{\xi})$, která musí splňovat podmínku

$$\oint G(\Delta, \vec{x}, \vec{\xi}) d\vec{\xi} = 1 \quad (4.3)$$

V tomto vztahu představuje \vec{x} umístění středované veličiny v prostoru, $\vec{\xi}$ poziční vektor a Δ šířku filtru.

Přímo řešená část veličiny bude v tomto případě zastoupena středovanou veličinou kompletního pole, což můžeme formálně zapsat jako konvoluci příslušné funkce a filtrovací funkce G

$$\bar{u}(\vec{x}, t) = G * \bar{u} = \int_V G(\Delta, \vec{x}, \vec{\xi}) \cdot \bar{u}(\vec{\xi}, t) d\vec{\xi} \quad (4.4)$$

Pro sub-grid část platí potom následující konvoluce

$$u'(\vec{x}, t) = (1 - G) * \bar{u} \quad (4.5)$$

Filtrování v LES je tzv. low-pass, tedy oddělující měřítka pohybů s vysokými frekvencemi. Filtrování může být jak prostorové, tak časové. Dále bude v této práci aplikováno prostorové filtrování.

Filtrovací funkce rozhoduje o struktuře a velikosti malých měřítka a závisí na rozdílu $(\vec{x} - \vec{\xi})$ a Δ . Důležitým parametrem je šířka filtru Δ , která určuje minimální velikost přímo řešeného víru. Lze říci, že pohyby (víry) měřítka větších než Δ jsou pohyby velkých měřítka a pohyby (víry) měřítka menších než Δ jsou pohyby malých měřítka. O výpočtu Δ bude pojednáno dále v popisu jednotlivých SGS modelů.

Možností, jak filtrování provést, existuje více. Zmiňme zde jednu možnost, která je dále využívána v aplikační části, tzv., *implicit top-hat filter* [4]. Tento filtr vyhlazuje fluktuace velkých i malých měřítka a je definován jako

$$G(\Delta, \vec{x}) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta^3}, & |\vec{x} - \vec{\xi}| \leq \frac{\Delta}{2} \\ 0, & \text{jinak} \end{cases} \quad (4.6)$$

Upravme nyní obecný tvar tenzoru napětí $\bar{\tau}$ v momentových rovnicích (3.5). Užitím Stokesovy hypotézy s předpokladem nestlačitelnosti tekutiny dostane tento tenzor v našem případě tvar

$$\bar{\tau} = \mu \text{symm} \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial \vec{x}} \right) \quad (4.7)$$

Aplikací filtrování na NS rovnice (3.5) dostáváme filtrované NS rovnice pro přímo řešenou část

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial \vec{x}} = 0 \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \vec{x}} = \frac{-1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(\nu \frac{\partial \bar{v}}{\partial \vec{x}} \right) + \vec{g} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{\tau}^r}{\partial \vec{x}}$$

poslední člen na pravé straně této rovnice obsahující derivaci $\bar{\tau}^r$ vznikl v důsledku nelinearity advekčních členů a faktu, že

$$\overline{v \frac{\partial v}{\partial x}} \neq \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \quad (4.9)$$

a proto

$$\bar{\tau}^r = \rho(\bar{v}\bar{v} - \overline{v\bar{v}}) \quad (4.10)$$

Tento člen se nazývá SGS reziduální napětí a zprostředkovává vztah mezi přímo řešenou a modelovanou částí veličin. Můžeme jej přepsat do následujícího tvaru

$$\bar{\tau}^r = -2\rho\nu_{SGS}\bar{S} + \frac{1}{3}\delta_{ij}tr(\bar{\tau}^r) \quad (4.11)$$

kde ν_{SGS} je tzv. SGS viskozita a \bar{S} je tenzor napětí velkých měřítek

$$S_{ij} = \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.12)$$

Pokud se blíže podíváme na tenzor $\bar{\tau}^r$, můžeme ho rozložit [4] na součet tří tenzorů

$$\bar{\tau}^r = \bar{L} + \bar{C} + \bar{R} \quad (4.13)$$

Každému z těchto tenzorů lze přiřknout vlastní význam.

Leonardovo napětí

$L_{ij} = \rho \overline{\overline{u_i u_j}} - \rho \overline{u_i} \overline{u_j}$ zprostředkovává interakci mezi řešenými (velkými) víry.

Clarkovo napětí

$C_{ij} = \rho \overline{\overline{u_i' u_j'}} - \rho \overline{u_i'} \overline{u_j'}$ zprostředkovává interakci mezi SGS a řešenými víry.

Reynoldsovo SGS napětí

$R_{ij} = \rho \overline{u_i' u_j'}$ zprostředkovává interakci mezi SGS víry navzájem.

4.1.2.2 SGS model

K modelování SGS části dané veličiny a dosažení možnosti uzavřít náš systém rovnic (3.3) a (3.5) je k dispozici množství SGS modelů. V této práci byly testovány a využívány modely implementované v programu OpenFOAM a to algebraický *Smagorinsky*, jednorovnicový *One Equation Eddy* a dvourovnicový *k-omega SST-SAS model*.

4.1.2.2.1 Šířka filtru Δ

Šířka filtru Δ může být počítána různými způsoby, v našem případě počítáme hodnotu Δ pomocí objemu V_i příslušné buňky násobeného konstantou c_Δ , konkrétně

$$\Delta = c_\Delta \sqrt[3]{V_i} \quad (4.14)$$

V programu OpenFOAM se tento parametr nazývá *cubeRootDelta*.

4.1.2.2.2 Smagorinsky model

Jak název modelu napovídá, jeho autorem je Joseph Smagorinsky a první verze tohoto modelu pochází již z roku 1969. Jedná se o algebraický model.

V tomto modelu se jednotlivé členy tenzoru napětí $\bar{\tau}^r$ z rovnice (4.11) vyjadřují pomocí SGS turbulentní kinetické energie k , šířky filtru Δ , tenzoru \bar{S} a konstant c_k a c_e .

Obecně má vztah pro výpočet ν_{SGS} tvar [3]

$$\nu_{SGS} = c_S \Delta^2 |\bar{S}| \quad (4.15)$$

Konkrétně jsou pak použity v programu OpenFOAM pro výpočet ν_{SGS} následující vztahy

$$\nu_{SGS} = c_k \Delta \sqrt{k} \quad (4.16)$$

kde SGS turbulentní kinetická energie k je počítána jako:

$$k = 2 \frac{c_k}{c_e} \Delta^2 |\bar{S}|^2 \quad (4.17)$$

Můžeme tak spočítat tenzor napětí $\overline{\tau^r}$ a tím uzavřít náš systém rovnic.

Testovány byly různé hodnoty parametrů:

- Parametr c_k byl testován pro hodnoty $c_k \in (0,1; 1)$. Finálně byla použita hodnota $c_k = 0,5$.
- Parametr c_Δ byl testován pro hodnoty $c_\Delta \in (0,5; 3)$. Finálně byla použita hodnota $c_\Delta = 2$.
- Parametr c_e byl testován pro hodnoty $c_e \in (0,1; 1)$. Finálně byla použita hodnota $c_e = 0,3$.

U modelu *Smagorinsky* trvalo poměrně dlouho, než bylo nalezeno nastavení, které by proudění ustálilo. Výsledkem ovšem bylo pouze ustálené proudění, které stále vykazovalo značné kvalitativní nedostatky (délka recirkulační zóny), a proto byly testovány další modely. Je nutno podotknout, že model byl testován na poměrně hrubé síti, což mohlo způsobit jeho chování.

4.1.2.2.3 One Equation Eddy

Druhý využívaný model je tzv. *One Equation Eddy* model, což je jednorovnicový *Eddy viscosity k-model*, který řeší transportní rovnici pro turbulentní kinetickou energii k

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \vec{u} \frac{\partial k}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(\nu_{eff} \frac{\partial k}{\partial \vec{x}} \right) - \frac{c_e k \sqrt{k}}{\Delta} - 2\nu_{SGS} |\bar{S}|^2 \quad (4.18)$$

kde jsou pro výpočet Δ a ν_{SGS} využity stejné vztahy (4.14) a (4.16) jako pro předchozí model. Člen ν_{eff} je pak dán součtem

$$\nu_{eff} = \nu_{SGS} + \nu \quad (4.19)$$

Z těchto veličin již jsme schopni spočítat SGS reziduální napětí a tím uzavřít náš systém rovnic.

Taktéž pro tento model byly testovány různé hodnoty parametrů:

- Parametr c_k byl testován pro hodnoty $c_k \in (0,1; 2)$. Finálně byla použita hodnota $c_k = 1$. Pro hodnoty c_k blízké spodní hranici se příliš snižovala viskozita a výsledkem tak byla velmi dlouhá recirkulační zóna, pro hodnoty blízké horní hranici byl již výpočet nestabilní.
- Parametr c_Δ byl testován pro hodnoty $c_\Delta \in (0,5; 3)$. Finálně byla použita hodnota $c_\Delta = 2$.
- Parametr c_e byl testován pro hodnoty $c_e \in (0,005; 1)$. Finálně byla použita hodnota $c_e = 0,01$. Se snižujícími se hodnotami c_e se zmenšovala recirkulační zóna za překážkou, ale pro hodnoty nižší než 0,05 začal výpočet divergovat.

U modelu *One Equation Eddy* se dařilo nastavení podstatně lépe než u předchozího a výsledkem bylo stacionární proudění, které svými parametry bylo o poznání realističtější než u modelu *Smagorinsky*.

4.1.2.2.4 K-omega SST-SAS

Posledním testovaným modelem je dvourovnicový *k-omega SST-SAS* model. SST-SAS je zkratka pro Shear Stress Transport – Scale Adapted Simulation. Tento model byl vybrán k testování pro jeho potenciálně lepší chování v blízkosti stěn. Nevýhodou je složitější nastavení s velkým množstvím parametrů a oproti ostatním modelům také vyšší výpočetní náročnost.

Model počítá s rovnicemi pro turbulentní kinetickou energii k

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial \vec{u}k}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(D_{keff} \frac{\partial k}{\partial \vec{x}} \right) + \min(G, c_1 k \beta^* \omega) - \beta^* \omega k \quad (4.20)$$

A pro míru disipace ω

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \vec{u} \omega}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(D_{\omega eff} \frac{\partial \omega}{\partial \vec{x}} \right) + \gamma \bar{S}^2 - \beta^* \omega \omega - (F_1 - 1) \frac{CD_{k\omega}}{\omega} \omega \\ + F_{SAS} \max \left(0, \zeta_2 \kappa S_2 \sqrt{\frac{L}{L_{vk2}}} - \frac{2}{\alpha_\phi} k \text{ grad} \omega_k \right) \end{aligned} \quad (4.21)$$

kde je pro výpočet Δ využit vztah (4.14) a v_{SGS} se počítá pomocí následujícího vztahu

$$v_{SGS} = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, F_2 \sqrt{S_2})} \quad (4.22)$$

Vzhledem k velkému rozsahu používaných vztahů zde uvedeme pouze přehled jednotlivých koeficientů tohoto modelu a jejich hodnot, jak byly použity v této práci:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0,5532 \\ \alpha_2 &= 0,4403 \\ \beta_1 &= 0,075 \\ \beta_2 &= 0,0828 \\ \alpha_{k1} &= 0,85034 \\ \alpha_{k2} &= 1,0 \\ \alpha_{\omega1} &= 0,5 \\ \alpha_{\omega2} &= 0,85616 \\ \beta^* &= 0,09 \\ a_1 &= 0,31 \\ CDES &= 0,61 \\ c_\mu &= 0,09 \\ C_S &= 0,262 \\ \alpha_\phi &= 0,666667 \\ \zeta_2 &= 1,755 \\ FSAS &= 1,25 \\ \kappa &= 0,41 \end{aligned} \quad (4.23)$$

Tento model byl testován pro výše uvedené nastavení a pro rychlost $u_{ref} = 3 \text{ ms}^{-1}$, výsledky této aplikace jsou uvedeny v kapitole 7.

Dodejme, že hlavní část práce s modely turbulence se věnovala nastavení a otestování *One Equation Eddy* modelu a proto bylo otestování tohoto modelu spíše okrajové a bylo by třeba dále zkoušet jak jeho nastavení, tak použití jemnějších sítí.

4.1.2.3 Komentář k modelům turbulence

Výpočty byly testovány postupně se všemi modely turbulence, pro finální výpočet byl použit model *One Equation Eddy*. O konkrétních dosažených výsledcích je pojednáno v kapitole 7 Aplikace a výsledky, kde je také ukázáno a okomentováno chování všech modelů.

4.2 Použité numerické metody

4.2.1 Diskretizace

V OpenFOAM je používána metoda konečných objemů (MKO). Vzhledem k tomu, že je v OpenFOAM implementováno velké množství numerických metod, dále popíšeme jen metody použité v této práci.

4.2.1.1 Metoda konečných objemů

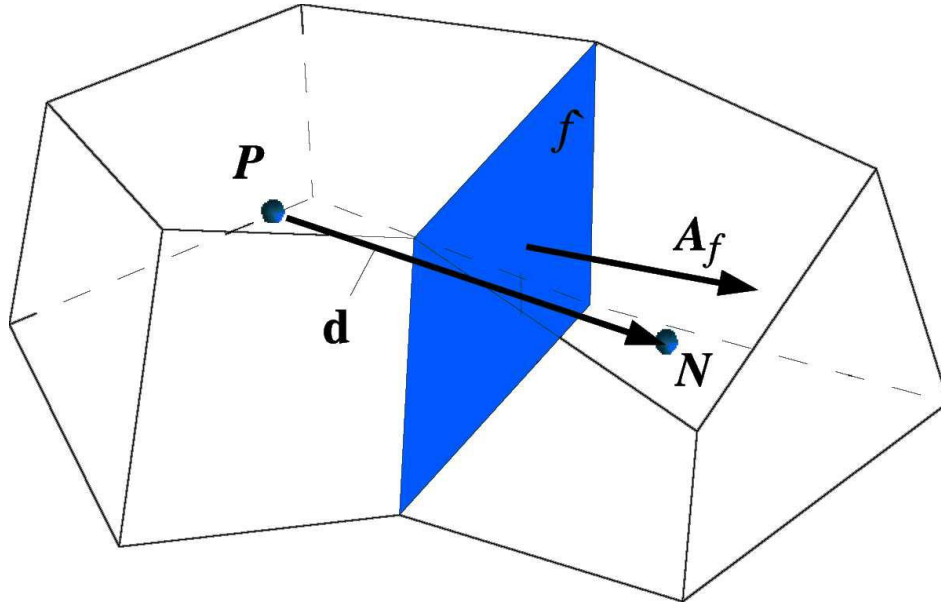
MKO je velmi rozšířenou metodou k řešení problémů mechaniky tekutin. Vychází z integrální podoby zákonů zachování a je založena na rozdělení výpočetní oblasti na menší podoblasti – kontrolní objemy (KO). Pro KO platí, že jsou navzájem disjunktní a že pokrývají celou výpočetní oblast, tedy:

$$\bigcup_i \bar{V}_i = V \quad (4.24)$$

$$V_i \cap V_j = \emptyset, \quad \forall i, j: i \neq j \quad (4.25)$$

Výpočetní oblast je rozdělena pomocí sítě na jednotlivé KO. Program OpenFOAM pracuje s hodnotami tlaku a rychlosti v těžištích \mathbf{P} jednotlivých KO – metoda cell-centered. V každém KO je určen v jeho těžišti výpočetní bod \mathbf{P} a síť tvoří hranice mezi jednotlivými kontrolními objemy, jak můžeme vidět na obrázku

4.1. Vektor \mathbf{d} spojuje těžiště sousedních KO (zde $\mathbf{P-N}$). Stěna mezi sousedními KO je označena f a normálový vektor na tuto stěnu jako \mathbf{A}_f .



Obrázek 4.1 Schéma kontrolních objemů

Naším cílem je diskretizace výše odvozených filtrovaných NS rovnic (4.8).

Pokud integrujeme tyto rovnice přes celý KO a v čase, dostáváme:

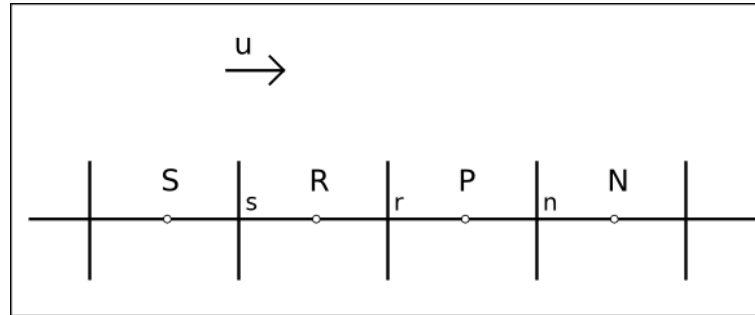
$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \frac{\partial \bar{v}}{\partial \vec{x}} dV \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \bar{v} dA \right] dt = 0 \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} dV + \int_V \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \vec{x}} dV \right] dt = \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \frac{-1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \vec{x}} dV + \int_V \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(v \frac{\partial \bar{v}}{\partial \vec{x}} \right) dV + \int_V \bar{g} dV + \int_V \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{\tau}^r}{\partial \vec{x}} dV \right] dt \end{aligned} \quad (4.27)$$

4.2.1.2 Prostorová diskretizace

Program OpenFOAM poskytuje uživateli velkou škálu schémat pro prostorovou diskretizaci, většinou jde o schémata prvního řádu přesnosti (upwind) a schémata druhého řádu (centrální). Uvedme nyní přehled schémat, použitých pro prostorovou diskretizaci v této práci. Jednotlivá schémata vždy popíšeme obecně a uvedeme také označení používané v OpenFOAMu. K popisu využijeme obrázků 4.1 a 4.2, hodnoty veličin v daných bodech budeme značit ϕ_P, ϕ_N a interpolovanou hodnotu na stěně jako ϕ_n, ϕ_s . Souřadnice bodů budou značeny jako x_P, x_N, x_f ,

vektor spojující těžiště sousedních KO bude značen \vec{d}_{PN} , normálový vektor na stěnu KO jako \vec{A}_n a velikost plochy stěny jako S_n .



Obrázek 4.2 Schéma výpočetní sítě

4.2.1.2.1 Interpolace na stěny buněk

Pro interpolaci hodnot z těžišť KO na jejich stěny bylo použito centrální schéma. Jde tedy o lineární interpolaci hodnot z těžišť KO do středů stěn, která nebere v potaz směr proudění a je druhého řádu přesnosti. V OpenFOAMu najdeme toto schéma pod termínem *linear*. Toto schéma můžeme popsat následujícím vztahem

$$\phi_n = \phi_N \lambda + \phi_P (1 - \lambda) \quad (4.28)$$

s koeficientem $\lambda = \frac{x_n - x_P}{x_N - x_P}$.

4.2.1.2.2 Schéma pro gradient

Pro výpočet hodnot gradientů používáme Gaussovu integraci podle Gaussovy věty (1.6). K interpolaci hodnot ϕ_f z těžišť KO na stěny je použito výše popsané schéma (4.28)(4.26). Tato interpolace je druhého řádu přesnosti. Pro výpočet gradientu veličiny v těžišti KO použijeme následující vztah (předpokládáme konstantní hodnotu gradientu v KO):

$$\nabla \phi_P = \frac{1}{V_P} \sum_{f_i} \phi_f \vec{A}_f \quad (4.29)$$

kde \vec{A}_f značí normálový vektor na stěnu, viz obrázek 4.1 a hodnotu na stěně vyřešíme pomocí výše uvedeného vztahu (4.28). V OpenFOAMu najdeme toto schéma pod termínem *Gauss linear*.

4.2.1.2.3 Schéma pro konvekční člen

Pro konvekci byla používána dvě schémata, jedno typu upwind a centrální schéma. První schéma je dle kódu OpenFOAM dáno vztahem:

$$\phi_n = \phi_P + \vec{r} \nabla \phi_P \quad (4.30)$$

kde \vec{r} je korektor. Pokud bychom nastavili $\vec{r} = 0$, dostáváme upwind schéma, které je prvního řádu přesnosti. V našem případě je implementace následovná

$$\vec{r} = (x_n - x_P) \cdot \nabla \phi_P \quad (4.31)$$

Toto schéma je v OpenFOAM uváděno jako *linearUpwind*.

Druhým schématem je TVD schéma vyššího řádu s limiterem pro omezení oscilací. Použitý je Swebyho limiter toku (flux limiter), který přepíná mezi metodami druhého a prvního řádu přesnosti. Lineární schéma vyššího řádu má obecně následující podobu:

$$\phi_n = \phi_P + 0,5\varphi(r)(\phi_N - \phi_P) \quad (4.32)$$

Parametr $r = \frac{\phi_N - \phi_P}{\phi_P - \phi_R}$ je váhová funkce zohledňující poměry gradientů mezi sousedními buňkami. Pokud bychom opět volili $\varphi(r) = 0$, dostaneme schéma upwind prvního řádu, pro $\varphi(r) = 1$ dostaneme schéma centrální.

Swebyho limiter samotný má obecně podobu

$$\varphi(r) = \max(0, \min(\beta r, 1), \min(r, \beta)) \quad (4.33)$$

kde $\beta \in \langle 1, 2 \rangle$.

V OpenFOAM je potom implementován jako

$$\varphi(r) = \max(0, \min\left(\frac{2}{\max(k, 0)}, r\right)) \quad (4.34)$$

koeficient k zde nabývá hodnot $k \in (0, 1)$, v našem případě jsme volili $k = 1$, což by mělo vést ke stabilitě metody, jak je také komentováno na [15]. Parametr r je implementován ve tvaru

$$r = 2 \frac{\phi_N - \phi_P}{\nabla \phi_P (x_N - x_P)} \quad (4.35)$$

Toto schéma je v OpenFOAMu nazýváno *limitedLinear*.

Cílem bylo počítat se schémata vyšších řádů, nicméně schéma (4.30) typu upwind se chovalo stabilněji a proto bylo využíváno přednostně. Jeho nevýhodou ovšem je vyšší difuzivita a obecně nevhodnost pro metody LES. Nicméně pro seznámení se s metodou a možnosti dosažení přijatelných výsledků bylo používáno.

4.2.1.2.4 Schéma pro difuzní člen

Také difuzní členy jsou diskretizovány pomocí Gaussovy věty (1.6). Je zde třeba aproximovat normálový gradient a pro neortogonální sítě také korekci této neortogonalitě.

V našem případě normálový gradient aproximujeme centrálním schématem a pro korekci na neortogonalitu sítě používáme tzv. ortogonální korekci [15]. Výsledná podoba diskretizace difuzního toku na stěně KO bude

$$F_{D_n} = \nabla \phi_n \vec{A}_n = k_o \frac{\phi_N - \phi_P}{|\vec{d}_{PN}|} + k_n \frac{\phi_N - \phi_P}{|\vec{d}_{PN}|} \quad (4.36)$$

Kde korekční faktory mají podobu

$$k_o = S_n \frac{\vec{d}_{PN}}{|\vec{d}_{PN}|}, \quad k_n = \vec{A}_n \left(\frac{\vec{A}_n}{|\vec{A}_n|} - \frac{\vec{d}_{PN}}{|\vec{d}_{PN}|} \right) \quad (4.37)$$

V OpenFOAMu je toto schéma nazýváno *Gauss linear corrected*.

4.2.1.3 Časová diskretizace

V této práci byla použita metoda časové diskretizace **Crank Nicolson s off-center koeficientem ψ** , který nabývá hodnot 0 – 1 Tuto metodu můžeme zjednodušeně zapsat jako

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(2 - \psi)F^{n+1}(u) + \frac{\psi}{2}F^n(u) \quad (4.38)$$

Pro zahájení výpočtu bylo nastaveno $\psi = 0$ a metoda se tak stala **Eulerovou implicitní metodou**

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = F^{n+1}(u) \quad (4.39)$$

tato metoda je prvního řádu přesnosti, je ale nepodmíněně stabilní.

Po „rozběhnutí“ výpočtu byl řešič přepnut na $\psi = 0,5$ a dostáváme tak následující metodu:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \frac{3}{4}F^{n+1}(u) + \frac{1}{4}F^n(u) \quad (4.40)$$

Tato metoda je kombinací Eulerovy metody 1. řádu a Crank Nicolsonové metody 2. řádu, díky čemuž je stabilnější, než samotná metoda 2. řádu a přesnější než samotná metoda 1. řádu.

Pro stabilitu výpočtu je důležité **Courantovo číslo**

$$Co = \frac{\vec{u} \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad (4.41)$$

Obecně by mělo být pro zachování stability výpočtu $Co < 1$. O námi používaných hodnotách tohoto parametru bude pojednáno dále v části o algoritmu výpočtu.

Po prostorové a časové diskretizaci získáme rovnici pro každý KO

$$a_p \phi_p^{n+1} + \sum_N a_N \phi_N^{n+1} = R_p \quad (4.42)$$

a pro celou výpočetní oblast následně dostáváme systém rovnic

$$[A] \vec{\phi} = \vec{R} \quad (4.43)$$

kde $[A]$ je řídká matice s koeficienty a_p na diagonále a a_N mimo diagonálu, $\vec{\phi}$ je vektor proměnné a \vec{R} je vektor zdrojových členů.

4.3 Hypotézy a aproximace použité v práci

Pro reálný výpočet proudění v MVA se zavádí řada zjednodušujících předpokladů, které takový výpočet značně usnadňují, zároveň je ale třeba co nejvíce zachovat fyzikální podstatu řešeného problému. V našem případě jsme přistoupili k následujícím zjednodušením:

1. Proudění je uvažováno jako nestlačitelné.

Proto můžeme buď první člen rovnice kontinuity (3.3) položit roven nule a předpokládat, že hustota je funkcí souřadnic $\rho = \rho(x, y, z)$, dostáváme tedy tzv. anelastický tvar

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial\vec{x}} = 0 \quad (4.44)$$

nebo pokud je hustota vzduchu ρ v námi sledované oblasti konstantní, pak můžeme rovnici kontinuity zapsat jako

$$\frac{\partial\vec{v}}{\partial\vec{x}} = 0 \quad (4.45)$$

Pro testovací úlohy proudění v MVA budeme používat právě tuto poslední rovnici (4.45).

2. Vliv Coriolisovy síly

Vzhledem k malým rozměrům výpočetní oblasti je zanedbán vliv Coriolisovy síly, která nabývá oproti ostatním členům v momentové rovnici řádově menších hodnot.

3. Dvoudimenzionální proudění

Pro výpočet uvažujeme pouze dvoudimenzionální (2D) proudění, nicméně používáme trojdimenzionální řešič v nastavení pro 2D.

4. Neutrální stratifikace

Reálná atmosféra je teplotně a hustotně stratifikována. Tedy s měnící se výškou se mění hustota i teplota vzduchu. Tato změna závisí na stavu atmosféry a možné scénáře byly popsány v kapitole 3.4. Ve výpočetní části je uvažováno pouze neutrální zvrstvení atmosféry.

4.3.1 Boussinesqova aproximace

Boussinesqova aproximace je matematický model pro zjednodušení momentových rovnic. Umožňuje nám používat v řešených rovnicích pouze poruchové složky veličin, které jsou oproti hlavním řádově menší. Pomocí něj jsme schopni jednodušeji počítat veličiny proudění – rychlost, hustotu, teplotu aj. Tento model nyní stručně popíšeme.

Základním prvkem této metody je linearizace systému Navierových – Stokesových rovnic podle termodynamických proměnných. Jak bylo výše uvedeno, budeme uvažovat pouze 2D proudění. Udělejme tedy rozklad na hlavní a poruchovou složku pro hustotu, tlak a potenciální teplotu

$$\rho(x, y, t) = \rho_0(y) + \rho'(x, y, t) \quad (4.46)$$

$$p(x, y, t) = p_0(y) + p'(x, y, t) \quad (4.47)$$

$$\theta(x, y, t) = \theta_0(y) + \theta'(x, y, t) \quad (4.48)$$

Vzhledem k rozměrům oblastí, ve kterých se naše proudění v MVA uvažuje, můžeme vertikální složky momentových rovnic omezit na členy, které jsou v nich dominantní

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} = -\vec{g} \quad (4.49)$$

Dosaďme nyní do tohoto vztahu rovnici (4.46) a předpokládejme, že poruchové veličiny jsou řádově menší než hlavní, tj. $\rho' \ll \rho_0$. Rovnici (4.49) tak upravíme do podoby

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \vec{g} = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial z} + \frac{\rho'}{\rho_0} \vec{g} \quad (4.50)$$

Poslední člen tohoto vztahu můžeme upravit použitím stavové rovnice (3.8) a rovnice pro potenciální teplotu (3.15). Následující odvození zde není uvedeno, lze ho najít např. v [5]. Jako výsledek dostáváme vztah

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \vec{g} = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial z} + \left(\frac{\theta'}{\theta_0} + \frac{c_v p'}{c_p p_0} \right) \vec{g} \quad (4.51)$$

kde můžeme pro výpočetní oblast zanedbat člen $\frac{c_v p'}{c_p p_0}$.

Pokud se podíváme na druhý člen na pravé straně této rovnice, tak vidíme, že má vztah se stabilitou MVA, jak bylo uvedeno výše v kapitole 3.4.

System nestlačitelných rovnic s konstantní hustotou nabývá tedy po aplikaci Boussinesqovy aproximace následujícího tvaru:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{x}} = \vec{0} \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{x}} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial \vec{x}} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(\mu \frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{x}} \right) + \frac{\theta'}{\theta} \vec{g} \quad (4.53)$$

Tato metoda je použita v jednom z našich řešičů a také v porovnávaných řešeních [12] a [13].

5 Program OpenFOAM

V této práci bylo použito CFD open source softwaru OpenFOAM , tedy „Open Field Operation And Manipulation“. Tento přístup měl řadu důvodů:

- OpenFOAM je volně dostupný software.
- OpenFOAM je open source, je tedy možno jej upravovat podle aktuálních potřeb.
- Program je napsán v jazyku C++.
- Poměrně dobrá dostupnost návodů a rad z prostředí vývojové komunity.

Nevýhodou je v určitých případech nedostatek oficiální dokumentace.

5.1 Použité řešiče

Úlohy byly počítány pomocí dvou řešičů proudění. A to konkrétně „*PimpleFoam*“ a „*Buoyant Boussinesq PimpleFoam*“. V obou případech jde o řešiče pro proudění vazké nestlačitelné tekutiny, které využívají algoritmu PIMPLE.

Do obou řešičů byla doprogramována část pro řešení přenosu pasivní příměsi.

Rozeberme nyní konkrétní podoby řešičů. Veličiny s pruhem budou v dalších částech práce značit přímo řešené hlavní části těchto veličin (ve smyslu LES modelu turbulence).

5.1.1 Řešič Buoyant Boussinesq PimpleFoam

Jak již název napovídá, jde o řešič, který bere v úvahu tíhové a vztlakové síly, využívá Boussinesqovy aproximace a v jeho průběhu je realizován PIMPLE algoritmus, což je kombinace algoritmů PISO a SIMPLE. Řešič obsahuje rovnice pro rychlost, tlak, teplotu a byla přidána transportní rovnice pro pasivní příměs.

5.1.1.1 Momentové rovnice

Momentové rovnice jsou řešeny v následujícím tvaru

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{-\partial}{\partial x_i} \left(\frac{p'}{\rho_0} \right) + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} + \tau_{t_{ij}}) + \frac{\bar{\rho}}{\rho_0} g_i \quad (5.1)$$

kde kromě již dříve uvedených veličin je $\tau_{t_{ij}}$ tenzor turbulentního napětí a τ_{ij} je přímo řešený napěťový tenzor, který je dán vztahem

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] \quad (5.2)$$

Dále zavedeme kinematickou viskozitu

$$\nu_0 = \frac{\mu_0}{\rho_0} \quad (5.3)$$

a tenzor

$$R_{ij} = R_{ij}^D + \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (5.4)$$

kteřý v našem případě plní funkci Reynoldsova sub-grid tenzoru napětí.

R_{ij}^D zde vyjadřuje deviatorickou část a $k = 0,5 R_{ii}$ vyjadřuje LES sub-grid kinetickou energii.

Pomocí výše uvedených vztahů můžeme upravit momentovou rovnici (5.1) do tvaru

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{-\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \left\{ \nu_0 \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] - R_{ij}^D \right\} + g_i \rho_k \quad (5.5)$$

kde byl zaveden kinematický tlak (jednotka je m^2/s^2)

$$\tilde{p} = \frac{p'}{\rho_0} + \frac{2}{3} k \quad (5.6)$$

a dále tzv. kinematická hustota

$$\rho_k = 1 + \frac{\bar{\rho} - \rho_0}{\rho_0} \quad (5.7)$$

Použitím Boussinesqovy aproximace můžeme, s použitím T_0 jako referenční teploty a β jako koeficientu teplotní roztažnosti tekutiny s jednotkou K^{-1} , tento výraz upravit do podoby:

$$\rho_k = 1 - \beta(\bar{T} - T_0) \quad (5.8)$$

Dále můžeme Reynoldsův sub-grid tenzor napětí R_{ij}^D , při zohlednění hypotézy o sub-grid viskozitě, vyjádřit jako

$$R_{ij}^D = -\nu_t \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] \quad (5.9)$$

kde ν_t je turbulentní viskozita. Rovnice (5.5) tedy může být, s použitím $\nu_{eff} = \nu_0 + \nu_t$ zapsána jako

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} &= \\ &= \frac{-\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \nu_{eff} \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] \right\} + g_i [1 - \beta(\bar{T} - T_0)] \end{aligned} \quad (5.10)$$

5.1.1.2 Rovnice pro teplotu

Rovnice pro teplotu je odvozena pomocí energetické rovnice (3.7), která může být také obdobně zformulována pro entalpii

$$h = u + \frac{p}{\rho} \quad (5.11)$$

a dostáváme tak rovnici

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho h v_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial q_i}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + v_i \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(\tau_{ij} v_i)}{\partial x_j} + \rho q + \rho f_i v_i \quad (5.12)$$

Při uvažování ideálního plynu zavedeme následující vztah

$$\frac{Dh}{Dt} = c_p \frac{DT}{Dt} \quad (5.13)$$

a dále pro nestlačitelné proudění můžeme použít předpoklad nulové divergence rychlosti a zanedbat členy s tlakem a také třetí člen na pravé straně rovnice

(5.12), který je pro nízké rychlosti zanedbatelný oproti členu s tepelnou vodivostí. Nebudeme také uvažovat tepelné zdroje ani objemové síly působící na tekutinu. Po postupné aplikaci filtrování, předpokladu konstantní hustoty a viskozity, tedy $\rho = \rho_0, \mu = \mu_0$ a zavedením

$$Pr = \frac{c_p \mu_0}{k}; Pr_t = \frac{c_p \mu_t}{k_t} \quad (5.14)$$

dostáváme rovnici (5.12) ve tvaru

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{T} \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\frac{\nu_t}{Pr_t} + \frac{\nu_0}{Pr} \right) \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_k} \right] \quad (5.15)$$

Toto můžeme dále zjednodušit zavedením

$$\alpha_{eff} = \frac{\nu_t}{Pr_t} + \frac{\nu_0}{Pr} \quad (5.16)$$

A dostáváme tedy rovnici pro přímo řešenou část teplotního pole:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{T} \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\alpha_{eff} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_k} \right) \quad (5.17)$$

5.1.1.3 Rovnice pro pasivní příměs

Rovnice pro pasivní příměs je řešena ve tvaru (3.30) odvozeném v kapitole 3.3

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (C \vec{v})}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial (C \vec{v}_s)}{\partial \vec{x}} = f_c + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(D \frac{\partial C}{\partial \vec{x}} \right) \quad (5.18)$$

5.1.2 Řešič PimpleFoam

Popišme zde pouze rozdíly mezi tímto a výše uvedeným řešičem. Také řešič PimpleFoam je sestaven pro výpočet proudění vazké nestlačitelné tekutiny a využívá PIMPLE algoritmu. Na rozdíl od předchozího ale nebere v potaz tíhovou sílu v momentových rovnicích a nevyužívá Boussinesqovy aproximace. Pracuje tedy s hodnotou absolutního tlaku. Momentové rovnice také nejsou nijak ovlivněny teplotou, tudíž se s touto veličinou vůbec npracuje.

5.1.3 Vztah mezi rychlostí a tlakem

Pro tlak uveďme semidiskrétní formu obecné momentové rovnice (3.5)

$$a_p U_p = H(U) - \nabla p \quad (5.19)$$

kde člen $H(U)$ obsahuje konvekční a zdrojovou část momentové rovnice. Úpravou této rovnice se dostaneme k Navierovým – Stokesovým rovnicím v diskretní podobě [8]

$$a_p U_p = H(U) - \sum_f A \cdot p_f \quad (5.20)$$

$$\sum_f A \cdot \left(\frac{1}{a_p} \right)_f (\nabla p)_f = \sum_f A \cdot \left(\frac{H(U)}{a_p} \right)_f \quad (5.21)$$

V této práci je použit algoritmus PIMPLE, což je „Merged PISO-SIMPLE“. Tento algoritmus řeší metodou tlakových korekcí právě tyto výše uvedené rovnice a bude podrobněji popsán v další kapitole.

5.1.4 Realizace v OpenFOAM

V následující části bude podrobněji popsán řešič *buoyant Boussinesq pimpleFoam*. Druhý z použitých řešičů je v programu zapsán ve stejném stylu a nebudeme se jím tedy podrobněji zabývat.

Základem řešiče je cyklus PIMPLE, výpočtové kroky v tomto cyklu jsou následující:

1. Nastavení okrajových podmínek
 - 1.1. Kalkulace hybnosti a získání nového pole rychlostí
 - 1.2. Kalkulace toků na hranicích buněk
 - 1.3. Kalkulace tlaku
 - 1.4. Korekce toků na hranicích buněk
 - 1.5. Korekce rychlosti z nových hodnot tlaku
 - 1.6. Aktualizace okrajových podmínek
 - 1.7. Přepočítání tlaku z nové hodnoty hybnosti
 2. Korekce tlaku a aplikace relaxace
 3. Korekce toků na hranicích buněk
 4. Korekce rychlosti a aplikace relaxace
 5. Aktualizace okrajových podmínek
 6. Zvýšení časového kroku a opakování od 1.
-
- Kroky 1.4 a 1.5 mohou být opakovány pro korekci neortogonality sítě.
- Kroky 1.1 – 1.7 se opakují pro předepsaný počet iterací.

Kroky 1 – 5 se opakují do dosažení kritéria konvergence nebo předepsaného počtu vnějších iterací.

Tento algoritmus nám umožňuje použití vyššího CFL čísla, než jaké by bylo možné pro samotný, např. PISO řešič. V této práci je použito $CFL_{max} = 3$ a časový krok byl kontrolován při běhu algoritmu právě tímto parametrem.

5.1.5 Numerické řešiče

OpenFOAM používá pro řešení soustav lineárních rovnic typu $Ax = b$ iterativní lineární řešiče. Při řešení jsou používány také předpodmíňovače a vyhlazovače (smoothers). Zaměříme se na nástroje použité v této práci.

5.1.5.1 Řešiče soustav lineárních rovnic

Pro řešení soustav lineárních rovnic je v našem případě použit **GAMG řešič** „Generalised geometric-algebraic Multigrid Solver“ nebo „Geometric agglomerated algebraic Multigrid Solver“. Tento řešič je ze skupiny multigrid metod. Základním principem je užití hrubší sítě pro rychlé získání řešení, které je pak vstupním řešením pro výpočet na jemnějších sítích. Hrubší síť je generována algoritmem pomocí slučování KO výpočetní sítě dle zadaných parametrů. Detaily mohou být nalezeny například v [7].

5.1.5.1.1 Předpodmínění

Pro rychlejší konvergenci výpočtu je použito předpodmíňovače, který řeší systém rovnic

$$[M]^{-1}[A]\vec{x} = [M]^{-1}\vec{b} \quad (5.22)$$

V této práci bylo použito GAMG předpodmínění.

5.1.5.1.2 Vyhlazovače – Smoothers

Kvalita a struktura sítě může významně ovlivnit počet iterací potřebných k dosažení konvergence řešení. Úkolem vyhlazovačů je zjemnit numerické extrémy řešení a tím zlepšit a zrychlit konvergenci řešení.

V našem případě je použit smoother „*DICGaussSeidel*“. Ten využívá kombinaci DIC – Diagonal-based incomplete Cholesky smoother a Gauss Seidel smoother. Detaily mohou být nalezeny např. v [2].nebo přímo v kódu řešiče OF.

5.1.5.2 Relaxace řešení

Pro zlepšení stability řešení jsou používány relaxační faktory, které omezují hodnoty řešení. Faktor α_ϕ dosahuje hodnot $\langle 0; 1 \rangle$

$$\phi^n = \phi^{n-1} + \alpha_\phi(\phi^n - \phi^{n-1}) \quad (5.23)$$

V této práci byly použity hodnoty $\alpha_\phi = 0.3$ pro prvotní iterace a $\alpha_\phi = 0.9$ pro finální iteraci tlaku a $\alpha_\phi = 1$ pro finální iteraci ostatních veličin.

6 Porovnání s dostupnými výsledky

Pro porovnání byla použita práce [13], která řeší proudění v MVA pomocí RANS – Reynolds Averaged Navier Stokes – rovnic a využívá Boussinesqovu aproximaci. Řešený systém rovnic má následující podobu:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = 0 \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + (u_i \cdot \nabla) u_i + \frac{\nabla p'}{\rho_0} = \nu_E \nabla^2 u_i + g_i + S_u \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta u_i) = \frac{\nu_E}{Pr} (\nabla \cdot (\nabla \theta)) \quad (6.3)$$

kde ν_E je efektivní kinematičká viskozita, $\vec{g} = (0, g \frac{\theta'}{\theta}, 0)$ je vektor tíhového zrychlení, S_u je ztráta hybnosti vlivem vegetace (v našem modelu neuvažováno) a $Pr = 0,75$ je Prandtlovo číslo.

Rovnice (6.1) je upravena metodou umělé stlačitelnosti na evoluční rovnici

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot u_i = 0 \quad (6.4)$$

Turbulence je popsána dvourovnicovým $k - \epsilon$ modelem

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k u_i) = \nabla \cdot \left(\left(\mu_L + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P_k - \rho \epsilon + \rho S_k \quad (6.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \epsilon u_i) &= \\ &= \nabla \cdot \left(\left(\mu_L + \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right) + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + \rho S_\epsilon \end{aligned} \quad (6.6)$$

$$\mu_T = C_{\mu} \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (6.7)$$

Přenos pasivní příměsi je počítán transportní rovnicí

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \vec{u}) - \frac{\partial \rho w u_s}{\partial y} = \nabla \cdot \left(\frac{v_E}{Sc} \nabla w \right) + \rho f_c + S_w \quad (6.8)$$

kde w je hmotnostní frakce pasivní příměsi, f_c je zdrojový člen a S_w je depoziční člen na vegetaci – v naší práci neuvažován. Schmidtovo číslo bylo zvoleno jako $Sc = 0,72$.

6.1 Rozdíly mezi porovnávanými řešiči

Vzhledem k rozdílnosti použitého systému rovnic nyní rozebereme faktické rozdíly v těchto rovnicích popisujících problém proudění MVA a jejich očekávaný vliv na výsledky výpočtů. Vždy bude uveden tvar rovnic pro řešiče Buoyant Boussinesq PimpleFoam (**BBPF**), PimpleFoam (**PF**) a porovnávaný řešič z předešlé kapitoly pod zkratkou **ÚTMFS**. Rovnice jsou přepsány do shodné notace, aby se daly co nejnázve porovnat a v rovnicích ÚTMFS nejsou uvažovány členy, které nebyly použity pro srovnávací výpočet – vliv vegetace. Pro porovnání byl zvolen model turbulence *One Equation Eddy*.

6.1.1.1 Rovnice kontinuity

Rovnice kontinuity má ve všech řešičích tvar

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = 0 \quad (6.9)$$

a rozdílem je použití metody umělé stlačitelnosti (6.4) v případě ÚTMFS a metody tlakové korekce v případě řešičů BBPF a PF pro řešení tlaku.

6.1.1.2 Momentové rovnice

1. BBPF

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{-\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\tilde{p}}{\rho_0} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ v_{eff} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right\} + g_i [1 - \beta(\bar{T} - T_0)] \quad (6.10)$$

2. PF

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{-\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \nu_{eff} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right\} \quad (6.11)$$

3. ÚTMFS

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{p'}{\rho_0} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \nu_E \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right\} + g_i \frac{\theta'}{\theta} \quad (6.12)$$

Rozdíly v momentových rovnicích jsou v tlakovém členu, kdy řešič BBPF pracuje s kinematickým tlakem definovaným vztahem (5.6) $\tilde{p} = \frac{p'}{\rho_0} + \frac{2}{3}k$,

Řešič PF pracuje s absolutní hodnotou tlaku p a řešič ÚTMFS s poruchou tlaku p' dle Boussinesqovy aproximace.

Přístup použitý v ÚTMFS bývá vhodnější kvůli nízkým hodnotám p' ($\approx 10^1 Pa$) a tím potenciálně příhodnějším podmínkám pro numerický výpočet oproti přístupu v PF, tedy uvažování absolutního tlaku ($\approx 10^5 Pa$). Rozdílný je potom přístup BBPF, kdy je uvažován kinematický tlak \tilde{p} , který v sobě kombinuje derivaci poruchové složky p' a LES sub-grid kinetickou energii k .

Dalším rozdílem jsou členy s gravitací, kdy řešič BF tuto vůbec neuvažuje a řešiče BBPF a ÚTMFS pracují s gravitačním zrychlením v kombinaci s odchylkou teploty (absolutní T pro BBPF a potenciální θ pro ÚTMFS). Toto nám umožňuje pracovat s teplotní stratifikací, nicméně je pro náš případ uvažována stratifikace neutrální.

6.1.1.3 Teplotní rovnice

1. BBPF + PF

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{T} \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\alpha_{eff} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_k} \right) \quad (6.13)$$

2. ÚTMFS

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\theta} \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\nu_E}{Pr} \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \right) \quad (6.14)$$

V teplotních rovnicích je rozdíl v použití absolutní teploty T v BBPF a PF a potenciální teploty θ v ÚTMFS. Principiálně se ale tyto rovnice nijak neliší.

6.1.1.4 Rovnice turbulence

1. BBPF + PF

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_i \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) - \frac{c_e k \sqrt{k}}{\Delta} - 2\nu_{SGS} |S_{ij}|^2 \quad (6.15)$$

2. ÚTMFS

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k u_i) = \nabla \cdot \left(\left(\mu_L + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P_k - \rho \epsilon \quad (6.16)$$

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \epsilon u_i) = \nabla \cdot \left(\left(\mu_L + \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right) + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (6.17)$$

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (6.18)$$

Modely turbulence se od sebe liší značně. $k - \epsilon$ model se nehodí pro proudění s velkými tlakovými gradienty, např. v uzavřených kanálech, blízkosti stěn atp. k -model patří k jednoduchým jednorovnicovým modelům a hodí se pro modelování proudění v nepříliš komplexních geometriích při nižších rychlostech [4], [7], [15].

6.1.1.5 Transportní rovnice pro pasivní příměs

1. BBPF + PF

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial C v_{s_i}}{\partial x_j} = f_{c_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) \quad (6.19)$$

2. ÚTMFS

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial \rho w u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \rho w v_{s_i}}{\partial x_j} = \rho f_{c_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu_E}{Sc} \frac{\partial w}{\partial x_i} \right) \quad (6.20)$$

Rozdíl je v tomto případě pouze v označení transportované veličiny, kdy C v našich rovnicích je definována vztahem (3.19).

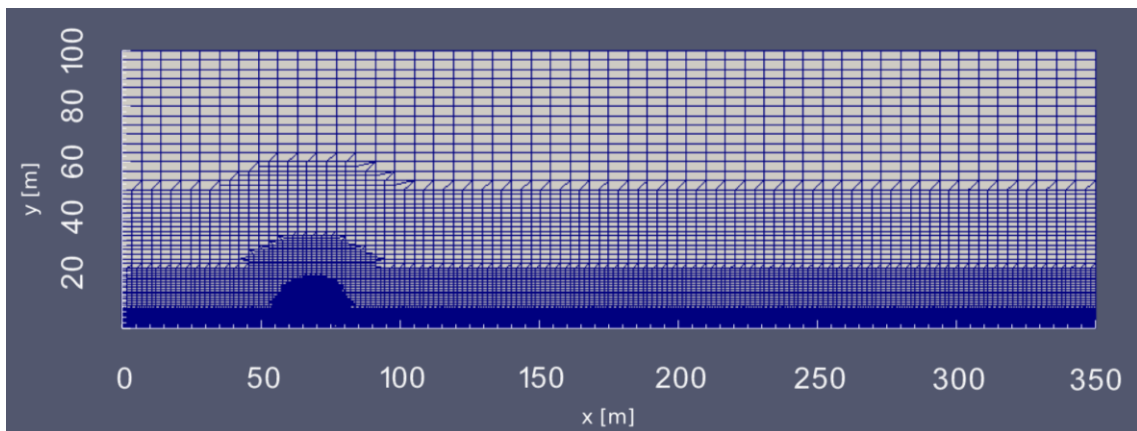
7 Aplikace a výsledky

7.1 Výpočetní oblast

Výpočetní oblast je tvaru obdélníku o délce 350 metrů a výšce 100 metrů. Ve vzdálenosti 68 metrů od vstupu je umístěna 6 metrů vysoká a 0,5 metru široká neprostupná překážka.

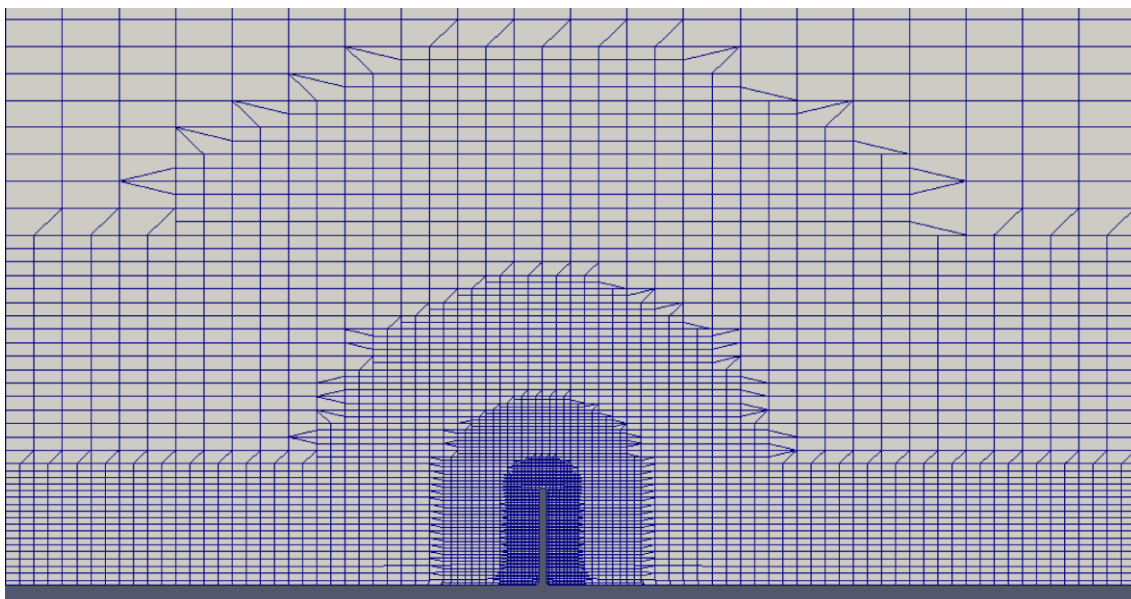
7.2 Výpočetní síť

Jako základ byla použita strukturovaná čtyřúhelníková síť vytvořená nástrojem blockMesh. Ta je zahuštěná ve směru osy y směrem k povrchu pro zachycení dějů v jeho blízkosti. Dále je síť zahuštěná v oblastech povrchových nerovností – překážky, kde se očekávaly významné změny v hodnotách počítaných veličin, viz obrázek 7.1. Finální nestrukturovaná síť je generována programem OpenFOAM pomocí nástroje snappyHexMesh.



Obrázek 7.1 Výpočetní síť

Detail sítě v oblasti překážky je vidět na dalším obrázku



Obrázek 7.2 Detail sítě kolem překážky

Výpočet byl testován na dvou sítích, nazvěme jednu síť jako **hrubou** a jednu jako **jemnou**.

Uvedme nyní parametry obou sítí:

Hrubá síť

Parametr	Hodnota
Počet buněk	15378
Objem největší buňky	23,3333
Objem nejmenší buňky	0,0104
Výška buňky u země	0,4

Tabulka 7.1 Parametry hrubé sítě

Jemná síť

Parametr	Hodnota
Počet buněk	33638
Objem největší buňky	23,3333
Objem nejmenší buňky	0,00016
Výška buňky u země	0,2

Tabulka 7.2 Parametry jemné sítě

7.3 Okrajové podmínky

Námi popisovaná oblast je ve tvaru obdélníku. Musíme tedy předepsat OP právě na čtyřech stěnách. Podle charakteru proudění a rovnic, které jej popisují, předepíšeme potřebné veličiny v různé podobě. Uvedme nyní typy a hodnoty použitých OP:

7.3.1 OP na vstupu

Dirichletovy OP předepíšeme pro složky rychlosti u, v . Pro teplotu T a koncentraci příměsi ψ předepíšeme homogenní Dirichletovu OP, tedy $T = 0, \psi = 0$. Pro rychlost lze její rozložení na vstupu popsat různými způsoby. Základním je konstantní rychlostní profil, kde jsou složky rychlosti u, v konstantami, $(u, v) = (u_0, v_0)$. Dalšími možnostmi jsou rychlostní profily, které jsou blíže skutečnému proudění v atmosféře. Jde o mocninný profil

$$(u, v) = \left(u_r \cdot \left(\frac{z}{z_0} \right)^\alpha, v_0 \right) \quad (7.1)$$

a logaritmický profil

$$(u, v) = \left(\frac{u^*}{\kappa} \cdot \ln \left(\frac{z}{z_0} + \psi(z, z_0, L) \right), v_0 \right) \quad (7.2)$$

Kde v poslední rovnici je u^* tzv. třecí rychlost, definovaná jako $u^* = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}}$, kde τ je smykové napětí v mezní vrstvě tekutiny a ρ je hustota tekutiny. κ je Von Karmánova konstanta ($\kappa \approx 0,41$), z je výška nad povrchem, z_0 je drsnost povrchu, ψ stabilizační člen, který je v případě neutrálního zvrstvení atmosféry roven nule. V rovnici (7.1) je potom u_r rychlost v referenční výšce z_r . Exponent α je závislý na stabilitě atmosféry a pro neutrální podmínky je roven přibližně 1/7.

V této práci byl použit **logaritmický profil** s parametry:

$$u_{ref} = 3 \text{ m s}^{-1}; 5 \text{ m s}^{-1}; 10 \text{ m s}^{-1}$$

$$\kappa = 0,41$$

$$z_0 = 0,1$$

$$v_0 = 0 \text{ m s}^{-1}$$

u^* je počítána tak, aby bylo dosaženo u_{ref} ve výšce 50 m. Konstanta ψ je v našem případě zanedbána.

Homogenní Neumannovu OP předepisujeme pro tlak p , tedy $\nabla p = 0$.

7.3.2 OP na výstupu

Používáme **homogenní Neumannovy OP** pro složky u, v, T, ψ . Zvláštní řešení je třeba zvolit pro podmínky, kdy může nastat zpětný tok směrem zpět do oblasti. Toto je řešeno přímo v programu OpenFOAM, kdy program automaticky volí pro rychlosti buď Neumannovu OP (tok směrem z oblasti ven) nebo Dirichletovu OP (tok směrem do oblasti).

Pro tlak p je použita **Dirichletova OP**, kdy je zde předepsán barometrický profil

$$p = p_b e^{-\frac{Mgy}{RT_0}} \quad (7.3)$$

s parametry:

$$p_b = 100000 \text{ Pa pro BBPF a } 1 \text{ Pa pro PF}$$

$$M = 0,02897 \text{ kg mol}^{-1}$$

$$g = 9,81 \text{ ms}^{-2}$$

$$R = 8,31 \text{ Nm mol}^{-1}\text{K}^{-1}$$

$$T_0 = 293,15 \text{ K}$$

Příčemž P_b značí referenční tlak, M molární hmotnost molekuly vzduchu, g tíhové zrychlení, R univerzální plynovou konstantu a T_0 referenční teplotu.

7.3.3 OP na zemi

Pro rychlost požadujeme podmínku ulpívání proudu na zemi, tj. **homogenní Dirichletova OP** $u, v = 0$. Pro p a T a ψ předepisujeme **homogenní Neumannovy OP**.

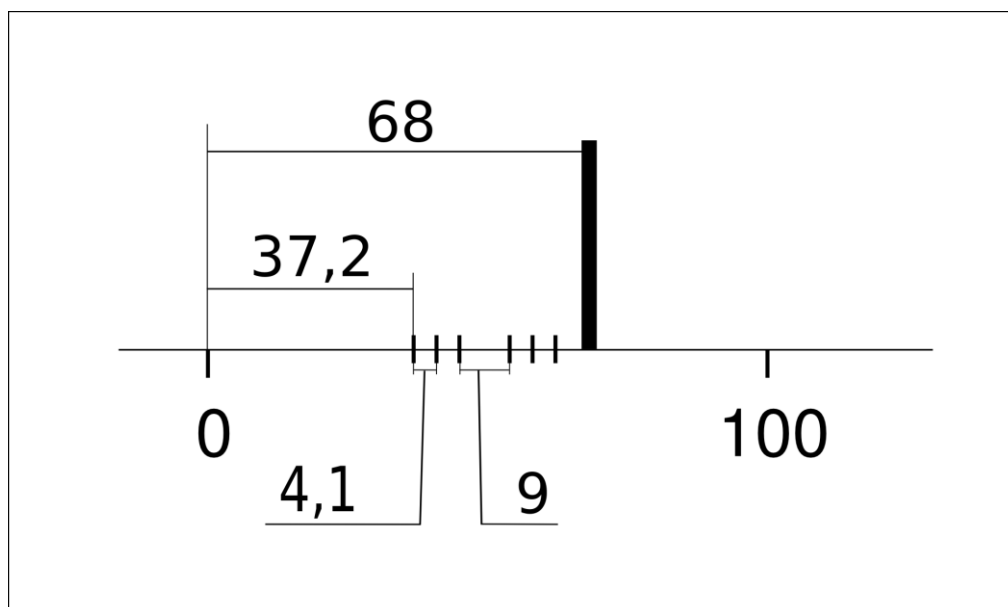
Pro koncentraci příměsi požadujeme nezvratný záchyt po dopadu vlivem gravitace. Toto je řešeno pomocí spádové rychlosti v_s , která zde má stejnou nenulovou hodnotu jako pro vnitřní oblast, viz kapitola 3.3.1.

7.3.4 OP na horní hranici

Pro u, v, T, ψ, p je použita homogenní Neumannova OP.

7.4 Zdroje pasivní příměsi

Mezi vstupem do oblasti a překážkou jsou umístěny dvě trojice jednotkových zdrojů příměsi. Nastavení je podle [12] a [13]. Jejich rozmístění ukazuje následující obrázek



Obrázek 7.3 Zdroje příměsi

7.5 Výsledky testovacích výpočtů

Tato sekce je rozdělena na čtyři oddíly, které postupně obsahují:

1. Porovnání našich výsledků s dostupnými výsledky z jiných výpočtů
2. Porovnání řešičů PF a BBPF pro různé rychlosti proudění
3. Porovnání modelů turbulence *Smagorinsky*, *One Equation Eddy* a *k-omega*
4. Zobrazení typických průběhů reziduí

Výsledky jsou zobrazeny pomocí open source softwaru ParaView.

Legendy v grafech používají následující zkratky:

- vZ vstupní referenční rychlost, kde Z značí hodnotu (3; 5; 10)
- xZZ řez v rovině y ve vzdálenosti ZZ metrů od vstupu (50; 100; 200)
- yZZ řez v rovině x ve výšce ZZ metrů od povrchu (3; 7; 11)

Řešiče jsou označeny zkratkami:

- *PF* PimpleFoam, hrubá síť
- *PF2* PimpleFoam, jemná síť
- *BBPF* Buoyant Boussinesq PimpleFoam, hrubá síť
- *ÚTMFS* porovnávaný řešič z FS ČVUT, hrubá síť

Turbulentní modely jsou označeny jako:

- *Smagorinsky* model Smagorinsky, hrubá síť
- *OneEq* model One Equation Eddy, hrubá síť
- *OneEq PF2* model One Equation Eddy, jemná síť
- *kOmega* model k-omega SST-SAS, hrubá síť

7.5.1 Porovnání s dostupnými výsledky z jiných výpočtů

Pro porovnání byla zvolena práce [13]. Pro porovnání byla použita nejdříve stejná (hrubá) výpočetní síť, popsaná v kapitole 7.2 a následně síť jemná. Rovněž vstupní a okrajové podmínky pro rychlost s $u_{ref} = 3 \text{ ms}^{-1}$ i pro ostatní počítané veličiny byly nastaveny stejně, viz kapitoly 7.3 a 7.4. Byly použity výpočty s modelem turbulence *One Equation Eddy*.

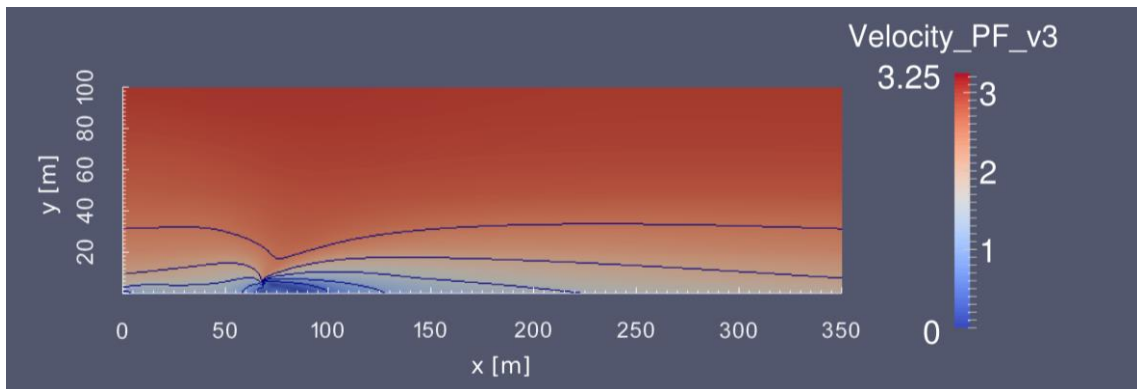
Porovnávány byly tyto údaje:

1. Rychlostní pole
2. Rychlostní profily v různých řezech
3. Koncentrace příměsi

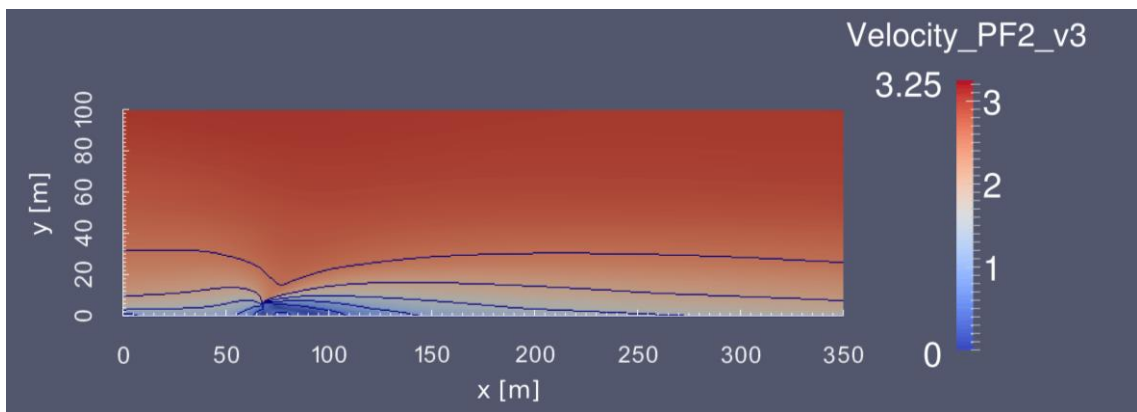
Ke každé kategorii je uveden komentář, který rozebírá rozdíly ve výsledcích a jejich možné důvody.

7.5.1.1 Porovnání rychlostních polí

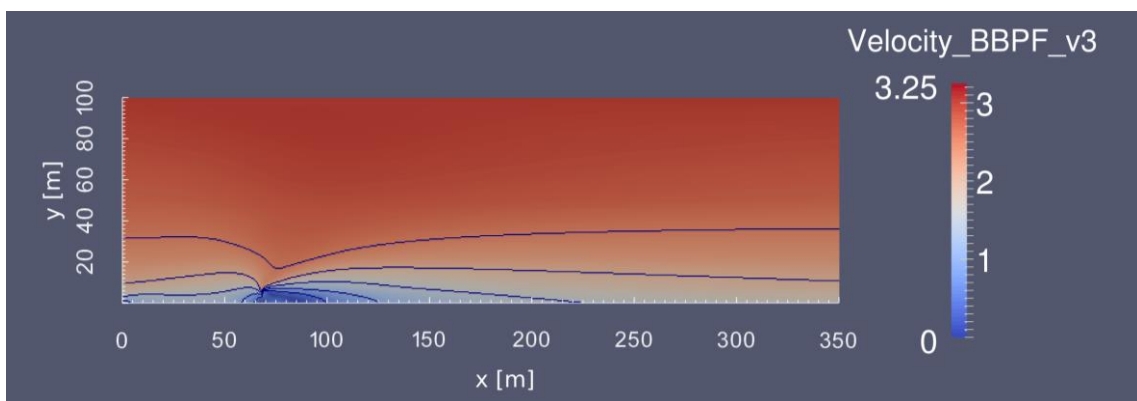
V rychlostních polích pro každý řešič jsou zobrazeny izočáry rychlosti pro $\vec{u} = 0,5; 1,0; 1,5; 2,0; 2,5 \text{ ms}^{-1}$



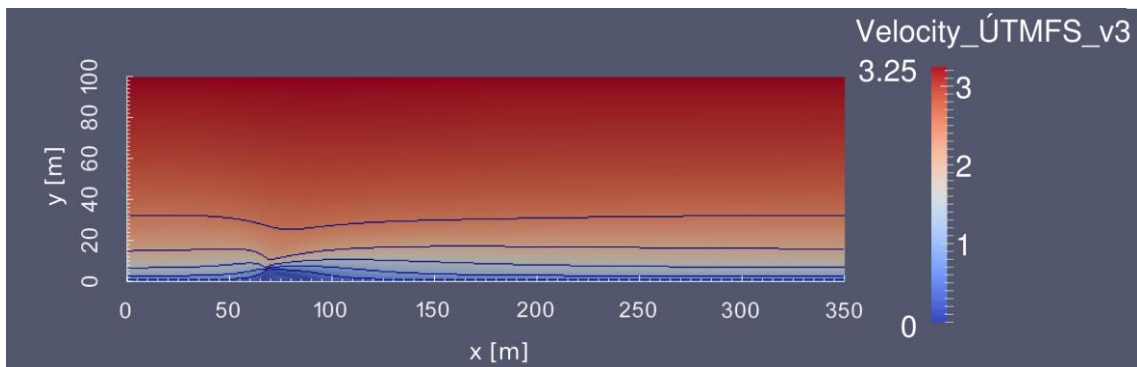
Obrázek 7.4 Rychlostní pole PF



Obrázek 7.5 Rychlostní pole PF2



Obrázek 7.6 Rychlostní pole BBPF



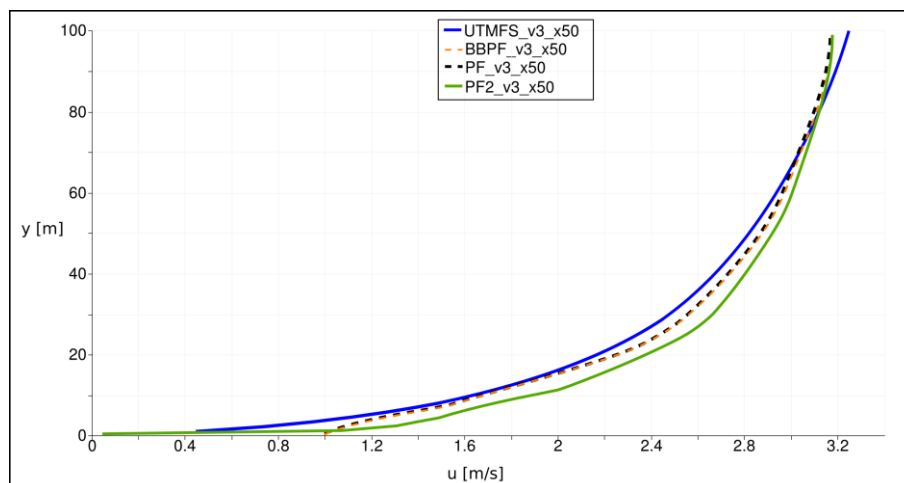
Obrázek 7.7 Rychlostní pole ÚTMFS

7.5.1.1.1 Komentář k výsledkům

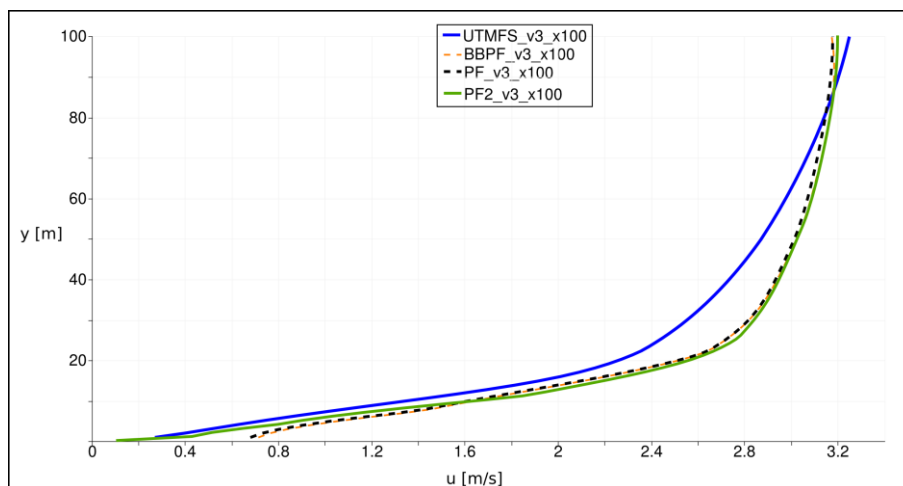
Při pohledu na zobrazená rychlostní pole vidíme určité rozdíly v délce recirkulační zóny za překážkou. Výsledek z řešiče ÚTMFS vykazuje recirkulační zónu dlouhou do 30 metrů. Délka recirkulační zóny u řešičů PF a BBPF je necelých 40 metrů. Lze předpokládat, že tento rozdíl je způsoben použitým modelem turbulence a jeho správným nastavením. U řešení PF2 pozorujeme recirkulační zónu nižší než u PF a BBPF a je tak bližší řešení ÚTMFS. Z polohy izočar vidíme rozdíly v tloušťce mezních vrstev u jednotlivých řešičů, kdy u ÚTMFS je mezní vrstva vyvinuta po celé délce oblasti, u řešiče PF2 je užší a u ostatních řešičů je jak před překážkou, tak hlavně za ní rozdíl již velmi markantní. Z tohoto pohledu se jeví použití jemnější sítě jako nezbytný krok pro použití LES metody. Celkově nejsou rozdíly nijak velké a můžeme konstatovat, že rychlostní pole jsou porovnatelná.

7.5.1.2 Porovnání rychlostních profilů

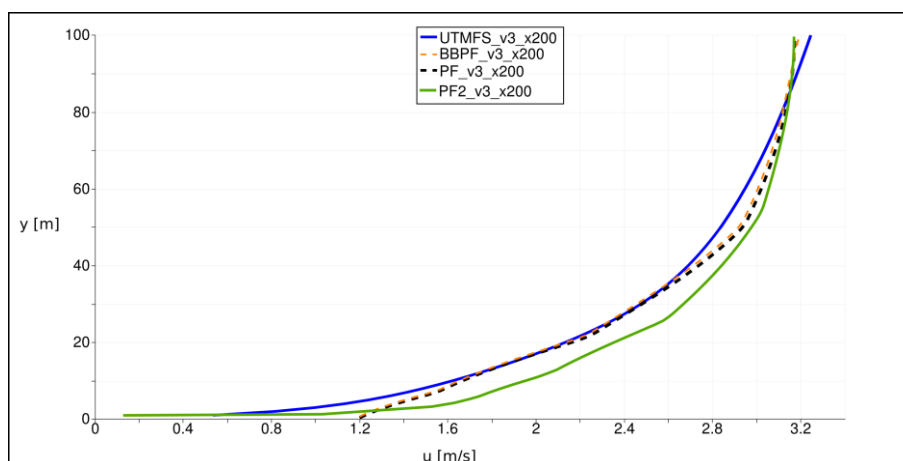
Rychlostní profily byly porovnávány ve třech místech a to 50, 100 a 200 metrů od vstupu do oblasti.



Obrázek 7.8 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 50$



Obrázek 7.9 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 100$



Obrázek 7.10 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 200$

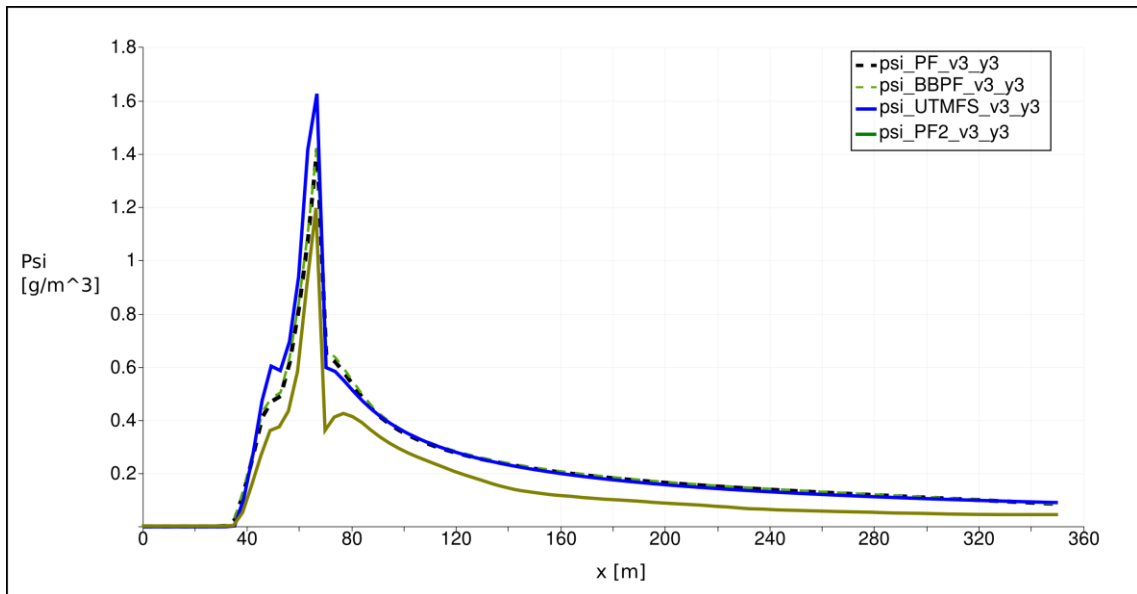
7.5.1.2.1 Komentář k výsledkům

Rychlostní profily pro PF a BBPF jsou téměř totožné ale profil PF2 má jiný tvar. Vzhledem k totožným vstupním parametrům lze tedy říci, že rychlostní profil je ovlivněn použitou hrubou nebo jemnou sítí. Dalo by se také říci, že vzhledem k podobě profilu pro PF a BBPF nemá uvažování členu gravitace v rovnicích na chování rychlostního pole v tomto případě podstatný vliv. Na řezech pro $x = 50$ a $x = 200$ metrů jsou rychlostní profily relativně podobné. Na řezu ve vzdálenosti 100 metrů od vstupu, tedy asi 30 metrů za překážkou je vidět jiný tvar rychlostního pole, což je způsobeno zpětným proudem, který se tvoří u úloh s řešiči PF, PF2 a BBPF ve větší míře než u ÚTMFS. Podstatný rozdíl můžeme pozorovat u hodnot rychlosti při spodní hranici oblasti, kdy PF a BBPF vykazují vysokou hodnotu ještě těsně nad zemí. Tento fakt je dán nedostatečnou jemností použité hrubé sítě a u řešení PF2 je tento jev již potlačen. Nicméně rozdíly od profilu

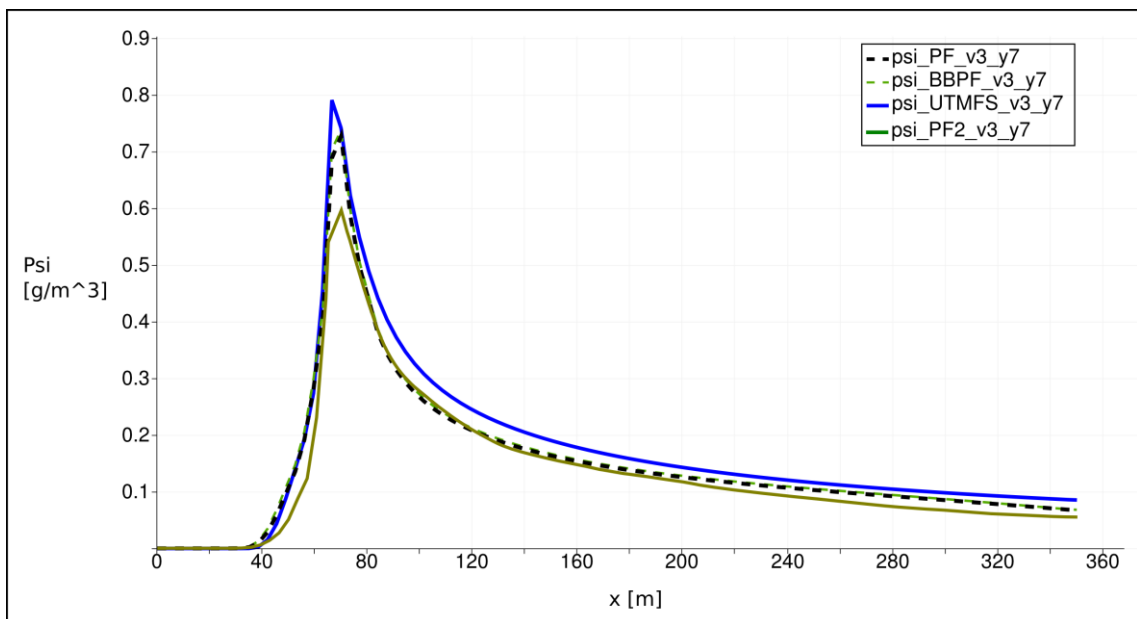
ÚTMFS jsou patrné a je třeba dalších testování. Určitý rozdíl je také vidět na horní hranici, kdy je rychlost ÚTMFS vyšší o cca 0,1 m/s, což může být způsobeno jiným numerickým řešením OP v řešičích.

7.5.1.3 Porovnání koncentrací příměsí

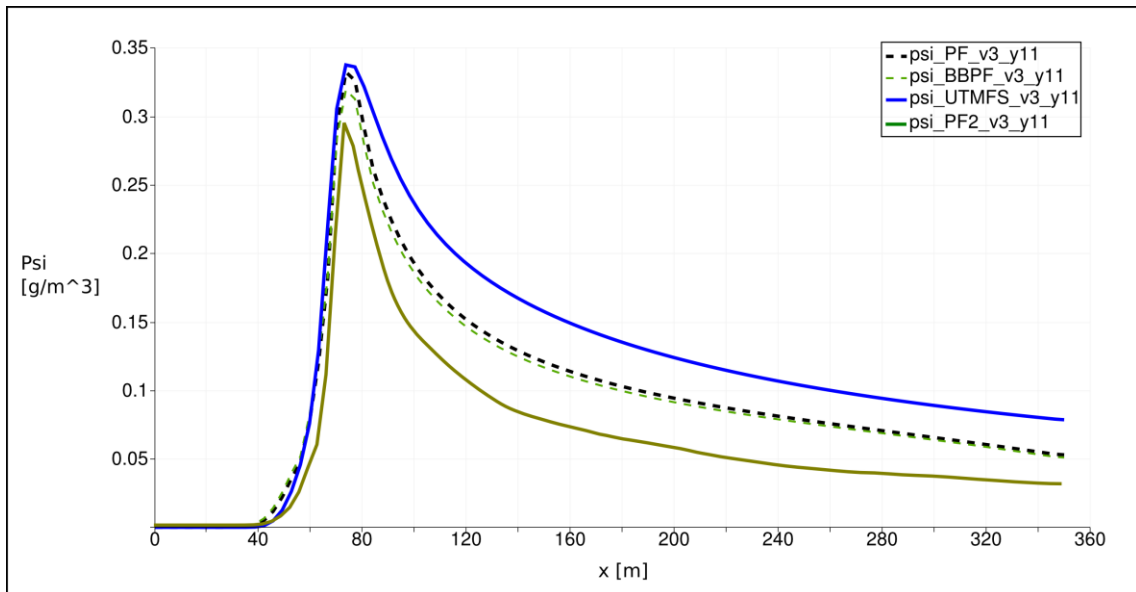
Koncentrace příměsí byla sledována ve třech vodorovných řezech ve výšce 3, 7 a 11 metrů od povrchu.



Obrázek 7.11 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 3 m nad povrchem



Obrázek 7.12 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 7 m nad povrchem



Obrázek 7.13 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 11 m nad povrchem

7.5.1.3.1 Komentář k výsledkům

Ve všech řezech je koncentrace příměsi vypočítaná řešiči PF a BBPF velmi podobná a dosahuje nižších hodnot než koncentrace vypočítaná řešičem ÚTMFS, Tento rozdíl je v řezech 3 a 7 metrů asi 10%, v řezu 11 metrů nad povrchem jsou hodnoty koncentrací téměř stejné. Řešení PF2 vykazuje hodnoty ještě nižší a to o cca 10% maximální hodnoty ve všech řezech. Podstatný rozdíl je vidět u řešení PF2 v místech dále od překážky, kde jsou hodnoty koncentrací téměř poloviční oproti ÚTMFS. Průběh rozložení koncentrace je u všech řešení podobný a určité rozdíly v tvaru křivek v grafech jsou dány rozdílem proudových polí. Lze předpokládat, že dalším testováním různých nastavení modelu by bylo možné dosáhnout hodnot velmi blízkých porovnávanému řešení. Z grafů můžeme vidět, že největší hodnoty dosahují koncentrace nad překážkou a dále se jejich hodnota snižuje. Vzhledem k poměrně malým rozdílům ve vypočítaných hodnotách je otázku, které z těchto řešení nejvíce odpovídá fyzikální realitě.

7.5.2 Porovnání řešičů BBPF a PF

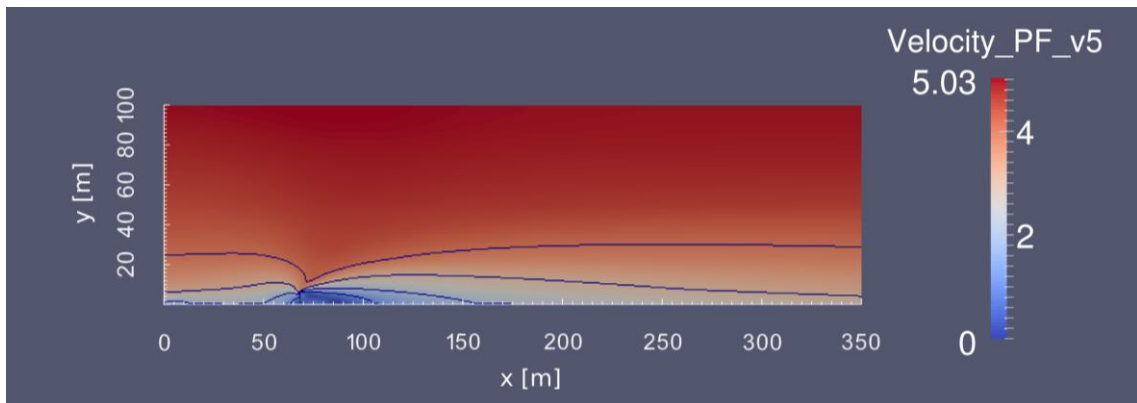
V této kapitole jsou porovnávány dva řešiče použité v této práci. Jsou sledovány rychlostní pole a profily a hodnoty koncentrací pro jiné vstupní rychlosti než v předěšlé kapitole. Nicméně se k výsledkům pro $u_{ref} = 3 \text{ ms}^{-1}$ budeme vracet v jednotlivých komentářích.

7.5.2.1 Porovnání rychlostních polí

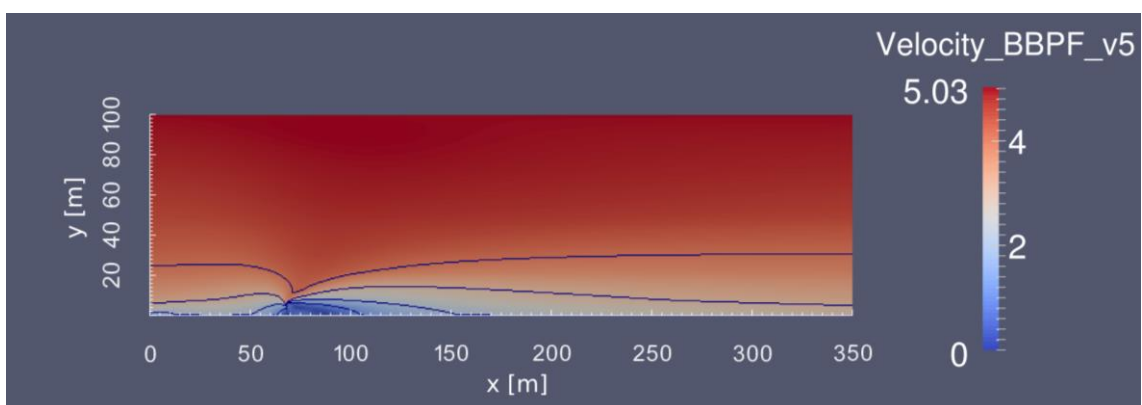
V následující sekci jsou zobrazena rychlostní pole pro každý řešič a to nejdříve pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$ a opět jsou zobrazeny izočáry rychlosti a to pro

$\vec{u} = 1,0; 2,0; 3,0; 4,0 \text{ ms}^{-1}$.

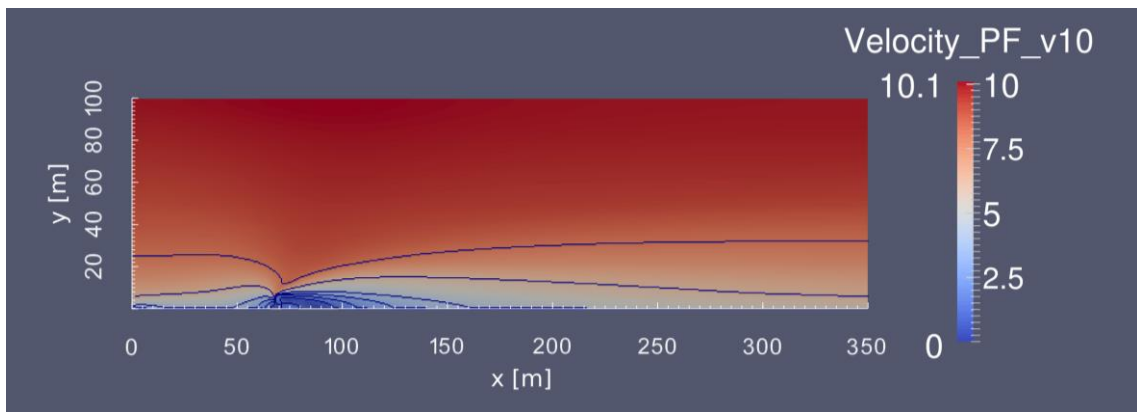
Dále jsou zobrazena rychlostní pole pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$ s izočárami rychlosti pro $\vec{u} = 1,0; 2,0; 3,0; 4,0; 6,0; 8,0 \text{ ms}^{-1}$



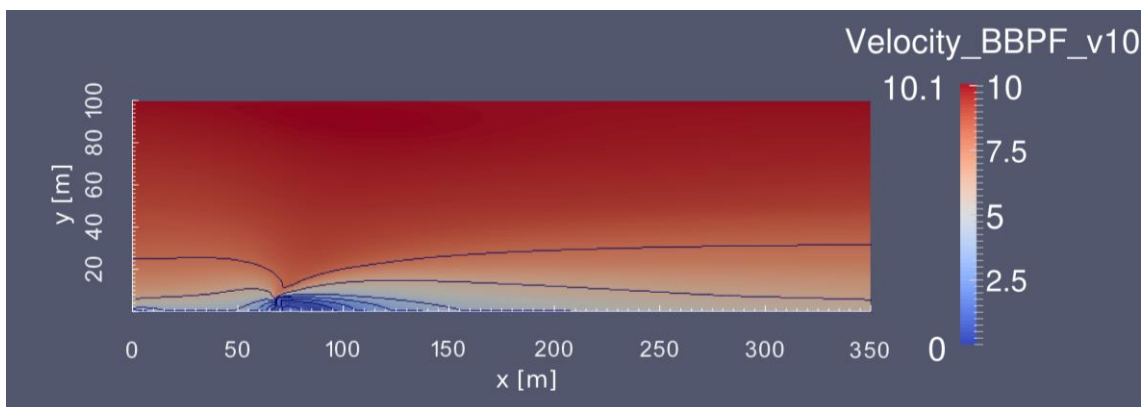
Obrázek 7.14 Rychlostní pole PF pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$



Obrázek 7.15 Rychlostní pole BBPF $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$



Obrázek 7.16 Rychlostní pole PF pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$



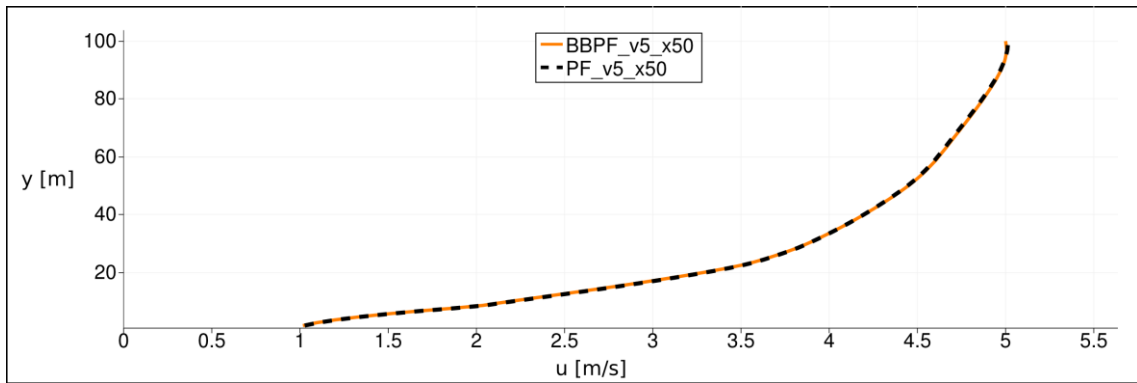
Obrázek 7.17 Rychlostní pole BBPF $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$

7.5.2.1.1 Komentář k výsledkům

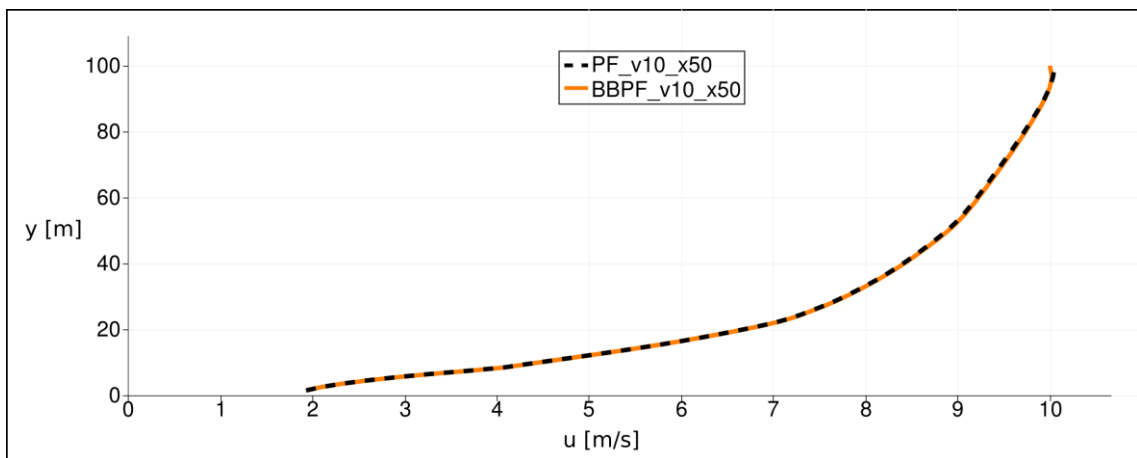
Oproti předešlé kapitole vidíme delší recirkulační zónu za překážkou, kdy v případě rychlosti $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$ je dlouhá přibližně 50 metrů a v případě $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$ pak asi 60 metrů. Toto odpovídá předpokladům, že zóna pro nízké rychlosti bude kratší a bude se prodlužovat s narůstající rychlostí proděním. Můžeme také pozorovat malý rozdíl mezi jednotlivými řešiči, kde řešič PF vykazuje delší recirkulační zónu, která je viditelná hlavně pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$. Můžeme zde vyslovit domněnku, že rozdíl v systémech rovnic se projevuje až ve vyšších rychlostech. Z polohy izočar vidíme, že mezní vrstva těsně u země je velmi malá. Tento jev bude zcela jistě způsoben použitou sítí, která nedovolí zachytit rozdíly v rychlosti těsně nad zemí.

7.5.2.2 Porovnání rychlostních profilů

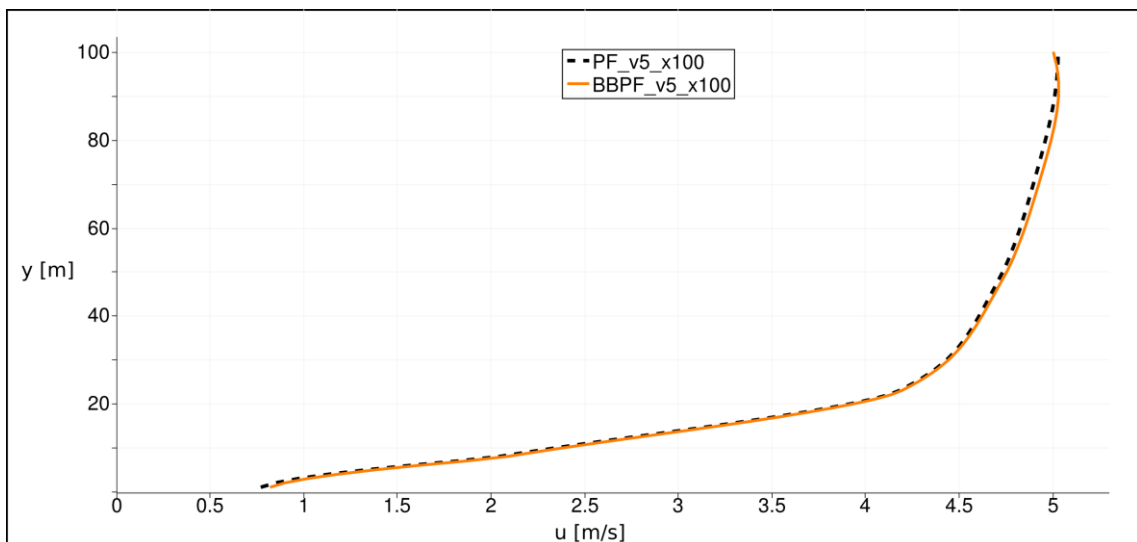
Na následujících obrázcích jsou zobrazeny rychlostní profily pro řezy 50, 100 a 200 metrů od vstupu do oblasti pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$ a pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$.



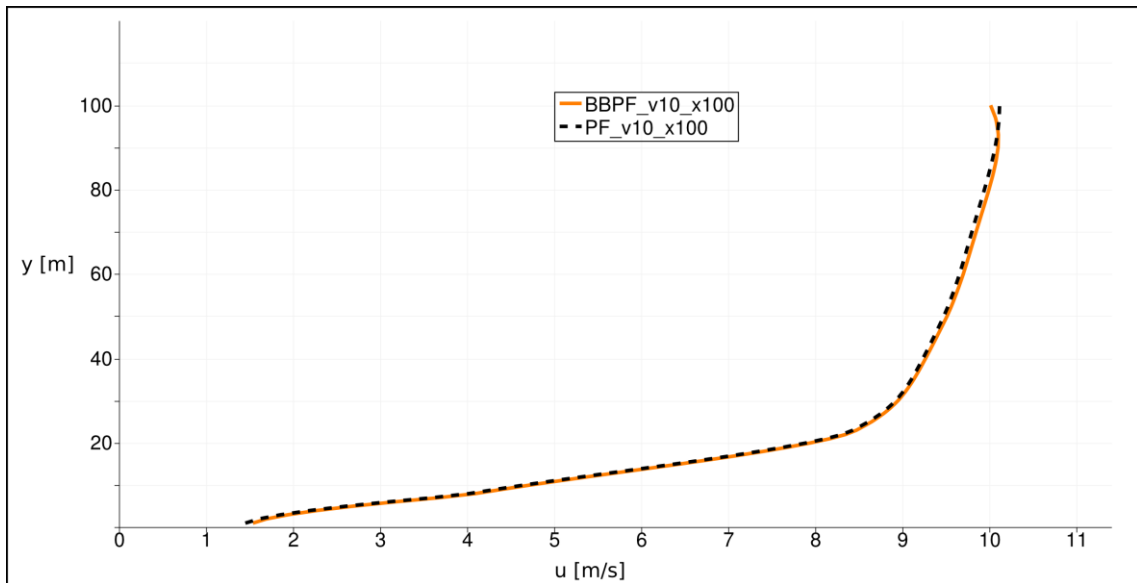
Obrázek 7.18 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$, $x = 50$



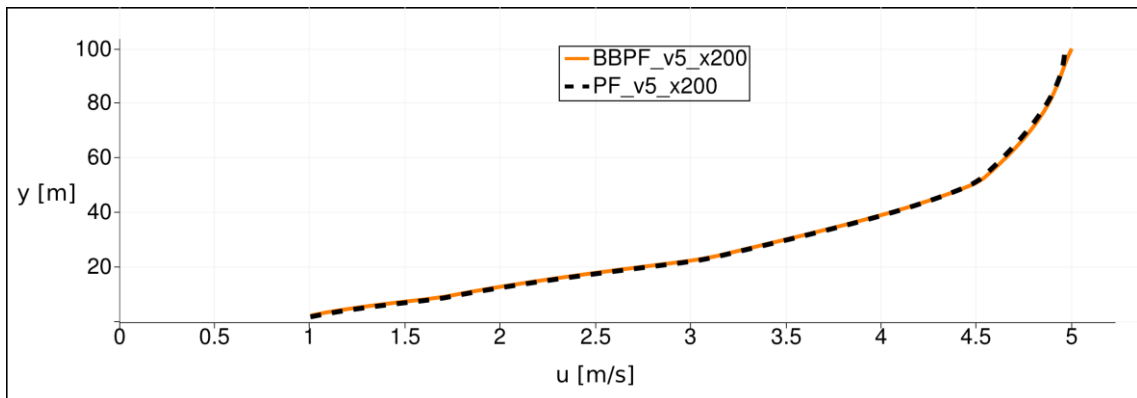
Obrázek 7.19 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$, $x = 50$



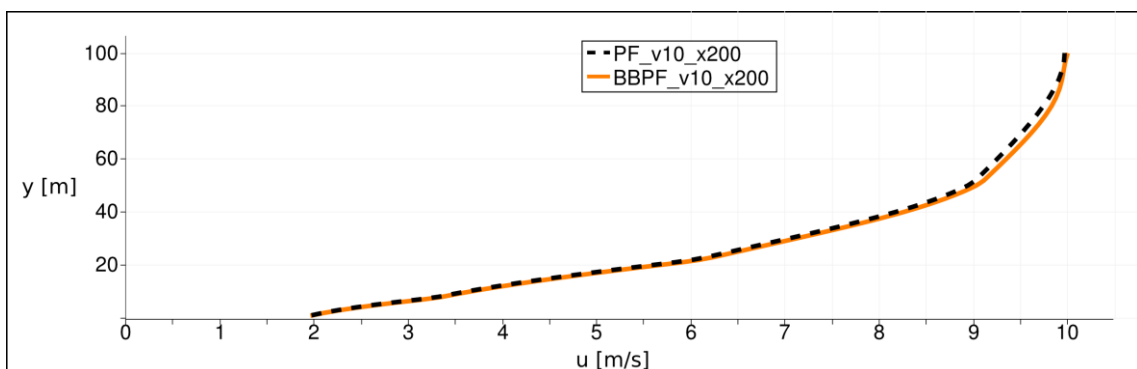
Obrázek 7.20 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$, $x = 100$



Obrázek 7.21 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$, $x = 100$



Obrázek 7.22 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 5 \text{ ms}^{-1}$, $x = 200$



Obrázek 7.23 Vertikální profily složky rychlosti u pro $u_{ref} = 10 \text{ ms}^{-1}$, $x = 200$

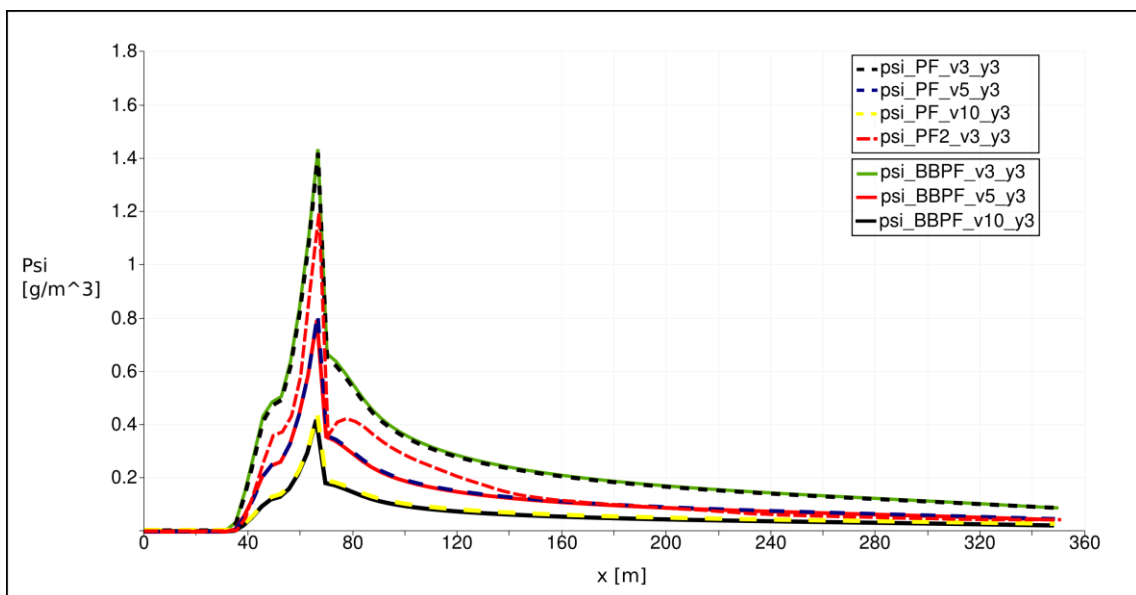
7.5.2.2.1 Komentář k výsledkům

Z obrázků vidíme, že se jednotlivé rychlostní profily při daných rychlostech a řezech téměř neliší. Lze si ovšem všimnout mírně nižších rychlostí u profilu PF, tato

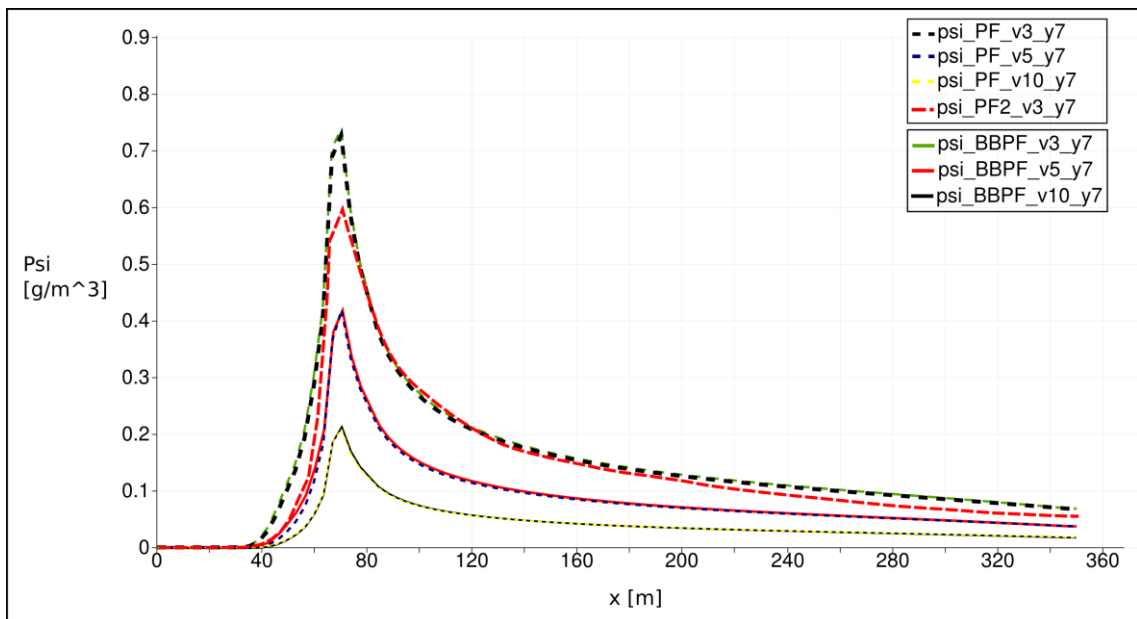
skutečnost následně ovlivní průběh koncentrací pasivní příměsi, jak bude pojednáno dále. V řezu za překážkou je vidět vliv recirkulační zóny, která významně ovlivňuje rychlost až do výšky 25 metrů. V tomto případě nebyl testován výpočet na jemné síti, ale lze předpokládat, že výsledky by odpovídaly výsledkům pro $u_{ref} = 3 \text{ ms}^{-1}$.

7.5.2.3 Porovnání koncentrací příměsí

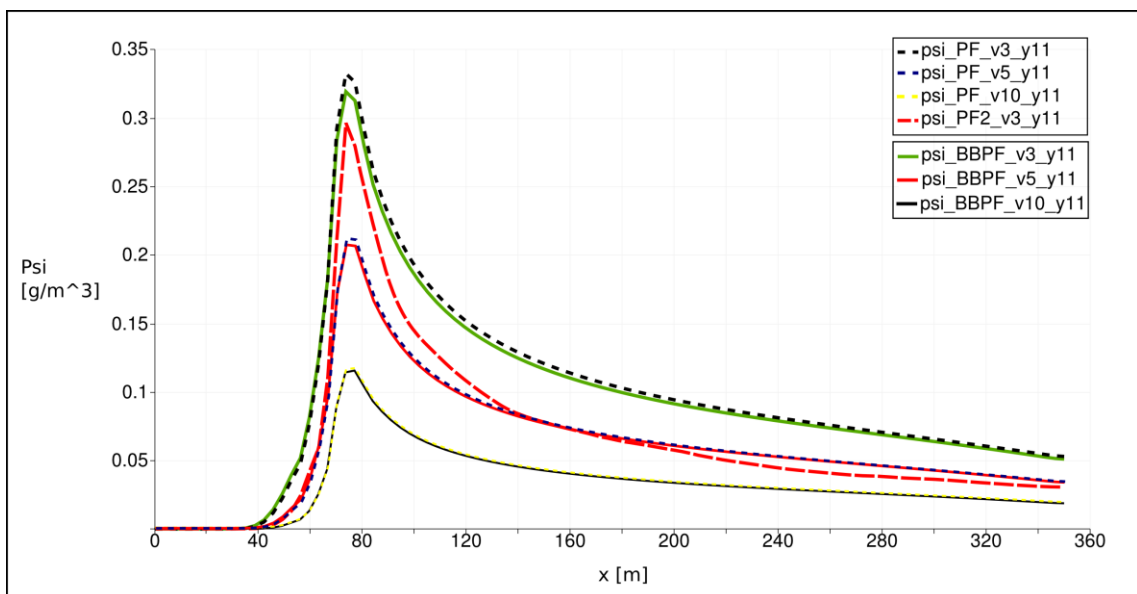
Pro názornost jsou v jednotlivých řezech znázorněny vždy v jednom grafu hodnoty koncentrace pro oba porovnávané řešiče a pro všechny tři testované vstupní rychlosti, tedy $u_{ref} = 3; 5; 10 \text{ ms}^{-1}$. Je navíc přidána hodnota koncentrace pro řešení PF2 a $u_{ref} = 3 \text{ ms}^{-1}$.



Obrázek 7.24 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 3 m nad povrchem



Obrázek 7.25 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 7 m nad povrchem



Obrázek 7.26 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 11 m nad povrchem

7.5.2.3.1 Komentář k výsledkům

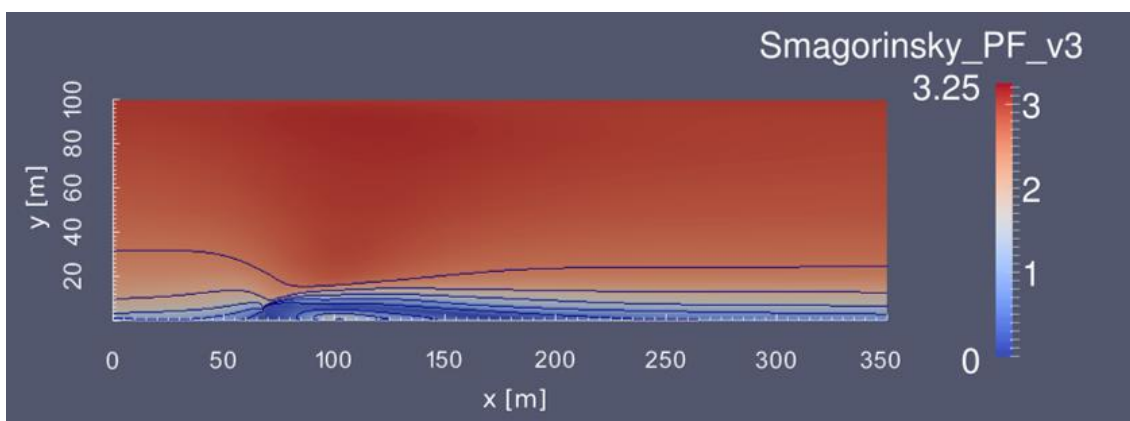
Ze zobrazení hodnot koncentrací vidíme, že při vyšších rychlostech je rychlejší odnos částic a tím hodnoty koncentrací klesají. Můžeme také pozorovat velmi podobné až téměř totožné chování obou řešičů při všech testovaných rychlostech i ve všech sledovaných hladinách. Jediný pozorovatelný rozdíl je v hladině $y = 11$

metrů, kdy řešič PF vykazuje vyšší hodnoty koncentrace. Což potvrzuje i jistý rozdíl v proudových polích, jak bylo pojednáno výše v 7.5.2.2.1.

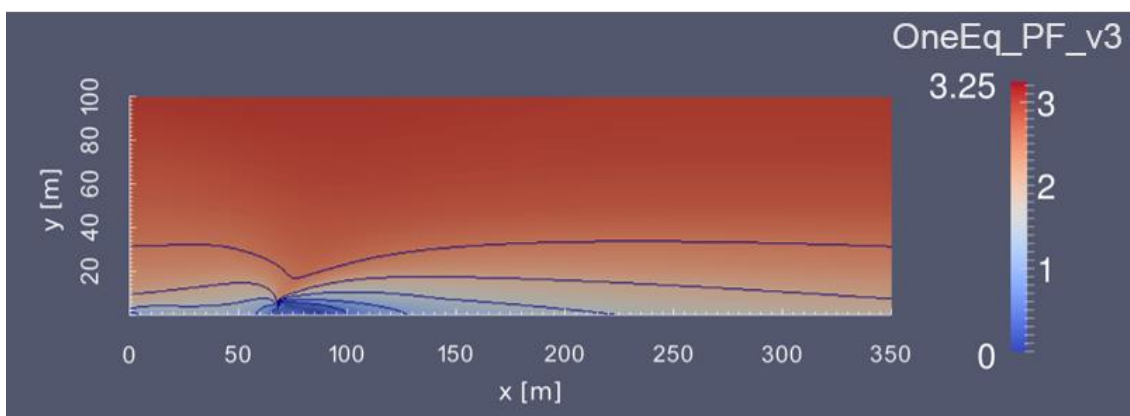
7.5.3 Porovnání modelů turbulence

Vzhledem k výše uvedeným výsledkům porovnejme nyní řešení vytvořené pomocí řešiče PF s modely turbulence *Smagorinsky*, *One Equation Eddy* a *k-omega*. Dále je srovnáván řešič PF2 s modelem *One Equation Eddy*. Tento přístup by nám měl ukázat rozdíly v jednotlivých modelech a jejich schopnosti ovlivnit proudové pole. Pro všechny výpočty byla použita $u_{ref} = 3 \text{ ms}^{-1}$.

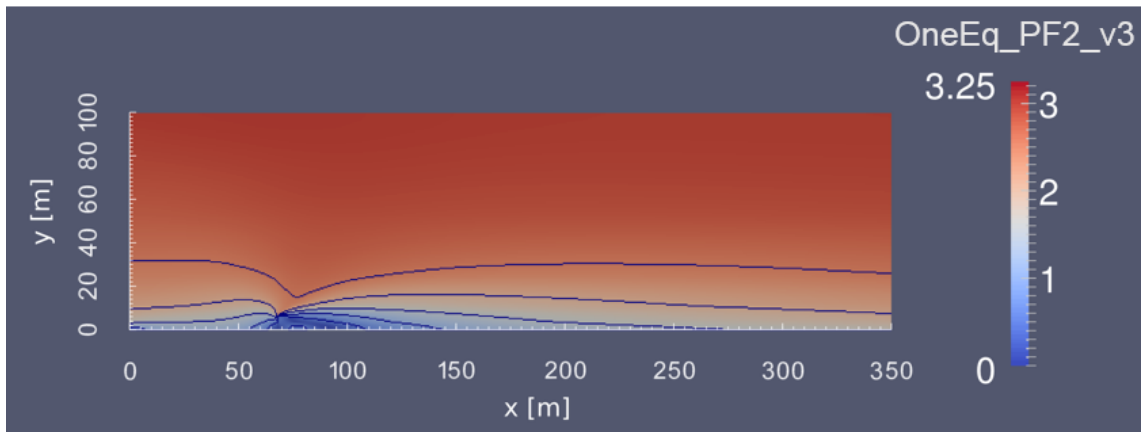
7.5.3.1 Porovnání rychlostních polí



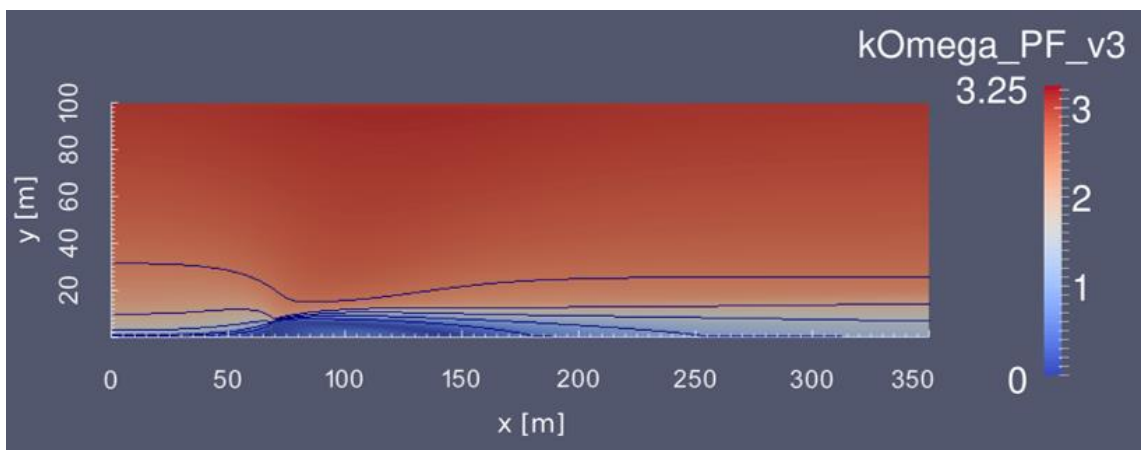
Obrázek 7.27 Rychlostní pole Smagorinsky



Obrázek 7.28 Rychlostní pole PF



Obrázek 7.29 Rychlostní pole PF2



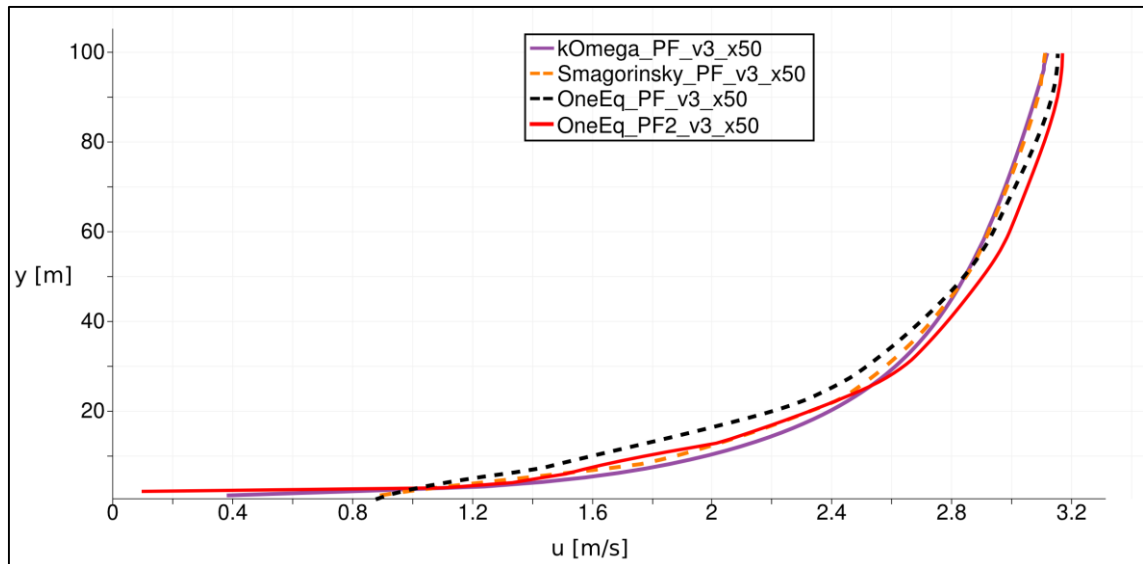
Obrázek 7.30 Rychlostní pole k - ω

7.5.3.1.1 Komentář k výsledkům

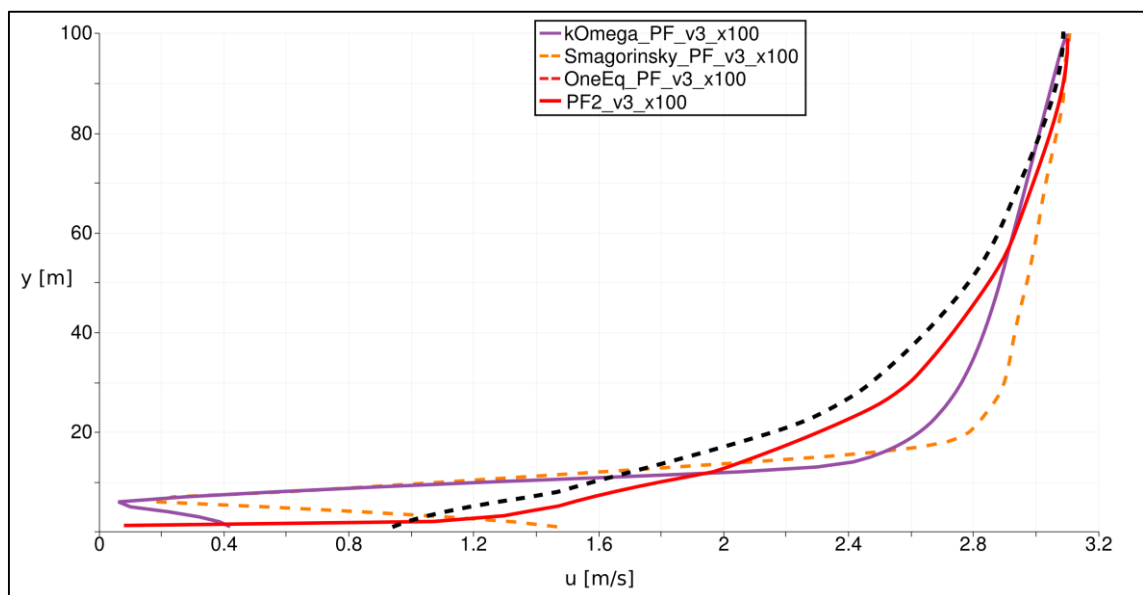
Z pohledu na zobrazená rychlostní pole lze usoudit, že model *Smagorinsky* vytváří největší recirkulační zónu, s modelem *k-omega* je tato zóna o něco menší a podstatný rozdíl lze pozorovat u *One Equation Eddy* modelu, který má nejbližší k porovnávaným výsledkům ÚTMFS. Také ovlivnění proudu nad překážkou je u tohoto modelu minimální. Je zde ovšem nutno podotknout, že výsledek modelu *Smagorinsky* je zcela jistě ovlivněn použitou hrubou sítí a u modelu *k-omega* je třeba kromě jemnější sítě testovat další možné hodnoty parametrů tohoto poměrně komplexního modelu. Zajímavé jsou polohy izočáry rychlostí, kde vidíme u modelů *Smagorinsky* a *k-omega* vyvinutou mezní vrstvu v podstatě po celé oblasti, což je oproti řešení s *One Equation Eddy* podstatný rozdíl. Na tomto příkladu můžeme ilustrovat, že chování modelu v různých místech výpočetní oblasti

je rozdílné a nelze tedy říci, že by *One Equation Eddy* model byl jednoznačně lepší.

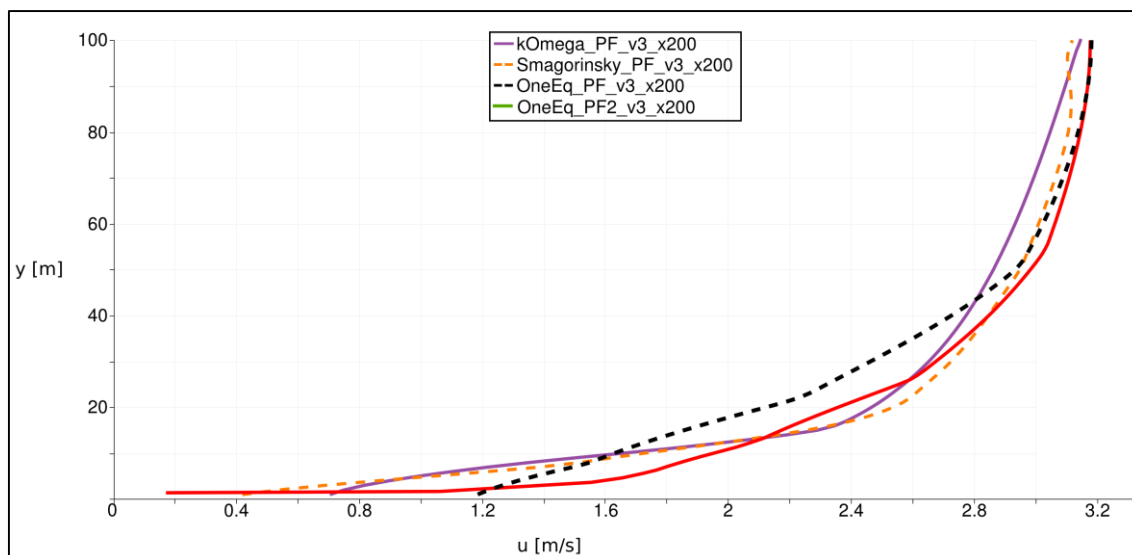
7.5.3.2 Porovnání rychlostních profilů



Obrázek 7.31 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 50$



Obrázek 7.32 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 100$

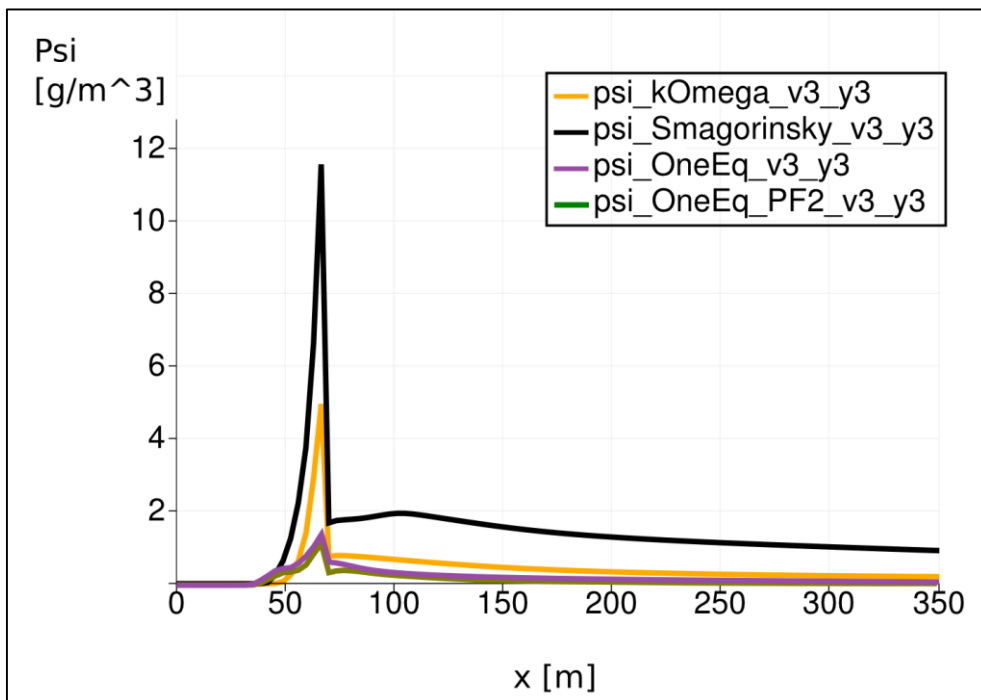


Obrázek 7.33 Vertikální profily složky rychlosti u pro $x = 200$

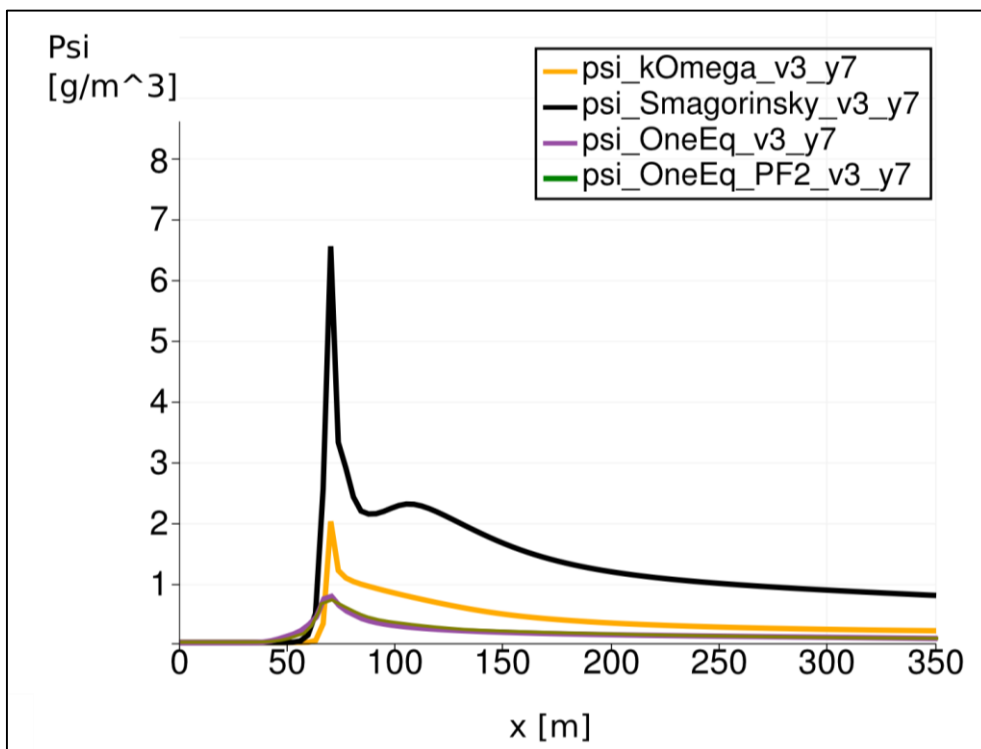
7.5.3.2.1 Komentář k výsledkům

U rychlostních profilů vidíme podobné chování u řezu $x=50$. I na tomto řezu ale lze pozorovat rozdíly u spodní hranice, kde je na hrubé síti gradient rychlosti dosti značný. Zajímavé je chování modelů *Smagorinsky* a *k-omega*, které i na hrubé síti vykazují u spodní hranice přijatelné hodnoty, jak již bylo zmíněno v předcházejícím komentáři. Výrazný rozdíl je vidět v řezu $x=100$ za překážkou, kdy recirkulační zóna u modelů *Smagorinsky* a *k-omega* způsobuje zpětný proud. Profily za překážkou $x=200$ jsou srovnatelné, až na chování u spodní hranice, jak bylo rozebíráno výše. Změnu zde vidíme u modelu *Smagorinsky*, který vykazuje povolnější profil, což je dáno podobou rychlostního pole, které se u tohoto modelu vytváří za překážkou.

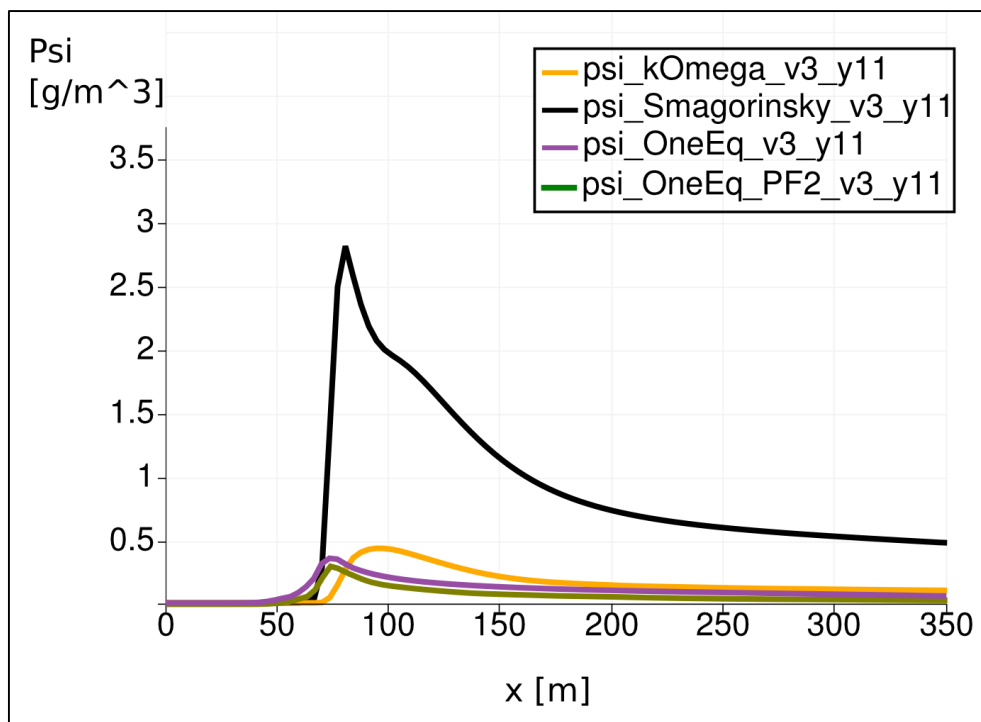
7.5.3.3 Porovnání koncentrací příměsí



Obrázek 7.34 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 3 m nad povrchem



Obrázek 7.35 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 7 m nad povrchem



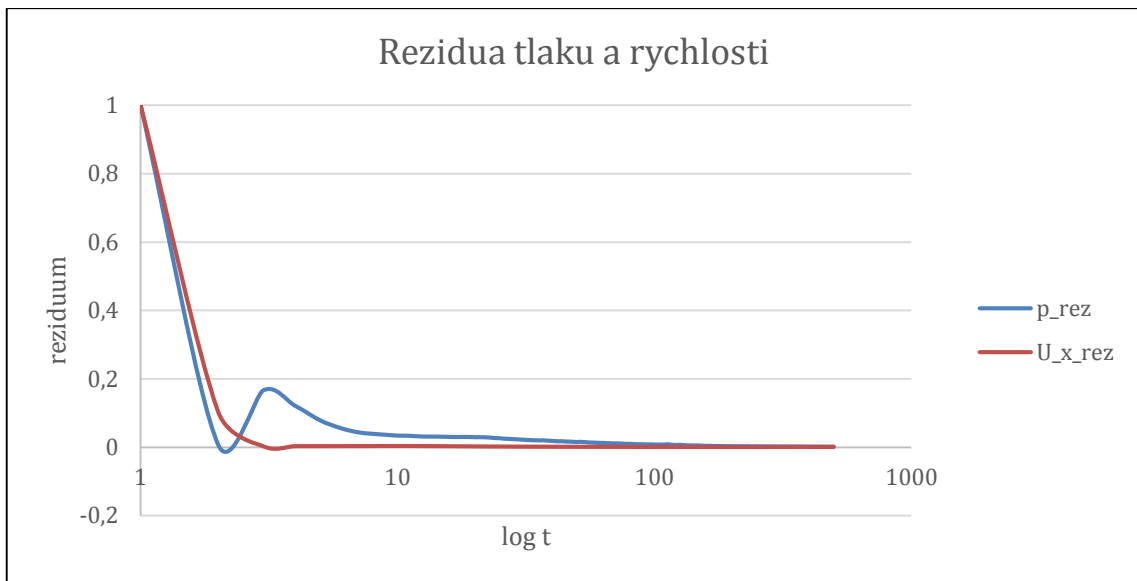
Obrázek 7.36 Porovnání podélného profilu hodnot koncentrací ve výšce 11 m nad povrchem

7.5.3.3.1 Komentář k výsledkům

Značně rozdílných výsledků dosahují hodnoty koncentrací spočítané jednotlivými modely. Model *Smagorinsky* vykazuje několikanásobné hodnoty koncentrace příměsi oproti ostatním modelům, což zřejmě ukazuje na jeho velmi omezené nebo nemožné použití pro výpočet přenosu veličin. Otázkou zde ovšem zůstává, jak toto ovlivní použitá síť. Modely *One Equation Eddy* a *k-omega* vykazují velmi podobné hodnoty vypočtených koncentrací.

7.5.4 Průběh výpočtu

Na následujícím grafu je zaznamenán typický průběh hodnot reziduí pro tlak a vodorovnou složku rychlosti u . Na ose x je zobrazen výpočetní čas v logaritmickém měřítku. Výpočet byl kontrolován a zastaven pomocí minimální hodnoty rezidua tlaku.



Obrázek 7.37 Průběh reziduí

8 Závěr

Teoretická část a prezentované výsledky této práce ukazují, že modelování proudění v mezní vrstvě atmosféry je velmi komplexní záležitost jak z hlediska porozumění fyzikálním jevům, tak z hlediska numerického řešení.

Hlavním cílem práce bylo otestovat možnost řešení proudění v MVA pomocí softwaru OpenFOAM a doprogramovat do tohoto řešiče rovnici pro transport pasivní příměsi.

Tento cíl byl splněn a výsledky můžeme shrnout do několika bodů:

- Byly testovány dva řešiče proudění programu OpenFOAM, do kterých byla autorem implementována transportní rovnice pro pasivní příměs. Oba řešiče vykazovaly velmi podobné výsledky výpočtů proudových polí a rozložení koncentrace pasivní příměsi. Výsledky byly porovnávány s pracemi [12] a [13] a i přes jisté rozdíly můžeme konstatovat, že použití programu OpenFOAM jako základu pro řešení úloh tohoto typu, je možné. Nicméně je třeba ještě dalšího testování pro různá nastavení a také úprav v algoritmech pro dosažení potřebné podoby řešených rovnic, která by byla pro proudění v MVA optimálnější.
- Výpočet byl testován na dvou sítích, kdy jedna z nich byla tvořena přibližně dvojnásobným počtem buněk. Výsledky na těchto sítích vykazovaly rozdíly v proudovém poli, kdy se ukázalo, že jemnější síť daleko lépe zachycuje oblast těsně u země a její použití je pro další výpočty LES metodou nezbytné. Tento rozdíl v proudových polích se následně projevil v hodnotách koncentrací pasivní příměsi v oblasti za překážkou. Je nutno podotknout, že výpočet na jemnější síti byl časově podstatně náročnější (6 hodin oproti cca 30 minutám). Další testování a nalezení správného nastavení sítě je žádoucí.
- Pro naše řešení byla přijata jistá zjednodušení, která byla pro náš případ vyhovující, ale obecně pro proudění v MVA je třeba je zvažovat – neutrální teplotní zvrstvení, konstantní hustota.
- Důležitou kapitolou byl popis a otestování modelu transportu pasivní příměsi. Zvolený model počítal s unášením příměsi proudem vzduchu

a s jeho spadem – sedimentací na zemi. Stejný model byl použit ve srovnávaných pracích [12] a [13]. Z prezentovaných výsledků plyne, že na hodnoty koncentrace má zásadní vliv členitost oblasti a charakter proudění. Pozorované rozdíly v hodnotách koncentrace jsou poměrně malé (do 10%) a jsou způsobeny proudovým polem, charakter rozptylu koncentrace je ale podobný. Lze tedy konstatovat, že pro výpočet koncentrací pasivních příměsí je zásadní vyvinout a správně nastavit výpočetní model pro proudění.

- Značné úsilí bylo věnováno studiu, nastavení a testování různých modelů turbulence. Byly používány LES modely již implementované v programu OpenFOAM. Výsledky dosažené modelem *One Equation Eddy* jsou uspokojivé, nicméně nejsou úplně shodné s porovnávanými výsledky. Příčin této situace může být několik. Ať už použitý model turbulence obecně a jeho nesprávné nastavení, nebo mohou být příčiny na straně nevhodné použité výpočetní sítě, která může být příliš hrubá pro LES modelování. Je nutné říci, že při použití jemnější sítě se proudové pole více přiblížilo porovnávanému řešení. Dalším prvkem ovlivňujícím výpočet je použití 2D modelu, přičemž LES modelování je určeno primárně pro 3D problémy.
- Celkem byly testovány modely *Smagorinsky*, *One Equation Eddy* a *k-omega*. Modely byly testovány pro různé vstupní rychlosti a profily proudění (konstantní, mocninný, logaritmický). Taktéž bylo testováno mnoho nastavení konkrétních modelů, viz kapitola 4.1.2. Postupně autor dospěl od nestacionárního proudění za překážkou k proudění stacionárnímu ve stavu zde prezentovaném. Přes poměrně uspokojivé výsledky je ale třeba dalšího zkoumání daných modelů a testování jejich nastavení.
- Snahou autora bylo, aby použité numerické metody v programu OpenFOAM byly nastaveny tak, aby zajistily robustnost výpočtu při zachování jeho co největší přesnosti. Při některých výpočtech bohužel došlo při použití schémat druhého řádu k jejich divergenci a muselo být použito schéma prvního řádu přesnosti.

- Okrajové podmínky hrají zásadní úlohu ve správném fungování řešičů a jejich nastavení bylo věnováno poměrně hodně času. Nicméně jistě by bylo vhodné otestovat další možnosti jejich volby.

Celkově lze říci, že pro autora byla práce velmi přínosná a získal díky ní důležitý teoretický vhled zaprvé do fyzikálních dějů v atmosféře, jejich popisu a obtížnostech, které nám toto přináší a za druhé do matematického aparátu, kterým tyto děje popisujeme a následně řešíme. Velmi obohacující byla aplikační část, díky které autor porozuměl do jisté úrovně fungování softwaru OpenFOAM a použité numerické matematice potřebné k řešení úloh proudění v MVA.

Pokud zhodnotíme použité řešení, tak lze konstatovat, že jeho použití (a využití softwaru OpenFOAM) je pro problematiku proudění v MVA možné a výsledky by měly být, při správném nastavení a odladění programu, vyhovující pro různé environmentální aplikace.

Další kroky, především pro autora, jsou:

- Otestovat více modelů turbulence a najít jejich co nejlepší nastavení
- Upravit řešiče programu OpenFOAM tak, aby lépe vyhovovaly potřebám výpočtů proudění v MVA
- Otestovat a vybrat optimální numerické metody

9 Seznam použité literatury a zdrojů

- [1] ARGAIN, J. L. et al. Estimation of the Friction Velocity in Stably Stratified Boundary-Layer Flows Over Hills Faro: Universidade do Algarve, 2008. Dostupné z: http://webpages.fc.ul.pt/~mateixeira/Argain_etal_BLM_2009.pdf
- [2] BEHRENS, Tim. OpenFOAM's basic solvers for linear systems of equations. Delft: TU Delft, 2009. Dostupné z: http://www.tfd.chalmers.se/~hani/kurser/OS_CFD_2008/TimBehrens/tibeh-report-fin.pdf
- [3] BENEŠ, Luděk. Numerické řešení proudění v mezní vrstvě atmosféry. Praha: ČVUT, 2000.
- [4] BLAZEK, J. Computational fluid dynamics: principles and applications. 1st ed. New York: Elsevier, 2001.
- [5] BODNÁR, Tomáš. Numerical simulation of flows and pollution dispersion in atmospheric boundary. Praha: ČVUT, 2003.
- [6] DAVIDSON, Lars. Evaluation of the sst-sas model: channel flow, asymmetric diffuser and axi-symmetric hill. Göteborg: Chalmers University of Technology, 2006. Dostupné z: http://www.tfd.chalmers.se/~lada/postscript_files/davidson_ec-comas_2006.pdf
- [7] FERZIGER, Joel H a Milovan PERIĆ. Computational methods for fluid dynamics. 3rd rev. ed. Berlin: Springer-Verlag, 2002.
- [8] JAŇOUR, Zbyněk. Modelování mezní vrstvy atmosféry. Praha: Karolinum, 2001.
- [9] JASAK, Hrvoje. Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows. London: University of London, 1996.
- [10] LEVEQUE, Randall J. Numerical methods for conservation laws. 2nd ed. Boston: Birkhäuser Verlag, 1992.
- [11] McDONOUGH, J. M., Lectures in computational fluid dynamics of incompressible flow: mathematics, algorithms and implementations. University of Kentucky, 2003.
- [12] ŠÍP, Viktor, Luděk BENEŠ, Hynek ŘEZNIČEK. Modelling of the effects of a vegetation barrier on road dust dispersion. Praha, ČVUT, 2015.

- [13] ŠÍP, Viktor a Luděk BENEŠ. Šíření pevných částic ze silniční komunikace CFD modelování. Praha, ČVUT, 2015.
- [14] VERHOEVEN, Olivier. Trailing edge noise Simulation using IDDES in OpenFoam. Delft: TU Delft, 2011.
- [15] CFD Online [online]. [cit. 2016-01-09]. Dostupné z: <http://www.cfd-online.com>
- [16] OpenFOAM documentation [online]. [cit. 2016-01-09]. Dostupné z: <http://sourceforge.net/projects/foam/>
- [17] OpenFOAM wiki [online]. [cit. 2016-01-09]. Dostupné z: https://openfoamwiki.net/index.php/Main_Page
- [18] Paraview documentation [online]. [cit. 2016-01-09]. Dostupné z: <http://www.paraview.org>
- [19] Astronomia [online]. [cit. 10.1.2016]. Dostupné z: <http://astronomia.zcu.cz/planety/zeme/1943-atmosfera-zeme>
- [20] OpenFOAM [online]. Dostupné z: <http://www.openfoam.com/>
- [21] U.S. Environmental Protection Agency. Dostupné z: <http://www3.epa.gov/airtrends/aqtrnd95/pm10.html>
- [22] LINDBLAD, Daniel [online]. Implementation and run-time mesh refinement for the $k - \omega$ SST DES turbulence model when applied to airfoils. Göteborg, Chalmers University of Technology, 2014. Dostupné z: http://www.tfd.chalmers.se/~hani/kurser/OS_CFD_2013/DanielLindblad/k-Omega-SST-DES-Report.pdf