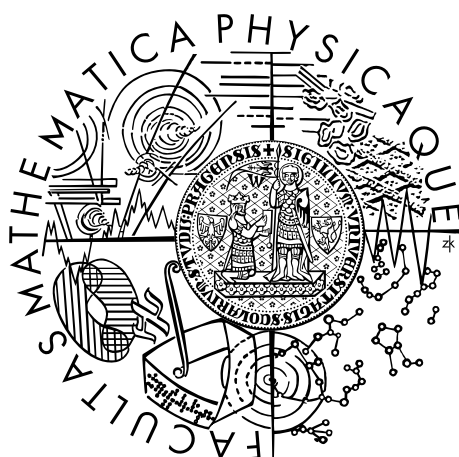


Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## DIPLOMOVÁ PRÁCE



Tomáš Netti

## Numerická simulace transonického proudění mokré páry

Katedra numerické matematiky

Vedoucí diplomové práce: prof. RNDr. Vít Dolejší, Ph.D., DSc.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Matematické a počítačové modelování  
ve fyzice a technice

Praha 2016

Rád bych poděkoval vedoucímu své diplomové práce prof. RNDr. Vítu Dolejšimu, Ph.D., DSc. za bezbřehou ochotu a trpělivost, cenné rady a lidský přístup. Stejně tak chci poděkovat své rodině a přítelkyni za psychickou oporu i pochopení.

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V ..... dne .....

Podpis autora

Název práce: Numerická simulace transonického proudění mokré páry

Autor: Tomáš Nettl

Katedra: Katedra numerické matematiky

Vedoucí diplomové práce: prof. RNDr. Vít Dolejší, Ph.D., DSc., Katedra numerické matematiky

Abstrakt: Tato práce se zabývá simulací proudění mokré páry pomocí nespojitě Galerkinovy metody. Mokrý pára je popsána Navierovými-Stokesovými rovnicemi pro stlačitelnou tekutinu a Hillovými momentovými rovnicemi, které popisují proces kondenzace vodní páry. První část této práce obsahuje matematickou formulaci rovnic modelu a odvození Hillových rovnic. Následuje diskretizace rovnic mokré páry pomocí nespojitě Galerkinovy metody a BDF metody do diskrétního tvaru pro přibližné řešení. Použitý postup vede k odvození časově implicitního schématu, k jehož řešení je použita modifikovaná Newtonova metoda. Navržená numerická metoda byla implementována do programu ADGFEM, který obecně slouží pro řešení nestacionárních konvekčně-difuzních úloh. Poslední část práce pak obsahuje získané numerické experimenty.

Klíčová slova: Navierovy-Stokesovy rovnice pro stlačitelnou tekutinu, mokrá pára, nespojitá Galerkinova metoda

Title: Numerical simulation of transonic flow of wet steam

Author: Tomáš Nettl

Department: Department of Numerical Mathematics

Supervisor: prof. RNDr. Vít Dolejší, Ph.D., DSc., Department of Numerical Mathematics

Abstract: This thesis is concerned on the simulation of wet steam flow using discontinuous Galerkin method. Wet steam flow equations consist of Navier-Stokes equations for compressible flow and Hill's equations for condensation of water vapor. The first part of this thesis describes the mathematical formulation of wet steam model and the derivation of Hill's equations. The model equations are discretized with the aid of discontinuous Galerkin method and backward difference formula which leads to implicit scheme represented by nonlinear algebraic system. This system is solved using Newton-like method. The derived scheme was implemented in program ADGFEM which is used for solving non-stationary convective-diffusive problems. The numerical results are presented in the last part of this thesis.

Keywords: compressible Navier-Stokes equations, wet steam, discontinuous Galerkin method

# Obsah

Úvod	2
<b>1 Popis modelu a jeho rovnic</b>	<b>3</b>
1.1 Rovnice proudění ideálního plynu . . . . .	3
1.2 Rovnice mokré páry . . . . .	5
<b>2 Odvození rovnic kondenzace</b>	<b>8</b>
2.1 Rovnice mokré páry . . . . .	8
2.1.1 Obecná dynamická rovnice GDE . . . . .	8
2.1.2 Hillovy momentové rovnice . . . . .	9
2.2 Kondenzace při rychlé expanzi . . . . .	12
2.2.1 Homogenní nukleace . . . . .	13
2.3 Rychlost nukleace . . . . .	16
2.4 Rychlost růstu poloměru kapky . . . . .	20
2.5 Rovnice pro tlak . . . . .	22
<b>3 Nespojité Galerkinova metoda</b>	<b>24</b>
3.1 Formulace problému . . . . .	24
3.1.1 Bezrozměrný tvar rovnic . . . . .	24
3.1.2 Schématický zápis modelových rovnic . . . . .	26
3.2 Základní vlastnosti rovnic . . . . .	27
3.2.1 Základní vlastnosti nevazkého toku . . . . .	28
3.2.2 Vlastnosti vazkého toku . . . . .	31
3.3 Diskretizace rovnic mokré páry . . . . .	31
3.3.1 Značení a prostory funkcí po částech Sobolevovských . . . . .	31
3.3.2 Semidiskretizace nespojitou Galerkinovou metodou . . . . .	32
3.3.3 Časová a prostorová diskretizace problému . . . . .	37
3.3.4 Metoda řešení nelineární algebraické soustavy . . . . .	38
<b>4 Numerické experimenty</b>	<b>45</b>
<b>Závěr</b>	<b>55</b>
<b>Seznam použité literatury</b>	<b>57</b>
<b>Seznam použitých veličin a konstant</b>	<b>60</b>

# Úvod

Matematické modelování proudění mokré páry se dostalo do popředí zájmů s rozvojem parních turbín. Snahou bylo přizpůsobit konstrukci parní turbíny tomu, že při přechodu přes rázovou vlnu může docházet ke kondenzaci vodní páry a vznikají kapky vody. Ty způsobují erozi lopatek turbín a zároveň se kondenzací snižuje účinnost turbíny. S rozvojem počítačů se ukázala numerická simulace transonického proudění jako vhodná metoda popisu, neboť experimentální měření kondenzace a spektra kapek v turbínové mříži je poměrně komplikované.

Termínem mokrá pára se označuje směs vodní páry a kapek vody. Fyzikální model pak uvažuje vodní páru jako ideální plyn, který při daných podmínkách může kondenzovat do kapalné formy. Vzniklé kapky vytváří velikostní spektrum, jehož tvar závisí na okolních podmínkách. Aby však bylo možné matematicky popsat model mokré páry, zavádí se řada zjednodušujících předpokladů. Zde popisovaný model využívá k popisu spektra kapalné momenty poprvé použité v práci [10], kondenzace je zde reprezentována homogenní nukleací a je zde uvažován difuzní růst kapek. Tato koncepce je poměrně rozšířena a má široké možnosti použití jako například při proudění v kanálu nebo pro tryskové pumpy.

Většina numerických simulací proudění mokré páry je založena na metodě konečných objemů. Jedná se o metodu prvního řádu, která je založena na počátcích konstantní aproximaci. To umožňuje její aplikaci na problémy obsahující z fyzikální podstaty nespojitosti v řešení, například nespojitosti stavových veličin na rázové vlně při transonickém proudění. Nevýhody metody konečných objemů je nízký řád přesnosti a náchylnost na nežádoucí numerickou vazkost. Ta může při vysokých hodnotách Reynoldsova čísla přesáhnout fyzikální vazkost a vést k přílišnému zhlazení řešení.

V této práci je použita nespojitá Galerkinova metoda, která představuje zobecnění metody konečných prvků, kdy na jednotlivých elementech sítě je hledané řešení aproximováno polynomem. Práce se však nezabývá odhadem chyby numerické metody, ale samotnou implementací modelu pomocí Galerkinovy nespojitě metody. K tomu je použit program ADGFEM řešící nestacionární konvekčně-difuzní úlohy pomocí nespojitě Galerkinovy metody. Ten umožňuje simulaci stlačitelné proudění kolem lopatky turbíny. Cílem práce je tedy formulace rovnic mokré páry, návrh numerické metody a její implementace do programu ADGFEM.

Tato práce je rozčleněna do čtyř kapitol. V první kapitole jsou uvedeny použité rovnice proudění páry jako ideálního plynu a Hillovy rovnice popisující spektrum kapek. Druhá kapitola se věnuje samotnému modelu mokré páry, jeho odvození a jednotlivým zjednodušením. Třetí kapitola obsahuje odvození přibližného řešení a přiblížení postupu jeho řešení. Prostorové derivace jsou diskretizovány nespojitou Galerkinovou metodou a časové derivace obecnou  $n$ -krokovou BDF metodou. Pro řešení vzniklého problému, který představuje algebraickou soustavu nelineárních rovnic, je použita modifikovaná Newtonova metoda, která vyžaduje linearizaci forem přibližného řešení. V poslední čtvrté kapitole jsou uvedeny úpravy použité při implementaci rovnic a získané výsledky.

# 1. Popis modelu a jeho rovnic

Koncepčně odpovídá zde popisovaný model proudění v turbínové lopatkové mříži, kdy dochází mezi lopatkami turbíny ke snížením plošného průřezu proudící páry a tím dochází k jejímu urychlení na rychlost vyšší než rychlost zvuku. Vznikají rázové vlny, tj. nespojitosti stavových veličin jako hustota, teplota, tlak. Proudícím kontinuem v uvažovaném modelu je vodní pára, která tak při přechodu přes rázovou vlnu přechází do stavu silného podchlazení. Pára se tak stává přesycenou a nastává proces homogenní nukleace, tedy vzniku kapek vody. Kromě samotného popisu nukleace se v modelu parametrizuje i proces časové změny již existujících kapek, který má nezanedbatelný význam a který je řízen procesy difuze a vedení tepla. Jiné procesy související například s vzájemnou kolizí kapek zde pro jednoduchost uvažovány nejsou.

Moderní turbíny nebo turbogenerátory jsou z důvodů co nejvyšší účinnosti složeny z víceúrovňové série lopatek různých velikostí a vlastností. Mnoho modelů včetně zde uvažovaného však uvažuje pouze jednu lopatkovou mříž, na které navíc využívá její symetrii. Rovnice proudění jsou tak formulovány ve 2D a samotná lopatková mříž je ve značném geometrickém zjednodušení. Tím je zjednodušena formulace rovnic a sníží se nároky na výpočet.

Rovnice proudění mokré páry lze fyzikálně rozdělit na rovnice popisující samotné proudění kontinua, tj. rovnici kontinuity, Navierovy-Stokesovy rovnice a rovnici energetické bilance, a rovnice charakterizující mokrou páru. Rovnice uvedené v podsekcích 1.1 a 1.2 jsou čerpány z článku Halamy [8, podsekcce 2]. Jedná se o sadu rovnic pro stlačitelné proudění ideálního plynu ve 2D doplněnou o rovnice mokré páry.

## 1.1 Rovnice proudění ideálního plynu

Proudění kontinua se řídí základními fyzikálními zákony zachování, jejich odvození lze nalézt např. v knize [7].

Zákon zachování hmoty je reprezentován rovnicí kontinuity pro stlačitelné proudění

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{v}\rho) = 0, \quad (1.1)$$

kde  $\rho$  je hustota,  $\mathbf{v}$  je vektor rychlosti o složkách  $\mathbf{v} = [v_1, v_2]^T$  a  $t$  je čas.

Zákon zachování hybnosti je ve tvaru<sup>1</sup>

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\operatorname{grad}(p) + \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}), \quad (1.2)$$

kde  $p$  je termodynamický tlak určený rovnicí (1.24) a  $\boldsymbol{\tau}$  je tensor napětí. Tensor  $\boldsymbol{\tau}$  má obecný tvar

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right) & \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

---

<sup>1</sup>V rovnici (1.2) se díky zjednodušenému 2D modelu neuvažuje tíhová síla.

kde  $\mu$  a  $\lambda$  jsou obecně funkcemi termodynamických veličin proudícího kontinua. V modelu mokré páry se jedná o vodní páru jakožto ideální plyn, ve kterém platí

$$3\lambda + 2\mu = 0. \quad (1.4)$$

Vyjádřením  $\lambda$  z rovnice (1.4) a užitím rovnice (1.3) dostaneme koncový výraz pro tensor napětí

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \begin{pmatrix} \frac{4}{3} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} & \left( \frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right) \\ \left( \frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right) & \frac{4}{3} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \end{pmatrix}, \quad (1.5)$$

kde veličina  $\mu$  odpovídá dynamické viskozitě kontinua. Pro proudění mokré páry bude dále značena symbolem  $\eta_v$ .

Zákon zachování energie lze zapsat ve tvaru

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}(E\mathbf{v}) = -\operatorname{div}(p\mathbf{v}) + \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}\mathbf{v}) - \operatorname{div}\mathbf{q}, \quad (1.6)$$

kde  $E$  je hustota celkové energie a  $\mathbf{q} = [q_1, q_2]$  je vektor tepelného toku. Hodnota  $E$  je dána

$$E = \rho \left( e + \frac{|\mathbf{v}|^2}{2} \right), \quad (1.7)$$

kde  $e$  je specifická vnitřní energie ideálního plynu

$$e = c_v \theta, \quad (1.8)$$

kde  $c_v$  je měrné specifické teplo za konstantního objemu a  $\theta$  je teplota plynu. Ta je dána stavovou rovnicí

$$\theta = \frac{p}{\rho R}, \quad (1.9)$$

kde  $\rho$  je hustota a  $R$  je univerzální plynová konstanta. Protože platí Mayerův vztah, lze vyjádřit  $c_v = c_p - R$ , kde  $R$  je universální plynová konstanta a  $c_p$  je měrné specifické teplo za konstantního tlaku, které obecně závisí na teplotě. Zbývá ještě doplnit vztahy pro tepelný tok  $\mathbf{q}$ , pro který platí Fourierův zákon

$$\mathbf{q} = -\kappa \operatorname{grad}(\theta), \quad (1.10)$$

kde  $\kappa$  je koeficient tepelné vodivosti, a pro rychlost zvuku  $a$

$$a = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}. \quad (1.11)$$

Machovo číslo  $M$  je pak dáno jako

$$M = \frac{|\mathbf{v}|}{a}. \quad (1.12)$$

Rovnice (1.1), (1.2) a (1.6) představují soustavu čtyř parciálních diferenciálních rovnic pro pět neznámých veličin  $\rho$ ,  $\mathbf{v} = [v_1, v_2]$ ,  $E$  a  $p$ . Jedná se o Navierovy-Stokesovy rovnice pro stlačitelné proudění ideálního plynu. Tyto rovnice však netvoří úplný systém a pro jejich uzavření je nutné doplnit rovnici pro tlak  $p$  viz (1.24). Tlak mokré páry však souvisí přímo i s prouděním mokré páry a představuje tedy vazbu mezi Navierovými-Stokesovými rovnicemi a rovnicemi mokré páry.



## 1.2 Rovnice mokré páry

Mokrá pára je definována jako směs vodní páry jako ideálního plynu a kapiček vody. Koncepce modelu proudění v lopatkové mříži turbíny předpokládá, že kapky vody nejsou obsaženy v proudění na vstupu do turbíny, ale vznikají při přechodu proudícího páry přes rázovou vlnu, na které dochází k prudkému podchlazení vodní páry a nastává homogenní nukleace neboli spontánní vznik kapek při vysokém přesycení.

Základní veličinou charakterizující obsah vody v proudícím médiu je podíl kapalné vody (v [11, rovnice (2.21)] se označuje jako liquid mass fraction)  $\omega$  definovaný jako

$$\omega = \frac{M_l}{M}, \quad (1.13)$$

kde  $M_l$  je hmotnost vody a  $M$  je celková hmotnost. Z definice hustoty a z předchozí rovnice plyne vztah mezi hustotou kapaliny  $\rho_l$  (nebo též hustotou zkoncentrované vody) a celkovou hustotou  $\rho$

$$\rho_l = \frac{M_l}{V} = \omega\rho, \quad (1.14)$$

kde  $V$  je uvažovaný objem. Protože celková hustota  $\rho$  je dána součtem hustoty vody  $\rho_l$  a vodní páry  $\rho_v$ , tedy  $\rho = \rho_l + \rho_v$ , platí pro hustotu vodní páry

$$\rho_v = (1 - \omega)\rho. \quad (1.15)$$

Pro popis již existujících vodních kapek se používají kapalné momenty (liquid moments)  $Q_0$ ,  $Q_1$  a  $Q_2$ , které byly poprvé zavedeny v práci [10]. Tyto momenty charakterizují spektrum velikostí kapek vzniklých homogenní nukleací. Platí

$$Q_0 = N, \quad Q_1 = \sum_{i=1}^N r_i, \quad Q_2 = \sum_{i=1}^N r_i^2, \quad (1.16)$$

kde  $r_i$  je poloměr  $i$ -té kapky a  $N$  je celkový počet kapek na jednotku hmotnosti. Aby nebylo nutné popisovat celé spektrum poloměrů jednotlivých kapek, zavádí se průměrný poloměr kapky  $\bar{r}$

$$\bar{r} = \begin{cases} 0 & \text{pro } \omega \leq 10^{-6} \\ \sqrt{\frac{Q_2}{Q_0}} & \text{pro } \omega > 10^{-6} \end{cases}, \quad (1.17)$$

kde hodnota  $10^{-6}$  je zde volena stejně jako je uvedeno v [8].

Pomocí veličin  $\omega$ ,  $Q_0$ ,  $Q_1$  a  $Q_2$  již lze charakterizovat vodní složku v proudící páře. Z fyzikálního pohledu se voda v kontinuu podrobuje procesu pasivního transportu v proudovém poli, je však nutné uvažovat zdrojové členy charakterizující procesy nukleace a difuzního růstu. Velkým zjednodušením z hlediska modelu je předpoklad, že zde nejsou žádné setrvačné síly a nedochází tak k posunu mezi prouděním kapalné a plynné složky stejně jako se neuvažuje vzájemné kolize kapiček. Tato koncepce je diskutována v článku [10] a uvažovaný předpoklad dobře odpovídá experimentálním měření.

Proudění mokré páry odpovídající transportním rovnicím se zdrojovými členy se nazývá Hillový momentové rovnice. Tyto rovnice mají tvar

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\omega\mathbf{v}) &= \frac{4}{3}\pi r_c^3 \rho_l J + 4\rho\pi Q_2 \dot{r} \rho_l \\ \frac{\partial(\rho Q_2)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Q_2 \mathbf{v}) &= r_c^2 J + 2\rho Q_1 \dot{r} \\ \frac{\partial(\rho Q_1)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Q_1 \mathbf{v}) &= r_c J + \rho Q_0 \dot{r} \\ \frac{\partial(\rho Q_0)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Q_0 \mathbf{v}) &= J\end{aligned}, \quad (1.18)$$

kde  $\rho_l$  je hustota vody,  $r_c$  je kritický poloměr,  $J$  je člen popisující rychlost nukleace (nucleation rate), tj. počet nově vzniklých kapek, a  $\dot{r}$  popisuje časovou změnu poloměru kapky<sup>2</sup> difuzí vodní páry na povrchu kapky. Parametrizované členy jsou funkcemi evolučních proměnných. Při použití značení z podsekcce 3.1.2 lze psát  $J = J(\mathbf{w})$ ,  $r_c = r_c(\mathbf{w})$ ,  $\rho_l = \rho_l(\mathbf{w})$  a  $\dot{r} = \dot{r}(\mathbf{w})$ , kde  $\mathbf{w}$  je stavový vektor viz (3.13). Pro větší přehlednost se však argumenty těchto členů uvádět nebudou. Odvození těchto členů je popsáno v podsekcce 2.1.

Jak již bylo uvedeno, model mokré páry se skládá z vodní páry jakožto ideálního plynu a kapalné vody. Pro vodní páru proto platí stavová rovnice

$$\theta_v = \frac{p}{\rho_v R_v}, \quad (1.19)$$

kde  $\theta_v$  je teplota páry,  $R_v$  je její plynová konstanta a  $p$  je její tlak. Protože v modelu je plynná složka tvořena pouze vodní párou, je označení pro tlak  $p$  ekvivalentní tlaku  $p_v$ .

Proces homogenní nukleace vyjádřený veličinou  $J$  je parametrizován rovnicí

$$J = \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_v^3} \frac{\rho_v^2}{\rho_l}} \exp\left(-\frac{4\pi r_c^2 \sigma}{3k_B \theta_v}\right), \quad (1.20)$$

kde  $\sigma$  je povrchové napětí,  $m_v$  je molekulová hmotnost vodní páry,  $\rho_v$  je hustota vodní páry,  $k_B$  je Boltzmannova konstanta,  $\theta_v$  je teplota vodní páry a  $\rho_l$  je hustota vody. Odvození vzorce (1.20) je uvedeno v podsekcce 2.3.

Rychlost růstu kapek  $\dot{r}$  daná difuzním výparem nebo kondenzací je parametrizována vztahem

$$\dot{r} = \frac{\lambda_v(\theta_s - \theta_v)}{L_Q \rho_l (1 + 3.18 \operatorname{Kn})} \frac{\bar{r} - r_c}{\bar{r}^2}, \quad (1.21)$$

kde  $\theta_s$  je teplota, při které je se stává vodní pára sytou,  $L_Q$  je latentní teplo kondenzace,  $\lambda_v$  je koeficient tepelné vodivosti,  $\operatorname{Kn}$  je Knudsenovo číslo a  $\bar{r}$  je průměrný poloměr kapky daný rovnicí (1.17).

Pro Knudsenovo číslo je použit stejný vztah jako používá Halama v článku [8, rovnice (8)]

$$\operatorname{Kn} = \frac{\eta_v \sqrt{2\pi R_v \theta_v}}{4\bar{r} p_v}, \quad (1.22)$$

<sup>2</sup>Nejedná se o časovou derivaci, která se často takto značí, ale pouze o používané značení.

kde  $R_v$  je plynová konstanta pro vodní páru a  $\eta_v$  je dynamická viskozita vodní páry.

Kritický poloměr  $r_c$  udává velikost kapek vzniklých procesem nukleace. Je dán rovnicí

$$r_c = \frac{2\sigma}{\rho_l R_v \theta_v \ln\left(\frac{p_v}{p_s}\right)}, \quad (1.23)$$

kde poměr tlaku vodní páry  $p_v$  a tlaku syté vodní páry  $p_s$  udává hodnotu přesycení. Odvození této rovnice je uvedeno v sekci 2.2.

Zavedením podílu vody  $\omega$  a latentního tepla kondenzace  $L$  lze formulovat rovnici pro tlak

$$p = \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ E - \frac{1}{2} \rho |\mathbf{v}|^2 + \rho \omega L_Q \right], \quad (1.24)$$

kde  $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$  je poměr měrných tepel za konstantního tlaku  $c_p$  a konstantního objemu  $c_v$ . V podsekci 2.5 je uvedeno odvození této rovnice.

Spolu s rovnicí pro tlak se stává systém rovnic zákonů zachování (1.1), (1.2) a (1.6) uzavřený a s rovnicemi mokré páry (1.18) tvoří systém rovnic popisující proudění mokré páry.

## 2. Odvození rovnic kondenzace

V této části je uveden podrobnější popis a odvození rovnic uvedených v sekci 1. Hlavní důraz je kladen odvození modelových rovnic mokré páry (1.18) a souvisejících členů popisujících proces nukleace, rovnice (1.20), a homogenní kondenzace (1.21). Cílem je porozumět matematickému modelu a jeho zjednodušení oproti fyzikální teorii. Odvození rovnic základních fyzikálních zákonů zachování (1.1), (1.2), (1.6) zde uvedeno není, neboť jejich odvození je obecně známější a lze ho nalézt např. v knize [7].

### 2.1 Rovnice mokré páry

V této části práce jsou odvozeny rovnice mokré páry (1.18). Jejich odvození lze přistupovat dvěma způsoby - pomocí fyzikální intuice nebo matematickými úpravami obecné dynamické rovnice pro aerosoly (general dynamic equation, zkráceně GDE). Zde je zvolen druhý jmenovaný postup, a proto je nejprve zaveden obecný tvar GDE.

#### 2.1.1 Obecná dynamická rovnice GDE

Kapičky vody vzniklé kondenzací páry jsou aerosoly lze pomocí GDE, která se používá v aerosolovém inženýrství. Fyzikálně se jedná bilanci hmoty v uvažovaném objemu, která zahrnuje procesy spjaté s aerosoly. Problematika aerosolů je velmi obsáhlá a zde uvedené rovnice jsou zúžením obecnějšího popisu. Níže uvedený postup vychází z knihy [12, kapitola 3 a 11]. Pro podrobný výklad je uveden např. v knize [13].

Rovnice GDE je odvozena z věty o transportu, proto platí

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\text{div}(n\mathbf{v}), \quad (2.1)$$

kde  $n$  je koncentrace aerosolů dané velikosti. Kromě vlivu proudění na bilanci koncentrace je nutné započítat příspěvky od procesů charakteristických pro aerosoly - difuze, externího silového působení, růstu částic a nukleace. Celková časová změna koncentrace v uvažovaném elementárním objemu je pak dána jako jejich součet

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\text{div}(n\mathbf{v}) + (D \text{ grad } n) + \left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{\text{nukl}} + \left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{\text{rust}}, \quad (2.2)$$

kde  $D$  je difuzní koeficient a  $\mathbf{c}$  je vektor rychlosti daný externími silami, např. elektrostatickými. Členy  $\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{\text{nukl}}$  a  $\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{\text{rust}}$  pak parametrizují procesy nukleace a difuzního růstu.

Aerosoly jakožto malé částičky vzniklé různými procesy za různých podmínek však téměř vždy nabývají celé škály velikostí a tvoří spektrum. Toto spektrum lze popsat dvěma způsoby. Pro dostatečně velké aerosoly lze použít distribuční funkci  $f = f(\mathbf{x}, r, t)$ , která je obecně funkcí prostorových souřadnic  $\mathbf{x}$ , poloměru částic  $r$  a času  $t$ . V diskrétním případě je spektrum nahrazeno histogramem četnosti, což bývá vhodnější pro popis malých částíček. Obě dvě metody popisu

jsou pro rozumně velké aerosoly rovnocenné.

Aby bylo možné popsat rovnicí (2.2) spektrum velikostí, označí se  $n_i$  koncentrací aerosolových částíček tvořených  $i$  molekulami. Nahrazení  $n$  za  $n_i$  pak znamená formální přechod k diskrétnímu popisu spektra velikostí kapek. Rovnici (2.2) lze přepsat na tvar

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\operatorname{div}(n_i \mathbf{v}) + \operatorname{div}(D \operatorname{grad}(n_i)) - \operatorname{div}(\mathbf{c} n_i) + \left[ \frac{\partial n_i}{\partial t} \right]_{\text{nukl}} + \left[ \frac{\partial n_i}{\partial t} \right]_{\text{rust}}, \quad (2.3)$$

který se označuje jako obecná dynamická rovnice GDE. Dosazením distribuční funkce  $f$  za  $n_i$  se provede formální přechod k spojitému rozložení. Je ale nutné nahradit příslušnou sumaci přes index  $i$  za integraci distribuční funkce přes velikost částic.

## 2.1.2 Hillové momentové rovnice

Níže uvedené odvození kapalných momentů  $Q_i$ ,  $i = 0, 1, 2$  vyskytujících se v rovnicích (1.18) vychází z práce [11, podsekcce 2.3.3]. Východním bodem je obecná dynamická rovnice, ve které nejsou uvažovány členy popisující procesy difuze a segregace aerosolů (člen  $-\operatorname{div}(\mathbf{c} n_k)$ ). Její tvar je potom možné zapsat ([11, rovnice (2.36)]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(\dot{r}f)}{\partial r} + \operatorname{div}(f \mathbf{v}) = \delta(r - r_c) J, \quad (2.4)$$

kde  $r$  je poloměr kapičky (aerosolu),  $\dot{r}$  je časová změna poloměru (viz rovnice (1.21)),  $J$  je nukleační člen (rovnice (1.20)) a  $\delta(r - r_c)$  je Diracova delta funkce. Člen  $\frac{\partial(\dot{r}f)}{\partial r}$  odpovídá členu  $\left[ \frac{\partial n_k}{\partial t} \right]_{\text{rust}}$  v rovnici (2.3) a popisuje růst poloměru kapky,  $J$  odpovídá nukleačnímu členu  $\left[ \frac{\partial n_k}{\partial t} \right]_{\text{nukl}}$  a Diracova funkce  $\delta(r - r_c)$  zajišťuje započtení nukleačního členu  $J$  pouze pro kapky o kritickém poloměru  $r_c$ , což charakterizuje proces nukleace.

Postup při odvozování Hillových momentových rovnic je zavést v rovnici (2.4) obdobně jako ve statistice  $k$ -tý moment  $\mu_k$  definovaný jako

$$\mu_k = \int_0^{\infty} r^k f dr, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

Proto se přenásobí rovnice (2.4) členem  $r^k$ , kde  $k = 0, 1, 2, \dots$  a integrací přes celé spektrum velikostí se získá rovnice

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\infty} r^k f dr + \int_0^{\infty} r^k \frac{\partial(\dot{r}f)}{\partial r} dr + \int_0^{\infty} \operatorname{div}(r^k f \mathbf{v}) dr = \int_0^{\infty} r^k \delta(r - r_c) J dr. \quad (2.6)$$

a může se pak přepsat (2.6) jako

$$\frac{\partial \mu_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\mu_k \mathbf{v}) = r_c^k J - \int_0^{\infty} r^k \frac{\partial(\dot{r}f)}{\partial r} dr. \quad (2.7)$$

Integrál na pravé straně (2.7) lze upravit pomocí integrace per-partes

$$\int_0^{\infty} r^k \frac{\partial(\dot{r}f)}{\partial r} dr = [r^k \dot{r}f]_0^{\infty} - k \int_0^{\infty} r^{k-1} \dot{r}f dr. \quad (2.8)$$

První člen na pravé straně rovnice je nulový, neboť se neuvažuje výskyt kapek o nulovém nebo nekonečně velkém poloměru a hodnota distribuční funkce se u těchto bodů blíží nule. Aby bylo možné rovnici (2.8) dále upravit, zavádě se průměrný poloměr kapky  $\bar{r}$  (viz [11])

$$\bar{r} = \sqrt{\frac{\mu_2}{\mu_0}}. \quad (2.9)$$

Zavedení průměrného poloměru umožňuje přeformulovat člen popisující rychlost růstu poloměru kapky jakožto funkce  $\dot{r} = \dot{r}(r)$  na funkci  $\dot{r} = \dot{r}(\bar{r})$ . Díky této úpravě lze  $\dot{r}$  v rovnici (2.8) vysunout před integrál a psát

$$\int_0^\infty r^k \frac{\partial(\dot{r}f)}{\partial r} dr = -k\dot{r} \int_0^\infty r^{k-1} f dr = -k\dot{r}\mu_{k-1}. \quad (2.10)$$

S využitím rovnice (2.10) se rovnice (2.7) převede na tvar

$$\frac{\partial\mu_k}{\partial t} + \text{div}(\mu_k \mathbf{v}) = r_c^k J - k\dot{r}\mu_{k-1}, \quad (2.11)$$

což je rekurentní vztah pro  $\mu_k$ . V tomto rekurentním vyjádření je voleno  $k = 0, 1, 2, 3$  a vzniká tak z rovnice (2.11) soustava čtyř parciálních diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\mu_0)}{\partial t} + \text{div}(\mu_0 \mathbf{v}) &= J, \\ \frac{\partial(\mu_1)}{\partial t} + \text{div}(\mu_1 \mathbf{v}) &= r_c J + \dot{r}\mu_0, \\ \frac{\partial(\mu_2)}{\partial t} + \text{div}(\mu_2 \mathbf{v}) &= r_c^2 J + 2\dot{r}\mu_1, \\ \frac{\partial(\mu_3)}{\partial t} + \text{div}(\mu_3 \mathbf{v}) &= r_c^3 J + 3\dot{r}\mu_2. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Důvod, proč jsou voleny právě čtyři momenty a ne jiný počet, nebyl v dostupné literatuře diskutován. Může to však souviset s tím, že rovnice (2.12) pro třetí moment  $\mu_3$  se dá upravit na rovnici pro vlhkost  $\omega$  jak bude uvedeno níže. Pro další úpravy rovnic (2.12) se zavede formální předpoklad, že pro jednotlivé momenty platí

$$\mu_k \equiv \rho Q_k, \quad (2.13)$$

kde veličina  $Q_k$  se nazve  $k$ -tý kapalný moment (liquid moment) a  $\rho$  je celková hustota vody. Vložením (2.13) do rovnic (2.12) se dostane

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho Q_0)}{\partial t} + \text{div}(\rho Q_0 \mathbf{v}) &= J, \\ \frac{\partial(\rho Q_1)}{\partial t} + \text{div}(\rho Q_1 \mathbf{v}) &= r_c J + \dot{r}\rho Q_0, \\ \frac{\partial(\rho Q_2)}{\partial t} + \text{div}(\rho Q_2 \mathbf{v}) &= r_c^2 J + 2\dot{r}\rho Q_1, \\ \frac{\partial(\rho Q_3)}{\partial t} + \text{div}(\rho Q_3 \mathbf{v}) &= r_c^3 J + 3\dot{r}\rho Q_2. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Aby bylo možné přejít od kapalného momentu k podílu kapalné vody  $\omega$ , je hustota kapaliny vyjádřena pomocí distribuční funkce jako integrál přes všechny objemy kapek (předpokládá se sférický tvar kapek) přenásobený distribuční funkcí, tedy

$$\rho_l = \int_0^{\infty} \frac{4}{3} \pi \varrho_l r^3 f dr, \quad (2.15)$$

kde  $\varrho_l$  je hustota zkondenzované kapaliny (condensate density), což je materiálová vlastnost. Tuto veličinu lze uvažovat konstantní, díky čemuž lze s využitím definice momentu (rovnice (2.5)) vyjádřit rovnici (2.15) jako

$$\rho_l = \frac{4}{3} \pi \varrho_l \int_0^{\infty} r^3 f dr = \frac{4}{3} \pi \varrho_l \mu_3. \quad (2.16)$$

Kombinací vztahu pro hustotu kapalné vody (1.14) a (2.13) se získá výsledný vztah mezi  $\omega$  a  $Q_3$

$$\omega = \frac{4}{3} \pi \varrho_l Q_3. \quad (2.17)$$

Tento vztah se využije pro úpravu poslední rovnice v soustavě (2.14), čímž vyjde

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho Q_0)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Q_0 \mathbf{v}) &= J, \\ \frac{\partial(\rho Q_1)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Q_1 \mathbf{v}) &= r_c J + \dot{r} \rho Q_0, \\ \frac{\partial(\rho Q_2)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Q_2 \mathbf{v}) &= r_c^2 J + 2\dot{r} \rho Q_1, \\ \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \omega \mathbf{v}) &= \frac{4}{3} \pi \varrho_l (r_c^3 J + 3\dot{r} \rho Q_2). \end{aligned} \quad (2.18)$$

což je výsledný tvar rovnic, který se také nazývá Hillové momentové rovnice. Zavedením kapalných momentů je možné vyjádřit rovnici pro průměrný poloměr (2.9) pomocí kapalných momentů (2.13) na tvar

$$\bar{r} = \sqrt{\frac{Q_2}{Q_1}}, \quad (2.19)$$

a pro zkompletování odvození lze s využitím (2.5) psát

$$\begin{aligned} \rho Q_0 &\equiv \mu_0 = \int_0^{\infty} f dr, \\ \rho Q_1 &\equiv \mu_1 = \int_0^{\infty} r f dr, \\ \rho Q_2 &\equiv \mu_k = \int_0^{\infty} r^2 f dr. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Distribuční funkce popisuje počet kapek v jednotkovém prostoru (má proto rozměr  $m^{-3}$ ), mají kapalně momenty fyzikální rozměr (viz rozměrová analýza rovnic

(2.18))  $Q_2 = [m^2kg^{-1}]$ ,  $Q_1 = [mkg^{-1}]$  a  $Q_0 = [kg^{-1}]$ . Přibližně však lze momenty interpretovat jako následující charakterizaci spektra kapek

$$\begin{aligned} Q_0 &\approx N, \\ Q_1 &\approx \sum_{i=0}^N r_i, \\ Q_2 &\approx \sum_{i=0}^N r_i^2. \end{aligned} \tag{2.21}$$

Výsledné tvary rovnic (2.18), (2.19) a (2.21) jsou totožné s rovnicemi (1.18), (1.17) a (1.16), které jsou převzaty z výchozího článku [8].

## 2.2 Kondenzace při rychlé expanzi

Charakteristickou vlastností podzvukového proudění je, že se termodynamické veličiny mění spojitě z výchozího do koncového stavu a celý systém se stále nachází v termodynamické rovnováze. Při nadzvukovém proudění však nelze uvažovat termodynamické veličiny ve stálém stavu termodynamické rovnováhy. Vznikají zde totiž rázové vlny, na kterých dochází k rychlé expanzi páry, která se stává přesycenou a nenachází se proto ve stavu termodynamické rovnováhy. Aby se pára vrátila zpět do rovnovážného stavu, dochází ke kondenzaci. Protože charakteristický čas kondenzace je mnohem delší než charakteristický čas expanze vodní páry, je proto nutné uvažovat při popisu kondenzace vodní páru v nerovnovážném stavu. Za tímto účelem se zavádí pojem nasycení vodní páry  $\Phi$  definovaný jako poměr

$$\Phi = \frac{p_v}{p_s}, \tag{2.22}$$

kde  $p_v$  je aktuální tlak vodní páry a  $p_s$  je tlak syté vodní páry, který se řídí Clausius-Clapeironovou rovnicí. Nerovnovážný stav při rychlé expanzi vodní páry je charakterizován stavem přesycení, kdy  $\Phi > 1$ .

Při kondenzaci nastává nejprve proces nukleace, tj. vznik stabilních částic (též shluků nebo klastrů molekul) o kritickém poloměru<sup>1</sup>, které jsou schopny samostatné existence. S rostoucí velikostí těchto částic roste i jejich vnitřní energie, zároveň však klesá pravděpodobnost spontánního vzniku. Velikost je proto klíčovým parametrem, který ovlivňuje existenci částice. Je-li velikost shluku nižší než kritická hodnota (viz podsekcce 2.2.1), dochází k jeho rozpadu. V opačném případě je energie shluku dostatečná na to, aby mohl dále samostatně existovat, což umožňuje jeho následný růst daný difuzí molekul páry a srážkami s jinými shluky neboli koagulací<sup>2</sup>. Pro shluk molekul, který je větší než kritická hodnota, se také užívá označení kapička.

Nukleace může probíhat dvěma způsoby. Pro oba je však nutné pro vznik kapičky o kritické velikosti překonat počáteční energetickou bariéru nutnou k vytvoření kapky. Homogenní nukleace popisuje přímou kondenzaci molekul páry na částice o kritickém poloměru. Tento proces je řízen náhodnými srážkami

<sup>1</sup>Předpokládá se, že vznikající částice mají sférický tvar.

<sup>2</sup>Proces koagulace není při popisu modelu mokré páry uvažován.



molekul a jejich shluků. Jedná se tedy o proces řízený kinetickou povahou plynu, který lze popsat pomocí statistické fyziky.

Další možností pro překonání energetické bariéry je přítomnost katalyzátoru, který sníží energii potřebnou k jejímu překonání. Takovým katalyzátorem jsou tzv. kondenzační jádra tvořená částicemi tuhých aerosolů (např. prachové částice, krystalky soli apod.). Kondenzaci molekul vody na jejich povrch je umožněno efektivně dosáhnout kritické velikosti a následného vzniku kapičky o kritické velikosti. Tomuto procesu se říká heterogenní nukleace.

Při prudké expanzi vodní páry v transonickém proudění počet kapiček vzniklých homogenní nukleací několikanásobně přesahuje množství kapiček vzniklých heterogenní nukleací ([11]). Proto lze transonické proudění mokré páry popsat pouze pomocí procesu homogenní nukleace<sup>3</sup> a difuzního růstu. Výsledný model pak dobře odpovídá reálným experimentům.

Zanedbání procesu koagulace je odůvodněno užitím předpokladu, že kapičky jsou malé a pohybují se spolu s proudící vodní párou. Tento předpoklad tedy zabraňuje relativnímu pohybu mezi částicemi a s ohledem na malé velikosti kapek je opodstatnělý.

Další fází kondenzace je již zmíněný difuzní růst stabilních kapek. Při tomto procesu se uvažovaná kapička již nachází ve stavu termodynamické rovnováhy. Tento proces je podrobněji popsán v podsekcí 2.4.

## 2.2.1 Homogenní nukleace

Jak již bylo uvedeno výše, procesem homogenní nukleace se rozumí vznik částic o kritické velikosti procesem spontánního shlukování molekul vodní páry. Řídicím mechanismem tohoto procesu je hodnota přesycení vodní páry.

Při zavedení sytosti vodní páry  $\Phi = \frac{p_v}{p_s}$  se uvažuje tlak páry nad rovinným vodním povrchem. Obecně se však tlak vodní páry nad různě zakřivenými povrchy mění a tím se mění i hodnota  $\Phi$ . Tuto skutečnost je proto nutné uvažovat při popisu tlaku v okolí kapky.

### 2.2.1.1 Kritický poloměr

Formování kapičky tvořené  $N_{drop}$  částicemi o poloměru  $r$  se popisuje pomocí změny Gibbsovy energie  $\Delta G$  (viz [16, sekce 10.3]) jako rozdíl Gibbsovy energie systému kapka - vodní pára  $G_{d,v}$  a původnímu systému čisté vodní páry  $G_{pure\ vapor}$

$$\Delta G = G_{d,v} - G_{pure\ vapor}. \quad (2.23)$$

Nechť tedy je počet molekul vodní páry na počátku  $N_t$ . Po vytvoření kapky o  $N_{drop}$  molekulách je pak počet molekul vodní páry

$$N_v = N_t - N_{drop}. \quad (2.24)$$

Symbolem  $g_v$ , resp.  $g_l$  se označí Gibbsova energie jedné molekuly vodní páry, resp. kapaliny. Může se potom přepsat rovnice (2.23) do tvaru

$$\Delta G = \overbrace{N_v g_v + N_{drop} g_l + 4\pi r^2 \sigma}^{G_{d,v}} - \overbrace{N_t g_v}^{G_{pure\ vapor}}, \quad (2.25)$$

<sup>3</sup>V reálné atmosféře je tomu naopak. Přesycení vodní páry zde nedosahuje takových hodnot, aby bylo došlo k homogenní nukleace. Tvorba kapek je proto řízena heterogenní nukleací.

kde  $\sigma$  je povrchové napětí vody. Člen  $G_{d,v}$  popisující energii systému pára-kapka se skládá ze součtu Gibbsovy energie vodní páry, kapky a členu  $4\pi r^2\sigma$  popisující práci pro překonání povrchových sil nutnou k vytvoření sférické kapky o poloměru  $r$ . S využitím (2.24) se dále upraví vztah (2.25) jako

$$\Delta G = N_{drop}(g_l - g_v) + 4\pi r^2\sigma. \quad (2.26)$$

Za předpokladu, že kapka je sférická, platí vztah mezi počtem molekul v kapce  $N_{drop}$  a poloměrem kapky  $r$

$$N_{drop}v_l = \frac{4}{3}\pi r^3, \quad (2.27)$$

kde  $v_l$  je objem, který zaujímá molekula vody. Kombinací rovnic (2.26) a (2.27) dostáváme

$$\Delta G = \frac{4}{3} \frac{\pi r^3}{v_l} (g_l - g_v) + 4\pi r^2\sigma. \quad (2.28)$$

Pro vyjádření rozdílu  $g_l - g_v$  je potřeba vyjádřit Gibbsův potenciál jedné molekuly vody a páry. K tomu se využije termodynamická definice Gibbsova potenciálu.

Diferencováním Gibbsova potenciálu s využitím první věty termodynamiky lze psát ([16, podsekcce 10.1.2])

$$dG = -Sd\theta + Vdp + \sum_{i=1}^k \mu_i dn_i, \quad (2.29)$$

kde  $S$  je entropie systému,  $V$  je jeho objem,  $dn_i$  je počet molů jednotlivých komponent systému (celkový počet je  $k$ ). Veličina  $\mu_i$  je chemický potenciál, který lze definovat např. jako  $\mu_i = \frac{\partial U(\theta, V, n_i)}{\partial n_i}$ , kde  $U$  je vnitřní energie.

Aplikací rovnice (2.29) na uvažovaný model kapka-pára, ve kterém se předpokládá, že se nemění koncentrace jednotlivých složek systému, tj.  $dn_i = 0 \quad \forall i$ , a za předpokladu konstantní teploty,  $d\theta = 0$ , plyne z (2.29) pro jednotlivé molekuly s využitím extenzivity Gibbsova potenciálu

$$dg = vdp \Leftrightarrow g_l - g_v = (v_l - v_v)dp. \quad (2.30)$$

V modelu kapka-pára platí pozorování  $v_v \gg v_l$ , díky němuž se může  $v_l$  zanedbat a psát

$$g_l - g_v \cong -v_v dp. \quad (2.31)$$

Protože v modelu mokré páry jsou plynné složky považovány za ideální plyny, platí stavová rovnice  $v_v = k_B\theta/p$ , kde  $k_B$  je Boltzmannova konstanta. Použitím stavové rovnice na rovnici (2.30) a následnou integrací z tlaku páry nad rovinným povrchem  $p_v$  do aktuálního stavu  $p$  se dostane rovnice

$$g_l - g_v = -k_B\theta \int_{p_v}^p \frac{dp'}{p'}, \quad (2.32)$$

jejíž integrací vznikne

$$g_l - g_v = -k_B\theta \ln\left(\frac{p}{p_v}\right) = -k_B\theta \ln(\Phi), \quad (2.33)$$

což je hledané vyjádření rozdílu Gibbsových potenciálů.

V rovnici (2.28) se nyní může dosadit vztah (2.33) a tím se získá rovnice pro Gibbsův potenciál

$$\Delta G = -\frac{4}{3} \frac{\pi r^3}{v_l} k_B \theta \ln(\Phi) + 4\pi r^2 \sigma. \quad (2.34)$$

Na obr. 2.1 je znázorněn průběh této funkce v závislosti na poloměru při různých stavech nasycení. Z průběhu funkce je patrné, že pro nenasycenou vodní páru

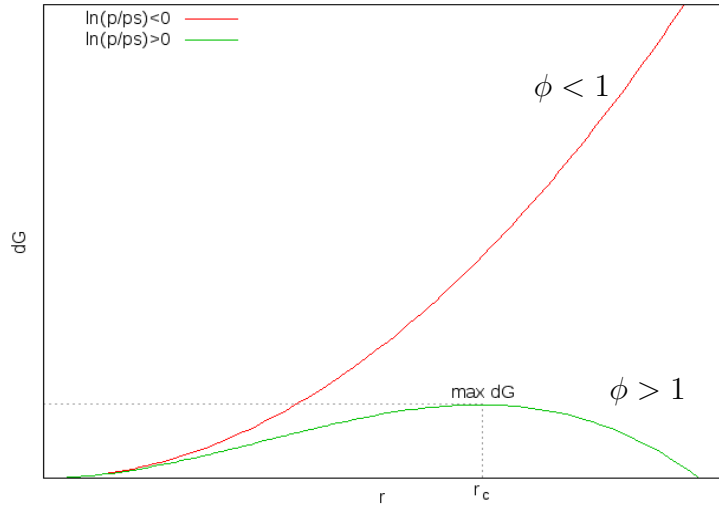


Figure 2.1: Průběh Gibbsova potenciálu jako funkce poloměru kapky

$\Phi < 1$  jsou oba členy na pravé straně rovnice (2.34) kladné a Gibbsova energie monotónně roste s rostoucím  $r$ . Naopak při stavu přesycení  $\Phi > 1$  je první člen na pravé straně (2.34) záporný. Gibbsův potenciál pak nabývá maxima v bodě označeném jako  $r_c$ . Tato hodnota se označuje jako kritický poloměr  $r_c$  a získá se z podmínky na extrém funkce  $\frac{\partial \Delta G}{\partial r} = 0$

$$r_c = \frac{2\sigma v_l}{k_B \theta \ln(\Phi)}. \quad (2.35)$$

Tato rovnice se někdy označuje jako Kelvinova, neboť vyjádření tlaku z této rovnice popisuje závislost mezi tlakem vodní páry nad zakřiveným povrchem. Z tohoto vztahu pak vyplývá, že tlak nad zakřiveným povrchem je vždy vyšší než nad rovinným (podrobněji v [16, kapitola 10], [19], [11] nebo [15]).

Díky předpokladu sférického tvaru kapky tvořené  $n$  molekulami (nebo též  $n$ -meru) a předpokladu zjednodušené geometrie lze psát

$$V_l = n v_0, \quad (2.36)$$

což znamená

$$\begin{aligned} \frac{4}{3} \pi r^3 &= n \frac{4}{3} \pi r_0^3, \\ r &= \sqrt[3]{n} r_0. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Díky tomuto předpokladu lze rovnici (2.34) zapsat jako funkci počtu molekul  $n$

$$\Delta G(n) = -n k_B \theta \ln(\Phi) + a_0 n^{2/3} \sigma, \quad (2.38)$$

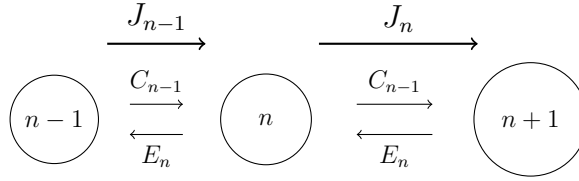


Figure 2.2: Schéma CNT.

kde  $a_0 = 4\pi r_0^2$ . Tento tvar je vhodný při odvozování rychlosti kondenzace (viz podsektce 2.3). Pro tuto rovnici lze nalézt maximum Gibbsova potenciálu položením  $\frac{\partial \Delta G}{\partial n} = 0$ . Získá se tím kritický počet částic  $n^*$

$$n^* = \left( \frac{2\sigma a_0}{3k_B\theta \ln(\phi)} \right)^3. \quad (2.39)$$

Tato rovnice je obdobou rovnice pro kritický poloměr (2.35).

Rovnici (2.35) lze díky definici univerzální plynové konstanty  $R = kN_A$ , kde  $N_A$  je Avogadrova konstanta, rovnici  $r_c = \sqrt[3]{n^*} r_0$ , vztahu  $a_0 = 4\pi r_0^2$  a z definice hustoty přepsat ve tvaru

$$r_c = \frac{2\sigma}{\rho_l R \theta \ln\left(\frac{p_v}{p_s}\right)}. \quad (2.40)$$

Tato rovnice platí pro obecný ideální plyn. V modelu mokré páry je jím tímto plynem vodní pára. Při dosazení zmíněných rovnic vyjde

$$r_c = \frac{2\sigma \frac{4}{3}\pi r_0^3 N_A}{R \theta \ln\left(\frac{p_v}{p_s}\right)} = \frac{2\sigma V_{mol}}{R \theta \ln\left(\frac{p_v}{p_s}\right)} = \frac{2\sigma M_l}{\rho_l R \theta \ln\left(\frac{p_v}{p_s}\right)}, \quad (2.41)$$

kde  $M_l$  je molární hmotnost vody. Aby tato rovnice odpovídala rovnici (1.23), je třeba uvažovat univerzální plynovou konstantu podělenou molární hmotností, tj.  $R_v = \frac{R}{M_l}$ , a zároveň uvažovat  $\theta = \theta_v$ . Tak se dostane rovnice (1.23), která vychází ze stejného článku [8].

## 2.3 Rychlost nukleace

Zde uvedené rovnice popisující nukleaci vychází z klasické nukleační teorie (zkráceně CNT). Jednou ze základních prací, ze které vychází i rovnice (1.20), je [20]. Zde uvedené odvození však vychází z práce [14, sekce 2.1].

Jak již bylo uvedeno v úvodu sekce 2.2, tvorba shluků molekul vodní páry je řízena kinetickými procesy. Jedním ze základních předpokladů CNT je, že kinetickým pohybem dochází k pouze k interakci mezi shluky molekul ( $n$ -mery) a samotnými volnými molekulami neboli monomery. Vzájemná interakce shluků molekul není v CNT zahrnuta. Interakce monomeru s  $n$ -merem vede ke vzniku  $(n+1)$ -meru a rychlost této interakce se značí jako rychlost kondenzace  $C_n$ . Naopak, výpar monomeru z povrchu  $n$ -meru vede ke vzniku  $(n-1)$ -meru a rychlost výparu se značí  $E_n$ . Schéma interakce je na obr. 2.2. Zavede-li se označení pro hustotu  $n$ -merů  $\rho_n$ , pak lze napsat časovou bilanci  $n$ -meru jako rozdíl

$$\frac{\partial \rho_n}{\partial t} = J_{n-1} - J_n, \quad (2.42)$$

kde rychlost nukleačního členu pro  $n$ -mer  $J_n$  je dána vztahem

$$J_n = C_n \rho_n - E_{n+1} \rho_{n+1}. \quad (2.43)$$

Rychlost kondenzace  $C_n$  je dána množstvím molekul dopadajících na plošný průřez  $n$ -meru  $\beta_n$  (impingement rate) přenásobená pravděpodobností  $\alpha_n$ , že se dopadající molekula zachytí na povrchu (accomodation coefficient). Pokud se využije předpokladu, že  $n$ -klastry jsou sférického tvaru, a tedy díky rovnicím (2.37) vyjadřuje člen  $a_0 n^{2/3}$  povrch  $n$ -klastru. lze psát

$$C_n = \alpha a_0 n^{2/3} \beta_n. \quad (2.44)$$

Určení počtu molekul dopadajících na jednotkový povrch za jednotku času využívá klasické kinetické teorie plynů a zde uvedné odvození pochází z [27].

Nechť  $A$  je uvažovaný povrch,  $v_x$  je rychlost molekul ve směru  $x$  a  $\Delta t$  je infinitezimální časový interval. Potom za  $\Delta t$  urazí molekuly vzdálenost  $v_x \Delta t$  ve směru  $x$  (uvažuje se rychlost v kladném směru osy  $x$ ). Nechť  $V = Av_x \Delta t$  je objem a hustota molekul (number density of the gas)  $\rho_v = N/V$ , kde  $N$  je počet molekul. Potom počet dopadajících molekul  $\beta_{A\Delta t v_x}$  s rychlostí  $v_x$  dopadající na plochu  $A$  za čas  $\Delta t$  lze vyjádřit pomocí Maxwell-Boltzmannova rozdělení  $f_{MB}(v_x)$  ([26]) jako

$$\beta_{A\Delta t v_x} = \frac{N}{V} A \Delta t v_x f_{MB}(v_x) dv_x. \quad (2.45)$$

Integrací této rovnice přes všechny rychlosti se dostane

$$\beta_{A\Delta t} = \frac{N}{V} A \Delta t \frac{\langle |v_x| \rangle}{2}, \quad (2.46)$$

kde se užilo značení pro střední rychlost  $\langle |v_x| \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |v_x| f_{MB}(v_x) dv_x$  a sudosti funkce  $v_x f_{MB}(v_x)$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} v_x f_{MB}(v_x) dv_x &= \int_0^{\infty} |v_x| f_{MB}(v_x) dv_x \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |v_x| f_{MB}(v_x) dv_x. \\ &= \frac{1}{2} \langle |v_x| \rangle \end{aligned} \quad (2.47)$$

Pro celkový počet částic dopadajících na jednotkovou plochu za jednotku času  $\beta_n$  pak s využitím (2.47) platí

$$\beta_n = \frac{\beta_{A\Delta t}}{A\Delta t} = \frac{1}{2} \frac{N}{V} \langle |v_x| \rangle. \quad (2.48)$$

Dále lze však ukázat (viz [27]), že pro střední rychlost platí rovnice

$$\langle |v_x| \rangle = \frac{1}{2} \langle v \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8k_B\theta}{\pi m_v}}, \quad (2.49)$$

kde byl použit vztah pro střední rychlost částic plynu při Maxwell-Boltzmannově rozdělení rychlostí  $\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B\theta}{\pi m_v}}$  ([26]), kde  $m_v$  je hmotnost molekul vodní páry. Tímto se z (2.48) dostane

$$\beta_n = \frac{1}{4} \frac{N}{V} \sqrt{\frac{8k_B\theta}{\pi m_v}} = \rho_v \sqrt{\frac{k_B\theta}{2\pi m_v}}. \quad (2.50)$$

kde bylo použito označení  $\rho_v = \frac{N}{V}$ , což odpovídá molekulové hustotě vodní páry. Rovnice (2.44) má tak tvar

$$C_n = \alpha a_0 n^{2/3} \rho_l \sqrt{\frac{k_B \theta}{2\pi m_v}}, \quad (2.51)$$

kde  $m_v$  je molekulová hmotnost páry,  $\rho_l$  je hustota vody a člen  $a_0 n^{2/3}$  odpovídá povrchu  $n$ -klastru. Pravděpodobnost zachycení monomeru lze bez větších nepřesností položit  $\alpha_n \cong 1$ , a proto nebude tento parametr dále uváděn.

Dalším klíčovým předpokladem je předpoklad rovnováhy, tj. že se s časem nemění hustota  $n$ -merů a platí tak  $\frac{\partial \rho_n}{\partial t} = 0$ . Tento předpoklad je diskutován mnoha autory (např. [10] nebo [19]). Pro zavedení koncepce rovnovážného stavu mezi  $n$ -mery je nutné, aby se ve spektru nevyskytovaly příliš velké částice, které by rostly nade všechny meze. Proto byl přijat koncept Maxwellova démona, díky kterému se velké částičky odeberou z uvažovaného systému (tento koncept je uveden v [14] a v [19]).

Stav rovnováhy lze vyjádřit z rovnice (2.43) dvěma způsoby: buď je rychlost nukleace  $J_n = 0$  pro všechna  $n$ ; nebo jsou jednotlivé členy nenulové a platí  $J_n = J$  pro každé  $n$ . Stejně jako v [14] i zde se volíme první zmíněný postup. Rovnice (2.43) pak přechází do tvaru

$$E_{n+1}^e = C_n^e \frac{\rho_n^e}{\rho_{n+1}^e}, \quad (2.52)$$

kde  $\rho_n^e$  je hustota  $n$ -merů v rovnovážném stavu. Protože rychlost vypařování v rovnovážném stavu  $E_n^e$  závisí pouze na velikosti  $n$ -meru a teplotě, platí rovnost  $E_n^e = E_n$ . Navíc je ve stavu rovnováhy tlak vodní páry rovný tlaku přesycené páry, což umožňuje položit  $C_n = C_n^e$ . V [19] je uvedeno, že za předpokladu rovnováhy bylo pozorováno, že i při nenasyceném stavu vodní páry je spektrum  $n$ -merů blízké Maxwell-Boltzmannovu rozdělení popisujícímu vzájemně rozlišitelné částice a lze proto psát

$$\rho_n^e = \rho_0^e \exp\left(-\frac{\Delta G^e(n)}{k_B \theta}\right), \quad (2.53)$$

kde  $G^e(n)$  je Gibbsův potenciál potřebný k vytvoření  $n$ -meru za předpokladu rovnovážného stavu. Hodnota Gibbsova potenciálu v maximu  $n^*$  se získá dosazením rovnice (2.39) do rovnice (2.38) a užitím (2.35), což vede na

$$\Delta G(n^*) = \frac{4}{3} \sigma \pi r_c^2. \quad (2.54)$$

Rovnici (2.53) můžeme přepsat

$$\rho_n^e = \rho_0^e \exp\left(-\frac{\frac{4}{3} \pi r_c^2 \sigma}{k_B \theta}\right), \quad (2.55)$$

Charakteristická doba vzniku rovnovážného stavu  $n$ -merů je menší než  $1 \mu s$  ([14]), což je mnohonásobně méně než samotný proces nukleace. Proto je možné

použít koncept rovnováhy mezi  $n$ -mery, díky níž se rychlost nukleace  $J$  stává při dané teplotě a tlaku nezávislou na  $n$ . Kombinací (2.43) a (2.52) se získá

$$\frac{J}{C_n^e \rho_n^e} = \frac{C_n \rho_n}{C_n^e \rho_n^e} - \frac{\rho_{n+1}}{\rho_{n+1}^e} = \frac{\rho_n}{\rho_n^e} - \frac{\rho_{n+1}}{\rho_{n+1}^e}. \quad (2.56)$$

Vznik shluku molekul má zanedbatelný vliv na hustotu molekul vodní páry  $\rho_1$ , která je tak neměnná a je rovna rovnovážnému stavu  $\rho_1^e = \rho_e$ . Sumací rovnice (2.56) od 1 do  $N'$  dostaneme

$$J \sum_{n=1}^{N'} \frac{1}{C_n^e \rho_n^e} = 1 - \frac{\rho_{G+1}}{\rho_{G+1}^e}. \quad (2.57)$$

Druhý člen na pravé straně rovnice lze zanedbat, neboť hustota v rovnovážném stavu roste díky (2.55) do nekonečna a pro velká  $N'$  je hustota takto velkých částic díky zavedení Maxwellova démona nulová.

Přechodem od sumace k integraci od 1 do  $\infty$  tak dostaneme

$$J = \left( \int_1^\infty \frac{1}{C_n^e \rho_n^e} dn \right)^{-1}. \quad (2.58)$$

K řešení tohoto integrálu je použita Laplaceova metoda (viz [21, sekce 2.4] nebo [15, podsekce 3.3.1]). Využívá se zde toho, že člen  $\left[ \exp\left(-\frac{\Delta G^e(n)}{k_B \theta}\right) \right]^{-1}$  v rovnici (2.53) nabývá ostrého maxima v bodě  $n^*$ . Díky tomu tvoří největší příspěvek pouze hodnoty v okolí tohoto bodu a je zde možné provést Taylorův rozvoj

$$\Delta G(n) \approx \Delta G^* + \frac{\partial \Delta G}{\partial n} \Big|_{n=n^*} (n - n^*) + \frac{\partial^2 \Delta G}{\partial n^2} \Big|_{n=n^*} \frac{(n - n^*)^2}{2}. \quad (2.59)$$

Druhý člen na pravé straně je nulový, což umožní přepsat rovnici do tvaru

$$\Delta G(n) \approx \Delta G^* - \zeta_{n^*}^2 \pi k_B \theta (n - n^*)^2, \quad (2.60)$$

kde  $\zeta_{n^*} = \left( -\frac{(\partial^2 \Delta G / \partial n^2)_{n=n^*}}{2\pi k_B \theta} \right)^{1/2}$  je tzv. Zeldovichův faktor. Rovnici (2.58) lze pak zapsat s využitím rovnice (2.53) a Taylorava rozvoje (2.60)

$$J = C_{n^*} \rho_1^e \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{k_B \theta}\right) \left[ \int_1^\infty \exp[-\zeta_{n^*}^2 \pi (n - n^*)^2] dn \right]^{-1}. \quad (2.61)$$

S využitím rovnice (2.38) a předpokladu  $n^* = \frac{4}{3}\pi(r^*)^3$  platí pro Zeldovichův faktor

$$\zeta_{n^*} = \sqrt{\frac{\sigma a^3}{k_B \theta}} \frac{2}{a_0 (n^*)^{2/3}}. \quad (2.62)$$

Díky ostrému maximu rovnice (2.61) v okolí bodu  $n^*$  je možné bez větších nepřesností rozšířit integrační meze od  $(-\infty, \infty)$ . Tím se dostane klasický Gaussův integrál a jeho řešením spolu s dosazením rovnic (2.51), (2.62) a (2.36), s předpokladem na sférický tvar, do rovnice pro rychlost kondenzace (2.61) vyjde

$$J = \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_v}} \rho_v^2 v_l \exp\left(-\frac{4\pi r_c^2 \sigma}{3k_B T_v}\right). \quad (2.63)$$

Využitím definice pro objem molekuly pomocí molární hmotnosti vody  $M_l$ , Avogadrovy konstanty  $N_A$  a molekulové hmotnosti vody  $m_l$

$$v_l = \frac{M_l}{N_A \rho_l} = \frac{m_l}{\rho_l}, \quad (2.64)$$

a úvahou, že molekulová hmotnost vody  $m_l$  je stejná jako molekulová hmotnost vodní páry  $m_v$ , dostaneme výsledný vztah

$$J = \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_v^3} \frac{\rho_v^2}{\rho_l}} \exp\left(-\frac{4\pi r_c^2 \sigma}{3k_B T_v}\right). \quad (2.65)$$

Tato rovnice se od rovnice (1.20) liší pouze o faktor  $\beta_n$ , který je korekcí na závislost povrchového napětí na teplotě. Tento faktor však není v této práci uvažován, respektive platí  $\beta_n = 1$  a dále se nepíše.

## 2.4 Rychlost růstu poloměru kapky

Pro kondenzaci vodní páry v turbíně je typické, že hmotnost vzniklých vodních kapiček je mnohem menší než hmotnost vody, která zkondukuje při rychlém přechodu ze stavu přesycení do stavu blízkého nasycení. Proto hraje proces růstu vodních kapek důležitou roli a měl by být v modelu zahrnut. Další vlastností typickou pro kondenzaci v turbínách je, že kritický poloměr kapky vzniklé nukleací (rovnice (2.40)) je řádově o dva až tři řády menší než její volná dráha ([10]). Z tohoto důvodu je pro odvození rychlosti růstu kapky použita kinetické teorie. Uvedné odvození vychází z knihy [22, sekce 16.1] a práce [23]. Cílem je odvodit bilanční rovnici pro sférickou kapku za předpokladu difuzního toku molekul vodní páry a toku energie vedením tepla.

Proces difuze lze vyjádřit pomocí prvního Fickova zákona, který vyjadřuje rychlost změny hmotnosti sférické vodní kapky vlivem difuze. Lze jej zapsat ve tvaru

$$\frac{dm_d}{dt} = 4\pi R^2 D_v \frac{d\rho_v}{dR}, \quad (2.66)$$

kde  $m_d$  je hmotnost kapky,  $R$  je radiální vzdálenost od středu kapky,  $D_v$  je molekulární difuzní koeficient vodní páry ve vzduchu a  $\frac{d\rho_v}{dR}$  je radiální gradient vodní páry. Tuto rovnici je možné integrovat z povrchu kapky o poloměru  $r$ , kde  $R = r$ ,  $\rho_v(r) = \rho_{v,r}$ , do nekonečna, tj.  $R = \infty$ ,  $\rho_v(\infty) = \rho_v$ , čímž se dostane

$$\frac{dm_d}{dt} = 4\pi r D_v (\rho_v - \rho_{v,r}). \quad (2.67)$$

Tato rovnice vyjadřuje základní charakteristiku procesu kondenzace na povrchu kapky. Pro  $\rho_v > \rho_{v,r}$  dochází ke kondenzaci vodní páry na kapce, v opačném případě se kapka vypařuje.

S procesem kondenzace nebo vypařování vodní páry souvisí uvolnění nebo absorpce latentního tepla. Dochází tak ke změně teploty kapky a vzniká teplotní gradient mezi teplotou povrchu kapky a okolním vzduchem. Velikost tohoto gradientu je však snižována vedením tepla z povrchu kapky, které probíhá díky interakci molekul vzduchu s povrchem kapky. Tento proces popisuje rovnice pro



rychlost ochlazování (cooling rate), která má tvar

$$\frac{dQ}{dt} = -4\pi R^2 \kappa \frac{dT}{dR}, \quad (2.68)$$

kde  $dQ$  je teplo přijaté nebo odebrané z kapky a  $\kappa$  je teplotní vodivost vodní páry. Analogicky jako v rovnici (2.66) se provede integrace od povrchu kapky, kde  $R = r$  a  $T = \theta_r$ , do nekonečna,  $T = \theta_v$ , což vede na tvar

$$\frac{dQ}{dt} = 4\pi r \kappa (\theta_r - \theta_v). \quad (2.69)$$

Rovnice (2.67) a (2.69) popisující tok hmoty a tok energie lze zahrnout do bilanční rovnice pro teplotu povrchu kapky  $\theta_r$ . Rovnice bilance má tvar

$$m_d c_w \frac{d\theta_r}{dt} = L_Q \frac{dm_d}{dt} - \frac{dQ}{dt}, \quad (2.70)$$

kde  $c_w$  je specifické teplo kapalné vody a  $L_Q$  je latentní teplo výparu. Dosazením rovnice (2.69) do rovnice (2.70) vyjde výsledný tvar pro bilanci energie v kapce

$$m_d c_w \frac{d\theta_r}{dt} = L_Q \frac{dm_d}{dt} - 4\pi r \kappa (\theta_r - \theta_v). \quad (2.71)$$

Povrchová teplota kapky se však při difuzním růstu mění jen velmi málo. To umožňuje zanedbat první člen na levé straně rovnice. Díky tomu se tato rovnice zjednoduší do tvaru

$$L_Q \frac{dm_d}{dt} = 4\pi r \kappa (\theta_r - \theta_v). \quad (2.72)$$

Hmotnost sférické kapky je dána  $m_d = \frac{4}{3}\rho_l \pi r^3$ . Vyjádřením koeficientu pro teplotní vodivost ([23, rovnice (2.52)]) ve tvaru

$$\kappa = \frac{\lambda_v}{\bar{r}(1 + 3.18Kn)}, \quad (2.73)$$

kde  $\bar{r}$  je průměrný poloměr (rovnice (1.17)) a  $Kn$  je Knudsenovo číslo udávající poměr střední volné dráhy částice a jejího průměru. Kombinací rovnice (2.73) a diferencováním rovnice pro hmotnost kapičky se získá z rovnice (2.72) vztah pro změnu poloměru kapky

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\lambda_v}{\bar{r}\rho_l(1 + k_c Kn)} \frac{\theta_r - \theta_v}{L_Q}. \quad (2.74)$$

Pro vyjádření teploty povrchu kapky je možné použít aproximační vztah ([23, rovnice (2.44)])

$$\theta_r = \theta_s - (\theta_s - \theta_v) \frac{r_c}{\bar{r}}, \quad (2.75)$$

kde  $\theta_s$  je teplota syté vodní páry,  $r_c$  je kritický poloměr (rovnice (2.40)) a  $\bar{r}$  je průměrný poloměr (rovnice (2.19)). Dosazením teploty na povrchu kapky dané vztahem (2.75) do (2.74) vznikne rovnice

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\lambda_v(\theta_s - \theta_v)}{L_Q \rho_l (1 + 3.18Kn)} \frac{\bar{r} - r_c}{\bar{r}^2}, \quad (2.76)$$

což je výsledný vztah, který odpovídá rovnici (1.21) uvedené ve výchozí práci [8].

Tvar Knudsenova čísla je zvolen stejně jako je uveden v [8] a daný vztahem (1.22)

## 2.5 Rovnice pro tlak

Odvození rovnice pro tlak je dáno koncepcí modelu proudění mokré páry, která je složena z vodní páry a kapek vody za předpokladu, že vodní pára je ideální plyn. Níže popsany postup vychází z článku [24, appendix A.1].

Pro vnitřní energii mokré páry  $e$  tvořené směsí páry o vnitřní energii  $e_v$  a vody o energii  $e_l$  proto platí

$$e = \omega e_l + (1 - \omega)e_v = e_v - \omega(e_v - e_l), \quad (2.77)$$

kde  $\omega$  je poměr kapalné vody a mokré páry (viz rovnice (1.13)). Latentní teplo  $L_Q$  je definováno jako rozdíl entalpií mezi skupenstvími. Z definice entalpie  $H$  vztahené na jednotkovou hmotnost, tj. pro objem  $V$  platí  $H = 1/\rho$ , plyne

$$H = e + pV = e + \frac{p}{\rho}. \quad (2.78)$$

Využitím této rovnice spolu s definicí latentního tepla kondenzace dostáváme

$$L_Q = H_v - H_l = \left( e_v + \frac{p_v}{\rho_v} \right) - \left( e_l + \frac{p_l}{\rho_l} \right) = e_v - e_l + p \left( \frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right). \quad (2.79)$$

Díky skutečnosti, že hustota vody je mnohem větší než hustota vodní páry ( $\rho_l \gg \rho_v$ ), lze v rovnici (2.79) zanedbat člen  $1/\rho_l$ , čímž vyjde

$$e_v - e_l = L_Q - \frac{p}{\rho_v}. \quad (2.80)$$

Za předpokladu, že vodní pára je ideální plyn, použije se stavová rovnice pro ideální plyn  $\frac{p}{\rho} = nR\theta$  spolu s rovnicí pro vnitřní energii vodní páry jako ideálního plynu  $e_v = nc_v\theta$ . Jejich dosazením s využitím Mayerova vztahu  $c_v = c_p - R$  a matematickými úpravami se získá vztah pro vnitřní energii vodní páry  $e_v$

$$e_v = c_v \frac{p}{\rho_v} = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho_v}. \quad (2.81)$$

Dosazením rovnice (2.81) a (2.80) do rovnice pro celkovou vnitřní energii mokré páry na jednotku hmotnosti  $e$  (viz (2.77)) se obdrží

$$e = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho_v} - \omega L_Q + \omega \frac{p}{\rho_v}, \quad (2.82)$$

což je výsledný vztah pro vnitřní energii mokré páry.

Rovnici celkové energie mokré páry  $E$  je potom možné zapsat ve tvaru

$$E = \rho e + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) = \frac{1}{\gamma - 1} p \frac{\rho}{\rho_v} - \rho\omega L_Q + \omega p \frac{\rho}{\rho_v} + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2). \quad (2.83)$$

Celková hustota směsi je vyjádřena pomocí poměru kapalné vody  $\omega$  jako

$$\rho = \overbrace{(1 - \omega)\rho}^{\rho_v} + \overbrace{\omega\rho}^{\rho_l}. \quad (2.84)$$

Dosazením  $\rho_v = (1 - \omega)\rho$  do (2.83) tak vyjde rovnice

$$E - \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) + \rho\omega L_Q = p \left( \frac{1}{\gamma - 1} \frac{1}{1 - \omega} + \omega \frac{1}{1 - \omega} \right) \quad (2.85)$$

a její matematickou úpravou se získá hledaný algebraický výraz pro tlak

$$p = \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ E - \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) + \rho\omega L_Q \right], \quad (2.86)$$

který odpovídá rovnici (1.24) v sekci 1.

# 3. Nespojitá Galerkinova metoda

Zobecnění metody konečných objemů (a v podstatě i metody konečných prvků) nespojitou Galerkinovou metodou představuje z hlediska numerické formulace a analýzy komplikovanější přístup. Zavádí se prostory funkcí po částech Sobolevovských (broken Sobolev spaces) a veličiny na hranicích jednotlivých elementů se aproximují numerickými toky, což je ale společné s metodou FVM. Pro odvození rovnic mokré páry nespojitou Galerkinovou metodou je nejprve nutné uvést některé vlastnosti rovnic mokré páry, které budou použity při samotné formulaci.

## 3.1 Formulace problému

### 3.1.1 Bezrozměrný tvar rovnic

Pro numerické řešení rovnic se často využívá jejich bezrozměrného tvaru. Ten zachovává fyzikální podobnost rovnic, ale snižuje jejich rozměr a tím klesá i vliv zaokrouhlovacích chyb. Pro převedení rovnic mokré páry do bezrozměrné formulace se zavádí následující charakteristické veličiny

$$x' = \frac{x}{L^*}, \quad u' = \frac{u}{U^*}, \quad \rho' = \frac{\rho}{\rho^*}, \quad \varrho'_l = \frac{\varrho_l}{\rho^*}, \quad \omega' = \omega, \quad (3.1)$$

kde  $L^*$ ,  $U^*$  a  $\rho^*$  jsou popořadě charakteristická délka, rychlost a hustota. Ostatní bezrozměrné veličiny jsou již závislé na charakteristikách veličinách

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t}{t^*}, & t^* &= \frac{L^*}{U^*}, \\ Q'_2 &= \frac{Q_2}{Q_2^*}, & Q_2^* &= \frac{1}{\rho^* L^*}, \\ Q'_1 &= \frac{Q_1}{Q_1^*}, & Q_1^* &= \frac{1}{\rho^* (L^*)^2}, \\ Q'_2 &= \frac{Q_0}{Q_0^*}, & Q_0^* &= \frac{1}{\rho^* (L^*)^3}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Očárkované veličiny se dosadí do rovnic mokré páry (1.18) a dostane se bezrozměrný tvar

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho'Q'_0)}{\partial t'} + \mathbf{div}'(\rho'Q'_0\mathbf{v}') &= J' \\ \frac{\partial(\rho'Q'_1)}{\partial t'} + \mathbf{div}'(\rho'Q'_1\mathbf{v}') &= r'_c J' \frac{1}{\gamma-1} + \dot{r}' \rho' Q'_0 \frac{\gamma}{RePr} \\ \frac{\partial(\rho'Q'_2)}{\partial t'} + \mathbf{div}'(\rho'Q'_2\mathbf{v}') &= r'^2_c J' \left( \frac{1}{\gamma-1} \right)^2 + 2\dot{r}' \rho' Q'_1 \frac{\gamma}{RePr} \\ \frac{\partial(\rho'\omega')}{\partial t'} + \mathbf{div}'(\rho'\omega'\mathbf{v}') &= \frac{4}{3} \pi \varrho'_l (r'_c)^3 J' \left( \frac{1}{\gamma-1} \right)^3 + 4\pi \varrho'_l \rho' \dot{r}' Q'_2 \frac{\gamma}{RePr} \end{aligned}, \quad (3.3)$$

kde symbol  $'$  značí bezrozměrné veličiny <sup>1</sup>. Symbol  $\gamma$  je Poissonova konstanta,  $Re$  a  $Pr$  označují bezrozměrné Reynoldsovo a Prandtlovo číslo definované jako

$$Re = \frac{\rho^* U^* L^*}{\nu}, \quad Pr = \frac{c_p \nu}{\lambda}. \quad (3.4)$$

Členy na pravé straně rovnice (3.3) jsou vyjádřeny pomocí charakteristických veličin vztahy

$$p' = \frac{p}{(U^*)^2 \rho^*}, \quad \theta' = \frac{\theta}{\frac{(U^*)^2}{c_v}}, \quad \sigma' = \frac{\sigma}{\rho^* (U^*)^2 L^*}, \quad (3.5)$$

$$L'_Q = \frac{L_Q}{(U^*)^2}, \quad m'_v = \frac{m_v}{\rho^* (L^*)^3}.$$

Dosazením charakteristických veličin do rovnice (2.65) pro rychlost nukleace se dostane

$$J' = \frac{J}{J^*}, \quad J^* = \frac{U^*}{(L^*)^4}, \quad (3.6)$$

$$J' = \sqrt{\frac{2\sigma'}{\pi(m'_v)^3} \frac{(\rho'_v)^2}{\rho'_l}} \exp\left(-\frac{4\pi(r'_c)^2 \sigma'}{3\theta'_v}\right)^{\frac{c_v (L^*)^3 \rho^*}{k_B}},$$

pro kritický poloměr (rovnice (1.23))

$$r'_c = \frac{r_c}{r_c^*}, \quad r_c^* = \frac{L^* c_v}{R_v}, \quad r'_c = \frac{2\sigma'}{\rho'_l \theta'_v \ln\left(\frac{p'_v}{p'_s}\right)}, \quad (3.7)$$

pro průměrný poloměr (rovnice (1.17))

$$\bar{r}' = \frac{\bar{r}}{L^*}, \quad (3.8)$$

pro Knudsenovo číslo (rovnice (1.22))

$$Kn' = \frac{Kn}{Kn^*}, \quad Kn^* = \frac{\sqrt{(\gamma-1)}}{Re}, \quad Kn' = \frac{\sqrt{2\pi\theta'_v}}{4\bar{r}' p'_v} \quad (3.9)$$

a rychlost růstu kapek (rovnice (1.21))

$$\dot{r}' = \frac{\dot{r}}{\dot{r}^*}, \quad \dot{r}^* = \frac{\lambda}{c_v \rho^* L^*}, \quad \dot{r}' = \frac{(\theta'_s - \theta'_v)}{L'_Q \rho'_l (1 + 3.18 Kn' Kn^*)} \frac{\bar{r}' - \frac{1}{\gamma-1} r'_c}{(\bar{r}')^2}. \quad (3.10)$$

Zbývá ještě uvést bezrozměrný tvar stavové rovnice (1.19)

$$\theta'_v = \frac{1}{\gamma-1} \frac{p'}{\rho'_v}. \quad (3.11)$$

Rovnice mokré páry jsou tímto převedeny do bezrozměrného tvaru a mohou být přidány k bezrozměrným Navierovým-Stokesovým rovnicím. Velikost charakteristických veličin je uvedena v kapitole 4.

<sup>1</sup>Derivace v operátoru divergence se uvažují bezrozměrné  $\frac{\partial}{\partial x'_i}$ .

### 3.1.2 Schématický zápis modelových rovnic

Nyní lze Navierovy-Stokesovy rovnice v bezrozměrného tvaru (viz [1, subsekcce 9.1.1]) a rovnice mokré páry (3.3) převést do tvaru <sup>2</sup>, který se využívá při diskretizaci.

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \sum_{s=1}^2 \frac{\partial \mathbf{f}_s(\mathbf{w})}{\partial x_s} = \sum_{s=1}^2 \frac{\partial \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})}{\partial x_s} + \mathbf{q}(\mathbf{w}), \quad (3.12)$$

kde

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v_1 \\ \rho v_2 \\ E \\ \rho \omega \\ \rho Q_2 \\ \rho Q_1 \\ \rho Q_0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) = \begin{bmatrix} \rho v_s \\ \rho v_1 v_s + \delta_{1s} p \\ \rho v_2 v_s + \delta_{2s} p \\ (E + p) v_s \\ \rho \omega v_s \\ \rho Q_2 v_s \\ \rho Q_1 v_s \\ \rho Q_0 v_s \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{s1}^v \\ \tau_{s2}^v \\ \sum_{k=1}^2 v_k \tau_{sk}^v + \frac{\gamma}{RePr} \frac{\partial \theta}{\partial x_s} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.13)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{w}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{4}{3} \pi r_c^3 \rho_l J \left( \frac{1}{\gamma-1} \right)^3 + 4 \rho \pi Q_2 \dot{r} \rho_l \left( \frac{\gamma}{RePr} \right)^3 \\ r_c^2 J \left( \frac{1}{\gamma-1} \right)^2 + 2 \rho Q_1 \dot{r} \left( \frac{\gamma}{RePr} \right) \\ r_c J \frac{1}{\gamma-1} + \rho Q_0 \dot{r} \frac{\gamma}{RePr} \\ J \end{bmatrix}.$$

Vektor  $\mathbf{w}$  se označuje jako stavový vektor, vektory  $\mathbf{f}_s$  a  $\mathbf{R}_s$  pak jako nevazké a vazké toky a  $\mathbf{q}(\mathbf{w})$  jako zdrojový vektor<sup>3</sup>. Bezrozměrný tenzor napětí  $\boldsymbol{\tau}^v$  je dán z rovnice (1.5) vztahem  $\boldsymbol{\tau}^v = \frac{1}{Re} \boldsymbol{\tau}$ .

Tato soustava parciálních diferenciálních rovnic se uvažuje na oblasti  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  a časovém intervalu  $0 < T < \infty$ , souhrně označenou<sup>4</sup>  $Q_T$ . Oblast  $\Omega$  je v jednom směru ohraničená (označen  $x_1$ ) a v druhém je tvořena periodickou okrajovou podmínkou ( $x_2$ ) viz obr. 3.1.

<sup>2</sup>Symbol ' dále se již nebude psát a všechny veličiny budou uvažovány v bezrozměrném tvaru.

<sup>3</sup>Parametrizující členy  $J$ ,  $r_c$  a  $\dot{r}$  vektoru  $\mathbf{q}$  jsou funkcemi  $\mathbf{w}$ , ale pro přehlednost nejsou uvedeny jejich argumenty.

<sup>4</sup>Jedná se o bezrozměrné veličiny.

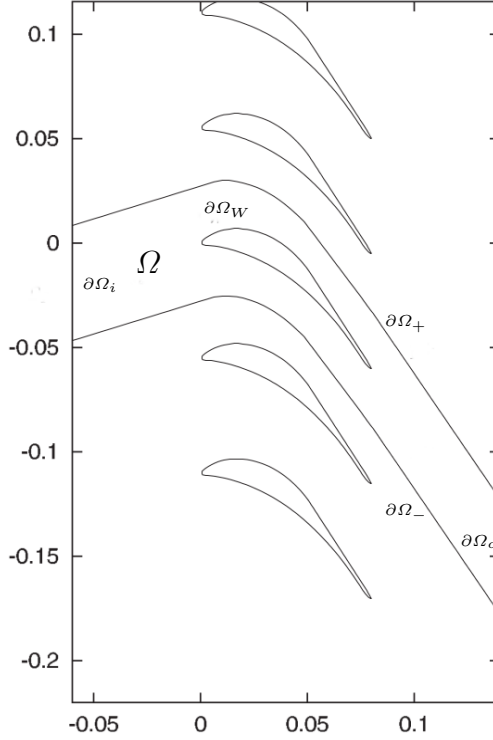


Figure 3.1: Výpočetní oblast lopatkové mříže SE1050. Převzato z [2]

## 3.2 Základní vlastnosti rovnic

Rovnice mokré páry (3.12) jsou rozšířením Navierových-Stokesových rovnic o transportní rovnice se zdrojovými členy. Protože transportní rovnice jsou speciálním případem Navierových-Stokesových rovnic, mají proto rovnice mokré páry podobné vlastnosti. Níže budou uvedeny ty vlastnosti, které jsou důležité pro prostorovou semidiskretizaci rovnic mokré páry. Širší pojetí včetně níže uvedeného lze nalézt v [1], [5] nebo např. [7].

Vektorové toky  $\mathbf{f}_s$ ,  $\mathbf{R}_s$  a zdrojový vektor  $\mathbf{q}$  jsou definovány na otevřené množině  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^8$ , která musí splňovat fyzikální požadavky na kladné hodnoty hustoty, energie, tlaku a podílu kapalné vody a kapalných momentů

$$\mathcal{D} = \{w \in \mathbb{R}^8; w_1 > 0, w_{4,5,6,7,8} > 0; (w_4 - \sum_{i=2}^3 \frac{w_i^2}{2w_1} + L_Q w_5) > 0\}. \quad (3.14)$$

Navíc  $\mathbf{f}_s, \mathbf{R}_s \in (C^1(\mathcal{D}))^8$  a  $\mathbf{q} \in (L^1(\mathcal{D}))^8$ .

Implementace rovnic mokré páry do modelu znamená nejprve zformulovat rovnici (3.12) v semidiskrétním tvaru, diskretizovat časovou derivaci a celý problém převést na řešení nelineární algebraické soustavy rovnic, kterou pak následně vyřešit. K tomu se využívají důležité vlastnosti Eulerových, respektive Navierových-Stokesových rovnic, které v pozměněné podobě platí i pro rovnice mokré páry.

### 3.2.1 Základní vlastnosti nevazkého toku

Základní vlastností potřebnou pro semidiskretizaci a další úpravy rovnice (3.12) je derivace nevazkého toku  $\mathbf{f}_s$ . S využitím věty o derivaci složené funkce platí

$$\sum_{s=1}^2 \frac{\partial \mathbf{f}_s(\mathbf{w})}{\partial x_s} = \sum_{s=1}^2 \mathbb{A}_s(\mathbf{w}) \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x_s}, \quad (3.15)$$

kde  $\mathbb{A}_s$  je Jacobiho matice  $8 \times 8$  daná vztahem

$$\mathbb{A}_s(\mathbf{w}) = \frac{D\mathbf{f}_s(\mathbf{w})}{D\mathbf{w}}. \quad (3.16)$$

Další významnou veličinou je fyzikální tok  $\mathbf{P}$ . Ten je důležitý, protože je při implementaci nahrazován numerickým tokem (sekce 3.3.2.1), který představuje důležitou konstrukci DGM nebo FVM metody. Fyzikální tok je definován jako

$$\mathbf{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n}) = \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) n_s, \quad (3.17)$$

přičemž  $\mathbf{n} \subset \mathbb{R}^2$  je normálový vektor. Kromě samotného fyzikálního toku je potřeba vyjádřit i jeho Jakobián  $\mathbb{P}$ , pro který platí s využitím (3.16)

$$\frac{D\mathbf{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n})}{D\mathbf{w}} = \sum_{s=1}^2 \mathbb{A}_s(\mathbf{w}) n_s =: \mathbb{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n}). \quad (3.18)$$

Matice  $\mathbb{P}$  pak má pro rovnice morké páry ve fyzikálních veličinách následující tvar

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 0 & n_1 & n_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} & \mathbb{P}_{23} & \mathbb{P}_{24} & \mathbb{P}_{25} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{P}_{31} & \mathbb{P}_{32} & \mathbb{P}_{33} & \mathbb{P}_{34} & \mathbb{P}_{35} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{P}_{41} & \mathbb{P}_{42} & \mathbb{P}_{43} & \mathbb{P}_{44} & \mathbb{P}_{45} & 0 & 0 & 0 \\ -\omega \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} & \omega n_1 & \omega n_2 & 0 & \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} & 0 & 0 & 0 \\ -Q_2 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} & Q_2 n_1 & Q_2 n_2 & 0 & 0 & \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} & 0 & 0 \\ -Q_1 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} & Q_1 n_1 & Q_1 n_2 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} & 0 \\ -Q_0 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} & Q_0 n_1 & Q_0 n_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$



kde jednotlivé členy jsou ve tvaru

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_{21} &= \frac{(\gamma - 1)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ \frac{\gamma}{1 + \omega(\gamma - 1)} \frac{1}{\rho} \omega p_0 + (1 - \omega) \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} \right] n_1 - v_1(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}), \\
\mathbb{P}_{22} &= \left[ 1 - \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \right] v_1 n_1 + \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}, \\
\mathbb{P}_{23} &= - \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} v_2 n_1 + v_1 n_2, \\
\mathbb{P}_{24} &= \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} n_1, \\
\mathbb{P}_{25} &= \frac{(\gamma - 1)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ - \frac{\gamma}{1 + \omega(\gamma - 1)} \frac{1}{\rho} p_0 + (1 - \omega) L \right], \\
\mathbb{P}_{31} &= \frac{(\gamma - 1)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ \frac{\gamma}{1 + \omega(\gamma - 1)} \frac{1}{\rho} \omega p_0 + (1 - \omega) \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} \right] n_2 - v_2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}), \\
\mathbb{P}_{32} &= v_2 n_1 - \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} v_1 n_2, \\
\mathbb{P}_{33} &= \left[ 1 - \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \right] v_2 n_2 + \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}, \\
\mathbb{P}_{34} &= \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} n_2, \\
\mathbb{P}_{35} &= \frac{(\gamma - 1)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ - \frac{\gamma}{1 + \omega(\gamma - 1)} \frac{1}{\rho} p_0 + (1 - \omega) L \right] n_2, \\
\mathbb{P}_{41} &= \frac{1}{1 + \omega(\gamma - 1)} \frac{1}{\rho} \\
&\quad \left[ \frac{\gamma(\gamma - 1)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \omega p_0 - \gamma E + (\gamma - 1)(1 - \omega) \rho (v_1^2 + v_2^2 - \omega L_Q) \right] (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}), \\
\mathbb{P}_{42} &= \frac{1}{\rho} \frac{1}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ \gamma E + (\gamma - 1)(1 - \omega) \rho \left( - \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} + \omega L_Q \right) \right] n_1 - \\
&\quad - \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} v_1(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}), \\
\mathbb{P}_{43} &= - \frac{(\gamma - 1)(1 - \omega)}{1 + \omega(\gamma - 1)} v_2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) + \\
&\quad + \frac{1}{\rho} \frac{1}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ \gamma E + (\gamma - 1)(1 - \omega) \rho \left( - \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} + \omega L_Q \right) \right] n_2, \\
\mathbb{P}_{44} &= \frac{\gamma}{1 + \omega(\gamma - 1)} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}), \\
\mathbb{P}_{45} &= \frac{(\gamma - 1)}{1 + \omega(\gamma - 1)} \left[ - \frac{\gamma}{1 + \omega(\gamma - 1)} \frac{1}{\rho} p_0 + (1 - \omega) L \right] (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}),
\end{aligned} \tag{3.20}$$

kde  $p_0 = E - \rho \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} + \rho \omega L_Q$ .

Další důležité vlastnosti nevazkých (Eulerových) členů využité při semidiskretizaci rovnic mokré páry jsou (viz [1, Lemma 8.6] nebo [5, podsekcce 2.1])

**a)** Eulerův tok  $\mathbf{f}_s$  a fyzikální nevazký tok  $\mathbf{P}$  jsou homogenní zobrazení prvního

řádu, tj.

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_s(\alpha \mathbf{w}) &= \alpha \mathbf{f}_s(\mathbf{w}), \quad \alpha > 0, \\ \mathbf{P}(\alpha \mathbf{w}, \mathbf{n}) &= \alpha \mathbf{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n}), \quad \alpha \neq 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Díky homogenitě pak navíc platí důležitý vztah

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) &= \mathbb{A}_s(\mathbf{w})\mathbf{w}, \\ \mathbf{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n}) &= \mathbb{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n})\mathbf{w}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

- b)** Matice  $\mathbb{P}$  má pouze reálná vlastní čísla  $\lambda_i(\mathbf{w}, \mathbf{n})$ ,  $i = 1, \dots, 8$  (viz podsekcce 3.3.4.1) a je diagonalizovatelná. Existuje tedy regulární matice  $\mathbb{T}(\mathbf{w}, \mathbf{n})$  taková, že jejíž sloupce jsou tvořeny vlastními vektory matice  $\mathbb{P}$  a platí rozklad

$$\mathbb{T}^{-1}\mathbb{P}\mathbb{T} = \Lambda, \quad (3.23)$$

kde  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_8)$  je diagonální matice s vlastními čísly na diagonále.

- c)** Rotační invariance systému rovnic - pro vhodnou transformaci systému souřadnic ve tvaru  $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbb{Q}(\mathbf{n})\mathbf{x} + \tilde{\mathbf{o}}$  s maticí rotace  $\mathbb{Q}$  a vektorem posunutím  $\tilde{\mathbf{o}} \in \mathbb{R}^8$  pak pro rovnice mokré páry ve 2D platí

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n}) &= \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w})n_s = \mathbb{Q}^{-1}(\mathbf{n})\mathbf{f}_1(\mathbb{Q}(\mathbf{n})\mathbf{w}) \\ \mathbb{P} &= \sum_{s=1}^2 \mathbb{A}_s(\mathbf{w})n_s = \mathbb{Q}^{-1}(\mathbf{n})\mathbb{A}_1(\mathbb{Q}(\mathbf{n})\mathbf{w})\mathbb{Q}(\mathbf{n}) \end{aligned} \quad (3.24)$$

kde matice rotace  $\mathbb{Q}(\mathbf{n})$  je ve tvaru

$$\mathbb{Q}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_1 & n_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -n_2 & n_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

$$\mathbb{Q}^{-1}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_1 & -n_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_2 & n_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Tyto vlastnosti budou dále využity při konstrukci numerického toku v podsekcce 3.3.4.1.

### 3.2.2 Vlastnosti vazkého toku

Obdobně jako pro nevazké toky  $\mathbf{f}_s$ , platí podobné rovnice i pro vazký tok  $\mathbf{R}_s$ . Rovnice mokré páry však neobsahují žádné členy odpovídající vazkému toku, a proto rozšíření vazkého toku o složky mokré páry znamená pouze rozšířit vektor  $\mathbf{R}_s$  pro Navierovy-Stokesovy rovnice nulami a zbylé členy nechat bezezměny. Důležitou vlastností vazkého toku je možnost formální změny zápisu

$$\mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) = \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}(\mathbf{w}) \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x_k}, \quad s = 1, 2, \quad (3.27)$$

kde  $\mathbb{K}_{s,k}(\mathbf{w})$  je matice  $8 \times 8$ . Struktura těchto matic odpovídá maticím  $4 \times 4$  pro Navierovy-Stokesovy rovnice uvedeným v [1, sekce 9.1], které jsou rozšířeny nulami na matice  $8 \times 8$ , neboť složky mokré páry nemají žádné prvky odpovídající vazkým členům. Protože kromě rozšíření matic nulami nedošlo k žádné změně, nejsou zde tyto matice explicitně uvedeny.

## 3.3 Diskretizace rovnic mokré páry

K odvození prostorové semidiskretizace pro nespojitou Galerkinovu metodu je potřeba nejprve zavést značení, které bude dále užíváno a je shodné se značením používaným v [1]. Následně je provedena semidiskretizace rovnic mokré páry spolu s uvedením základních vlastností rovnic (podsekce 3.3.2) a časová diskretizace (zmíněna v podsekcí 3.3.3).

### 3.3.1 Značení a prostory funkcí po částech Sobolevovských

Rovnice mokré páry jsou uvažovány na polygonální oblasti  $\Omega$  viz obr. 3.1. Na oblasti  $\Omega$  se uvažuje pokrytí vzájemně disjunktními trojúhelníky (obecně simplex) tvořící triangulaci  $\mathcal{T}_h$ . Symbolem  $\mathcal{F}_h$  se označí množina všech hran  $\Gamma$  prvků  $K$  (trojúhelníků) triangulace  $\mathcal{T}_h$  ( $K \in \mathcal{T}_h$ ). Množina  $\mathcal{F}_h$  se uvažuje jako sjednocení  $\mathcal{F}_h = \mathcal{F}_h^I \cup \mathcal{F}_h^W \cup \mathcal{F}_h^i \cup \mathcal{F}_h^o$ , kde  $\mathcal{F}_h^I$  je množina všech vnitřních hran  $\Gamma \in \Omega$ ,  $\mathcal{F}_h^W$  množina hran na pevné stěně  $\Gamma \in \partial\Omega_W$  a  $\mathcal{F}_h^i$  resp.  $\mathcal{F}_h^o$  množina hran na vstupu  $\Gamma \in \partial\Omega_i$ , resp. výstupu  $\Gamma \in \partial\Omega_o$ . Vstup a výstup se souhrnně označí jako  $\mathcal{F}_h^{io} = \mathcal{F}_h^i \cup \mathcal{F}_h^o$  stejně jako obecné označení  $\mathcal{F}_h^B = \mathcal{F}_h^W \cup \mathcal{F}_h^{io}$  pro hrany obsažené na hranici  $\partial\Omega$ . Ke každé hraně  $\Gamma$  pak náleží normálový vektor  $\mathbf{n}_\Gamma$ . Jeho orientace odpovídá pro  $\Gamma \in \mathcal{F}_h^B$  orientaci vnější normály  $\partial\Omega$  a pro  $\Gamma \in \mathcal{F}_h^I$  je libovolná, ale pevná. Hranice  $\Omega_+$  a  $\Omega_-$  představují periodické okrajové podmínky, kde pro  $\Gamma^+ \in \Omega_+$  a  $\Gamma^- \in \Omega_-$  platí  $\Gamma^+ = \{(x_1, x_2 + q); (x_1, x_2) \in \Gamma^-\}$ , kde  $q$  je velikost periody ve směru  $x_2$ .

Nad triangulací  $\mathcal{T}_h$  se zavádí prostor vektorových funkcí po částech Sobolevovských (broken Sobolev space)

$$\mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h) = (H^2(\Omega, \mathcal{T}_h))^8, \quad (3.28)$$

$$H^2(\Omega, \mathcal{T}_h) = \{v \in L^2(\Omega), v|_K \in H^2(K) \forall K \in \mathcal{T}_h\},$$

kde  $H^2(K) \equiv W^{2,2}(K)$  je Sobolevův prostor pro skalární funkce na jednotlivých elementech triangulace  $K$ . Numerické řešení se však uvažuje v prostoru s konečnou

dimenzí. Zavadí se proto nad triangulační sítí  $\mathcal{T}_h$  konečnědimenzionální prostor vektorových funkcí po částech polynomiálních  $\mathbf{S}_{hp} \subset \mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h)$ , kde

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{hp}(\Omega, \mathcal{T}_h) &= (S_{hp}(\Omega, \mathcal{T}_h))^8, \\ S_{hp}(\Omega, \mathcal{T}_h) &= \{v \in L^2(\Omega), v|_K \in P_p(K) \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

kde  $S_{hp}$  značí prostor všech polynomů stupně  $p$  na elementu  $K$ .

Zároveň se předpokládá, že pro každou hranu  $\Gamma \in \mathcal{F}_h^I$  existují elementy  $K_\Gamma^{(L)}, K_\Gamma^{(R)} \in \mathcal{T}_h$ , že  $\Gamma \subset K_\Gamma^{(L)} \cap K_\Gamma^{(R)}$  a že element  $K_\Gamma^{(R)}$  leží ve směru normály  $\mathbf{n}_\Gamma$  a  $K_\Gamma^{(L)}$  ve směru opačném.

Při odvození nespojitě Galerkinovy metody je nutné znát hodnoty veličin na hranicích elementů, které však mohou být při přechodu z elementu na element nespojitě. Zavadí se následující značení. Pro vnitřní hranu  $\Gamma \in \mathcal{F}_h^I$  se zavádí značení  $\mathbf{w}_\Gamma^{(L)}$  jako stopa  $\mathbf{w}|_{K_\Gamma^{(L)}}$  na hraně  $\Gamma$ , stejně tak  $\mathbf{w}_\Gamma^{(R)}$  jako stopa  $\mathbf{w}|_{K_\Gamma^{(R)}}$  na hraně  $\Gamma$ . Lze tedy zavést označení pro aritmetický průměr

$$\langle \mathbf{w} \rangle_\Gamma = \frac{1}{2}(\mathbf{w}_\Gamma^{(L)} + \mathbf{w}_\Gamma^{(R)}) \quad (3.30)$$

a rozdíl funkcí na hraně

$$[\mathbf{w}]_\Gamma = \mathbf{w}_\Gamma^{(L)} - \mathbf{w}_\Gamma^{(R)}. \quad (3.31)$$

Pro  $\Gamma \in \mathcal{F}_h^B$  pak platí  $[\mathbf{w}]_\Gamma = \langle \mathbf{w} \rangle_\Gamma = w|_\Gamma$ . Spodní index  $[\cdot]_\Gamma, \langle \cdot \rangle_\Gamma$  a  $\mathbf{n}_\Gamma$  se nepíše v případě, že uvedené výrazy jsou argumentem integrálu přes hranu  $\int_\Gamma \dots dS$ . Podobně pro hranu na hranici oblasti  $\Gamma \in \mathcal{F}_h^B$  značí  $\mathbf{w}_\Gamma^L$  stopu  $\mathbf{w}|_{K_\Gamma^{(L)}}$  na  $\Gamma$ , kde  $K_\Gamma^{(L)} \in \mathcal{T}_h$  splňuje  $\Gamma \subset K_\Gamma^{(L)} \cap \partial\Omega$ .

### 3.3.2 Semidiskretizace nespojitou Galerkinovou metodou

Pro odvození prostorové diskretizace se postupuje způsobem uvedeným v [1]. Cílem je odvodit slabou formulaci rovnic mokré páry.

Nechť tedy existuje dostatečně regulární řešení z Bochnerova prostoru  $\mathbf{w} \in \mathbf{C}^1([0, T]; \mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h))$  splňující rovnice mokrá páry (3.12). Pro slabou formulaci se pak tato rovnice přenásobí testovací funkcí z prostoru funkcí po částech sobolevovských  $\varphi \in \mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h)$ , integruje se přes element  $K \in \mathcal{T}_h$ , a pak se přes všechny elementy  $K$  vysčítá. Tím se dostane

$$\begin{aligned} & \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} \cdot \varphi dx + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \frac{\partial \mathbf{f}_s(\mathbf{w})}{\partial x_s} \cdot \varphi dx = \\ & = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \frac{\partial \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})}{\partial x_s} \cdot \varphi dx + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \mathbf{q}(\mathbf{w}) \cdot \varphi dx. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Tato rovnice se formálně přepíše do tvaru

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} \cdot \varphi dx + Inv + Vis + Src = 0, \quad (3.33)$$

kde prostorové derivace vazkých a nevazkých toků se použitím Greenovy věty převedou na integraci přes hranici

$$\begin{aligned}
Inv &\equiv \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \frac{\partial \mathbf{f}_s(\mathbf{w})}{\partial x_s} \cdot \boldsymbol{\varphi} dx \stackrel{Green}{=} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) n_s \cdot \boldsymbol{\varphi} dS - \\
&\quad - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x_s} dx \\
Vis &\equiv \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \frac{\partial \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})}{\partial x_s} \cdot \boldsymbol{\varphi} dx \stackrel{Green}{=} \\
&\quad = - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} \sum_{s=1}^2 \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) n_s \cdot \boldsymbol{\varphi} dS + \\
&\quad + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x_s} dx \\
Src &\equiv - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \mathbf{q}(\mathbf{w}) \cdot \boldsymbol{\varphi} dx
\end{aligned} \tag{3.34}$$

kde  $n_s, s = 1, 2$  jsou složky normálového vektoru k  $\partial K$ . Protože na vazké členy lze nahlížet jako na perturbaci Eulerových rovnic ([2]), je prostorová semidiskretizace nevazkých a vazkých členů provedena zvlášť.

### 3.3.2.1 Úprava nevazkých členů $Inv$

Pro aplikaci okrajových podmínek se v rovnici (3.34) rozdělí integrace přes všechny hrany v členu  $Inv$  na integraci přes jednotlivé typy hran. Člen  $Inv$  má tak tvar

$$\begin{aligned}
&- \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x_s} dx + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) n_{\Gamma,s} \cdot [\boldsymbol{\varphi}] dS + \\
&\quad + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^B} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) n_{\Gamma,s} \cdot \boldsymbol{\varphi} dS.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Zde se využilo toho, že integrace přes vnitřní hrany je integrace počítána dvakrát, pokaždé ale s opačnou normálou  $n_{\Gamma,s}^{(L)} = -n_{\Gamma,s}^{(R)}$  a že při formálním předpokladu dostatečně regulárního řešení  $\mathbf{w}$  platí  $\mathbf{f}_s(\mathbf{w}^{(L)}) = \mathbf{f}_s(\mathbf{w}^{(R)})$ . Lze tedy psát

$$\begin{aligned}
&\sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 (\mathbf{f}_s(\mathbf{w}^{(L)}) \cdot \boldsymbol{\varphi}^{(L)} - \mathbf{f}_s(\mathbf{w}^{(R)}) \cdot \boldsymbol{\varphi}^{(R)}) n_{\Gamma,s} dS = \\
&\quad = \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) n_{\Gamma,s} \cdot [\boldsymbol{\varphi}] dS.
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Nyní se zavede již zmíněný numerický tok daný jako vektorová funkce  $\mathbf{H}$  předpisem

$$\int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) n_{\Gamma,s} \cdot \boldsymbol{\varphi} dS \approx \int_{\Gamma} \mathbf{H}(\mathbf{w}^{(R)}, \mathbf{w}^{(L)}, \mathbf{n}_{\Gamma}) \cdot \boldsymbol{\varphi} dS, \tag{3.37}$$

který se používá k určení fyzikálního toku na hraně  $\Gamma$ . Numerický tok vyjadřující hodnoty na hranách je z hlediska nespojitě Galerkinovy metody i metody

FEM velmi důležitý, protože jeho volba může ovlivnit chování metody. Kromě vhodných numerických vlastností musí splňovat i fyzikální předpoklady pro regulární řešení - spojitost, konzistentnost a konzervativitu (viz např. [1] nebo [7]).

### 3.3.2.1.1 Nevazké okrajové podmínky

Pro hrany  $\Gamma \in \partial\Omega$  je nutné určit hodnoty vně oblasti  $\mathbf{w}_\Gamma^{(R)}$ , které jsou obsaženy v numerickém toku. Ty se liší podle typu hrany a vhodnosti použití.

#### Nepropustná stěna

Pro  $\Gamma \in \mathcal{F}_W^I$  je jednou z možností jak aplikovat podmínku  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$  je zavedení nevazkého operátoru zrcadlení (Inviscid Mirror Operator) jako  $\mathbf{w}_\Gamma^{(R)} = \mathcal{M}(\mathbf{w}_\Gamma^{(L)})$  ([1, sekce 8.3.1]). Tento operátor pro nevazké členy se zavádí s pomocí vektoru  $\mathbf{v}^\perp = \mathbf{v} - 2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ , který má stejnou tangenciální složku, ale opačnou normálovou složku oproti vektoru  $\mathbf{v}$ . Operátor zrcadlení je pak zavedený tvarem

$$\mathcal{M}(\mathbf{w}) = (\rho, \rho \mathbf{v}^\perp, E, \rho \omega, \rho Q_2, \rho Q_1, \rho Q_0). \quad (3.38)$$

Pro numerický tok na pevné stěně tak platí

$$\mathbf{H}(\mathbf{w}^{(R)}, \mathbf{w}^{(L)}, \mathbf{n}_\Gamma) = \mathbf{H}(\mathbf{w}, \mathcal{M}(\mathbf{w}), \mathbf{n}) := \mathbf{f}_W(\mathbf{w}^{(L)}, \mathbf{n}). \quad (3.39)$$

#### Vstup a výstup

Pro  $\Gamma \in \mathcal{F}_h^{io}$  je obecně těžší určit hodnotu  $\mathbf{w}_\Gamma^{(R)}$ . Zde je zvolen přístup založený na řešení linearizovaného Riemannova problému, která vychází ze znalosti vhodně zvoleného vektoru  $\mathbf{w}_{BC}$  předepsaného na časoprostorovém intervalu  $(\partial\Omega_i \cup \Omega_o) \times (0, T)$ . Podrobnější popis metody je uveden v [1] nebo [7]. Schématicky lze zapsat zavedením operátoru řešení Riemannova problému  $\mathcal{B}^{RP}$

$$\mathbf{w}_\Gamma^{(R)} := \mathcal{B}^{RP}(\mathbf{w}_\Gamma^{(L)}, \mathbf{w}_{BC}). \quad (3.40)$$

S využitím výše uvedené formulace okrajových podmínek (3.39) a (3.40) lze členy z (3.35) přeformulovat a zavedením formy  $\mathbf{b}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi})$  zjednodušeně vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) := & - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x_s} dx \\ & + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_\Gamma \sum_{s=1}^2 \mathbf{H}(\mathbf{w}^{(R)}, \mathbf{w}^{(L)}, \mathbf{n}_\Gamma) \cdot [\boldsymbol{\varphi}] dS \\ & + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_\Gamma \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s^W(\mathbf{w}_\Gamma^{(L)}) \mathbf{n}_{\Gamma,s} \cdot \boldsymbol{\varphi} dS \\ & + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^{io}} \int_\Gamma \sum_{s=1}^2 \mathbf{H}(\mathbf{w}^{(L)}, \mathcal{B}^{RP}(\mathbf{w}^{(L)}, \mathbf{w}_{BC}), \mathbf{n}_\Gamma) \cdot [\boldsymbol{\varphi}] dS \end{aligned} \quad (3.41)$$

### 3.3.2.2 Úprava vazkých členů $Vis$

Odvození probíhá obdobně jako pro nevazké členy. Integrál přes hranici elementu  $K$  se v rovnici (3.34) se rozepíše podle typu hran

$$\begin{aligned} \sum_{K \in \mathcal{F}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) n_s \cdot \boldsymbol{\varphi} dS &= \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \langle \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) \rangle n_s \cdot [\boldsymbol{\varphi}] dS + \\ &+ \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^B} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) n_s \cdot \boldsymbol{\varphi} dS, \end{aligned} \quad (3.42)$$

kde střední hodnota pro  $\Gamma \in \mathcal{F}_h^I$  byla zavedena formálně díky tomu, že  $\mathbf{w} \in \mathbf{H}^2(\Omega)$ . Tím je zaručena spojitost  $\mathbf{R}_s$  na  $\Omega$  a platí

$$\mathbf{R}_s(\mathbf{w}^{(L)}, \nabla \mathbf{w}^{(L)}) = \mathbf{R}_s(\mathbf{w}^{(R)}, \nabla \mathbf{w}^{(R)}) = \langle \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) \rangle. \quad (3.43)$$

Člen  $[\boldsymbol{\varphi}]$  byl odvozen stejně jako pro vazké členy výše. Při analýze hraničních integrálů se podobně jako pro vazké členy využívá okrajových podmínek.

#### 3.3.2.2.1 Vazké okrajové podmínky

Pro vazké členy odpovídající členům Navierových-Stokesových rovnic jsou na hranicích dány následující hodnoty

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_{ext}, \quad v_1 = v_{1,ext}, \quad v_2 = v_{2,ext}, \quad \sum_{s=1}^2 \sum_{k=1}^2 v_k \tau_{sk}^v + \frac{\gamma}{RePr} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{na } \partial \Omega_i \\ \sum_{k=1}^2 \tau_{sk}^v n_k &= 0, \quad s = 1, 2, \quad \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{na } \partial \Omega_o \\ v_1 = v_2 &= 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{na } \partial \Omega_W, \end{aligned} \quad (3.44)$$

kde spodní index  $_{ext}$  značí příslušně zvolenou funkci. Členy odpovídající mokré páře, které jsou při této formulaci pro vazký tok identicky nulové, nemají proto žádný vliv na tento způsob zápisu okrajových podmínek.

Takto zvolené podmínky pak zaručují, že (viz (3.13))

$$\mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})|_{\partial \Omega_o} = 0 \quad (3.45)$$

a že na pevné stěně lze zavést matice  $\mathbb{K}_{s,k}^W(\mathbf{w})$  vycházející z rovnice (3.27) a splňující

$$\mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})|_{\partial \Omega_W} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sum_{s=1}^2 \tau_{1s}^v n_s \\ \sum_{s=1}^2 \tau_{2s}^v n_s \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} := \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}^W(\boldsymbol{\partial} \mathbf{w}) \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x_s} |_{\partial \Omega_W}. \quad (3.46)$$

Tyto matice jsou vyjádřeny v [1, sekce 9.1.2].

Díky rovnici (3.45) je zaručeno, že na výstupu je člen z rovnice (3.42) nulový, neboť platí

$$\sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^o} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{R}_s(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) n_s \cdot \boldsymbol{\varphi} dS = 0. \quad (3.47)$$

Rozepsáním výrazu (3.42) podle příslušnosti hran k okrajovým podmínkám s vhodným zavedením středních hodnot a skokových funkcí (obdobně jako u nevazkých členů v podsekcí 3.3.2.1), aplikací vztahu (3.27) na objemový integrál a zavedením formy  $\mathbf{a}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi})$  se dostane<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \left( \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}(\mathbf{w}) \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x_k} \right) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x_s} dx \\ &\quad - \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \left\langle \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}(\mathbf{w}) \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x_k} \right\rangle n_s \cdot [\boldsymbol{\varphi}] dS \\ &\quad - \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^i} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}(\mathbf{w}) \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x_k} n_s \cdot \boldsymbol{\varphi} dS \\ &\quad - \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}^W(\mathbf{w}) \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x_k} n_s \cdot \boldsymbol{\varphi} dS. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Dále se zavede penalizační člen pro vnitřní a okrajové hrany (Interior and Boundary Penalty)  $J_h^\sigma$ , který je při formálním předpokladu dostatečně hladkého řešení roven nule a který má tvar

$$\begin{aligned} J_h^\sigma(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) &:= \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sigma[\mathbf{w}_h] \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS \\ &\quad + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^i} \int_{\Gamma} \sigma(\mathbf{w}_h - \mathbf{w}_{h,B}) \cdot \boldsymbol{\varphi}_h dS + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_{\Gamma} \sigma(\mathbf{w}_h - \mathbf{w}_{h,B}) \cdot \mathcal{V}(\boldsymbol{\varphi}_h) dS, \end{aligned} \quad (3.49)$$

kde  $\mathbf{w}_{h,B}$  je hodnota stavového vektoru na hranici vycházející z okrajových podmínek (3.44) přepsaná do tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{h,B}|_{\Gamma} &:= \mathcal{B}^{RP}(\mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{w}_{BC})^T \quad \Gamma \in \mathcal{F}_h^i, \\ \mathbf{w}_{h,B}|_{\Gamma} &:= (\rho_{\Gamma}^{(L)}, 0, 0, \rho_{\Gamma}^{(L)} \theta_{\Gamma}^{(L)}, 0, 0, 0, 0)^T \quad \Gamma \in \mathcal{F}_h^W. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Operátor  $\mathcal{V}$  slouží k penalizaci prvků  $\mathbf{w}$  s Dirichletovou okrajovou podmínkou na pevné stěně a  $\sigma$  je vhodně zvolený váhový faktor (podrobně [1, podsekcce 9.2]).

Celkově lze tedy přepsat vazký člen  $Vis$  z rovnice (3.34) pro dostatečně hladké řešení  $\mathbf{w}$  jako

$$Vis = \mathbf{a}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{J}_h^\sigma(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in \mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h). \quad (3.51)$$

<sup>5</sup>Neuvažuje se vnitřní Galerkinova penalizace (typ stabilizace IIPG,  $\Theta = 0$ ) viz [1].



### 3.3.2.3 Úprava zdrojového členu $Src$

Pro shodu s vazkými a nevazkými členy se člen  $Src$  označí formou  $\mathbf{s}_h$  jako

$$\mathbf{s}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) := - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \mathbf{q}(\mathbf{w}) \cdot \boldsymbol{\varphi} dx, \quad (3.52)$$

kde forma  $\mathbf{s}_h$  je ve svém prvním argumentu nelineární.

### 3.3.3 Časová a prostorová diskretizace problému

Pro formulaci diskrétního tvaru rovnic mokré páry (3.12) se zavede v  $(L^2(\Omega))^8$  skalární součin  $(\cdot, \cdot)$  vztahem

$$(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\varphi} dx. \quad (3.53)$$

S jeho využitím se rovnice (3.32) přepíše s pomocí (3.41) a (3.51) zapíše jako soustava obyčejných diferenciálních rovnic

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{w}(t), \boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{b}_h(\mathbf{w}(t), \boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{a}_h(\mathbf{w}(t), \boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{J}_h^\sigma(\mathbf{w}(t), \boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{s}_h(\mathbf{w}(t), \boldsymbol{\varphi}) = 0, \quad (3.54)$$

která platí pro dostatečně regulární řešení  $\mathbf{w}$  a  $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h)$ . Do této rovnice se přidají dodatečné formy  $\boldsymbol{\beta}_h, \boldsymbol{\gamma}_h : \mathbf{S}_{hp} \times \mathbf{S}_{hp} \times \mathbf{S}_{hp} \rightarrow \mathbb{R}$ , které jsou lineární ve svém druhém a třetím argumentu. Fyzikálně odpovídají umělé vazkosti a slouží ke stabilizaci řešení v oblasti rázové vlny. Podrobněji jsou popsány v [1, podsekce 8.5.2]).

Nyní lze konečně zavést finální formu  $\mathbf{c}_h$  zahrnující všechny členy nespojitě Galerkinovy metody jako

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) := & \mathbf{a}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{b}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{J}_h^\sigma(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{s}_h(\mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) \\ & + \boldsymbol{\beta}_h(\mathbf{w}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}) + \boldsymbol{\gamma}_h(\mathbf{w}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}). \end{aligned} \quad (3.55)$$

Pro odvození vztahu (3.55) se předpokládala existence dostatečně regulárního řešení  $\mathbf{w}(t) \in \mathbf{C}^1([0, T]; \mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h))$  a  $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h)$ . Pro nalezení numerického řešení se aplikuje Galerkinova metoda aproximace řešení, kdy se zavádí konečně dimenzionálního prostor  $\mathbf{S}_{hp} \subset \mathbf{H}^2(\Omega, \mathcal{T}_h)$  polynomiálních funkcí (rovnice (3.29)), ve kterém se předpokládá, že  $\forall t \in (0, T)$  je  $\mathbf{w}(t) \in \mathbf{S}_{hp}$ . Může se proto zadefinovat vektor  $\mathbf{w}_h : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}^8$  a problém (3.54) se s využitím (3.55) převede na tzv. semi-diskrétní problém

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_h & \in C^1([0, T]; \mathbf{S}_{hp}), \\ \frac{d}{dt}(\mathbf{w}_h(t), \boldsymbol{\varphi}_h) + \mathbf{c}_h(\mathbf{w}_h(t), \boldsymbol{\varphi}_h) & = 0 \quad \forall \boldsymbol{\varphi}_h \in \mathbf{S}_{hp} \forall t \in (0, T), \\ \mathbf{w}_h(0) & = P_h \mathbf{w}^0, \end{aligned} \quad (3.56)$$

kde  $P_h \mathbf{w}^0$  je projekce počáteční podmínky  $\mathbf{w}^0(x)$ ,  $x \in \Omega$  na prostor  $\mathbf{S}_{hp}$ .

Problém (3.56) představuje soustavu obyčejných diferenciálních rovnic. V této práci je pro její řešení zvolena zpětná Eulerova metoda jako nejjednodušší případ obecnějších zpětných  $n$ -krokových metod (BDF metody). Ty lze při použití standardního dělení časového intervalu  $[0, T]$  na časové hladiny  $0 = t_0 < t_1 < t_2 <$

$\dots < t_r = T$ , kde  $\tau_k = t_k - t_{k-1}$  je časový krok a  $\mathbf{w}_h^k = \mathbf{w}_h(t_k)$ , zapsat pro problém (3.56)

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_h^k &\in \mathbf{S}_{hp}, \quad k = 1, \dots, r, \\ \frac{1}{\tau_k} \left( \sum_{l=0}^n \alpha_{k,l} \mathbf{w}_h^{k-l}, \boldsymbol{\varphi}_h \right) + \mathbf{c}_h(\mathbf{w}_h^k(t), \boldsymbol{\varphi}_h) &= 0 \quad \forall \boldsymbol{\varphi}_h \in \mathbf{S}_{hp} \forall t \in (0, T), \quad k = n, \dots, r \\ \mathbf{w}_h^0 &= P_h \mathbf{w}^0, \end{aligned} \tag{3.57}$$

kde  $\alpha_{k,l}$  jsou koeficienty koeficienty BDF metody. Vektor  $\mathbf{w}_h^k$  splňující 3.57 se nazývá přibližné řešení problému 3.12. Počáteční hodnoty  $\mathbf{w}_h^l \in \mathbf{S}_{hp}$ ,  $l = 1, \dots, n-1$  jsou spočteny vhodnou méněkrokovou metodou. Eulerova metoda pak představuje nejjednodušší případ, kdy  $n = 1$  a  $\alpha_{k,0} = 1, \alpha_{k,1} = -1$  pro  $\forall k$ . Stavový vektor  $\mathbf{w}_h^k$  splňující (3.57) se nazývá přibližné řešení. Pro jeho získání je třeba vyřešit rovnici (3.57), která představuje soustavu nelineárních algebraických rovnic jejíž postup řešení je nastíněn v následující sekci.

### 3.3.4 Metoda řešení nelineární algebraické soustavy

Zde uvedený postup (viz [1]) řešení rovnice (3.57) vychází z Newtonovy metody řešení nelineární soustavy rovnic, oproti které ale nevyžaduje konstrukci Jakobiho matice a na místo jí používá matici toku (Flux Matrix).

Metody založené na Galerkinově aproximaci vedou ke konstrukci konečnědimenzionálního podprostoru, ve kterém se hledá přibližné řešení pomocí zavedení báze tohoto podprostoru. Nechť tedy  $N_{hp}$  je dimenze prostoru  $\mathbf{S}_{hp}$  a množina  $B_{hp} = \boldsymbol{\varphi}_i, i = 1, \dots, N_{hp}$  je jeho báze. Stavový vektor  $\mathbf{w}_h^k \in \mathbf{S}_{hp}$  lze potom v této bázi zapsat jako

$$\mathbf{w}_h^k(x) = \sum_{j=1}^{N_{hp}} \xi^{k,j} \boldsymbol{\varphi}_j(x) \tag{3.58}$$

kde  $\xi^{k,j}$  jsou bázové koeficienty. Dosazením (3.58) do rovnice (3.57) a volba testovací funkce jakožto bázových funkcí  $\boldsymbol{\varphi}_i$  vede k zavedení vektorové funkce  $\mathbf{F}_h : (\mathbb{R}^{N_{hp}})^n \times \mathbb{R}^{N_{hp}} \rightarrow \mathbb{R}^{N_{hp}}$ , která formálně nahradí rovnici (3.57)

$$\mathbf{F}_h(\{\boldsymbol{\xi}_{k-l}\}_{l=1}^n; \boldsymbol{\xi}_k) := \frac{1}{\tau_k} \left( \sum_{l=0}^n \alpha_{k,l} \mathbf{w}_h^{k-l}, \boldsymbol{\varphi}_i \right) + \mathbf{c}_h(\mathbf{w}_h^k, \boldsymbol{\varphi}_i) = \mathbf{0}, \quad k = n, \dots, r. \tag{3.59}$$

Rovnice (3.59) představuje systém algebraických nelineárních rovnic a zároveň se jedná o implicitní metodu řešení původního problému. Pro jeho řešení je zvolena tzv. modifikovaná Newtonova metoda (Newton-like method, [1, podsektce 8.4.3]). Jedná se o metodu řešení soustavy nelineárních rovnic vycházející z Newtonovy metody, ale namísto výpočtu Jakobiho matice se linearizuje formu  $\mathbf{c}_h(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi})$  danou vztahem (3.55) a zavádí matici toku (Flux Matrix). Při tomto postupu se definuje forma  $\mathbf{c}_h^L : \mathbf{S}_{hp} \times \mathbf{S}_{hp} \times \mathbf{S}_{hp} \rightarrow \mathbb{R}$ , která je lineární ve svém druhém a třetím argumentu a platí

$$\mathbf{c}_h(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}) = \mathbf{c}_h^L(\mathbf{w}_h, \overbrace{\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}}^{\text{lin. arg.}}) - \tilde{\mathbf{c}}_h(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}) \quad \forall \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \in \mathbf{S}_{hp}. \tag{3.60}$$

kde forma  $\tilde{\mathbf{c}}_h : \mathbf{S}_{hp} \times \mathbf{S}_{hp} \rightarrow \mathbb{R}$  je reziduální forma. Protože  $\mathbf{c}_h$  je dána součtem forem odpovídajícími různým členům (viz rovnice (3.55)), spočívá lineariace  $\mathbf{c}_h$  v linearizaci dílčích forem, pro než je z hlediska rovnic mokré páry nejdůležitější forma  $\mathbf{b}_h$ .

### 3.3.4.1 Linearizace formy $\mathbf{b}_h$

Postup linearizace formy  $\mathbf{b}_h$  (rovnice (3.41)) je formálně stejný jako v rovnici (3.60). Nejprve se zavede značení

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}_h(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) := & \underbrace{- \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s(\mathbf{w}_h) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_h}{\partial x_s} dx}_{:=\eta_1} \\
& + \underbrace{\sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{H}(\mathbf{w}_h^{(R)}, \mathbf{w}_h^{(L)}, \mathbf{n}_{\Gamma}) \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS}_{:=\eta_2} \\
& + \underbrace{\sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_s^W(\mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)}) \mathbf{n}_{\Gamma,s} \cdot \boldsymbol{\varphi}_h dS}_{:=\eta_3} \\
& + \underbrace{\sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^{io}} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{H}(\mathbf{w}_h^{(L)}, \mathcal{B}^{RP}(\mathbf{w}_h^{(L)}, \mathbf{w}_{hBC}), \mathbf{n}_{\Gamma}) \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS}_{:=\eta_4}.
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Člen  $\eta_1$  je linearizován s využitím homogenity Eulerova toku (3.22) jako

$$\eta_1^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \mathbb{A}_s(\bar{\mathbf{w}}_h) \mathbf{w}_h \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_h}{\partial x_s} dx. \tag{3.62}$$

Linearizace členu  $\eta_2$  se provede pomocí vhodně zvoleného numerického toku  $\mathbf{H}$ . Pro rovnice mokré páry je použit Vijayasundaramův numerický tok  $\mathbf{H}_{VS}$  ([1, sekce 8.4.3] nebo [7]). Ten je spočten s využitím rotační invariance matice (3.24) a diagonalizovatelnosti matice  $\mathbb{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n})$  (3.23). Dále se využije přepisu matice  $\mathbb{A}_1$  podle [24]

$$\mathbb{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & v_1(2-\alpha) & -\alpha v_2 & \alpha & a_{25} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -v_1 v_2 & v_2 & v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v_1(a_{21} + v_1^2 - H) & H - \alpha v_1^2 & -\alpha v_1 v_2 & v_1(1+\alpha) & v_1 a_{25} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\omega v_1 & \omega & 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -Q_2 v_1 & Q_2 & 0 & 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 & 0 \\ -Q_1 v_1 & Q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 \\ -Q_0 v_1 & Q_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_1 \end{pmatrix}, \tag{3.63}$$

kde

$$\begin{aligned} a_{21} &= \omega\delta c^2 - v_1^2 + \alpha \frac{v_1^2 + v_2^2}{2}, & a_{25} &= \alpha L_Q - \delta c^2, & c^2 &= \frac{\gamma p}{\rho}, & H &= \frac{E + p}{\rho} \\ \alpha &= \frac{(1 - \omega)(1 - \gamma)}{1 + \omega(\gamma - 1)}, & \delta &= \frac{1}{(1 - \omega)} \frac{1}{(1 + \omega(\gamma - 1))} \end{aligned} \quad (3.64)$$

Vlastní čísla matice  $\mathbb{A}_1$  jsou

$$\lambda_1 = v_1 - \hat{c}, \quad \lambda_2 = v_1 + \hat{c}, \quad \lambda_{3,4,5,6,7,8} = v_1 \quad (3.65)$$

při značení  $\hat{c} = \sqrt{\alpha(H + \omega L_Q - \frac{v_1^2 + v_2^2}{2})}$ . Potom matice vlastních vektorů<sup>6</sup>  $\mathbb{T}_{\mathbb{A}_1}$  a její inverzní matice  $\mathbb{T}_{\mathbb{A}_1}^{-1}$  mají tvar

$$\mathbb{T}_{\mathbb{A}_1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v_1 - \hat{c} & v_1 + \hat{c} & v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v_2 & v_2 & v_2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ H - v_1 \hat{c} & H + v_1 \hat{c} & \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} - L_Q \omega & v_1 & r_{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \omega & \omega & \omega & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ Q_2 & Q_2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ Q_1 & Q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ Q_0 & Q_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{T}_{\mathbb{A}_1}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\frac{v_1}{\hat{c}} + 1 - \frac{v_2^2}{z} - \frac{y}{z}) & \frac{1}{2}(-\frac{1}{\hat{c}} + \frac{v_1}{z}) & \frac{1}{2} \frac{v_2}{z} & -\frac{1}{2} \frac{1}{z} & \frac{1}{2} \frac{r_{45}}{z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(-\frac{v_1}{\hat{c}} + 1 - \frac{v_2^2}{z} - \frac{y}{z}) & \frac{1}{2}(\frac{1}{\hat{c}} + \frac{v_1}{z}) & \frac{1}{2} \frac{v_2}{z} & -\frac{1}{2} \frac{1}{z} & \frac{1}{2} \frac{r_{45}}{z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{v_2^2}{z} + \frac{y}{z} & -\frac{v_1}{z} & -\frac{v_2}{z} & \frac{1}{z} & -\frac{r_{45}}{z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -v_2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\omega & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -Q_2(1 - \frac{v_2^2}{z} - \frac{y}{z}) & -\frac{v_1 Q_2}{z} & -\frac{v_2 Q_2}{z} & \frac{Q_2}{z} & -\frac{Q_2 r_{45}}{z} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -Q_1(1 - \frac{v_2^2}{z} - \frac{y}{z}) & -\frac{v_1 Q_1}{z} & -\frac{v_2 Q_1}{z} & \frac{Q_1}{z} & -\frac{Q_1 r_{45}}{z} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -Q_0(1 - \frac{v_2^2}{z} - \frac{y}{z}) & -\frac{v_1 Q_0}{z} & -\frac{v_2 Q_0}{z} & \frac{Q_0}{z} & -\frac{Q_0 r_{45}}{z} & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.66)$$

kde  $r_{45} = \frac{c^2}{(\gamma-1)(1-\omega)^2} - L_Q$ ,  $y = -H + v_1^2 + r_{45}\omega$ ,  $z = -H + \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} - L_Q\omega$  a zároveň musí platit<sup>7</sup>  $z \neq 0$ . Díky těmto vlastnostem je možné matici  $\mathbb{P}$  danou rovnicí (3.18) zapsat jako

$$\mathbb{P}(\mathbf{w}, \mathbf{n}) = \mathbb{Q}^{-1}(\mathbf{n}) \mathbb{A}_1(\mathbb{Q}(\mathbf{n})\mathbf{w})\mathbb{Q}(\mathbf{n}) = \overbrace{\mathbb{Q}^{-1}(\mathbf{n})\mathbb{T}_{\mathbb{A}_1}}{:=\mathbb{T}} \Lambda \overbrace{\mathbb{T}_{\mathbb{A}_1}^{-1}\mathbb{Q}(\mathbf{n})}{:=\mathbb{T}^{-1}}, \quad (3.67)$$

kde matice  $\mathbb{T}$  a  $\mathbb{T}^{-1}$  jsou matice vlastních vektorů  $\mathbb{P}$  z rovnice (3.23),  $\Lambda$  je diagonální matice vlastních čísel daných vztahem (3.65) a matice  $\mathbb{Q}$  a  $\mathbb{Q}^{-1}$  jsou dány vztahy (3.25) a (3.26). Rovnici (3.67) lze dále přepsat jako matici  $\mathbb{P}^+$  a  $\mathbb{P}^-$  odpovídající rozkladu matice  $\mathbb{P}$  pro kladná a pro záporná vlastní čísla

$$\mathbb{P}^\pm = \mathbb{T}\Lambda^\pm\mathbb{T}^{-1}, \quad (3.68)$$

<sup>6</sup>Matice uvedená v článku [24, rovnice (32)] má člen  $t_{43} = \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} + L_Q\omega$ . Potom ale neplatí  $\mathbb{T}\mathbb{T}^{-1} = Id$ .

<sup>7</sup>Jak se ukázalo při numerické implementaci, podmínka na nenulovost  $z$  byla vždy splněna.

kde  $\lambda_i^+ = \max(\lambda_i, 0)$  a  $\lambda_i^- = \min(\lambda_i, 0)$  pro  $i = 1, \dots, 8$ . Vijayasundaramův numerický tok je potom dán vztahem

$$\mathbf{H}_{VS}(\mathbf{w}_1), \mathbf{w}_2, \mathbf{n}) = \mathbb{P}^+\left(\frac{\mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_2}{2}, \mathbf{n}\right)\mathbf{w}_1 + \mathbb{P}^-\left(\frac{\mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_2}{2}, \mathbf{n}\right)\mathbf{w}_2. \quad (3.69)$$

Dosažením této rovnice lze člen  $\eta_2$  z (3.61) linearizovat výrazem

$$\begin{aligned} \eta_2^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = \\ \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 [\mathbb{P}^+(\langle \bar{\mathbf{w}}_h \rangle_{\Gamma}, \mathbf{n}_{\Gamma})\mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)} + \mathbb{P}^-(\langle \bar{\mathbf{w}}_h \rangle_{\Gamma}, \mathbf{n}_{\Gamma})\mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(R)}] \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Člen  $\eta_3$  ze vztahu (3.61) odpovídající integraci přes nepropustnou stěnu se při použití nevazkého operátoru zrcadlení  $\mathcal{M}$  (výraz (3.38)) linearizuje aplikací výrazu (3.39) a dosažením konkrétního Vijayasundaramova numerického toku (3.69). To vede nejprve na vztah

$$\mathbf{f}_W^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \mathbf{n}) = \mathbb{P}^+(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{n})\mathbf{w}_h + \mathbb{P}^-(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{n})\mathcal{M}(\mathbf{w}_h) \quad (3.71)$$

pomocí kterého se linearizuje člen  $\eta_3$  jako

$$\eta_3^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_W^L(\bar{\mathbf{w}}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\varphi}_h dS. \quad (3.72)$$

Linearizace členu  $\eta_4$  z (3.61) vychází z definice Vijayasundaramova numerického toku

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{w}_h^{(L)}, \mathcal{B}^{RP}(\mathbf{w}_h^{(L)}, \mathbf{w}_{h,BC}), \mathbf{n}_{\Gamma}) = \mathbb{P}^+(\bar{\mathbf{w}}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{n}_{\Gamma})\mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)} + \\ \mathbb{P}^-(\bar{\mathbf{w}}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{n}_{\Gamma})\mathcal{B}^{RP}(\mathbf{w}_h^{(L)}, \mathbf{w}_{h,BC}), \end{aligned} \quad (3.73)$$

která se rozepíše na linearizovanou formu  $\eta_4^L$  a residuum  $\tilde{\mathbf{b}}_h$

$$\begin{aligned} \eta_4 \approx \underbrace{\sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^{io}} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 (\mathbb{P}^+(\bar{\mathbf{w}}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{n}_{\Gamma})\mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)}) \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS}_{=: \eta_4^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h)} \\ \underbrace{\sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^{io}} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 (\mathbb{P}^-(\bar{\mathbf{w}}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{n}_{\Gamma})\mathcal{B}^{RP}(\mathbf{w}_h^{(L)}, \mathbf{w}_{h,BC})) \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS}_{=: -\tilde{\mathbf{b}}_h(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h)}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Linearizované formy zavedené tímto způsobem navíc splňující  $\eta_i = \eta_i^{(L)}(\mathbf{w}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h)$  pro  $i = 1, 2, 3$  a  $\eta_4 = \eta_4^{(L)}(\mathbf{w}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) - \tilde{\mathbf{b}}_h(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h)$ .

Celkově tedy lze psát linearizovanou formu  $\mathbf{b}_h^L$  pomocí (3.62), (3.70), (3.72) a

(3.74)

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}_h^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) &= - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \mathbb{A}_s(\bar{\mathbf{w}}_h) \mathbf{w}_h \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_h}{\partial x_s} dx \\
&+ \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 [\mathbb{P}^+(\langle \bar{\mathbf{w}}_h \rangle_{\Gamma}, \mathbf{n}_{\Gamma}) \mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)} + \mathbb{P}^-(\langle \bar{\mathbf{w}}_h \rangle_{\Gamma}, \mathbf{n}_{\Gamma}) \mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(R)}] \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS \\
&+ \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \mathbf{f}_W^L(\bar{\mathbf{w}}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\varphi}_h dS \\
&+ \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^{io}} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 (\mathbb{P}^+(\bar{\mathbf{w}}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{n}_{\Gamma}) \mathbf{w}_{h,\Gamma}^{(L)}) \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS
\end{aligned} \tag{3.75}$$

a 'zbytkovou' formu

$$\tilde{\mathbf{b}}_h(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h) = - \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^{io}} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 (\mathbb{P}^-(\bar{\mathbf{w}}_{h,\Gamma}^{(L)}, \mathbf{n}_{\Gamma}) \mathcal{B}^{RP}(\mathbf{w}_h^{(L)}, \mathbf{w}_{h,BC})) \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS. \tag{3.76}$$

Zároveň pak platí  $\mathbf{b}_h = \mathbf{b}_h^L(\mathbf{w}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) - \tilde{\mathbf{b}}_h(\mathbf{w}_h, \mathbf{w}_h)$ .

### 3.3.4.2 Linearizace dalších forem

Princip při linearizaci zbylých členů z formy  $\mathbf{c}_h$  z (3.55) je stejný jako pro formu  $\mathbf{b}_h$  a to zavést formu, která je lineární alespoň ve dvou svých argumentu, a 'zbytkovou' nelineární formu, která ale nemusí být nutně přítomna.

Pro formu  $\mathbf{a}_h$  ze vztahu (3.48) spočívá linearizace v přepisu argumentů

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_h^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \sum_{s=1}^2 \left( \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}(\bar{\mathbf{w}}_h) \frac{\partial \mathbf{w}_h}{\partial x_k} \right) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_h}{\partial x_s} dx \\
&- \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \left\langle \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}(\bar{\mathbf{w}}_h) \frac{\partial \mathbf{w}_h}{\partial x_k} \right\rangle_{n_s} \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS \\
&- \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^i} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}(\bar{\mathbf{w}}_h) \frac{\partial \mathbf{w}_h}{\partial x_k} n_s \cdot \boldsymbol{\varphi}_h dS \\
&- \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_{\Gamma} \sum_{s=1}^2 \sum_{k=1}^2 \mathbb{K}_{s,k}^W(\bar{\mathbf{w}}_h) \frac{\partial \mathbf{w}_h}{\partial x_k} n_s \cdot \boldsymbol{\varphi}_h dS.
\end{aligned} \tag{3.77}$$

Linearizace penalizační formy  $\mathbf{J}_h^\sigma$  z (3.49) se provede formálním rozepsáním

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_h^{\sigma,L}(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) &:= \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^I} \int_{\Gamma} \sigma[\mathbf{w}_h] \cdot [\boldsymbol{\varphi}_h] dS \\
&+ \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^i} \int_{\Gamma} \sigma(\mathbf{w}_h) \cdot \boldsymbol{\varphi}_h dS + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_{\Gamma} \sigma(\mathbf{w}_h) \cdot \mathcal{V}(\boldsymbol{\varphi}_h) dS, \\
\tilde{\mathbf{J}}_h^\sigma(\bar{\mathbf{w}}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) &= \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^i} \int_{\Gamma} \sigma \bar{\mathbf{w}}_{h,B} \cdot \boldsymbol{\varphi}_h dS + \sum_{\Gamma \in \mathcal{F}_h^W} \int_{\Gamma} \sigma \bar{\mathbf{w}}_{h,B} \cdot \mathcal{V}(\boldsymbol{\varphi}_h) dS,
\end{aligned} \tag{3.78}$$

kde  $\bar{\mathbf{w}}_{h,B}$  je stavový vektor odpovídající okrajovým podmínkám (3.50) pro vektor  $\bar{\mathbf{w}}_h$ . Díky tomu je splněna platnost  $J_h^\sigma(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = J_h^{\sigma,L}(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) - \tilde{J}_h^\sigma(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h)$ .

Linearizace dodatečných forem  $\boldsymbol{\beta}_h(\mathbf{w}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h)$ ,  $\boldsymbol{\gamma}_h(\mathbf{w}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h)$  stabilizujících řešení v oblasti rázové vlny není nutná neboť tyto formy jsou již lineární ve svých druhých a třetích argumentech lineární.

Výsledná linearizace formy  $\mathbf{c}_h$  se zapíše s využitím (3.75), (3.77), (3.78) a (3.52) jako

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_h^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = & \mathbf{a}_h^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) + \mathbf{b}_h^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) + J_h^{\sigma,L}(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) \\ & + \boldsymbol{\beta}_h(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) + \boldsymbol{\gamma}_h(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) \end{aligned} \quad (3.79)$$

a 'zbytková' forma

$$\tilde{\mathbf{c}}_h(\bar{\mathbf{w}}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = \tilde{\mathbf{b}}_h(\bar{\mathbf{w}}_h, \mathbf{w}_h) + \tilde{J}_h^\sigma(\bar{\mathbf{w}}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) + \mathbf{s}_h(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h). \quad (3.80)$$

Takto linearizovaná forma opět splňuje podmínku (3.60)

$$\mathbf{c}_h(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = \mathbf{c}_h^L(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) - \tilde{\mathbf{c}}_h(\mathbf{w}_h, \boldsymbol{\varphi}_h). \quad (3.81)$$

Linearizace formy  $\mathbf{c}_h$  byla provedena z toho důvodu, aby bylo možné použít modifikovanou Newtonovu metodu pro řešení nelineární soustavy rovnic, která využívá namísto Jakobiho matice matici toku. Její zavedení je motivováno dosazením algebraické reprezentace přibližného řešení  $\mathbf{w}_h^k$  (vztah (3.58)) do rovnice (3.59), linearizací formy  $\mathbf{c}_h$ , využitím její linearity a vhodnou úpravou. Matice toku je pak pro víceřadovou metodu (3.57) definována jako  $N_{hp} \times N_{hp}$  matice  $\mathbb{C}_h$

$$\mathbb{C}_h(\bar{\boldsymbol{\xi}}) = \left\{ \frac{\alpha_{n,0}}{\tau_k}(\boldsymbol{\varphi}_i, \boldsymbol{\varphi}_j) + \mathbf{c}_h^L(\bar{\mathbf{w}}_h, \boldsymbol{\varphi}_i, \boldsymbol{\varphi}_j) \right\}_{i,j=1}^{N_{hp}}, \quad (3.82)$$

kde  $\bar{\boldsymbol{\xi}} \in \mathbb{R}^{N_{hp}}$  je vektor bázových koeficientů  $\bar{\mathbf{w}}_h$ . Kromě matice toku takto ještě vznikne vektor  $\mathbf{d}_h$

$$\mathbf{d}_h(\{\boldsymbol{\xi}_{k-l}\}_{l=1}^n, \bar{\boldsymbol{\xi}}) = \left\{ \frac{1}{\tau_k} \left( \sum_{i=1}^n \alpha_{n,i} \mathbf{w}_h^{k-l}, \boldsymbol{\varphi}_i \right) + \tilde{\mathbf{c}}_h(\bar{\mathbf{w}}_h, \boldsymbol{\varphi}_i) \right\}_{i=1}^{N_{hp}}, \quad (3.83)$$

kde  $\boldsymbol{\xi}_{k-l} \in \mathbb{R}^{N_{hp}}$ ,  $\forall l = 1, \dots, n$  je algebraická reprezentace  $\mathbf{w}_h^{k-l} \in \mathcal{S}_{hp}$ . S využitím vztahů (3.82) a (3.83) se pak přepíše rovnice (3.59) jako

$$\mathbf{F}_h(\{\boldsymbol{\xi}_{k-l}\}_{l=1}^n, \boldsymbol{\xi}_k) = \mathbb{C}_h(\boldsymbol{\xi}_k) \boldsymbol{\xi}_k - \mathbf{d}_h(\{\boldsymbol{\xi}_{k-l}\}_{l=1}^n, \boldsymbol{\xi}_k) = \mathbf{0}, \quad k = 1, \dots, r \quad (3.84)$$

kde  $r$  je maximální počet časových kroků a kde vektory  $\boldsymbol{\xi}_{i=1}^{n-1}$  musí být určeny vhodnou 'méně krokovou' metodou z počáteční podmínky (např. [1, podsekcce 8.4.5]).

Další postup řešení (3.84) je stejný jako v případě klasické Newtonovy metody pouze s tím rozdílem, že namísto Jacobiho matice je použita matice toku  $\mathbb{C}_h$ . Na dané  $k$ -té časové hladině se zadaným vektorem  $\mathbf{w}_h^{k-1} \in \mathcal{S}_{hp}$  reprezentovaným bázovými koeficienty  $\boldsymbol{\xi}_{k-1}$  se tak počítá iteračně úloha pro  $m = 0, 1, 2, \dots$ , kdy se položí  $\boldsymbol{\xi}_k^{m=0} := \boldsymbol{\xi}_{k-1}$  a nejprve se řeší soustava lineárních rovnic<sup>8</sup> s neznámým vektorem  $\boldsymbol{\delta}^m$

$$\mathbb{C}_h(\boldsymbol{\xi}_k^m) \boldsymbol{\delta}^m = \mathbf{F}_h(\{\boldsymbol{\xi}_{k-l}\}_{l=1}^n, \boldsymbol{\xi}_k^m), \quad (3.85)$$

<sup>8</sup>V programu ADGFEM je pro řešení soustavy (3.85) použita metoda GMRES.

a následně se upraví hledané bázové koeficienty

$$\xi_k^{m+1} = \xi_k^m + \lambda^m \delta^m. \quad (3.86)$$

Parametr  $\lambda^m \in (0, 1]$  slouží k zajištění konvergence, která je závislá na vzdálenosti počáteční hodnoty od řešení. Jeho podrobný popis je uveden v [1, podsekce 8.4.4.1]. Postup pro ukončení iteračního procesu 3.86 je popsán v [6].

Výše uvedený popis metody řešení rovnic mokré páry (3.12) je pouze malou částí skutečného postupu řešení rovnic v programu ADGFEM, týká se ale hlavních modifikací potřebných pro rozšíření Navierových-Stokesových rovnic na rovnice mokré páry. Podrobnější informace o dalších aspektech a použitých postupech numerického řešení Eulerových nebo Navierových-Stokesových rovnic v programu ADGFEM je popsáno v [1], [5] nebo [6].



## 4. Numerické experimenty

Pro implementaci rovnic mokré páry do programu ADGFEM bylo nutné provést následující úkony.

Nejprve je nutné určit dvě klíčové parametrizované veličiny tlak nasycení  $p_s$ , respektive teplotu  $\theta_s$  nasycení. Tyto veličiny se objevují v rovnicích (1.23) a (1.21) a jsou klíčové pro celou parametrizaci zdrojového nukleačního členu  $J$  z (1.20) a rychlosti růstu  $\dot{r}$  z (1.21) a tím i celého modelu mokré páry. V této práci byly použity pro výpočet tlaku a teploty nasycení následující dvě funkce převzaté z [18], které byly upraveny pro použití v bezrozměrném tvaru. Samotné funkce nejsou složité a jejich zdrojové kódy jsou uvedeny v příloze. Obecně však platí, že tlak nasycení je vypočten jako funkce teploty, pro výpočet teploty nasycení je použita iterační metoda založená na znalosti tlaku a teploty.

Dalším nezbytnou úpravou je vynormování rovnic pro kapalně momenty  $Q_0$ ,  $Q_1$  a  $Q_2$ . Důvodem normování rovnic je, že hodnoty kapalných momentů se obvykle pohybují kolem řádu  $Q_0 \approx 10^{18}$ ,  $Q_1 \approx 10^{10}$  a  $Q_2 \approx 10^4$ . Takto vysoké hodnoty jsou problematické z hlediska konečné počítačové aritmetiky. Proto se zavedou  $\tilde{Q}_0 = \frac{Q_0}{C_0}$ ,  $\tilde{Q}_1 = \frac{Q_1}{C_1}$  a  $\tilde{Q}_2 = \frac{Q_2}{C_2}$ , kde  $C_0$ ,  $C_1$  a  $C_2$  jsou normovací konstanty. Rovnice (3.3) se tak upraví na tvar

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(\rho\tilde{Q}_0)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\tilde{Q}_0\mathbf{v}) &= J\frac{1}{C_0} \\
 \frac{\partial(\rho\tilde{Q}_1)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\tilde{Q}_1\mathbf{v}) &= r_c J \frac{1}{C_1} \frac{1}{\gamma-1} + \dot{r}\rho\tilde{Q}_0 \frac{C_0}{C_1} \frac{\gamma}{RePr} \\
 \frac{\partial(\rho\tilde{Q}_2)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\tilde{Q}_2\mathbf{v}) &= r_c^2 J \frac{1}{C_2} \left(\frac{1}{\gamma-1}\right)^2 + 2\dot{r}\rho\tilde{Q}_1 \frac{C_1}{C_2} \frac{\gamma}{RePr} \\
 \frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\omega\mathbf{v}) &= \frac{4}{3}\pi\varrho_l \left( r_c^3 J \left(\frac{1}{\gamma-1}\right)^3 + 3\dot{r}\rho\tilde{Q}_2 C_2 \frac{\gamma}{RePr} \right)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

V další části se již hodnoty kapalných momentů budou psát bez horního symbolu  $\tilde{\phantom{x}}$ , přestože jejich hodnoty budou normované. Normovací konstanty jsou voleny jako  $C_0 = 10^{14}$ ,  $C_1 = 10^6$  a  $C_2 = 10^2$ .

Dalším krokem je volba bezrozměrných čísel a charakteristických veličin a konstant. Bezrozměrná čísla byla volena  $Re = 1.5 \cdot 10^6$  a  $Pr = 0.865$ , dále byla zvolena charakteristická hustota vodní páry  $\rho_v^* = 0.815 \text{ kg m}^{-3}$  a charakteristická délka  $L^* = 0.14 \text{ m}$ . Charakteristická rychlost pak byla dopočítána ze vztahů (3.4) při znalosti konstant  $\eta_v$ ,  $c_p$  a  $\lambda_v$  uvedených v na konci práce na hodnotu  $U^* = 173.4 \text{ m s}^{-1}$ . Volba charakteristických veličin udává fyzikální velikost počítaných veličin, což je podstatné při výpočtu stavu nasycení, pro který je nutné znát fyzikální hodnoty teploty a tlaku páry.

Při výpočtu parametrizace zdrojových členů bylo dále nutné ošetřit dělení malými čísly. Pro výpočet kritického poloměru  $r_c$  (1.23) byla volena minimální hodnota přesycení  $p_v/p_s > 1.2$ . Při výše uvedené volbě charakteristických veličinách dosahuje hodnota přesycení v maximech kolem  $p_v/p_s \approx 11$ . Ikdyž např. v [10] je uvedeno, že typická hodnota přesycení, při kterém kondenzuje vodní pára v turbínové mříži se pohybuje v rozmezí  $p_v/p_s \approx 6 - 8$ , zvýšení minimální hodno-

ty přesycení na  $p_v/p_s > 6$  však vedlo k zastavení výpočtu v důsledku nesplnění fyzikální podmínky (3.14).

Kromě samotné výpočtu kritického poloměru je také nutné stanovit minimální velikost poloměru  $r_{min}$ , tedy velikost nejmenších kapek. V [8] se uvádí jako tato hodnota  $r_{min} = 1 \cdot 10^{-12} m$ . Ve zde uvedeném modelu se volba  $r_{min}$  ukázala jako klíčová veličina z hlediska velikosti nukleačního členu  $J$  a tedy i Hillových momentů. Byla-li zvolena bezrozměrná velikost  $r_{min} = 1 \cdot 10^{-9}$ , byl nukleační člen  $J$  nenulový v celé oblasti za rázovou vlnou kromě úplavu. Navíc nabýval vysokých hodnot  $J \approx 10^{27}$ , což vedlo k příliš vysokým hodnotám Hillových momentů ( $\omega \approx 0.7$ ) a nestabilitě výpočtu z hlediska fyzikálních podmínek (3.14), která nastávala po několika časových krocích. Jako optimální se tak jevila bezrozměrná velikost  $r_{min} = 3.8 \cdot 10^{-9}$ , kdy nukleační člen nabývá maximálních hodnot  $J \approx 10^{22}$  v oblasti rázové vlny a o jeden až dva řády nižší hodnoty na okrajích úplavu. Navíc dosažené hodnoty podílu kapalné vody  $\omega$  přibližně odpovídají článku [8]. Hodnota  $r_{min}$  je také podstatná z hlediska dělení v rovnici pro  $\dot{r}$  (1.21). Zde však volba  $r_{min} = 1 \cdot 10^{-9}$  nebo  $3.8 \cdot 10^{-9}$  je v porovnání s vlivem na nukleační člen  $J$  minimální.

Pro výpočet byla zvolena nestrukturovaná isotropní síť o 8983 elementech uvedená na obr. 4.1.

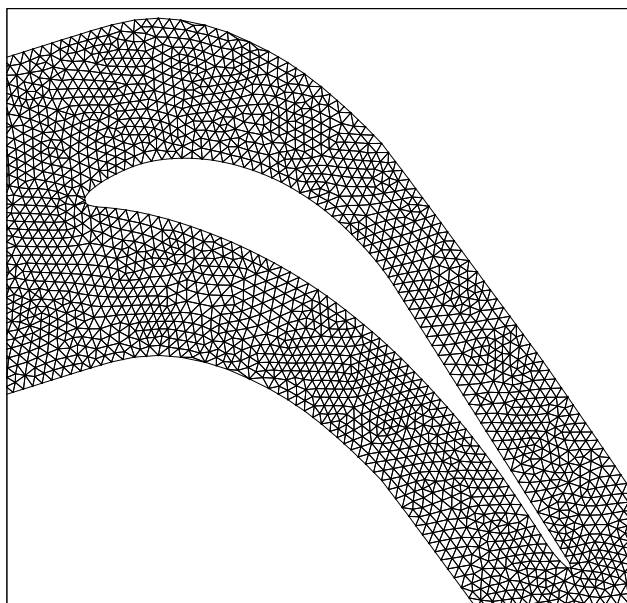


Figure 4.1: Výřez použité sítě v okolí lopatky

Jako počáteční podmínky byly pro složky odpovídající Navierovým-Stokesovým rovnicím (viz (3.12)) použity předem napočítané hodnoty ve stacionárním stavu, složky mokré páry pak byly na celé oblasti  $\Omega$  voleny nulové. Okrajové podmínky byly voleny stejně jako v podsekcích 3.3.2.1.1 a 3.3.2.2 s tím, že na vstupu a výstupu byl pro složky Navierových-Stokesových rovnic použit linearizovaný Riemannův řešič (viz [7]) a složky mokré páry byly na vstupu voleny nulové a výstup byl ponechán volný. Pro samotný výpočet byla použita jako výchozí nastavení  $P_1$  aproximace, časová derivace byla řešena zpětnou Eulerovou metodou a časový krok byl počítán adaptivně s počátečním časovým krokem  $10^{-7}$ . Použitá

metoda adaptace používá pro volbu časového kroku kombinaci odhadů prostorové  $\eta_S$  a časové  $\eta_T$  chyby. kdy na dané časové hladině musí platit  $\frac{\eta_T}{\eta_S} \approx c_T$ , kde  $c_T$  volená tolerance. Je-li  $\frac{\eta_T}{\eta_S} > c_T$ , je na dané časové hladině opakován výpočet s kratším časovým krokem. Způsob výpočtu časové a prostorové chyby včetně detailního popisu časové adaptace je uveden v [6].

Z numerických experimentů vyplývá, že použité schéma rovnic mokré páry není stabilní z hlediska splnění podmínky fyzikálních vlastností (3.14). To se projevilo tím, že nebylo dosaženo stacionárního stavu řešení, jak se původně předpokládalo, a hlavně zastavením konvergence schématu a následně s nesplněním podmínky (3.14) v čase  $t = 2.6$ . Použité schéma je navíc silně ovlivněno volbou tolerance na časovou adaptaci  $c_T$ , která byla empiricky zvolena na hodnotu  $c_T = 1.4$ . Vyšší hodnoty tolerance ( $c_T > 1.5$ ) vedou k porušení fyzikální podmínky (3.14) v kratším čase, nízké hodnoty ( $tol_\tau < 1.3$ ) naopak k příliš malé adaptaci časového kroku a tím se problém stává v rozumném čase nedopočitatelný.

I přes výše zmíněné nevýhody zde jsou uvedeny výsledky získané pro čas  $t = 1$ , které byly získány pro použití  $P_1$  a  $P_2$  aproximace a pro časovou diskretizaci zpětnou Eulerovou metodou. Tyto výsledky navíc přibližně odpovídají koncepci modelu.

## $P_1$ aproximace

Výše uvedené volby konstant a úpravy byly získány pro 'výchozí' nastavení, kterým je míněno řešení časové derivace zpětnou Eulerovou metodou a prostorové  $P_1$  aproximace. Na obr. 4.2 je zobrazena relativní velikost rezidua řešení soustavy (3.84) a hodnoty CFL-podmínky v průběhu výpočtu. Příčin nekon-

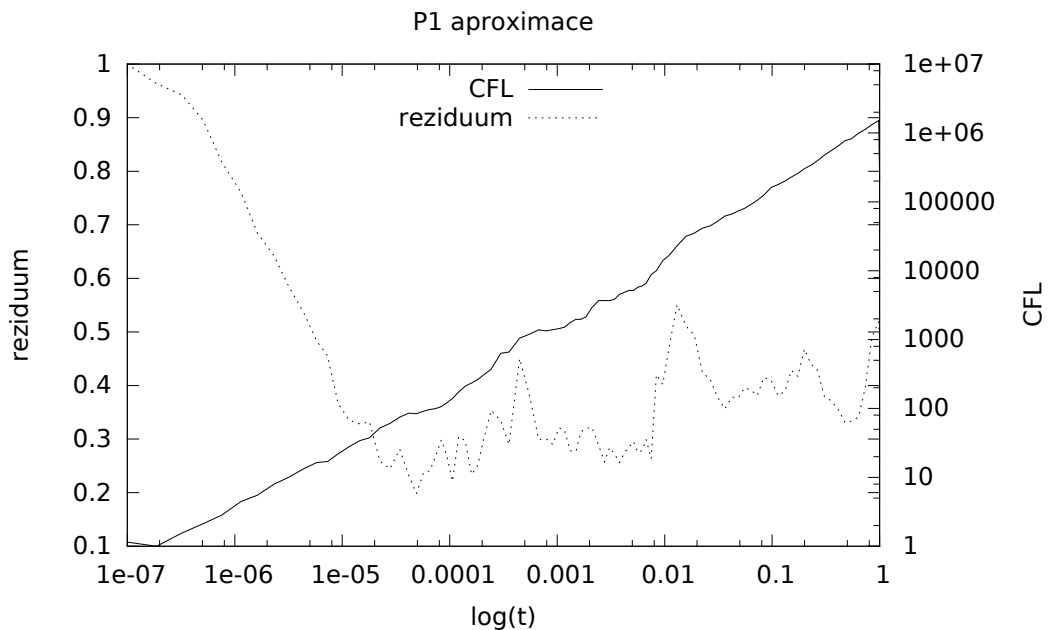
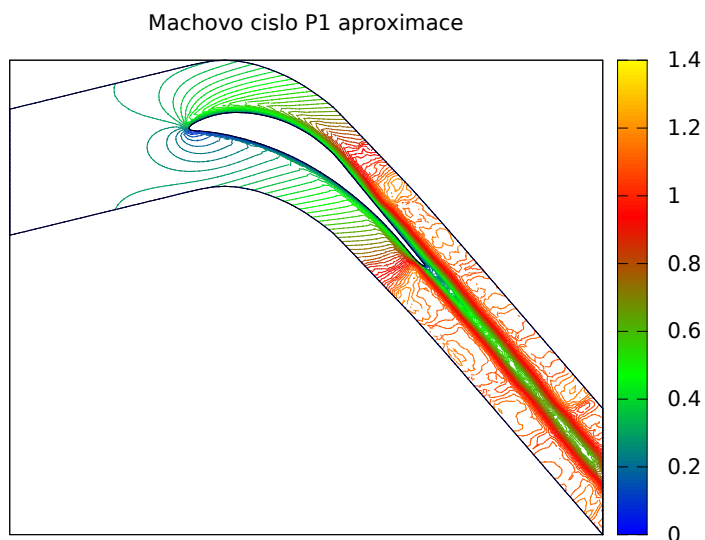


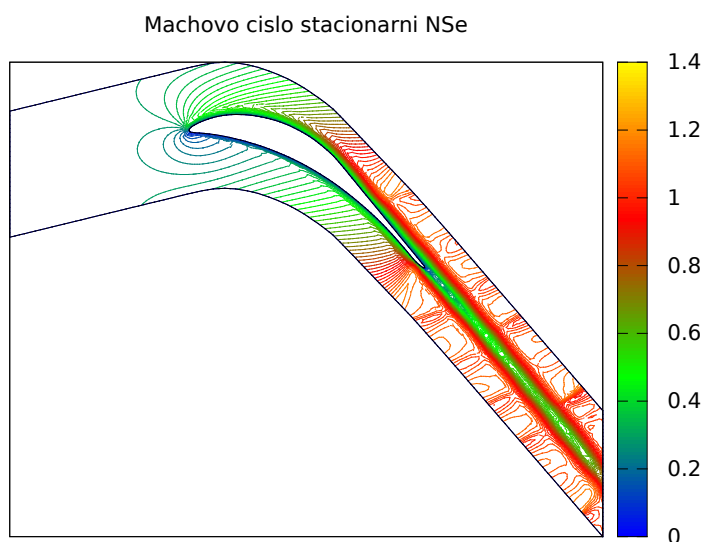
Figure 4.2: Residuuum a CFL-podmínka v závislosti na case pro  $P_1$  aproximaci

vergence schématu může být mnoho. V [6] je zmíněno, že pro případ vazkého

podzvukového proudění okolo profilu může volba konstanty  $c_T$  ovlivnit konvergenci schématu. Pro hodnotu  $c_T = 10$  bylo dosaženo stacionárnímu stavu, zatímco  $c_T = 10^{-2}$  vedlo k nestacionárnímu řešení. Jiné vysvětlení je zmíněno v [17], a to že uvolnění latentního tepla při kondenzaci může vést ke vzniku oscilací. Tomu by odpovídaly pozorované změny veličin hustoty, rychlosti a energie, které lze ilustrovat na změně Machova čísla na pro P1 aproximaci mokré páry obr. 4.3a a stacionární Navierovy-Stokesovy rovnice 4.3b. Tyto oscilace by mohly být příčinou porušení podmínky 3.14. Vyloučit však nelze ani chybu při implementaci.



(a)



(b)

Figure 4.3: Machovo číslo pro model mokré páry (a) a Navierovy-Stokesovy rovnice (b)

Na obr.<sup>1</sup> 4.4a až 4.5b je znázorněn podíl kapalné složky  $\omega$  a Hillov momenty

<sup>1</sup>Pro detailnější náhled na oblast kondenzace je poměr stran 5:4.

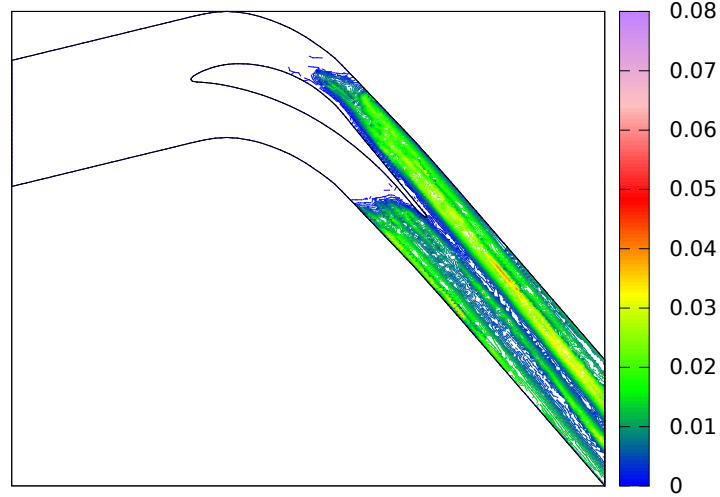
$Q_2, Q_1$  a  $Q_0$ . Rozložení momentů přibližně odpovídá koncepci modelu - na rázové vlně dochází ke kondenzaci a kapalně momenty jsou následně transportovány proudovým polem. Porovnáním obr. 4.5a a 4.5b je patrný vliv difuzního růstu kapek.

Na obrázku 4.6 je znázorněn průběh tlaku kolem lopatky turbínové mříže. Použití modelu morké páry vedlo ke snížení tlaku v celého profilu. Pro porovnání získaných výsledků je na obr. 4.7 podíl kapalně vody z článku [8], který využítá metody konečných objemů pro prostorovou semidiskretizaci a časová derivace je řešena Runge-Kutovou metodou. Při porovnání se získanými výsledky (obr. 4.4a) je patrné, že shoda je spíše koncepční ve smyslu počátku kondenzace a ve velikosti amplitudy. I když zde použité vztahy vychází z článku [8], použité rovnice parametrizace se trochu liší. Při výpočtu nukleační členu  $J$  v rovnici (1.20) není použit korekční faktor na tepelnou závislost povrchového napětí vody, koeficient měrného tepla  $c_p$  zde není uvažován jako funkce teploty a není znám způsob výpočtu klíčových veličin jako teplota a tlak nasycení. I přesto by rozdíly v použitých modelech neměly být příliš velké.

## $P_2$ aproximace

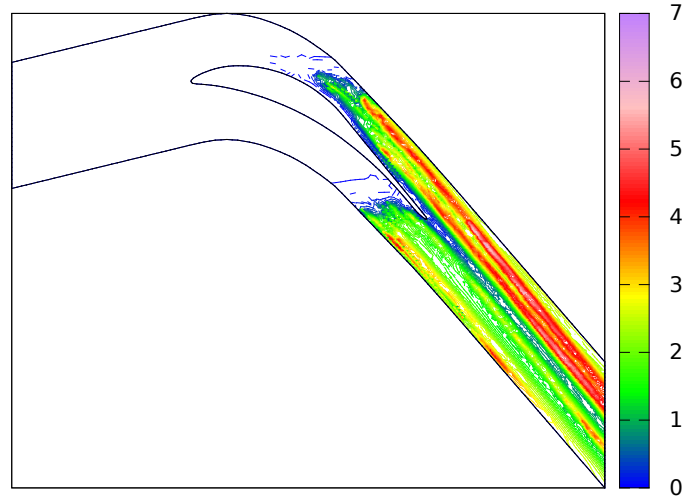
Pro porovnání vlivu stupně polynomiální aproximace byl spuštěn model se stupněm polynomu  $P_2$ , časová derivace byla opět řešena zpětnou Eulerovou metodou a zbylé nastavení bylo voleno stejně jako pro  $P_1$  aproximaci. Na obr. 4.8 je uveden průběh konvergence a CFL podmínky. V porovnání s  $P_1$  aproximací na obr. 4.2 je zde rozdíl v průběhu rezidua. Ten je pravděpodobně dán tím, že podrobnější informace o prostorovém rozložení veličin v sobě již obsahuje detailnější informaci o oscilacích a tím i zvyšuje reziduum. To lze ilustrovat porovnáním Machova čísla (obr. 4.3a a 4.9) kapalného podílu vody  $\omega$  na obr. 4.10 pro  $P_2$  aproximaci s  $P_1$  aproximací na obr. 4.4a. Použití vyššího polynomiálního stupně aproximace vede k podrobnější informaci o tvaru pole. Zároveň je zde dosahováno vyšších amplitud. Obdobné pozorování platí i pro ostatní kapalně momenty.

Podíl kapalné složky omega P1 aproximace



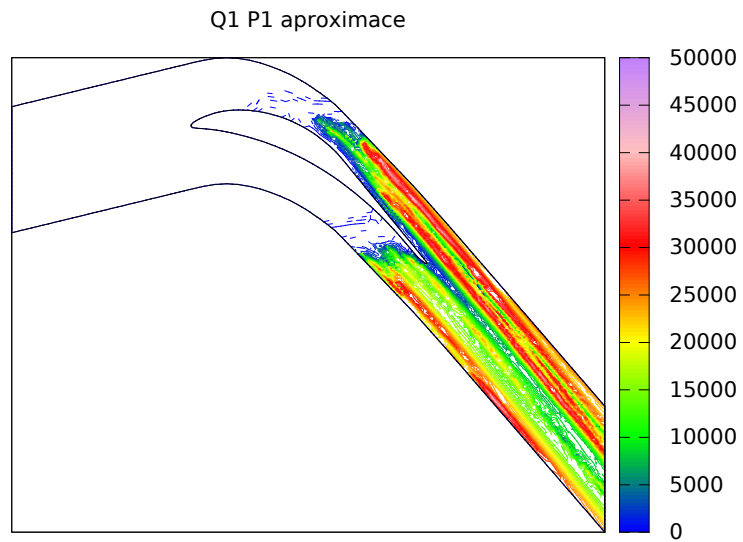
(a)

Q2 P1 aproximace

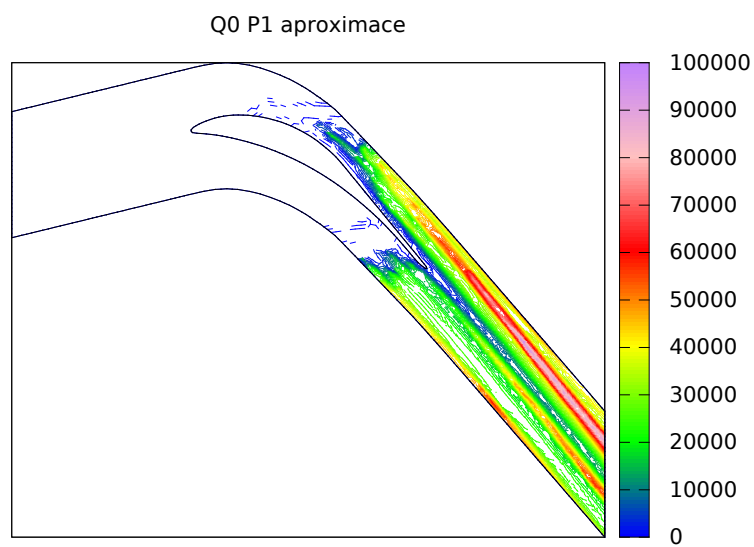


(b)

Figure 4.4: Podíl kapalné složky  $\omega$  pro rovnice mokré páry (a) a kapalného momentu  $Q_2$  (b)



(a)



(b)

Figure 4.5: Vynormované kapalné momenty  $Q_1$  (a)  $Q_0$  (b) pro model mokré páry

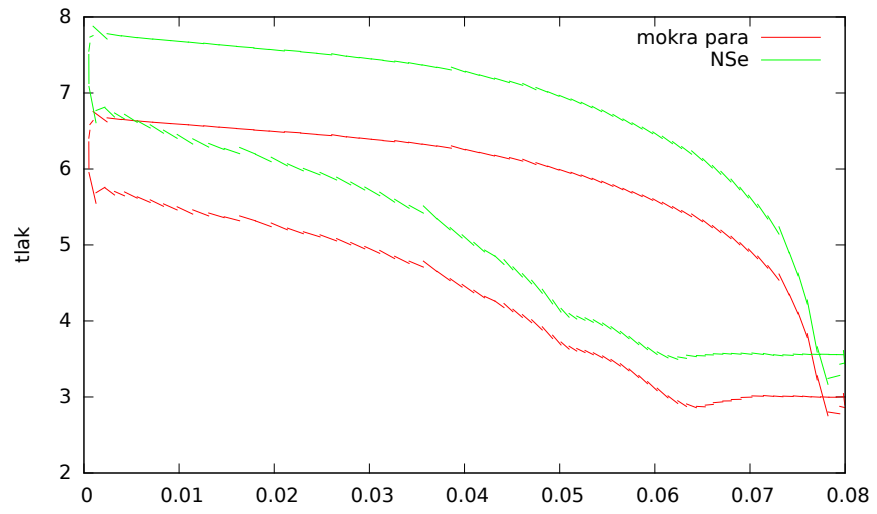


Figure 4.6: Průběh tlaku kolem turbínové mříže

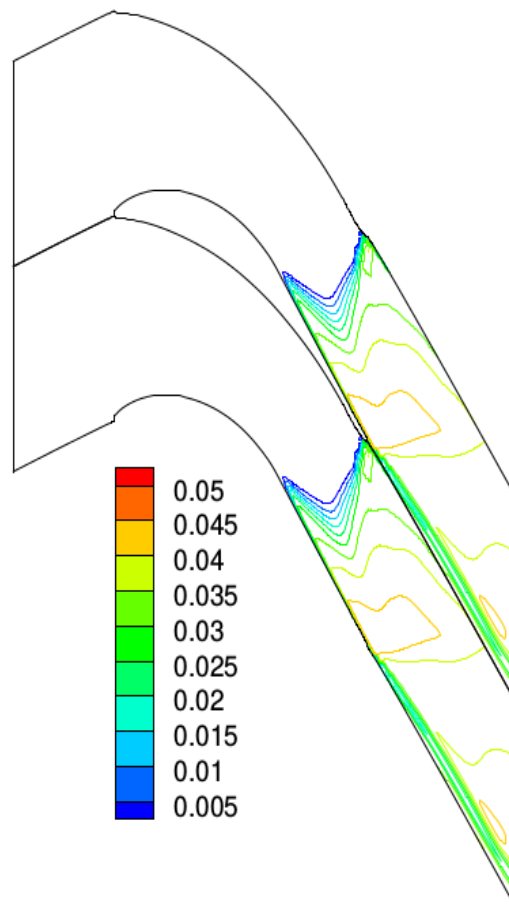


Figure 4.7: Podíl kapalné složky  $\omega$  převzatý z článku [8].



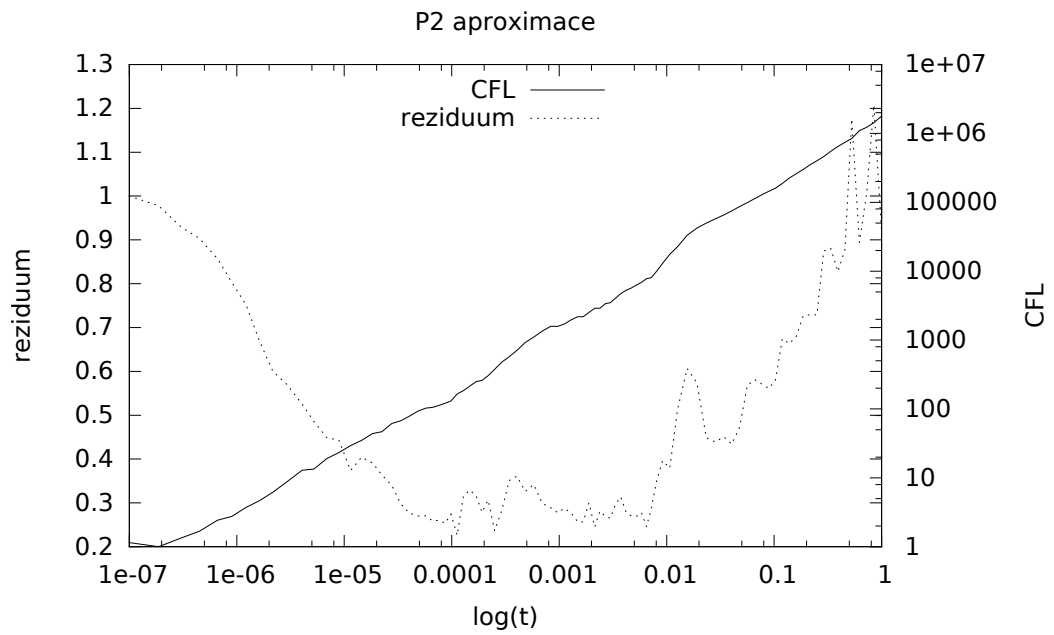


Figure 4.8: Residuuum a CFL-podmínka v závislosti na case pro  $P_2$  aproximaci

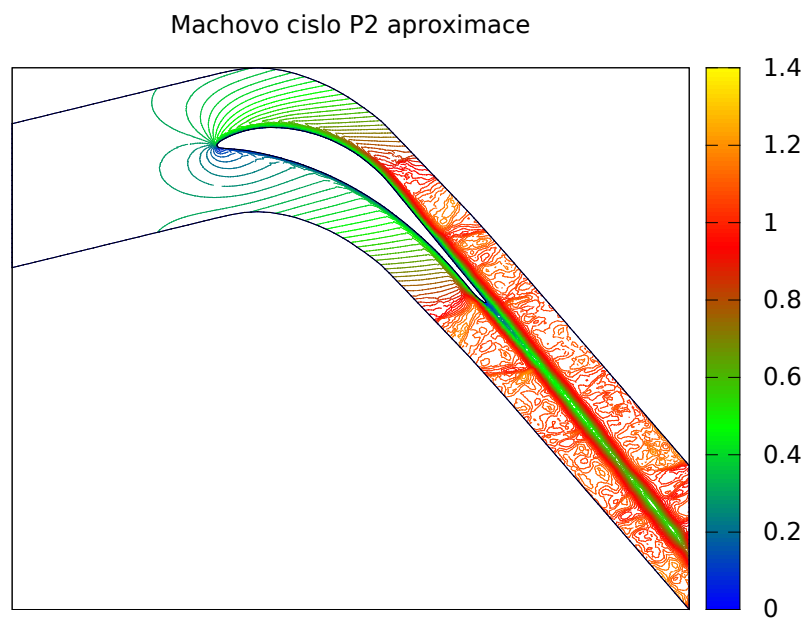


Figure 4.9: Machovo číslo pro  $P_2$  aproximaci

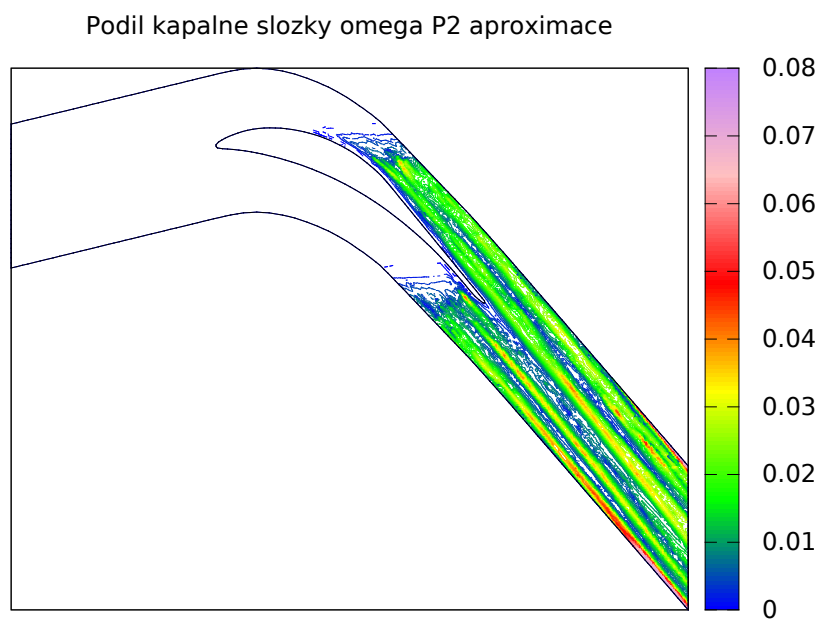


Figure 4.10: Podíl kapalné složky  $\omega$  pro  $P_2$  aproximaci

# Závěr

Cíle této práce byly studium příslušného fyzikálního modelu popisující proudění mokré páry, návrh numerické metody návrh a vlastní implementace metody a numerická verifikace.

Fyzikálnímu popisu modelu mokré páry jsou věnovány úvodní dvě kapitoly. V kapitole 1 jsou zavedeny základní pojmy související s modelem proudění mokré páry a je popsána obecná koncepce modelu. Jsou zde uvedeny rovnice popisující proudění mokré páry - Navierovy-Stokesovy rovnice pro proudění páry jako ideálního plynu a Hillový momentové rovnice pro popis spektra kapek zkondenzované vody. Stejně tak jsou zde rovnice popisující procesy vzniku kapek homogenní nukleací a jejich difuznímu růstu. Kapitola 2 je pak věnována odvození použitých rovnic mokré páry. Hillový momentové rovnice jsou odvozeny v podsekcí 2.1.2, kdy se namísto popisu spektra velikostí kapek zavedou momenty distribuční funkce  $Q_0, Q_1, Q_2$  a  $Q_3$ . V sekci 2.3 je pak odvozen z klasické nukleační teorie zdrojový člen homogenní nukleace  $J$  a sekce 2.4 obsahuje princip difuzního růstu kapek. Odvození vzorce pro tlak, který představuje vazbu mezi Hillovými momentovými a Navierovými-Stokesovými rovnicemi, je uvedeno v sekci 2.5.

Pro numerickou implementaci rovnic mokré páry byla zvolena nespojitá Galerkinova metoda. Kapitola 3 proto obsahuje popis a přeformulování rovnic mokré páry pomocí této metody. Rovnice mokré páry byly nejprve převedeny do bezrozměrného tvaru (sekce 3.1.1). Samotná formulace vychází z postupu použitého v [1] nebo [5], jejímž cílem provést semidiskretizaci rovnic tak, aby bylo možné použít časovou implicitní metodu a pro řešení nelineární algebraické soustavy použít modifikovanou Newtonovu metodu (podsekcí 3.3.4). Bylo proto třeba rozšířit pro model mokré páry nevazký a vazký tok  $\mathbf{f}_s$  a  $\mathbf{R}_s$ , přeformulovat matici  $\mathbb{P}$ , určit její vlastní vlastní čísla a matice jejích vlastních vektorů s využitím rotační invariance rovnic (sekce 3.2). Prostorová a časová diskretizace s linearizací členů pro aplikaci modifikované Newtonovy metody je uvedena v podsekcí 3.3.3.

V kapitole 4 jsou uvedeny numerické experimenty. Pro samotnou implementaci bylo nutné vynormovat rovnice mokré páry, protože vysoké hodnoty kapalných momentů (řádově až  $10^{18}$ ) vedly k problémům způsobeným zaokrouhlovacími chybami. Jako výchozí model byla použita  $P_1$  aproximace v prostoru a Eulerova zpětná diference pro časovou derivaci. Oproti očekávání však nebylo dosaženo stacionárního stavu a implementované rovnice se ukázaly jako nestabilní z hlediska fyzikálních požadavků (3.14). Přibližné řešení problému pak s rostoucím časem jeví známky oscilací. Přesto přibližné řešení pro bezrozměrný čas  $t = 1$  odpovídá přibližné koncepci modelu. Stejně tak i porovnání  $P_1$  a  $P_2$  aproximace, kdy vyšší stupeň polynomu obsahuje podrobnější informaci o rozložení veličin. Pro srovnání je uveden podíl kapalné vody  $\omega$  z článku [8].

Celkově se tedy podařilo ukázat, že výše uvedené schéma nespojitě Galerkinovy metody je možné aplikovat i na složitější fyzikální problémy jako je proudění mokré páry. Získané výsledky jsou však spíše koncepční a jeví řadu problematických vlastností jako je nestabilita z hlediska fyzikálních podmínek a oscilace přibližného řešení. Aby bylo možné použít model pro detailnější pohled na fyzikální problematiku kondenzace v okolí turbínové lopatky, bylo by dobré směřovat ke stabilizaci řešení a ověření vhodnosti použitých postupů a vztahů pro

daný typ problému, zejména tedy pro teplotu a tlak nasycení. Další krok by pak představovala adaptace výpočetní sítě.

# Seznam použité literatury

- [1] DOLEJŠÍ, Vít, FEISTAUER, Miloslav *Discontinuous Galerkin Method*. Springer, 2015. ISBN 978-3-319-19266-6
- [2] DOLEJŠÍ, Vít *Numerical Simulation of Compressible flow through Cascade of Profiles*. TASK QUARTERLY 6 No 1, 2002; 177–186
- [3] FRANCESCO, Bassi, CRIVELLINI, Andrea, STEFANO, Rebay, MARCO, Savini *Discontinuous Galerkin solution of the Reynolds-averaged Navier–Stokes and  $k$ - $\omega$  turbulence model equations*. Computers & Fluids 34, 2005; 507–540.
- [4] KELLENNERS, P.H.,PUT, F., HAGMEIJER R., H.W.M. HOEIJMAKERS, H.W.M. *Development of a Numerical Method for the Simulation of Condensing Real Gas Flows*. Department of Mechanical Engineering, University of Twente.
- [5] DOLEJŠÍ, Vít. *Semi-implicit Interior Penalty Discontinuous Galerkin Methods for Viscous Compressible Flows*. Commun. Comput. Phys. 4(2),2008; 231-274.
- [6] DOLEJŠÍ, Vít. *A design of residual error estimates for a high order BDF-DGFE method applied to compressible flows*. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2013.
- [7] FEISTAUER, M., FELCMAN, J., STRAŠKRABA, I. *Mathematical and computational methods for compressible flow. Numerical Mathematics and Scientific Computation*. Oxford University Press, Oxford, 2003. ISBN 0 19 850588 4.
- [8] HALAMA, Jan. *Transonic Flow of Wet Steam - Numerical simulation*. Acta Polytechnica, No. 6/2012; Vol. 52.
- [9] HALAMA, Jan. *Numerical Solution of Flow in Turbine Cascades and Stages*. Czech Technical University in Prague, Faculty of Mechanical Engineering. Summary of Ph.D. Thesis, 2003.
- [10] HILL, P.G. *Condensation of water vapor during supersonic expansion in nozzles*. Journal of Fluid Mechanics. Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, 1966; pp.593-620.
- [11] PUT, Frits. *Numerical simulation of condensation in transonic flows*. Enschede, The Netherlands, 2003. Thesis University of Twente. ISBN 90-365-1948-9. Dostupné z: [http://www2.ts.ctw.utwente.nl/rob/TS\\_publications/PDF/F.Put.pdf](http://www2.ts.ctw.utwente.nl/rob/TS_publications/PDF/F.Put.pdf)
- [12] FRIEDLANDER, Sheldon K. *Smoke, Dust, and Haze [Fundamental of Aerosol Dynamics]*. Second edition New York: Oxford university press, 2000. ISBN 0-19-512999-7
- [13] WILLIAMS, M. M. R, LOYALKA, Shudarsan K. *Aerosol Science Theory and Practise [With special application to the nuclear industry]*. First edition. Great Britain: Pergamon press, 2000. ISBN 0-08-037209-0

- [14] MUITJENS, Marcel. *Homogeneous condensation in a vapour /gas mixture at high pressures in an expansion cloud chamber*. Eindhoven: University of Technology, 1996. ISBN 90-386-0199-9. Dostupné z: <http://repository.tue.nl/471316>
- [15] LUIJTEN, C.C.M. *Nucleation and Droplet Growth at High Pressure*. Eindhoven: University of Technology, 1998. ISBN 90-386-0747-4. Dostupné z: <http://repository.tue.nl/516103>
- [16] SEINFELD, John H., SPYROS, N. Pandis., *Atmospheric Chemistry and Physics*. Second edition. New Jersey: John Wiley & Sons, 2006. ISBN 978-0471-72018-8
- [17] HALAMA, Jan, BENKHALDOUN, Fayssal, FOŘT, Jaroslav. *Numerical Modeling of Two-Phase Transonic Flow*. Department of Technical Mathematics, CTU FME Prague.
- [18] Wet Steam examples *Virginia Tech* [online]. Poslední úprava 4 května 2009 [cit. 2015-10-02] Dostupné z: [http://www.arc.vt.edu/ansys\\_help/fluid\\_ug/fluid\\_ug\\_sec\\_multiphase\\_wet\\_steam\\_example.html](http://www.arc.vt.edu/ansys_help/fluid_ug/fluid_ug_sec_multiphase_wet_steam_example.html)
- [19] McDONALD, James E. *Homogeneous nucleation of Vapor Condensation*. The University of Arizona, Institut of Atmospheric Physics, 1962. Dostupné z: [http://puhep1.princeton.edu/mcdonald/JEMcDonald/mcdonald\\_ajp\\_30\\_870\\_62.pdf](http://puhep1.princeton.edu/mcdonald/JEMcDonald/mcdonald_ajp_30_870_62.pdf)
- [20] BECKER, R., DÖRING, W. *Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen*. Annalen der Physik, 1935; 5. Folge, Band 24.
- [21] ERDÉLYI, A. *Asymptotic Expansions*. New York: Dover Publications, 1956. ISBN 416-031-57-900-11
- [22] JACOBSON, Mark Z. *Fundamental of Atmospheric Modeling*. 2nd edition. New York: Cambridge University Press, 2005 ISBN 978-0-511-11115-0
- [23] SIGG, Rolland. *Numerische Untersuchung von Lastvariationen und Nässephänomenen an einer Niederdruck-Dampfturbine*. Germany: Universität Stuttgart, 2010. ISBN 978-3-8322-9489-2. Dostupné z: [http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2010/5843/pdf/SiggRoland\\_2010\\_Diss\\_LP\\_Steamturbine\\_3\\_8322\\_9489\\_9.PDF](http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2010/5843/pdf/SiggRoland_2010_Diss_LP_Steamturbine_3_8322_9489_9.PDF)
- [24] HALAMA , J., BENKHALDOUN, F., FOŘT, J. *Flux schemes based finite volume method for internal transonic flow with condensation*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2010. DOI: 10.1002/fd.2223
- [25] HALAMA , FOŘT, J. *Numerical simulation of two-phase flow in a low pressure steam turbine stage*. ENGINEERING MECHANICS 2012: 18 th International Conference, Svatka May 14-17. PP. 345-353, paper #138.
- [26] Maxwell-Boltzmann distribution. *Wikipedia: the free encyclopedia* [online]. Poslední úprava 1 října 2014 [cit. 2014-10-02] Dostupné z: [http://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell-Boltzmann\\_distribution](http://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell-Boltzmann_distribution)

- [27] Collisions With A Surface. *The University of Arizona* [online]. Poslední úprava 25 října 2004 [cit. 2014-10-02] Dostupné z: <http://www.chem.arizona.edu/salzman-r/480a/480ants/collsurf/collsurf.html>
- [28] ANTONIO DI PIETRO, Daniel, ERN, Alexandre. *Mathematical Aspects of Discontinuous Galerkin Methods*. Springer-Verlag, Berlin, 2012. ISBN 978-3-642-22979-4.

# Seznam použitých veličin a konstant

## Seznam proměnných a fyzikální jednotky

$\rho$ [ $kg/m^3$ ]	celková hustota
$v_1$ [ $m/s$ ]	$x$ -ová složka rychlosti vektoru $\vec{v}$
$v_2$ [ $m/s$ ]	$y$ -ová složka rychlosti $\vec{v}$
$\theta$ [ $K$ ]	teplota
$\omega$	bezrozměrný podíl kapalně vody
$Q_2$ [ $m^2kg^{-1}$ ]	druhý kapalný moment
$Q_1$ [ $mkkg^{-1}$ ]	první kapalný moment
$Q_0$ [ $kg^{-1}$ ]	nultý kapalný moment
$\tau$ [ $Pa$ ]	tenzor napětí
$\bar{r}$ [ $m$ ]	průměrný poloměr kapky
$J$ [ $m^{-3}s^{-1}$ ]	rychlost homogenní nukleace
$r_c$ [ $m$ ]	kritický poloměr
$\dot{r}$ [ $ms^{-1}$ ]	rychlost růstu vodní kapky
$Kn$	bezrozměrné Knudsenovo číslo
$p$ [ $Pa$ ]	tlak vodní páry (značen též $p_v$ )
$p_s$ [ $Pa$ ]	tlak syté vodní páry
$\theta_s$ [ $K$ ]	teplota nasycení

## Použité konstanty

$c_v = 1397,5$ [ $Jkg^{-1}K^{-1}$ ]	měrné specifické teplo za konstantního objemu,
$c_p = 1859$ [ $Jkg^{-1}K^{-1}$ ]	měrné specifické teplo za konstantního tlaku,
$\gamma = 1.332$	bezrozměrná Poissonova konstanta,
$k_B = 1,3804 \cdot 10^{-23}$ $JK^{-1}$	Boltzmannova konstanta,
$R_v = 461,52$ $JK^{-1}kg^{-1}$	plynová konstanta vodní páry,
$m_v = 2,99046 \cdot 10^{-26}$ $kg$	hmotnot molekuly vodní páry,
$\eta_v = 1,3192 \cdot 10^{-5}$ [ $Pa\cdot s$ ]	dynamická viskozita páry,
$\lambda_v = 2,835 \cdot 10^{-2}$ [ $Wm^{-1}K^{-1}$ ]	koeficient tepelné vodivosti vodní páry,
$L_Q = 2260 \cdot 10^3$ [ $Jkg^{-1}$ ]	měrné latentní teplo kondenzace,
$\sigma = 58,85 \cdot 10^{-3}$ [ $Nm^{-1}$ ]	povrchové napětí vody.