

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

Fakulta strojní

Habilitační práce

**Uživatelské modely v numerických výpočtech  
procesních aparátů a zařízení**

Ing. Karel Petera, Ph.D.

Obor: Konstrukční a procesní inženýrství

2017



## Poděkování

Chtěl bych poděkovat všem kolegům z Ústavu procesní a zpracovatelské techniky ČVUT FS, se kterými jsem spolupracoval v uplynulých letech na různých výzkumných projektech a tvorbě návazných publikací.

Zejména děkuji:

- prof. Tomáši Jiroutovi, PhD. za trvalou podporu mojí práce na Ústavu procesní a zpracovatelské techniky
- ing. Martinu Dostálovi, PhD. za vynikající spolupráci při řešení společných projektů
- ing. Štěpánu Papáčkovi, PhD., z Jihočeské univerzity v Českých Budějovicích, za cennou a inspirující spolupráci v oblasti modelování systémů s živými organismy
- svým rodičům



## Souhrn

Použití nástrojů CFD při návrhu a konstrukci procesních aparátů a celé řady jiných strojních zařízení je v dnešní době nezbytnou podmínkou kvalitního výsledku. V řadě případů je nutné CFD systémy rozšířit o další modely s pomocí uživatelsky definovaných funkcí. Tato práce ukazuje jejich implementaci a použití v systému ANSYS Fluent na dvou případech z oblasti procesní a zpracovatelské techniky. Prvním je přenos tepla v impaktním proudu tekutiny, jehož průmyslovou obdobou je přestup tepla na dně nádoby míchané axiálním míchadlem. Důležitým faktorem je zde přítomnost tangenciální složky, která v takovýchto případech významným způsobem ovlivňuje charakteristiku přenosu tepla. V této práci je podrobně popsána metodika implementace uživatelské funkce postihující anizotropní turbulentní tepelný tok. Dále je zde prezentována uživatelská funkce pro ověření vlivu podélné kondukce v teplosměnné ploše u experimentální metody TOIRT. Na základě dalších numerických simulací míchané nádoby s usměřovačem toku jsou v této práci vyhodnoceny integrální korelace pro Nusseltovo číslo a výsledky jsou porovnány s experimentálními daty. Druhým prezentovaným případem je model „fotosyntetické továrny“ (PSF) a implementace uživatelské funkce postihující vliv distribuce ozáření na růst řasových mikroorganismů v promíchávaném systému. Cirkulace řasové kultury díky vhodnému hydrodynamickému režimu mezi místy s vysokou a nízkou intenzitou osvětlení může podstatně navýšit produkci biomasy. To se podařilo ověřit na modelu dvourozměrné geometrie čtvercové kavity a také na plně trojrozměrném případě Couette-Taylorova zařízení. Výsledky simulací prezentované v této práci demonstrují vliv fotoinhibice a zvýšení efektivity procesu s narůstající intenzitou promíchávání systému. Tato závislost odpovídá experimentálním datům jiných autorů.

## Summary

Nowadays, CFD tools are essential in the design of process apparatuses and many other engineering equipment in order to get high-quality results. In numerous cases, it is necessary to extend capabilities of CFD systems with additional models by user-defined functions. Their implementation and usage in ANSYS Fluent for two cases from process engineering are illustrated in this work. The first one is the heat transfer in an impinging jet which industrial analogy is represented by the heat transfer at the bottom of a vessel agitated by an axial impeller. The tangential velocity component is the important factor which influences the heat transfer characteristics substantially in such cases. In this work, the methodology of implementing a user-defined function for the anisotropic turbulent heat flux is described in detail. The influence of lateral heat conduction in the heat-exchange surface with TOIRT experimental method was investigated by another user-defined function. Integral correlations for the Nusselt number were evaluated in consequent numerical simulations of an agitated vessel with a draft tube and compared with experimental data. The second case presented in this work is the implementation of a user-defined function describing the model of „photo-synthetic factory“ (PSF) and influence of the irradiance distribution on the microalgae growth in a mixed system. The circulation of the algae culture between places with high and low light irradiance due to a proper hydrodynamic regime may significantly increase the biomass production. This effect was verified on a model of two-dimensional square cavity and also on a three-dimensional case of the Couette-Taylor device. The results presented in this work illustrates the impact of the photoinhibition and the increase of the process effectivity with the increasing mixing intensity. This dependency is in accordance with experimental data of other authors.



# Obsah

<b>Úvod</b>	<b>3</b>
<b>1 Modelování a simulace fyzikálních systémů</b>	<b>7</b>
<b>2 Základní transportní rovnice</b>	<b>11</b>
2.1 Rovnice kontinuity a bilance hybnosti . . . . .	11
2.2 Tenzor dynamických napětí a Navier-Stokesova rovnice . . . . .	12
2.3 Rovnice přenosu tepla (entalpie) . . . . .	13
2.4 Rovnice přenosu hmoty . . . . .	14
<b>3 Turbulence</b>	<b>15</b>
3.1 Large Eddy Simulation (LES) . . . . .	17
3.2 Zprůměrované Navier-Stokesovy rovnice . . . . .	18
3.3 RANS modely turbulence . . . . .	19
3.3.1 Modely založené na turbulentní viskozitě . . . . .	19
3.3.2 Modely založené na transportu Reynoldsových napětí (RSM) . . . . .	23
3.3.3 Stěnové funkce . . . . .	25
<b>4 Numerické metody používané v CFD</b>	<b>29</b>
4.1 Metoda konečných objemů . . . . .	30
4.2 Lattice-Boltzmannova metoda . . . . .	34
4.3 Přesnost numerického řešení . . . . .	37
4.3.1 Odchyly od fyzikální skutečnosti . . . . .	37
4.3.2 Vliv velikosti sítě . . . . .	38
<b>5 Uživatelské funkce v ANSYS Fluent</b>	<b>43</b>
5.1 Typy uživatelských funkcí . . . . .	46
5.2 Makra pro zjištění základních veličin . . . . .	48
5.2.1 Gradienty základních veličin . . . . .	49
5.2.2 Zprůměrované hodnoty u nestacionárních simulací . . . . .	50
5.3 Smyčky (cykly) . . . . .	50
5.4 Uživatelské skaláry (UDS) . . . . .	52
5.4.1 Uživatelské veličiny (UDM) . . . . .	53
5.5 Paralelní výpočty a uživatelské funkce . . . . .	55
<b>6 Přenos tepla v impaktním proudu a míchaných nádobách</b>	<b>61</b>
6.1 Anizotropie v přenosu tepla . . . . .	62
6.2 Simulace proudění a přestupu tepla v impaktním proudu . . . . .	63
6.3 Implementace modelu pro turbulentní tepelný tok . . . . .	67

6.3.1	Výsledky simulací pro uživatelsky definovaný turbulentní tepelný tok .	70
6.4	Simulace přestupu tepla v rotujícím impaktním proudu . . . . .	73
6.4.1	Porovnání výsledků simulací s experimenty TOIRT . . . . .	76
6.4.2	Integrální hodnoty součinitele přestupu tepla . . . . .	78
<b>7</b>	<b>Implementace růstového modelu PSF ve fotobioreaktoru</b>	<b>83</b>
7.1	Model fotosyntetické továrny . . . . .	85
7.2	Vliv distribuce ozářenosti . . . . .	88
7.3	Implementace PSF modelu v ANSYS Fluent . . . . .	89
7.3.1	Definice reakčního členu pomocí UDF . . . . .	90
7.4	Simulace proudění včetně PSF modelu . . . . .	95
7.4.1	Čtvercová kavita . . . . .	96
7.4.2	Couette-Taylorovo zařízení . . . . .	103
<b>8</b>	<b>Závěr</b>	<b>111</b>
	<b>Seznam symbolů</b>	<b>115</b>
	<b>Literatura</b>	<b>121</b>
	<b>Příloha</b>	<b>127</b>



# Úvod

U celé řady strojních zařízení nebo procesních aparátů a zařízení, ve kterých hraje důležitou roli dynamika proudění tekutin spolu s případným přenosem tepla či hmoty, je využití numerických metod CFD nezbytným předpokladem úspěšného návrhu nebo vývoje. Příkladem mohou být třeba chemické reaktory nebo bioreaktory, kde charakter toku uvnitř zařízení významným způsobem ovlivňuje výtěžnost celého procesu. Idealizované případy ideálně míchaných systémů nebo na druhé straně systémů s pístovým tokem, které jsou často používány při počátečním návrhu zařízení, se mohou podstatně odchylovat od reálných zařízení v průmyslovém měřítku. Při konstrukci a stavbě zařízení v oblasti procesního inženýrství (a nejen v této oblasti) tak představuje CFD důležitý nástroj pro popis a studium chování reálných systémů, ať již se jedná o míchané nádoby (důležitými parametry při návrhu jsou například doba homogenizace nebo příkon míchadla), katalytické trubkové reaktory (klíčovým je model popisující chemickou reakci), tepelné výměníky (nejdůležitějšími parametry jsou velikost teplosměnné plochy a tlaková ztráta), fotobioreaktory (rozhodujícím faktorem je distribuce ozáření a model fotosyntetické reakce), destilační kolony a absorbery (zde je důležitý správný popis vícefázového proudění a velikosti mezifázové plochy). Nástroje CFD mají rovněž nezastupitelnou úlohu při optimalizaci a s rostoucím výkonem výpočetní techniky umožňují zkrátit dobu vývoje a vylepšit konstrukční parametry navrhovaných zařízení (příkladem může být třeba optimalizace umístění vestaveb ve statických směšovačích, velikost průtoku ve fotobioreaktoru zajišťující optimální promíchávání systému a produkci biomasy, tvar a velikost teplosměnné plochy ve výměnících tepla nebo míchaných nádobách).

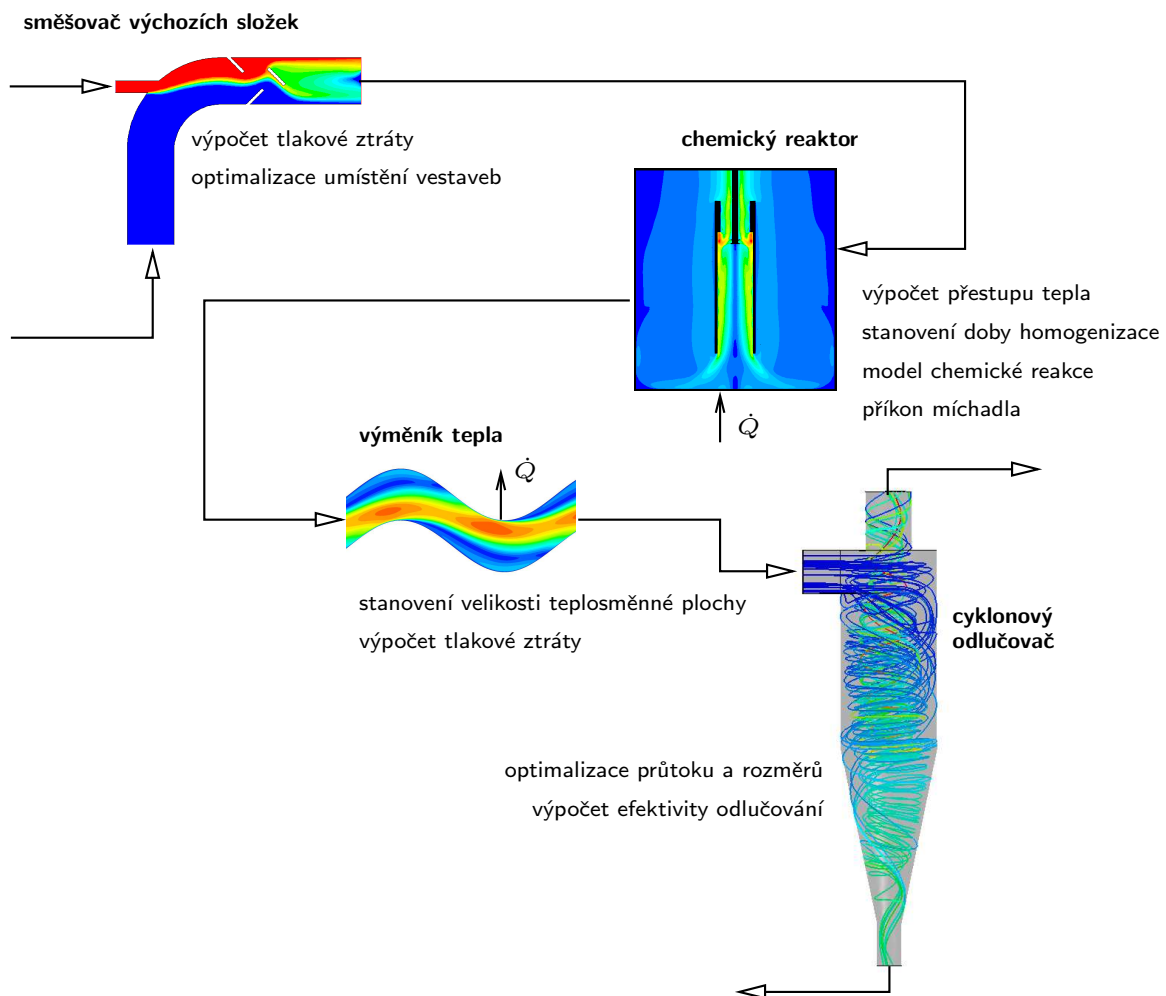
V současnosti existuje celá řada softwarových systémů umožňujících řešit základní rovnice popisující přenos hybnosti, tepla i hmoty ve velice komplikovaných geometriích na základě různých numerických metod, počínaje klasickou metodou sítí, přes metodu konečných elementů, metodu konečných objemů [Patankar, 1980] až po relativně nové (novější) metody vycházející z kinetické teorie plynů a imitace pohybu a kolizí částic v diskrétní mřížce jako je Lattice Boltzmanova metoda (LBM) [Succi, 2001]. Z komerčně dostupných systémů lze třeba zmínit ANSYS Fluent nebo ANSYS CFX, které jsou založené na metodě konečných (kontrolních) objemů, což je v současnosti pravděpodobně nejpoužívanější přístup při výpočtech proudění. Do kategorie softwarů založených na metodě konečných elementů patří například COMSOL Multiphysics nebo ABAQUS. Vedle komerčních systémů existují i open-source řešení jako je například OpenFOAM [2017], založený na metodě konečných objemů, nebo OpenLB [2017] implementující metodu LBM.

Výhodou open-source systémů je možnost, někdy trochu hypotetická, libovolně zasahovat do zdrojového kódu a uzpůsobit tak řešič i řešené rovnice k obrazu svému. To u komerčních systémů možné není, nicméně většina z nich poskytuje rozšiřující rozhraní pro uživatelem definované funkce (procedury), které mohou popisovat například proměnné okrajové podmínky, materiálové vlastnosti, kinetiku reakcí nebo i vlastní modely turbulence či dokonce celé transportní

rovnice. Tímto způsobem lze podstatně rozšířit spektrum problémů, které se s těmito systémy dají řešit a které by jinak nebylo možné řešit. Výhodou komerčních systémů je většinou zpracovanější uživatelské rozhraní, dále pak pre a postprocessing, které je nutné u systémů jako je OpenFOAM řešit odděleně od vlastního řešiče.

Hlavním cílem této práce je ukázat důležitost porozumění základním transportním rovnicím v oblasti procesní a zpracovatelské techniky a ilustrovat způsoby a metodiku jejich rozšíření o dodatečné modely pomocí tzv. uživatelských funkcí při numerických simulacích v systému ANSYS Fluent.

Kapitola 1 této práce shrnuje základní kroky při modelování a simulacích fyzikálních systémů, počínaje správnou formulací problému a definicí cílů, přes analýzu procesu a volbu nebo návrh vhodného matematického modelu, řešení, až po verifikaci a analýzu získaných výsledků. V kapitole 2 této práce je uveden souhrn rovnic popisujících přenos základních veličin jako je hybnost, teplo nebo hmota, které z matematického hlediska představují v obecném případě parciální diferenciální rovnice druhého řádu. Tyto rovnice je nutné vyjma nejjednodušších případů řešit numericky, a protože se v řadě průmyslových zařízení vyskytuje turbulentní proudění, je nutné spolu s nimi řešit i modely turbulentního proudění. Kapitola 3 této práce se tak věnuje přehledu různých přístupů a modelování turbulence. Vedle přístupů založených na DNS a LES je zde podrobněji popsán přístup založený na zprůměrovaných Navier-Stokesových rovnicích



Obr. 1: Ilustrace využití nástrojů CFD v některých oblastech procesního a konstrukčního inženýrství.

(RANS), který je nejčastěji používán s ohledem na významně nižší výpočetní náročnost.

Kapitola 4 pak popisuje některé numerické metody používané při řešení problémů v oblasti CFD, zejména tedy metodu konečných objemů. Je zde zmíněna i Lattice-Boltzmannova metoda, které se autor této práce kdysi věnoval a která představuje značně odlišný přístup k modelování proudění nebo obecněji transportních procesů popsaných parciálními diferenciálními rovnicemi. V kapitole 4 jsou rovněž popsány základní principy stanovení přesnosti numerického řešení a jeho závislosti na velikosti sítě. Tato oblast bývá při numerických výpočtech často zanedbávána, nicméně její důležitost je stejně významná jako třeba správný odhad chyby naměřených dat.

V kapitole 5 je popsáno rozhraní systému ANSYS Fluent, jehož dobrá znalost je nezbytná v případech, kdy potřebujeme stávající řešené rovnice doplnit nebo rozšířit o další rovnice či modely pomocí tzv. uživatelských funkcí. Toto rozšíření lze provést v celé řadě oblastí, například při definici okrajových podmínek, materiálových vlastností, definici nebo úpravě zdrojových členů v řešených transportních rovnicích, nebo při definici zcela nových transportních rovnic, které jsou řešeny simultánně s rovnicemi popisujícími přenos základních veličin jako je hybnost, teplo či hmota.

Kapitoly 6 a 7 pak popisují příklady dvou problémů z oblasti procesní a zpracovatelské techniky, které autor v uplynulých letech řešil v systému ANSYS Fluent v rámci různých projektů. V prvním případě, popsaném v kapitole 6, se jedná o přestup tepla v impaktním proudu tekutiny s tangenciální složkou, který vykazuje značnou podobnost s přestupem tepla na dně míchané nádoby. Jsou zde prezentovány výsledky simulací pro různé modely turbulence včetně implementované uživatelské funkce pro tzv. turbulentní tepelný tok postihující vliv anizotropie v přenosu tepla. Druhým příkladem (kapitola 7) je pak simulace fotobioreaktoru a vliv proudění (promíchávání) v systému na výtěžnost fotosyntetické reakce. V tomto případě byla vytvořena uživatelská funkce popisující třístavový model fotosyntézy včetně závislosti intenzity dopadajícího osvětlení na prostorové souřadnici. Navržený model spolu s popsanou metodikou lze pak využít při návrhu a konstrukci fotobioreaktoru produkujícího řasové mikroorganismy, které se dají použít například při výrobě biopaliv druhé generace.



# Kapitola 1

## Modelování a simulace fyzikálních systémů

Základem jakékoliv simulace fyzikálních nebo multifyzikálních systémů je matematický model. Existuje celá řada různých modelů různé složitosti, které lze dělit podle různých hledisek. Výběr nebo návrh modelu vychází především z definice cílů, kterých chceme s jeho pomocí dosáhnout. V některých případech, například ve fázi počátečního návrhu, nás nemusí zajímat všechny detaily popisovaného systému a spokojíme se s jednodušším modelem, v jiných případech naopak chceme nebo potřebujeme složitější model.

Při návrhu nebo výběru vhodného matematického modelu, popisujícího nějaký fyzikální systém, je nezbytná dobrá analýza všech důležitých procesů, které se v něm odehrávají, ze které pak vyplyne identifikace základních proměnných a parametrů daného systému. Díky důkladné analýze, podpořené často zkušenostmi a experimenty, můžeme již daný model dále upravit, zjednodušit nebo naopak rozšířit o další modely, které jsou důležité pro popis reálného systému. Dobrá znalost modelů, které jsou používány a řešeny v rámci použitého simulačního softwaru, je samozřejmě nezbytná v případě implementace rozšiřujících modelů a je rovněž důležitá s ohledem na splnění cílů samotné simulace.

Principiálně lze matematické modely používané v numerických simulacích rozdělit podle celé řady kritérií. Jedním z hledisek je rozlišovat mezi modely, které jsou popsány čistě algebraickými, diferenciálními nebo integrálními rovnicemi, případně jejich kombinacemi. S ohledem na fyzikální procesy jsou čistě algebraické rovnice, ať již lineární nebo nelineární, používány nejčastěji v případech, kdy nás zajímá stacionární chování nějakého systému. U řady průmyslových procesů je snahou provozovat je ve více či méně ustáleném stavu s ohledem třeba na efektivitu, optimální provozní parametry atp. Matematické modely popisující stacionární režim lze tak využít k návrhu celé řady základních provozních nebo konstrukčních parametrů.

Pokud potřebujeme v popisu nějakého systému postihnout změny veličin v závislosti na čase, musíme již použít nebo navrhnout model založený na diferenciálních rovnicích. V jednodušším případě se jedná o obyčejné diferenciální rovnice, které jsou schopny postihnout dynamické chování systémů. Lze s nimi tedy popsat časové závislosti různých veličin a stanovit tak například důležité provozní parametry například s ohledem na stabilitu, která může být důležitým faktorem při náhlých změnách okolních podmínek daného systému. Příkladem může být třeba spouštění nebo odstávka nějakého zařízení nebo aparátu. Do kategorie modelů popsaných obyčejnými diferenciálními rovnicemi (někdy jsou označovány jako modely s vázanými parametry), lze

zařadit také modely, kde místo závislosti na časové souřadnici definujeme závislost na jedné prostorové souřadnici.

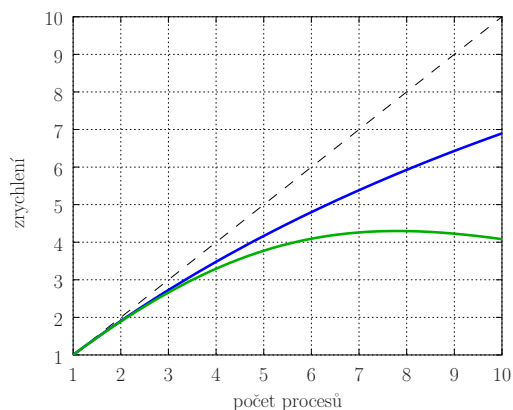
Nejsložitější variantou jsou pak modely popsané pomocí parciálních diferenciálních rovnic, které vystihují závislost na více nezávisle proměnných, jako je čas a prostorové souřadnice. Někdy se tyto systémy označují jako systémy s distribuovanými parametry. Parciální diferenciální rovnice je nutné použít v situacích, kdy nám již nestačí zjednodušené modely typu ideálně míchaného systému, které pomíjejí závislost na prostorové souřadnici. Cílem je tedy lépe postihnout chování reálného systému, kde sledované veličiny nabývají různých hodnot v různých místech a jejich rozložení je důležité při popisu daného systému. V případě procesů z oblasti procesního a zpracovatelského průmyslu spadají do této kategorie modelů tzv. transportní (přenosové) rovnice, které popisují přenos různých veličin (hybnost, teplo, hmota). Z matematického hlediska se jedná v obecném případě o parciální diferenciální rovnice druhého řádu.

Po té, co máme již k dispozici model, který popisuje daný fyzikální systém, můžeme přistoupit k jeho řešení. U složitějších případů z výše zmíněných kategorií modelů je nutné použít numerické metody, protože analytické řešení není možné získat. To je zejména případ systémů popsaných parciálními diferenciálními rovnicemi, kdy je nutné používat softwarové systémy typu ANSYS, COMSOL Multiphysics, ABAQUS a jiné. Základní princip numerických simulací s podobnými nástroji spočívá ve vytvoření sítě bodů či elementů pokrývající geometrii daného systému, náhradě derivací v původních modelových rovnicích diferencemi, a jejich transformaci na soustavu algebraických rovnic. Tato soustava je pak řešena s pomocí počítače a potřebný výpočetní výkon je logicky úměrný počtu elementů a také i počtu a složitosti řešených modelových rovnic. V některých případech nám může počet elementů sítě (nebo navíc i počet časových kroků nestacionárních simulací) výrazně narůstat právě kvůli volbě modelu, ze kterého vyplývá omezení na velikost elementů (nebo časového kroku). Příkladem může být třeba přístup založený na DNS nebo LES při modelování turbulentního proudění. V takových případech je důležité zvážit, jestli se raději nevydat cestou méně výpočetně náročných modelů (RANS), i když možná ne tak dobrých s ohledem na přesný popis fyzikálních procesů. V řadě numerických simulací využívaných při konstrukci nebo návrhu nějakého zařízení chceme totiž často hledat optimální hodnoty různých parametrů, což obnáší provedení celé série numerických simulací, které by v takových situacích bylo časově příliš náročné.

V případě systémů, ve kterých se odehrávají značně rozdílné fyzikální procesy, které se mezi sebou navzájem významně ovlivňují, je často nutné použít i rozdílné přístupy při jejich řešení, různé numerické metody a tím pádem i rozdílné simulační nástroje. Klíčem úspěchu takových multifyzikálních simulací je pak propojení a výměna informací mezi souběžně běžícími simulacemi (někdy mluvíme o tzv. kosimulacích). Nejmodernější systémy jako je ANSYS nebo COMSOL Multiphysics umožňují provádět tzv. multifyzikální simulace, pro které se u problémů z oblasti mechaniky tekutin a tuhých těles někdy používá termín „fluid-structure interaction“.

Posledním krokem při modelování a simulacích fyzikálních nebo multifyzikálních systémů je ověření výsledků. Pokud neodpovídají reálnému chování daného systému, je nutné provést analýzu příčin a následně pak například použít nebo navrhnout jiný model, provést modifikaci stávajícího modelu (např. doplněním o další rozšiřující rovnice), další možností může být použití jiného řešiče, lepší definice omezujících či okrajových podmínek modelu, atp. Špatné nebo nepřesné výsledky mohou mít příčinu i v příliš hrubé síti elementů – součástí analýzy výsledků numerické simulace by mělo být i vyhodnocení závislosti řešení na velikosti sítě. To nám na jedné straně pomůže odhadnout přesnost získaného numerického řešení, a na druhé straně stanovit potřebný počet elementů pro zvolenou přesnost, abychom se vyhnuli zbytečnému

Obr. 1.1: Ukázka zrychlení výpočtu v závislosti na narůstajícím počtu paralelních procesů. Čárkovaná přímka představuje ideální případ lineárního zrychlení, prostřední (modrá) křivka ukazuje vliv částí výpočtu, které nelze zparalelizovat, a spodní (zelená) křivka demonstruje navíc vliv komunikačních nároků na efektivitu paralelního výpočtu.



použití příliš jemné a velké sítě a snížili tak výpočetní náročnost.

S masivním nárůstem výkonu dostupných počítačů v posledních letech zároveň došlo i k nárůstu požadovaného výpočetního výkonu, protože je snahou řešit větší a složitější úlohy, které dříve nebylo možné řešit. Protože taktovací frekvence dnešních procesorů již naráží na fyzikální limity, jde se v současné době spíše cestou souběžného využití více jader, procesorů a počítačů, kdy je větší problém rozdělen na několik menších a ty jsou řešeny paralelně. Klíčovým a limitujícím faktorem efektivit paralelních výpočtů je nutnost výměny informací mezi souběžně běžícími procesy. S ohledem na to může být někdy výhodnější zvolit i jiný typ modelu, který se řeší odlišnými numerickými metodami (např. LBM), které nemají tak velké komunikační nároky a poskytují výrazně lepší škálovatelnost při použití velkého počtu paralelních procesů. Hitem posledních let v numerických simulacích jsou výpočty s pomocí výkonných grafických karet, které v sobě mají obsaženy řádově větší počet jader ve srovnání s běžnými procesory. Nicméně jejich využití je efektivní jen v případě dobře zpáralizovatelných úloh. Navíc techniky jejich programování jsou značně odlišné od standardních procesorů, takže v řadě případů ještě nejsou dostupné v běžně používaných simulačních nástrojích nebo jsou k dispozici jen v některých dílčích oblastech.





# Kapitola 2

## Základní transportní rovnice

U řady procesních aparátů je nutné při návrhu řešit nejen rovnice popisující samotné proudění tekutiny uvnitř zařízení, ale i další rovnice popisující přenos hmoty nebo tepla. Všechny tyto rovnice spadají do stejné kategorie parciálních diferenciálních rovnic parabolického typu a proto jsou i používané metody řešení velmi podobné nebo stejné. Z obecného hlediska je proudění vlastně přenos hybnosti tekutiny, a tak většina CFD nástrojů umí spolu s těmito rovnicemi řešit současně i další rovnice pro přenos tepla a hmoty. Na základě podobnosti mezi těmito rovnicemi lze i výsledky přenášet mezi jednotlivými oblastmi, například výsledky z přenosu tepla lze aplikovat na přenos hmoty a naopak.

### 2.1 Rovnice kontinuity a bilance hybnosti

Chceme-li získat podrobný přehled o proudění v nějakém systému, tj. znát rozložení rychlostí případně dalších veličin jako jsou tlaková či smyková napětí, je nutné vyjít z bilance hybnosti doplněné o bilanci hmoty. Celková bilance hmoty, častěji označovaná jako rovnice kontinuity, aplikovaná na pevný kontrolní objem představuje formálně bilanci přívodu a odvodu hmoty přes hranici (povrch) kontrolního elementu

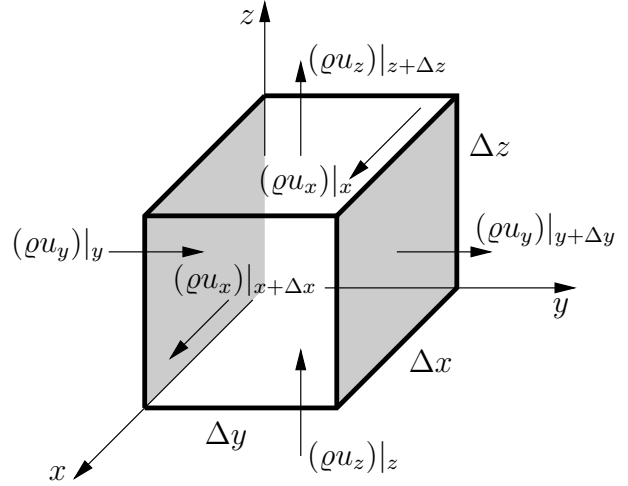
$$\begin{pmatrix} \text{rychlost} \\ \text{akumulace} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{rychlost} \\ \text{přívodu} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{rychlost} \\ \text{odvodu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{výsledná} \\ \text{rychlost} \\ \text{přívodu} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

kde rozdíl mezi přívodem a odvodem představuje *výslednou* rychlost přívodu bilancované veličiny (hmoty) rovnající se její akumulaci v kontrolním objemu. Rovnice kontinuity ve tvaru pro pevný kontrolní objem jako je na obrázku 2.1 lze odvodit [Šesták a Rieger, 1988; Bird et al., 2007] v následujícím tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (2.2)$$

pro materiálový kontrolní objem s tzv. materiálovou derivací lze pak dostat následující

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.3)$$



Obr. 2.1: Pevný kontrolní objem v kartézském souřadném systému pro účely bilance hmoty či hybnosti.

V bilanci obecné fyzikální veličiny  $\phi$  se navíc ještě přívod či odvod rozděluje na konvektivní a molekulární část.

$$\left( \begin{array}{c} \text{rychlost} \\ \text{akumulace} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{výsledná rychlost} \\ \text{konvektivního} \\ \text{přívodu} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{výsledná rychlost} \\ \text{molekulárního} \\ \text{přívodu} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{rychlost} \\ \text{vzniku} \end{array} \right) \quad (2.4)$$

To lze pro pevný kontrolní objem vyjádřit ve tvaru

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \vec{u}) + \nabla \cdot \Phi + \dot{\phi}^{(g)} = 0 \quad (2.5)$$

a substitucí

$$\phi \equiv \rho \vec{u}, \quad \Phi \equiv -\vec{\sigma}, \quad \dot{\phi}^{(g)} \equiv \rho \vec{f}, \quad (2.6)$$

kde tenzor druhého řádu  $\vec{\sigma}$  představuje tenzor celkových napětí, nejčastěji rozdělovaný na dvě části, tlakové a smykové (dynamické) napětí

$$\vec{\sigma} = -p\vec{\delta} + \vec{\tau}, \quad (2.7)$$

Ize dospět k bilanci hybnosti nebo-li Cauchyho rovnici dynamické rovnováhy

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{f} \quad (2.8)$$

## 2.2 Tenzor dynamických napětí a Navier-Stokesova rovnice

Tenzor smykových (dynamických) napětí  $\vec{\tau}$  v Cauchyho rovnici (2.8) představuje vliv vazkých sil v tekutině. Jeho závislost na tenzoru rychlosti deformace (a dalších parametrech) se označuje jako konstitutivní rovnice. Tenzor rychlosti deformace představuje symetrickou část tenzoru gradientu rychlostí

$$\vec{\Delta} = \frac{1}{2} \left[ \nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right] \quad (2.9)$$

U tzv. Newtonských tekutin je závislost tenzoru dynamických napětí na tenzoru rychlosti deformace lineární, která v obecném tvaru může vypadat nějak takto

$$\vec{\tau} = 2\mu \vec{\Delta} + \left( \mu_2 - \frac{2}{3}\mu \right) \vec{\delta} (\nabla \cdot \vec{u}) \quad (2.10)$$

Pokud se zaměříme na nestlačitelné tekutiny s Newtonským chováním, zredukuje se předchozí vztah pouze na

$$\vec{\tau} = 2\mu\vec{\Delta} \quad (2.11)$$

protože pro nestlačitelné tekutiny se rovnice kontinuity (2.2) zjednoduší na

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.12)$$

S využitím dvou předchozích rovnic lze bilanci hybnosti (2.8) převést na Navier-Stokesovu rovnici v konzervativním tvaru (pro pevný kontrolní objem)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\vec{u}) + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\vec{u}) = -\nabla p + \mu\nabla^2\vec{u} + \rho\vec{g} \quad (2.13)$$

V této rovnici bylo použito gravitační zrychlení na místě posledního členu Cauchyho rovnice (2.8), představující pole vnějších objemových sil. Vedle toho je zde pominuta závislost viskozity  $\mu$  na souřadnici, jinak by druhý člen na pravé straně rovnice (2.13) musel být  $\nabla \cdot (\mu\nabla\vec{u})$ . V literatuře lze tuto rovnici najít ve formě pro materiálový (pohyblivý) kontrolní objem s tzv. materiálovou derivací

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \left( \frac{\partial\vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla\vec{u} \right) = -\nabla p + \mu\nabla^2\vec{u} + \rho\vec{g} \quad (2.14)$$

## 2.3 Rovnice přenosu tepla (entalpie)

Pokud se zajímáme o přenos tepla a případné rozložení teplot uvnitř nějakého systému, můžeme v nejobecnějším případě vyjít z rovnice přenosu celkové energie, která bilancuje na jedné straně kinetickou (mechanickou) a vnitřní energii kontrolního elementu, a na druhé straně pak konvektivní či konduktivní přívod energie přes povrch bilancovaného (kontrolního) elementu, práci vazkých či tlakových sil na molekulární úrovni, práci vykonanou vnějšími objemovými silami (např. gravitace), a rovněž vnitřní zdroje energie vznikající třeba při chemických reakcích (reakční teplo).

Velice často si vystačíme se zjednodušenou verzí takové bilance omezenou jen na entalpii a nestlačitelné tekutiny, která je vlastně speciálním případem bilance celkové energie a může vypadat následovně

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = -\nabla \cdot \vec{q} + \vec{\tau} : \vec{\Delta} + \dot{Q}^{(g)} \quad (2.15)$$

Pokud bychom do této rovnice dosadili za hustotu tepelného toku Fourierův vztah

$$\vec{q} = -\lambda\nabla T \quad (2.16)$$

můžeme za předpokladu konstantního součinitele tepelné vodivosti a Newtonských tekutin dostat tzv. Fourier-Kirchhoffovu rovnici

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla T \right) = \lambda\nabla^2 T + 2\mu\vec{\Delta} : \vec{\Delta} + \dot{Q}^{(g)} \quad (2.17)$$

Druhý člen na pravé straně předchozí rovnice představuje disipaci mechanické energie vlivem vazkých sil, a pokud by součinitel tepelné vodivosti nebyl konstantní a závisel na souřadnici,

musel by první člen na pravé straně být  $\nabla \cdot (\lambda \nabla T)$ . Na levé straně je tzv. materiálová derivace, která odpovídá případu kdy je i tepelná kapacita  $c_p$  je konstantní, pokud by tomu tak nebylo, byl by správnější následující vztah

$$\varrho \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (c_p T) + \vec{u} \cdot \nabla (c_p T) \right\} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + 2\mu \vec{\Delta} : \vec{\Delta} + \dot{Q}^{(g)} \quad (2.18)$$

nebo by bylo lepší použít konzervativní tvar této rovnice

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varrho c_p T) + \nabla \cdot (\varrho c_p T \vec{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + 2\mu \vec{\Delta} : \vec{\Delta} + \dot{Q}^{(g)} \quad (2.19)$$

Ten je i vhodnější, pokud chceme tuto rovnici řešit numericky metodou konečných objemů.

## 2.4 Rovnice přenosu hmoty

Pokud máme vícesložkový systém a zajímají nás koncentrace a transport jednotlivých složek, nevystačíme si jen s rovnicí kontinuity (2.2) vyjadřující celkovou bilanci hmoty, ale musíme pro každou ze složek napsat její bilanční rovnici. Například pro složku A ji lze vyjádřit jako [Šesták, 1990]

$$\frac{\partial \varrho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{n}_A - R_A = 0 \quad (2.20)$$

V této rovnici máme kromě rychlosti vzniku či zániku dané složky  $R_A$  i tzv. hustotu hmotnostního toku  $\vec{n}_A$ , kterou lze dále rozdělit na difuzní tok  $\vec{j}_A$  odpovídající přenosu hmoty na molekulární úrovni, a konvektivní část odpovídající přenosu dané složky proudem celé tekutiny

$$\vec{n}_A = \vec{j}_A + \varrho_A \vec{u} \quad (2.21)$$

Difuzní tok lze popsat pomocí prvního Fickova zákona

$$\vec{j}_A = -D_{AB} \nabla \varrho_A \quad (2.22)$$

který vyjadřuje, že koncentrační difuze je přímo úměrná zápornému gradientu koncentrací a difuznímu součiniteli  $D_{AB}$ . Po dosazení do rovnice (2.21) bychom mohli dostat

$$\frac{\partial \varrho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_A \vec{u}) = D_{AB} \nabla^2 \varrho_A + R_A \quad (2.23)$$

což je rovnice, ve které lze shledat nápadnou podobnost s rovnicemi bilancujícími hybnost nebo teplo (entalpii), viz např. Navier-Stokesovu rovnici (2.13) nebo bilanci tepla (2.17). Všechny tyto rovnice patří do kategorie parciálních diferenciálních rovnic druhého řádu, tzv. parabolického typu, vyskytuje se v nich vedle časové derivace bilancované veličiny člen spojený s tokem tekutiny a vyjadřující konvektivní mechanismus transportu této veličiny. Dále je zde pak člen vyjadřující přenos na molekulární úrovni vlivem například rozdílných koncentračních nebo teplotních gradientů. Proto není asi překvapením, že při řešení těchto rovnic lze použít stejné či velmi podobné metody, a výsledky pak lze také na základě podobnosti aplikovat na případy transportu jiné veličiny.

# Kapitola 3

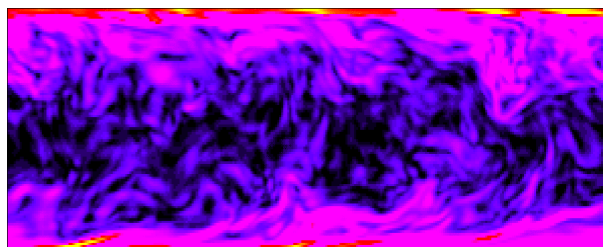
## Turbulence

Při „relativně“ malých rychlostech proudění ať již uvnitř nějakých průmyslových zařízení nebo při obtékání těles lze pro Navier-Stokesovy rovnice (2.13) nebo obecně pro rovnice bilancující hybnost pohybující se tekutiny dostat „hladké“ a stacionární řešení (vyjma některých případů). Toto řešení odpovídá tzv. laminárnímu režimu proudění a pro jednoduché geometrické případy a okrajové podmínky lze dokonce vyjádřit analytické řešení, například zcela popsat rychlostní profil uvnitř potrubí s kruhovým průřezem atp.

Pokud se rychlost proudění bude zvyšovat, hybnost tekutiny v jistém okamžiku začne významně převyšovat smyková napětí, v proudu tekutiny vzniknou fluktuace rychlostí, tlaků, případně jiných veličin, a laminární proudění se stane nestabilním a přejde v tzv. turbulentní proudění. Turbulentní proudění je charakterizováno nepravidelným pohybem tekutiny, při kterém různé veličiny jako je rychlost, tlak, teplota, koncentrace, vykazují náhodné variace (fluktuace) v čase a prostoru a lze jasně rozlišit statisticky zprůměrované hodnoty. Tyto náhodné fluktuace nejsou zcela náhodné z pohledu pravděpodobnosti, ale jsou ovlivněny rychlostí proudění, geometrií systému, látkovými vlastnostmi, okrajovými podmínkami atp. Obecně jsou tyto změny (fluktuace) viditelné ve všech třech prostorových rozměrech (plus v čase), i když v řadě případů jsou výsledky ve dvou rozměrech postačující.

Turbulentní fluktuace v proudu tekutiny mají své důsledky i v transportu jiných veličin a přispívají tak například ke zvýšenému přenosu hmoty či tepla. Kvůli tomu je cílem při návrhu většiny zařízení v procesním či zpracovatelském průmyslu zajistit turbulentní proudění a je důležité umět takové případy řešit. Turbulentní proudění se samozřejmě vyskytuje i v jiných oblastech průmyslu a softwarové systémy CFD představují nezbytný nástroj při návrhu celé řady strojních zařízení.

Další charakteristikou turbulentního proudění je i veliký rozsah měřítek [Wilcox, 2006]. Jsou zde přítomny velké vírové struktury (viz obr. 3.1), jejichž velikost je úměrná charakteristickému rozměru dané geometrie. Tyto vírové struktury se postupně přeměňují na menší a menší víry,



Obr. 3.1: Ukázka turbulentního charakteru proudění.

kterým předávají svoji kinetickou energii, která je pak na nejmenší úrovni disipována na teplo díky molekulární viskozitě tekutiny. Tento proces se někdy označuje jako turbulentní kaskáda. Kolmogorov [1941] ve své teorii izotropní turbulence uvedl, že na té nejmenší úrovni je rychlost disipace úměrná kinetické energii dodávané většími víry za daný čas

$$\varepsilon = -\frac{dk}{dt}, \quad (3.1)$$

a že pohyb na této úrovni závisí také na kinematické viskozitě tekutiny  $\nu$ . Na základě rozměrové analýzy odvodil tzv. Kolmogorovo měřítko

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}, \quad (3.2)$$

které definuje velikost nejmenších struktur v turbulentním proudu tekutiny. Wilcox [2006] uvádí, že u auta pohybujícího se rychlostí 105 km/h je velikost tohoto měřítka poblíž řidičova okna asi  $4.5 \times 10^{-3}$  mm, což je zhruba 72-krát více než je volná dráha molekul ve vzduchu o teplotě 18°C. Rozměrová analýza i experimentální výsledky pro plně vyvinuté turbulentní proudění potvrzují, že vztah mezi kinetickou energií turbulence, její disipací a charakteristickým rozměrem  $L$  největších vírů je definován jako [Taylor, 1935; Wilcox, 2006]

$$\varepsilon \sim \frac{k^{3/2}}{L} \quad (3.3)$$

S využitím definice kinetické energie turbulence (v tenzorovém zápisu se sčítacím indexem  $i$ )

$$k = \frac{1}{2}u_i'^2 \quad (3.4)$$

lze napsat, že

$$\varepsilon \sim \frac{u_i'^3}{L}, \quad (3.5)$$

a dále lze dojít k vyjádření poměru největších a nejmenších měřítek v turbulentním proudění

$$\frac{L}{\eta} = \frac{L\varepsilon^{1/4}}{\nu^{3/4}} = \left(\frac{Lu_i'}{\nu}\right)^{3/4} = \text{Re}_t^{3/4}, \quad (3.6)$$

kde  $\text{Re}_t$  představuje tzv. turbulentní Reynoldsovo číslo. Pokud bychom chtěli při numerickém řešení Navier-Stokesových rovnic (2.13) postihnout všechna, i ta nejmenší měřítka turbulence definovaná Kolmogorovým měřítkem (3.2), musel by počet elementů sítě v jednom rozměru odpovídat právě výše uvedenému poměru (3.6). Pro trojrozměrný problém tedy dostaneme, že počet elementů sítě by měl být úměrný [Pope, 2000]

$$N^3 \sim \text{Re}_t^{9/4} \quad (3.7)$$

V takovém případě bychom pro (numerické) řešení Navier-Stokesových rovnic (2.13) nepotřebovali žádný model turbulence, tj. žádné dodatečné rovnice. Tento přístup se označuje jako DNS (Direct Numerical Simulation), nicméně jeho výpočetní náročnost stále ještě přesahuje výkon současných počítačů, pokud se tedy budeme zajímat o plně vyvinuté turbulentní proudění. A nejde zde jenom o potřebný počet elementů výpočetní sítě, ale i o velikost časového kroku, který musí odpovídat časovému měřítku turbulentních fluktuací. S inženýrského hlediska nás pak spíše zajímají průměrné hodnoty za nějaký časový úsek, tudíž s malým časovým krokem je odpovídající počet časových kroků příliš veliký.

### 3.1 Large Eddy Simulation (LES)

Výpočetní náročnost přímé numerické simulace (DNS) se dá částečně zmenšit zavedením poměrně jednoduchého modelu isotropní turbulence na úrovni menších měřítek v turbulentním proudu tekutiny. Na této úrovni se dá předpokládat, že vírové struktury jsou víceméně isotropní, a nesymetrie či anisotropie je přítomna pouze ve větších vírových strukturách. Tyto velké struktury jsou metodou LES řešeny přímo, a na menších měřítkách, které jsou „odfiltrovány“ (přirozené odfiltrování může být dané velikostí elementů výpočetní sítě), je aplikován tzv. subgrid model (SGS). Rozdělíme-li vektor rychlosti (a jiné veličiny jako třeba tlak) na dvě části, z nichž jedna představuje hodnotu nad hranicí aplikovaného filtru ( $\bar{u}_i$ ) a druhá pak hodnotu na menším měřítku  $u'_i$  pod hranicí tohoto filtru

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i, \quad p = \bar{p} + p', \quad (3.8)$$

potom po dosazení do Navier-Stokesových rovnic (pro zjednodušení je zde uvažován případ nestlačitelné tekutiny), můžeme dostat

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.9)$$

Poslední člen na pravé straně předchozí rovnice  $\tilde{\tau}_{ij}$  zde představuje tzv. „subgrid-scale“ napětí, které je definováno jako

$$\tilde{\tau}_{ij} = \rho (\bar{u}_i \bar{u}_j - \overline{u_i u_j}) \quad (3.10)$$

Toto napětí je nejčastěji modelováno na základě tzv. Boussinesqovy hypotézy [Hinze, 1975]

$$\tilde{\tau}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{\tau}_{kk} \delta_{ij} = -2\mu_t S_{ij} \quad (3.11)$$

kde  $S_{ij}$  představuje tenzor smykových napětí nad hranicí filtru. Jeho definice je stejná jako u klasického tenzoru rychlosti deformace

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right] \quad (3.12)$$

Turbulentní (eddy) viskozitu lze pak popsat pomocí relativně jednoduchého modelu, například Smagorinsky [1963]

$$\mu_t = \rho (c_s \Delta x)^2 \sqrt{2S_{ij}S_{ji}} \quad (3.13)$$

kde  $c_s$  je empirická konstanta. Po nějakých menších úpravách lze rovnici (3.9) převést na

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right] \quad (3.14)$$

což je v zásadě stejné jako klasická Navier-Stokesova rovnice s tím rozdílem, že k molekulární viskozitě zde přičítáme ještě turbulentní (eddy) viskozitu, spočtenou na základě nějakého subgrid-scale modelu. Člen  $\tilde{\tau}_{kk} \delta_{ij} / 3$  je zde zahrnut do tlaku  $\bar{p}$ .

Modelování LES je méně výpočetně náročné ve srovnání s DNS přístupem, nicméně stále se jedná o nestacionární metodu a pokud chceme získat nějaké časově zprůměrované hodnoty různých veličin, musíme provést hodně časových kroků. To nás pak samozřejmě limituje v případech, kdy provádíme nějaké optimalizace a celý výpočet je nutné provádět opakovaně pro různé hodnoty nějakého parametru.

## 3.2 Zprůměrované Navier-Stokesovy rovnice

V současnosti asi nepoužívanější modely turbulence jsou modely označované zkratkou RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), přestože nejsou zcela univerzální a vhodné pro veškeré typy úloh. Důvodem jsou výrazně menší výpočetní nároky než u modelů LES nebo dokonce DNS. Základem je podobná rovnice jako (3.8) u přístupu LES, ale s jiným významem jednotlivých veličin.

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (3.15)$$

Okamžitá hodnota rychlosti  $u_i$  je zde rozdělena na průměrnou hodnotu  $\bar{u}_i$  vzhledem k nějakému časovému intervalu (obecně co nejdelšímu, v limitě rovnému nekonečnu)

$$\bar{u}_i(x_i) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} u_i(x_i, t) dt, \quad (3.16)$$

a flukuační složku  $u'_i$ , která je zde přítomna díky turbulentnímu proudění. Obdobný rozklad lze aplikovat i na jiné veličiny jako je tlak, teplota atp. Dosadíme-li rovnici (3.15) do Navier-Stokesových rovnic, můžeme po nějakých úpravách dostat podobnou rovnici jako je rovnice (3.9)

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.17)$$

Poslední člen na pravé straně předchozí rovnice  $\bar{\tau}_{ij}$  zde představuje tzv. tenzor Reynoldsových napětí, který je definován jako

$$\bar{\tau}_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} \quad (3.18)$$

Tento člen musí být popsán nějakým modelem turbulence, aby byl systém pohybových (Navier-Stokesových) rovnic tzv. uzavřený a řešitelný. Nejčastěji používaný model je založený na Boussinesqově aproximaci [Hinze, 1975]

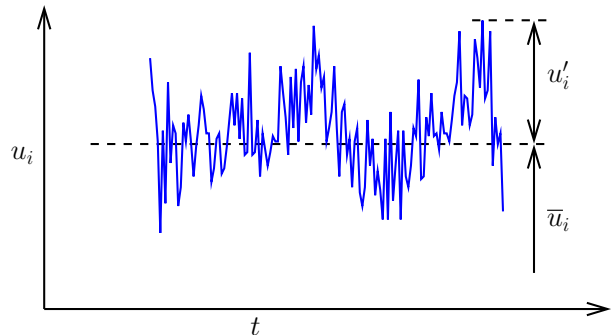
$$\bar{\tau}_{ij} = 2\mu_t S_{ij} - \frac{2}{3}\rho k \delta_{ij} \quad (3.19)$$

kde  $\mu_t$  je tzv. turbulentní viskozita, která představuje čistě jen skalární hodnotu a může být popsána následující rovnicí

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.20)$$

V této rovnici je  $C_\mu$  empirická konstanta a  $k$  v těchto (RANS) modelech představuje průměrnou hodnotu kinetické energie turbulence, viz rovnice (3.4), tj.

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u'^2_1} + \overline{u'^2_2} + \overline{u'^2_3}) \quad (3.21)$$



Obr. 3.2: Ukázka turbulentních flukuačních okamžitých hodnot rychlosti a jejich dekompozice na časově průměrnou a flukuační složku.



Veličina  $\varepsilon$  v rovnici (3.20) představuje disipaci kinetické energie turbulence. Pro stanovení hodnot kinetické energie turbulence  $k$  a disipace  $\varepsilon$  jsou pak používány další, ať již algebraické či transportní (parciální diferenciální) rovnice. Tensor  $S_{ij}$  je definován stejně jako v rovnici (3.12), s tím rozdílem, že složky rychlosti  $\bar{u}_i$  zde představují průměrné hodnoty vzhledem k časové souřadnici, zatímco u modelu LES mají význam hodnot nad hranicí filtru vzhledem k prostorové souřadnici.

### 3.3 RANS modely turbulence

Jak již bylo zmíněno, s přístupem založeným na časově zprůměrovaných Navier-Stokesových rovnicích je potřeba nějaký model pro tenzor Reynoldsových napětí (3.18). Bohužel zatím neexistuje žádný zcela univerzální model, s postupem času a nárůstem dostupného výpočetního výkonu byla navržena celá řada různě složitých modelů, z nichž některé jsou vhodné spíše pro specifické účely, jiné jsou více univerzální (i když ne zcela). Jednou ze dvou základních kategorií takových modelů jsou ty, které jsou založeny na Boussinesqově aproximaci a používají v definici modelu lineární závislost mezi tenzorem Reynoldsových napětí a tenzorem smykových napětí (rychlosti deformace). V této závislosti vystupuje skalární turbulentní viskozita a v mnohých případech tak nelze postihnout například neizotropie v transportu veličin jako je hybnost, teplo, atp. Druhou kategorií jsou modely založené na transportních rovnicích pro Reynoldsova napětí. Tento tenzor má obecně 6 nezávislých složek

$$\bar{\tau}_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = \begin{pmatrix} -\rho \overline{u'^2_x} & -\rho \overline{u'_x u'_y} & -\rho \overline{u'_x u'_z} \\ -\rho \overline{u'_y u'_x} & -\rho \overline{u'^2_y} & -\rho \overline{u'_y u'_z} \\ -\rho \overline{u'_z u'_x} & -\rho \overline{u'_z u'_y} & -\rho \overline{u'^2_z} \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

tudíž je nutné spolu s Navier-Stokesovými rovnicemi řešit minimálně dalších 6 transportních rovnic. To výrazně zvyšuje nároky na výpočetní výkon, ale na druhou stranu umožňuje postihnout existující neizotropie při turbulentním proudění, projevující se například ve vzniku sekundárních vírů při proudění v kanálech s pravoúhlým průřezem nebo v rozdílné velikosti přenosu tepla či hmoty v různých směrech. V následujícím textu bude stručně shrnuta základní charakteristika různých modelů turbulence spadajících do kategorie RANS:

- modely založené na turbulentní viskozitě (Boussinesqova aproximace)
  - algebraické modely
  - jednorovnicové modely
  - dvourovnicové modely
  - vícerovnicové a přechodové modely
- modely založené na transportu Reynoldsových napětí (RSM)

#### 3.3.1 Modely založené na turbulentní viskozitě

Tyto modely jsou pravděpodobně nejpoužívanější z kategorie modelů RANS, i když nejsou schopny korektně postihnout situace, kdy je v turbulentním proudění přítomna významným

způsobem anisotropie, tzn. významně rozdílné jednotlivé složky tenzoru Reynoldsových napětí. Modely založené na turbulentní viskozitě definují závislost mezi tenzorem Reynoldsových napětí a tenzorem smykových napětí podle rovnice (3.19), která může být rozepsána následovně

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu_t \left[ \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right] - \frac{2}{3} \mu_t \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (3.23)$$

V této rovnici se vedle turbulentní viskozity  $\mu_t$  vyskytuje i kinetická energie turbulence  $k$ , která je u RANS modelů definována jak zprůměrovaná hodnota flukтуаčních složek rychlosti, viz rov. (3.21).

### Algebraické modely

Nejjednodušší typ modelu pro výpočet turbulentní viskozity  $\mu_t$  vychází z rovnice založené na tzv. Prandtlově směřovací délce  $l_m$

$$\mu_t = \rho l_m^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right| \quad (3.24)$$

Směřovací délka  $l_m$  je pak popsána nějakou algebraickou rovnicí

$$l_m = f(u, \delta), \quad (3.25)$$

kde  $y$  je vzdálenost od stěny a  $\delta$  tloušťka mezní vrstvy. Tato závislost však je více či méně použitelná jen pro určité typy úloh a nelze ji jednoduše aplikovat na jiné případy bez toho, aniž by byly doladěny parametry tohoto vztahu.

### Jednorovnicové modely

Jednorovnicové modely využívají pouze jednu transportní rovnici pro kinetickou energii turbulence  $k$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k \bar{u}_j) = \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (3.26)$$

V této rovnici první člen na pravé straně s tenzorem Reynoldsových napětí  $\bar{\tau}_{ij}$  (viz rov. 3.22 nebo 3.23) představuje produkci (vznik) kinetické energie turbulence kvůli turbulentním fluktuacím. Dále se zde vyskytuje disipace kinetické energie turbulence  $\varepsilon$  (druhý člen na pravé straně), definovaná jako

$$\varepsilon = \nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}} \quad (3.27)$$

Jednorovnicové modely patří mezi tzv. neuzavřené modely, kdy je nutné celý systém rovnic doplnit dalšími vztahy a předpoklady, aby byl řešitelný. V tomto případě je nutné vyjádřit  $\varepsilon$ , nejjednodušší přístupy jsou založené na nějakém (délkovém) turbulentním měřítku  $l$

$$\varepsilon \sim \frac{k^{3/2}}{l}, \quad \varepsilon = C_D \frac{k^{3/2}}{l} \quad (3.28)$$

Turbulentní viskozita je pak popsána jako

$$\mu_t = k^{1/2} l = \rho C_D \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.29)$$

V takovémto modelu je pak nutné doplnit hodnoty parametrů  $C_D$ ,  $\sigma_k$  a zejména měřítko  $l$ , aby jej bylo možné řešit. Jednorovnicové modely v současnosti nejsou příliš často používány, vyjma některých speciálních případů, pro které jsou již třeba na základě experimentů dobře známy hodnoty potřebných parametrů. V programu ANSYS Fluent je k dispozici jeden reprezentant takovýchto modelů, Spalart a Allmaras [1992], který je však založen na transportní rovnici pro turbulentní viskozitu, nikoliv kinetickou energii turbulence.

## Dvourovnicové modely

Dvourovnicové modely patří do kategorie tzv. uzavřených modelů, tzn. představují již úplný systém transportních rovnic, který lze řešit (za předpokladu definovaných okrajových případně počátečních podmínek).

V literatuře lze najít zejména modely s transportními rovnicemi pro kinetickou energii turbulence  $k$  a disipaci energie turbulence  $\varepsilon$ , tzv.  $k - \varepsilon$  modely, nebo je místo disipace kinetické energie turbulence  $\varepsilon$  používána specifická disipace

$$\omega \sim \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.30)$$

Pak se jedná o kategorii tzv.  $k - \omega$  modelů. Přestože modely z kategorie  $k - \varepsilon$  byly ve výpočtech CFD masivně používány nejdříve, první dvourovnicový model byl právě  $k - \omega$  navržený Kolmogorovem [1942]. Tato první varianta byla postupem času a řadou dalších autorů vylepšena do podoby, kde rovnice pro  $\omega$  může vypadat následovně [ANSYS Fluent, 2013a]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\omega\bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega - Y_\omega \quad (3.31)$$

Člen  $G_\omega$  zde představuje vznik (produkci) transportované veličiny  $\omega$  a  $Y_\omega$  její disipaci

$$G_\omega = \alpha \frac{\omega}{k} G_k = \alpha \frac{\omega}{k} \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}, \quad Y_\omega = \rho \beta f_\beta \omega^2 \quad (3.32)$$

Transportní rovnice pro kinetickou energii turbulence  $k$  dvourovnicových modelů je v zásadě stejná jako u rovnice (3.26), tj.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - Y_k \quad (3.33)$$

kde je analogický člen pro produkci turbulentní kinetické energie  $G_k$ , který je modelován na základě Boussinesqovy aproximace (3.19), (3.23),

$$G_k = \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \mu_t S^2, \quad S = \sqrt{2S_{ij}S_{ji}} \quad (3.34)$$

Dále je zde člen  $Y_k$  představující její disipaci, který je pro standardní model  $k - \omega$  definován následovně [ANSYS Fluent, 2013a]

$$Y_k = \rho \beta^* f_{\beta^*} k \omega, \quad (3.35)$$

a pro standardní  $k - \varepsilon$  model takto

$$Y_k = \rho \varepsilon \quad (3.36)$$

Transportní rovnice pro disipaci  $\varepsilon$  u modelů  $k - \varepsilon$  je podobná rovnici pro  $\omega$  (3.31),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\varepsilon\bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + G_\varepsilon - Y_\varepsilon \quad (3.37)$$

s následujícími definicemi členů produkce a disipace transportované veličiny  $\varepsilon$

$$G_\varepsilon = C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} G_k, \quad Y_\varepsilon = C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.38)$$

Turbulentní viskozita je ve výše uvedených modelech definována vztahem (3.20)

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon},$$

s tím, že pro  $k - \omega$  modely je relace mezi  $\varepsilon$  a  $\omega$  definována podle (3.30)

$$\varepsilon = \beta k \omega, \quad \beta = 0.09 \quad (3.39)$$

Koeficient  $\beta$  má nejčastěji stejnou hodnotu jako  $C_\mu$  (pro standardní varianty obou modelů), tudíž

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (3.40)$$

V programu ANSYS Fluent je v této relaci použit ještě jeden koeficient

$$\mu_t = \alpha^* \rho \frac{k}{\omega} \quad (3.41)$$

kde  $\alpha^*$  představuje korekci pro případy nízkých Reynoldsových čísel (low-Reynolds-number correction). Jeho hodnota je pro vysoké hodnoty Reynoldsových čísel rovna 1 (podrobněji viz ANSYS Fluent [2013a], nicméně je doporučeno místo této korekce používat raději přechodové modely).

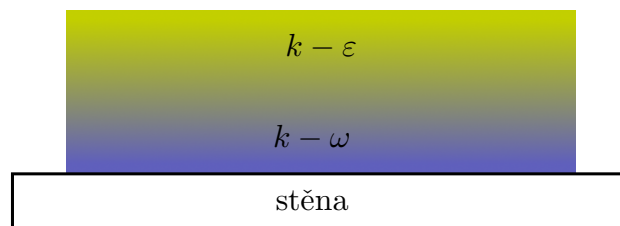
## Variety dvourovnicových modelů

Standardní varianty modelů  $k - \varepsilon$  či  $k - \omega$  trpí některými nedostatky, proto jsou v řadě případů vhodnější jejich upravené verze, které jejich vlastnosti vylepšují. V programu ANSYS Fluent jsou k dispozici následující varianty

- RNG  $k - \varepsilon$
- Realizable  $k - \varepsilon$
- SST  $k - \omega$

Z rodiny modelů  $k - \varepsilon$  je nejvíce doporučovaná varianta „Realizable“, která vylepšuje jeho numerické výsledky v řadě případů jako jsou silně zakřivené geometrie, vířivé a rotující proudění. Vylepšení je dosaženo například zavedením podmínky kladných čtverců normálových napětí tenzoru Reynoldsových napětí, použitím jiné formulace turbulentní viskozity s proměnnou konstantou  $C_\mu$ , a další. Při použití s rotujícími rámci (MRF) tato varianta  $k - \varepsilon$  modelu zahrnuje rovněž efekt rotace na hodnotu turbulentní viskozity (tento efekt není v programu ANSYS Fluent standardně zapnutý, je nutné jej aktivovat příkazem v textovém rozhraní /define/models/viscous/turbulence-expert/rke-cmu-rotation-term).

Obr. 3.3: Ilustrace modelu SST  $k - \omega$  spojujícího dohromady model  $k - \omega$  u stěny a transformovaný model  $k - \varepsilon$  dále od stěny.



ANSYS Fluent dále poskytuje SST (Shear Stress Transport) variantu modelu  $k - \omega$  [Menter, 1994], která používá standardní  $k - \omega$  model v blízkosti stěny a dále od stěny pak model  $k - \varepsilon$  (převedený do tvaru pro specifickou disipaci  $\omega$ ). Oba tyto modely jsou spojeny dohromady pomocí přechodové funkce, která zajistí hladký přechod mezi oběma modely, tj. v blízkosti u stěny je aktivován model  $k - \omega$ , a dále od stěny pak upravený model  $k - \varepsilon$ . Spolu s dalšími modifikacemi, které zde nebudou podrobně rozebírány (viz originální reference nebo manuál programu ANSYS Fluent), dává tento model přesnější a robustnější výsledky než původní (standardní) model  $k - \omega$  [Wilcox, 2006].

### Přechodové (transition) modely

V programu ANSYS Fluent jsou k dispozici také tzv. „transition“ modely založené na turbulentní viskozitě, které s pomocí dalších transportních rovnic a vztahů dokážou lépe postihnout případy, kde dochází k přechodu mezi laminárním a turbulentním prouděním. Tuto vlastnost předchozí modely nejsou schopny správně postihnout, i navzdory různým korekcím jako třeba „low-Re“ u modelu  $k - \omega$ . Jedná se o modely:

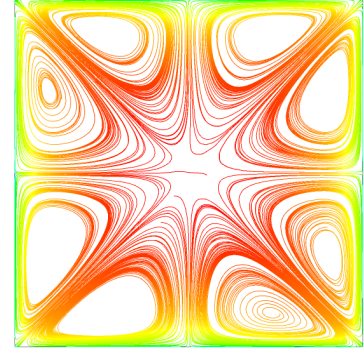
- $k - kl - \omega$  model – třírovnice model pro  $k$ ,  $\omega$  a laminární kinetickou energii  $k_L$ .
- Transition SST model ( $\gamma - Re_\theta$ ) – čtyřrovnice model, vedle  $k$  a  $\omega$  jsou zde navíc rovnice pro intermitenci  $\gamma$  a „momentum-thickness“ Reynoldsovo číslo  $Re_\theta$ , představující kritérium přechodu.
- Intermittency Transition model – třírovnice model pro  $k$ ,  $\omega$  a intermitenci  $\gamma$ .

Veličina  $\gamma$  označovaná jako intermitence je ve výše uvedených modelech používána pro aktivaci členu s produkcí kinetické energie za bodem představujícím přechod z laminární do turbulentní oblasti [Menter et al., 2006, 2015]. Čtyřrovnice model  $\gamma - Re_\theta$  implementovaný v programu ANSYS Fluent není tzv. „Galilean invariant“, v případech, kdy je tato vlastnost důležitá (např. s pohybujícími se stěnami či rámcem vzhledem k souřadnicovému systému, jako např. MRF), je doporučován třírovnice Intermittency Transition model, který tuto podmínku splňuje.

### 3.3.2 Modely založené na transportu Reynoldsových napětí (RSM)

Modely založené na skalární turbulentní viskozitě a Boussinesqově aproximaci nejsou schopny postihnout některé typy případů, kde je důležitá anisotropie v tenzoru Reynoldsových napětí. Příkladem může být třeba proudění v kanálech s pravoúhlým průřezem, kde v turbulentním režimu vznikají sekundární víry, viz obrázek 3.4.

Základem modelů RSM jsou transportní rovnice pro složky tenzoru Reynoldsových napětí  $\bar{\tau}_{ij}$ , viz rov. (3.22), které mohou být (zjednodušeně, bez vlivu přirozené konvekce a rotace)



Obr. 3.4: Ukázka proudnic v příčném průřezu pravoúhlého kanálu, kde v turbulentním režimu vznikají sekundární víry ( $Re = 17000$ ).

formulovány následovně [Wilcox, 2006]

$$\frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k \bar{\tau}_{ij}) = -P_{ij} + \varepsilon_{ij} - \Pi_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \mu \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_k} + D_{ijk} \right] \quad (3.42)$$

kde

$$P_{ij} = \bar{\tau}_{ik} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} + \bar{\tau}_{jk} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \quad (3.43)$$

$$\varepsilon_{ij} = 2\mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}} \quad (3.44)$$

$$\Pi_{ij} = \overline{p' \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} \quad (3.45)$$

$$D_{ijk} = \overline{\rho u'_i u'_j u'_k} + \overline{p' u'_i} \delta_{jk} + \overline{p' u'_j} \delta_{ik} \quad (3.46)$$

Protože tenzor Reynoldsových napětí má v obecném, trojrozměrném případě celkem 6 nezávislých složek, jedná se o 6 dalších transportních rovnic, které je nutno řešit společně s Navier-Stokesovými rovnicemi pro zprůměrované hodnoty rychlostí. Členy  $\varepsilon_{ij}$  (disipace),  $\Pi_{ij}$  a  $D_{ijk}$  (turbulentní difuze) je nutno dále popsat, aby byl systém rovnic (3.42) tzv. uzavřený a řešitelný. Pokud bychom provedli kontrakci rovnice (3.42), mohli bychom dostat transportní rovnici pro kinetickou energii turbulence používanou v dvourovnícových modelech s turbulentní viskozitou, neboť

$$\text{tr } \bar{\tau}_{ij} = \bar{\tau}_{ii} = -\overline{\rho u'_i u'_i} = -2\rho k, \quad \rho k = \frac{1}{2} \bar{\tau}_{ii} \quad (3.47)$$

V této rovnici se pak objeví člen pro turbulentní disipaci  $\varepsilon$  (3.27)

$$\varepsilon = \nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}}$$

Na základě předpokladu, že na nejmenší úrovni jsou turbulentní víry izotropní [Kolmogorov, 1941], je pak ve většině RSM modelů použita skalární hodnota  $\varepsilon$  pro popis členu  $\varepsilon_{ij}$ , představujícího disipaci transportované veličiny, tj. tenzoru Reynoldsových napětí

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \rho \varepsilon \delta_{ij} \quad (3.48)$$

Pro stanovení izotropní disipace turbulence  $\varepsilon$  se pak používá další transportní rovnice, podobná jako u standardních dvourovnícových modelů. Wilcox [2006] uvádí modifikovaný vztah pro  $\varepsilon_{ij}$  s anizotropním členem, nicméně ANSYS Fluent používá jen izotropní formulaci (spolu s modifikací zahrnující vliv stlačitelné tekutiny). S rovnicí pro  $\varepsilon$  se tak celkový počet transportních

rovnice rozroste na sedm (ve trojrozměrném případě), což samozřejmě klade větší nároky na výpočetní výkon než dvourovnícové modely turbulence jako  $k - \varepsilon$  nebo  $k - \omega$ . Proto vznikly i tzv. algebraické modely (ARSM), které pro výpočet jednotlivých složek tenzoru Reynoldsových napětí používají algebraické rovnice a mají logicky menší výpočetní nároky než plný RSM model s celkem sedmi transportními rovnicemi a ještě dalšími vztahy pro popis členů  $\Pi_{ij}$  a  $D_{ijk}$  v rovnici pro Reynoldsova napětí – podrobněji viz např. Wilcox [2006]; ANSYS Fluent [2013a].

### 3.3.3 Stěnové funkce

Při turbulentním proudění existují u stěny značně veliké rychlostní (i jiné) gradienty. Pokud řešíme zprůměrované Navier-Stokesovy rovnice (3.17) na relativně hrubé síti, nelze tyto gradienty bez nějakých dalších opatření korektně postihnout a výsledky pak budou zkreslené či zcela špatné. Proto se v případech, kdy nemáme dostatečně jemnou síť u stěn, používají k aproximaci rychlostních profilů tzv. stěnové funkce.

Jedním z používaných předpokladů při definici stěnových funkcí je, že hodně blízko u stěny (v tzv. laminární podvrstvě) je smykové (dynamické) napětí prakticky konstantní a rovné hodnotě smykového napětí na stěně  $\tau_w$ . V jednorozměrné případě je jeho hodnota úměrná gradientu rychlosti podle souřadnice  $y$  (vzdálenost od stěny) a molekulární viskozitě (blízko stěny jsou veškeré turbulentní fluktuace utlumeny a tekutina proudí laminárně)

$$\tau_w = \text{konst} = \mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial y}, \quad \mu = \nu \rho \quad (3.49)$$

Integrací tohoto vztahu lze dojít k lineární závislosti rychlosti na souřadnici

$$\bar{u} = \frac{\tau_w}{\rho} \frac{y}{\nu}, \quad (3.50)$$

která je dále vyjadřována s pomocí tzv. smykové rychlosti  $u_\tau$

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (3.51)$$

v bezrozměrné závislosti

$$\frac{\bar{u}}{u_\tau} = \frac{u_\tau y}{\nu}, \quad \text{nebo-li} \quad u^+ = y^+ \quad (3.52)$$

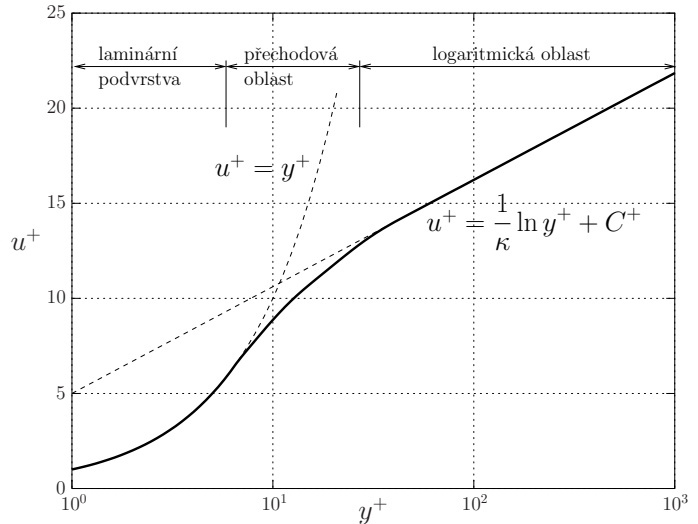
kde  $u^+$  a  $y^+$  představují bezrozměrnou rychlost a vzdálenost od stěny.

Dále od stěny začnou postupně převažovat turbulentní fluktuace nad molekulárními vazkými silami, takže by šlo obdobně jako v rovnici (3.49) napsat podobný vztah pro tenzor Reynoldsových napětí, kde bychom za turbulentní viskozitu mohli dosadit vztah založený na Prandtlově směšovací délce (3.24)

$$\bar{\tau} = \mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = \rho l_m^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \quad (3.53)$$

Když bychom opět uvažovali, že hodnota smykového napětí  $\bar{\tau}$  není příliš odlišná od napětí na stěně  $\tau_w$ , a že Prandtlova směšovací délka je přímo úměrná vzdálenosti od stěny  $y$  [Šesták a Rieger, 1988], tak

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = \frac{1}{\kappa y} \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (3.54)$$



Obr. 3.5: Závislosti bezrozměrné smykové rychlosti u stěny  $u^+$  na vzdálenosti od stěny  $y^+$  používané pro aproximaci rychlostních profilů v turbulentním proudění.

Po integraci v rozmezí  $y = (y_0, y)$  pro vzdálenost od stěny a  $(0, \bar{u})$  pro rychlost ( $y_0$  formálně odpovídá vzdálenosti, kde je rychlost nulová) lze dostat vztah

$$\frac{\bar{u}}{u_\tau} = \frac{1}{\kappa} \ln \frac{y}{y_0} \quad (3.55)$$

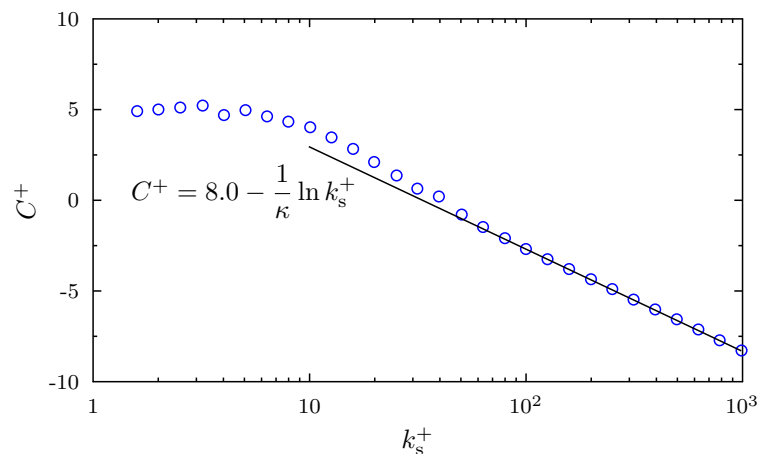
Ten lze dále s použitím bezrozměrných veličin  $y^+$  a  $u^+$  vyjádřit například ve tvaru

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C^+ \quad (3.56)$$

kde tzv. Kármánova konstanta  $\kappa$  a konstanta  $C^+$  jsou parametry, které lze vyhodnotit na základě experimentálních dat. Nejčastěji uváděné hodnoty pro hydraulicky hladké stěny jsou [Schlichting a Gersten, 2000]

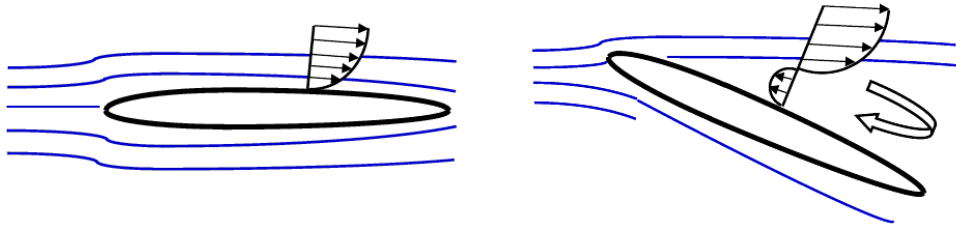
$$\kappa = 0.41, \quad C^+ = 5.0 \quad (3.57)$$

Konstanta  $C^+$  obecně závisí na drsnosti stěny, se zvětšující se drsností její hodnota klesá. V literatuře [Wilcox, 2006] lze najít vztahy, které drsnost ve výše uvedeném vztahu (3.56) zohledňují, viz obr. 3.6.



Obr. 3.6: Závislost parametru  $C^+$  na drsnosti stěny  $k_s^+ = u_\tau k_s / \nu$  [Wilcox, 2006].





Obr. 3.7: Nalevo – lze používat stěnové funkce, napravo - není vhodné používat stěnové funkce [ANSYS Fluent, 2014].

Stěnové funkce jsou založeny na předpokladu, že tok tekutiny je se stěnou víceméně rovnoběžný. Pokud tomu tak není a dochází třeba k odtržení a otočení proudu tekutiny, je dobré mít dostatečně jemnou síť u stěny a vyhnout se tak použití stěnových funkcí, viz obrázek 3.7 demonstrující nevhodnost použití stěnových funkcí (napravo). Obecně je doporučováno, aby v takovém případě bezrozměrná velikost prvního elementu u stěny odpovídala hodnotě  $y^+ \approx 1$ , tudíž z definice  $y^+ = u_\tau y / \nu$  lze vyjádřit skutečnou velikost prvního elementu jako

$$y_1 = \frac{y^+ \nu}{u_\tau} \quad (3.58)$$

Zde je nutné odhadnout hodnotu smykové rychlosti  $u_\tau$ , které je definováno s pomocí smykového napětí na stěně  $\tau_w$  (3.51). Vyjdeme-li ze vztahu pro tlakovou ztrátu v trubce

$$\Delta p = \lambda_f L \frac{\rho}{D} \frac{u^2}{2}, \quad (3.59)$$

kteřá je v rovnováze se smykovými silami na stěně

$$\Delta p = \frac{F_w}{S_w} = \frac{\tau_w \pi D L}{\pi D^2 / 4}, \quad (3.60)$$

lze pak kombinací předchozích rovnic dostat vztah pro  $\tau_w$

$$\tau_w = \frac{\lambda_f}{4} \rho \frac{u^2}{2} \quad (3.61)$$

Nebo s použitím tzv. Fanningova třecího součinitele  $C_f = \lambda_f / 4$

$$\tau_w = \frac{1}{2} C_f \rho u^2 \quad (3.62)$$

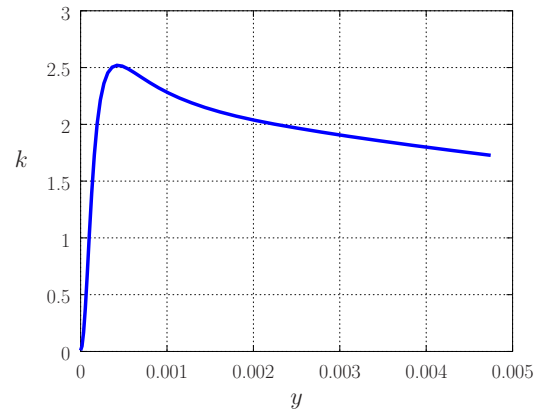
Součinitel třecích ztrát lze odhadnout s pomocí nějaké korelace. Například pro proudění uvnitř trubky či obecně nějakých zařízení lze využít Blasiovův vztah

$$\lambda_f = \frac{0.3164}{\text{Re}^{0.25}}, \quad C_f = 0.079 \text{Re}^{-0.25} \quad (3.63)$$

Při obtékání těles lze vyjít z některé z možných korelací pro stanovení třecího součinitele při proudění podél rovinné desky [Šesták a Rieger, 1988]

$$C_f = 0.058 \text{Re}_x^{-0.2}, \quad C_f = 0.072 \text{Re}^{-0.2} \quad (3.64)$$

Při tvorbě dostatečně jemných elementů u stěny nejde jenom o to, aby první element splňoval podmínku  $y^+ \approx 1$ , ale aby byla těmito elementy pokryta celá mezní vrstva jinak hrozí, že jejich



Obr. 3.8: Maximum kinetické energie turbulence v závislosti na vzdálenosti od stěny.

nedostatečný počet ovlivní (omezí) růst mezní vrstvy. V manuálu programu ANSYS Fluent se doporučuje ověření (*ex-post*, až po provedené simulaci), že maximum turbulentní viskozity spadá do poloviny celkové šířky elementů u stěny. To však platí pro externí obtékání těles, kde dále a dále od stěny turbulentní fluktuace klesají, pro interní proudění je asi lepší sledovat maximum kinetické energie turbulence, viz obr. 3.8. Toto maximum se vyskytuje v místě, kde jsou hodnoty turbulentních (Reynoldsových) napětí a smykových napětí založených čistě na molekulární viskozitě vyrovnané.

# Kapitola 4

## Numerické metody používané v CFD

Jak bylo zmíněno v kapitole 2, při návrhu celé řady procesních aparátů a zařízení je nutné řešit transportní rovnice pro různé veličiny (hybnost, teplo, hmotu). Tyto rovnice lze analyticky řešit jen ve velice jednoduchých případech, ve většině situací je nutné je řešit numericky. Existuje celá řada numerických metod, které se dají použít na řešení parciálních diferenciálních rovnic jako jsou Navier-Stokesovy rovnice (ty obecně spadají do kategorie tzv. parabolických parciálních diferenciálních rovnic). Tyto metody se dají klasifikovat podle různých hledisek a lze je rozdělit do řady různých kategorií. Vedle asi nejjednodušší nebo nejdříve zmiňované metody sítí jsou hodně používané jiné metody, jako je např. metoda konečných prvků (elementů), používaná zejména v pevnostní analýze, známé jsou i metody konečných (kontrolních) objemů, hraničních prvků, metoda Monte Carlo, spektrální metody a další.

Z matematického hlediska lze rozlišovat skupinu tzv. variačních metod, které s rozvojem funkcionální analýzy zaznamenaly velký pokrok. Jejich princip je založen na tzv. slabé formulaci řešení úloh a minimalizaci funkcionálu. Do této skupiny patří například Galerkinova metoda a Ritzova metoda, metoda hraničních prvků (Rektorys [1995, 1974]). Z hlediska variačního počtu je metoda konečných prvků vlastně jen speciálním případem Ritzovy metody (s konkrétní volbou báze funkce). Patankar [1980] uvádí také metodu vážených reziduí, ze které se pro různé typy tzv. váhové funkce dají odvodit některé z výše zmíněných metod – např. metoda sítí, kontrolních objemů, Galerkinova metoda.

Podstata zmiňovaných numerických metod v zásadě leží v náhradě derivací v původních diferenciálních rovnicích diferenčními schémata a jejich transformaci na algebraické rovnice. Oblast, ve které hledáme řešení, se nejčastěji rozdělí na konečný počet podoblastí (elementů, bodů, buněk), ve kterých je toto nahrazení provedeno. Výsledkem je pak soustava algebraických rovnic, jejímž řešením získáme přibližnou aproximaci hledané veličiny v dané oblasti. Anderson et al. [1984] a Patankar [1980] uvádí několik různých přístupů k sestavení diferenčních schémat a rovnic:

- rozložení funkce do Taylorovy řady
- interpolace funkce polynomy
- variační metody
- metoda vážených reziduí
- metoda konečných objemů

I přes různé počáteční přístupy se velice často stává, že formálně na závěr dostaneme stejná diferenční schémata a rovnice. Význam různých přístupů se především projeví u neortogonálních souřadných systémů, nepravidelné geometrii, při aproximaci okrajových podmínek a z matematického hlediska i na podmínkách existence a jednoznačnosti řešení.

## 4.1 Metoda konečných objemů

Metoda konečných (kontrolních) objemů je v současnosti asi nejčastěji používanou numerickou metodou ve výpočtech CFD. Jejím základním rozdílem, například od metody sítí, je, že její formulace založena na „dodržování“ zákona zachování hmoty či obecněji transportované veličiny. Tento předpoklad metoda sítí s diferenciemi sestrojenými s pomocí např. Taylorových řad obecně nesplňuje (splňuje je jen pro limitní hodnoty diferenčních náhrad) a je v tomto smyslu jen formální metodou [Anderson et al., 1984].

Představíme-li si transportní rovnici obecné fyzikální veličiny  $\phi$ , pro zjednodušení jen s konvektivním a difuzním členem

$$\nabla \cdot (\phi \vec{u}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) , \quad (4.1)$$

lze tuto rovnici převést na integrální rovnici pro kontrolní objem  $V$

$$\int_V \nabla \cdot (\phi \vec{u}) dV = \int_V \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV \quad (4.2)$$

Pomocí Gaussovy věty lze objemové integrály převést na plošné integrály přes hranici objemu  $S$

$$\int_S (\phi \vec{u}) \cdot \vec{n} dS = \int_S (\Gamma \nabla \phi) \cdot \vec{n} dS , \quad (4.3)$$

kde  $\vec{n}$  představuje normálový vektor k ploše  $S$ . Tato rovnice vlastně bilancuje toky (konvektivní a difuzní) přes hranici kontrolního objemu  $S$ . V jednorozměrné případě (ve směru souřadné osy  $x$  se složkou vektoru rychlosti  $u$ ), bychom tuto rovnici mohli přepsat

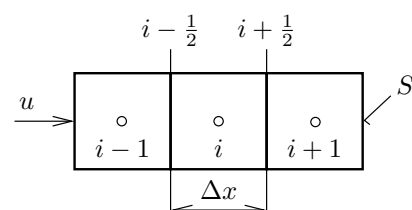
$$\int_S \phi u dS = \int_S \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} dS , \quad (4.4)$$

a podle obr. 4.1 bychom mohli sestavit následující schéma, aproximující rovnici (4.1) na kontrolním elementu o objemu  $V$ ,

$$S(\phi u)_{i+1/2} - S(\phi u)_{i-1/2} = S \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2} - S \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-1/2} \quad (4.5)$$

Zde pro zjednodušení uvažujeme, že hranice elementu z levé i pravé strany je stejná a rovna  $S$ , tudíž nám z rovnice zcela vypadne. Aproximujme dále hodnoty na hranicích elementu pomocí

$$(\phi u)_{i+1/2} = \frac{1}{2} [(\phi u)_{i+1} + (\phi u)_i] , \quad (\phi u)_{i-1/2} = \frac{1}{2} [(\phi u)_i + (\phi u)_{i-1}] \quad (4.6)$$



Obr. 4.1: Kontrolní objemy pro jednorozměrný případ.

$$\left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2} = \Gamma \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}, \quad \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-1/2} = \Gamma \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \quad (4.7)$$

kde opět pro zjednodušení uvažujeme, že všechny elementy jsou stejně veliké, tj. že tyto hranice leží přesně v polovině vzdálenosti mezi středy jednotlivých elementů  $\Delta x$ . Pak lze rovnici (4.5) převést do tvaru

$$a_i \phi_i = a_{i-1} \phi_{i-1} + a_{i+1} \phi_{i+1}, \quad (4.8)$$

kde jednotlivé koeficienty jsou definovány následovně

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{2\Gamma}{\Delta x} \\ a_{i-1} &= \frac{\Gamma}{\Delta x} + \frac{u_{i-1}}{2} \\ a_{i+1} &= \frac{\Gamma}{\Delta x} - \frac{u_{i+1}}{2} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Toto schéma v zásadě odpovídá tzv. centrální diferencní formuli pro aproximaci konvektivního členu

$$\frac{\partial(u\phi)}{\partial x} \Big|_i \approx \frac{(u\phi)_{i+1} - (u\phi)_{i-1}}{2\Delta x} \quad (4.10)$$

a je tzv. druhého řádu přesnosti. Nicméně, pokud má obecná fyzikální veličina nabývat jen kladných hodnot, je zřejmé, že její hodnota vyjádřená v bodě  $i$  z rovnice (4.8) může být záporná kvůli koeficientu  $a_{i+1}$ . Ten může být menší než nula pro určité (velké) hodnoty rychlosti (za předpokladu, že tok/rychlost je orientován/a zleva doprava a nabývá jen kladných hodnot). Jinak řečeno, může být toto numerické schéma nestabilní, a podmínkou stability jsou v tomto případě nezáporné hodnoty koeficientů v rovnici (4.8).

## Up-wind diferencní schéma

Výše uvedený problém s numerickou nestabilitou nebo-li s fyzikálně nesmyslnými hodnotami veličiny  $\phi_i$  vyjádřené z rovnice (4.8) lze ošetřit pomocí tzv. „up-wind“ difference. V metodě sítí je také označovaná jako zpětná diference, a používá se při diskretizaci konvektivních členů v transportních rovnicích, např.

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i \approx u \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \quad (4.11)$$

Nevýhodu tohoto schématu je přesnost pouze prvního řádu, ale existují schémata vyšších řádů, [Press et al., 1992; Anderson et al., 1984]. V našem případě metody konečných objemů bychom toto schéma mohli zavést pomocí následujících aproximací

$$(\phi u)_{i+1/2} = (\phi u)_i, \quad (\phi u)_{i-1/2} = (\phi u)_{i-1} \quad (4.12)$$

místo aproximací (4.6). To platí opět pro orientaci toku zleva doprava v obrázku 4.1. Pak bychom dostali následující definice koeficientů v diferencní rovnici (4.8)

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{2\Gamma}{\Delta x} + u_i \\ a_{i-1} &= \frac{\Gamma}{\Delta x} + u_{i-1} \\ a_{i+1} &= \frac{\Gamma}{\Delta x} \end{aligned} \quad (4.13)$$

keré podmínku kladnosti splňují vždy a jedná se tedy o numericky stabilní schéma. Samozřejmě v reálném případě, kdy není směr toku jednoznačně daný, je nutné toto ošetřit nějakými podmínkami a zvolit takové „up-wind“ schéma, které směr toku respektuje. Podrobněji viz Patankar [1980], kde jsou uvedena i schémata vyšších řádů (mocninové, exponenciální), která lze využít při diskretizaci výše uvedené rovnice (4.1) s konvektivním a difuzním členem.

## Numerická difuze

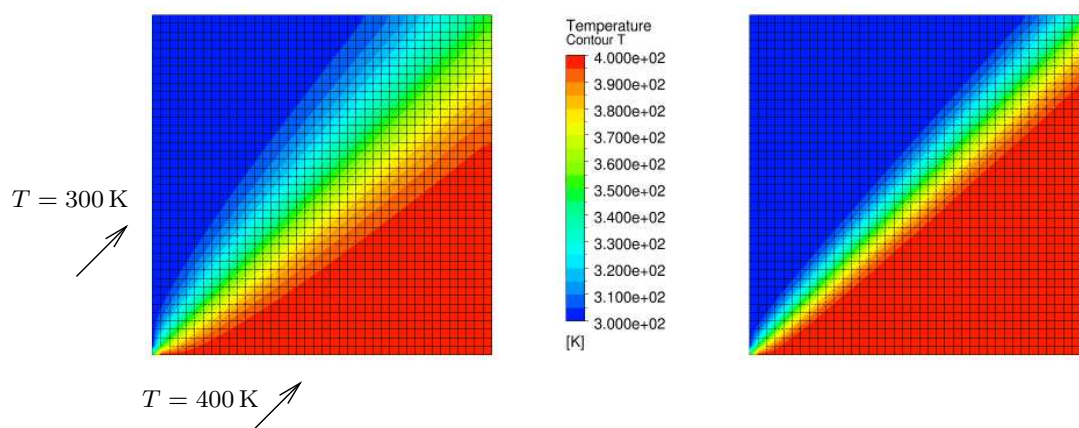
Porovnáním koeficientů (4.9) pro schéma s centrální diferencí u konvektivního členu a koeficientů (4.13) pro „up-wind“ schéma, lze dojít k tomu, že pokud bychom v koeficientech pro centrální diferenční schéma dosadili za obecný difuzní součinitel následující

$$\Gamma + \frac{u\Delta x}{2}, \quad (4.14)$$

dostaneme stejné koeficienty jako pro „up-wind“ schéma. A protože centrální diferenční schéma je vyššího řádu přesnosti, můžeme říci, že s „up-wind“ formulací máme v systému navýšenou hodnotu difuzního součinitele o  $u\Delta x/2$ . Tato nepřesnost se někdy označuje jako tzv. numerická difuze. Patankar [1980] uvádí, že numerická difuze je zanedbatelná při nízkých hodnotách Pécletova čísla

$$Pe = \frac{uL_{char}}{\Gamma}, \quad L_{char} = \Delta x \quad (4.15)$$

tj. v případech, kdy skutečná hodnota difuze převažuje nad konvekcí ( $u$ ) a je tedy o hodně větší než hodnota numerické difuze. Naopak u velkých hodnot Pécletova čísla numerická difuze sehrává větší roli, tj. v případech, kde konvekce převažuje nad samotnou difuzí. To je navíc umocněno případy, kdy není konvektivní tok přesně zarovnán s elementy sítě. V takovém případě může být „up-wind“ difference prvního řádu značně nepřesná a doporučuje se používat schémata s vyšším řádem přesnosti. ANSYS Fluent používá implicitně „up-wind“ schéma druhého řádu a nabízí vedle „up-wind“ prvního řádu i další schémata s vyšším řádem přesnosti (např. mocninové schéma atp.). Z rovnice (4.14) lze dovodit, že jednou z možností, jak snížit dopad numerické difuze, je zmenšení velikosti elementů sítě. To ale může být někdy příliš restriktivní s ohledem na potřebný výpočetní výkon. Obrázek 4.2 ilustruje problém s numerickou difuzí na pravoúhlé geometrii a síti, kde je směr toku orientován podél diagonály. Pécletovo číslo definované rovnicí (4.15) je v tomto případě zhruba 25.



Obr. 4.2: Ilustrace problému s numerickou difuzí, vlevo je up-wind schéma prvního řádu, vpravo druhého řádu. Pécletovo číslo definované rovnicí (4.15) je  $Pe = 25$ .

## Tlak v bilanci hybnosti

V Navier-Stokesových rovnicích (2.13), nebo obecněji v Cauchyho rovnici (2.8) představující bilanci hybnosti, se vedle konvektivních a difuzních členů vyskytuje i gradient tlaku. Pokud se zaměříme na zjednodušený stacionární případ bez zdrojového členu, můžeme dostat

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \vec{u}) \quad (4.16)$$

Při integraci přes kontrolní objem a aplikaci Gaussovy věty lze gradient tlaku převést na

$$\int_V \nabla p \, dV = \int_S p \vec{n} \, dS \quad (4.17)$$

Pro jednorozměrný případ lze pak tento člen nahradit pomocí

$$S(p_{i+1/2} - p_{i-1/2}) \quad (4.18)$$

a nakonec dostat podobnou rovnici jako je (4.8), nyní však pro rychlost  $u$  s tím, že se nám zde objeví další členy pro tlaky na hranicích elementu (násobené plochou elementu - pro zjednodušení zde uvažujme, že je tato plocha konstantní, takže ji lze v rovnici zkrátit)

$$a_i u_i = a_{i-1} u_{i-1} + a_{i+1} u_{i+1} + (p_{i-1/2} - p_{i+1/2}) \quad (4.19)$$

V této algebraické rovnici máme další neznámé, tlaky, které nám její řešení komplikují. Klíčem k jejímu řešení je využití rovnice kontinuity (2.2), ve které je obsažena hustota. Jednou z možností (kterou používají „density-based“ řešiče) je řešit tuto rovnici a pak vyjádřit tlak z hustoty přes stavovou rovnici. Další variantou je využití korekčních rovnic pro tlak, které lze obdržet z rovnice kontinuity a hybnosti po dekompozici tlaků i rychlostí na jejich aproximaci (odhad  $u^*$ ,  $p^*$  a korekce  $\Delta u^*$ ,  $\Delta p^*$ )

$$p = p^* + \Delta p, \quad u = u^* + \Delta u \quad (4.20)$$

Po nějakých úpravách lze obdržet korekční rovnice pro tlak, které tvoří základ metody SIMPLE. Vyřešením těchto rovnic dostaneme zmíněné korekce pro  $\Delta u^*$  a  $\Delta p^*$ . Ty lze použít pro stanovení nových hodnot tlaků a rychlostí podle výše uvedené rovnice, které se pak použijí jako nové odhady (aproximace) v další iteraci.

## 4.2 Lattice-Boltzmannova metoda

Lattice-Boltzmannova metoda (LBM) představuje značně odlišnou kategorii numerických metod. Vychází z konceptu dynamiky molekul (částic) ve zředěném plynu, které se pohybují z jednoho místa do jiného místa a vzájemně spolu kolidují. Základ tohoto přístupu leží v kinetické teorii plynů, která popisuje systém pohybujících se částic pomocí Boltzmannovy rovnice [Heinbockel, 2002]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla N + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial N}{\partial \vec{u}} = \Omega_C N, \quad (4.21)$$

kde  $N = N(\vec{x}, \vec{u}, t)$  představuje distribuční funkci (pravděpodobnost, že se molekula s rychlostí  $\vec{u}$  nachází v místě  $\vec{x}$  a čase  $t$ ).  $\Omega_C$  je kolizní operátor, postihující kolize mezi molekulami (v obecném případě nejen dvou, ale i více molekul zároveň),  $\vec{F}$  představuje nějaké vnější objemové síly působící na pohybující se molekuly.

Frisch et al. [1986] uvedl předchůdce metody LBM, metodu LGCA (Lattice Gas Cellular Automata), která je založena na pravidelné mřížce bodů a několika pevně daných směrech, ve kterých se pohybují fiktivní částice představující molekuly plynu (viz obr. 4.3). To je samozřejmě významné zjednodušení celého procesu a pokud chceme obdržet rozumnou přesnost/podobnost s tokem tekutiny, je nutné dodržet řadu podmínek, jednak geometrických, a dále pak podmínek při definici kolizního operátoru.

Lattice-Boltzmannova metoda nahradila celočíselné (dvoustavové, 0 – částice není přítomna, 1 – je přítomna) veličiny používané u metody LGCA distribuční funkcí  $N_i$ , která může nabývat reálných hodnot. Jinak je postup výpočtu v zásadě podobný, v prvním kroku se provede posun částic podle daných směrů z jednoho místa mřížky do jiného, a ve druhém kroku se spočte kolizní operátor. To lze popsat pomocí následujícího vztahu

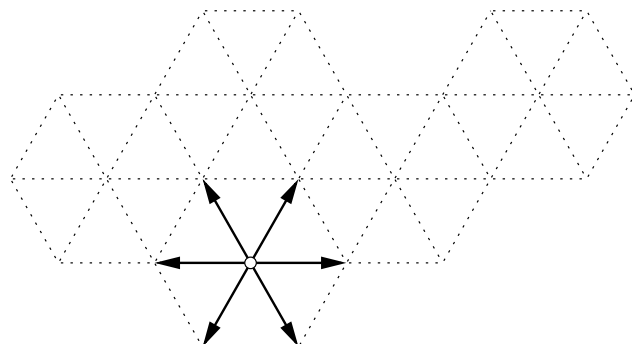
$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - N_i(\vec{x}, t) = \Omega_i, \quad (4.22)$$

kde hustota tekutiny a moment hybnosti jsou definovány následovně

$$\rho = \sum_i N_i \quad (4.23)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_i \vec{c}_i N_i \quad (4.24)$$

Index  $i$  v předchozích rovnicích odkazuje na jednotlivé směry v dané mřížce. Abychom mohli ve finále obdržet chování popsané Navier-Stokesovými rovnicemi, je nutné dodržet následující



Obr. 4.3: Ukázka dvourozměrné mřížky (FHP) se šesti pevně definovanými směry [Frisch et al., 1986].



podmínky pro kolizní operátor

$$\sum_i \Omega_i = 0, \quad \sum_i \vec{c}_i \Omega_i = \vec{f}. \quad (4.25)$$

Pokud bychom použili Taylorův rozvoj prvního řádu pro distribuční funkci  $N_i(\vec{x}, t)$ , lze diskrétní rovnici (4.22) přepsat v diferenciálním tvaru jako

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \nabla N_i = \Omega_i \quad (4.26)$$

Sečtením přes všechny hodnoty indexů  $i$  (tj. přes všechny směry v dané mřížce) v rovnici (4.26) můžeme dostat (s pomocí tenzorového zápisu, kde  $a$  odkazuje na prostorový index)

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_i N_i + \frac{\partial}{\partial x_a} \sum_i c_{ia} N_i = \sum_i \Omega_i \quad (4.27)$$

Tento vztah lze s použitím vztahů (4.25), (4.23) a (4.24) transformovat na rovnici kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_a} (\rho u_a) = 0 \quad (4.28)$$

Pokud pro danou geometrii mřížky patřičným způsobem nadefinujeme distribuční funkci  $N_i$ , lze po dosazení do rovnice (4.26) a aplikaci nějakých dalších podmínek dostat Navier-Stokesovy rovnice. Pro trojrozměrnou (pseudo 4-D) mřížku označovanou jako FCHC (Face-Centered Hyper-Cubic), viz obr. 4.4, lze použít následující definici [Somers, 1993; Eggels a Somers, 1995; Derksen a Van den Akker, 1999]

$$N_i = \frac{w_i \rho}{24} \left\{ 1 + 2c_{ia} u_a + 3 \left[ c_{ia} c_{ib} u_a u_b - \frac{1}{2} u_a u_a \right] - 6\nu \left[ c_{ia} \frac{\partial}{\partial x_a} (c_{ib} u_b) - \frac{1}{2} \frac{\partial u_a}{\partial x_a} \right] \right\} \quad (4.29)$$

kteřá po dosazení do rovnice (4.26), sečtením přes všechny indexy  $i$ , aplikací výše uvedených podmínek a ještě dalších vycházejících z vlastností dané mřížky (pro stručnost zde nejsou uvedeny, viz originální reference), nakonec vyústí v Navier-Stokesovy rovnice

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_a) + \frac{\partial}{\partial x_b} (\rho u_a u_b) &= -\frac{\partial p}{\partial x_a} + \\ \frac{\partial}{\partial x_b} \left[ \nu \rho \left( \frac{\partial u_a}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b}{\partial x_a} \right) \right] - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_a} \left( \nu \rho \frac{\partial u_b}{\partial x_b} \right) &+ f_a \end{aligned} \quad (4.30)$$

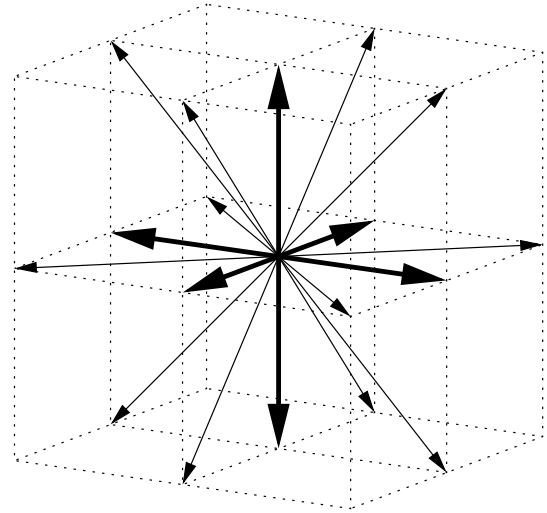
kde tlak  $p$  je definován jako

$$p = \frac{1}{2} \rho (1 - \frac{1}{2} u_b u_b) \quad (4.31)$$

Dosazením vztahu (4.29) do rov. (4.26) lze také vyjádřit vztah pro kolizní operátor  $\Omega_i$ , který je nutné vyčíslit v druhém kroku této výpočetní metody a který vede k chování odpovídajícímu řešení Navier-Stokesových rovnic

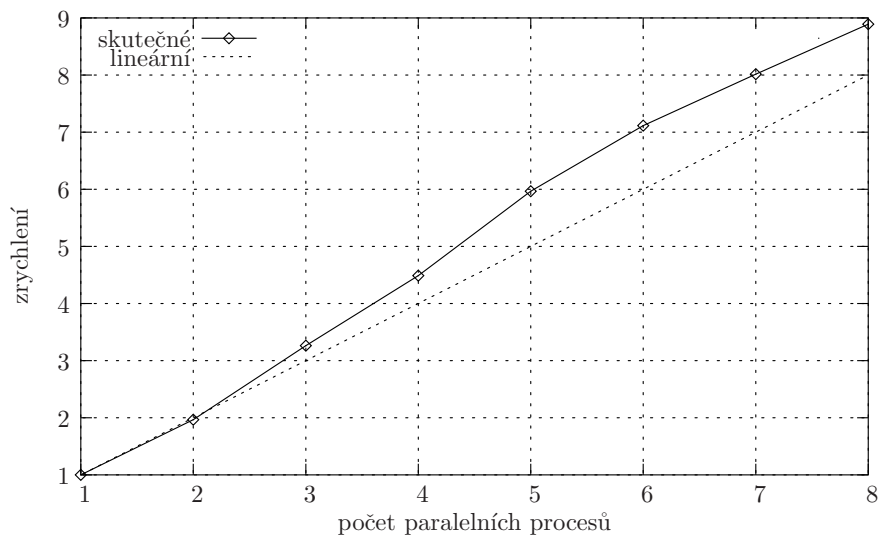
$$\Omega_i = \frac{w_i \rho}{12} \left( c_{ia} c_{ib} \frac{\partial u_b}{\partial x_a} - \frac{1}{2} \frac{\partial u_a}{\partial x_a} \right) + \frac{w_i}{12} c_{ia} f_a \quad (4.32)$$

Pro podrobnosti viz Somers [1993], Eggels a Somers [1995], Petera et al. [2002].



Obr. 4.4: Trojrozměrná projekce pseudo 4-rozměrné mřížky FCHC s celkem 24 pevně definovanými směry a vektory rychlosti  $c_{ia}$  se 4 složkami  $(c_{i1}, c_{i2}, c_{i3}, c_{i4})$  [d'Humières et al., 1986].

Lattice-Boltzmannova metoda představuje podstatně odlišný přístup ve srovnání s klasickými metodami používanými v CFD jako třeba metoda konečných objemů. Její hlavní výhodou je, že největší část výpočetní náročnosti spočívá ve výpočtu kolizního operátoru, který je tzv. zcela lokální, to znamená, že pro jeho výpočet potřebujeme čistě jen hodnoty veličin z daného bodu výpočetní sítě. To se projeví jako velká výhoda při paralelizaci, kdy mezi jednotlivými současně běžícími procesy není potřeba vyměňovat tolik informací jako s klasickými metodami. Obrázek 4.5 pěkně demonstruje zrychlení výpočtů proudění v kanále čtvercového průřezu [Petera et al., 2002] s rostoucím počtem paralelních procesů. Od počtu 3 paralelních procesů je zrychlení dokonce lepší než lineární, což je v tomto případě způsobeno tím, že se část jednotlivých procesů vešla do sekundární cache paměti příslušného procesoru (MIPS R12k/300), která je výrazně rychlejší než hlavní operační paměť. Od celkem 5 paralelních procesů je vidět, že již tento vliv pominul, nicméně zrychlení dále odpovídá ideálnímu lineárnímu případu, kdy např. 8 paralelních procesů urychlí výpočet 8krát.



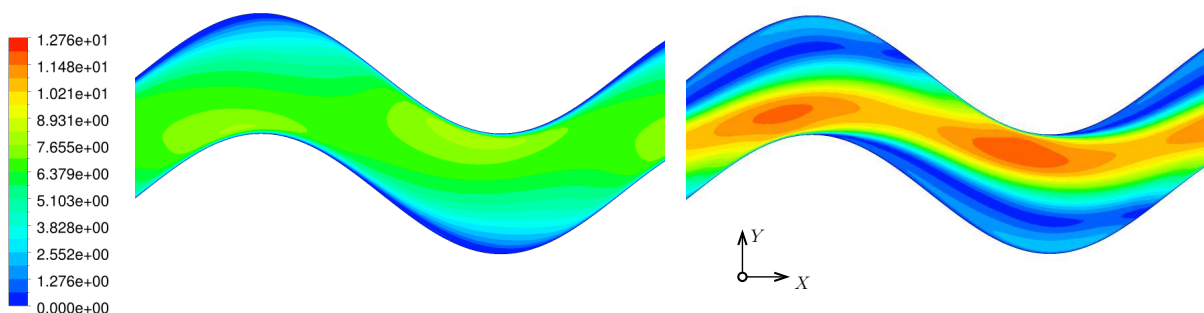
Obr. 4.5: Paralelní zrychlení výpočtů založených na metodě LBM [Petera et al., 2002].

## 4.3 Přesnost numerického řešení

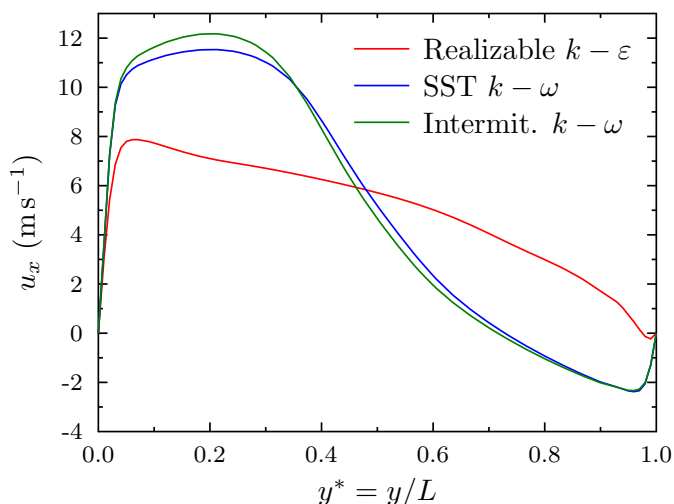
Důležitým bodem jakékoliv numerické simulace je samozřejmě přesnost řešení. Na jedné straně nás zajímá, jak hodně se získané řešení odchyluje od fyzikální reality kvůli třeba nevhodně zvolenému modelu turbulence, okrajovým podmínkám, atp., a na druhé straně nás zajímá jaký má vliv na přesnost řešení velikost sítě (elementů), dostatečně jemná síť u stěny (aby byla podchycena mezní vrstva), použitá diskretizační schémata, numerická difuze atp., což je kromě jiného v přímé souvislosti s výpočetní náročností vedoucí k získání finálních výsledků.

### 4.3.1 Odchytky od fyzikální skutečnosti

Odchytky od fyzikální reality mohou být způsobeny zvoleným modelem turbulence (pokud řešíme turbulentní proudění), jak dobře máme definované okrajové podmínky (dost často o nich máme jen málo informací), jaká další zjednodušení jsme použili při definici úlohy (symetrie, jedno či vícefázové proudění, atp.). Definitivní odpověď na tuto část ohledně přesnosti numerického řešení může dát jen porovnání s experimenty. Protože v kategorii RANS modelů turbulence neexistuje žádný zcela univerzální, je důležité si zvolit ten nejvhodnější, buď na základě zkušeností, nebo je dobré výpočet provést s různými modely turbulence a vybrat ten nejvhodnější, který se nejvíce blíží skutečnosti (pokud tedy máme vůbec nějaká experimentální data k dispozici). Na obrázku 4.6 jsou ilustrovány rozdíly mezi dvěma modely turbulence,  $k - \varepsilon$  a SST  $k - \omega$ , na příkladu kontur rychlostí v sinusovém kanále výměníku tepla. Jsou zde zřetelně vidět významné odchylky, což je rovněž potvrzeno i na obrázku 4.7, kde jsou vyobrazeny složky rychlosti v podélném směru (osa  $x$ ). Jasně je zde vidět, že u modelu  $k - \omega$  je postihnuto odtržení proudu od stěny a vytvoření zpětného toku, což model  $k - \varepsilon$  není schopen postihnout. Tyto rozdíly se pak samozřejmě projeví i v predikci například tlakové ztráty nebo výstupní teploty (či střední teplotní difference), což jsou v principu jedny ze základních parametrů při návrhu výměníků, viz. tabulka 4.1. V obou případech zde byla použita stejná síť se zjemněnými elementy u stěny, aby  $y^+ \approx 1$ .



Obr. 4.6: Porovnání kontur rychlostí v sinusovém kanále výměníku tepla pro dva různé modely turbulence, nalevo je Realizable  $k - \varepsilon$ , a napravo SST  $k - \omega$ .



Obr. 4.7: Složky rychlosti  $u_x$  v podélném směru sinusového kanálu výměníku tepla (na konci 4. sekce/sinusovky) pro různé modely turbulence (Realizable  $k - \varepsilon$ , SST  $k - \omega$ , Intermittency Transition Model).

Tabulka 4.1: Porovnání tlakových ztrát a výstupních teplot v sinusovém kanále výměníku tepla pro různé modely turbulence ( $Re = 6850$ ).

model	$\Delta p$ [Pa]	$T_{out}$ [K]
Realizable $k - \varepsilon$	53.6	336.4
SST $k - \omega$	142.7	342.1
Intermit. Trans.	156.0	342.1

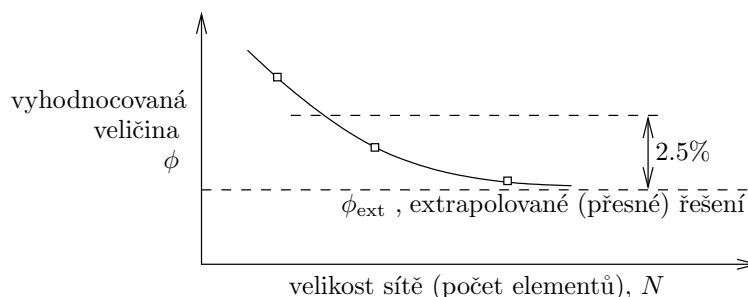
### 4.3.2 Vliv velikosti sítě

Velikost sítě nebo jinak také velikost elementů jsou důležitým faktorem ovlivňujícím přesnost řešení. Obecně se dá říci, že čím menší máme elementy, tím přesnější řešení dostaneme. Samozřejmě s rostoucím počtem elementů nám úměrně narůstá i výpočetní náročnost příslušné úlohy, proto je asi rozumné mít jen tak velkou síť, jak je nezbytně nutné.

Journal of Fluids Engineering [Celik et al., 2008] doporučuje vyhodnocení tzv. „Grid Convergence Indexu“ (GCI), který vyjadřuje přesnost numerického řešení pro danou velikost sítě. Analýza vlivu velikosti sítě (elementů) je založena na provedení výpočtů pro tři různě velké sítě a vyhodnocení závislosti sledované veličiny na počtu elementů sítě. Ta může vypadat jako na obr. 4.8, a lze ji popsat pomocí následující funkce

$$\phi = \phi_{ext} + c N^{-p/D} \quad (4.33)$$

V této rovnici jsou celkem tři neznámé parametry: extrapolovaná hodnota  $\phi_{ext}$  odpovídající nekonečně velké síti, dalo by se říci „přesnému“ řešení, dále pak koeficient  $c$ , jehož hodnota nás ani tak nezajímá, a nakonec je tu  $p$ , což odpovídá řádu přesnosti použité numerické metody



Obr. 4.8: Závislost sledované veličiny  $\phi$  na velikosti (počtu elementů) sítě  $N$ .

(zjednodušeně řečeno, pokud se změní velikost elementu dvakrát, tak s jakou mocninou se změní odchylka od přesného řešení). Parametr  $D$  v rovnici (4.33) představuje rozměr řešeného problému. Ten je roven 2, pokud se jedná o dvourozměrný problém, pokud se jedná o trojrozměrný problém, tak je roven 3. Lze jej z této rovnice eliminovat tím, že místo počtu elementů sítě zavedeme nějaký charakteristický rozměr elementu  $h$ , který je nepřímo úměrný velikosti sítě a odmocnině  $D$

$$h \approx \left(\frac{1}{N}\right)^{1/D}, \quad h_{3-D} = \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}, \quad h_{2-D} = \left(\frac{S}{N}\right)^{1/2} \quad (4.34)$$

Pak se rovnice (4.33) přetransformuje do tvaru

$$\phi = \phi_{\text{ext}} + c h^p \quad (4.35)$$

kde máme zmíněné tři neznámé parametry,  $\phi_{\text{ext}}$ ,  $c$  a  $p$ . Je zřejmé, že pokud je chceme stanovit, musíme provést výpočet na minimálně třech velikostech sítě. Pak lze řešit soustavu rovnic

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \phi_{\text{ext}} + c h_1^p \\ \phi_2 &= \phi_{\text{ext}} + c h_2^p \\ \phi_3 &= \phi_{\text{ext}} + c h_3^p \end{aligned} \quad (4.36)$$

Zavedením poměrů velikostí elementů pro jednotlivé velikosti sítě

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1}, \quad r_{32} = \frac{h_3}{h_2} \quad (4.37)$$

a rozdílů mezi hodnotami obdrženy pro různé velikosti sítě (elementů)

$$\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1, \quad \varepsilon_{32} = \phi_3 - \phi_2, \quad (4.38)$$

Lze výše uvedenou soustavu tří rovnic (4.36) pro tři neznámé převést jen na jednu rovnici pro jednu neznámou  $p$

$$p = \frac{1}{\ln r_{21}} \left[ \ln \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} + \ln \frac{r_{21}^p - 1}{r_{32}^p - 1} \right], \quad (4.39)$$

kteřou je však nutné řešit numericky (jedná se o transcendentní rovnici). V zásadě stejnou rovnici publikoval Celik et al. [2008]

$$p = \frac{1}{\ln r_{21}} \left[ \ln |\varepsilon_{32}/\varepsilon_{21}| + q \right], \quad q = \ln \left( \frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right), \quad s = \text{sign} \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \quad (4.40)$$

kteřá navíc zohledňuje případy, kdy závislost vyhodnocované veličiny  $\phi$  na počtu či velikosti elementů není monotónní, tj. případy kdy je například

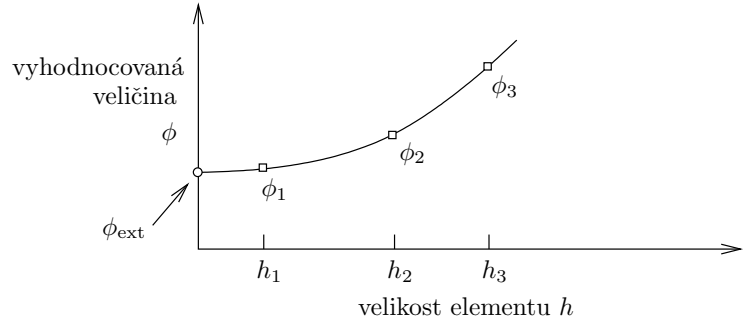
$$\phi_1 < \phi_2, \quad \phi_2 > \phi_3 \quad (4.41)$$

což odpovídá situaci, kdy má závislost na velikosti sítě (elementů) oscilační charakter.

Rovnici (4.40) lze numericky řešit například v Matlabu (či Octavu) následovně

```
eps32 = Phi(3)-Phi(2)
eps21 = Phi(2)-Phi(1)
s = sign(eps32/eps21)

fq = @(p) log((r21.^p-s)./(r32.^p-s));
fp = @(p) p - 1/log(r21)*abs(log(abs(eps32/eps21))+fq(p));
p = fzero(fp,1)
```



Obr. 4.9: Závislost sledované veličiny  $\phi$  na velikosti elementu  $h$ .

Se znalostí parametru  $p$  lze vyjádřit další neznámé ze soustavy rovnic (4.36), z nichž nás zajímá hlavně  $\phi_{\text{ext}}$  (parametr  $c$  není tak důležitý)

$$\phi_{\text{ext}} = \frac{\phi_1 r_{21}^p - \phi_2}{r_{21}^p - 1} \quad (4.42)$$

Potom lze vyjádřit tzv. GCI index pro největší síť (nejmenší velikost elementu) s indexem 1 jako

$$\text{CGI}_{21} = F_s \frac{\phi_{\text{ext}} - \phi_1}{\phi_1} \quad (4.43)$$

kde  $F_s$  představuje jakýsi bezpečnostní faktor, doporučovaná hodnota je 1.25 [Celik et al., 2008]. Předchozí rovnici lze dále pomocí vztahu pro  $e_a^{21}$

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right| \times 100 [\%] \quad (4.44)$$

převést do tvaru

$$\text{CGI}_{21} = \frac{1.25 e_a^{21}}{r_{21}^p - 1} \quad (4.45)$$

Tento vztah (nebo rovnice 4.43) představuje tedy odhad numerické přesnosti největší sítě s nejmenšími elementy. Obdobně lze vyjádřit i odhad přesnosti pro střední síť

$$\text{CGI}_{32} = \frac{1.25 e_a^{32}}{r_{32}^p - 1}, \quad e_a^{32} = \left| \frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_2} \right| \times 100 [\%] \quad (4.46)$$

Aby byly výsledky relevantní, Celik et al. [2008] doporučuje mít rozdíly ve velikostech jednotlivých sítí dostatečně významné. Vyjádřeno s pomocí poměrů velikostí elementů pro jednotlivé sítě (4.37), aby platilo

$$r_{21}, r_{32} > 1.3 \quad (4.47)$$

To může být u velkých 3-D úloh poměrně náročné, protože v takovém případě by poměr velikostí (počtu elementů) mezi jednotlivými sítěmi měl být

$$\frac{N_1}{N_2} > 1.3^3 = 2.197 \quad (4.48)$$

To znamená, že máme-li nejmenší síť o velikosti 1 milión elementů, budeme u další sítě potřebovat zhruba 2.2 milióny elementů, a pro největší síť již téměř 5 miliónu elementů (4.83 mil.). Pro 2-D problém je pak doporučený poměr mezi velikostmi (počtem elementů) jednotlivých sítí  $1.3^2 = 1.69$ . Následuje ukázka Matlab skriptu, který lze použít pro vyhodnocení GCI indexů jednotlivých velikostí sítí, na jejichž základě se pak lze rozhodnout, která z nich nám poskytuje dostatečnou přesnost.

```

N = [ 25840 57000 100320 ];
Phi = [ 6.44893698 6.3422233644 6.2927614565 ];
[N, i] = sort(N, 'descend'); % srovna poradí prvku, aby první odpovídal
Phi = Phi(i); % nejmenější síti
figure(1); plot(N,Phi, 'r*', N,Phi, 'b'); grid on;
D = 2; % rozmer ulohy, 2-D or 3-D
r21 = (N(1)/N(2))^(1/D)
r32 = (N(2)/N(3))^(1/D)
eps32 = Phi(3)-Phi(2)
eps21 = Phi(2)-Phi(1)
R = eps21/eps32
s = sign(eps32/eps21);
fq = @(p) log((r21.^p-s)./(r32.^p-s));
fp = @(p) p - 1/log(r21)*abs(log(abs(eps32/eps21))+fq(p));
p = fzero(fp,1)
PhiExt = (r21^p*Phi(1)-Phi(2))/(r21^p-1)
e21a = abs((Phi(1)-Phi(2))/Phi(1))*100
CGI21 = 1.25*e21a/(r21^p-1)
e32a = abs((Phi(2)-Phi(3))/Phi(2))*100
CGI32 = 1.25*e32a/(r32^p-1)

```

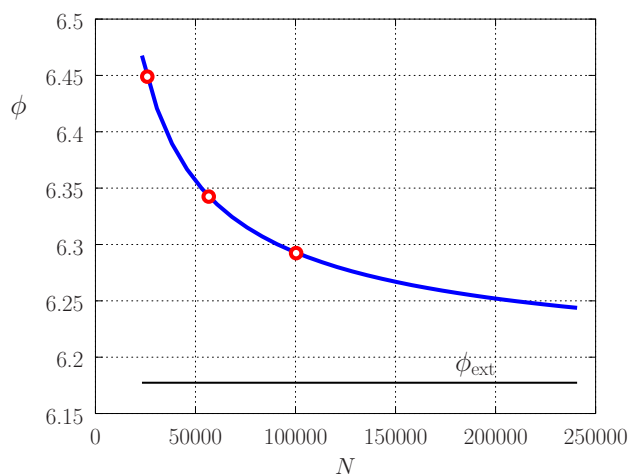
Výsledkem pak může být

```

r21 = 1.3266
r32 = 1.4852
eps32 = 0.10671
eps21 = 0.049462
R = 0.46350
s = 1
p = 1.2616
Phi21ext = 6.1773
e21ext = 1.8689
e21a = 0.78601
CGI21 = 2.2932
e32a = 1.6826
CGI32 = 3.2502

```

kde lze vyčíst, že GCI index pro největší síť (s nejmenšími elementy) je  $GCI_{21} = 2.29\%$ . Pokud by nám stačila přesnost  $GCI_{32} = 3.25\%$ , mohli bychom použít prostřední síť (síť s indexem 2). S podobnou rovnicí jako je (4.43) bychom mohli odhadnout i přesnost nejhrubší sítě jako



Obr. 4.10: Ilustrace závislosti monitorované veličiny pro vyhodnocení GCI indexu pomocí Matlab (Octave) skriptu uvedeného v textu.

5.26 %, což je, z inženýrského hlediska, v řadě případů ještě přijatelné.

$CGI_{33} = 1.25 * \text{abs}(\Phi_{\text{Ext}} - \Phi(3)) / \Phi(3) * 100$	.....	5.2648
---	-------	--------

Při vyhodnocování indexu GCI budeme dostávat různé výsledky pro různé veličiny (rychlost, tlak, teplota, ...), okrajové podmínky (např. různé vstupní rychlosti), modely turbulence, lokální či zprůměrované hodnoty atp. Proto je nutné si vybrat takový případ, který bude pro naše potřeby nejvíce relevantní, například provést vyhodnocení GCI pro nejvyšší vstupní rychlost, protože pro menší hodnoty budou i hodnoty GCI obecně menší. Je zřejmé, že korektně provedená analýza vlivu velikosti sítě na přesnost řešení může být výpočetně i časově dosti náročná, zejména pokud řešíme 3-D problémy a navíc třeba i nestacionární. Nicméně její důležitost je myslím zjevná podobně jako stanovení chyby u prováděných experimentů.



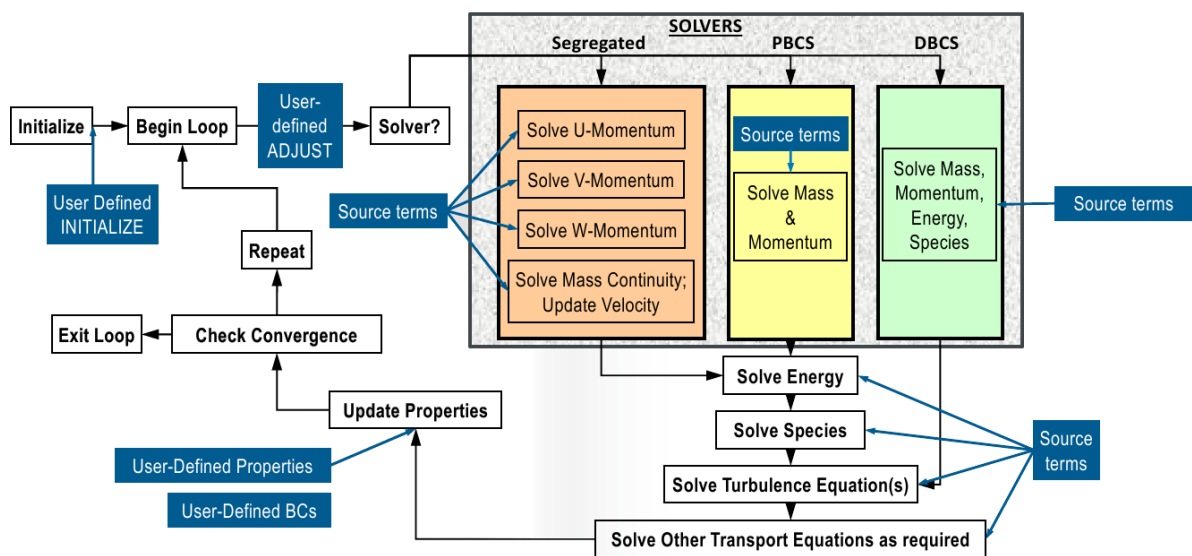
# Kapitola 5

## Uživatelské funkce v ANSYS Fluent

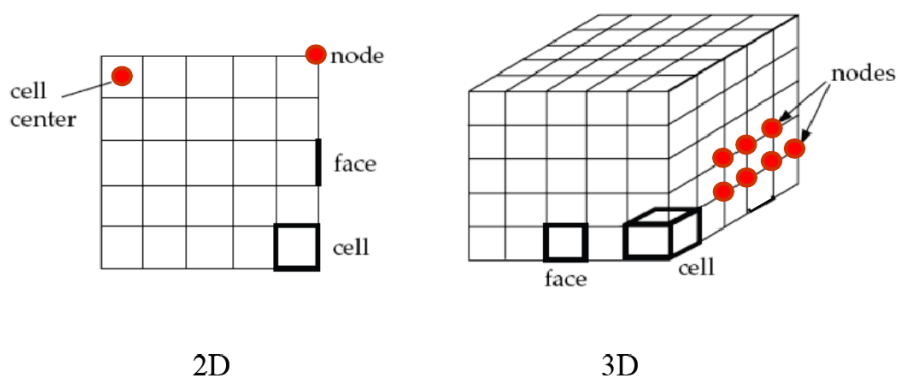
ANSYS Fluent poskytuje rozhraní pro tzv. uživatelské funkce (User Defined Functions, UDF) a umožňuje tak podstatně rozšířit spektrum problémů, které lze v tomto programu řešit. Pro definici uživatelských funkcí je používán programovací jazyk C, a lze je využít v celé řadě oblastí, například

- časově nebo prostorově závislé okrajové nebo počáteční podmínky
- vlastní modely materiálových vlastností, jako je třeba viskozita, hustota, atp.
- definice reakčních rychlostí
- definice zdrojových členů v transportních rovnicích
- uživatelské definice kompletních transportních rovnic
- modifikace řešených proměnných a post-processing
- úprava některých členů stávajících modelů turbulence, definice vlastních stěnových funkcí
- deformující nebo pohybující se síť
- definice interakcí mezi fázemi ve vícefázovém systému

Obrázek 5.1 ukazuje schéma se základními místy, kde lze v rámci iteračního procesu řešiče ANSYS Fluent využít uživatelsky definované funkce. Makra lze použít i mimo samotný iterační proces, například v post processingu, při načítání nebo ukládání dat, atp. Ve většině UDF funkcí je nutné se nějakým způsobem odkazovat na základní proměnné (veličiny) řešených rovnic, jako je třeba tlak, rychlost, nebo teplota, a to navíc v určitém místě, které je v zásadě dáno konkrétním elementem vytvořené sítě. ANSYS Fluent je tzv. „cell-centered“ řešič, tzn. že zmíněné základní veličiny jsou definovány ve středu elementů (buněk) sítě. Pokud je tedy nutné znát jejich hodnoty na rozhraní (plochách, faces) mezi buňkami sítě, je nutné je získat interpolací. Toky řešených veličin jsou naopak přímo, bez jakékoliv interpolace známy na hranicích jednotlivých buněk sítě. Každá buňka sítě je vymezena jednotlivými uzly (nodes), a plochami buňky (faces), viz obrázek 5.2. Každá buňka má informaci o svých plochách (faces), a naopak pro určitou plochu lze zjistit sousedící buňky. Buňky či jejich plochy jsou sdruženy do tzv. vláken (threads, někdy se označují jako zóny), které dohromady tvoří tzv. doménu (domain) představující celou síť. Pro jednofázový systém je definována pouze jedna doména, s indexem 1, u vícefázových systémů doména s indexem 1 odkazuje na směs, a pro jednotlivé fáze pak jsou definovány domény s vyššími indexy 2, 3, atd. Jejich přiřazení lze najít v ANSYS Fluent v panelu *Phases*. Pokud

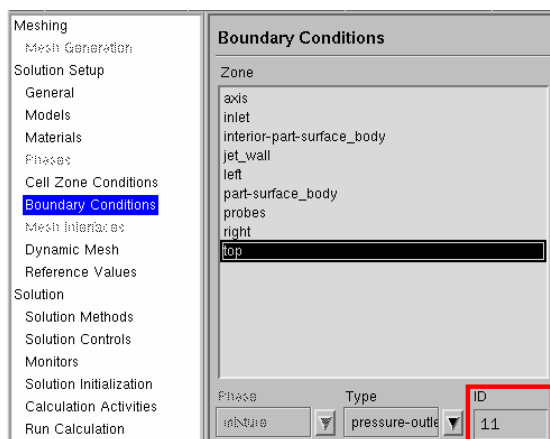


Obr. 5.1: Schéma iteračního procesu řešiče ANSYS Fluent s místy, kde lze využít uživatelsky definované funkce [ANSYS Fluent, 2014].



Obr. 5.2: Buňky (cells), plochy (faces) a uzly (nodes) jednotlivých elementů sítě [ANSYS Fluent, 2014]. Vlevo je varianta 2-D geometrie, napravo 3-D.

Obr. 5.3: Panel s okrajovými podmínkami v ANSYS Fluent a index příslušné zóny.



je potřeba v rámci nějaké funkce explicitně získat odkaz na doménu (protože není třeba mezi předávanými parametry do funkce), lze to provést následujícím způsobem

```
Domain *d;
Thread *t;
int zone_id = 11;
...

d = Get_Domain(1);
t = Lookup_Thread(d, zone_id);
```

Proměnná `d` zde představuje ukazatel na strukturu v jazyce C odkazující na příslušnou doménu. V ukázce je dále uvedeno, jak se následně lze dostat k množině (vláknů, thread) buněk pro určitou zónu pomocí makra `Lookup_Thread`. To mohou být třeba buňky (nebo spíše plochy buněk), pro které jsou definovány nějaké okrajové podmínky. V ANSYS Fluent lze najít příslušný index v panelu s okrajovými podmínkami, viz obr. 5.3. Naopak, pokud by člověk potřeboval zjistit index příslušné zóny (thread) z jeho ukazatele, lze použít makro `THREAD_ID`.

```
Thread *t;
int zone_id;
...

zone_id = THREAD_ID(t);
```

Vedle výše zmíněných struktur `Domain` a `Thread` se v rámci uživatelských funkcí musíme často odkazovat na jednotlivé buňky (cells) či jejich plochy (faces). Pro to jsou definovány typy, které ale v zásadě představují čistě celočíselný index (typ `int`). Další typ `Node` představuje strukturu (ukazatel na strukturu) odkazující na konkrétní uzel sítě (node).

```
cell_t c;
face_t f;
Node *node;
```

Na začátku souboru s uživatelskými definicemi je nutné uvést minimálně direktivu pro načtení hlavičkového souboru `udf.h`, případně i dalších souborů, ve kterých jsou definovány používaná makra, další funkce nebo procedury případně jejich prototypy.

```
#include <udf.h>
#include <math.h>
...
```

V následujícím textu nebudu zcela striktně rozlišovat mezi pojmy jako makro či funkce nebo procedura, za což se programátorským puristům omlouvám. Většina maker používaných v ANSYS Fluent pro definici uživatelských funkcí totiž v zásadě představuje definici funkce. Například pro definici okrajových vlastních okrajových podmínek lze použít makro `DEFINE_PROFILE`, ale v souboru `udf.h` lze najít následující řádek

```
#define DEFINE_PROFILE(name, t, i) void name(Thread *t, int i)
```

ze kterého je zřejmé, že toto makro se při použití rozvine do definice funkce s názvem `name`, jejíž návratový typ je `void`. Vedle zmíněných definic uživatelských funkcí lze v hlavičkových souborech najít i řadu obyčejných definic (maker) typu

```
#define M_PI 3.14159265358979323846
#define SQR(a) ((a)*(a))
```

Pokud člověk používá nějaké matematické funkce, je dobré načítat i hlavičkový soubor `math.h`.

ANSYS Fluent nabízí možnost používat tzv. interpretované nebo kompilované uživatelské funkce. Obecně je doporučeno používat kompilované uživatelské funkce, protože jsou rychlejší a nemají některá omezení jako interpretované funkce. U interpretovaných funkcí je například přístup k datům řešiče omezen jen na předdefinovaná makra, nelze používat definice lokálních struktur, ukazatele na funkce, vícerozměrná pole, nelze je propojit s externími sdílenými knihovnamy, atp. Naopak interpretované funkce mohou být použity na systému, kde není k dispozici překladač jazyka C. Asi nejdůležitějším kritériem pro rozhodnutí, kterou z variant uživatel použije, je rychlost. Například, pokud budeme používat funkci, která definuje materiálové vlastnosti a bude tak volána pro každou buňku sítě, bude samozřejmě vhodnější kompilovaná funkce.

## 5.1 Typy uživatelských funkcí

Obecně je uživatelská funkce definována pomocí makra, které začíná slovem `DEFINE_`, za ním pak následuje typ funkce spolu s případnými parametry, se kterými bude uživatelská funkce volána. Prvním vstupním parametrem je název funkce, který bude viditelný v rámci programu ANSYS Fluent a lze jej navázat, například, na určitou materiálovou vlastnost, okrajovou podmínku atp.

```
DEFINE_TYP_FUNKCE(nazev, ... parametry ...)
{
    ...
}
```

Následuje na ukázkou výběr některých typů uživatelských funkcí (maker), které lze v ANSYS Fluent použít:

<code>DEFINE_PROPERTY</code>	definice materiálových vlastností
<code>DEFINE_PROFILE</code>	definice okrajových podmínek
<code>DEFINE_INIT</code>	definice počátečních podmínek
<code>DEFINE_SOURCE</code>	definice zdrojového členu v transportní rovnici
<code>DEFINE_ADJUST</code>	úprava řešených veličin (nebo jen použití pro případný post processing) před voláním další iterace
<code>DEFINE_ON_DEMAND</code>	zavolání příslušné funkce po výběru z menu programu ANSYS Fluent

DEFINE_EXECUTE_AT_END	funkce bude volána na konci iterace, v případě nestacionární simulace na konci časového kroku
DEFINE_EXECUTE_ON_LOADING	funkce bude zavolána při načítání zkompilované knihovny
DEFINE_RW_FILE	volání při čtení nebo ukládání vlastních informací do *.cas nebo *.dat souborů
DEFINE_DELTAT	vlastní specifikace časového kroku u nestacionárních simulací
DEFINE_HEAT_FLUX	definice tepelného toku na stěně
DEFINE_DIFFUSIVITY	definice difuzivity v transportní rovnici pro uživatelský skalár
DEFINE_VR_RATE	definice (objemové) reakční rychlosti pro jednu či více reakcí
DEFINE_TRANSIENT_PROFILE	definice časově proměnné podmínky pro zónu buněk (cell zone)

Vedle toho existuje celá řada dalších funkcí, které jsou více či méně specifické pro nějaký konkrétní typ úlohy (vícefázový systém, radiace, atp). Kompletní seznam lze najít v UDF manuálu [ANSYS Fluent, 2013b].

Uživatelské funkce (makra) lze rozdělit do dvou základních kategorií

- funkce automaticky volané pro každou buňku sítě
- funkce s cykly pro buňky či jejich plochy spadající do nějaké skupiny (zóny, vlákna – thread)

Do první kategorie patří makra používaná například pro definice materiálových vlastností, objemovou reakční rychlost, atp. Výhodou těchto funkcí je, že mezi vstupními parametry již je přímo odkaz na aktuální buňku sítě a případnou zónu (vlákno, thread), do které tato buňka spadá. V rámci funkce je pak spočtena nějaká hodnota, která tvoří návratovou hodnotu. Příkladem může být následující definice viskozity pomocí makra DEFINE\_PROPERTY, kde za prvním parametrem, představujícím název funkce, následuje index příslušné buňky `c` (typ `cell_t`), a dále pak parametr `ct`, představující odkaz na příslušnou zónu (thread), do které tato buňka spadá. Tyto dva parametry lze využít při zjištění základních veličin v dané buňce, například teploty pomocí makra `C_T`, jak je uvedeno v této ukázce.

```
DEFINE_PROPERTY(my_viscosity, c, ct)
{
    real temp, mu;
    temp = C_T(c, ct);
    if (temp > 300.0 )
        mu = 0.5;
    else
        mu = 1.0;
    return mu;
}
```

Tento typ uživatelské definice představuje funkci, která vrací nějakou hodnotu, viz `return mu`, na konci definice. Vedle toho existují typy uživatelských funkcí, kde jedním ze vstupních parametrů je odkaz na proměnnou (ukazatel, pointer), do které je nutné uložit výsledek. Příkladem může být následující definice reakční rychlosti

```

DEFINE_VR_RATE (name, c, t, r, Mw, omega, rate, rate_t)
{
    ...
    *rate = k1*ca*cb;
    *rate_t = ...
}

```

kde `rate` představuje ukazatel na proměnnou typu `real`, do které je nutné uložit hodnotu reakční rychlosti (zde se jedná o tzv. laminární reakční rychlost, parametr `rate_t` představuje reakční rychlost v turbulentním režimu).

## 5.2 Makra pro zjištění základních veličin

Ve výše uvedené ukázce definice viskozity je použito makro `C_T` pro zjištění teploty v aktuální buňce (elementu) sítě. Existuje celá řada dalších maker, které lze využít pro zjištění jiných veličin, jak je tlak, rychlost, atp.

<code>C_R(c, t)</code>	hustota
<code>C_P(c, t)</code>	tlak
<code>C_T(c, t)</code>	teplota
<code>C_U(c, t)</code>	složka rychlosti ve směru první souřadné osy ( $x, r, \dots$ )
<code>C_V(c, t)</code>	složka rychlosti ve směru druhé souřadné osy ( $y, \varphi, \dots$ )
<code>C_W(c, t)</code>	složka rychlosti ve směru třetí souřadné osy ( $z, \vartheta$ )
<code>C_K(c, t)</code>	kinetická energie turbulence ( $k$ )
<code>C_D(c, t)</code>	disipace kinetické energie turbulence ( $\varepsilon$ )
<code>C_MU_L(c, t)</code>	laminární viskozita
<code>C_MU_T(c, t)</code>	turbulentní viskozita
<code>C_UDSI(c, t, i)</code>	hodnota uživatelského skaláru s indexem $i$
<code>C_DUDX(c, t)</code>	derivace první složky rychlosti ( $u_x$ ) podle první souřadnice ( $x$ )
<code>C_DUDY(c, t)</code>	derivace první složky rychlosti ( $u_x$ ) podle druhé souřadnice ( $y$ )
<code>...</code>	

Zmíněná makra lze často použít i pro přiřazení nějaké hodnoty příslušné veličině, což se dá využít třeba při inicializaci

```

if ( ... )
    C_T(c, t) = 300.0;
else
    C_T(c, t) = 400.0;

```

Vedle zmíněných maker pro zjištění potřebných veličin uvnitř příslušné buňky jsou k dispozici i makra pro stanovení souřadnic, velikosti buňky, velikosti vektoru, atp.

<code>C_CENTROID(pos, c, t)</code>	souřadnice středu buňky $x, y, z$ budou uloženy do vektoru <code>pos</code>
<code>F_CENTROID(pos, c, t)</code>	souřadnice středu plochy (face) $x, y, z$ budou uloženy do vektoru <code>pos</code>

C_VOLUME (c, t)	spočte objem příslušné buňky sítě
F_AREA (A, f, t)	do A bude uložen normálový vektor příslušné plochy (face), velikost vektoru odpovídá velikosti plochy
NV_MAG (x)	spočte velikost vektoru x, ve 3-D podle vztahu $\text{sqrt}(x[0]*x[0]+x[1]*x[1]+x[2]*x[2])$

## 5.2.1 Gradienty základních veličin

Vedle hodnot základních veličin jako je tlak, teplota, rychlost atp. lze získat i hodnoty jejich derivací podle souřadnic, jiným slovem gradienty. Ty obecně představují vektory tří hodnot – derivací ve směru příslušných souřadnic. Jejich názvy se odvíjejí od názvu maker pro získání hodnot daných veličin, ke kterým se připojí `_G`. Například gradient teploty tedy můžeme získat pomocí `C_T_G(c, t)`, a protože se jedná o vektor, tak chceme-li se odkázat na některou z jeho složek, použijeme příslušný index, např. `C_T_G(c, t)[1]` (indexy nabývají hodnot, 0, 1, 2 pro 3-D případ). Následuje stručný souhrn maker pro stanovení gradientů u základních veličin (tlak, teplota, rychlost), další lze najít v manuálu [ANSYS Fluent, 2013b].

C_P_G (c, t)	gradient tlaku
C_T_G (c, t)	gradient teploty
C_U_G (c, t)	gradient složky rychlosti $u_1$
C_V_G (c, t)	gradient složky rychlosti $u_2$
C_W_G (c, t)	gradient složky rychlosti $u_3$
UDSI_G (c, t, i)	gradient uživatelského skaláru s indexem $i$

Problém může nastat, že pokud řešič hodnoty gradientů již pro další práci nepotřebuje, tak je uvolní z paměti a jejich hodnoty dále nejsou k dispozici. Tomu lze zamezit nastavením v textovém rozhraní Fluentu

```
solve/set/expert
...
Keep temporary solver memory from being freed? ... yes
```

Zmíněná makra pro získání hodnot gradientů mají jednu nechtěnost, a to je, že pokud s jejich pomocí budeme chtít zrekonstruovat hodnoty veličin v rámci dané buňky, například na stěně, tak můžeme dostat hodnoty, která jsou vyšší (nebo nižší), než hodnoty s sousedící buňce. To je z fyzikálního hlediska nesmysl, a pokud se tedy chceme těmto problémům vyhnout, je doporučeno použít varianty maker, v jejichž názvu je na konci `_RG` místo `_G`, například `C_T_RG(c, t)`. Tato makra hodnoty gradientů omezí tak, aby ke zmíněným nesrovnalostem nemohlo dojít.

Jestli jsou k dispozici příslušné gradienty v rámci nějaké uživatelské funkce, lze otestovat pomocí následující podmínky (standardně jsou po skončení výpočtu k dispozici jen gradienty rychlostí)

```
if (NULLP (THREAD_STORAGE (t, SV_T_G))) {
    Message0 ("gradient of T is available \n ");
    ...
}
```

Obecně platí, že pokud definujeme uživatelskou funkci pro zdrojový nebo nějaký jiný člen v rovnici energie, tak je zde k dispozici i gradient teploty. Pokud však máme uživatelskou funkci pro jinou veličinu, například uživatelský skalár, tak v ní gradient teploty není viditelný.

## 5.2.2 Zprůměrované hodnoty u nestacionárních simulací

ANSYS Fluent si u nestacionárních simulací ukládá součet (integrál) dané veličiny za příslušný časový úsek, proto je nutné tuto hodnotu vydělit velikostí příslušného časového úseku. K průměrným hodnotám se pak dá dostat s pomocí makra C\_STORAGE\_R, například

```
P_mean = C_STORAGE_R(c,t, SV_P_MEAN)/delta_time_sampled;
U_mean = C_STORAGE_R(c,t, SV_U_MEAN)/delta_time_sampled;
T_mean = C_STORAGE_R(c,t, SV_T_MEAN)/delta_time_sampled;
...
```

## 5.3 Smyčky (cykly)

V některých případech není vůbec třeba žádné cykly používat, protože daná uživatelská funkce (makro) je automaticky volána pro každou (vnitřní) buňku sítě. To je případ třeba definice materiálových vlastností (makro DEFINE\_PROPERTY) nebo reakční rychlosti (DEFINE\_VR\_RATE). V jiných případech je však nutné projít všechny buňky (nebo plochy) spadající do nějaké skupiny (vlákna, zóny) buněk. Například u definice vlastní funkce pro okrajové podmínky na nějaké stěně je jedním ze vstupních parametrů odkaz na vlákno buněk, které je nutné celé v nějakém cyklu projít. Například v následující ukázce je použit cyklus begin\_f\_loop(f,tf) pro všechny plochy z daného vlákna buněk tf, které je druhým vstupním parametrem uvedené procedury, při nastavení teploty na stěně v závislosti na souřadnici  $x$ .

```
DEFINE_PROFILE(myWallTemp, tf, var)
{
    real temp, x;
    real pos[ND_ND]; /* ND_ND = 3 pro 3-D pripad, 2 pro 2-D */
    face_t f;

    begin_f_loop(f,tf) /* cyklus pres vsechny plochy (faces) */
    {
        /* z vlakna bunek tf (typ Thread) */
        F_CENTROID(pos,f,tf); /* ulozi souradnice do pos[] */
        x = pos[0]; /* souradnice x */
        temp = 300. + 100.*sin(200.*x);
        F_PROFILE(f,tf,var) = temp;
    }
    end_f_loop(f,tf)
}
```

Třetí vstupní parametr `var` představuje index proměnné, se kterou je tato definice spjatá, například jestli se jedná o tlak, teplotu, rychlost, atp. Její hodnota je automaticky nastavena při definici okrajové podmínky v ANSYS Fluent. Makro F\_PROFILE je zde pak použito pro nastavení hodnoty dané proměnné.

Existuje několik kategorií maker používaných v cyklech. Jedna se zaměřuje na cykly přes všechna vlákna buněk (nebo ploch) v nějaké doméně. Jestli se jedná o buňky nebo plochy je rozlišeno písmenem `c` nebo `f` na konci názvu.



```

thread_loop_c(t,d)
{
  ... /* cyklus pres vsechna vlakna bunek v domene d */
}

thread_loop_f(t,d)
{
  ... /* cyklus pres vsechna vlakna ploch (faces) v domene d */
}

```

Další kategorií jsou cykly, které procházejí již jen dané vlákno (thread) buněk nebo ploch. Toto vlákno může být jedním ze vstupních parametrů uživatelské funkce, příklad viz makro `DEFINE_PROFILE` výše. Jedná se zase o dvojici maker, jedna je zaměřena na buňky (cells), druhá na plochy (faces). V názvu je to rozlišeno písmeny `c` nebo `f`.

```

begin_c_loop(c,t)
{
  ... /* cyklus pres vsechny bunky c ve vlaknu t */
}
end_c_loop(c,t)

begin_f_loop(f,t)
{
  ... /* cyklus pres vsechny plochy f ve vlaknu t */
}
end_f_loop(f,t)

```

Tyto cykly mohou být vnořeny do cyklů přes vlákna buněk či ploch v doméně, například při definici počátečních podmínek, kde je pro záporné souřadnice ve směru osy  $x$  nastavena jiná teplota než pro kladné hodnoty souřadnice  $x$ .

```

DEFINE_INIT(my_init_temp, d)
{
  cell_t c;
  Thread *ct;
  real pos[ND_ND], x;

  thread_loop_c(ct,d) /* cyklus pres vsechna vlakna v domene d */
  {
    begin_c_loop(c,ct) /* cyklus pres vsechny bunky ve vlaknu ct */
    {
      C_CENTROID(pos,c,ct); x = pos[0];
      if(x < 0.0)
        C_T(c,ct) = 300.;
      else
        C_T(c,ct) = 400.;
    }
    end_c_loop(c,ct)
  }
}

```

## 5.4 Uživatelské skaláry (UDS)

ANSYS Fluent umožňuje pomocí UDF maker (funkcí) nadefinovat dokonce celé transportní rovnice, které budou řešeny společně se standardními transportními rovnicemi spjatými s tokem tekutiny, přenosem energie či hmoty. Obecný tvar této rovnice může vypadat následovně

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(F_i\phi) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x_i}\right) + \dot{\phi}^{(g)} \quad (5.1)$$

a pomocí uživatelsky definovaných maker lze popsat jednotlivé členy v této rovnici. Například pomocí makra

```
DEFINE_UDS_UNSTEADY (udf_name, c, t, i, api, su)
```

lze nadefinovat první člen na levé straně rovnice (5.1), představující změnu bilancované veličiny s časem. Tuto funkci lze pak využít v nastavení *Unsteady function* v dialogovém boxu pro příslušný UDS skalár, viz obr. 5.4. Pokud chceme použít standardní definici, ponecháme v nastavení hodnotu *default*. U stacionárních případů není tento člen součástí řešené rovnice.

Podobně pro druhý člen na levé straně rov. (5.1) existuje makro

```
DEFINE_UDS_FLUX (udf_name, c, t, i)
```

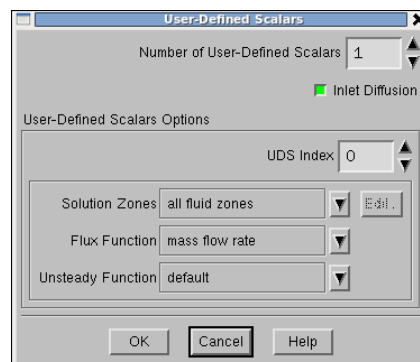
kterým lze ovlivnit podobu konvektivního členu v této transportní rovnici (přesněji tedy jen tok  $F_i$  uvnitř derivace tohoto členu podle prostorové souřadnice). Ponecháme-li v nastavení UDS skaláru pro *Flux Function* implicitní hodnotu *mass flow rate*, bude použita obvyklá definice

$$F_i = \rho u_i \quad (5.2)$$

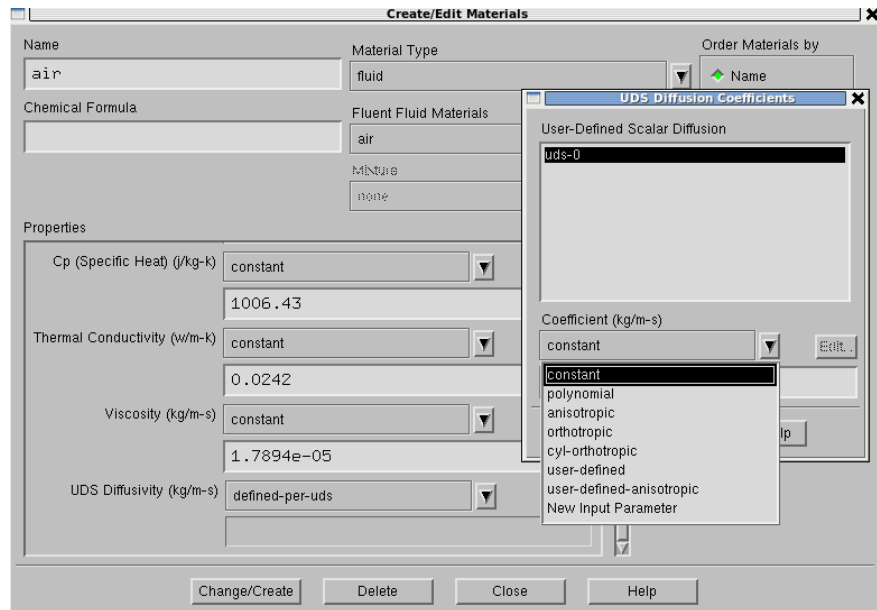
Je možné také použít v nastavení této položky hodnotu *none*, která pak tento člen z řešené rovnice zcela vyřadí.

Na pravé straně rov. (5.1) se v prvním členu vyskytuje součinitel  $\Gamma$ , který představuje obdobu přenosu dané veličiny na molekulární úrovni (tepelná vodivost v přenosu tepla, difuzní součinitel v přenosu hmoty). Lze jej nastavit různě, viz obrázek 5.5 ukazující všechny dostupné položky v menu při nastavení *UDS Diffusivity* daného materiálu. Vedle nastavení konstantních hodnot, ať již izotropních či anizotropních, jsou zde dvě možnosti použití uživatelských funkcí. Buď se jedná o uživatelskou funkci definující izotropní (tj. ve všech směrech stejnou) definici součinitele  $\Gamma$  pomocí makra

```
DEFINE_DIFFUSIVITY (name, c, t, i)
```



Obr. 5.4: Dialogový box pro nastavení uživatelského skaláru v ANSYS Fluent.



Obr. 5.5: Dialogový box pro nastavení uživatelského skaláru v ANSYS Fluent.

nebo je zde možnost nadefinovat anizotropní variantu součinitele  $\Gamma$ , která je představována v obecném trojrozměrném případě maticí  $3 \times 3$ . K tomu lze využít následující makro

```
DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY(name, c, t, i, dmatrix)
```

Poslední člen na pravé straně rov. (5.1) představuje zdrojový člen v této rovnici. ANSYS Fluent poskytuje makro

```
DEFINE_SOURCE (name, c, t, dS, eqn)
```

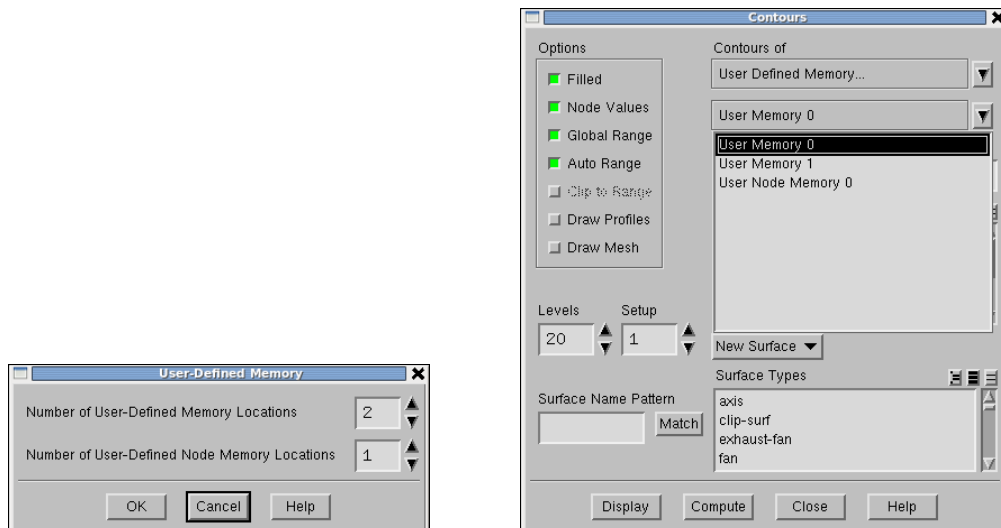
které je obecně použitelné nejenom při definici uživatelského skaláru, ale i v jiných rovnicích (přenos hybnosti, energie, rovnice pro kinetickou energii turbulence, atp.).

Pokud chceme zjistit nebo nastavit hodnotu uživatelského skaláru v nějaké buňce, lze k tomu použít makro  $C\_UDSI(c, t, i)$ . Pro stanovení gradientu je k dispozici makro  $C\_UDSI\_G(c, t, i)$ .

### 5.4.1 Uživatelské veličiny (UDM)

ANSYS Fluent poskytuje možnost nadefinovat si další veličiny (User Defined Memory, UDM), do kterých lze ukládat v rámci uživatelských funkcí nějaké hodnoty a následně je, třeba v rámci post processingu, číst a dále zpracovávat. Jejich vytvoření lze provést v menu *Define – User-Defined – Memory*, viz obr 5.6. Celkem lze definovat až 500 vlastních veličin (UDM), které jsou alokovány buď pro jednotlivé buňky nebo plochy sítě, a nebo pro uzly sítě. Pro ukládání a čtení existuje několik základních maker:

- |                    |  |
|--------------------|--|
| $C\_UDMI(c, t, i)$ | uložení nebo přečtení hodnoty uživatelské proměnné s indexem $i$ v buňce $c$ , spadající do vlákna buněk $t$         |
| $F\_UDMI(f, t, i)$ | uložení nebo přečtení hodnoty uživatelské proměnné s indexem $i$ na ploše (face) $f$ , spadající do vlákna buněk $t$ |
| $N\_UDMI(n, i)$    | uložení nebo přečtení hodnoty uživatelské proměnné s indexem $i$ v uzlu (node) $n$                                   |



Obr. 5.6: Vlevo – dialogový box s definicí uživatelských veličin (User Defined Memory). Vpravo - použití při vykreslování kontur definované veličiny.

Následuje ukázka uživatelské definice, která uloží do uživatelské proměnné s indexem 0 hodnotu ozáření odpovídající dané souřadnici podle Beer-Lambertova zákona (viz rov. 7.13). Tuto hodnotu by pak šlo využít například uvnitř funkce popisující reakční rychlost, viz kapitola 7.3.1 na straně 91, a nebylo by tak nutné při nestacionární simulaci vždy znovu závislost na souřadnici vypočítávat (pokud tedy přijmeme předpoklad, že nezávisí na čase). Pokud je cílem této funkce urychlení výpočtu, je v tomto směru její přínos prakticky zanedbatelný, protože se jedná o velice jednoduchou závislost. Při vlastních simulacích bylo urychlení do 2 %, takže využití této definice má v tomto případě význam spíše jen v oblasti post processingu.

```

DEFINE_ON_DEMAND (my_UDM)
{
  Thread *tc; cell_t c; Domain *d;
  real pos[ND_ND]; real z, I;

  d = Get_Domain(1);
  thread_loop_c(tc,d)
  {
    begin_c_loop(c,tc)
    {
      C_CENTROID(pos,c,tc);
      z = pos[1];
      I = U0*exp(-277.26*z);
      C_UDMI(c,tc,0) = I;
    }
    end_c_loop(c,tc)
  }
}

```

Další možnost využití uživatelských veličin leží v post processingu gradientů, viz kap. 5.2.1 na straně 49, které jinak normálně nejsou k dispozici (standardně jsou po skončení výpočtu k dispozici jen gradienty rychlostí). Během iteračního procesu je lze v rámci nějakých uživatelských funkcí ukládat do uživatelských proměnných, odkud je pak lze po skončení výpočtu přečíst.

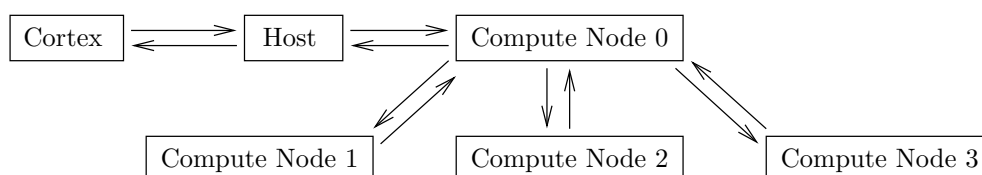
```

C_UDMI(c,t,0) = NV_MAG( C_T_G(c,t) );
C_UDMI(c,t,1) = NV_MAG( C_UDSI_G(c,t,0) );

```

## 5.5 Paralelní výpočty a uživatelské funkce

Paralelní výpočty k CFD simulacím neodmyslitelně patří, protože jedině tak je možné realizovat výpočty složitých a velkých problémů. Principiálně se jedná o rozdělení veliké úlohy na několik menších, které pak běží současně (paralelně) na více procesorech (jádrech, počítačích, ...). V některých případech to žádné komplikace v uživatelských definicích nepřináší, například pokud máme vlastní definici nějaké látkové vlastnosti, která se volá pro každou buňku celé sítě, nemusíme se v zásadě o nic starat. Pokud však chceme třeba v rámci post processingu sečíst hodnotu nějaké veličiny přes celou doménu, musíme již paralelní běh vzít do úvahy. ANSYS Fluent se při paralelním běhu třeba na 4 procesorech (jádrech, uzlech) skládá z celkem 6 procesů, viz obr. 5.7.



Obr. 5.7: Procesy programu ANSYS Fluent při paralelním běhu na čtyřech procesorech (jádrech).

Jedním z procesů je `cortex`, který se stará o uživatelské rozhraní (textové nebo grafické). Dalším procesem je `host`, který obstarává jednak spuštění samotných výpočetních procesů na výpočetních uzlech, a pak i komunikaci mezi výpočetním uzlem 0 a `cortexem`. Výpočetní uzly komunikují s uzlem 0, kterému v případě potřeby mohou předat třeba dílčí součty nějaké veličiny, a z něj se pak tato informace může dále dostat na řídicí proces `hosta` a od něj pak k uživatelskému rozhraní.

Pro rozlišení, na kterém z běžících procesů se v určitém okamžiku v kódu uživatelské funkce nacházíme, lze použít podmíněné direktivy spolu s makry, která nabývají různých hodnot.

```
#if RP_HOST
  /* kod, který pobezi jen na hostu */
#endif
#if RP_NODE
  /* kod, který pobezi jen na vypocetnim nodu */
#endif
#if PARALLEL
  /* kod, který pobezi jen na hostu a vypocetnim nodu */
#endif
```

Často jsou užitečnější negace uvedených podmínek

```
#if !RP_HOST
  /* kod, který pobezi jen na nodech, pripadne
     pri neparalelnim (seriovem) spusteni */
#endif
#if !RP_NODE
  /* kod, který pobezi jen na hostu, pripadne
     pri neparalelnim (seriovem) spusteni */
#endif
#if !PARALLEL
  /* kod, který pobezi jen pri neparalelnim (seriovem) spusteni */
#endif
```

Pokud bychom v rámci nějaké uživatelské funkce prováděli nějaký součet přes všechny buňky, například

```

DEFINE_ON_DEMAND(mesh_size)
{
    Domain *d; cell_t c; Thread *t;
    int sum = 0;

    d = Get_Domain(1);
    t = Lookup_Thread(d, 2);

    begin_c_loop (c,t)
    {
        sum++;
    }
    end_c_loop (c,t)
    Message("id: %-8d sum: %d \n",myid, sum);
}

```

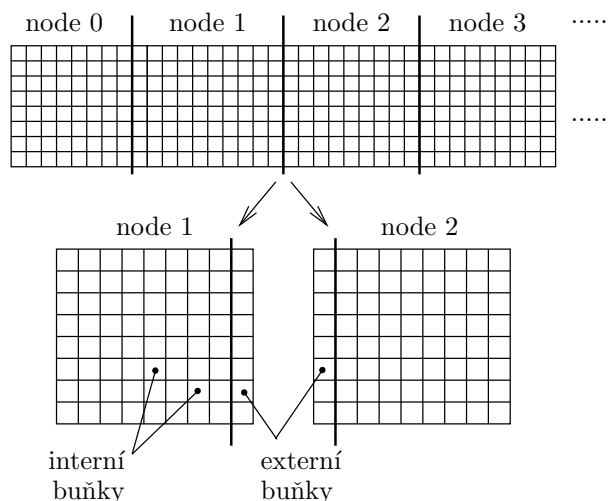
tak v textovém rozhraní ANSYS Fluent můžeme dostat něco jako

```

id: 999999    sum: 0
id: 0         sum: 72
id: 1         sum: 72
id: 2         sum: 72
id: 3         sum: 72

```

Řádek s `sum: 0` se vztahuje k procesu `host`, který nemá přiřazena žádná data (lze jej identifikovat pomocí proměnné `myid` s hodnotou 999999). Další řádky se vztahují k jednotlivým výpočetním procesům (uzlům) s indexy 0...3. Každý z těchto procesů provede cyklus přes všechny buňky dostupné na daném výpočetním uzlu a vypíše hodnotu součtu z proměnné `sum`, a jejich sečtením bychom v tomto případě mohli dostat velikost celé sítě. Nicméně výsledek nebude správný (bude větší), protože ANSYS Fluent při rozdělování sítě na jednotlivé výpočetní uzly k nim přidává i buňky z druhé strany dělicího rozhraní, aby se zde snadněji počítaly veličiny (např. derivace), které potřebují hodnoty z druhé strany tohoto rozhraní (viz obr. 5.8). A cyklus `begin_c_loop` je prováděn i přes tyto přidávané „externí“ buňky. Lze se tomu vyhnout použitím modifikované verze tohoto cyklu `begin_c_loop_int`, který je prováděn pouze přes „interní“ buňky na daném uzlu (procesu), viz následující kód



Obr. 5.8: Ilustrace paralelního výpočtu a jeho rozdělení na více procesorů, jader, nebo počítačů, ukazující rozdíl mezi externími a interními buňkami sítě.

```

...
begin_c_loop_int (c,t)
{
    sum++;
}
end_c_loop_int (c,t)
Message("id: %-8d sum: %d \n",myid, sum);

```

To by nám již mělo poskytnout správné hodnoty za jednotlivé výpočetní uzly (procesy), jejichž sečtením dostaneme správnou hodnotu odpovídající celkovému počtu buněk sítě.

```

id: 999999  sum: 0
id: 0      sum: 64
id: 1      sum: 64
id: 2      sum: 64
id: 3      sum: 64

```

Pokud bychom se chtěli vyhnout obdobným problémům u cyklů přes plochy buněk, tak lze použít obdobný cyklus jen přes plochy interních buněk, nebo existuje makro `PRINCIPAL_FACE_P`, které vrací kladnou hodnotu v případě, že se jedná o plochu interní buňky.

```

begin_f_loop_int (f,t)
{
    ...
}
end_f_loop_int (f,t)
/* nebo */
begin_f_loop (f,t)
{
    if ( PRINCIPAL_FACE_P(f,t) ) {
        ...
    }
}
end_f_loop (f,t)

```

Protože asi nechceme sčítat ručně dílčí součty z jednotlivých výpočetních procesů, lze využít makra (funkce), která si je mezi jednotlivými uzly vymění a sečtou automaticky. Existuje makro `PRF_GISUM1` pro čísla typu `int` a makro `PRF_GRSUM1` pro čísla s pohyblivou plovoucí čárkou typu `real` (typ `float` nebo `double` ve standardním jazyku C, podle toho, jakou verzi Fluentu pustíme, jestli `single` nebo `double precision`). Obecně má smysl tato makra používat jen na výpočetních uzlech, což lze zajistit pomocí direktivy `#if RP_NODE`.

```

int sum = 0; real rsum = 0.0;
...
#if RP_NODE
sum = PRF_GISUM1(sum);
rsum = PRF_GRSUM1(rsum);
#endif
Message("id: %-8d sum: %d \n",myid, sum);

```

Výsledek by pak mohl pro náš ukázkový příklad vypadat následovně

```

id: 999999  sum: 0
id: 0      sum: 256
id: 1      sum: 256
id: 2      sum: 256
id: 3      sum: 256

```

Je zde vidět, že na každém z výpočetních uzlů je nyní stejná hodnota, odpovídající součtu všech buněk sítě. Existují i varianty, které při těchto operacích mohou najednou zpracovat více proměnných, od předchozího se liší jinou číslicí na konci názvu, která indikuje, kolik hodnot se má zpracovat, například

```
PRF_GISUM2(sum1, sum2);
PRF_GRSUM3(x1, x2, x3);
PRF_GRSUM3(rsum[0], rsum[1], rsum[2]);
```

Další varianty PRF\_GISUM a PRF\_GRSUM mohou zpracovat součty pro pole s několika prvky, kde je nutné vedle počtu prvků pole přidat i další pole (*iwork* v následující ukázce), které je používáno danou procedurou pro dočasné uložení potřebných hodnot.

```
real rsum[3] = { 0., 0., 0. }; real iwork[3]
...
rsum = PRF_GRSUM(rsum, 3, iwork);
...
```

Vedle součtů existují makra, která dokáží analogicky vyhledávat největší či nejmenší hodnoty. Obecně má smysl tato makra použít pouze na výpočetních uzlech, což lze zajistit pomocí direktivy `#if RP_NODE`. Pokud navíc chceme výsledek vypsát pouze na prvním výpočetním uzlu (s indexem 0), lze k tomu použít příkaz `Message0` místo `Message`.

```
real T, Tmin = 0; real Tmax = 0.0;
...
T = C_T(c, t);
if ( T < Tmin )
    Tmin = T;
if ( T > Tmax )
    Tmax = T;
...
#if RP_NODE
    Tmin = PRF_GRLOW1(Tmin);
    Tmax = PRF_GRHIGH1(Tmax);
#endif
...
Message0("Tmin: %.4f, Tmax: %.4f\n", Tmin, Tmax);
```

Zmíněná makra typu PRF\_GISUM zajistí příslušnou komunikaci mezi jednotlivými výpočetními uzly automaticky. Někdy je však nutné předat nějaká data mezi výpočetními uzly a hostem, ať již jedním druhým směrem. K tomu lze použít makra, jejichž názvy vypadají nějak takto

```
host_to_node_TYPE_NUM(val_1, val_2, ..., val_num);
node_to_host_TYPE_NUM(val_1, val_2, ..., val_num);
```

kde za `TYPE` dosadíme typ proměnné, která je mezi procesy přenášena, (např. `int`, `real`), a za `NUM` se dosadí počet těchto proměnných. Varianta makra `host_to_node` přenáší data na všechny výpočetní uzly, zatímco varianta `node_to_host` přenáší data pouze z prvního výpočetního uzlu (s indexem 0)! Oba typy těchto maker není nutné uzavírat do podmíněných direktiv typu `#if RP_NODE` apod., protože veškeré situace jsou ošetřeny uvnitř jejich definic.

Nejčastější využití maker typu `host_to_node` je v situacích, kdy chceme přenést nějakou hodnotu parametru případně okrajové podmínky z hosta na všechny výpočetní uzly, například



```

DEFINE_INIT(init_temp, domain)
{
    real initTemp;
    Thread *tc;
    cell_t c;

#ifdef !RP_NODE
    /* precteni hodnoty parametru na hostu a pri seriovem behu */
    initTemp = RP_Get_Real("my-init-temp");
#endif

    host_to_node_real_1(initTemp); /* prenese data z hosta na vypocetni uzly */
                                   /* neprovede nic pri seriovem behu */
#ifdef !RP_HOST /* tyto cykly neni treba provadet na hostu */
    thread_loop_c(tc, domain)
    {
        begin_c_loop(c, tc)
        {
            C_T(c, tc) = initTemp;
        }
        end_c_loop(c, tc)
    }
#endif
}

```

Opačným směrem, tj. z výpočetních uzlů na hosta, můžeme přenášet nějaké hodnoty, které jsou výsledkem třeba součtových operací nějakých proměnných. Například, když navážeme na výše uvedený příklad hledání minimální a maximální teploty, tak za tím může následovat

```

...
node_to_host_real_2(Tmin, Tmax)

#ifdef !RP_NODE /* na hostu nebo pri seriovem behu */
    Message("Tmin: %.4f, Tmax: %.4f\n", Tmin, Tmax);
#endif

```

V tomto konkrétním příkladě to ale není zcela nezbytné, spočtené výsledky budou stejné jako výsledky zobrazené pomocí příkazu `Message0`, který je při paralelním běhu spuštěn pouze na prvním výpočetním uzlu (s indexem 0).

## Další makra

Zde ještě následuje stručný výčet některých dalších užitečných maker, která lze použít v rámci definic uživatelských funkcí a která nebyla uvedena (vysvětlena) v předchozím textu.

<code>ND_ND</code>	počet rozměrů daného problému, 2 pro 2-D, 3 pro 3-D
<code>NULLP(t)</code>	vrací hodnotu <code>true</code> , pokud ukazatel <code>t</code> má hodnotu <code>NULL</code>
<code>NNULLP(t)</code>	vrací hodnotu <code>true</code> , pokud ukazatel <code>t</code> nemá hodnotu <code>NULL</code>
<code>FLUID_THREAD_P(t)</code>	vrací hodnotu <code>true</code> , pokud ukazatel <code>t</code> odkazuje na vlákno buněk odpovídající tekutině (fluid)
<code>Data_Valid_P()</code>	vrací hodnotu <code>true</code> , pokud jsou k dispozici napočítaná data (před inicializací ještě k dispozici nejsou)



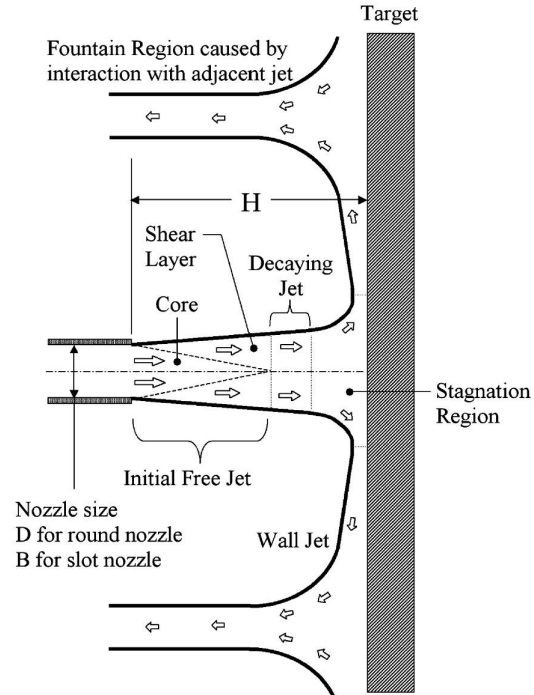
## Kapitola 6

# Přenos tepla v impaktním proudu a míchaných nádobách

V řadě průmyslových aparátů a zařízení lze narazit na geometrické uspořádání, kde proud tekutiny dopadá (nejčastěji) kolmo na nějakou plochu. V takovém případě mluvíme o tzv. impaktním proudu. Ten představuje velmi efektivní způsob přenosu energie (tepla) či hmoty, který lze využít v mnoha průmyslových aplikacích. Proud tekutiny dopadající kolmo na plochu poskytuje až třikrát větší součinitele přestupu tepla ve srovnání s uspořádáním, kdy je proud tekutiny orientován podélně s teplosměnnou plochou [Zuckerman a Lior, 2006] (pokud tedy pomineme případy s fázovými změnami). Jedním z uváděných důvodů zvýšeného přenosu tepla či hmoty je výrazně menší tloušťka mezní vrstvy než u podélného uspořádání. V této práci se budeme zaměřovat na případ tzv. vnořeného impaktního proudu, kdy je okolní tekutina stejná jako tekutina vycházející z trysky.

Proud tekutiny vycházející z trysky může být generován různými způsoby, které pak mohou mít větší či menší vliv na celý proces, protože ovlivní proudové pole a následně i teplotní nebo koncentrační profily. Nejzákladnější případ představuje kruhovou trysku, na jejímž výstupu je v zásadě rychlostní profil odpovídající vyvinutému profilu v trubce. Další možností je použití štěrbin s kruhovým průřezem místo trubkové trysky, kdy je rychlostní profil více podobný profilu tzv. pístového toku. Lee a Lee [2000] uvádějí, že v takovém případě jsou dosahovány vyšší intenzity přenosu tepla. V praktických aplikacích se často setkáme s případy, kde je impaktní proud generován pomocí „rotačních“ zařízení jako jsou například větráky při chlazení elektronických součástek. Podobným případem je i míchaná nádoba, kde je impaktní proud tekutiny generován axiálním míchadlem a dopadá na dno nádoby. Na rozdíl od „klasických“ impaktních proudů je v takových případech navíc přítomna rotační (tangenciální) složka rychlosti, která významně ovlivní rychlostní pole. Příklad míchané nádoby navíc představuje příklad tzv. omezeného impaktního proudu, kdy se proud tekutiny pod dopadu na rovinnou plochu nemůže podél ní rozpínat do nekonečna, ale je omezen geometrií nádoby – svislými stěnami, kde proud tekutiny opětovně změni směr. Podobné chování se vyskytuje i u klasických impaktních proudů, kdy máme vedle sebe uspořádány řady trysek, které se navzájem omezují.

Většina průmyslových aplikací impaktního proudu spadá do oblasti turbulentního režimu proudění. Pokud se zaměříme na modelování takových případů pomocí přístupu RANS, je třeba si uvědomit, že ne každý z modelů turbulence v této kategorii je vhodný pro tento případ. V impaktním proudu je totiž několik značně rozdílných oblastí proudění (viz obr. 6.1), což klade větší nároky na „kvalitu“ modelu. Je například známá anomálie u výsledků pro impaktní proud [Pope,



Obr. 6.1: Různé oblasti v impaktním proudu dle [Zuckerman a Lior, 2006].

1978; Wilcox, 2006], kdy mnohé modely turbulence (zejména  $k - \varepsilon$ ) predikují, že se impaktní proud vycházející z kruhové trysky rozšiřuje rychleji než impaktní proud z rovinné trysky. Experimentální data však ukazují přesný opak – zhruba o 10 % menší rozšiřování impaktního proudu u kruhové trysky.

## 6.1 Anizotropie v přenosu tepla

Jak bylo zmíněno v kapitole 3.3, RANS modely založené na turbulentní viskozitě a Boussinesqově aproximaci nejsou schopny postihnout anizotropii v tenzoru Reynoldsových napětí. Ta je v některých případech významná (hodně vířivé toky přítomné například v cyklónových odlučovačích, míchaných nádobách, vznik sekundárních vířů v kanálech s pravoúhlým průřezem, atp.), a pak je vhodné použít pokročilejší modely založené na transportních rovnicích pro Reynoldsova napětí (3.42), viz kapitola 3.3.2. Nicméně tyto rovnice se týkají pouze transportu hybnosti, tj. proudění tekutiny. Spolu s hybností však může docházet i k transportu dalších veličin jako je teplo (entalpie) nebo hmota (složky), viz rovnice (2.15) nebo (2.20). Pokud se jedná o turbulentní proudění a přenos tepla, zavedeme-li podobné rozdělení okamžité hodnoty teploty na časově zprůměrovanou hodnotu a flukтуаční složku jako tomu bylo pro vektory rychlostí nebo tlak (viz rov. 3.8)

$$T = \bar{T} + T' \quad (6.1)$$

můžeme po dosazení do jedné z forem Fourier-Kirchhoffovy rovnice, např. (2.19), dostat v tenzorovém tvaru následující

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho c_p \bar{T} \bar{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + 2\mu \Delta_{ij} \Delta_{ji} + \dot{Q}^{(g)} + \frac{\partial}{\partial x_i} (-\rho c_p \overline{u'_i T'}) \quad (6.2)$$

Poslední člen na pravé straně rovnice označovaný jako turbulentní tepelný tok je obdobou tenzoru Reynoldsových napětí. Tento člen je nutné nějakým způsobem popsat, aby byla tato

rovnice řešitelná. Ve většině případů je použita jednoduchá relace

$$-\rho c_p \overline{u_i' T'} = \frac{c_p \mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} \quad (6.3)$$

kde za turbulentní Prandtlovo číslo  $Pr_t$  je dosazena konstantní hodnota (0.85) a  $\mu_t$  je turbulentní viskozita (viz rov. 3.20). To je případ i RSM modelů v systému ANSYS Fluent. Takový přístup samozřejmě nemůže postihnout možnou anizotropii v turbulentním přenosu tepla, jak poukázal Dietz et al. [2007] a další autoři. Samozřejmě šlo by se vydat podobnou cestou jako u rovnice přenosu hybnosti, tj. formulovat transportní rovnice pro turbulentní tepelný tok, ale to by znamenalo dalších minimálně 6 rovnic a řadu parametrů, které by bylo nutné nějakým způsobem určit. Obecný tvar transportní rovnice pro turbulentní tepelný tok ukazuje přímou závislost na složkách tenzoru Reynoldsových napětí  $\overline{u_i' u_j'}$  (což samozřejmě nelze postihnout pomocí rovnice 6.3). Proto lze pro vylepšení výsledků simulací použít jednodušší přístup založený na tzv. (explicitních) algebraických modelech. Například Daly a Harlow [1970] navrhli následující poměrně jednoduchý model

$$-\overline{u_i' T'} = C_\theta \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}, \quad C_\theta = 0.3, \quad (6.4)$$

nebo Abe a Suga [2001] o něco složitější

$$-\overline{u_i' T'} = C_\theta \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_i' u_k'} A_{kj} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}, \quad C_\theta = 0.6, \quad A_{ij} = \frac{\overline{u_i' u_j'}}{k}. \quad (6.5)$$

V literatuře lze nalézt i značně složitější modely [Younis et al., 2005, 2007]. V ANSYS Fluent žádné z těchto modelů nejsou k dispozici, a tak v jedné z následujících kapitol bude ukázána jejich implementace pomocí uživatelských funkcí.

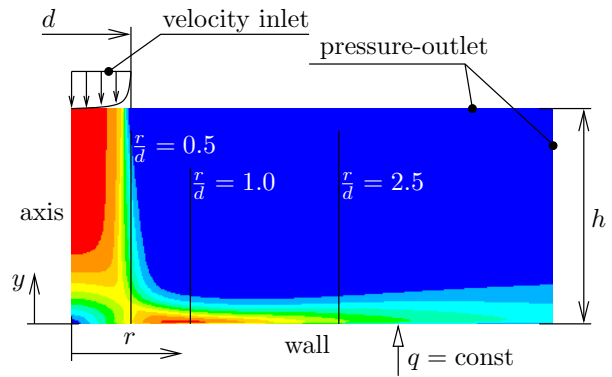
## 6.2 Simulace proudění a přestupu tepla v impaktním proudě

V systému ANSYS Fluent byla vytvořena 2-D geometrie odpovídající axisymetrickému případu impaktního proudě s kruhovou tryskou, jejíž schéma je na obrázku 6.2 (spolu s konturami velikosti rychlosti definované jako  $u_m = \sqrt{u_y^2 + u_r^2}$  pro případ  $Re = 23000$  a vzdálenost trysky od stěny  $h/d = 2$ ). V obrázku jsou vyznačené okrajové podmínky, které byly použity při následných simulacích. Na výstupu z trysky (velocity-inlet) byl ve většině případů použitý plně vyvinutý rychlostní profil pro danou hodnotu Reynoldsova čísla. Ten byl spočten v samostatném výpočtu pro příslušný model turbulence s využitím periodických okrajových podmínek, simulujících nekonečně dlouhou trubku. Maximální hodnota radiální souřadnice představující vnější poloměr geometrie byla  $r/d = 10$ .

Síť byla vytvořena v programu ANSYS Meshing tak, aby  $y^+$  na impaktované stěně bylo zhruba 1 a nebylo tak nutné používat stěnové funkce. Byla provedena analýza vlivu velikosti sítě na přesnost řešení pro tři různé velikosti (13000, 23000, 50000) a pro průměrnou hodnotu rychlosti podél přímky  $r/d = 1$  (viz obr. 6.2) byl vyhodnocen GCI index 3.3 % u sítě s největším počtem elementů (viz kapitola 4.3.2). Tato síť pak byla používána ve většině následných simulací.

Na obrázku 6.3 jsou vyobrazeny profily rychlostí podél tří různých přímek  $r/d = 0.5, 1.0, 2.5$  (viz obr. 6.2) a jejich závislost na bezrozměrné vzdálenosti od stěny  $y/d$  pro různé modely

Obr. 6.2: Schéma axisymetrické geometrie impaktního proudu s kruhovou tryskou s vyznačenými okrajovými podmínkami a konturami rychlosti  $u_m = \sqrt{u_y^2 + u_r^2}$  pro  $Re = 23000$  a  $h/d = 2$ .



turbulence dostupné v ANSYS Fluent. Výsledky simulací jsou porovnány s experimentálními daty [Cooper et al., 1993]. Na svislé ose je poměr velikosti rychlosti  $u_m$  v daném místě ku střední objemové rychlosti  $u_b$  proudu vytékajícího z trysky. Na levé straně obrázku jsou porovnány modely založené na Boussinesqově aproximaci, na pravé straně pak RSM modely schopné postihnout případné anizotropie v transportu složek tenzoru Reynoldsových napětí. Z obrázku je patrné, že RSM modely si nevedou příliš dobře ve srovnání s modely založenými na turbulentní viskozitě. Asi nejlépe experimentálním datům odpovídají výsledky pro třířnicový Intermittency Transition model [Menter et al., 2006, 2015; ANSYS Fluent, 2013a].

Obrázek 6.4 zobrazuje porovnání výsledků přestupu tepla v impaktním proudu pro různé modely turbulence v ANSYS Fluent s experimentálními daty Baughn a Shimizu [1989]; Yan [1993]. Porovnávanou hodnotou je Nusseltovo číslo

$$Nu = \frac{\alpha d}{\lambda} \quad (6.6)$$

V ANSYS Fluent je hodnota součinitele přestupu tepla  $\alpha$  vyhodnocována na základě vztahu

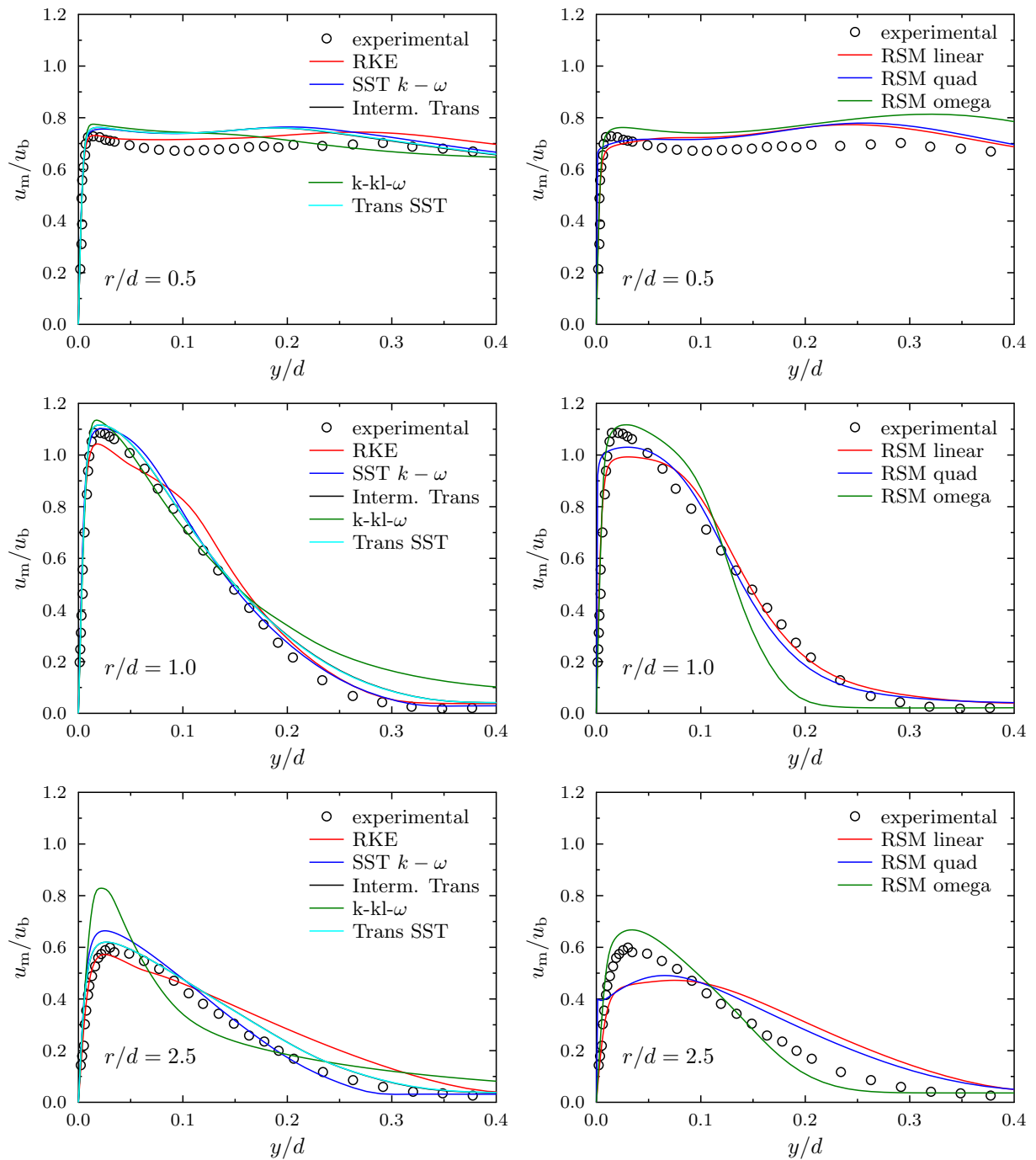
$$\alpha = \frac{q}{T_w - T_{ref}} \quad (6.7)$$

kde  $T_{ref}$  je referenční hodnota, která pro případ impaktního proudu odpovídá teplotě na výstupu z trysky, a  $T_w$  je teplota stěny. Hustota toku na stěně je pak dána gradientem teploty u stěny, který je na konci simulace známý,

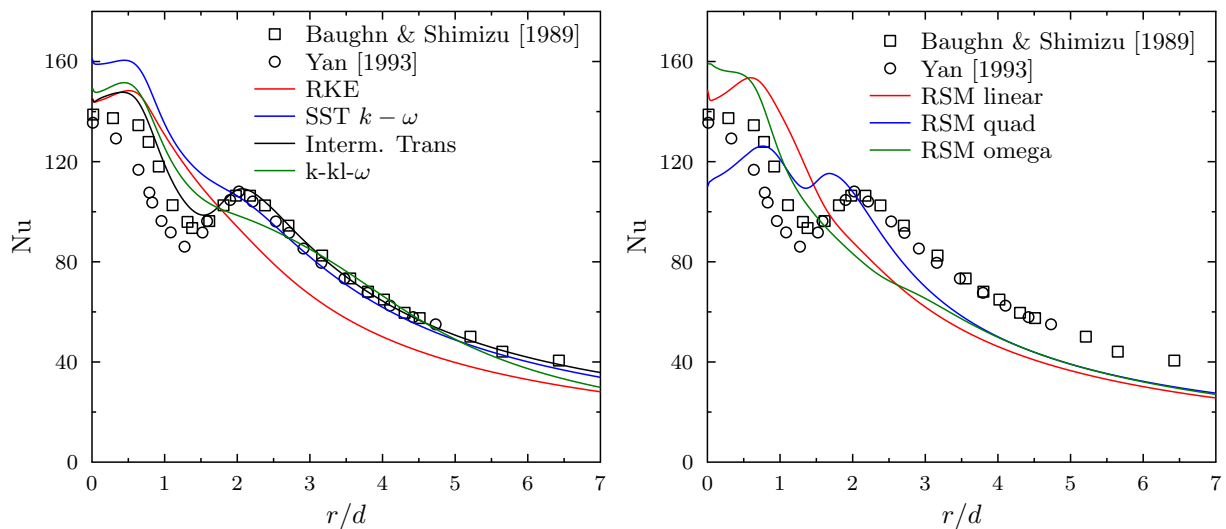
$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (6.8)$$

případně je definován okrajovou podmínkou konstantního tepelného toku  $q = konst$ . Tak tomu bylo v tomto případě, tudíž po provedené simulaci lze vyhodnotit profily teploty podél stěny a z rovnic 6.7 a 6.6 pak vyjádřit součinitel přestupu tepla a Nusseltovo číslo. Vyhodnocení lze provést přímo v ANSYS Fluent, je však nutné správně nastavit hodnotu referenční teploty (v tomto případě  $T_{ref} = 300 \text{ K}$ ) a případně charakteristický rozměr odpovídající průměru trysky ( $d = 20 \text{ mm}$ ), viz obr. 6.5.

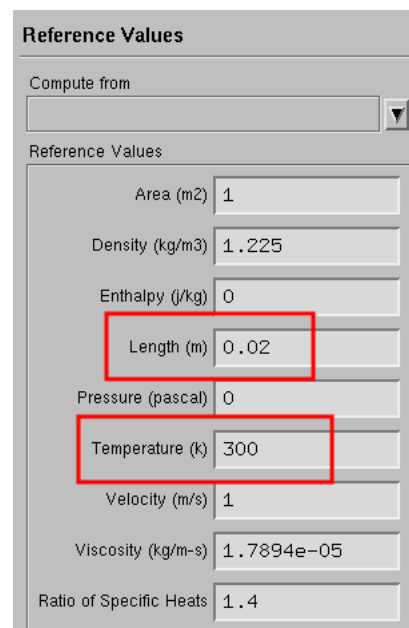
Nejlepší výsledky byly dosaženy pro přechodový Transition Intermittency model, u kterého bylo velmi dobře predikováno sekundární maximum Nusseltova čísla včetně jeho pozice  $r/d = 2.08$ , což je blízko hodnotě 1.97, kterou uvedl Uddin et al. [2013].



Obr. 6.3: Rychlostní profily velikosti rychlosti  $u_m = \sqrt{u_y^2 + u_r^2}$  v závislosti na vzdálenosti od impaktované stěny  $y/d$  v různých radiálních pozicích impaktního proudu. Ne levé straně je porovnání modelů založených na konceptu Boussinesqovy aproximace se skalární turbulentní viskozitou, na pravé straně pak RSM modely postihující případné anizotropie ve složkách tenzoru Reynoldsových napětí. Výsledky jsou porovnány s experimentálními daty [Cooper et al., 1993]. Vzdálenost trysky od stěny je  $h/d = 2$ , Reynoldsovo číslo  $Re = 23000$ .



Obr. 6.4: Porovnání experimentálních dat z Baughn a Shimizu [1989]; Yan [1993] se simulacemi pro různé modely turbulence,  $h/d = 2$ ,  $Re = 23000$ . Nalevo jsou modely založené na turbulentní viskozitě, napravo pak RSM modely dostupné v ANSYS Fluent.



Obr. 6.5: Dialogový box v ANSYS Fluent s referenčními hodnotami, kde je nutné nastavit charakteristický rozměr a referenční teplotu pro správné vyhodnocení součinitele přestupu tepla a Nusseltova čísla.



### 6.3 Implementace modelu pro turbulentní tepelný tok

Jak uvádí Dietz et al. [2007], jednoduchý vztah (6.3) pro popis turbulentního tepelného toku nemusí řadě případů (komplexních toků) správně postihnout možnou anisotropii v přenosu tepla. S odkazem na další autory [Bremhorst a Bullock, 1970; Kasagi et al., 1992; Kim a Moin, 1989] uvádí, že i v jednoduchém případě toku v potrubí je turbulentní přenos hmoty ve směru toku mnohem větší než v normálovém směru ke stěně, přestože je teplotní gradient ve směru toku zanedbatelný. Jednou z možností jak lépe popsat anisotropii v turbulentním tepelném toku je použití algebraických modelů, viz např. rovnice (6.4) nebo (6.5). ANSYS Fluent žádnou podobnou variantu neposkytuje, nicméně lze je implementovat s pomocí uživatelských funkcí.

Jednou z možností implementace anizotropního modelu by bylo nadefinovat zdrojový člen pomocí makra `DEFINE_SOURCE` tak, aby zahrnoval rozdíl mezi standardní definicí turbulentního tepelného toku (6.3) a definicí algebraického model podle např. rovnice (6.4). Základním problémem tohoto přístupu je, že by v rámci tohoto makra bylo nutné vyjadřovat prostorové derivace. To v ANSYS Fluent nelze jednoduše provést, proto byl zvolen přístup založený na definici nové transportní rovnice (User Defined Scalar, UDS), kterou ANSYS Fluent umí řešit společně s ostatními transportními rovnicemi pro hybnost, hmotu, atp. Obecná definice takové rovnice v ANSYS Fluent je velmi podobná obecné bilanci (2.5)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\bar{u}_i\phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + \dot{\phi}^{(g)} \quad (6.9)$$

Koeficient  $\Gamma$  může být obecně neizotropní tenzor druhého řádu. Pokud se budeme soustředit na bilanci entalpie, pro zjednodušení ještě ve stacionárním stavu a bez vnitřního zdroje tepla a disipace, můžeme po dosazení do rovnice (6.2) za definici turbulentního toku podle rovnice (6.4) dostat

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho c_p \bar{u}_i \bar{T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \lambda + \rho c_p C_\theta \frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_i u'_j} \right) \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right] \quad (6.10)$$

Porovnáním s obecnou rovnicí pro uživatelský skalár (6.9) pak můžeme vyjádřit definici jednak obecné veličiny

$$\phi = c_p \bar{T}, \quad (6.11)$$

a dále pak i součinitele  $\Gamma$

$$\Gamma_{ij} = \frac{\lambda}{c_p} \delta_{ij} + \rho C_\theta \frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_i u'_j}, \quad (6.12)$$

kde člen se skalární hodnotou součinitele tepelné vodivosti byl navíc vynásoben Kroneckerovým tenzorem, abychom u něj dodrželi izotropní představu tepelné vodivosti. Ostatně, kdybychom chtěli používat standardní definici turbulentního toku (6.3) tak, jak je používán v programu ANSYS Fluent, mohli bychom součinitel  $\Gamma$  definovat

$$\Gamma_{ij} = \left( \frac{\lambda}{c_p} + \frac{c_p \mu_t}{Pr_t} \right) \delta_{ij} \quad (6.13)$$

Za předpokladu konstantní hodnoty tepelné kapacity můžeme dostat formálně stejnou rovnici jako je (6.10) v případě, kdy za skalární veličinu použijeme definici  $\phi = \bar{T}$ . Stejná bude i definice součinitele  $\Gamma$ , rozdílly se však objeví v okrajových podmínkách. U předchozí definice (6.11) lze definovat konvektivní tok (na nějaké hranici) jako

$$q_1 = \rho \bar{u} \phi = \rho \bar{u} c_p \bar{T}, \quad (6.14)$$

Tabulka 6.1: Dvě možné definice uživatelského skaláru  $\phi$  a odpovídající rozdíly v definici okrajových podmínek.

definice skaláru	tepelný tok	hodnota
$\phi_1 = c_p \bar{T}$	$q_1 = \rho c_p \bar{u} \bar{T}$	$\phi_{1w} = c_p \bar{T}_w$
$\phi_2 = \bar{T}$	$q_2 = \rho \bar{u} \bar{T} = q_1 / c_p$	$\phi_{2w} = \bar{T}_w = \phi_{1w} / c_p$

s definicí  $\phi = \bar{T}$  bude však tok skalární veličiny jen

$$q_2 = \rho \bar{u} \bar{T} \quad (6.15)$$

Obdobné rozdíly se projeví i v případě definice okrajové podmínky pro hodnotu skalární veličiny, viz tabulka 6.1, kde jsou tyto rozdíly shrnuty. V následných simulacích byla využita definice uživatelského skaláru  $\phi = \bar{T}$  s ohledem na následný postprocessing, protože představuje přímo teplotu a není nutné jeho hodnotu v ANSYS Fluent nijak přepočítávat.

Pro definici součinitele  $\Gamma$  v rovnici (6.9) lze v programu ANSYS Fluent použít uživatelské makro `DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY`. Toto makro potřebuje při definici několik vstupních parametrů

```
DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (name, c, t, i, dmatrix)
```

s následujícím významem

name	název UDF funkce viditelný v rámci programu ANSYS Fluent
c	index buňky (cell index)
t	ukazatel na vlákno buněk (thread cell)
i	index rovnice uživatelsky definovaného skaláru (UDS)
dmatrix	matice anizotropního součinitele $\Gamma$

Pokud bychom chtěli ověřit chování UDS skaláru pro standardní izotropní součinitel podle rovnice (6.13), mohla by jeho definice vypadat následovně

```
DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (gamma_isoT, c, t, i, dmatrix)
{
    real gamma;

    real mu = C_MU_L(c, t);
    real mu_t = C_MU_T(c, t);
    real Pr_t = 0.85;

    gamma = LAMBDA / CP + mu_t/Pr_t;;
    dmatrix[0][0] = gamma;
    dmatrix[1][1] = gamma;
    dmatrix[0][1] = dmatrix[1][0] = 0.0;
    #if RP_3D
    dmatrix[2][2] = gamma;
    dmatrix[0][2] = dmatrix[2][0] = dmatrix[1][2] = dmatrix[2][1] = 0.0;
    #endif
}
```

Ve výše uvedeném kódu nejsou uvedeny číselné definice některých použitých veličin jako je součinitel tepelné vodivosti  $\lambda$  (LAMBDA), měrná tepelná kapacita  $c_p$  (CP), či hustota  $\rho$  (RHO). Ty byly ve všech případech uvažovány konstantní a byly definovány v záhlaví zdrojového souboru pomocí makra `#define`. V uvedené definici podmínka `#if RP_3D` vymezuje část kódu

pro případ 3-D geometrie, kdy má matice `dmatrix` odpovídající anizotropnímu součiniteli  $\Gamma$  rozměr 3 x 3. Ve 2-D případě se jedná pouze o 2 x 2, a díky této podmínce pak není nutné definovat dvě oddělené funkce pro 2-D a 3-D případ.

Pro algebraický model podle [Daly a Harlow, 1970], viz rov. (6.4), potřebujeme znát v daném místě hodnoty kinetické energie turbulence, její disipace, a samozřejmě i jednotlivé složky tenzoru Reynoldsových napětí. K tomu lze využít makra `C_K` (kinetická energie turbulence), `C_D` (disipace kinetické energie turbulence  $\varepsilon$ ), a dále pak sadu maker pro složky tenzoru Reynoldsových napětí `C_RUU`, `C_RUV`, `R_UW`, atp. Dvojice písmen z množiny U, V, W v jejich názvech odkazuje na první, druhou, nebo třetí složku vektoru rychlosti s indexy 1, 2 nebo 3 (v kartézském souřadném systému s indexy  $x$ ,  $y$ , a  $z$ ). Například `C_RUU` představuje složku  $u'_1 u'_1$  ( $u'_x u'_x$ ), `C_RUV` je  $u'_1 u'_2$  ( $u'_x u'_y$ ), `C_RUW` je  $u'_1 u'_3$  ( $u'_x u'_z$ ), atp. V obecném případě má tenzor Reynoldsových napětí 6 nezávislých složek (za předpokladu symetrie platí například  $u'_1 u'_2 = u'_2 u'_1$ ). Definici již skutečně anizotropního součinitele  $\Gamma$  podle rov. (6.4) lze tedy provést následovně

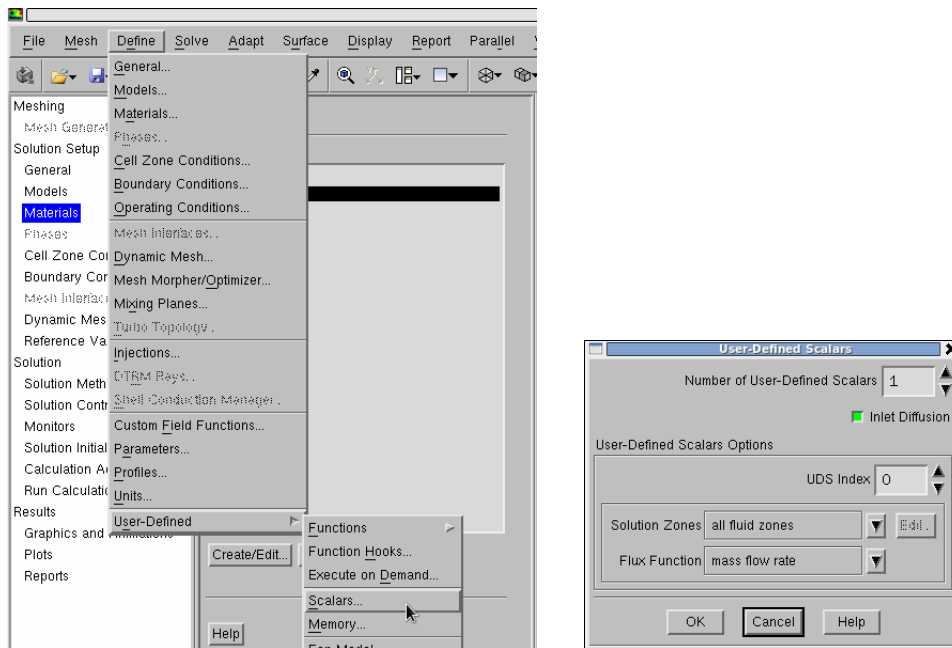
```
DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (gamma_DalyHarlow_eps, c, t, i, dmatrix)
{
    real k = C_K(c,t);
    real eps = C_D(c,t);
    gamma_DalyHarlow(c,t,i,dmatrix,eps,k);
}

void gamma_DalyHarlow(cell_t c, Thread *t, int i,
                    real dmatrix[ND_ND][ND_ND], real eps, real k)
{
    real Cth = 0.3;
    dmatrix[0][0] = LAMBDA/CP+RHO*Cth*k/eps*C_RUU(c,t);
    dmatrix[1][1] = LAMBDA/CP+RHO*Cth*k/eps*C_RVV(c,t);
    dmatrix[0][1] = RHO*Cth*k/eps*C_RUV(c,t);
    dmatrix[1][0] = dmatrix[0][1];
#ifdef RP_3D
    dmatrix[2][2] = LAMBDA/CP+RHO*Cth*k/eps*C_RWW(c,t);
    dmatrix[0][2] = RHO*Cth*k/eps*C_RUW(c,t);
    dmatrix[2][0] = dmatrix[0][2];
    dmatrix[1][2] = RHO*Cth*k/eps*C_RVW(c,t);
    dmatrix[2][1] = dmatrix[1][2];
#endif
}
```

Definice je rozdělena na dvě části, makro `DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY` a funkci (proceduru) `gamma_DalyHarlow`. Tuto funkci pak můžeme využít i pro modely  $k - \omega$ , kde nejprve přepočítáme specifickou disipaci kinetické energie turbulence  $\omega$  na disipaci kinetické energie  $\varepsilon$  podle rovnice (3.39), a pak lze využít již definovanou funkci `gamma_DalyHarlow`.

```
DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (gamma_DalyHarlow_omega, c, t, i, dmatrix)
{
    real omega = C_O(c,t);
    real k = C_K(c,t);
    real eps = 0.09*k*omega;
    gamma_DalyHarlow(c,t,i,dmatrix,eps,k);
}
```

V programu ANSYS Fluent pak musíme přidat UDS skalár, viz obrázek 6.6, jehož transportní rovnice (6.9) pak bude řešena simultánně spolu s dalšími transportními rovnice pro hybnost, teplotu, atp. Následně pak je nutné propojit definici součinitele  $\Gamma$  s položkou *UDS Diffusivity* pro příslušný materiál, jak uvedeno na obrázku 6.7. Pokud bychom použili definici, která odpovídá



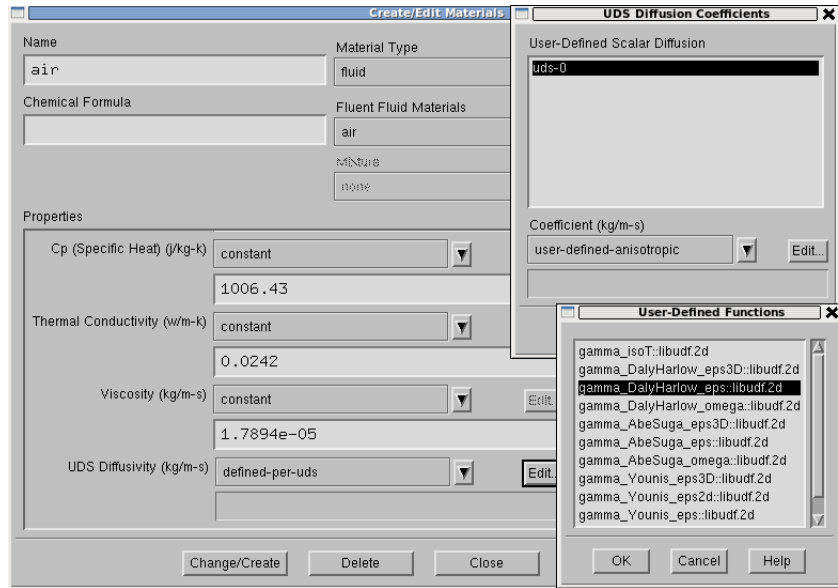
Obr. 6.6: Nastavení (vytvoření) uživatelsky definovaného skaláru (UDS) v programu ANSYS Fluent.

standardní izotropní difuzivité podle rov. (6.13), měli bychom dostat stejné výsledky jako pro hodnoty teploty, které jsou výsledkem řešením rovnice energie v ANSYS Fluent. Při prvních simulacích toto bylo ověřeno.

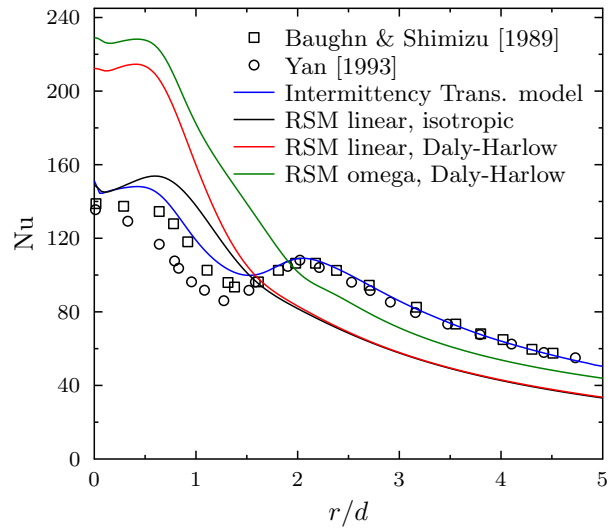
### 6.3.1 Výsledky simulací pro uživatelsky definovaný turbulentní tepelný tok

Na obrázku 6.8 je zobrazeno porovnání experimentálních dat [Baughn a Shimizu, 1989; Yan, 1993] s výsledky simulace přenosu tepla v impaktním proudu pro  $Re = 23000$  a  $h/d = 2$ . Z kategorie RSM modelů dostupných v ANSYS Fluent jsou zde uvedeny výsledky jednak „Linear Pressure-Strain“ modelu, a dále pak modelu „Stress-Omega“ [ANSYS Fluent, 2013a]. V obou případech byl pro anizotropní turbulentní tepelný tok použit model [Daly a Harlow, 1970]. Výsledky však nejsou příliš dobré, ve srovnání s ostatními již dříve použitými modely predikují příliš velké hodnoty přestupu tepla v oblasti stagnantního bodu, tj. v ose pod tryskou impaktního proudu. RSM modely dostupné v ANSYS Fluent obecně pro tento případ problému nedávají dobré výsledky již pro samotné proudové pole, viz obrázek 6.3, a to se pak promítne i do predikce přenosu tepla. Implementace anizotropního modelu turbulence to pak logicky nemůže vylepšit.

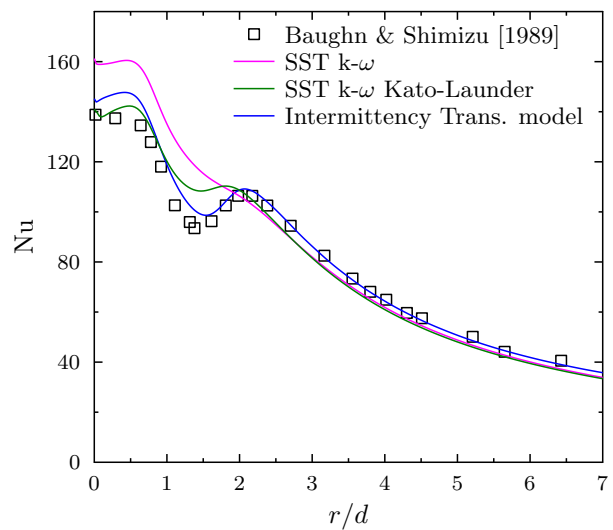
Jednou z hlavních příčin příliš neuspokojivých výsledků může být absence limiteru přílišné produkce kinetické energie turbulence u RSM modelů v ANSYS Fluent, který je důležitý právě v okolí stagnantního bodu impaktního proudu. Obrázek 6.9 ukazuje vliv limiteru Kato-Launder [Kato a Launder, 1993], pokud je aktivován u modelu SST  $k - \omega$ . Bez něj není predikce Nusseltova čísla příliš dobrá, s jeho zapnutím se výsledky značně vylepší. Součástí třírovnicevého Intermittency Transition modelu v ANSYS Fluent [ANSYS Fluent, 2013a; Menter et al., 2006, 2015] je také zmíněný Kato-Launder limiter, a tento model dává v případě impaktního proudu nejlepší výsledky [Peters, 2015].



Obr. 6.7: Propojení definice součinitele  $\Gamma$  s difuzivitou (UDS Diffusivity) v nastavení materiálu v programu ANSYS Fluent.



Obr. 6.8: Porovnání experimentálních dat s výsledky simulace přestupu tepla v impaktním proudu pro různé RSM modely s implementovaným modelem pro turbulentní tepelný tok.  $Re = 23000$ ,  $h/d = 2$ .



Obr. 6.9: Vliv limiteru Kato-Launder [Kato a Launder, 1993] na výsledky přestupu tepla v impaktním proudu.  $Re = 23000$ ,  $h/d = 2$ .

V rámci simulací byly vyzkoušeny i další algebraické modelu pro turbulentní tepelný tok, jednak model podle Abe a Suga [2001] (rov. 6.5), a také i model dle Younis et al. [2005, 2007], ale žádný z nich neposkytnul lepší výsledky. Kompletní definice uživatelských funkcí pro turbulentní tepelný tok lze najít v příloze této práce.

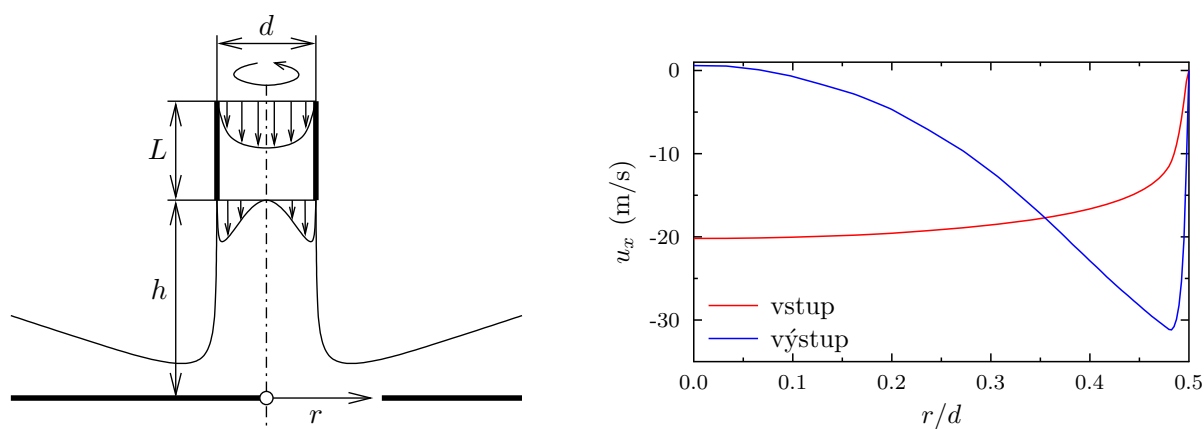
## 6.4 Simulace přestupu tepla v rotujícím impaktním proudu

Jak již bylo zmíněno v úvodu této kapitoly, proud tekutiny vycházející z trysky může být generován různými způsoby. Velice často je v impaktním proudu přítomna tangenciální složka, protože zdrojem může být například větrák, míchadlo, v některých případech jsou do ústí trysky přidávány vestavby ve formě zakřivených proužků, které usměrní (roztočí) vytékající proud, atp. Dalším důvodem (možností) je přivedení proudu tekutiny bez tangenciální složky do „směšovače“ v tečném směru, což následně zajistí, že se ve vycházejícím proudu tekutiny již tangenciální složka objeví.

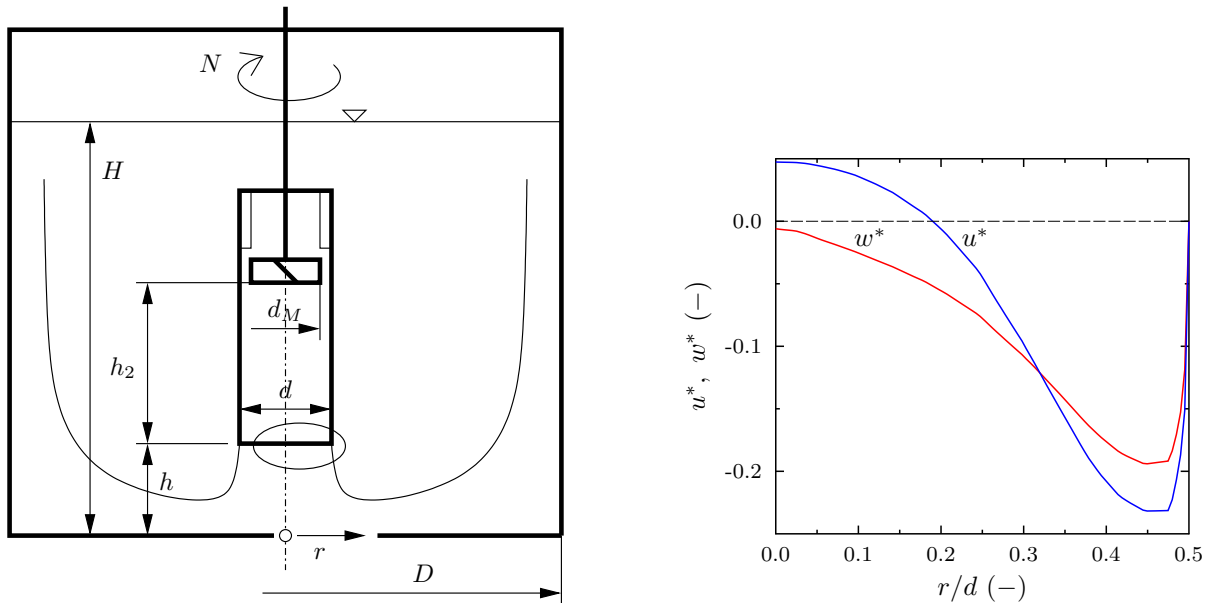
Vliv tangenciální složky rychlosti má značný dopad na axiální rychlostní profil vycházející z trysky. Obrázek 6.10 ilustruje případ, kdy je na vstup trysky o délce  $L = 2d$  přiveden proud tekutiny s parabolickým axiálním rychlostním profilem, a navíc se superponovanou tangenciální složkou rychlosti s lineárním průběhem od nuly ve středu trysky do maxima na stěně. To lze nasimulovat nastavením tangenciální rychlosti na stěně trubky s periodickou okrajovou podmínkou ve směru osy. Výsledný rychlostní profil aplikovaný na vstup do trysky s již nehybnou stěnou se pak na výstupu z trysky díky odstředivým silám transformuje do značně odlišného tvaru, podobného trojúhelníku, viz pravá strana obrázku 6.10. Velmi podobný rychlostní profil se objevuje i v míchané nádobě s axiálním míchadlem (se šikmými lopatkami), viz obr.6.11. Zde je navíc míchadlo umístěno uvnitř usměrňovače toku (difuzoru), a díky tangenciální složce se na výstupu z difuzoru objeví podobný rychlostní profil trojúhelníkového tvaru jako na obrázku 6.10. Je zde i patrné, že v ose ( $r/d = 0$ ) je axiální rychlost dokonce záporná, což je způsobeno tím, že výstup z difuzoru je poměrně blízko u dna nádoby ( $h/d = 1$ ). To znamená, že v ose je směr toku do jisté míry opačný a lze tedy předpokládat, že zde významným způsobem ovlivní případný přestup tepla.

Vliv nebo velikost tangenciální složky lze definovat pomocí bezrozměrné intenzity vířivosti  $Sw$  (Swirl number), kterou lze popsat následovně [Chigier a Beer, 1964; Mahmood, 1980]

$$Sw = \frac{2 G_{\varphi}}{d G_x} \quad (6.16)$$



Obr. 6.10: Ilustrace vlivu tangenciální složky na výstupní axiální rychlostní profil z trysky impaktního proudu. Na pravé straně je zobrazeno, jak se vstupní profil parabolického tvaru se superponovanou tangenciální složkou změní na výstupu z trysky díky odstředivým silám ( $Re = 23000$ ,  $L = 2d$ ,  $Sw = 1.02$ ).



Obr. 6.11: Geometrie míchané nádoby s impaktním proudem generovaným axiálním míchadlem v difuzoru. Napravo je ukázka typického bezrozměrného axiálního a tangenciálního rychlostního profilu na výstupu z difuzoru [Vlček a Jirout, 2015]. Průměr nádoby  $D = 392$  mm, výška hladiny  $H = 430$  mm, průměr difuzoru  $d = 70$  mm, průměr míchadla  $d_M = 61$  mm, výška difuzoru nad dnem  $h/d = 1$ , pozice míchadla  $h_2 = 215$  mm, délka difuzoru 300 mm.

$G_\varphi$  a  $G_x$  zde představují tzv. tangenciální a axiální toky hybnosti.

$$G_\varphi = \int_A \rho r u_x u_\varphi \, dA, \quad G_x = \int \rho u_x^2 \, dA \quad (6.17)$$

V literatuře lze také najít odlišnou a jednodušší definici čísla  $Sw$  [Ahmed et al., 2015]

$$Sw = \frac{U_\varphi}{U_x} \quad (6.18)$$

kde  $U_\varphi$  a  $U_x$  představují zprůměrované hodnoty tangenciální a axiální rychlosti přes příčný průřez  $A$ .

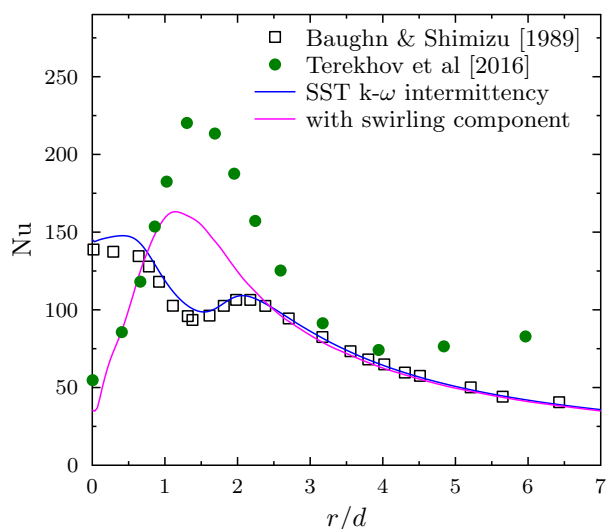
$$U_x = \frac{1}{A} \int_A u_x \, dA, \quad U_\varphi = \frac{1}{A} \int_A u_\varphi \, dA \quad (6.19)$$

V této práci jsou veškeré hodnoty intenzity vířivosti  $Sw$  vyjadřovány podle definice (6.16).

Obrázek 6.12 ukazuje výsledky simulací pro hodnoty Nusseltova čísla v impaktním proudě s přítomnou tangenciální (rotující) složkou rychlosti. Je zde porovnání s případem bez přítomné tangenciální složky a experimentálními daty podle [Baughn a Shimizu, 1989]. Jsou zde patrné výrazné rozdíly vyplývající zejména z odlišných axiálních rychlostních profilů na výstupu z trysky impaktního proudě (viz obr. 6.10). Ten je vlivem odstředivých sil značně jiný než v případě s nulovou tangenciální složkou rychlosti, a nulové nebo dokonce záporné hodnoty axiální rychlosti v ose tak mají za následek veliký pokles intenzity přenosu tepla. Dále od osy je patrné, že maximum Nusseltova čísla se posune dále od osy v porovnání s případem bez tangenciální složky, a není zde rovněž přítomno sekundární maximum v místě bezrozměrné souřadnice  $r/d \approx 2$ . V obrázku 6.12 jsou ještě pro porovnání uvedena experimentální data [Terekhov a Mshvidobadze, 2016], která představují případ impaktního proudě s tangenciální složkou pro zhruba stejné parametry ( $Re = 28000$ ,  $Sw = 1.0$ ,  $h/d = 2$ ). Maximum Nusseltova

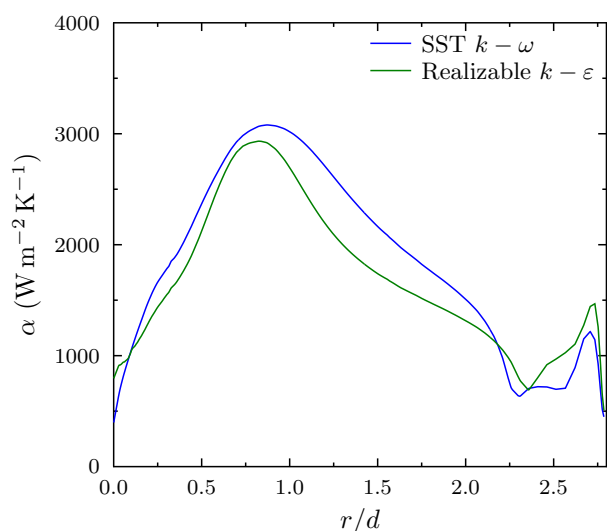
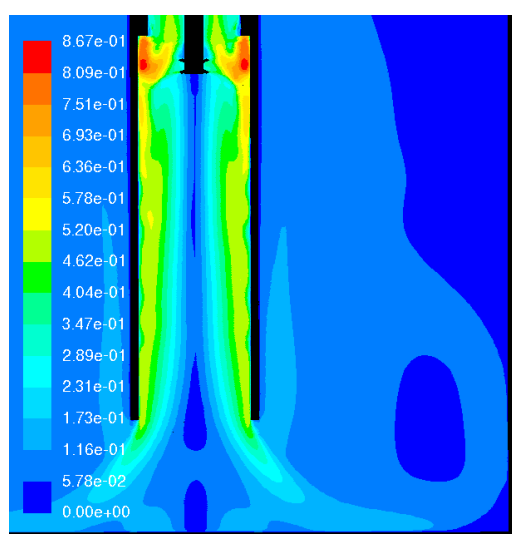


Obr. 6.12: Porovnání Nusseltova čísla v impaktním proudu s přítomnou a nepřítomnou tangenciální složky rychlosti.  $Re = 23000$ ,  $h/d = 2$ ,  $Sw = 1.02$  (rov. 6.16). Experimentální data [Terekhov a Mshvidobadze, 2016] odpovídají případu s o něco větší hodnotou Reynoldsova čísla ( $Re = 28000$ ,  $Sw = 1$ ).



čísla je zde zhruba o 25 % vyšší, nicméně charakter jeho závislosti na radiální souřadnici je, zejména ve stagnantní oblasti, velmi podobný výsledkům obdržným při simulacích v ANSYS Fluent.

Podobný trend, tj. výrazně menší hodnoty intenzity přestupu tepla ve středu impaktního proudu, se potvrdil i při simulacích již reálného zařízení – míchané nádoby s usměřňovačem toku (viz schéma vlevo na obr. 6.11). Obrázek 6.13 vlevo ukazuje kontury rychlostí ve svislém řezu nádobou, napravo jsou zobrazeny závislosti součinitele přestupu tepla na dně nádoby pro dva různé modely turbulence, Realizable  $k - \epsilon$ , a model SST  $k - \omega$  (s aktivovaným limiterem Kato-Lauder). Jsou zde patrné rozdíly, i když trend je podobný. V ose je vidět výrazný pokles intenzity přestupu tepla, a maximum se nachází zhruba v místě  $r/d \approx 1$ . Proud tekutiny dopadající na dno se nemůže rozpínat do stran do nekonečna, protože je omezen svislými stěnami nádoby, u nichž dojde k otočení proudu a jeho transformaci na stěnový proud směrem vzhůru. V této oblasti vzniká recirkulační oblast (viz kontury rychlostí vlevo), která se v závislosti součinitele přestupu



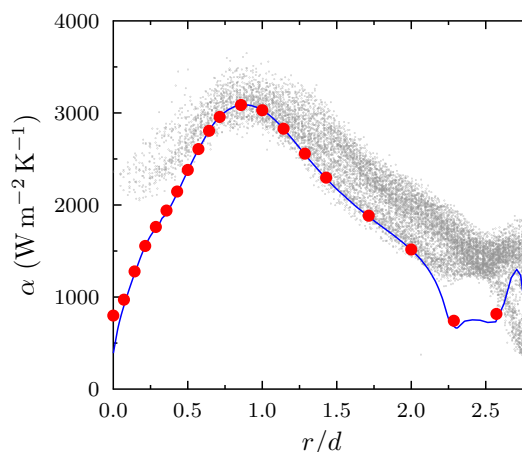
Obr. 6.13: Vlevo je ukázka kontur velikosti rychlostí v míchané nádobě s difuzorem (usměřňovačem toku) pro otáčky  $400 \text{ min}^{-1}$ ,  $Re_M \approx 25000$ ,  $Sw = 1.1$ . Napravo jsou pak hodnoty součinitele přestupu tepla na dně nádoby v závislosti na radiální souřadnici.

tepla na radiální souřadnici projeví nejprve poklesem a pak jeho nárůstem. Při simulacích proudění v míchané nádobě s difuzorem programem ANSYS Fluent byl použit přístup založený na MRF (Moving Reference Frame), kde vymezená oblast okolo míchadla virtuálně rotuje danou úhlovou rychlostí a na rozhraní s okolní nehybnou oblastí jsou aplikovány potřebné transformace pro vektory rychlostí a jejich gradienty a jsou spočteny příslušné toky. Někdy se tento přístup označuje jako „frozen rotor“. Tento přístup nebere v potaz interakce mezi pohyblivou a nehybnou částí.

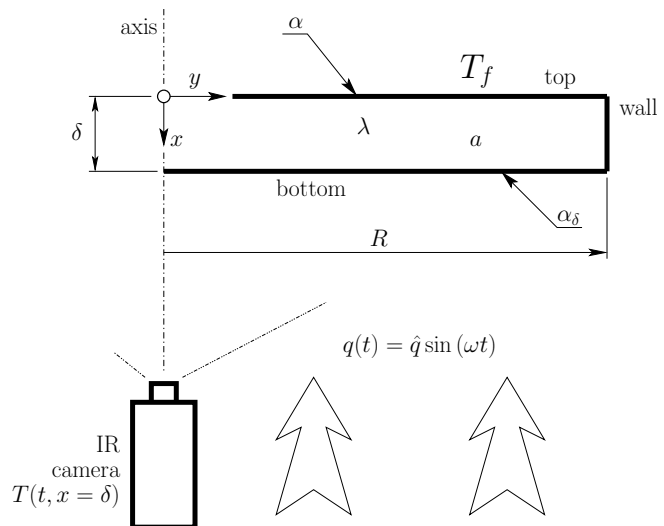
V tomto případě byla nejprve provedena stacionární simulace samotného proudění, a poté následovaly nestacionární simulace přestupu tepla na dně nádoby ohříváné konstantním tepelným tokem. Důvodem nestacionárních simulací přenosu tepla je to, že míchaná nádoba v tomto případě nemá žádný odvod tepla a tudíž za neustálého přívodu tepla nelze dospět k ustálenému stavu (teplota by rostla do nekonečna). Nestacionární simulace byly rozděleny do dvou částí. V první části dlouhé 2 sekundy bylo získáno počáteční nestacionární rozložení rychlostí, a pak následovala druhá část dlouhá 20 sekund, ve které byly získány časově zprůměrované hodnoty teplot (a jiných veličin) na dně nádoby. Z nich pak lze v ANSYS Fluent přímo vyhodnotit součinitele přestupu tepla na základě rovnice (6.7).

#### 6.4.1 Porovnání výsledků simulací s experimenty TOIRT

Obrázek 6.14 ukazuje porovnání hodnot získaných simulací v programu ANSYS Fluent s naměřenými hodnotami součinitele přestupu tepla na dně nádoby metodou teplotních oscilací (TOIRT), [Petera a Dostál, 2017]. Jsou zde zobrazeny všechny experimentální hodnoty (z matice 160 x 120 bodů dané rozlišením infrakamery) získané na daném bezrozměrném poloměru  $r/d$ , aby byl demonstrován rozptyl naměřených dat. Přestože charakter závislosti na radiální souřadnici je velmi podobný, rozdíly mezi naměřenými hodnotami a hodnotami získanými v simulacích jsou v určitých oblastech poměrně výrazné. Jedná se zejména o oblast okolo stagnantního bodu (v ose geometrie), a dále pak u stěny v místě, kde vzniká recirkulační smyčka. Experimentální metoda TOIRT [Wandelt a Roetzel, 1997; Freund, 2007; Freund et al., 2007; Freund a Kabelac, 2010] je bezkontaktní metoda, založená na aplikaci oscilujícího tepelného toku na vnější stranu teplosměnné plochy a měření odezvy povrchové teploty pomocí infrakamery (viz obr. 6.15). Jak autoři této metody prokázali, hodnota součinitele přestupu tepla na druhé straně teplosměnné plochy (v našem případě uvnitř míchané nádoby) je pak závislá pouze na časovém posuvu mezi dopadajícím oscilujícím tepelným tokem a měřenou teplotní odezvou.



Obr. 6.14: Porovnání hodnot součinitele přestupu tepla naměřených metodou TOIRT na dně míchané nádoby s hodnotami získanými při CFD simulaci v ANSYS Fluent.



Obr. 6.15: Schéma experimentální metody teplotních oscilací (TOIRT).

To platí za předpokladu, že zanedbáme podélnou kondukcí v teplosměnné ploše (v našem případě se jedná o dno míchané nádoby). Pro vyšetření vlivu podélné kondukcce byla v ANSYS Fluent vytvořena uživatelská funkce definující proměnný (oscilující) tepelný tok. Tato definice pak byla použita v samostatné simulaci pro definici okrajové podmínky na jedné straně desky (odpovídající dnu nádoby), a na druhé straně desky byly nastaveny hodnoty součinitele přestupu tepla odpovídající hodnotám spočteným v CFD simulacích celé nádoby. Červené body v obrázku 6.14 představují výsledky se započtením vlivu podélné kondukcce. Je zřejmé, že významné odchylky jsou patrné pouze ve stagnantní oblasti (ve středu, ose nádoby). Protože při praktickém návrhu zařízení jako je míchaná nádoba nás spíše zajímají integrální hodnoty přestupu tepla přes celou teplosměnnou plochu, je z tohoto hlediska vliv podélné kondukcce zanedbatelný, neboť odpovídající plocha okolo středu nádoby je relativně malá. Následuje zmíněná definice uživatelské funkce pro oscilující tepelný tok.

```

DEFINE_PROFILE(heat_flux_alpha, thread, position)
{
    real r[ND_ND];
    real y, wTemp, q;
    face_t f;

    real flow_time = RP_Get_Real("flow-time");
    real freq = 0.1; real alpha_delta = 3.0;
    real q_amplitude = 10000;

    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_CENTROID(r, f, thread);
        y = r[1]; wTemp = F_T(f, thread);
        q = q_amplitude*sin(2.0*PI*freq*flow_time) +
            alpha_delta*(300.0-wTemp);
        F_PROFILE(f, thread, position) = q;
    }
    end_f_loop(f, thread)
}

```

## 6.4.2 Integrální hodnoty součinitele přestupu tepla

Při praktickém návrhu zařízení nás více zajímají hodnoty součinitelů přestupu tepla nebo Nusseltových čísel zprůměrované přes celou teplosměnnou plochu. Pro případ přestupu tepla na rovinné desce kruhového tvaru (v našem případě se jedná o ploché dno válcové nádoby) lze z lokálních hodnot závislých na souřadnici (poloměru) dostat průměrné hodnoty podle následující rovnice

$$\overline{Nu} = \frac{\int_0^R Nu(r) 2\pi r dr}{\pi R^2} = \frac{2}{R^2} \int_0^R Nu(r) r dr \quad (6.20)$$

V literatuře jsou pak nejčastěji k nalezení korelace pro Nusseltova čísla ve formě mocninových závislostí zejména na Reynoldsově a Prandtlově číslu, případně dalších bezrozměrných číslech nebo geometrických parametrech.

$$\overline{Nu} = c Re^m Pr^n Vi^p \dots \left(\frac{h}{d}\right)^q \dots \quad (6.21)$$

V případě impaktních proudů je jedním z důležitých parametrů vzdálenost trysky impaktního proudu od stěny, vyjadřovaná ve formě  $h/d$ . U průměrné hodnoty Nusseltova čísla je samozřejmě důležité, přes jak velkou plochu (tj. pro jakou horní mez integrálu  $R$  v rov. 6.20) jsou výsledky vyhodnoceny. Například, Lytle a Webb [1994] publikoval korelaci pro Nusseltovo číslo ve stagnantním bodu (pro  $h/d \leq 1$ ,  $Re = 3700 - 30000$ , vzduch)

$$Nu_0 = 0.726 Re^{0.53} \left(\frac{h}{d}\right)^{-0.191}, \quad R/d = 0 \quad (6.22)$$

Pro průměrnou hodnotu Nusseltova čísla v kruhové oblasti vymezené maximálním poloměrem  $R/d = 1$  pak uvedl korelaci

$$\overline{Nu} = 0.424 Re^{0.57} \left(\frac{h}{d}\right)^{-0.33}, \quad R/d = 1 \quad (6.23)$$

a pro ještě větší poloměr  $R/d = 2$

$$\overline{Nu} = 0.150 Re^{0.67} \left(\frac{h}{d}\right)^{-0.36}, \quad R/d = 2 \quad (6.24)$$

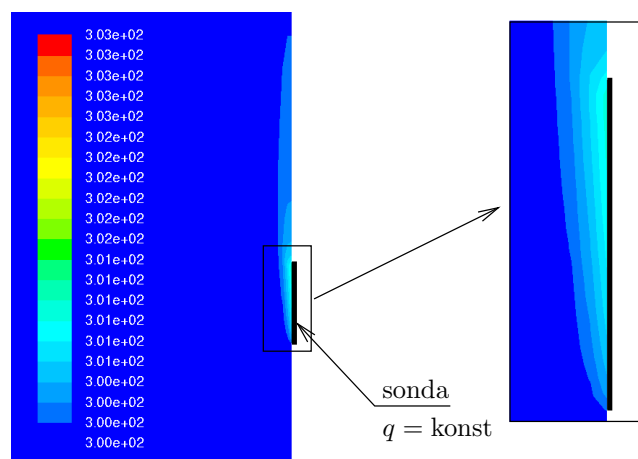
Je zde patrné, že s rostoucím poloměrem narůstá exponent Reynoldsova čísla, ve stagnantní oblasti je okolo hodnoty 0.5 (odpovídající laminárnímu proudění), a pro větší oblast jeho hodnota narůstá směrem k teoretické hodnotě 0.8 pro stěnový proud u plně vyvinutého turbulentního proudění. To potvrzuje i korelace podle Katti et al. [2011] pro  $Re = 500 - 8000$ ,  $0.5 \leq h/d \leq 8$ ,  $R/d = 5$

$$\overline{Nu} = 0.11 Re^{0.69} Pr^{0.33} \left(\frac{h}{d}\right)^{-0.04} \quad (6.25)$$

Martin [1977] jako jeden z mála v korelaci pro průměrnou hodnotu Nusseltova čísla zahrnuje horní mez integrálu  $R$  v rov. (6.20).

$$\overline{Nu} = \left(\frac{d}{R}\right) \frac{1 - 1.2(d/R)}{1 + 0.1(h/d - 6)(d/R)} 1.36 Re^{0.574} Pr^{0.42} \quad (6.26)$$

Obr. 6.16: Ilustrace vytváření mezní vrstvy na sondě u elektrodifuzní metody. Na obrázku jsou zobrazeny kontury teplot pro případ konstantního tepelného toku aplikovaného na sondě integrované do stěny impaktované proudem tekutiny (směr dopadajícího proudu je zde zleva doprava).



Petera et al. [2017] publikovali pro případ rotujícího impaktního proudu v míchané nádobě s difuzorem korelaci, kde dalším parametrem ve vztahu pro Nusseltovo číslo je intenzita vířivosti  $Sw$  (viz rov. 6.16).

$$\overline{Nu} = 0.041 Re^{0.826} Pr^{1/3} \left(\frac{h}{d}\right)^{-0.099} Sw^{0.609} \quad (6.27)$$

Tato korelace byla vyhodnocena pro vzdálenosti difuzoru ode dna nádoby  $0.25 \leq h/d \leq 1.0$  a integrační mez  $R/d = 2.67$ . Je založena na experimentálních datech získaných elektrodifuzní metodou [Kristiawan et al., 2012], která vychází z podobnosti mezi přenosem hmoty a tepla. S touto metodou se měří proud mezi elektrodami umístěnými v roztoku elektrolytu, a jeho velikost je úměrná velikosti přenosu hmoty. Na základě Chilton-Colburnovy podobnosti mezi přenosem hmoty a tepla [Bird et al., 2007]

$$\frac{Nu}{Pr^{1/3}} = \frac{Sh}{Sc^{1/3}} \quad (6.28)$$

Lze pak vyhodnotit velikost součinitele přestupu tepla, viz Petera et al. [2016]. Problémem tohoto vyhodnocení však je, že při použití malých pracovních elektrod nejsou okrajové podmínky při přestupu hmoty identické (podobné) s případem přestupu tepla na celé teplosměnné ploše. Na malých elektrodách se totiž vytváří nová mezní vrstva (viz obr. 6.16) a výsledné součinitele přestupu hmoty nebo tepla pak vycházejí značně větší než ve skutečnosti. Proto je nutné použít korekční faktory, které tuto diskrepanci napraví, viz např. [Petera et al., 2016; Karcz, 1999]. Tyto korekční faktory pak mohou experimentální výsledky velmi zkreslit a jsou tak slabým bodem této experimentální techniky. Ostatně i Katti et al. [2011] uvádí, že jejich výsledky jsou o cca 50 % větší než hodnoty podle [Martin, 1977] a jako hlavní důvod uvádí rozdílné měřicí techniky.

V korelaci (6.27) je definice Reynoldsova čísla vztažena k průměrné rychlosti proudu tekutiny vycházejícímu z difuzoru. To je i v souladu s klasickou definicí Reynoldsova čísla používanou v publikacích týkajících se klasických impaktních proudů. V oblasti míchacích zařízení se však používá definice Reynoldsova čísla vztažená k otáčkám míchadla

$$Re_M = \frac{nd_M^2 \rho}{\mu} \quad (6.29)$$

V této definici Reynoldsova čísla je charakteristický rozměr zastoupen průměrem míchadla  $d_M$ , a charakteristická rychlost součinem  $nd_M$ . U axiálních míchadel jsou velmi často sledovány jejich tzv. čerpací účinky, tj. jak veliký objemový tok (průtok) jsou schopny vyvolat (na míchadlo

Ize pohlížet jako na speciální druh čerpadla [Novák et al., 1989]). Jedná se o důležitý provozní parametr, který se projeví například při homogenizaci vsádky v míchané nádobě, a bývá charakterizován pomocí bezrozměrného průtokového kritéria

$$N_Q = \frac{\dot{V}}{nd_M^3} \quad (6.30)$$

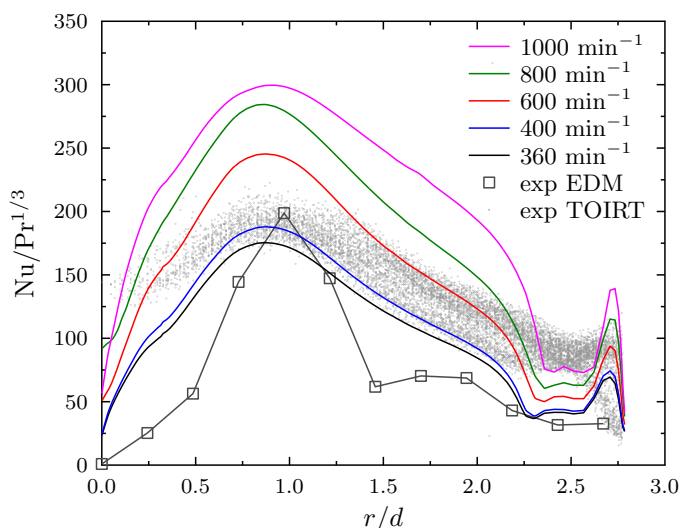
Toto kritérium je v turbulentní oblasti víceméně konstantní pro danou geometrickou konfiguraci jako je typ míchadla, jeho průměr, vzdálenost ode dna nádoby, atp. Pro studovanou geometrii nádoby s difuzorem s šesti-lopatkovým míchadlem se šikmými lopatkami s úhlem  $45^\circ$  byla stanovena jeho hodnota jako 0.449 [Vlček a Jirout, 2015] (při simulacích prováděných autorem této práce byla zjištěna srovnatelná hodnota, 0.442, tj. rozdíl necelá 2 %). Pro danou hodnotu průtokového čísla lze pak stanovit velikost průtoku  $\dot{V}$  pro určité hodnoty otáček míchadla a jeho průměr. Po vydělení průřezem difuzoru ( $\pi d^2/4$ ) lze pak dostat průměrnou hodnotu rychlosti proudu tekutiny opouštějící difuzor, souměřitelnou s charakteristickou rychlostí v definici Reynoldsova čísla pro klasický impaktní proud

$$Re = \frac{ud_0}{\mu} \quad (6.31)$$

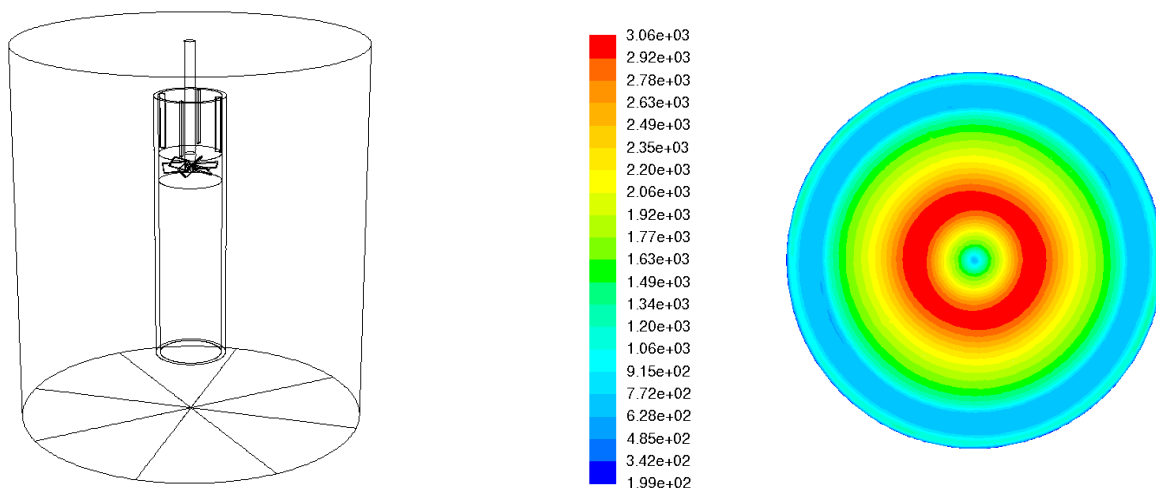
Kombinací výše uvedených vztahů lze dojít k rovnici pro přepočítání mezi „míchacím“ a klasickým Reynoldsovým číslem

$$Re = Re_M N_Q \frac{4d_M}{\pi d} \quad (6.32)$$

Obrázek 6.17 ukazuje výsledky simulací míchané nádoby s difuzorem v programu ANSYS Fluent. Jsou zde uvedeny závislosti hodnot Nusseltova čísla na bezrozměrné radiální souřadnici pro různé otáčky míchadla a pro porovnání i experimentální data získaná elektrodifuzní metodou a metodou TOIRT. Uvedená experimentální data odpovídají případu s otáčkami  $400 \text{ min}^{-1}$ , tj. pro dané geometrické parametry je  $Re_M = 24687$ . Odpovídající hodnota klasického Reynoldsova čísla podle rov. (6.32) je  $Re = 12112$ . Prezentované výsledky simulací jsou založeny na síti o velikosti cca 2,8 mil. elementů a modelu turbulence SST  $k - \omega$  s Kato-Launders limitem. Hodnoty součinitelů přestupu tepla a jejich závislosti podél radiální souřadnice byly vyhodnoceny na konci nestacionární simulace dlouhé 20 sekund, podél celkem osmi přímků na dně nádoby, viz schéma na levé straně obrázku 6.18. Získané hodnoty pak byly pro stejné radiální



Obr. 6.17: Závislosti Nusseltova čísla na bezrozměrné radiální souřadnici na dně míchané nádoby s difuzorem - výsledky simulací v programu ANSYS Fluent pro různé hodnoty otáček míchadla. V grafu jsou pro porovnání uvedeny experimentální hodnoty založené na elektrodifuzní metodě (EDM) a metodě TOIRT. Na svislé ose je hodnota Nusseltova čísla dělená Prandtlovým číslem s hojně používanou mocninou 1/3.



Obr. 6.18: Nalevo je schéma geometrie míchané nádoby s difuzorem s vyobrazenými 8 přímkami na dně nádoby, podél kterých byly vyhodnocovány součinitele přestupu tepla. Napravo jsou zobrazeny kontury součinitele přestupu tepla zprůměrované za časový interval 20 s nestacionární simulace (pro případ  $400 \text{ min}^{-1}$ ). Je zde vidět poměrně dobrá symetrie zprůměrovaných hodnot.

souřadnice na těchto přímkách zprůměrovány. Na stejném obrázku vpravo jsou navíc vyobrazeny kontury součinitele přestupu tepla zprůměrované za časový interval 20 s nestacionární simulace v ANSYS Fluent, demonstrující jejich symetrii vzhledem ke středu dna nádoby.

Výsledky simulací lze shrnout pomocí korelace pro průměrnou hodnotu Nusseltova čísla přes celou teplosměnnou plochu odpovídající celému dnu míchané nádoby v následující formě

$$\overline{Nu} = 0.101 Re_M^{0.680} Pr^{1/3} \quad (6.33)$$

Je zde použito míchací Reynoldsovo číslo, ale vzhledem k přepočtu podle rovnice (6.32) je zřejmé, že hodnota exponentu by pro klasické Reynoldsovo číslo zůstala stejná, změnila by se pouze úvodní konstanta. Přepočet této konstanty by šlo provést podle následující rovnice

$$c = c_M \left( \frac{\pi d}{4 d_M N_Q} \right)^m, \quad (6.34)$$

kde za  $N_Q$  dosadíme odpovídající hodnotu bezrozměrného průtokového kritéria, a za  $m$  hodnotu exponentu u Reynoldsova čísla. V našem případě by tato úvodní konstanta byla 0.163 (zhruba 1.6 násobek konstanty v korelaci pro míchací Reynoldsovo číslo).

Pokud se zaměříme na stagnantní oblast a zvolíme menší hodnotu horní meze integrace po teplosměnné ploše  $R/d = 1$  (viz rov. 6.20) při stanovení průměrné hodnoty Nusseltova čísla, lze získat následující korelaci

$$\overline{Nu} = 0.497 Re_M^{0.574} Pr^{1/3} \quad (6.35)$$

Zde je vidět, že hodnota exponentu Reynoldsova čísla je menší a přibližuje se hodnotě 0.5. To je v souladu s korelacemi z literatury, viz například rovnici (6.23). Tabulka 6.2 shrnuje výsledky regresní analýzy pro různé velikosti teplosměnné plochy dané horní mezí integrálu  $R$  v rovnici (6.20). V tabulce jsou uvedeny i konfidenční intervaly, které jsou, zejména co se týká úvodní konstanty v korelaci pro Nusseltovo číslo, poměrně veliké, protože regrese je založena na pouze pěti hodnotách otáček. Hodnoty otáček a odpovídajících Reynoldsových čísel jsou shrnuty v tabulce 6.3, kde je navíc v posledním sloupci uvedena hodnota intenzity vířivosti  $Sw$ , vyhodnocená v ANSYS Fluent na výstupu z difuzoru podle rovnice (6.16).

Tabulka 6.2: Výsledky regresní analýzy úvodních konstant a exponentu Reynoldsova čísla v korelaci pro Nusseltovo číslo v závislosti na různých hodnotách horní meze integrálu  $R$  v rov. (6.20).

$R/d$	konst. pro $Re_M$	exponent $Re_M$	konst. pro $Re$
1.0	$0.497 \pm 0.679$	$0.574 \pm 0.128$	$0.748 \pm 0.953$
1.5	$0.403 \pm 0.365$	$0.592 \pm 0.085$	$0.615 \pm 0.519$
2.0	$0.197 \pm 0.069$	$0.648 \pm 0.033$	$0.312 \pm 0.103$
2.8	$0.101 \pm 0.055$	$0.680 \pm 0.051$	$0.163 \pm 0.083$

Tabulka 6.3: Shrnutí otáček a odpovídajících Reynoldsových čísel u provedených simulací. V posledním sloupci je navíc hodnota intenzity vířivosti  $Sw$ , vyhodnocená v ANSYS Fluent na výstupu z difuzoru podle rovnice (6.16).

$\text{min}^{-1}$	$Re_M$	$Re$	$Sw$
360	22219	10900	1.0836
400	24687	12112	1.1037
600	37031	18168	1.2259
800	49375	24224	1.2211
1000	61719	30280	1.2730

Výsledky simulací v programu ANSYS Fluent prezentované v této kapitole ukazují na komplikovanost celé problematiky přestupu tepla v impaktním proudu. V reálných zařízeních jako jsou třeba míchané nádoby vstupuje navíc do hry tangenciální složka rychlosti, která významným způsobem ovlivňuje rychlostní pole a tím i výslednou intenzitu přestupu tepla. Dostupná data z literatury popisující přestup tepla v rotujícím impaktním proudu navíc vykazují značné rozdíly. To je vedle použití různých experimentálních metod zapříčiněno i způsobem generování tangenciální složky, která, jak poukázal Ahmed et al. [2015], má značný vliv na rychlostní pole v impaktním proudu a tím i následný přenos tepla.

Protože RANS modely turbulence nejsou zcela univerzální, je důležité při použití CFD nástrojů u návrhu různých aparátů a zařízení najít ten nejvhodnější, nejlépe na základě porovnání s experimentálními daty. Na druhou stranu pak u některých experimentálních metod mohou být CFD nástroje nezbytným doplňkem při studiu vlivu různých parametrů a ověření zjednodušujících předpokladů. Protože při praktickém využití CFD většinou potřebujeme provést celou sérii výpočtů pro různé varianty hodnot parametrů, není většinou možné použití výpočetních metod založených na přístupu DNS nebo LES. Limitujícím faktorem výpočetní náročnosti totiž u těchto metod není jen potřebná velikost sítě, která je značně větší než u modelů RANS, ale i nutnost řešit příslušný problém jako nestacionární. To pak samozřejmě výsledný čas vedoucí k získání finálních výsledků značně prodlužuje, a ten se dále násobí počtem zkoumaných variant pro různé parametry.



## Kapitola 7

# Implementace růstového modelu PSF ve fotobioreaktoru

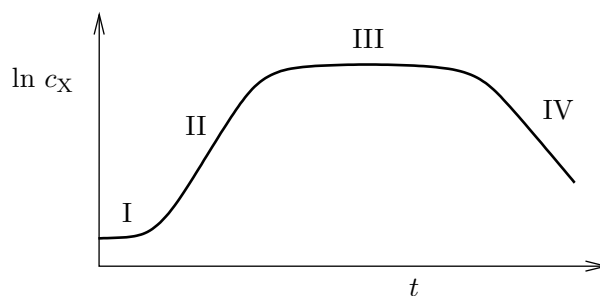
V bioreaktorech obecně probíhá biochemický děj, kdy dochází k přeměně výchozích látek na nějaké produkty za přítomnosti mikroorganismů. Produktem této přeměny mohou být i samotné mikroorganismy (biomasa). Pro tuto přeměnu jsou zapotřebí vhodné podmínky, jako je teplota, pH, a živiny, které představují důležitý zdroj energie, uhlíku, dusíku a dalších nezbytných látek pro život mikroorganismů. U fotobioreaktorů je jedním z nejdůležitějších faktorů ovlivňujících (limitujících) jejich růst světelné záření (ozáření).

Řasy (mikrořasy) patří mezi organismy, které s pomocí fotosyntézy dokáží výchozí složky (nejčastěji oxid uhličitý a vodu, spolu s dalšími živinami) přeměnit na složitější organické sloučeniny či další metabolické produkty. Vedle dosavadního využití řasových mikroorganismů jako zdroje metabolických produktů ve farmaceutickém průmyslu případně jako zdroje živin v potravinových doplňcích, získávají řasy znovu na pozornosti v procesech čištění odpadních vod nebo jako potenciální zdroj alternativních paliv v průmyslovém měřítku.

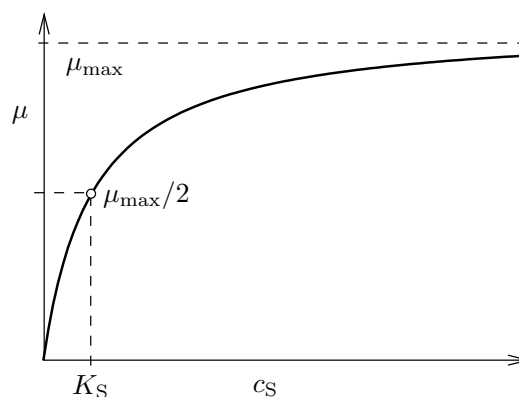
Obecně růst mikroorganismů může procházet několika fázemi [Aiba et al., 1972]:

- lag-fáze
- exponenciální fáze
- stacionární fáze
- fáze poklesu (útlumu)

Na obrázku 7.1 jsou tyto fáze označeny po pořadí římskými číslicemi I–IV. V exponenciální fázi II je růst mikroorganismů největší a nejčastěji se uvažuje, že jejich přírůstek je přímo úměrný



Obr. 7.1: Rychlost růstu mikroorganismů v závislosti na čase ve vsádkovém reaktoru ( $c_X$  je koncentrace mikroorganismů, na svislé ose je logaritmické měřítko).



Obr. 7.2: Závislost specifické růstové rychlosti  $\mu$  na koncentraci substrátu  $c_S$  podle Monodovy rovnice (7.3).

jejich koncentraci

$$\frac{dc_X}{dt} = \mu c_X \quad (7.1)$$

Konstanta úměrnosti  $\mu$  představuje tzv. specifickou růstovou rychlost, která může být z předchozí rovnice vyjádřena jako

$$\mu = \frac{1}{c_X} \frac{dc_X}{dt} = \frac{d(\ln c_X)}{dt} \quad (7.2)$$

Z předchozího vztahu je zřejmé, že v logaritmickém měřítku bude specifická růstová rychlost  $\mu$  představovat směrnici křivky (přímky) ve fázi exponenciálního růstu II (viz obr. 7.1).

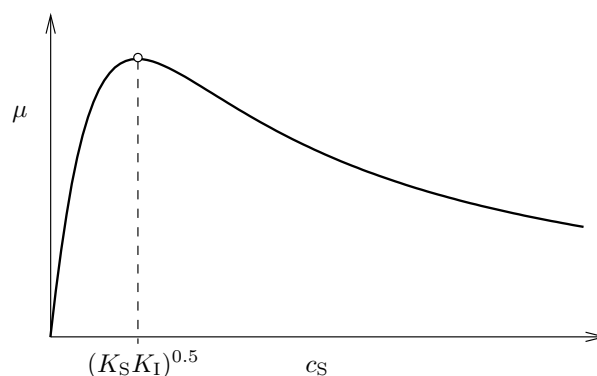
Růstová rychlost (či rychlost růstu mikroorganismů) obecně závisí na celé řadě faktorů. Velice častým případem je situace, kdy klíčovým faktorem je pouze jeden prvek, například koncentrace rozpuštěného kyslíku nebo oxidu uhličitého v živném médiu, dopadající světelné záření, atp. Ostatní prvky jsou rovněž důležité pro růst, nepředstavují však limitující faktor. Monod [Aiba et al., 1972] navrhnul pro popis specifické růstové rychlosti za podmínek limitace jedním substrátem rovnici podobnou vztahu pro popis enzymatických reakcí (Michaelis-Menten)

$$\mu = \mu_{\max} \frac{c_S}{K_S + c_S}, \quad (7.3)$$

kde  $c_S$  představuje koncentraci substrátu. Grafické zobrazení této závislosti je na obrázku 7.2, a je zřejmé, že s rostoucí koncentrací roste i rychlost růstu (až do hodnoty  $\mu_{\max}$ ). V praxi se však mohou vyskytnout případy, kdy při překročení určité meze dojde k tzv. inhibici, a i přes rostoucí koncentraci substrátu klesá hodnota růstové rychlosti. Tato situace je zobrazena na obrázku 7.3 a následující rovnice představuje jednu z možností, jak ji popsat

$$\mu = \mu_{\max} \frac{c_S}{K_S + c_S + c_S^2/K_I} \quad (7.4)$$

Situaci, kdy dochází k inhibici, můžeme v laboratorním měřítku většinou vyřešit snadno, třeba snížením koncentrace (pokud nám to vůbec vadí). V provozním měřítku již bývá situace složitější a jedním ze způsobů, jak se se situací vypořádat, může být úprava hydrodynamického režimu, který ovlivňuje promíchávání systému a rozložení koncentrací. To většinou ve větších zařízeních neodpovídá ideálním případům, tj. buď ideálně míchanému systému nebo systému s pístovým tokem. Možnost současného řešení hydrodynamiky spolu s reakční kinetikou v takovém systému pak získává na důležitosti při návrhu celého zařízení. ANSYS Fluent umožňuje specifikovat případy s „jednoduchou“ reakční kinetikou, nicméně u složitějších případů je nutné použít uživatelem definované funkce (UDF). V této části práce to bude ilustrováno na případě třístavového modelu „fotosyntetické továrny“ [Eilers a Peeters, 1988].



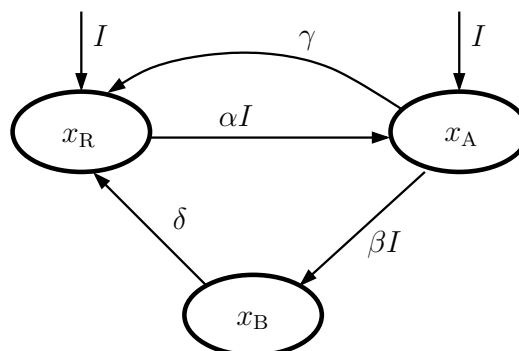
Obr. 7.3: Závislost specifické růstové rychlosti  $\mu$  v případě inhibice růstu podle rovnice (7.4).

## 7.1 Model fotosyntetické továrny

Model fotosyntetické továrny, který navrhnul Eilers a Peeters [1988], realisticky popisuje důležité procesy, které se odehrávají při růstu řas. Tento model popisuje tři základní stavy, ve kterých se řasová buňka může nacházet: aktivovaný stav  $x_A$ , inhibovaný stav  $x_B$ , a odpočívající stav  $x_R$ . Přechody mezi jednotlivými stavy jsou zobrazeny na obr. 7.4, a lze je popsat pomocí tří diferenciálních rovnic, kde  $I$  představuje světelné záření (ozáření) dopadající na řasové buňky:

$$\begin{aligned} \frac{dx_A}{dt} &= -\gamma x_A + \alpha I x_R - \beta I x_A \\ \frac{dx_R}{dt} &= \gamma x_A - \alpha I x_R + \delta x_B \\ \frac{dx_B}{dt} &= \beta I x_A - \delta x_B \end{aligned} \quad (7.5)$$

První z těchto rovnic popisuje změnu aktivovaného stavu A, ve kterém probíhá fotosyntéza a je využívána energie světelného záření při transformaci výchozích složek (oxid uhličitý, voda) na složitější organické sloučeniny. Po spotřebování energie buňka přechází do odpočívajícího stavu R – tomuto procesu odpovídá první člen  $\gamma x_A$  na pravé straně rovnice pro stav A. Z odpočívajícího stavu R se buňka může vrátit zpět do aktivního stavu, pokud na ni po nějakou dobu dopadá světelné záření, viz člen  $\alpha I x_R$ . Naopak, pokud je buňka příliš dlouho vystavena přemíře světelného záření, dojde k tzv. fotoinhibici a přejde do inhibovaného stavu B, což je postihnuto členem  $\beta I x_A$ . Z inhibovaného stavu se buňka může po nějaké době dostat nejprve do odpočívajícího stavu, což vyjadřuje poslední člen  $\delta x_B$  na pravé straně rovnic pro stavy R a B. Z něj se pak zase působením světelného záření může posunout do aktivovaného stavu, viz člen  $\alpha I x_R$ . Wu a Merchuk [2001] identifikoval parametry výše zmíněné soustavy rovnic (7.5)



Obr. 7.4: Modelu fotosyntetické továrny PSF (Photo-Synthetic Factory).

Tabulka 7.1: Parametry modelu fotosyntetické továrny pro *Porphyridium* sp. (Red Marine algae), [Wu a Merchuk, 2001].

$\alpha$	$1.935 \times 10^{-3}$	$\mu\text{E}^{-1} \text{m}^2$
$\beta$	$5.7848 \times 10^{-7}$	$\mu\text{E}^{-1} \text{m}^2$
$\gamma$	$1.460 \times 10^{-1}$	$\text{s}^{-1}$
$\delta$	$4.796 \times 10^{-4}$	$\text{s}^{-1}$
$\kappa$	$3.647 \times 10^{-4}$	—
Me	$1.6411 \times 10^{-5}$	$\text{s}^{-1}$

popisující model fotosyntetické továrny pro konkrétní řasu *Porphyridium* sp., viz tabulka 7.1, a zároveň je doplnil upraveným vztahem pro specifickou růstovou rychlost  $\mu$ , aby postihnul případy, kdy za slabého či nulového osvětlení dochází k úbytku biomasy. To původní model popsaný rovnicemi (7.5) nebyl schopen postihnout. V upravené variantě je specifická růstová rychlost přímo úměrná aktivovanému stavu  $x_A$

$$\mu = \kappa\gamma x_A - \text{Me}, \quad (7.6)$$

a doplněný člen Me zde představuje (energetické) nároky řasových buněk na vlastní vnitřní metabolické procesy (tzv. maintenance). Ty je obecně velmi těžké matematicky popsat, neboť zahrnují stovky či tisíce enzymatických reakcí [Wu a Merchuk, 2001], a v tomto modelu jsou všechny zahrnuty pod tento jediný člen Me.

U modelu popsaného soustavou tří rovnic (7.5) platí, že součet jednotlivých stavů dá dohromady 1, tj. buňka se vždy nachází v jednom ze tří možných stavů.

$$x_A + x_R + x_B = 1 \quad (7.7)$$

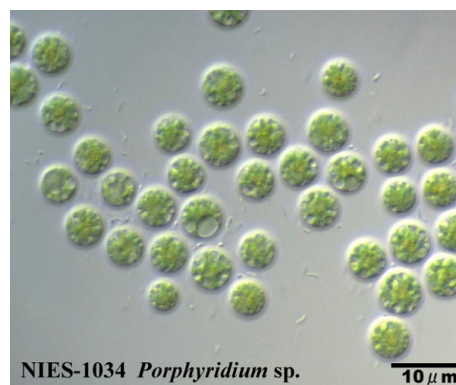
Soustavu tří rovnic (7.5) tedy lze převést na soustavu pouze dvou rovnic, například

$$\begin{aligned} \frac{dx_A}{dt} &= -[(\alpha + \beta)I + \gamma]x_A + \alpha I(1 - x_B) \\ \frac{dx_B}{dt} &= \beta I x_A - \delta x_B \end{aligned} \quad (7.8)$$

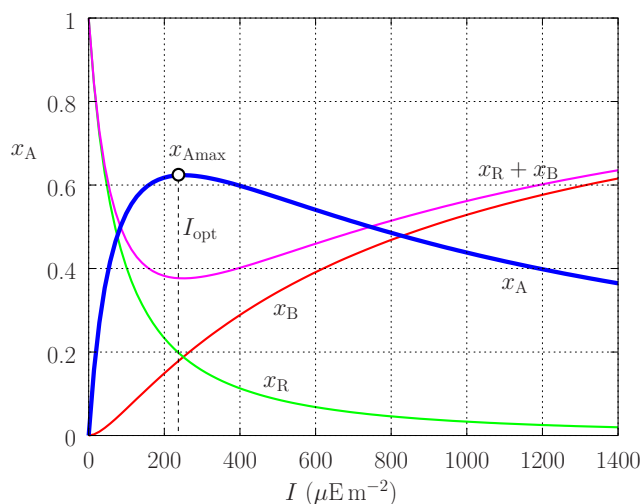
Odpočívající stav R lze pak v každém časovém okamžiku dopočítat jako

$$x_R = 1 - x_A - x_B. \quad (7.9)$$

Pokud zatím pomíneme vliv proměnné hodnoty ozáření  $I$ , představuje soustava obyčejných diferenciálních rovnic (7.5) nebo (7.8) systém s tzv. soustředěnými parametry, navíc s velmi



Obr. 7.5: Obrázek řasových buněk *Porphyridium* sp. (Red Marine algae), National Institute of Environmental Science [2017].



Obr. 7.6: Závislost aktivovaného stavu  $x_A$  (modrá křivka) na ozáření  $I$ , demonstrující vliv fotoinhibice u modelu PSF. Závislost odpovídá parametrům z tabulky 7.1 vyjma členu  $M_e$ . Maximum odpovídá hodnotě  $I_{opt} = 250 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$  a  $x_{Amax} = 0.624$ .

rozdílnými časovými měřítky (někdy označované jako *stiff*). Z analýzy hodnot parametrů v tabulce 7.1 je vidět, že parametry  $\delta$  případně  $\beta$ , charakterizující inhibovaný stav B, mají hodnoty o několik řádů menší než hodnoty parametrů  $\alpha$  příp.  $\gamma$ , charakterizující aktivovaný stav A. Tyto rovnice jsou schopny korektně popsat vliv fotoinhibice, například, kdybychom se zaměřili na ustálený stav, lze odvodit pro stacionární hodnotu aktivovaného stavu

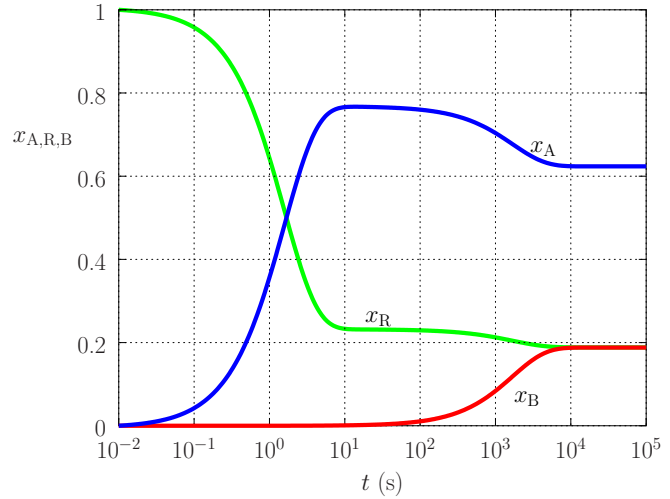
$$\bar{x}_A = \frac{\alpha I}{[(\alpha + \beta)I + \gamma] + \frac{\alpha\beta}{\delta}I^2} \quad (7.10)$$

a pro inhibovaný stav

$$\bar{x}_B = \frac{\beta}{\delta} I \bar{x}_A = \frac{\frac{\alpha\beta}{\delta}I^2}{[(\alpha + \beta)I + \gamma] + \frac{\alpha\beta}{\delta}I^2} \quad (7.11)$$

Charakter rovnice (7.10) je podobný jako u rovnice (7.4) představující limitaci růstu substrátem s tím, že místo koncentrace substrátu nám zde vystupuje ozáření  $I$ . Pro hodnoty z tabulky 7.1 lze dostat závislost na obr. 7.6, kde maximum odpovídá hodnotě ozáření  $I_{opt} = 250 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$  a aktivovanému stavu  $x_{Amax} = 0.624$ . V grafu jsou tenčími čarami vykresleny pro srovnání i závislosti inhibovaného a odpočívajícího stavu spolu s jejich součtem. Je zřejmé, že s rostoucí ozáření hodnota inhibovaného stavu postupně narůstá a hodnota odpočívajícího stavu naopak klesá. Hodnota aktivovaného stavu narůstá až do optimální hodnoty ozáření  $I_{opt}$ , a dále pak klesá v důsledku fotoinhibice. Obrázek 7.7 ukazuje časové závislosti (v logaritmickém měřítku) jednotlivých stavů systému PSF popsaného rovnicemi (7.5) nebo (7.8) pro konstantní hodnotu ozáření  $I_{opt} = 250 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Je zde zřejmé „zpoždění“ inhibovaného stavu daného rozdílným časovým měřítkem oproti aktivovanému stavu. Aktivovaný stav v řádu sekund vystoupá na maximální hodnotu, a pak s nástupem fotoinhibice klesá (v řádu hodin) na menší hodnoty odpovídající stacionárnímu stavu. Počáteční podmínky pro vykreslení této závislosti byly nulové hodnoty aktivovaného a inhibovaného stavu, tudíž všechny buňky se nacházely v odpočívajícím stavu R.

$$t = 0, \quad x_A = 0, \quad x_B = 0, \quad x_R = 1 \quad (7.12)$$



Obr. 7.7: Časové závislosti (v logaritmickém měřítku) jednotlivých stavů modelu PSF pro konstantní hodnotu ozáření  $I_{\text{opt}} = 250 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$ .

## 7.2 Vliv distribuce ozáření

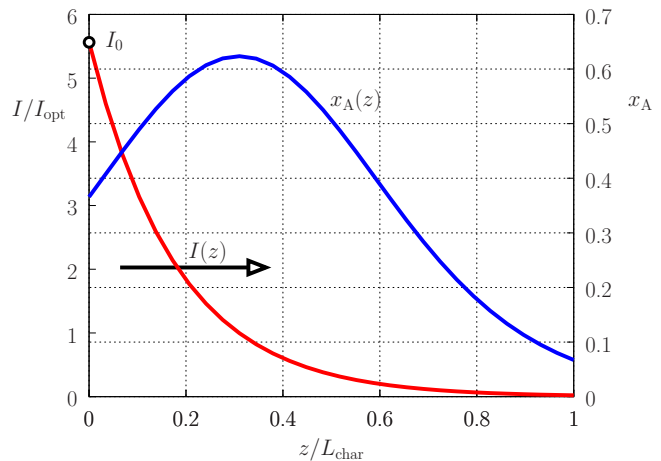
Pro správný popis reálného systému je většinou nutné vzít do úvahy, že distribuce ozáření není konstantní, ale je závislá na prostorové souřadnici (případně i času). Je to dáno jednak samotnou geometrií systému, umístěním zdroje světla a také i útlumem intenzity osvětlení v důsledku „hustoty“ (koncentrace) řasové kultury. Pokud se zaměříme na nejjednodušší jednorozměrný případ, kdy světlo o intenzitě  $I_0$  dopadá z jedné strany zařízení a k útlumu dochází ve směru dopadajícího zařízení (osa  $z$ ), lze popsat závislost ozáření  $I$  pomocí Beer-Lambertova vztahu

$$I = I_0 e^{-\Lambda z} \quad (7.13)$$

kde  $\Lambda$  představuje koeficient útlumu. Obrázek 7.8 ukazuje tuto závislost graficky pro hodnoty  $I_0 = 1391.7 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$  a  $\Lambda = 277.26 \text{ m}^{-1}$ , které po integraci v rozmezí  $z/L_{\text{char}} = 0 - 1$  dají průměrnou hodnotu ozáření  $I_{\text{av}}$  rovnou  $I_{\text{opt}} = 250 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$ .

$$I_{\text{av}} = \frac{1}{L_{\text{char}}} \int_0^{L_{\text{char}}} I(z) dz \quad (7.14)$$

V grafu je rovněž znázorněna závislost ustálené hodnoty aktivovaného stavu  $x_A$  podle rovnice (7.10) s využitím závislosti (7.13). Je zřejmé, že hodnota aktivovaného stavu je nižší u ozářené strany ( $z = 0$ ), kde je vliv fotoinhibice největší. Dále od stěny pak vliv inhibice klesá



Obr. 7.8: Závislost ozáření  $I$  na prostorové souřadnici  $z$  podle Beer-Lambertova zákona.  $I_0 = 1391.7 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ,  $\Lambda = 277.26 \text{ m}^{-1}$ .

a aktivovaný stav roste až k nějakému maximu, za kterým dochází k poklesu, tentokrát však z důvodu nedostatku světla. Pozorný čtenář si zde jistě všimnul jednotek  $\mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$ . To je převažující způsob značení energie dopadajícího osvětlení v literatuře věnované fotosyntetickým procesům. Jednotka E (Einstein) představuje jeden mol fotonů, tj.  $6.023 \times 10^{23}$  fotonů. Jeden  $\mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$  je tedy  $6.023 \times 10^{17}$  fotonů dopadajících na plochu  $1 \text{ m}^2$  za 1 s.

Pokud v systému fotosyntetické továrny (7.5) budeme navíc uvažovat závislost ozářenosti  $I$  na prostorové souřadnici, dostaneme již systém s distribuovanými parametry, jinými slovy systém popsáný parciálními diferenciálními rovnicemi. Budeme-li chtít zahrnout i vliv prostorové závislosti koncentrace řasových buněk (nebo jejich individuálních stavů) dané prouděním řasové suspenze v konkrétním zařízení, je zřejmé, že již nezbyvá než celý systém řešit s pomocí prostředků CFD.

### 7.3 Implementace PSF modelu v ANSYS Fluent

ANSYS Fluent poskytuje několik různých přístupů při modelování reakčních dějů probíhajících v daném systému. V této kapitole se budeme soustředit jen na klasický případ homogenních reakcí probíhajících v celém objemu reakční směsi, kdy je rychlost reakce v zásadě dána stechiometrií příslušných reakcí. Obecně lze tedy reakční člen  $R_A$  v rovnici přenosu hmoty (2.23) pro složku A vyjádřit jako sumu přes všechny reakce  $r_i$ , kterých se daná složka účastní

$$R_A = M_A \sum_i \nu_{Ai} r_i \quad (7.15)$$

Zde  $r_i$  představuje molární reakční rychlost příslušné reakce, která je, v případě elementárních reakcí, úměrná koncentracím výchozích složek a reakční konstantě. Například pro reakci prvního řádu složky A na složku B



lze reakční rychlost popsat pomocí

$$r = k c_A, \quad (7.17)$$

kde  $c_A$  představuje molární koncentraci složky A a  $k$  je reakční konstanta. Ta může záviset na teplotě, kterou lze vyjádřit pomocí Arrheniovy rovnice

$$k = k_0 e^{-E/(RT)} \quad (7.18)$$

kde  $E$  představuje aktivační energii a  $R$  je univerzální plynová konstanta. Pokud bychom se soustředili na nestacionární bilanci složky A v systému bez jakékoliv konvekce či difuze, tedy jen s reakčním členem, můžeme transportní rovnici (2.20) nebo (2.23) upravit do tvaru

$$\frac{d\rho_A}{dt} = R_A = M_A \sum_i \nu_{Ai} r_i \quad (7.19)$$

Pro jednoduchou elementární reakci prvního řádu popsanou stechiometrickou rovnicí (7.16) a kinetickou rovnicí (7.17) můžeme dostat

$$\frac{dc_A}{dt} = -k c_A, \quad (7.20)$$

což by šlo za předpokladu konstantní celkové molární koncentrace přepsat i do tvaru pro molární zlomky

$$\frac{dx_A}{dt} = -kx_A \quad (7.21)$$

Model fotosyntetické továrny vyobrazený na obr. 7.4 a popsáný rovnicemi (7.5) v zásadě představuje soustavu několika reakcí, které by šlo shrnout následovně



Složka (aktivovaný stav) A se v této soustavě účastní celkem 3 reakcí. U prvních dvou zde vystupuje jako výchozí složka (reaktant), ve třetí jako produkt. S využitím výše zmíněných vztahů (7.15), (7.19) lze tedy pro aktivovaný stav (složku) A napsat následující

$$\frac{dx_A}{dt} = -\gamma x_A - \beta I x_A + \alpha I x_R, \quad (7.23)$$

což je úplně stejné jako první rovnice v (7.5). Obdobně by šlo odvodit i vztahy pro další stavy (složky) B a R. V zásadě tento systém rovnic splňuje model homogenních reakcí tak jak je definovaný v ANSYS Fluent. Jediný problém je, že v ANSYS Fluent pro reakční konstanty příslušných reakcí nelze definovat závislost na prostorové (či jiné) souřadnici, která je u modelu PSF schována v ozářenosti  $I$ . Tudíž jedinou možností je použít uživatelem definované funkce (UDF), které umožňují nadefinovat funkci popisující celý reakční člen  $R_A$  v transportní rovnici (2.23).

### 7.3.1 Definice reakčního členu pomocí UDF

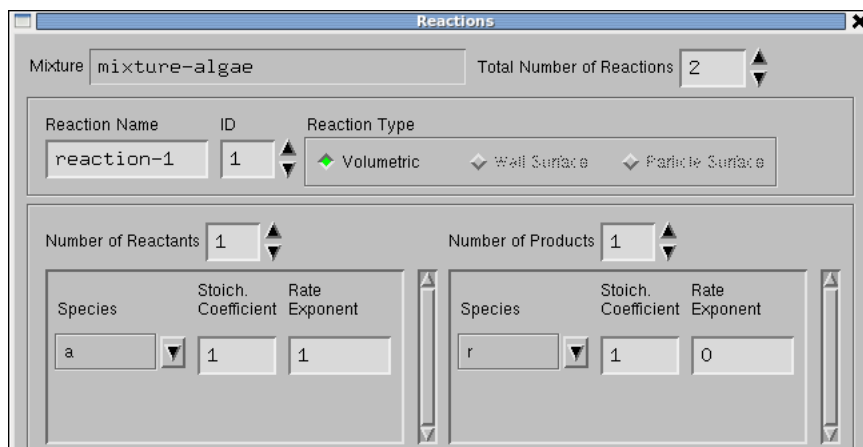
ANSYS Fluent poskytuje makro `DEFINE_VR_RATE`, které lze použít pro definici jedné či více reakcí v transportní rovnici pro přenos hmoty (2.23).

```
DEFINE_VR_RATE (name, c, t, r, Mw, omega, rate, rr_t)
```

Toto makro při definici požaduje několik parametrů:

<code>name</code>	název UDF funkce viditelný v rámci programu ANSYS Fluent
<code>c</code>	index buňky (cell index)
<code>t</code>	ukazatel na vlákno buněk (thread cell)
<code>r</code>	ukazatel na datovou strukturu dané reakce
<code>Mw</code>	pole molárních hmotností jednotlivých složek
<code>omega</code>	pole hmotnostních zlomků jednotlivých složek
<code>rate</code>	ukazatel na reakční rychlost v laminárním režimu
<code>rr_t</code>	ukazatel na reakční rychlost v turbulentním režimu





Obr. 7.9: Ukázka dialogového boxu v ANSYS Fluent při definici reakční rychlosti.

Pokud potřebujeme v rámci zmíněné funkce molární koncentraci příslušné složky, abychom mohli vyjádřit reakční rychlost ve tvaru (7.17), lze použít jednoduchý vztah

$$c_A = \frac{\rho_A}{M_A} = \frac{\rho \omega_A}{M_A}, \quad (7.24)$$

kde hmotnostní koncentraci složky  $\rho_A$  můžeme dále vyjádřit pomocí hmotnostního zlomku  $\omega_A$  a celkové hmotnostní koncentrace  $\rho$  (neboli hustoty). V našem případě PSF modelu nejsou jednotlivé stavy skutečnými složkami, ale jen dílčími stavy té samé složky, tj. řasové kultury. Proto při definici vlastně není třeba rozlišovat různé hodnoty molárních hmotností a rozlišovat mezi molárními či hmotnostními zlomky. Ty jsou v případě modelu PSF všechny stejné.

Při definici reakční rychlosti pomocí UDF funkce v ANSYS Fluent je třeba si uvědomit, že představuje hodnotu bez stechiometrického koeficientu lišícího se znaménkem – pro výchozí složky a + pro produkty (v ANSYS Fluent jsou však hodnoty stechiometrických koeficientů specifikovány bez znaménka, viz obr. 7.9), znaménko je k nim doplněno automaticky podle toho, jestli se nacházejí v sekci reaktantů nebo produktů. Následující úsek kódu demonstruje použití pro reakci prvního řádu (7.16) s reakční rychlostí popsanou rovnicí (7.17).

```
DEFINE_VR_RATE (myrate1, c,t,r,Mw,omega,rate,rr_t)
{
  real ca, dca, ra;

  ca = C_R(c,t)/Mw[0]*omega[0];
  ra = K*ca; dca = -ra; /* nebo dca = -K*ca */
  *rate = ra; /* nebo *rate = -dca */
  *rr_t = *rate;
}
```

Při definici modelu fotosyntetické továrny (PSF) bychom mohli vytvořit samostatné definice všech čtyř reakcí jako je uvedeno v rov. (7.22). Druhou možností je vyjít ze soustavy pouze dvou rovnic (7.8), které také představují zcela definovaný systém, protože třetí složka (stav) je doplňkem do 1, viz rov. (7.9). V rámci definované funkce je v případě více reakcí nutné rozlišit, o jakou reakci se jedná. S pomocí funkce `strcmp` lze provést porovnání s názvem reakce, který byl zvolen v dialogovém boxu při definici reakce v ANSYS Fluent (*Reaction Name*, viz obr. 7.9). Následuje zkrácená verze definice PSF modelu použitá při simulacích, ve které je již zahrnutá závislost ozáření  $I$  na souřadnici podle Beer-Lambertova vztahu (7.13). Ke zjištění aktuální pozice je zde využito makro `C_CENTROID`, které vrátí pole (vektor) hodnot odpovídajících souřadnicím aktuální buňky s indexem  $c$ .

```

#define RESTED 0          /* indexy složek podle seznamu */
#define ACTIVE 1         /* mixture/species/names/selected species */
#define INHIBITED 2

#define ALPHA 1.935e-3
#define BETA 5.785e-7
#define GAMMA 1.46e-1
#define DELTA 4.796e-4
#define I0 1391.7
#define AEXP 277.26

DEFINE_VR_RATE (myrate_PSFab, c,t,r,Mw,omega,rate,rr_t)
{
  real pos[ND_ND]; /* souradny vektor */
  real x,y,z,I,xa,xb,xr,dxa,dxb,cRMw;

  C_CENTROID(pos,c,t);
  z = pos[1];          /* souradnice - vzdalenost od steny */
  I = I0*exp(-AEXP*z); /* ozarenost - zavislost na souradnici */

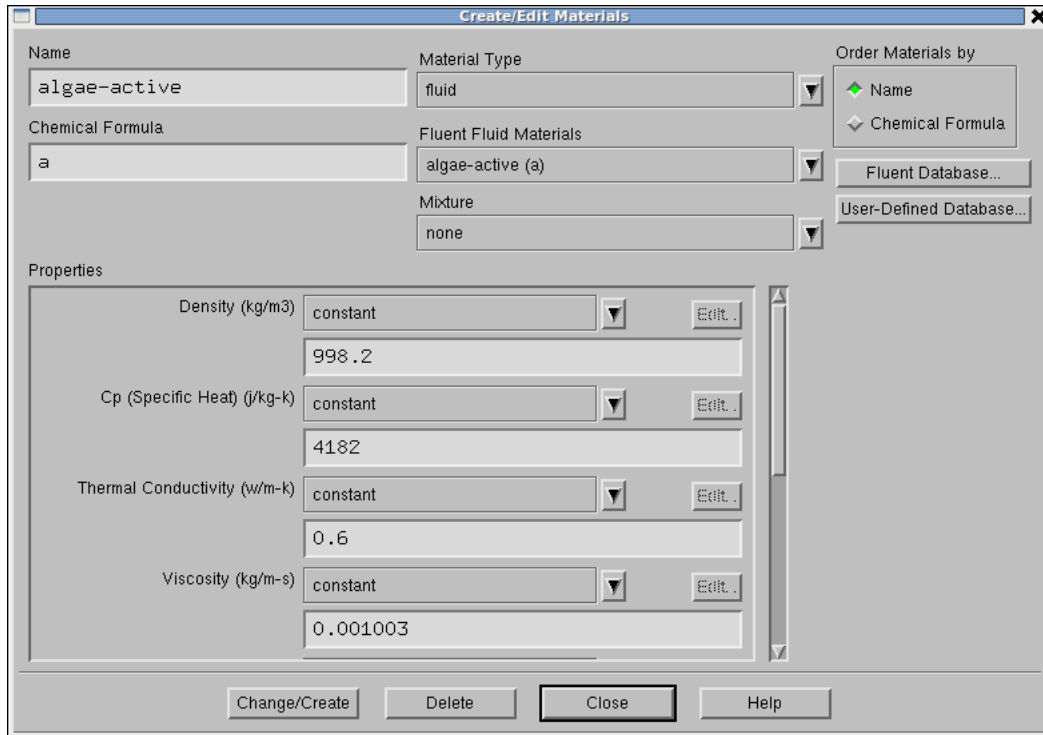
  /* ca = C_R(c,t)/Mw[ACTIVE] * omega[ACTIVE]; */
  cRMw = C_R(c,t)/Mw[ACTIVE];
  xa = omega[ACTIVE];
  xb = omega[INHIBITED]; /* xr = omega[RESTED]; */

  if (!strcmp(r->name,"reaction-1")) {
    dxa = -( (ALPHA+BETA)*I+GAMMA )*xa + ALPHA*I*(1-xb);
    *rate = -dxa*cRMw;
  }
  else if (!strcmp(r->name,"reaction-2")) {
    dxb = BETA*I*xa - DELTA*xb;
    *rate = -dxb*cRMw;
  }
  *rr_t = *rate;
}

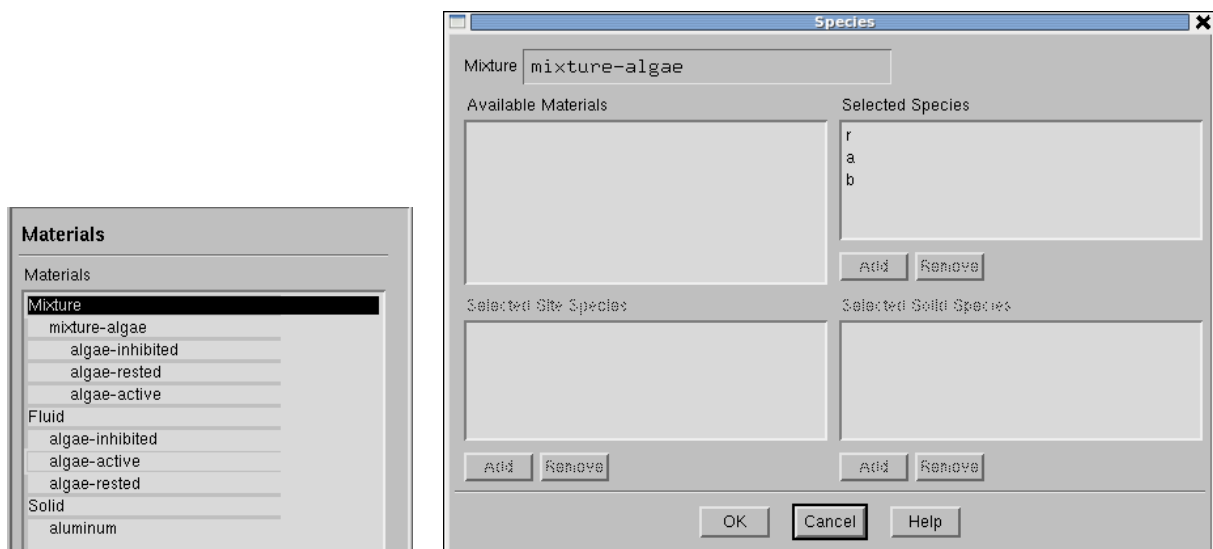
```

Pro zjištění hustoty je v předchozí definici použito makro C\_R, i když v tomto případě byl celý případ řešen jako systém s konstantními látkovými vlastnostmi, tudíž by zde šlo použít čistě jen konstantní hodnotu. Obdobně by nebylo nutné se odkazovat na individuální molární hmotnosti jednotlivých stavů (složek) při vyjádření podílu hustoty molární hmotnosti, který je součástí rovnice (7.24), protože jednotlivé stavy řasových buněk se vztahují k té samé složce. Rovněž tak není nutné rozlišovat mezi molárními a hmotnostními zlomky. Při definici jednotlivých stavů byly v ANSYS Fluent vytvořeny samostatné složky (species) se stejnými vlastnostmi jako voda, viz obrázek 7.10. Indexy jednotlivých složek (stavů) použitých ve výše zmíněné uživatelské funkci odpovídají pořadí daných složek v dialogovém boxu *Species*, viz vpravo na obr. 7.10. Tj. rested stav má index 0, aktivní stav 1, a inhibovaný 2. Z nich pak byla sestavena směs (mixture, viz obr. 7.11) jednotlivých stavů (složek).

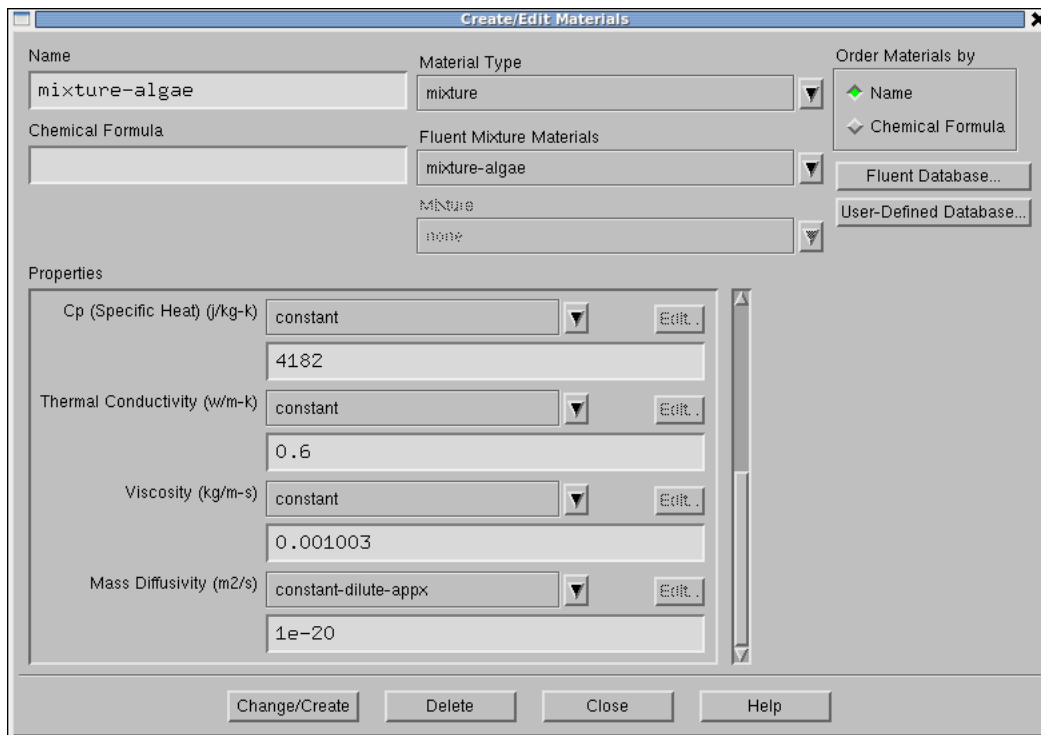
Protože stavy nepředstavují skutečné složky a tudíž se neúčastní přenosu hmoty na molekulární úrovni jako by tomu bylo u skutečných složek, byla u definice směsi nastavena hodnota difúzního součinitele blízka nule,  $1 \times 10^{-20} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  (s nulovou hodnotou výpočet selhával), viz obr. 7.12.



Obr. 7.10: Dialogový box s definicí jednoho (aktivního) ze stavů řasové kultury.



Obr. 7.11: Vlevo je přehled jednotlivých složek (stavů) řasové směsi definované v ANSYS Fluent, napravo pak pořadí složek směsi, které odpovídá příslušným indexům 0, 1, 2 v definici UDF.



Obr. 7.12: Dialogový box s nastavením difúzního součinitele pro směs složek (stavů).

## Redukovaný PSF systém

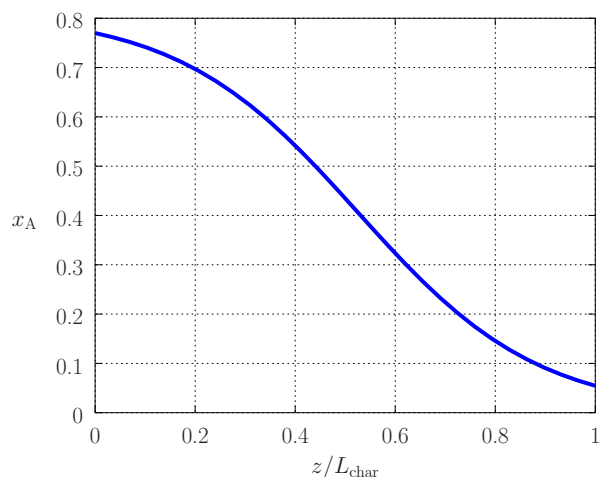
Jak již bylo zmíněno, PSF model představuje reakční systém s velice (řádově) rozdílnými časovými měřítky. Časové měřítko vztahující se k aktivovanému stavu je v řádu sekund, zatímco inhibovaný stav se mění pomalu, v řádu hodin. Ve zjednodušeném případě by šlo tedy jeho změnu zanedbat a nahradit inhibovaný stav jeho stacionární hodnotou  $\bar{x}_B$  podle rovnice (7.11), a dále se soustředit jen na zbylý aktivovaný stav. Pak by se původní soustava tří rovnic (7.5) nebo dvou rovnic (7.8) zredukovala již jen na jedinou rovnici

$$\frac{dx_A}{dt} = - [(\alpha + \beta)I + \gamma] x_A + \alpha I (1 - \bar{x}_B) \quad (7.25)$$

U této rovnice je ale myslím zřejmé, že není schopna postihnout fotoinhibici poblíž osvětlené stěny a maximum aktivovaného stavu o něco dále od stěny (jako u původního neredukovaného systému, obr. 7.6). Stacionární řešení tohoto zjednodušeného případu lze vyjádřit jako

$$\bar{x}_A = \frac{\alpha I (1 - \bar{x}_B)}{(\alpha + \beta)I + \gamma}, \quad (7.26)$$

a pokud budeme uvažovat exponenciální závislost ozáření  $I$  na souřadnici podle rovnice (7.13), bude i výsledná závislost aktivovaného stavu monotónní, viz. obr. 7.13. Nicméně pro analýzu systému a vlivu promíchávání může být tento zjednodušený systém užitečný, zejména proto, že není třeba simulovat dlouhý časový interval v řádu hodin, ale stačí se soustředit jen na časy v řádu sekund. Implementace tohoto zjednodušeného modelu v ANSYS Fluent je velice jednoduchá, stačí jen trochu upravit UDF funkci z předchozího textu – v části pro druhou reakci je změna inhibovaného stavu nulová, a u první reakce místo aktuální hodnoty  $x_B$  použijeme konstantní hodnotu odpovídající stacionárnímu stavu  $\bar{x}_B$ . Nebo zde můžeme použít aktuální hodnotu  $x_B$ , pokud ji správně nastavíme jeho počáteční hodnotu při inicializaci problému. Díky tomu, že je rychlost druhé reakce nulová, zůstane hodnota  $x_B$  po celou dobu konstantní.



Obr. 7.13: Závislost aktivovaného stavu na prostorové souřadnici u redukovaného systému (7.25) s konstantní hodnotou inhibovaného stavu odpovídající stacionární hodnotě  $\bar{x}_B$ .

```

...
#define XBSS 0.18804

DEFINE_VR_RATE (myrate_PSFab_XBSS, c,t,r,Mw,omega,rate,rr_t)
{
    ...
    if (!strcmp(r->name,"reaction-1")) {
        dxa = - ( (ALPHA+BETA)*I+GAMMA ) *xa + ALPHA*I*(1-XBSS);
        *rate = -dxa*cRMw;          /* nebo ALPHA*I*(1-xb); */
    }
    else if (!strcmp(r->name,"reaction-2")) {
        dxb = 0.0;
        *rate = 0.0;      /* -dxb*cRMw; */
    }
    ...
}

```

## 7.4 Simulace proudění včetně PSF modelu

Je zřejmé, že v reálném systému nelze zajistit takovou distribuci ozáření, která by odpovídala optimální hodnotě a maximu specifické růstové rychlosti, která je úměrná aktivovanému stavu (viz rov. 7.6). V reálu je totiž blízko osvětlené hranice systému taková hodnota ozáření, která většinou růst výrazně potlačí (fotoinhibice), a na opačné straně systému je pak zase hodnota ozáření příliš nízká. Někde mezi pak existuje optimum (maximum), jak je například zobrazeno na obr. 7.6 nebo 7.8. V průmyslovém měřítku (nikoliv v laboratoři) si lze však těžko představit, jak bez možnosti regulace osvětlení (zdrojem je například sluneční záření) tohoto optimálního stavu dosáhnout v systému bez nějakého promíchávání. To je právě klíčem k dosažení větší výtěžnosti, kdy zajistí „rozředění“ příliš intenzivního světelného záření a v principu funguje jako střídání cyklů světlo/tma (hodně světla/méně světla), což, jak bylo ověřeno experimentálně v laboratorním měřítku [Kok, 1953; Terry, 1986; Nedbal et al., 1996], dává šanci fotoinhibovaným buňkám k regeneraci a opětovné iniciaci růstu. Stejné chování PSF modelu bylo ověřeno v případě konkrétních geometrií, Papáček et al. [2011, 2012], avšak bez simultánního řešení hydrodynamiky v daném systému. To samozřejmě omezuje aplikaci takových výsledků na jiné geometrie, kde je nutné nějakým způsobem kvantifikovat vliv promíchávání systému.

Současné řešení hydrodynamiky, tj. Navier-Stokesových rovnic, spolu se systémem rovnic

popisujících model fotosyntetické továrny (PSF) představuje výrazně univerzálnější přístup, který lze využít prakticky pro libovolné geometrie, kde jsme schopni řešit proudění. PSF model lze do systému ANSYS Fluent implementovat pomocí UDF funkce prezentované v předchozí kapitole a postihující změnu ozářenosti s prostorovou souřadnicí (ale bez problémů by šla implementovat i časová závislost odpovídající například změně intenzity osvětlení během dne). Takový přístup pak lze snadno využít při návrhu parametrů konkrétního zařízení, optimalizaci provozních nebo konstrukčních parametrů atp.

### 7.4.1 Čtvercová kavita

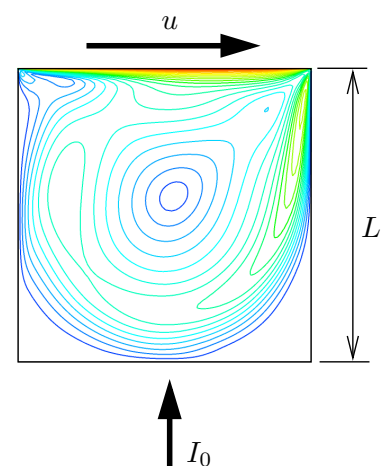
Ověření přístupu, integrujícího dohromady řešení Navier-Stokesových rovnic spolu s kinetikou PSF modelu, bylo provedeno na dvou případech. Prvním z nich je 2-D model čtvercové kavity s pohybující se jednou stěnou a osvětlený z druhé strany, viz obr. 7.14. Tento případ představuje zjednodušený pohled na výřez 3-D geometrie Couette-Taylorova zařízení (viz obr. 7.15), kde za určitých podmínek vznikají vlivem odstředivých sil víry, které se charakterem proudění v kavitě podobají (samozřejmě ne zcela, ale jak bude ukázáno později, výsledky jsou si docela podobné).

Geometrie a síť čtvercové kavity s pohybující se stěnou byla vytvořena v prostředí ANSYS Workbench s použitím nástrojů DesignModeler a Meshing. Při finálních výpočtech byla použita síť o velikost zhruba 10 tisíc buněk, se zjemněnými elementy u stěn, aby tak byla podchycena laminární podvrstva ( $y^+ \approx 1$ ) a nebylo nutné používat stěnové funkce v režimu turbulentního proudění. V takových případech pak byl používán model turbulence SST  $k - \omega$ .

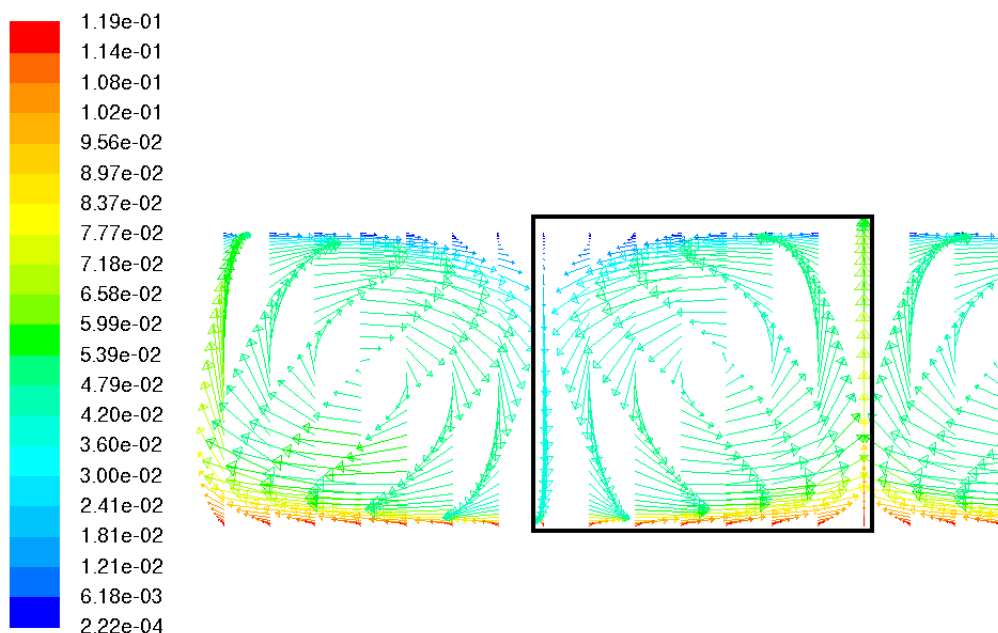
Byla provedena analýza vlivu velikosti sítě na přesnost řešení, kde pro nejjemnější síť byla stanovena hodnota GCI indexu 1.14 %. Tato hodnota je založena na lokální velikosti rychlosti uprostřed kavity, pro střední hodnoty rychlostí byly hodnoty GCI indexu menší. Podrobnosti jeho stanovení viz kapitola 4.3.2 na straně 38 nebo Celik et al. [2008].

#### Vliv velikosti časového kroku na přesnost řešení

Vedle GCI indexu vztaženého k velikosti sítě byl vyhodnocen i vliv velikosti časového kroku na přesnost řešení. Princip jeho stanovení je stejný jako u analýzy vlivu velikosti sítě (elementů), s tím rozdílem, že místo velikosti elementu  $h$  v rovnici (4.35) či na obrázku 4.9 použijeme



Obr. 7.14: Kontury rychlostí ve čtvercové kavitě s pohybující se horní stěnou ( $Re = 1000$ ).



Obr. 7.15: Vektory rychlostí v axiálním řezu Couette-Taylorova zařízení, kde vyznačený čtverec představuje vybranou oblast pro zjednodušenou aproximaci pomocí čtvercové kvity s pohybující se stěnou ( $Re = 2000, \omega = 2.4 \text{ rad s}^{-1}$ ). Osa Couette-Taylorova zařízení je zde orientována vodorovně.

velikost časového kroku. Dalším rozdílem je, že rozměr problému je tomto případě 1-D, tudíž parametr  $D = 1$  a velikost časového kroku je vlastně nepřímo úměrná počtu časových kroků bez jakékoliv odmocniny (viz rov. 4.34)

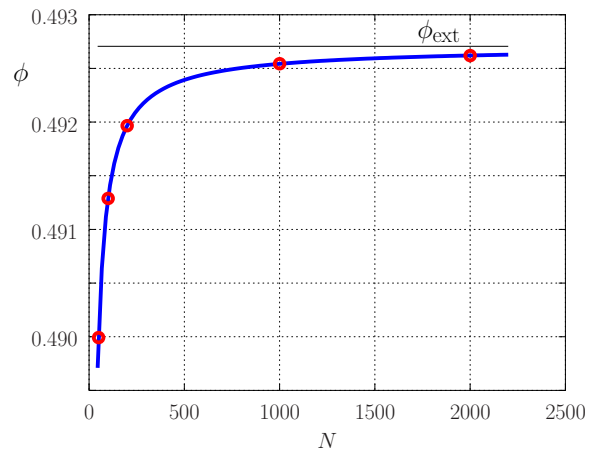
$$\Delta t = h \approx \frac{1}{N} \quad (7.27)$$

Tabulka 7.2 ukazuje hodnoty GCI indexu pro různé velikosti časového kroku, kdy porovnávanou veličinou byla zprůměrovaná hodnota aktivovaného stavu  $x_A$  na konci časového intervalu simulace 5 s. Analýza byla provedena pro  $Re = 1000$  a zjednodušený případ redukovaného modelu (7.25), tj. se zanedbáním vlivu pomalé reakce odpovídající fotoinhibici, kdy místo časové (a prostorové) závislosti inhibovaného stavu  $x_B$  byla použita konstantní hodnota podle rovnice (7.11) pro optimální hodnotu ozáření  $I = 250 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Ta je v případě parametrů PSF modelu z tabulky 7.1 rovna hodnotě 0.18804.

GCI index v tabulce 7.2 byl vyhodnocen dvěma způsoby. První způsob využívá postupné vyhodnocení vždy jen trojice řádků ze získaných dat (celkem šest různých hodnot časových

Tabulka 7.2: Vyhodnocený GCI index u čtvercové kvity pro různé hodnoty časových kroků. Porovnávanou veličinou byla zprůměrovaná hodnota aktivovaného stavu  $x_A$  na konci časového intervalu simulace 5 s. Analýza byla provedena pro  $Re = 1000$  a redukovaný systém (7.25) zanedbávající vliv pomalé reakce (fotoinhibice).

$\Delta t$ [s]	$N$	$\phi \equiv x_A$	GCI [%]	GCI-fit [%]
0.1	50	0.4899921	0.693	0.692
0.05	100	0.4912886	0.361	0.360
0.025	200	0.4919665	0.188	0.187
0.0005	1000	0.4925437	0.042	0.041
0.00025	2000	0.4926194	0.020	0.021
0.00001	5000	0.4926651	0.0078	0.0097



Obr. 7.16: Zobrazení hodnot z tabulky 7.2 a modelové funkce(4.33) při regresní analýze vlivu časového kroku na přesnost řešení.

kroků, 0.00001 – 0.1 s), tak jak je uvedeno v kapitole 4.3.2 na straně 38 (nebo v originální referenci Celik et al. [2008]). Výsledné hodnoty jsou v předposledním sloupci této tabulky. Druhý způsob je založen na regresní analýze, tj. hledání takových hodnot parametrů modelové funkce (4.33) nebo (4.35), které splňují minimální součet čtverců odchylek od hodnot získaných numerickou simulací. Výsledná hodnota GCI indexu získaná regresní analýzou na základě rovnice (4.43) pro různé časové kroky je uvedena v posledním sloupci tabulky 7.2. Je zde vidět, že výsledky se příliš neliší od postupu popsaném v kapitole 4.3.2 (předposlední sloupec). Hodnota extrapolované hodnoty  $\phi_{\text{ext}}$  byla výše uvedeným skriptem stanovena jako 0.4927, a hodnota exponentu  $p$  pak 0.94. Hodnota exponentu  $p$  je blízká hodnotě 1 a odpovídá tak časové diskretizaci prvního řádu přesnosti, která byla použita v programu ANSYS Fluent ve všech nestacionárních výpočtech uvedených v této práci. Tuto regresní analýzu a vyhodnocení GCI indexu by šlo provést následujícím skriptem v Matlabu s grafickým výstupem znázorněným na obr. 7.16.

```
data = load('gci5s.dat');
N = data(:,1); Phi = data(:,2); D = 1;
fmodel = @(b,N) b(1) + b(2)*N.^(-b(3)/D);
b = nlinfit(N,Phi,fmodel,[0.5,0.5,1])
Phi_ext = b(1)
p = b(2)
n = linspace(0.9*min(N),1.1*max(N),100);
plot(N,Phi,'ro', n,fmodel(b,n),'b', [n(1) n(end)], [Phi_ext Phi_ext], 'k');
grid on;
GCI = 1.25*abs(Phi-Phi_ext)./Phi*100
```

```
Phi_ext = 0.49270
p = 0.93973
GCI =
    0.6916924
    0.3599819
...
```

Tento alternativní postup pro stanovení GCI indexu založený na regresní analýze může být výhodný v případech, kdy máme veliké počty elementů (nebo časových kroků) a dodržení minimálních doporučených poměrů  $r_{21}, r_{32} > 1.3$  mezi následnými sítěmi (nebo časovými kroky) podle rovnice (4.47) je výpočetně příliš náročné. Celik et al. [2008] tyto poměry doporučuje proto, aby výsledky této analýzy byly dostatečně průkazné, ale pro veliké počty elementů mohou pak být značně restriktivní. Například když začneme s nejmenší sítí o velikosti 1 milion elementů, tak pro 3-D problém by následná velikost sítě měla být  $1.3^3$  krát větší, tj. zhruba 2.2



Tabulka 7.3: Vyhodnocený GCI index u čtvercové kavity pro různé hodnoty časových kroků. Porovnávanou veličinou byla zprůměrovaná hodnota aktivovaného stavu  $x_A$  na konci časového intervalu simulace 5000 s. Analýza byla provedena pro  $Re = 10^5$  a neredukovaný systém (7.8).

$\Delta t$ [s]	$N$	$\phi \equiv x_A$	GCI [%]
0.025	400000	0.6172431	3.02
0.1	100000	0.6286454	5.22
0.25	40000	0.6172431	7.47

milionu buněk. Další síť by pak již měla mít 4.83 mil. buněk. V takovém případě může být efektivnější napočítat si hodnoty sledované veličiny pro více sítí než jsou jen potřebné tři, které jsou ale méně rozdílné, tj. nesplňují kritérium (4.47), např. 1, 1.1, 1.2, 1.3, 1.4 miliónu buněk, a pak použít výše uvedený postup založený na regresní analýze.

V tabulce 7.3 je uveden vyhodnocený GCI index standardním způsobem pro tři velikosti časového kroku a neredukovaný systém (7.8), tj. systém, který korektně zachycuje i pomalou reakci (fotoinhibici). Porovnávanou veličinou byla opět zprůměrovaná hodnota aktivovaného stavu  $x_A$ , tentokrát na konci časového intervalu simulace 5000 s. Analýza byla provedena pro  $Re = 10^5$ , a vzhledem ke značně delšímu časovému intervalu a větší rychlosti proudění uvnitř systému jsou i hodnoty GCI indexu vyšší než v předchozím případě (redukovaný systém,  $Re = 1000$ ). Pro čtvercovou kavitu byl pak ve většině následných simulací použit časový krok 0.025 s.

## Produktivita

Produktivita tvorby biomasy v bioreaktoru je obecně dána specifickou růstovou rychlostí, viz rov. (7.1) nebo (7.2). Pokud bychom rozšířili rovnici (7.1) o členy představující přítok a odtok, dostaneme rovnici bilancující hmotu biomasy v takovém (průtočném) systému

$$\frac{dc_X}{dt} = \frac{\dot{V}}{V} (c_{X0} - c_X) + \mu c_X \quad (7.28)$$

Poměr objemového průtoku  $\dot{V}$  a objemu reaktoru  $V$  se někdy označuje jako zředovací rychlost  $D_r$ . Ve stacionárním případě s nulovou koncentrací na vstupu dostaneme

$$D_r c_X = \mu c_X, \quad D_r = \mu \quad (7.29)$$

Tato rovnice v zásadě vyjadřuje, jaké množství biomasy vztažené na objem v systému vznikne za jednotku času a představuje tedy v zásadě tzv. produktivitu

$$Pr = \mu c_X = D_r c_X \quad (7.30)$$

Je zřejmé, že klíčem k vyšší produktivitě (produkci biomasy) je právě specifická růstová rychlost  $\mu$ , když je vyšší, je vyšší i produktivita systému. V případě systému popsaného modelem PSF (7.5) je specifická růstová rychlost úměrná aktivovanému stavu  $x_A$ , viz rovnice (7.6). Zintegrujeme-li jej přes celý objem daného systému, dostaneme hodnotu úměrnou produktivitě vztažené na koncentraci biomasy. To zde dále bude označeno symbolem  $J$ .

$$\frac{Pr}{c_X} = \int_V \mu dV \approx J = \frac{1}{V} \int_V x_A dV \quad (7.31)$$

Výše uvedený vztah samozřejmě platí jen v ustáleném stavu či nějakém konkrétním časovém okamžiku a navíc při konstantní koncentraci biomasy. V případě, kdy se koncentrace nebo stavy

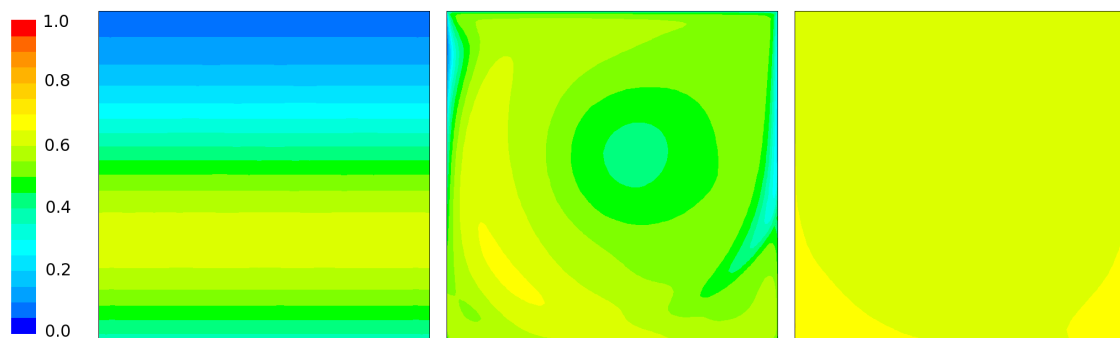
řasové kultury mění s časem, museli bychom provést integraci i přes daný časový úsek, a případně zahrnout do integrálu i měnící se koncentraci biomasy  $c_x$ . Ale přímá úměra mezi produktivitou a zprůměrovanou hodnotou  $x_A$  bude stále zachována, bez ohledu na časovou či prostorovou závislost koncentrace biomasy. V praxi se většinou snažíme o dosažení stacionárního stavu, a v případě intenzivního promíchávání systému se můžeme blížit ideálně míchanému systému, kdy koncentrace jednotlivých složek nezávisí ani na souřadnici. Při návrhu zařízení se pak snažíme nalézt takové parametry celého procesu, které odpovídají nějakému optimu z hlediska produkce biomasy či jiných metabolických produktů.

## Výsledky simulací ve čtvercové kavitě

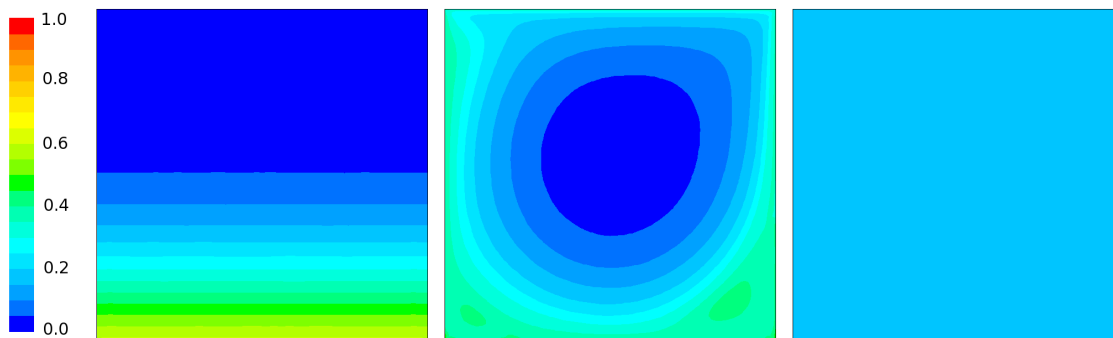
Simulace proudění včetně implementovaného PSF modelu pomocí UDF funkce ve čtvercové kavitě byly založeny na několika zjednodušujících předpokladech. Jedním z nich je, že rozptýlená řasová kultura nemá zásadní vliv na samotné proudění, tudíž lze celý systém řešit jako jednofázový systém. To je zejména podpořeno tím, že velikost částic (řasových buněk) je v řádu mikrometrů, viz obr. 7.5 případně [Wu a Merchuk, 2002], a dále i předpokladem, že celková koncentrace řas v systému je v řádu několika (jednotek) procent. Při vyšších koncentracích (řekněme nad 10 %) by samozřejmě bylo nutné vzít do úvahy, že se to může projevit například ve viskózním chování celého systému, hustotě, atp. V reálném systému je navíc často nutné nějak dodávat oxid uhličitý, který je nezbytnou podmínkou fotosyntézy, což opět implikuje vícefázový systém. V tomto případě to vše bylo zanedbáno, protože hlavním cílem byla implementace PSF modelu do ANSYS Fluent a ověření jeho chování. Po té by již neměl být problém tento model používat i pro vícefázové systémy.

Další zjednodušení při modelování v ANSYS Fluent částečně vyplynulo z toho, že kavita je uzavřený systém, tudíž pokud bychom chtěli modelovat i změnu množství biomasy jak je definováno s pomocí specifické růstové rychlosti rovnicí (7.1), narůstala by nám její koncentrace s postupujícím časem až do nekonečna. Tudíž bylo uvažováno, že koncentrace biomasy je víceméně konstantní a modelovány byly pouze změny jednotlivých stavů podle PSF modelu (7.5).

Obrázek 7.17 ukazuje rozložení aktivovaného stavu  $x_A$  ve čtvercové kavitě pro různé intenzity proudění, vyjádřené pomocí Reynoldsova čísla  $Re = uL/\nu$  (rychlost  $u$  odpovídá rychlosti pohybující se horní hrany čtvercové kavity,  $L$  je velikost hrany čtverce, viz obr. 7.14). Byla použita implementace PSF modelu popsaná rovnicemi (7.8), tj. neredukovaný model, definovaný UDF funkcí `myrate_PSFab` na str. 91.



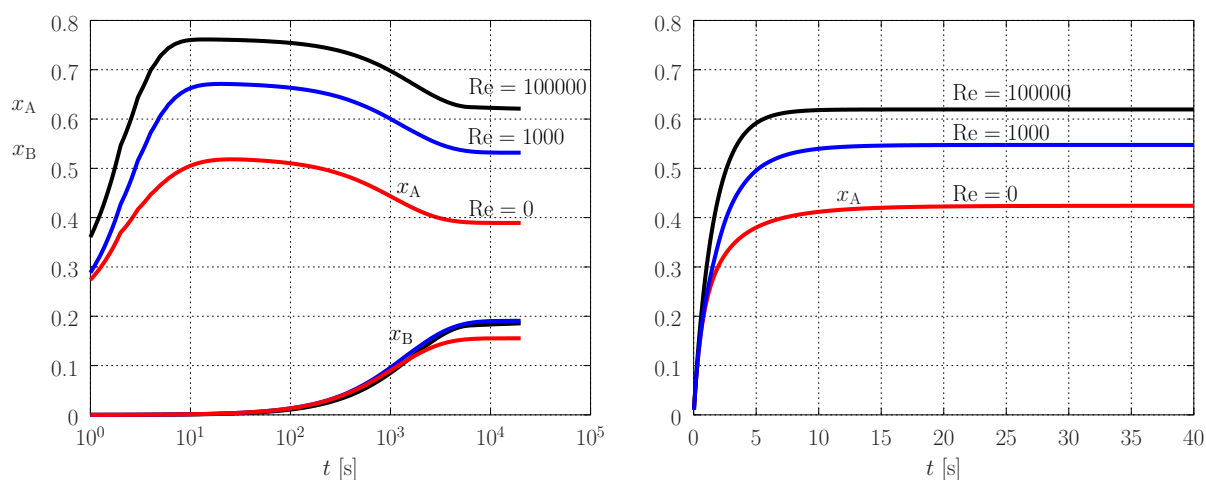
Obr. 7.17: Kontury aktivovaného stavu  $x_A$  v systému čtvercové kavity pro různé intenzity míchání – zleva jsou Reynoldsova čísla  $Re=0, 1000, 100000$ .



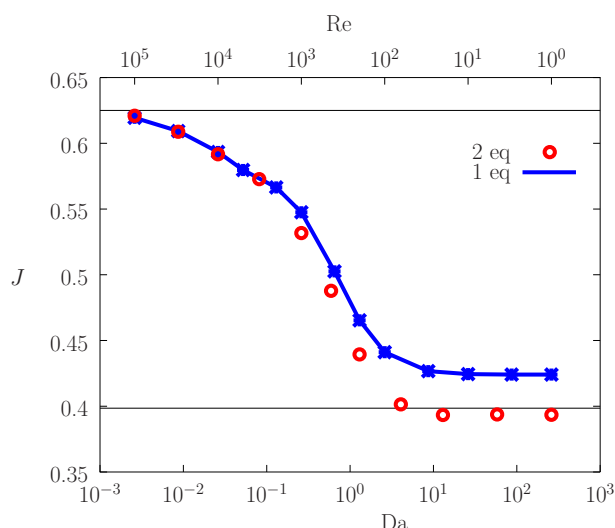
Obr. 7.18: Kontury inhibovaného stavu  $x_B$  v systému čtvercové kavity pro různé intenzity míchání – zleva jsou Reynoldsova čísla  $Re=0, 1000, 100000$ .

Zcela vlevo na obr. 7.17 je případ nulové rychlosti, čili stagnantního systému bez jakéhokoliv proudění. Je zřejmé, že rozložení aktivovaného stavu odpovídá závislosti na obr. 7.8, tj. poblíž osvětlené stěny (spodní hrana) je hodnota aktivovaného stavu menší, protože se zde projevuje vliv fotoinhibice, dále od stěny pak aktivovaný stav roste až do nějakého maxima, a pak zase klesá z důvodů nízkých hodnot osvětlení. Na opačné straně, zcela vpravo na obr. 7.17, je situace odpovídající veliké intenzitě proudění (míchání) pro  $Re = 10^5$ . Je zde vidět, že hodnota aktivovaného stavu je poměrně rovnoměrně rozprostřena po celé ploše čtvercové kavity. Zde bychom se v zásadě měli přibližovat stavu ideálně míchaného systému a zobrazené kontury aktivovaného stavu to potvrzují. Obrázek 7.18 dále pro porovnání zobrazuje kontury inhibovaného stavu  $x_B$ , které jsou v souladu s výše zmíněným vlivem fotoinhibice, který je nejvýznamnější u spodní osvětlené stěny, a s rostoucí intenzitou míchání se jeho závislost na prostorové souřadnici zmenšuje.

Obrázek 7.19 vlevo ukazuje časové průběhy prostorově zprůměrovaných hodnot (přes plochu kavity) aktivovaného a inhibovaného stavu pro různé intenzity proudění. Charakter průběhu těchto závislostí odpovídá grafu 7.7, tj. nejprve aktivovaný stav rychle (v řádu sekund) vystoupá na maximální hodnoty, a pak vlivem pomalejší fotoinhibice (v řádu hodin) klesá na ustálené hodnoty. Simulace byly provedeny pro časový interval  $0 - 20000$  s, s časovým krokem  $0.25$  s. Na vodorovné (časové) ose obr. 7.19 vlevo je logaritmické měřítko, aby byly pěkně vidět změny



Obr. 7.19: Časové průběhy prostorově zprůměrovaných hodnot (přes plochu kavity) aktivovaného a inhibovaného stavu pro různé hodnoty Reynoldsových čísel. Vlevo je systém (7.5), vpravo je redukováný systém (7.25).



Obr. 7.20: Závislost produktivity růstu řasové kultury na Damköhlerově (spodní vodorovná osa) a Reynoldsově čísle (horní osa).

s rozdílnými časovými měřítky, tj. rychlá změna aktivovaného stavu na počátku děje, a pomalejší změna inhibovaného stavu vlivem inhibice. Na pravé straně obr. 7.19 je pro porovnání uveden časový průběh aktivovaného stavu  $x_A$  pro redukovaný systém (7.25), kdy je proměnná hodnota inhibovaného stavu  $x_B$  zanedbána a je použita její ustálená hodnota  $\bar{x}_B$ , viz rov. (7.11) a odpovídající modifikací UDF funkce na str. 94. Porovnáním grafů nalevo a napravo v obr. 7.19 je vidět, že ustálené hodnoty plného a redukovaného systému nejsou od sebe tolik vzdálené, obecně platí, že čím více se daný systém blíží ideálně míchanému systému, kde veličiny nezávisí na souřadnici, tím jsou výsledky méně odlišné.

Obrázek 7.20 pak shrnuje výsledky simulací pro čtvercovou kavitu v závislosti jednak na Reynoldsově čísle (horní vodorovná osa), a pak také na Damköhlerově čísle (spodní osa). Damköhlerovo číslo obecně vyjadřuje poměr rychlostí reakce a přenosu hmoty (v našem případě konvektivního)

$$Da = \frac{\text{rychlost reakce}}{\text{rychlost konvektivního přenosu hmoty}} \quad (7.32)$$

Zavedeme-li si pro rychlost reakce časové měřítko  $t_r$ , a pro rychlost přenosu  $t_p$ , můžeme napsat

$$Da = \frac{t_r}{t_p} \quad (7.33)$$

Časové měřítko rychlosti přenosu hmoty je úměrné rychlosti pohybu horní desky čtvercové kavity

$$t_p = \frac{L}{u} \quad (7.34)$$

Co se týká časového měřítka reakce, zaměříme-li se na aktivovaný stav (ten je rozhodující v produkci biomasy), bude podle první z rovnic (7.8) úměrné

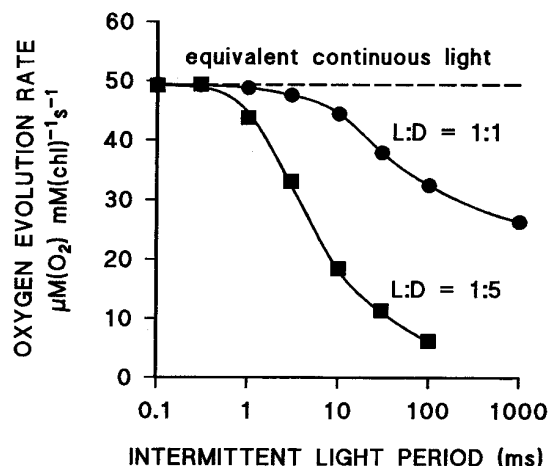
$$t_r = \frac{1}{(\alpha + \beta)I + \gamma} \quad (7.35)$$

případně podle rovnice (7.25) jen

$$t_r = \frac{1}{\alpha I + \gamma} \quad (7.36)$$

Zde je samozřejmě trochu problém s hodnotou ozáření, která závisí na souřadnici, ale šlo by místo ní použít průměrnou hodnotu  $I_{av} = 250 \mu E m^{-2} s^{-1}$ , která odpovídá optimální hodnotě

Obr. 7.21: Experimentální data [Nedbal et al., 1996] vyjadřující závislost růstu řas na velikosti periody (frekvenci) přerušovaného osvětlení. Různé hodnoty poměru L:D v obrázku znamenají poměr délky period světlo/tma (light/dark).



ozáření pro náš případ. V takovém případě pak lze hodnotu časového měřítka reakce vyčíslit pro parametry v tabulce 7.1 jako  $t_r = 1.588$  s. S využitím definice Reynoldsova čísla lze definici Damköhlerova čísla přepsat do tvaru

$$Da = \frac{\nu t_r}{L^2} Re = t_m^* Re \quad (7.37)$$

kde  $\nu$  je viskozita a  $L$  je charakteristický rozměr, a  $t_m^*$  by mohlo představovat bezrozměrný čas (obdobu Fourierova čísla), jehož převrácená hodnota je v našem případě zhruba 252. Pro reparametrizovaný systém a trochu odlišné hodnoty parametrů PSF modelu, viz Rehak et al. [2008]; Papáček et al. [2017], je hodnota  $1/t_m^* = 260$ .

Výsledná závislost produktivity růstu řasové kultury na obr. 7.20 vykazuje velmi pěknou shodu s experimentálními daty dle [Nedbal et al., 1996] na obr. 7.21. Na tomto obrázku je na vodorovné ose velikost periody přerušovaného osvětlení. Tato perioda vlastně odpovídá v případě čtvercové kavity době, kdy se nějaká částice pohybuje poblíž osvětlené stěny. A tato doba se zmenšuje s rostoucí hodnotou intenzity míchání, kdy roste rychlost cirkulace řasových buněk v systému. Jinak řečeno je nepřímo úměrná Reynoldsovu číslu. Na svislé ose obrázku 7.21 je rychlost produkce kyslíku ve sledovaném systému. Ta je v zásadě úměrná růstu řasových mikroorganismů, tj. prezentované produktivitě  $J$  na svislé ose obrázku 7.20, neboť při fotosyntéze řasy spotřebovávají oxid uhličitý (spolu s dalšími živinami) a produkují kyslík. A tento děj se odehrává jen v řasové buňce, která se nachází v aktivovaném stavu. Tabulka 7.4 shrnuje číselná data pro redukovaný a neredukovaný model a různé hodnoty Reynoldsových čísel u čtvercové kavity s pohybující se stěnou (grafické znázornění je na obr. 7.20).

## 7.4.2 Couette-Taylorovo zařízení

Couette-Taylorovo zařízení je tvořeno dvěma sousými válci (viz obr. 7.22), a v mezeře mezi nimi je tekutina, která vlivem otáčení jednoho či obou válců současně může vykazovat velmi zajímavé chování [Taylor, 1923]. Zaměříme se jen na případ otáčejícího se vnitřního válce, kdy Reynoldsovo číslo může být definováno jako

$$Re = \frac{\omega R_1 (R_2 - R_1)}{\nu} \quad (7.38)$$

Tabulka 7.4: Hodnoty faktoru  $J$  (viz rov. 7.31) po různé hodnoty Reynoldsových čísel (rychlosti pohybující se stěny) ve čtvercové kavitě. Sloupec označený „1 eq“ představuje redukováný systém (7.25), sloupec „2 eq“ pak hodnoty pro plný, neredukovaný systém (7.8).

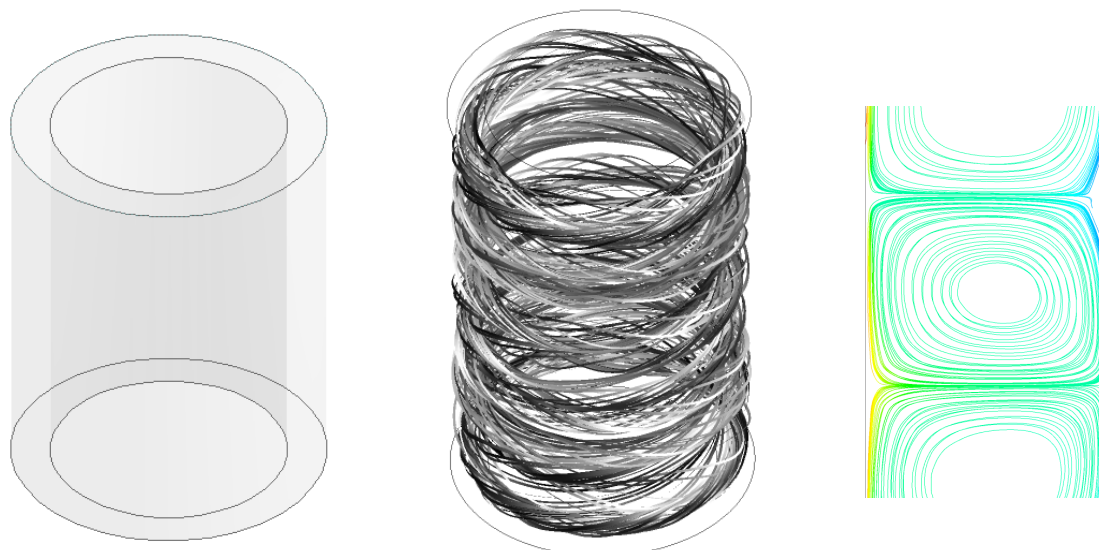
$u$ [m/s]	Re	$J - 1$ eq	$J - 2$ eq
0	0.0	0.4241	0.3893
0.00005	1.0	0.4241	0.3935
0.00015	3.0	0.4241	–
0.000224	4.5	–	0.3938
0.0005	10.0	0.4244	–
0.001	20	–	0.3934
0.0015	30	0.4267	–
0.0032	64	–	0.4015
0.005	100	0.4411	–
0.01	200	0.4653	0.4394
0.02	400	0.5026	–
0.022	440	–	0.4878
0.05	1000	0.5475	0.5317
0.1	2000	0.5665	–
0.16	3200	–	0.5727
0.25	5000	0.5797	–
0.5	10000	0.5934	0.5917
1.5	30000	0.6093	0.6088
5	100000	0.6194	0.6210

$R_1$  a  $R_2$  jsou poloměry vnitřního a vnějšího válce,  $\omega$  je úhlová rychlost otáčení. Při rozlišování jednotlivých režimů proudění se často používá tzv. Taylorovo číslo, které kromě rychlosti otáčení zahrnuje i relativní šířku mezery mezi válci a je definováno následovně [Haut et al., 2003]

$$Ta = \frac{\omega^2 R_1 (R_2 - R_1)^3}{\nu^2} = Re^2 \left( \frac{R_2 - R_1}{R_1} \right) \quad (7.39)$$

Při nízkých otáčkách v laminárním režimu se v prostoru mezi dvěma válci vyskytuje čistě tangenciální proudění. U vyšších otáček, když překročí Taylorovo číslo hodnotu  $Ta_c = 1706$  ( $Re > 155 \pm 10$ , Andereck et al. [1986]), vzniknou v zařízení vlivem odstředivých sil nestability a tzv. Taylorovy víry (Taylor vortices). Ty trochu připomínají sadu duší (pneumatik) poskládaných na sebe. Kromě toho, že se tekutina pohybuje tangenciálně podél obvodu rotujících válců, pohybuje se rovněž (v příčném řezu) směrem od vnitřního k vnějšímu válci a zpět. Se zvyšující se rychlosti otáčení ( $Ta > 1.7 Ta_c$ ) vznikne dále režim označovaný jako „wavy-vortex flow“, kdy se vzniklé víry postupně zvlíní a pak i postupují nahoru či dolů podél osy zařízení. Všechny tyto režimy se odehrávají v laminárním režimu proudění. Do turbulentního režimu, vyznačujícího se fluktuacemi složek rychlostí, se dostaneme až pro značně větší hodnoty Taylorova čísla, cca  $Ta > 100 Ta_c$ . V turbulentním režimu proudění (až do hodnoty  $Ta = 1.6 \times 10^9$ , [Haut et al., 2003]) se v systému i nadále vyskytují podobné vírové struktury jako v laminárním režimu.

Protože v režimu, kdy v Couette-Taylorově zařízení vznikají Taylorovy víry, dochází k pohybu tekutiny směrem od vnějšího k vnitřnímu povrchu válce a zpět, poskytuje tento režim vhodné podmínky k promíchávání systému s řasovou kulturou. Pokud je například vnější povrch celého zařízení ozářen dopadajícím světlem, cirkulace tekutiny umožní částečně eliminovat fotoinhibici, která by v takovém systému nastala v případě stagnantní tekutiny. Protože vírové struktury vznikají ještě v laminární oblasti proudění, je takové promíchávání navíc ohleduplné z hlediska mechanického namáhání řasových buněk (některé jsou na to citlivé a při velkých smykových napětích značně klesá jejich produkce). Na obrázku 7.22 zcela vpravo jsou zobrazeny proudnice



Obr. 7.22: Geometrie Couette-Taylorova zařízení tvořeného dvěma sousými válci, kde při otáčení jednoho či obou válců mohou za určitých podmínek vznikat vírové struktury proudění. Zcela vpravo jsou zobrazeny proudnice ve svislém řezu (rovině), které jasně ilustrují cirkulační pohyb tekutiny mezi vnitřním a vnějším válcem.

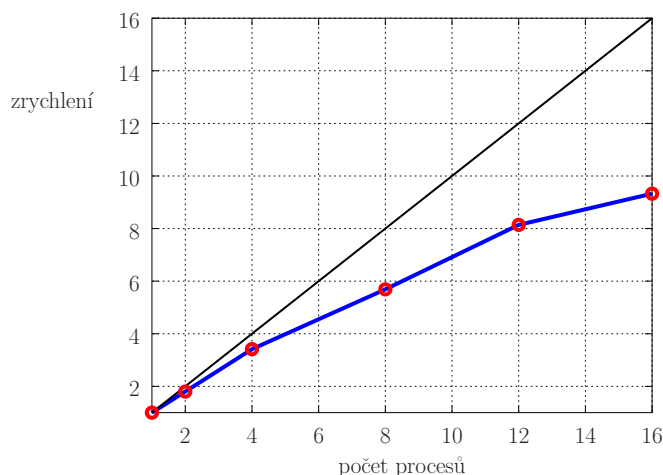
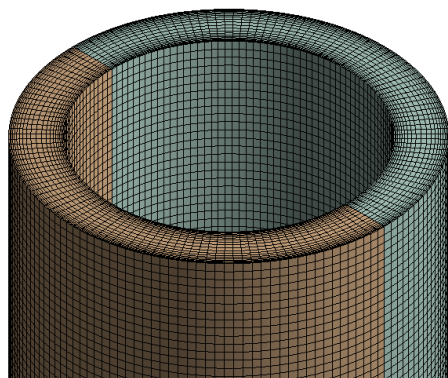
ve svislém řezu (rovině), které jasně ilustrují cirkulační pohyb tekutiny mezi vnitřním a vnějším válcem a zároveň tak ukazují i na podobnost s 2-D geometrií čtvercové kavity s pohybující se jednou stěnou, která byla použita v předchozí kapitole jako aproximace takového systému (viz obr. 7.14 na str. 96).

Vnitřní poloměr modelu Couette-Taylorova zařízení použitý v následných simulacích byl  $R_1 = 50$  mm, vnější poloměr  $R_2 = 66.67$  mm, délka (výška) 166.7 mm. Na obrázku 7.23 vlevo je vyobrazena výpočetní síť použitá při simulacích Couette-Taylorova zařízení. Z důvodů omezené výpočetní kapacity a délky trvajících výpočtů byl celkový počet elementů sítě „jen“ cca 200 tisíc, i když by asi bylo dobré mít větší počet elementů pro lepší popis proudového pole uvnitř zařízení. Doba simulace pro časový rozsah 0 – 20000 se pohybovala kolem 24 hodin a více při použití 8 paralelních procesů na výpočetním serveru s procesory Xeon E5-4627, 2.60GHz. Podle pravé strany obr. 7.23, kde je znázorněno zrychlení výpočtu se vzrůstajícím počtem paralelních procesů, by další zvyšování počtu paralelních procesů nebylo již příliš efektivní.

Tabulka 7.5 shrnuje vyhodnocený GCI index pro čtyři velikosti časového kroku a časový interval 0 – 5 s. Ve všech následných simulacích pak byla použita hodnota časového kroku 0.1 s,

Tabulka 7.5: Vyhodnocený GCI index u Couette-Taylorova zařízení pro různé hodnoty časových kroků. Porovnávanou veličinou byla zprůměrovaná hodnota aktivovaného stavu  $x_A$  na konci časového intervalu simulace 5 s. Analýza byla provedena pro  $Re = 1000$  a neredukovaný systém (7.5), tj. vč. vlivu pomalé reakce (fotoinhibice).

$\Delta t$ [s]	$N$	GCI-fit [%]
0.2	25	1.658
0.1	50	0.862
0.05	100	0.447
0.025	200	0.234



Obr. 7.23: Vlevo – ukázka výpočetní sítě použité při řešení Couette-Taylorova fotobioreaktoru. Vpravo – zrychlení výpočtů s použitím paralelních procesů.

### Distribuce ozáření v Couette-Taylorově zařízení

Distribuce ozáření v Couette-Taylorově zařízení je díky křivosti geometrie složitější než v případě čtvercové kavity (viz rov. 7.13). Pokud bychom zanedbali možnost odrazů a emise světelných paprsků a uvažovali pouze vliv útlumu (absorpce) kvůli řasovým buňkám obsaženým v kapalině, lze pro Couette-Taylorovo zařízení použít následující rovnici popisující závislost světelného toku na poloměru  $r$  v cylindrické geometrii [Cornet et al., 1995]

$$I(r) = 2I_0 \frac{R_2}{r} \frac{\cosh(\kappa \frac{r}{R_2})}{\cosh(\kappa) + \sinh(\kappa)} \quad (7.40)$$

Pro případ výše uvedených rozměrů ( $R_1 = 50$  mm,  $R_2 = 66.67$  mm) a průměrné ozáření  $I_{av}$  rovné  $250 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$  jako v případě čtvercové kavity, by šlo pro stejnou hodnotu dopadající ozáření  $I_0 = 1391.7 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$  vyjádřit hodnotu koeficientu  $\kappa = 25.404$  (pro porovnání s hodnotou  $\Lambda$  u čtvercové kavity je zde  $\Lambda = \kappa/R_2 = 381.07 \text{ m}^{-1}$ ). Obrázek 7.24 ukazuje porovnání prostorové závislosti ozáření  $I$  se čtvercovou kavitou, je zde vidět, že rozdíly nejsou příliš markantní. Na vodorovné ose je bezrozměrná souřadnice představující vzdálenost od osvětlené stěny, která je rovna 1 na protilehlé (neosvětlené) stěně.

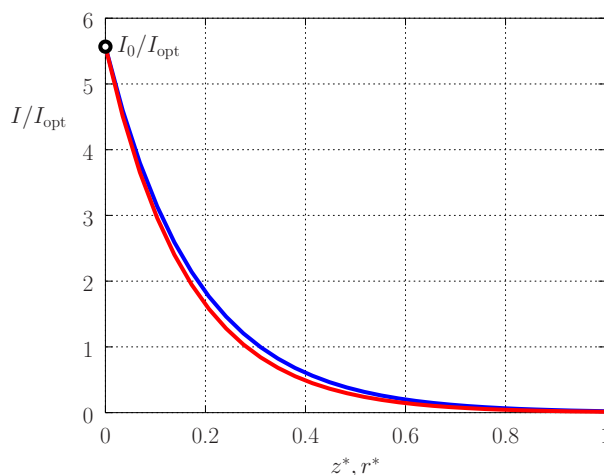
$$z^* = \frac{z}{L}, \quad r^* = \frac{R_2 - r}{R_2 - R_1} \quad (7.41)$$

Podle rovnice (7.40) popisující závislost ozáření na souřadnici je pak nutné upravit i její výpočet v UDF funkci, zkráceně to může vypadat následovně, kde zbytek funkce je stejný jako v případě čtvercové kavity (viz str. 91). Protože souřadný vektor obsahuje hodnoty souřadnic v kartézském souřadném systému, je nutné spočítat poloměr v daném místě

$$r = \sqrt{x^2 + z^2} \quad (7.42)$$

Osa  $y$ , tj. druhý prvek souřadného vektoru, představovala v tomto případě svislou, rotační osu Couette-Taylorova zařízení.





Obr. 7.24: Porovnání závislosti ozáření  $I$  na prostorové souřadnici pro čtvercovou kavitu a Couette-Taylorovo zařízení za předpokladu stejné hodnoty průměrné ozáření.

```

...
#define I0 1391.7
#define KAPPA 25.404
#define R1 0.0500
#define R2 0.0666667

DEFINE_VR_RATE (myrate_PSFab, c,t,r,Mw,omega,rate,rr_t)
{
  real pos[ND_ND]; /* souradny vektor */
  real x,y,z,I,xa,xb,xr,dxa,dxb,cRMw;

  C_CENTROID(pos,c,t);
  x = pos[0]; z = pos[2]; /* x, z-souradnice */
  y = pos[1]; /* y-souradnice, rotacni osa */
  rd = sqrt( SQR(x) + SQR(z) ); /* polomer */
  I = 2*I0*R2/rd*cosh(KAPPA/R2*rd) / (cosh(KAPPA)+sinh(KAPPA));
  ...
}

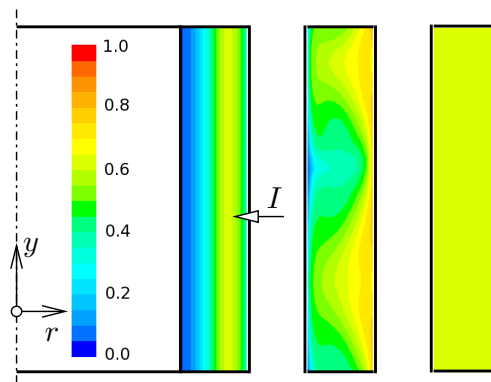
```

## Výsledky simulací ve Couette-Taylorově zařízení

V následující části jsou prezentovány výsledky simulací modelu fotosyntetické továrny včetně vlivu proudění ve 3-D geometrii odpovídající Couette-Taylorovu zařízení. Byly použity stejné zjednodušující předpoklady jako při simulacích ve čtvercové kavitě s pohybující se jednou stěnou (která měla simulovat otáčející se stěnu vnitřního válce). Systém byl považován za jednofázový a vedle samotného proudění byly simulovány pouze změny jednotlivých stavů, nikoliv přírůstek biomasy, který je u modelu fotosyntetické továrny úměrný aktivovanému stavu. Simulace byly provedeny pro různé hodnoty otáček vnitřního válce, vnější válec byl nehybný.

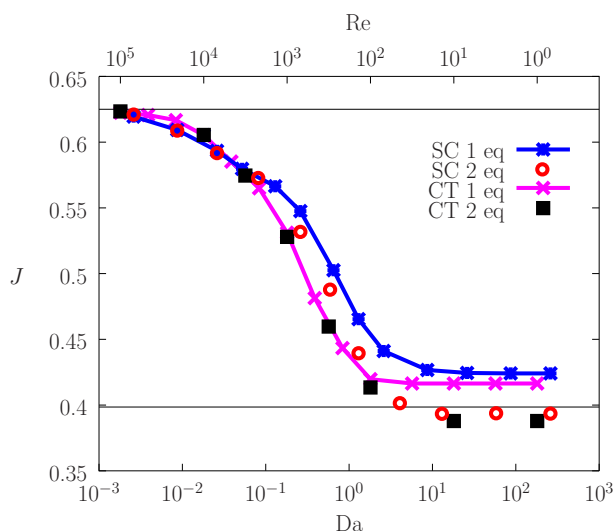
Na obrázku 7.25 jsou zobrazeny kontury aktivovaného stavu ve svislém řezu Couette-Taylorova zařízení pro různé hodnoty Reynoldsova čísla, zleva 0, 1000, a 100000. Byl zde uvažován kompletní PSF model (7.5) tj. včetně časové změny inhibovaného stavu, což je patrné, zejména pro  $Re = 0$ , menšími hodnotami aktivovaného stavu u osvětlené stěny (směr osvětlení je zprava doleva), kde hraje vliv fotoinhibice, nárůstem hodnot aktivovaného stavu dále od stěny, kvůli zmenšujícímu se vlivu inhibice, a pak zase poklesem hodnot na opačné straně, kde se již projevuje vliv nedostatku světla. Časový interval simulací byl 0 – 20000 s.

Obr. 7.25: Kontury aktivovaného stavu  $x_A$  ve svislém řezu Couette-Taylorova zařízení pro různé hodnoty Reynoldsova čísla, zleva  $Re = 0, 1000, 100000$ .

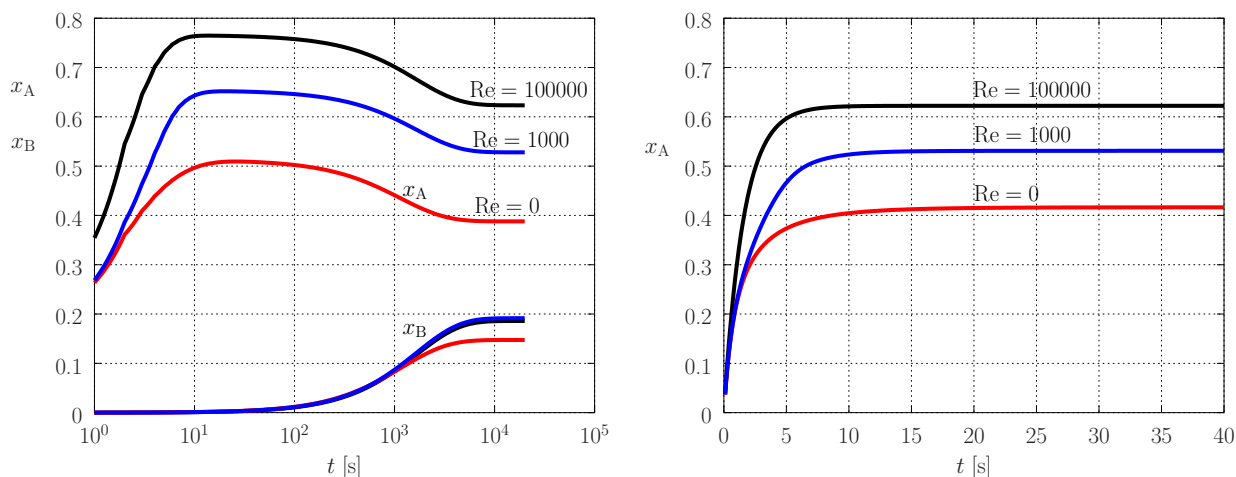


Obrázek 7.26 ukazuje závislost produktivity růstu řasové kultury na Reynoldsově čísle (horní vodorovná osa) a Damköhlerově (spodní vodorovná osa). Jsou zde pro srovnání i výsledky zjednodušeného případu čtvercové kavity (označené zkratkou SC) a je vidět značná podobnost. Ve srovnání jsou uvedeny i výsledky pro redukovaný systém (7.25), kdy je inhibovaný stav nahrazen konstantní průměrnou hodnotou  $\bar{x}_B$  (rov. 7.11). Obecně platí, že čím více se systém blíží ideálně míchanému systému (tedy pro větší hodnoty Reynoldsova čísla a menší hodnoty Damköhlerova čísla), tím se výsledky více blíží teoretickému maximu (0.625). To však většinou v praxi nebude reálně dosáhnout, protože se pravděpodobně dá očekávat limitace růstu například příliš velikými smykovými napětími.

Obrázek 7.27 doplňuje výsledky simulací v Couette-Taylorově zařízení o časové průběhy zprůměrovaných hodnot (vzhledem k objemu systému) aktivovaného a inhibovaného stavu pro různé hodnoty Reynoldsových čísel. Na levém obrázku jsou průběhy pro plný, neredukovaný systém, popsány rovnicemi (7.5) nebo (7.8). Je zde opět pěkně vidět vliv rychlé reakce odpovídající aktivovanému stavu, který v řádu sekund vystoupá na maximální hodnoty, a pak vlivem fotoinhibice v řádu hodin postupně klesá na menší hodnoty odpovídající ustálenému stavu. Tyto ustálené hodnoty nejsou příliš odlišné od ustálených hodnot pro redukovaný systém, kdy je inhibovaný stav nahrazen konstantní hodnotou  $\bar{x}_B$  (rov. 7.11). Rozdíly jsou menší pro větší hodnoty Reynoldsova čísla, neboli čím více se systém přibližuje ideálně míchanému systému. Velkou výhodou tohoto redukovaného systému je, že stačí provést simulace pro řádově menší časové rozsahy. Poměr mezi potřebnými časovými intervaly odpovídá v zásadě rozdílu v časových měřítkách pro rychlou a pomalou reakci, tj. pro aktivovaný a inhibovaný stav. Tento



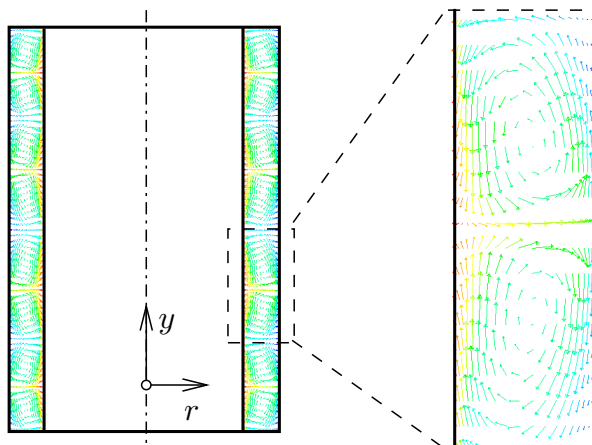
Obr. 7.26: Závislost produktivity růstu řasové kultury na Damköhlerově (spodní vodorovná osa) a Reynoldsově čísle (horní osa) a porovnání výsledků mezi zjednodušeným případem čtvercové kavity (SC) a Couette-Taylorovým zařízením (CT). Označení 1 eq či 2 eq odkazuje na redukovaný systém (7.25) a neredukovaný systém (7.8).



Obr. 7.27: Časové průběhy zprůměrovaných hodnot (přes objem Couette-Taylorova zařízení) aktivovaného a inhibovaného stavu pro různé hodnoty Reynoldsových čísel.

rozdíl je v řádu  $10^3$ , v našem případě byly simulace prováděny pro časové rozsahy 0 – 20000 s (neredukovaný systém) a 0 – 40 s (redukovaný systém), což se samozřejmě projeví i v potřebných výpočetních časech. Doba simulace pro časový rozsah 0 – 20000 s byla zhruba 24 hodin na výpočetním serveru s procesory Xeon E5-4627, 2.60GHz s využitím osmi paralelních procesů. Doba simulace redukovaného systému je samozřejmě úměrně menší, čehož lze využít při případných optimalizacích. Samozřejmě je třeba mít na paměti zjednodušující předpoklady redukovaného systému a výsledky následně ověřit pro neredukovaný systém.

Obrázek 7.28 ukazuje vektory rychlostí ve svislém řezu Couette-Taylorova zařízení pro  $Re = 1000$ , což je režim odpovídající stále laminárnímu proudění, kdy ale v systému již existují tzv. Taylorovy víry (konkrétně tzv. wavy vortices), které zajišťují promíchávání a zvyšují tak významně produktivitu růstu řas v systému. Pro tento konkrétní případ je průměrná hodnota aktivovaného stavu dosažená na konci časového intervalu 0 – 20000 s, tj. v ustáleném stavu, rovna 0.528. Hodnota založená na redukovaném modelu (7.25) je pro stejnou hodnotu Reynoldsova čísla rovna 0.531, což je prakticky stejné. Porovnání redukovaného a neredukovaného modelu pro různé hodnoty Reynoldsových čísel je shrnuto v tabulce 7.6 (grafické znázornění je na obr. 7.26).



Obr. 7.28: Ukázka vektorů rychlosti v Couette-Taylorově zařízení ve svislém řezu pro  $Re = 1000$ , tj. v režimu existence tzv. Taylorových vírů (konkrétně tzv. wavy-vortices).

Tabulka 7.6: Hodnoty faktoru  $J$  (viz rov. 7.31) po různé hodnoty Reynoldsových čísel (úhlové rychlosti) v Couette-Taylorově zařízení. Sloupec označený „1 eq“ představuje redukováný systém (7.25), sloupec „2 eq“ pak hodnoty pro plný, neredukováný systém (7.8).

$\omega$ [rad/s]	Re	$J - 1$ eq	$J - 2$ eq
0.0012	1.0	0.4164	0.3879
0.0038	3.2	0.4164	–
0.012	10.0	0.4164	0.3879
0.038	32	0.4164	–
0.12	100	0.4197	0.4134
0.26	217	0.4434	–
0.38	317	–	0.4597
0.56	467	0.4814	–
1.2	1000	0.5310	0.5280
2.6	2167	0.5649	–
3.8	3167	–	0.5746
5.6	4667	0.5852	–
12	10000	0.6053	0.6055
26	21667	0.6167	–
56	46667	0.6206	–
120	100000	0.6223	0.6233

# Kapitola 8

## Závěr

Základem simulací fyzikálních nebo multifyzikálních systémů je matematický model popisující daný systém. Správný návrh nebo výběr modelu založený především na definici cílů, analýze všech důležitých procesů daného systému a použití vhodných numerických metod a simulačních nástrojů nás pak dovede k výsledkům, které věrně popisují reálné chování nějakého zařízení. V oblasti procesní a zpracovatelské techniky jsou modely komplexních systémů popsány nejčastěji pomocí tzv. transportních rovnic, představovaných v obecném případě parciálními diferenciálními rovnicemi druhého řádu. Tyto rovnice popisují přenos základních veličin jako je hybnost, hmota či teplo, a výsledkem jejich numerického řešení pomocí nástrojů CFD je rozložení rychlostí, koncentrací, teploty a případně dalších veličin v příslušném systému. Použití nástrojů CFD v oblasti návrhu a konstrukce procesních aparátů a celé řady jiných průmyslových zařízení je tak v dnešní době nezbytnou podmínkou kvalitního výsledku. Programy jako je ANSYS Fluent umožňují řešit vedle samotného proudění i přenos tepla a hmoty, které hrají klíčovou roli v celé řadě průmyslových procesů jako je míchání, suspendace, ohřev či chlazení potravinářských látek, produkce biomasy nebo metabolických látek, apod. Řada softwarových systémů orientovaných na CFD umožňuje navíc definici dalších modelů prostřednictvím uživatelem definovaných funkcí, které jsou v některých případech nezbytné pro lepší popis fyzikálních procesů odehrávajících se v navrhovaném zařízení, a lze s nimi tak podstatně rozšířit spektrum řešených problémů.

Autor v této práci prezentuje výsledky simulací v programu ANSYS Fluent, včetně implementace uživatelských funkcí ve dvou případech z oblasti procesní a zpracovatelské techniky, a ukazuje tak důležitost umění propojit dohromady znalosti řešených transportních rovnic se znalostmi způsobu a metodiky jejich rozšíření o další modely. Prezentované výsledky a použitá metodika demonstruje praktické využití nástrojů CFD při návrhu a konstrukci aparátů a zařízení v oblasti procesního inženýrství.

Prvním prezentovaným případem v této práci je přestup tepla v impaktním proudu (viz kapitola 6), který se v různých obdobách vyskytuje v celé řadě průmyslových zařízení. Výhodou uspořádání, kde proud tekutiny dopadá kolmo na teplosměnnou plochu, je výrazně vyšší intenzita přenosu tepla než v situaci, kdy je proud tekutiny orientován podél takové plochy (stěny). Důležitým faktorem je i přítomnost rotační (tangenciální) složky v impaktním proudu, která významným způsobem ovlivňuje rychlostní profily a tím i charakteristiku přenosu tepla. Autor provedl celou řadu simulací různých variant s různými modely turbulence (z kategorie RANS) a porovnal výsledky s experimentálními daty buď z literatury nebo s daty získanými kolegy při experimentech provedených na Ústavu procesní a zpracovatelské techniky. Za účelem vylepšení

predikce přestupu tepla autor vytvořil a implementoval v programu ANSYS Fluent uživatelské funkce popisující anizotropní turbulentní tepelný tok na základě algebraických modelů, vyjadřujících jeho závislost na složkách tenzoru Reynoldsových napětí [Petera, 2015; Petera a Dostál, 2016]. Toto rozšíření je založeno na definici nové transportní rovnice pro uživatelský skalár, která je řešena společně s přenosovými rovnicemi pro hybnost a další základní veličiny. Autor se rovněž podílel na ověření vlivu podélné konduktivity v teplosměnné ploše u experimentální metody TOIRT [Petera a Dostál, 2017]. Autor rovněž provedl celou řadu simulací pro vyhodnocení korekčního faktoru, který hraje klíčovou roli u elektrodifuzní metody [Petera et al., 2016]. Dále autor provedl řadu simulací reálného průmyslového zařízení, míchané nádoby s axiálním míchadlem a usměrňovačem toku, jejichž výsledky byly porovnány s experimentálními daty [Petera et al., 2017]. V této habilitační práci autor vyhodnotil z výsledků těchto simulací integrální korelace pro Nusseltovo číslo na dně míchané nádoby a provedl srovnání s experimentálními daty. Charakter výsledků je velmi podobný, i když ve stagnantní oblasti jsou rozdíly výraznější. Jedním z cílů autora této práce je v rámci jeho pokračujících výzkumných aktivit tyto rozdíly objasnit a přispět tak k lepšímu poznání v této oblasti.

Druhým případem, kterému se autor intenzivně věnoval a který je prezentován v kapitole 7, byla implementace uživatelského modelu „fotosyntetické továrny“ (PSF) v programu ANSYS Fluent, postihujícího vliv distribuce ozáření a promíchávání systému na růst řasových mikroorganismů. Intenzita dopadajícího světla je obecně limitujícím faktorem u fotosyntetizujících mikroorganismů, kdy nedostatek světla nebo na druhou stranu příliš velká intenzita osvětlení má negativní vliv na jejich růst (tzv. fotoinhibice). V reálném zařízení pak oba případy znamenají nižší výtěžnost. V laboratorních podmínkách bylo pozorováno, že pravidelné střídání cyklů světlo/tma má pozitivní dopad na celkový růst, což lze ve větším (průmyslovém) měřítku zajistit například vhodným hydrodynamickým režimem (promícháváním). Pokud totiž zajistíme v systému vhodným způsobem pravidelnou cirkulaci řasové kultury mezi místy s vysokou intenzitou světla (např. u osvětlené stěny) a místy s naopak zase nízkou intenzitou osvětlení (dále od stěny), můžeme tak významně zvýšit efektivitu tvorby biomasy. Autor tento efekt ověřil při simulacích v programu ANSYS Fluent s implementovaným PSF modelem na případě dvou- a trojrozměrné geometrie čtvercové kavity s pohyblivou stěnou, a dále i na plně trojrozměrném případě Couette-Taylorova zařízení. Výsledky simulací pěkně demonstrují vliv fotoinhibice a zvýšení efektivity procesu s narůstající intenzitou promíchávání systému. Tato závislost odpovídá experimentálním datům jiných autorů. Implementovaný PSF model v ANSYS Fluent spolu s navrženou metodikou lze následně využít při návrhu a konstrukci jiných systémů s odlišnou geometrií a optimalizaci provozních nebo návrhových parametrů [Papáček, Jablonský, a Petera, 2017].

Hlavními přínosy této práce jsou prezentovaná rozšíření systému ANSYS Fluent o další matematické modely, které jsou v řadě případů nezbytné pro lepší popis studovaných systémů. Tyto modely jsou řešeny společně se základními transportními rovnicemi popisujícími proudění a případný přenos dalších veličin. Jedním z prezentovaných rozšíření je model pro anizotropní turbulentní tepelný tok, jehož implementace je založena na nové transportní rovnici pro uživatelský skalár. Dalším rozšířením je uživatelská funkce pro ověření vlivu podélné konduktivity v teplosměnné ploše u experimentální metody TOIRT. A posledním rozšířením je pak třístavový model „fotosyntetické továrny“ popisující vliv distribuce ozáření na růst řasových mikroorganismů v promíchávaném systému. V této práci je podrobně popsána metodika implementace těchto uživatelských modelů a výsledky numerických simulací reálných zařízení a na jejich základě je zde dále vyhodnoceno a popsáno chování daných systémů v závislosti na parametrech důležitých pro jejich návrh a konstrukci. V případě míchané nádoby s usměrňovačem

toku byly vyhodnoceny lokální charakteristiky přestupu tepla na dně nádoby spolu s integrálními korelacemi pro Nusseltovo číslo. V Couette-Taylorově zařízení byla s implementovaným modelem fotosyntetické reakce ověřena hypotéza pozitivního vlivu pravidelného střídání cyklů světlo/tma na růst řasových mikroorganismů a byla vyhodnocena efektivita růstu řasové kultury v závislosti na intenzitě promíchávání daného systému.





# Seznam symbolů

$a$	součinitel teplotní vodivosti, $\lambda/(\rho c_p)$ [ $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ]
$a_i$	koeficienty v diferenčních schématech metody konečných objemů, viz rov. (4.8)
$A$	příčný průřez [ $\text{m}^2$ ]
$A_{ij}$	matice složek tenzoru Reynoldsových napětí v algebraickém modelu pro turbulentní tepelný tok, viz rov. (6.5)
$c$	koeficient při stanovení GCI indexu, viz rov. (4.33)
$c_A$	koncentrace složky A [ $\text{kmol m}^{-3}$ ]
$\vec{c}_i$	jednotkový vektor rychlosti v mřížce Lattice-Boltzmannovy metody [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$c_p$	měrná tepelná kapacita [ $\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ ]
$c_s$	empirická konstanta ve Smagorinsky modelu pro turbulentní viskozitu
$c_S$	koncentrace substrátu [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$c_X$	koncentrace biomasy [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$C_D$	parametr u některých modelů turbulence
$C_f$	Fanningův třecí součinitel, $C_f = \lambda_f/4$
$C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}$	parametry u $k - \varepsilon$ modelu turbulence, viz rov. (3.38)
$C_\theta$	parametry algebraického modelu pro turbulentní tepelný tok, viz rov. (6.4), nebo (6.5)
$C_\mu$	empirická konstanta ve modelech turbulence s turbulentní viskozitou, nejčastěji 0.09, viz rov. (3.20)
$C^+$	parametr v logaritmickém modelu stěnové funkce
$d$	průměr (trysky, difuzoru v míchané nádobě) [ $\text{m}$ ]
$d_M$	průměr míchadla [ $\text{m}$ ]
$D$	průměr (nádobu) [ $\text{m}$ ]
$D$	rozměr problému (2-D, 3-D) při stanovení GCI indexu, viz rov. (4.33)
$D_{AB}$	difuzní součinitel [ $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ]
$D_{ijk}$	člen v transportní rovnici (3.42) pro Reynoldsova napětí představující turbulentní difuzi [ $\text{kg s}^{-3}$ , $\text{J m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ]
$D_r$	zředovací rychlost, $\dot{V}/V$ , viz rov. (7.29) [ $\text{s}^{-1}$ ]
$Da$	Damköhlerovo číslo, viz rov. (7.33)
$E$	aktivační energie [ $\text{J kmol}^{-1}$ ]
$e_a^{21}, e_a^{32}$	rozdíl mezi hodnotami sledované veličiny pro dvě různě veliké sítě, viz rov. (4.44), (4.46)
$\vec{f}$	pole vnějších objemových sil [ $\text{N kg}^{-1}$ , $\text{m s}^{-2}$ ]
$\vec{f}, f_a$	pole vnějších objemových sil u metody LBM [ $\text{N m}^{-3}$ ]
$f_\beta, f_{\beta^*}$	parametry v modelu turbulence $k - \omega$ , viz rov. (3.32), (3.35)
$F, \vec{F}$	síla, vektor síly [ $\text{N}$ ]
$F_i$	konvektivní člen v transportní rovnici pro uživatelský skalár, viz rov. (5.1), (5.2)
$F_s$	bezpečnostní koeficient při stanovování GCI indexu, viz rov. (4.43)

$\vec{g}$	gravitační zrychlení [ $\text{m s}^{-2}$ ]
$G_k$	člen představující vznik kinetické energie turbulence $k$ v modelu turbulence $k - \omega$ nebo $k - \varepsilon$ [ $\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-3}$ , $\text{J m}^{-3}\text{s}^{-1}$ ]
$G_x$	axiální tok momentu hybnosti, viz rov. (6.17) [ $\text{kg m s}^{-2}$ ]
$G_\varepsilon$	člen představující vznik specifické disipace kinetické energie $\varepsilon$ v modelu turbulence $k - \varepsilon$ [ $\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-4}$ , $\text{J m}^{-3}\text{s}^{-2}$ ]
$G_\varphi$	tangenciální tok momentu hybnosti, viz rov. (6.17) [ $\text{kg m}^2\text{s}^{-2}$ ]
$G_\omega$	člen představující vznik specifické disipace kinetické energie $\omega$ v modelu turbulence $k - \omega$ , viz rov. (3.32) [ $\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-2}$ ]
$\text{GCI}_{21,32}$	Grid Convergence Index, viz rov. (4.45), (4.46)
$h$	vzdálenost trysky impaktního proudu od stěny, vzdálenost difuzoru ode dna míchané nádoby [m]
$h$	charakteristický rozměr elementu sítě při stanovení GCI indexu, viz rov. (4.34)
$I$	ozáření, intenzita dopadajícího světelného záření [ $\mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ]
$I_0$	ozáření, intenzita dopadajícího světelného záření na povrch systému [ $\mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ]
$\vec{j}_A$	hustota difuzního toku složky A [ $\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ]
$J$	bezrozměrná produktivita tvorby biomasy, viz rov. (7.31)
$k$	kinetická energie turbulence [ $\text{m}^2\text{s}^{-2}$ , $\text{J kg}^{-1}$ ]
$k$	reakční konstanta [ $\text{s}^{-1}$ ]
$k_L$	„laminární“ kinetická energie turbulence v modelu $k - kl - \omega$ [ $\text{m}^2\text{s}^{-2}$ ]
$k_s$	drsnost stěny, viz obr. 3.6 [m]
$k_s^+$	bezrozměrná drsnost stěny, viz obr. 3.6
$K_I$	inhibiční konstanta, viz rov. (7.4) [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$K_S$	saturační konstanta Monodovy rovnice, viz rov. (7.3) [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$l$	délkové měřítko v modelech turbulence [m]
$l_m$	Prandtlůva směřovací délka [m]
$L, L_{\text{char}}$	délka, charakteristický rozměr [m]
$n$	otáčky (míchadla) [ $\text{s}^{-1}$ , $\text{min}^{-1}$ ]
$\vec{n}$	normálový vektor
$\vec{n}_A$	hustota hmotnostního toku složky A [ $\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ]
$m$	hmotnost [kg]
$M_A$	molární hmotnost složky A [ $\text{kg kmol}^{-1}$ ]
$Me$	maintenace parametr modelu PSF, viz rov. (7.6), tab. 7.1
$N$	počet elementů sítě
$N, N_i$	distribuční funkce u Lattice-Boltzmannovy metody (LBM), viz rov. (4.22)
$N_Q$	bezrozměrné průtokové kritérium, $\dot{V}/(nd_M^3)$ , viz rov. (6.30)
$Nu$	Nusseltovo číslo, $\alpha d/\lambda$
$\overline{Nu}$	průměrná hodnota Nusseltova čísla přes teplosměnnou plochu, viz rov. (6.20)
$p$	tlak [Pa]
$p$	řád metody při stanovení GCI indexu, viz rov. (4.33), (4.39)
$p^*$	odhad tlaku v korekčních rovnicích metody SIMPLE [Pa]
$P_{ij}$	člen v transportní rovnici (3.42) pro Reynoldsova napětí představující produkci [ $\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-3}$ , $\text{J m}^{-3}\text{s}^{-1}$ ]
$Pe$	Pecletovo číslo, $uL/\Gamma$
$Pr$	Prandtlovo číslo, $\nu/a$ , $\mu_{cp}/\lambda$
$Pr$	produktivita tvorby biomasy, viz rov. (7.30) [ $\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$ ]
$Pr_t$	turbulentní Prandtlovo číslo, viz rov. (6.3)
$q, \vec{q}$	hustota tepelného toku [ $\text{W m}^{-2}$ ]

$q$	parametr při stanovení GCI indexu, viz rov. (4.40)
$\dot{Q}^{(g)}$	objemový zdroj tepla [ $\text{W m}^{-3}$ ]
$r$	poloměr, radiální souřadnice [m]
$r$	reakční rychlost [ $\text{kmol m}^{-3}\text{s}^{-1}$ ]
$r_{21}, r_{32}$	poměry velikostí elementů mezi jednotlivými sítěmi při stanovování GCI indexu, viz rov. (4.37)
$R$	(vnější) poloměr [m]
$R$	univerzální plynová konstanta 8314.3 [ $\text{J kmol}^{-1}\text{K}^{-1}$ ]
$R_A$	rychlost vzniku složky A [ $\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$ ]
$Re$	Reynoldsovo číslo, $uL_{\text{char}}/\nu$ , v impaktním proudu $ud/\nu$
$Re_M$	Reynoldsovo číslo v míchané nádobě, $nd_M^2/\nu$
$Re_t$	turbulentní Reynoldsovo číslo, $u'_i L/\nu$
$Re_\theta$	„momentum-thickness“ Reynoldsovo číslo v transition modelech turbulence
$s$	parametr při stanovení GCI indexu, viz rov. (4.40)
$S$	plocha [ $\text{m}^2$ ]
$S_{ij}$	tenzor rychlosti deformace pro zprůměrované rychlosti v modelech turbulence (nebo rychlosti nad hranicí subgrid-scale filtru u modelů LES), viz rov. (3.12), (3.19) [ $\text{s}^{-1}$ ]
$Sc$	Schmidtovo číslo
$Sh$	Sherwoodovo číslo
$Sw$	intenzita vířivosti, viz rov. (6.16)
$t$	čas [s]
$t_p$	časové měřítko konvektivního přenosu hmoty [s]
$t_r$	časové měřítko reakce [s]
$t_m^*$	bezrozměrný čas, $\nu t_r/L^2$
$T$	teplota [K, °C]
$T_{\text{ref}}$	referenční teplota [K, °C]
$T_w$	teplota na stěně [K, °C]
$\bar{T}$	průměrná teplota (u RANS modelů zprůměrovaná vzhledem k času) [K, °C]
$T'$	flukuační složka teploty [K, °C]
$Ta$	Taylorovo číslo, viz rov. (7.39)
$u$	rychlost [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$u_m$	velikost vektoru rychlosti, $\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}$ , $\sqrt{u_y^2 + u_z^2}$ [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$u^*$	odhad rychlosti v korekčních rovnicích metody SIMPLE [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$\vec{u}$	vektor rychlosti [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$\bar{u}_i$	zprůměrovaná hodnota rychlosti, hodnota rychlosti nad hranicí filtru u metody LES [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$u'_i$	flukuační složka rychlosti, subgrid-scale hodnota rychlosti [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$u^+$	bezrozměrná rychlost v modelech stěnových funkcí
$u_\tau$	smyková rychlost v modelech stěnových funkcí, $\sqrt{\tau_w/\rho}$ [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$U_x$	průměrná hodnota axiální rychlosti v definici intenzity vířivosti $Sw$ , viz rov. (6.18), (6.19) [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$U_\varphi$	průměrná hodnota tangenciální rychlosti v definici intenzity vířivosti $Sw$ , viz rov. (6.18), (6.19) [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$V$	objem [ $\text{m}^3$ ]
$\dot{V}$	objemový průtok [ $\text{m}^3\text{s}^{-1}$ ]
$Vi$	viskozitní číslo, Sieder-Tate korekce, $\mu/\mu_w$
$w_i$	váhové koeficienty u metody LBM, viz rov. (4.29)
$x$	souřadnice kartézského souřadného systému [m]

$x_A$	aktivovaný stav v modelu PSF, viz rov. (7.5)
$x_B$	inhibovaný stav v modelu PSF, viz rov. (7.5)
$x_R$	odpočívající stav v modelu PSF, viz rov. (7.5)
$y$	souřadnice kartézského souřadného systému [m]
$y$	vzdálenost od stěny [m]
$y^+$	bezrozměrná vzdálenost od stěny v modelech stěnových funkcí
$Y_k$	člen představující disipaci veličiny $k$ v modelu turbulence $k - \omega$ nebo $k - \varepsilon$ [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-3</sup> , J m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> ]
$Y_\varepsilon$	člen představující disipaci veličiny $\varepsilon$ v modelu turbulence $k - \varepsilon$ [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-4</sup> , J m <sup>-3</sup> s <sup>-2</sup> ]
$Y_\omega$	člen představující disipaci veličiny $\omega$ v modelu turbulence $k - \omega$ , viz rov. (3.32) [kg m <sup>-3</sup> s <sup>-2</sup> ]
$z$	souřadnice kartézského souřadného systému [m]

## Řecké symboly

$\alpha$	součinitel přetupu tepla [W m <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup> ]
$\alpha$	parametr modelu PSF, viz rov. (7.5), tab. 7.1 [ $\mu\text{E}^{-1}\text{m}^2$ ]
$\alpha, \alpha^*$	parametr modelu turbulence $k - \omega$ , korekce nízkých Reynoldsových čísel
$\beta$	parametr modelu PSF, viz rov. (7.5, tab. 7.1) [ $\mu\text{E}^{-1}\text{m}^2$ ]
$\beta, \beta^*$	parametry modelu turbulence $k - \omega$
$\gamma$	intermitence v transition modelech turbulence
$\gamma$	parametr modelu PSF, viz rov. (7.5) [s <sup>-1</sup> ]
$\Gamma$	difuzivita, difuzní součinitel v obecné transportní rovnici [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\Gamma_{ij}$	anizotropní difuzní součinitel [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\delta$	parametr modelu PSF, viz rov. (7.5), tab. 7.1 [s <sup>-1</sup> ]
$\vec{\delta}, \delta_{ij}$	Kroneckerův jednotkový tenzor
$\vec{\Delta}$	tenzor rychlosti deformace [s <sup>-1</sup> ]
$\varepsilon$	disipace kinetické energie turbulence [m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup> , J kg <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\varepsilon_{ij}$	disipační člen v transportní rovnici (3.42) pro Reynoldsova napětí [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-3</sup> , J m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\varepsilon_{21}, \varepsilon_{32}$	rozdíly vyhodnocované veličiny pro různě veliké sítě při stanovení GCI indexu, viz rov. (4.38)
$\eta$	délkové měřítko turbulence [m]
$\kappa$	Kármánova konstanta, 0.41
$\kappa$	parametr modelu PSF, viz rov. (7.5), tab. 7.1
$\lambda$	součinitel tepelné vodivosti [W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]
$\lambda_f$	Darcyho třecí součinitel, $\lambda_f = 4C_f$
$\mu$	dynamická viskozita [Pa.s]
$\mu$	specifická růstová rychlost, viz rov. (7.2) [s <sup>-1</sup> , h <sup>-1</sup> ]
$\mu_{\max}$	maximální specifická růstová rychlost, viz rov. (7.3) [s <sup>-1</sup> , h <sup>-1</sup> ]
$\mu_t$	turbulentní dynamická viskozita [Pa.s]
$\mu_2$	druhý viskozitní koeficient v obecné konstitutivní rovnici pro Newtonské tekutiny, viz rov. (2.10) [Pa.s]
$\nu$	kinematická viskozita [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\nu_A$	stechiometrický koeficient složky A
$\Pi_{ij}$	člen v transportní rovnici (3.42) pro Reynoldsova napětí představující tlaková napětí [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-3</sup> , J m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> ]

$\rho$	hustota [kg m <sup>-3</sup> ]
$\rho_A$	hmotnostní koncentrace složky A [kg m <sup>-3</sup> ]
$\vec{\sigma}$	tenzor celkových napětí [Pa]
$\vec{\tau}$	tenzor dynamických (smykových) napětí [Pa]
$\tilde{\tau}_{ij}$	subgrid-scale napětí u modelů LES [Pa]
$\bar{\tau}_{ij}$	tenzor Reynoldsových napětí, $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ [Pa]
$\tau_w$	smykové napětí na stěně [Pa]
$\phi$	obecná fyzikální veličina
$\Phi$	rychlost molekulárního toku obecné fyzikální veličiny
$\dot{\phi}^{(g)}$	rychlost vzniku obecné fyzikální veličiny
$\omega$	specifická disipace kinetické energie turbulence, $\omega = \varepsilon/k$ [s <sup>-1</sup> ]
$\omega$	úhlová rychlost [rad s <sup>-1</sup> ]
$\omega_A$	hmotnostní zlomek složky A
$\Omega_i, \Omega_C$	kolizní operátor u Lattice-Boltzmannovy metody (LBM)

## Dolní indexy

$A$	aktivovaný stav
$B$	inhibovaný stav
ext	extrapolované
$i, j, k$	index prostorové souřadnice
in	vstupní
out	vztahující se k výstupu
$r$	radiální souřadnice
$R$	odpočívající (rested) stav
$x, y, z$	prostorové souřadnice v kartézském souřadném systému
$X$	biomasa (složka)
w	vztahující se ke stěně (wall)

## Horní indexy

'	fluktuační složka, subgrid-scale hodnota
T	transpozice

## Symboly nad písmeny

–	střední hodnota, nebo subgrid scale hodnota
·	derivace podle času, vztaženo na jednotku času
→	vektor (tenzor prvního řádu)
⇒	tenzor druhého řádu

## Zkratky

GCI	Grid Convergence Index
LBM	Lattice Boltzmannova metoda
PSF	Photo-Synthetic Factory, model fotosyntetické továrny
RKE	Realizable $k - \varepsilon$ model turbulence
RSM	model turbulence založený na transportu tenzoru Reynoldsových napětí
SST	Shear Stress Transport, varianta modelu turbulence $k - \omega$

SIMPLE Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations, metoda řešení tlaku v Navier-Stokesových rovnicích  
SGS subgrid scale

### **Další symboly**

d derivace  
D materiálová derivace  
ln přirozený logaritmus  
 $\partial$  parciální derivace  
 $\nabla$  nabla, Hamiltonův operátor

# Literatura

- Abe, K., Suga, K.: Towards the development of a Reynolds-averaged algebraic turbulent scalar-flux model, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 22 (1), 2001, str. 19 – 29.
- Ahmed, Z. U., Al-Abdeli, Y. M., Matthews, M. T.: The effect of inflow conditions on the development of non-swirling versus swirling impinging turbulent jets, *Computers & Fluids*, 118, 2015, str. 255 – 273.
- Aiba, S., Humphrey, A. E., Millis, N. F.: *Bioinženýrství*, Academia, Praha, 1972.
- Andereck, C. D., Liu, S., Swinney, H. L.: Flow regimes in a circular Couette system with independently rotating cylinders, *Journal of Fluid Mechanics*, 164, 1986, str. 155–183.
- Anderson, D. A., Tannehill, J. C., Pletcher, R. H.: *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corp., New York, 1984, ruský překlad, Mir, Moskva, 1990.
- ANSYS Fluent: *ANSYS Fluent Theory Guide*, ANSYS, Inc., Release 15.0, 2013a.
- ANSYS Fluent: *ANSYS Fluent UDF Manual*, ANSYS, Inc., Release 15.0, 2013b.
- ANSYS Fluent: *ANSYS Fluent Training Materials*, ANSYS, Inc., Release 15.0, 2014.
- Baughn, J., Shimizu, S.: Heat transfer measurements from a surface with uniform heat flux and an impinging jet, *ASME Journal of Heat Transfer*, 111, 1989, str. 1096 – 1098.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N.: *Transport phenomena*, John Wiley and Sons, Inc., New York, 2007.
- Bremhorst, K., Bullock, K. J.: Spectral Measurements of Temperature and Logitudinal Velocity Fluctuations in Fully Developed Pipe Flow, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 13, 1970, str. 1313 – 1329.
- Celik, I., Ghia, U., Roache, P., Freitas, C., Coleman, H., Raad, P.: Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty due to Discretization in CFDs Applications, *Journal of Fluids Engineering*, 130, 2008.
- Chigier, N. A., Beer, J. M.: Velocity and Static-Pressure Distributions in Swirling Air Jets Issuing from Annular and Divergent Nozzles, *Trans. ASME 86D. Journal of Basic Engineering*, 4, 1964, str. 788–796.
- Cooper, D., Jackson, D. C., Launder, B. E., Liao, G. X.: Impinging jet studies for turbulence model assessment - I. Flow-field experiments., *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36 (10), 1993, str. 2675 – 2684.

- Cornet, J.-F., Dussap, C., Gros, J.-B., Binois, C., Lasseur, C.: A simplified monodimensional approach for modeling coupling between radiant light transfer and growth kinetics in photobioreactors, *Chemical Engineering Science*, 50, 1995, str. 1489–1500.
- Daly, B. J., Harlow, F. C.: Transport Equations in Turbulence, *Physics of Fluids*, 13, 1970, str. 2634–2649.
- Derksen, J., Van den Akker, H. E. A.: Large Eddy Simulation of the Flow Driven by a Rushton Turbine, *AIChE Journal*, 45, 1999, str. 209–221.
- d’Humières, D., Lallemand, P., Frisch, U.: Lattice Gas Models for 3D Hydrodynamics, *Europhysics Letters*, 2, 1986, str. 291–297.
- Dietz, C. F., Neumann, S. O., Weigand, B.: A Comparative Study of the Performance of Explicit Algebraic Models for the Turbulent Heat Flux, *Numerical Heat Transfer, Part A*, 52, 2007, str. 101–126.
- Eggels, J. G. M., Somers, J. A.: Numerical simulation of free convective flow using the lattice-Boltzmann Equation, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 16, 1995, str. 357–364.
- Eilers, P., Peeters, J.: A model for the relationship between light intensity and the rate of photosynthesis in phytoplankton, *Ecological Modelling*, 42 (3), 1988, str. 199 – 215.
- Freund, S.: *Local Heat Transfer Coefficients Measured with Temperature Oscillation IR Thermography*, Ph.D. práce, Hamburg, 2007.
- Freund, S., Kabelac, S.: Investigation of local heat transfer coefficients in plate heat exchangers with temperature oscillation IR thermography and CFD, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53, 2010, str. 3764–3781.
- Freund, S., Pautsch, A. G., Shedd, T. A., Kabelac, S.: Local heat transfer coefficients in spray cooling systems measured with temperature oscillation IR thermography, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50, 2007, str. 1953–1962.
- Frisch, U., Hasslacher, B., Pomeau, Y.: Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation, *Physical Review Letters*, 56, 1986, str. 1505–1508.
- Haut, B., Amor, H. B., Coulon, L., Jacquet, A., Halloin, V.: Hydrodynamics and mass transfer in a Couette–Taylor bioreactor for the culture of animal cells, *Chemical Engineering Science*, 58 (3), 2003, str. 777–784.
- Heinbockel, J. H.: *Introduction to Tensor Calculus and Continuum Mechanics*, Trafford Publishing, 2002.
- Hinze, J. O.: *Turbulence*, McGraw-Hill Publishing Co., New York, 1975.
- Karcz, J.: Studies of local heat transfer in a gas-liquid system agitated by double disc turbines in a slender vessel, *Chemical Engineering Journal*, 72, 1999, str. 217–227.
- Kasagi, N., Tomita, Y., Kuroda, K.: Direct Numerical Simulations of Passive Scalar Field in a Turbulent Channel Flow, *Journal of Heat Transfer*, 114, 1992, str. 598 – 606.
- Kato, M., Launder, B.: The modelling of turbulent flow around stationary and vibrating square cylinders, v *Ninth Symposium on “Turbulent Shear Flows”*, 1993.



- Katti, V. V., Yayaswy, S. N., Prabhu, S. V.: Local heat transfer distribution between smooth flat surface and impinging air jet from a circular nozzle at low Reynolds numbers, *Heat and Mass Transfer*, 47 (3), 2011, str. 237–244.
- Kim, J., Moin, P.: Transport of Passive Scalars in a Turbulent Channel Flow, v *Turbulent Shear Flows 6: Selected Papers from 6th Symposium on Turbulent Shear Flows*, sv. 6, 1989, str. 85 – 96.
- Kok, B.: Experiments on photosynthesis by Chlorella in flashing light, v Burlew, J., ed., *Algal Culture From Laboratory to Pilot Plant*, sv. 600, Carnegie Institution of Washington, Washington, D. C., USA, 1953, str. 63–75.
- Kolmogorov, A. N.: The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers, *Proceedings of the USSR Academy of Sciences (in Russian)*, 30, 1941, str. 299–303.
- Kolmogorov, A. N.: Equations of Turbulent Motion of an Incompressible Fluid, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Fiz.*, 6, 1942, str. 56–58.
- Kristiawan, M., Meslem, A., Nastase, I., Sobolik, V.: Wall shear rates and mass transfer in impinging jets: Comparison of circular convergent and cross-shaped orifice nozzles, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55, 2012, str. 282–293.
- Lee, J., Lee, S.-J.: The effect of nozzle configuration on stagnation region heat transfer enhancement of axisymmetric jet impingement, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43 (18), 2000, str. 3497 – 3509.
- Lytle, D., Webb, B.: Air jet impingement heat transfer at low nozzle-plate spacings, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 37, 1994, str. 1687 – 1697.
- Mahmood, M.: *Heat transfer from swirling impinging jets*, Ph.D. práce, Cranfield Institute of Technology, 1980.
- Martin, H.: *Heat and Mass Transfer between Impinging Gas Jets and Solid Surfaces*, sv. 13, Academic Press, 1977.
- Menter, F. R.: Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications, *AIAA Journal*, 32, 1994, s. 1598–1605.
- Menter, F. R., Langtry, R., Völker, S.: Correlation-based transition modeling for unstructured parallelized computational fluid dynamics codes, *Flow, Turbulence and Combustion*, 77 (1), 2006, str. 277–303.
- Menter, F. R., Smirnov, P. E., Liu, T., Avancha, R.: A One-Equation Local Correlation-Based Transition Model, *Flow Turbulence Combust*, 95, 2015, str. 583–619.
- National Institute of Environmental Science, J.: *Porphyridium* sp., [http://cfb.unh.edu/phycokey/Choices/Rhodophyceae/Microreds/PORPHYRIDIUM/Porphyridium\\_image\\_page.htm](http://cfb.unh.edu/phycokey/Choices/Rhodophyceae/Microreds/PORPHYRIDIUM/Porphyridium_image_page.htm), 2017, accessed 2017-08-31.
- Nedbal, L., Tichý, V., Xiong, F., Grobbelaar, J.: Microscopic green algae and cyanobacteria in high-frequency intermittent light, *J. Appl. Phycol.*, 8, 1996, str. 325–333.

Novák, V., Rieger, F., Vavro, K.: *Hydraulické pochody v chemickém a potravinářském průmyslu*, SNTL, Praha, 1989.

OpenFOAM: <http://www.openfoam.org/>, 2017, accessed: 2017-07-17.

OpenLB: <http://optilb.org/openlb/>, 2017, accessed: 2017-09-30.

Papáček, Š., Jablonský, J., Petera, K.: Advanced integration of fluid dynamics and photosynthetic reaction kinetics for microalgae culture systems, *Journal of System Biology*, 2017, odesláno k publikaci.

Papáček, Š., Matonoha, C., Štumbauer, V., Štys, D.: Modelling and simulation of photosynthetic microorganism growth: random walk vs. finite difference method, *Mathematics and Computers in Simulation*, 82 (10), 2012, str. 2022 – 2032, the Fourth IMACS Conference: Mathematical Modelling and Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Devoted to Owe Axelsson in occasion of his 75th birthday.

Papáček, Š., Štumbauer, V., Štys, D., Petera, K., Matonoha, C.: Growth impact of hydrodynamic dispersion in a Couette–Taylor bioreactor, *Mathematical and Computer Modelling*, 54 (7), 2011, str. 1791 – 1795.

Patankar, S. V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corp., Washington, 1980.

Petera, K.: Turbulent heat transport and its anisotropy in an impinging jet, *EPJ Web of Conferences*, 92, 2015, s. 02063.

Petera, K., Dostál, M.: Heat transfer measurements and CFD simulations of an impinging jet, *EPJ Web of Conferences*, 114, 2016, s. 02091.

Petera, K., Dostál, M.: Heat transfer in a confined impinging jet with swirling velocity component, *EPJ Web Conf.*, 143, 2017, s. 02091.

Petera, K., Dostál, M., Jirout, T., Fořt, I.: Heat transfer similarities between impinging jets and axial-flow impellers, *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 50 (6), 2016, str. 937–944.

Petera, K., Dostál, M., Věříšová, M., Jirout, T.: Heat Transfer at the Bottom of a Cylindrical Vessel Impinged by a Swirling Flow from an Impeller in a Draft Tube, *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*, 31 (3), 2017, str. 343–352.

Petera, K., Roušar, I., Dítl, P.: Computer Simulation of turbulent flow in a rectangular channel, v *Konference CHISA*, Praha, 2002.

Pope, S. B.: An explanation of the turbulent round-jet/plane-jet anomaly, *AIAA Journal*, 16, 1978, str. 279–281.

Pope, S. B.: *Turbulent Flows*, Cambridge University Press, 2000.

Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P.: *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 1992, second Edition.

- Rehak, B., Čelikovský, S., Papáček, Š.: Model for Photosynthesis and Photoinhibition: Parameter Identification Based on the Harmonic Irradiation O<sub>2</sub> Response Measurement, *Joint Special Issue of TAC IEEE and TCAS IEEE*, 2008, str. 101–108.
- Rektorys, K.: *Variační metody v inženýrských problémech a v problémech matematické fyziky*, SNTL, Praha, 1974.
- Rektorys, K.: *Přehled užité matematiky II*, Prometheus, Praha, 1995.
- Schlichting, H., Gersten, K.: *Boundary-layer Theory*, Springer Verlag, Berlin, 2000.
- Šesták, J.: *Teoretické základy oboru - přenos hmoty*, ČVUT Fakulta strojní, Praha, 1990.
- Šesták, J., Rieger, F.: *Teoretické základy oboru - přenos hybnosti a tepla*, ČVUT Fakulta strojní, Praha, 1988.
- Smagorinsky, J.: General circulation experiments with the primitive equations I: the basic experiments, *Monthly Weather Rev.*, 91, 1963, str. 99–164.
- Somers, J. A.: Direct Simulation of Fluid Flow with Cellular Automata and the Lattice-Boltzmann Equation, *Applied Scientific Research*, 51, 1993, str. 127–133.
- Spalart, P., Allmaras, S.: A one-equation turbulence model for aerodynamic flows, 1992, technical report, AIAA-92-0439.
- Succi, S.: *The Lattice Boltzmann equation*, Oxford University Press, 2001.
- Taylor, G. I.: Stability of a Viscous Liquid containing between Two Rotating Cylinders, *Phil. Trans. Royal Society*, A223, 1923, str. 289–343.
- Taylor, G. I.: Statistical Theory of Turbulence, *Proceedings of Royal Society London*, A151, 1935, s. 421.
- Terekhov, V. I., Mshvidobadze, Y. M.: Features of heat transfer at interaction of an impact swirl jet with a dimple, *Thermal Science*, 20, 2016, str. S35–S45.
- Terry, K. L.: Photosynthesis in Modulated Light: Quantitative Dependence of Photosynthetic Enhancement on Flashing Rate, *Biotechnology and Bioengineering*, 28, 1986, str. 988–995.
- Uddin, N., Neumann, S. O., Weigand, B.: LES simulations of an impinging jet: On the origin of the second peak in the Nusselt number distribution., *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 57, 2013, str. 356 – 368.
- Vlček, P., Jirout, T.: CFD simulation of flow in mixing equipment with draft tube, v *CHISA conference*, Seč, Czech Republic, 2015.
- Wandelt, M., Roetzel, W.: Lockin thermography as a measurement technique in heat transfer, v *QIRT 96 - Eurotherm Series 50*, 1997, str. 189–194.
- Wilcox, D. C.: *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries, Inc., California, 2006.
- Wu, X., Merchuk, J.: A model integrating fluid dynamics in photosynthesis and photoinhibition processes, *Chemical Engineering Science*, 56, 2001, str. 3527–3538.

- Wu, X., Merchuk, J. C.: Simulation of algae growth in a bench-scale bubble column reactor, *Biotechnology and Bioengineering*, 80 (2), 2002, str. 156–168.
- Yan, X.: *A preheated-wall transient method using liquid crystals for the measurement of heat transfer on external surfaces and in ducts*, Ph.D. práce, University of California, 1993.
- Younis, B. A., Speziale, C. G., Clark, T. T.: A rational model for the turbulent scalar fluxes, *Proceedings of The Royal Society A*, 461 (2054), 2005, str. 575–594.
- Younis, B. A., Weigand, B., Spring, S.: An Explicit Algebraic Model for Turbulent Heat Transfer in Wall-Bounded Flow with Streamline Curvature, *Journal of Heat Transfer*, 129, 2007, str. 425–433.
- Zuckerman, N., Lior, N.: Jet Impingement Heat Transfer: Physics, Correlations, and Numerical Modeling, *Advances in Heat Transfer*, 39, 2006, str. 565 – 631.

# Příloha

## Modely pro turbulentní tepelný tok

Model podle Daly a Harlow [1970], viz rov. (6.4) na str. 63.

```
#include "udf.h"
#include <math.h>

#define LAMBDA 0.0242
#define CP 1006.43
#define RHO 1.225
#define PRA 0.74418
#define NU 1.4607e-05
#define MU 1.7894e-05 ;

/* function prototypes */
void gamma_DalyHarlow (cell_t c, Thread *t, int i,
                      real dmatrix[ND_ND][ND_ND], real eps, real k);
void gamma_AbeSuga (cell_t c, Thread *t, int i,
                   real dmatrix[ND_ND][ND_ND], real eps, real k);
void gamma_Younis (cell_t c, Thread *t, int i,
                  real dmatrix[ND_ND][ND_ND], real eps, real k);

/* turbulent isotropic anisotropic diffusivity */
DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (gamma_isoT, c, t, i, dmatrix)
{
    real gamma;

    real mu = C_MU_L(c,t);
    real mu_t = C_MU_T(c,t);
    real Pr_t = 0.85;

    gamma = LAMBDA / CP + mu_t/Pr_t;;

    dmatrix[0][0] = gamma;
    dmatrix[1][1] = gamma;
    dmatrix[0][1] = dmatrix[1][0] = 0.0;

    #if RP_3D
        dmatrix[2][2] = gamma;
        dmatrix[0][2] = dmatrix[2][0] = dmatrix[1][2] = dmatrix[2][1] = 0.0;
    #endif
}

void gamma_DalyHarlow(cell_t c, Thread *t, int i,
                     real dmatrix[ND_ND][ND_ND], real eps, real k)
{
    /* i ... odkazuje na cislo skalaru / UDS */
    real Cth = 0.3;

    dmatrix[0][0] = LAMBDA/CP+RHO*Cth*k/eps*C_RUU(c,t);
    dmatrix[1][1] = LAMBDA/CP+RHO*Cth*k/eps*C_RVV(c,t);
    dmatrix[0][1] = RHO*Cth*k/eps*C_RUV(c,t);
    dmatrix[1][0] = dmatrix[0][1];

    #if RP_3D
```

```

    dmatrix[2][2] = LAMBDA/CP+RHO*Cth*k/eps*C_RWW(c,t);
    dmatrix[0][2] = RHO*Cth*k/eps*C_RUW(c,t);
    dmatrix[2][0] = dmatrix[0][2];
    dmatrix[1][2] = RHO*Cth*k/eps*C_RVW(c,t);
    dmatrix[2][1] = dmatrix[1][2];
#endif

}

DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (gamma_DalyHarlow_eps, c, t, i, dmatrix)
{
    real k = C_K(c,t);
    real eps = C_D(c,t);
    gamma_DalyHarlow(c,t,i,dmatrix,eps,k);
}

DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (gamma_DalyHarlow_omega, c, t, i, dmatrix)
{
    real omega = C_O(c,t);
    real k = C_K(c,t);
    real eps = 0.09*k*omega;
    gamma_DalyHarlow(c,t,i,dmatrix,eps,k);
}

```

Model podle Abe a Suga [2001], viz rov. (6.5) na str. 63.

```

void gamma_AbeSuga(cell_t c, Thread *t, int i,
                   real dmatrix[ND_ND][ND_ND], real eps, real k)
{
    real A[ND_ND][ND_ND];
    real Cth = 0.6;

    A[0][0] = C_RUU(c,t) /* /k */ ; /* tim to pak zase nasobime, tak je to
                                     tady zbytecne */
    A[1][1] = C_RVV(c,t) /* /k */;
    A[0][1] = C_RUV(c,t) /* /k */;
    A[1][0] = A[0][1];

#ifdef RP_3D
    A[2][2] = C_RWW(c,t) /* /k */;
    A[0][2] = C_RUW(c,t) /* /k */;
    A[2][0] = A[0][2];
    A[1][2] = C_RVW(c,t) /* /k */;
    A[2][1] = A[1][2];
#endif

    dmatrix[0][0] = LAMBDA/CP+RHO*Cth/eps*(C_RUU(c,t)*A[0][0]+C_RUV(c,t)*A[1][0]
#ifdef RP_3D
    + C_RUW(c,t)*A[2][0]
#endif
    );

    dmatrix[1][1] = LAMBDA/CP+RHO*Cth/eps*(C_RUV(c,t)*A[0][1]+C_RVV(c,t)*A[1][1]
#ifdef RP_3D
    + C_RVW(c,t)*A[2][1]
#endif
    );

    dmatrix[0][1] = RHO*Cth/eps*(C_RUU(c,t)*A[0][1]+C_RUV(c,t)*A[1][1]

```

```

#if RP_3D
    + C_RUW(c,t)*A[2][1]
#endif
);
dmatrix[1][0] = dmatrix[0][1];

#if RP_3D
dmatrix[2][2] = LAMBDA/CP+RHO*Cth/eps*(C_RUW(c,t)*A[0][2]
    + C_RVW(c,t)*A[1][2] + C_RWW(c,t)*A[2][2]);
dmatrix[0][2] = RHO*Cth/eps*(C_RUU(c,t)*A[0][2]
    + C_RUV(c,t)*A[1][2] + C_RUW(c,t)*A[2][2]);
dmatrix[2][0] = dmatrix[0][2];
dmatrix[1][2] = RHO*Cth/eps*(C_RUV(c,t)*A[0][2]
    + C_RVV(c,t)*A[1][2] + C_RVW(c,t)*A[2][2]);
dmatrix[2][1] = dmatrix[1][2];
#endif
}

DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (gamma_AbeSuga_eps, c, t, i, dmatrix)
{
    real k = C_K(c,t);
    real eps = C_D(c,t);
    gamma_AbeSuga(c,t,i,dmatrix,eps,k);
}

DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY (gamma_AbeSuga_omega, c, t, i, dmatrix)
{
    real omega = C_O(c,t);
    real k = C_K(c,t);
    real eps = 0.09*k*omega;
    gamma_AbeSuga(c,t,i,dmatrix,eps,k);
}

```

## Modely pro reakční rychlosti fotosyntetické továrny

Plný, neredukovaný model (rov. 7.8) na str. 86, čtvercová kavita.

```
#include "udf.h"
#include <math.h>

/* indexy slozek podle seznamu mixture - species - names - selected species */
#define RESTED 0
#define ACTIVE 1
#define INHIBITED 2

#define ALPHA 1.935e-3
#define BETA 5.785e-7
#define GAMMA 1.46e-1
#define DELTA 4.796e-4
#define I0 1391.7
#define AEXP 277.26

DEFINE_VR_RATE (myrate_PSFab, c,t,r,Mw,omega,rate,rr_t)
{
    real pos[ND_ND]; /* souradny vektor */
    real x,y,z,I,xa,xb,xr,dxa,dxb,cRMw;

    C_CENTROID(pos,c,t);
    z = pos[1]; /* souradnice - vzdalenost od steny */
    I = I0*exp(-AEXP*z); /* ozarenost - zavislost na souradnici */

    /* ca = C_R(c,t)/Mw[ACTIVE] * omega[ACTIVE]; */
    cRMw = C_R(c,t)/Mw[ACTIVE];
    xa = omega[ACTIVE];
    xb = omega[INHIBITED]; /* xr = omega[RESTED]; */

    if (!strcmp(r->name,"reaction-1")) {
        dxa = -( (ALPHA+BETA)*I+GAMMA )*xa + ALPHA*I*(1-xb);
        *rate = -dxa*cRMw;
    }
    else if (!strcmp(r->name,"reaction-2")) {
        dxb = BETA*I*xa - DELTA*xb;
        *rate = -dxb*cRMw;
    }
    *rr_t = *rate;
}
```



Redukovaný model, rov. (7.25) na str. 94, čtvercová kavita.

```
#define XBSS 0.18804

DEFINE_VR_RATE (myrate_PSFab_XBSS, c,t,r,Mw,omega,rate,rr_t)
{
  real pos[ND_ND]; /* souradny vektor */
  real x,y,z,I,xa,xb,xr,dxa,dxb,cRMw;

  C_CENTROID(pos,c,t);
  z = pos[1]; /* souradnice - vzdalenost od steny */
  I = I0*exp(-AEXP*z); /* ozarenost - zavislost na souradnici */

  /* ca = C_R(c,t)/Mw[ACTIVE] * omega[ACTIVE]; */
  cRMw = C_R(c,t)/Mw[ACTIVE];
  xa = omega[ACTIVE];
  xb = omega[INHIBITED]; /* xr = omega[RESTED]; */

  if (!strcmp(r->name,"reaction-1")) {
    dxa = -( (ALPHA+BETA)*I+GAMMA ) *xa + ALPHA*I*(1-XBSS);
    *rate = -dxa*cRMw; /* nebo ALPHA*I*(1-xb); */
  }
  else if (!strcmp(r->name,"reaction-2")) {
    dxb = 0.0;
    *rate = 0.0; /* -dxb*cRMw; */
  }
  *rr_t = *rate;
}
```

Neredukovaný model, rov. (7.8) na str. 86, verze pro Coutte-Taylorovo zařízení (3-D geometrie).

```
#include "udf.h"
#include <math.h>

#define ALPHA 1.935e-3
#define BETA 5.785e-7
#define GAMMA 1.46e-1
#define DELTA 4.796e-4
#define XBSS 0.24632
#define I0 1391.7
#define KAPPA 25.404
#define R1 0.0500
#define R2 0.066666666667

DEFINE_VR_RATE (myrate_PSFab_CT, c,t,r,Mw,omega,rate,rr_t)
{
    real pos[ND_ND]; /* this will hold the position vector */
    real x,y,z,rd, u, xa,xb, xr, dxa, dxb,ctot;

    C_CENTROID(pos,c,t);
    x = pos[0]; /* x-coordinate */
    y = pos[1]; /* y-coordinate, rotational axis */
    z = pos[2]; /* z-coordinate */
    rd = sqrt( SQR(x) +SQR(z) ); /* radius coordinate */

    I = 2*I0*R2/rd*cosh(KAPPA/R2*rd) / (cosh(KAPPA)+sinh(KAPPA));

    ctot = C_R(c,t)/Mw[ACTIVE]; /* total molar concentration */
    xa = omega[ACTIVE];
    xb = omega[INHIBITED];

    if (!strcmp(r->name,"reaction-1")) {
        dxa = -( (ALPHA+BETA)*I+GAMMA ) *xa + ALPHA*I*(1-xb);
        *rate = -dxa*ctot;
    }
    else if (!strcmp(r->name,"reaction-2")) {
        dxb = BETA*I*xa - DELTA*xb;
        *rate = -dxb*ctot;
    }
    *rr_t = *rate;
}
```

Redukovaný model, rov. (7.25) na str. 94, verze pro Coutte-Taylorovo zařízení (3-D geometrie).

```
DEFINE_VR_RATE (myrate_PSFab_XBSS_CT, c,t,r,Mw,omega,rate,rr_t)
{
  real pos[ND_ND]; /* this will hold the position vector */
  real x,y,z,rd, u, xa,xb, xr, dxa, dxb,ctot;

  C_CENTROID(pos,c,t);
  x = pos[0]; /* x-coordinate */
  y = pos[1]; /* y-coordinate, rotational axis */
  z = pos[2]; /* z-coordinate */
  rd = sqrt( SQR(x) +SQR(z) ); /* radius coordinate */

  I = 2*I0*R2/rd*cosh(KAPPA/R2*rd) / (cosh(KAPPA)+sinh(KAPPA));

  ctot = C_R(c,t)/Mw[ACTIVE]; /* total molar concentration */
  xa = omega[ACTIVE]; /* true only if MA = MB = MR ... */
  xb = omega[INHIBITED];
  /* xb ke nutne nastavit pri inicializaci, pak zustane konstantni */

  if (!strcmp(r->name,"reaction-1")) {
    dxa = -( (ALPHA+BETA)*I+GAMMA ) *xa + ALPHA*I*(1-xb);
    *rate = -dxa*ctot;
  }
  else if (!strcmp(r->name,"reaction-2")) {
    dxb = 0;
    *rate = -dxb*ctot;
  }
  *rr_t = *rate;
}
```