VĚDECKÉ SPISY VYSOKÉHO UČENÍ TECHNICKÉHO V BRNĚ Edice Habilitační a inaugurační spisy, sv. 255 ISSN 1213-418X

Jiří Hájek

APLIKACE VÝPOČTOVÉ DYNAMIKY TEKUTIN V OBLASTI PROCESNÍHO PRŮMYSLU

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ Fakulta strojního inženýrství Ústav procesního a ekologického inženýrství

Ing. Jiří Hájek, Ph.D.

APLIKACE VÝPOČTOVÉ DYNAMIKY TEKUTIN V OBLASTI PROCESNÍHO PRŮMYSLU

APPLICATIONS OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS IN THE AREA OF PROCESS INDUSTRY

ZKRÁCENÁ VERZE HABILITAČNÍ PRÁCE



KLÍČOVÁ SLOVA

Výpočtová dynamika tekutin, procesní průmysl, optimalizace geometrie, energetické využití odpadů

KEY WORDS

Computational fluid dynamics, process industry, design optimisation, waste to energy

MÍSTO ULOŽENÍ PRÁCE

Oddělení pro vědu a výzkum Fakulty strojního inženýrství Vysokého učení technického v Brně

© Jiří Hájek, 2008 ISBN 978-80-214-3598-8 ISSN 1213-418X

OBSAH

P	ŘED	STAVENÍ AUTORA	4
1	ÚV(OD	5
	1.1 1.2	Cíl práce Shrnutí obsahu práce	5 6
2	VYUŽITÍ CFD – MOŽNOSTI A OMEZENÍ		6
	2.1 2.2	Obecné shrnutí možností CFD modelování Zásady efektivního využití CFD v inženýrské praxi	6 7
	2.3	Geometrie a výpočetní síť 2.3.1 Tvorba geometrie, import z 3D CAD programů 2.3.2 Závislost na výpočetní síti	7 7 10
	2.4	Matematický model 2.4.1 Rozšířený systém Navier-Stokesových rovnic 2.4.2 Turbulence jako klíčový problém v CFD	11 <i>11</i> <i>12</i>
		 2.4.3 Turbulentní separované proudění 2.4.4 Vířivé turbulentní hoření 2.4.5 Atomizace 	12 13 15
	2.5	Numerický model	15 15 17 17
	2.6	Analýza výstupních dat, ověřování a ladění modelu	18
3 R	JED EPRI	NOTKA PRO ENERGETICKÉ VYUŽITÍ ODPADŮ JAKO EZENTANT TECHNOLOGICKÉ LINKY V PROCESNÍM PRŮMYSLU	. 19
	3.1 3.2	Typická jednotka pro termické zpracování odpadů s využitím energie Aplikace u charakteristických aparátů	19 20
4	DAI	LŠÍ APLIKACE VČETNĚ NETRADIČNÍHO VYUŽITÍ CFD	21
	4.1 4.2	Výpočtový model výměníku "voda – kal" CFD analýza kompaktní jednotky pro termické čištění vzdušin znečištěných VOC	21
	43	látkami	21
5	ZÁV	VĚR	21
6	LIT	ERATURA	22
A	ABSTRACT		

PŘEDSTAVENÍ AUTORA

Jiří Hájek se narodil 31. března 1975 v Prostějově. V letech 1993 až 1998 studoval na Fakultě strojní Vysokého učení technického v Brně obor "Matematické inženýrství". Studium ukončil s vyznamenáním obhajobou diplomové práce zaměřené na simulace interakcí mezi částicemi a krystaly pevných látek. Za výsledky ve studiu získal cenu rektora VUT v Brně a cenu "Nadání Josefa, Marie a Zdeňky Hlávkových". V letech 1998 až 2000 působil na univerzitě Instituto Superior Tecnico v Lisabonu v Portugalsku, v období 2000 až 2001 v průmyslové praxi. V roce 2001 zahájil interní doktorské studium na Ústavu procesního a ekologického inženýrství Fakulty strojního inženýrství VUT v Brně, které ukončil v roce 2005 obhajobou disertační práce na téma "Výpočty a optimalizace vybraných procesů a zařízení s přítomností spalování".



Od roku 2005 je zaměstnán jako odborný asistent na Ústavu procesního a ekologického inženýrství Fakulty strojního inženýrství VUT v Brně. Zde se věnuje výpočtovému modelování dynamiky tekutin se zaměřením zejména na procesy spalování. Podílí se na výzkumu a vývoji hořáků s potlačenou tvorbou oxidů dusíku, vývoji zařízení pro energetické využití různých druhů biomasy a fytomasy a na výzkumu soustav zpracování odpadů a biomasy, podporovaném (v pořadí dle výše uvedených oblastí) Grantovou agenturou České republiky, Ministerstvem obchodu a průmyslu České republiky a Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky. Znalosti a zkušenosti v oboru výpočtového modelování proudění tekutin a spalování získával i uplatňoval na zahraničních stážích a studijních pobytech, především během dvouletého studiního

pobytu na Lisabonské technické universitě (1998-2000) a dále na Královském technickém institutu ve Stockholmu (2007). Výsledky své práce prezentoval v řadě publikací, kromě jiného v 4 článcích v mezinárodních impaktovaných časopisech, ve 26 příspěvcích na mezinárodních konferencích a v 8 příspěvcích na domácích konferencích. Jiří Hájek je dále aktivní v oblasti řešení evropských projektů a podílí se na jejich koordinaci. Je rovněž koordinátorem sekce "Modelování, CFD a optimalizace" v rámci řešení prestižního výzkumného záměru.

V rámci pedagogické činnosti zavedl a od roku 2004 zajišťuje výuku předmětů "Modelování s využitím CFD I" a "Modelování s využitím CFD II". Pro účely této výuky vytvořil učební texty s názvem "Modelování s využitím CFD". Tyto texty budou v nejbližší době doplněny o další výsledky vlastního výzkumu a vývoje, čímž vznikne první ucelená česká monografie v předmětné oblasti. Od roku 2002 byl vedoucím celkem 9 úspěšně obhájených diplomových prací a 1 bakalářské práce. Vede 1 doktoranda a jako školitel – specialista se podílí na vedení dalších 4 doktorandů.

1 ÚVOD

Co se přesně skrývá pod termínem "výpočtová dynamika tekutin" (Computational Fluid Dynamics, CFD)? Podle definice publikované v roce 1995 J.D. Andersonem je to "umění nahrazovat integrály a parciální derivace v Navier-Stokesových rovnicích diskretizovanými algebraickými formami a řešit vzniklé soustavy lineárních rovnic s cílem nalézt hodnoty vlastností proudových polí v diskrétních bodech" [1]. Je ovšem zajímavé, že simulovat proudění tekutin lze i bez nutnosti numerického řešení Eulerových či Navier-Stokesových rovnic, a to pomocí numerického řešení Boltzmannovy rovnice [2]. Jelikož zjevně i tato metoda vede k řešením, která jsou ekvivalentní k řešení Navier-Stokesových rovnic, a je prakticky využitelná (např. automobilka BMW používá virtuální aerodynamický tunel postavený na této metodě [3]), zdá se vhodnější zcela obecná definice: *Výpočtovou dynamikou tekutin rozumíme (jakékoliv) metody, umožňující numerické modelování proudění tekutin.*

V této práci bude řeč pouze o standardních metodách výpočtové dynamiky tekutin, které jsou postaveny na numerickém řešení rozšířené soustavy Navier-Stokesových rovnic metodou konečných objemů (Finite Volume Method, FVM). Metoda FVM se stala téměř synonymem CFD během posledních zhruba třiceti let, kdy se CFD používá v praxi. (I když to neplatí v takové míře, jako v oblasti pevnostních výpočtů pro metodu konečných prvků.) Tato převaha metody FVM je způsobena zejména její snadnou aplikaci na jakékoliv parciální diferenciální rovnice řídící dynamiku tekutin (jejich variant existuje obrovské množství). Zároveň je její použití velmi intuitivní; má velmi dobrý fyzikální smysl bilance na kontrolním objemu. Metoda se dá relativně snadno formulovat pro různé tvary kontrolních objemů a je tedy dobře použitelná pro složitě tvarované oblasti proudění.

Mezi hlavní záporné stránky výpočtové dynamiky tekutin v praktických aplikacích (tj. zejména v turbulentním proudění) patří neexistence matematicky podložených a spolehlivých odhadů velikosti chyb, ačkoliv existují snahy o "certifikaci" CFD řešičů (viz např. [4], [5]) a časté pokusy o systematické (experimentální i analytické) ověřování jednotlivých výpočtů. To znamená, že ačkoliv obvykle můžeme relativně snadno získat řešení, toto řešení může být velmi vzdálené od skutečnosti. Hlavním zdrojem chyb nejsou přitom většinou metody numerického řešení, ale přibližné matematické modely fyzikální podstaty dějů. Chyby způsobené numerickými metodami řešení jsou ale také schopné podstatně ovlivnit přesnost i kvalitativní charakter predikcí.

1.1 CÍL PRÁCE

Tato práce se zaměřuje na slabá místa běžných matematických a numerických modelů používaných pro řešení praktických úloh, to znamená modelů, které jsou implementovány v komerčních softwarových nástrojích. Z tohoto pohledu jsou pojímány i konkrétní oblasti výzkumu, jmenovitě:

- modelování spalování plynných paliv včetně tvorby oxidů dusíku
- modelování roštového spalování biomasy a odpadů
- optimalizace konstrukce a tvaru zařízení
- analýzy dalších zařízení včetně netradičních postupů (výměníky tepla, mokré vypírky, filtry, semi-empirické modelování tvorby NO_x)

Rozbor slabých stránek CFD modelování je v první řadě cestou, která vede k realistickému vnímání výpočtového modelování proudění tekutin z hlediska průmyslové praxe. Kromě toho je metodou pro systematickou identifikaci vhodných směrů dalšího výzkumu.

Z hlediska aplikačního zaměření je práce výsledkem úzkého napojení na výzkumné projekty probíhající na pracovišti autora, Ústavu procesního a ekologického inženýrství FSI VUT v Brně. V posledních letech jde zejména o výzkumný záměr "Ekologicky a ekonomicky řízené soustavy zpracování odpadů a biomasy" (MSM00216320502). Z tohoto důvodu se výzkumné aktivity

soustřeďují do oblasti termického zpracování odpadů a biomasy. Toto zaměření však nevede k úzké specializaci CFD simulací, jak dokumentuje široká škála studovaných aplikací.

1.2 SHRNUTÍ OBSAHU PRÁCE

Předložená habilitační práce je rozdělena do tří hlavních částí (kapitoly 2 až 4) a doplněna závěrečným shrnutím. V kapitole 2 jsou představeny metody CFD. Pohled na ně je zde záměrně netradiční, neboť, na toto téma existuje celá řada vynikajících monografií, např. [6], [7], [8]. Tato práce představuje CFD metody z pohledu omezení, kterým je nutno čelit při jejich aplikacích. Jsou to jednak fundamentální omezení, jejichž odstranění je nemožné, nebo pro ně doposud nebyl nalezen žádný vhodný způsob, a dále omezení, kterým úspěšně čelit můžeme.

Kapitoly 3 a 4 podávají přehled nejvýznamnějších řešených problémů, mezi něž jsou zapojeny také rozpracované oblasti aktuálního výzkumu autora. Všechny aplikace jsou uvedeny do souvislosti pomocí společného jmenovatele, kterým je konkrétní typ technologického (a zároveň energetického) procesu. Jedná se o jednotky pro termické zpracování a energetické využití odpadu, které jsou předmětem řešení hlavních výzkumných projektů pracoviště autora. Tyto jednotky lze považovat za poměrně reprezentantivní pro oblast procesního průmyslu. Připojeny jsou tři další úlohy, doplňující tuto oblast řešení.

2 VYUŽITÍ CFD – MOŽNOSTI A OMEZENÍ

S pokusy o vyjmenování oblastí, kde je možné a smysluplné (především ekonomicky) využití výpočtové dynamiky tekutin, se setkáváme zejména v prezentacích komerčních softwarových produktů. Hlavní světoví hráči, kteří působí na tomto trhu, své produkty vesměs deklarují jako univerzální, aplikovatelné téměř na všechny fyzikální jevy, které mohou při proudění tekutin nastat. Realita je samozřejmě mnohem méně idylická a pro aplikace modelů existuje mnoho silných omezení. Předmětem této kapitoly je proto především bližší pohled na nejdůležitější omezení, která je nutno brát do úvahy při přípravě simulací a vyhodnocování výsledků.

Výpočtová dynamika tekutin je rozsáhlý obor a v případě procesního průmyslu je aplikačně velmi různorodá. Z uvedeného důvodu není toto pojednání vyčerpávající. Výběr otázek, zařazených do této kapitoly, vyplývá do značné míry ze zkušeností autora a odvíjí se od úloh řešených v rámci výzkumných projektů na Ústavu procesního a ekologického inženýrství.

2.1 OBECNÉ SHRNUTÍ MOŽNOSTÍ CFD MODELOVÁNÍ

Využití CFD v průmyslu je prakticky omezeno pouze ekonomickými faktory, samo výpočtové modelování proudících tekutin nemá a priori žádná fyzikální omezení. Naopak, simulace stavů v extrémních podmínkách jsou významnou oblastí využití CFD.

Poněkud jiná je situace v okamžiku, kdy se zajímáme o možnosti predikcí v konkrétní úloze a zejména o jejich kvantitativní přesnost. Jak již bylo řečeno v úvodu, v CFD obecně neexistují spolehlivé odhady chyb, a tak kvalitní výsledky jsou vždy podmíněny znalostmi a zkušenostmi uživatele, případně možností srovnání s naměřenými daty v podobné úloze. Důležité je čerpat informace z literatury, což je dnes naštěstí výrazně ulehčeno díky internetovým databázím. Ověřování modelů pomocí naměřených dat je stále jediným spolehlivým způsobem pro kvantifikaci chyb.

Z pohledu zákazníka CFD modelování je možné rozlišit tři hlavní oblasti využití, jmenovitě:

- vývoj nových výrobků a zařízení
- analýza příčin špatné funkce zařízení ("troubleshooting")
- optimalizace provozních nebo konstrukčních parametrů zařízení

2.2 ZÁSADY EFEKTIVNÍHO VYUŽITÍ CFD V INŽENÝRSKÉ PRAXI

Základem optimálního využití metod CFD v praxi je efektivní komunikace výpočtářů s projektanty a provozními inženýry (technology). Ta musí v rámci objasnění teoretických principů zajistit formulaci realistického zadání výpočtové úlohy včetně očekávané formy a obsahu výsledků. Mimo to je podstatnou součástí zadání také způsob určení okrajových podmínek včetně identifikace důsledků přijatých zjednodušení.

V rámci tvorby modelu a řešení úlohy je důležité ověření spolehlivosti pomocí naměřených dat, například pro podobnou úlohu, zdokumentovanou v odborné literatuře. Tento krok často bývá přehlížen a kvalita řešení se posuzuje pouze kvalitativně, s odvoláním na velmi obecná doporučení, obsažená v uživatelských manuálech CFD programů. O to větší potom bývá zklamání na obou stranách (jak u projektantů a provozních inženýrů, tak u výpočtářů), když se teprve později ukáže, že výpočet poskytl významně zkreslené informace. Kvantifikované odhady chyb, bohužel, v CFD nejsou dosud možné, a proto tím větší pozornost je třeba věnovat definování "záchytných bodů" ve formě "tvrdých" (naměřených) dat na základě vyhodnocení dříve řešených podobných úloh. Zkušenosti CFD analytika hrají v tomto ohledu hlavní roli.

Zásadní význam pro průběžné zlepšování kvality výpočtů má tedy zpětná vazba z provozu simulovaných zařízení. Množství informací, které je možné takto získat, obvykle nebývá velké, avšak přesto bývá možné na základě hodnot několika parametrů vyhodnotit kvantitativní přesnost predikce. To umožňuje zpřesnění hodnot parametrů modelů. Ne všechny parametry bývají předem dobře známé (příkladem může být emisivita stěn kotle v radiační sekci) a jejich zpřesnění může výrazně ovlivnit kvalitu výsledků výpočtu.

2.3 GEOMETRIE A VÝPOČETNÍ SÍŤ

V současnosti se zdá být zmínka o modelování geometrie výpočtové oblasti spíše formální, neboť existuje, a v praxi se standardně využívá, mnoho 3D CAD programů, umožňujících snadno vytvářet velmi komplikované sestavy celých provozních celků. V automobilovém průmyslu již dokonce existují automatizované postupy pro vytváření geometrických modelů externí aerodynamiky vozidel s využitím 3D výkresové dokumentace pocházející z mnoha různých konstrukčních oddělení. Postup je takový, že všechny součásti se spojí do jedné sestavy a kolem celé geometrie vozu se vytvoří obalová plocha, která slouží jako základ pro model obtékání vozu ve virtuálním výpočtovém aerodynamickém tunelu.

Bohužel, zkušenosti ukazují, že obdobný postup v případě procesního průmyslu, kde se jedná vesměs o proudění uvnitř různých kanálů a zařízení, není použitelný. Jako příklad poslouží aktuální úloha řešená v rámci výzkumného projektu, ve které se jedná o simulaci proudění a spalování v kotli na biomasu (projekt programu IMPULS "Prototyp jednotky o výkonu 1 až 3 MW pro energetické využití různých druhů biomasy a fytomasy", číslo FI-IM3/166).

Výpočetní síť je klíčovou součástí každého CFD modelu. Její kvalita (tvarová dokonalost buněk) a počet kontrolních objemů (přesněji vhodné rozložení velikosti buněk včetně dělení v mezních vrstvách) je základní podmínkou pro dosažení kvalitních výsledků. Proto, kde je to možné, je třeba vyhodnocovat závislost výsledků výpočtů na dělení výpočtové oblasti a případně ji odstraňovat postupným zjemňováním v exponovaných oblastech. Velikost výpočetní sítě (počet kontrolních objemů) ovšem samozřejmě omezuje rychlost výpočtu – nejen, že na jemnější síti trvá déle každá iterace, ale také se zvyšuje počet iterací, potřebných k dosažení konvergence.

2.3.1 Tvorba geometrie, import z 3D CAD programů

Postup při 3D kreslení zařízení pro účely výrobní a montážní výkresové dokumentace je přímočarý a poměrně snadný. Není třeba se zabývat detailní návazností jednotlivých součástí na úrovni křivek a bodů, důraz je kladen pouze na správné rozměry a dispoziční uspořádání. Příklad 3D modelu vytvořeného v programu SOLIDWORKS je uveden na obrázku 2-1.



Obr. 2-1 Dispoziční uspořádání prototypu moderní jednotky pro spalování biomasy a fytomasy ve 3D modelu

Součástí tohoto CAD modelu není pouze vnější tvar jednotlivých částí jednotky, ale i podrobnější informace včetně tloušťky materiálu, přírub či armatur. Pro modelování proudění v tomto zařízení je však většina těchto dat zbytečná – například armatury jsou obvykle vykresleny bez vnitřních součástí, které jsou pro simulaci proudění rozhodující. Pro tvorbu kvalitních výpočtových sítí, které nejsou nepřiměřeně velké co do počtu kontrolních objemů, je důležitá nejenom správná geometrie úlohy, ale i detaily její topologie. Tyto protiklady dokumentuje část vzduchovodu kotle na biomasu uvedeného na obrázku 2-1. Detail je zobrazen na obrázcích 2-2 a 2-3. Na obou je vidět stejný detail geometrie vzduchotechnického potrubí kotle; nejprve ihned po importu z 3D CAD modelu a poté vyčištěný od zbytečných prvků a připravený pro tvorbu výpočetní sítě.



Obr. 2-2 Detail importované geometrie z 3D CAD modelu



Obr. 2-3 Detail importované geometrie po vyčištění a opravě

Kromě toho, že upravený model je již tvořen pouze vnitřní stěnou potrubí, jsou z obrázku patrné i změny v topologii geometrie. Napojení jednotlivých částí povrchu je provedeno tak, že je na minimum omezen výskyt tvořících bodů uvnitř hran, což umožňuje vytažení objemové mřížky po délce potrubí. Je evidentní, že takové úpravy geometrického modelu není možné zautomatizovat, naopak se jedná o pracnou a časově náročnou činnost.

Jedním z dalších problémů vznikajících v důsledku importu geometrie zařízení do programů pro tvorbu výpočetních sítí je ztráta kontroly nad přesností geometrických rysů modelu. Každý 3D CAD program pracuje s jinými tolerancemi přesnosti geometrických entit, takže se například stává, že importované kružnice nejsou přesně kruhové, některé rovnoběžky nejsou přesně rovnoběžné, symetrie či periodicita není dokonalá, a pokud je v průběhu výpočtové analýzy nutné na modelu provádět hlubší modifikace, je velmi těžké tyto nedokonalosti opravovat.

Z těchto důvodů je často výhodnější tvořit geometrii úlohy přímo v programu, který slouží zároveň pro tvorbu výpočetní sítě.

2.3.2 Závislost na výpočetní síti

Závislost výsledků simulace na výpočetní síti je často natolik významná, že je nutné se této otázce věnovat i v praktických aplikacích, ačkoliv to může výrazně prodlužovat celkový čas potřebný na provedení simulace. Jako příklad poslouží výsledky z nedávno publikované práce o ověřovacím výpočtu tepelného výměníku "voda–kal" [9]. (Další informace o této úloze obsahuje kapitola 4.1.) Tento výměník je zobrazen na obrázku 2-4. Čistírenský kal proudí v laminárním režimu, zatímco voda, která kal ohřívá, je v plně turbulentním režimu. Právě s modelováním turbulentního proudění a přenosu se pojí potřeba kontroly hustoty výpočetní sítě.



Obr. 2-4 Experimentální šroubovicový výměník tepla "voda-kal"

Výpočetní síť pro numerickou simulaci byla analyzována s využitím zjednodušeného modelu, který obsahoval pouze dvě otáčky šroubovice. S využitím tohoto malého modelu bylo vyhodnoceno 5 hustot výpočtových sítí a 3 modely turbulence (jmenovitě tzv. realizovatelný k- ε model, sedmi-rovnicový model Reynoldsových napětí (RSM) a varianta SST modelu k- ω). Pro modely k- ε a RSM bylo nutné doplnění vhodným modelem chování v blízkosti stěn, kterým byly buď to tzv. stěnové funkce anebo řešení přenosu turbulentních veličin v turbulentní mezní vrstvě pomocí speciálního jedno-rovnicového modelu [10]. Druhý, pokročilejší přístup, byl použit pouze ve spojení s nejjemnější výpočetní sítí.

Obrázek 2-5 ukazuje ve dvou grafech vyhodnocení tlakové ztráty a rozdílu vstupních a výstupních teplot ve vodním kanále výměníku pro všechny zmíněné modely turbulence a výpočetní sítě. Je na nich patrné, že pro standardní přístup (tzn. se stěnovými funkcemi) jsou výsledky v podstatě nezávislé na hustotě sítě, pokud hustota sítě je dostatečná, tj. bezrozměrná tloušťka první vrstvy buněk u stěny kanálu má hodnotu $y^+ \approx 40$ a nižší. Na nejjemnější výpočetní síti ($y^+ \approx 1$) však došlo při srovnání s těmito ustálenými hodnotami ke značné změně, zejména v predikci tlakové ztráty. Experimentální ověření těchto hodnot dosud není k dispozici, je ale pravděpodobné, že výsledky na nejjemnější síti jsou nejkvalitnější.



Obr. 2-5 Teplotní a tlakové ztráty ve vodním kanále výměníku v závislosti na hustotě výpočetní sítě použitém modelu turbulence. Kromě nejjemnější sítě ($y^+ \approx 1$) jsou modely k- ε a RSM kombinovány se stěnovými funkcemi

Lze tedy konstatovat, že při výpočtech turbulentního proudění je nutné věnovat pozornost parametrům výpočetní sítě a pokud to vyžaduje charakter výpočtu (je požadována vysoká přesnost predikce konvektivního přenosu tepla resp. tlakových ztrát), je vhodné provést i studii závislosti na výpočetní síti a vyhodnocení pomocí experimentálních dat.

2.4 MATEMATICKÝ MODEL

Nedokonalost matematického popisu reálných dějů je nevyhnutelná, ale měla by vždy být přijatelně malá. Zejména by však měl existovat kvantifikovaný odhad chyby, které se jednotlivými zjednodušeními dopouštíme a teprve na základě takového odhadu by mělo dojít k přijetí nebo odmítnutí jednotlivých aproximací. Situace v oblasti matematického modelování proudění mimo laminární režim je však zcela jiná.

2.4.1 Rozšířený systém Navier-Stokesových rovnic

Rozšířeným systémem Navier-Stokesových rovnic rozumíme systém tvořený rovnicí kontinuity, rovnicemi přenosu hybnosti a často také rovnicí přenosu energie a rovnicemi přenosu dalších skalárních veličin (například koncentrací chemických látek). Tyto rovnice lze psát ve čtyřech základních formách: mohou to být parciální diferenciální rovnice nebo integrální rovnice a v obou těchto případech je lze psát buďto v tzv. konzervativní (divergenční) nebo nekonzervativní formě. Přehled tohoto systému, nejčastěji v konzervativní formě parciálních diferenciálních rovnic, je nezbytnou součástí většiny monografií z této oblasti (kromě vynikající Andersonovy knihy [1] např. [6], [7], [8]) a také všech manuálů CFD programů. Také autor tohoto pojednání uvedl úplný přehled řídících rovnic dynamiky tekutin ve své disertační práci [11] a proto se jeho zařazení zde jeví jako nadbytečné.

Jaká jsou však zjednodušení, obsažená v těchto rovnicích? Pokud hovoříme o laminárním proudění, pak se jedná v nejhorších případech o zjednodušení v popisu materiálových vlastností, avšak vlastní rovnice přenosu jsou přesné. Jiná zjednodušení se do modelů dostávají, pokud se jedná o úlohy, kde k proudění tekutin přistupují další fyzikální nebo chemické procesy. Ani pak ale nejde o zjednodušení v rovnicích přenosu, ale v přidružených modelech, například v chemickém reakčním mechanismu. Díky tomu lze považovat matematické (i numerické) modelování laminárního režimu proudění za zvládnuté, viz například výsledky modelování laminárního spalování publikované v [12], [13], [14].

Zcela jiná je situace, pokud se věnujeme proudění mimo laminární režim. Přechodové i vyvinuté turbulentní proudění je z hlediska matematického modelování stále aktuální výzvou. V principu sice nic nebrání tomu, abychom tyto režimy proudění simulovali stejnými rovnicemi jako laminární proudění, avšak v praktických úlohách je to neproveditelné kvůli extrémním

výpočtovým nárokům. Přímé numerické simulace turbulentního proudění (direct numerical simulations, DNS) jsou a ne-li navždy, pak jistě nadlouho zůstanou pouze cenným výzkumným nástrojem [15]. Pro modelování přechodového režimu ale neexistuje jiný adekvátní nástroj než DNS a tak se tomuto typu proudění konstruktéři ještě dlouho nepřestanou vyhýbat.

2.4.2 Turbulence jako klíčový problém v CFD

Skutečně, při bližším pohledu na hlavní dosud nevyřešené problémy spojené s modelováním proudění tekutin, je turbulence vždy alespoň v pozadí přítomná. Na turbulenci je přitom složité a špatně uchopitelné zejména to, že je chaotická jen částečně, koherentní struktury v turbulentním proudění mají naopak úzkou vazbu na hlavní proud (viz ilustrativní fotografie v obrázku 2-6). Povaha turbulentního proudění je natolik složitá, že při pokusech o její přibližné modelování jsme nuceni přijímat velmi silné předpoklady, pokud výsledkem má být výpočetně zvládnutelný model.





Obr. 2-6 Fotografie turbulentních proudění (převzato z [16])

Modely turbulentního proudění používané v praxi vycházejí v naprosté většině případů z Navier-Stokesových rovnic upravených pomocí Reynoldsova (časového) průměrování a označují se proto zkratkou RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes). Mezi těmito modely turbulentního proudění, které se také označují jako metody momentového uzavření, převažují již více než třicet let modely postavené na myšlence gradientního přenosu v turbulentním proudění (především známé modely k- ε a k- ω v různých variantách) [17], [18].

Myšlenka časového průměrování turbulentního proudění je velmi přirozená, neboť pro inženýrský pohled na proudění a většinu jevů v něm probíhajících, je znalost průměrných hodnot zcela dostatečná. RANS modely tedy pracují pouze se středními hodnotami veličin, a to tak, že vliv turbulentních vírů na proudění (přenos hybnosti) nahrazují pomocí umělé turbulentní viskozity, případně tenzoru tzv. turbulentních napětí, nebo (v případě modelů vyšších řádů) velkým počtem proměnných, jejichž fyzikální význam je velmi abstraktní. Turbulentní přenos hmoty a tepla, který ve skutečnosti probíhá vířením, přitom nahrazují efektivním zvýšením difuzivity o několik řádů a to stejně jako u viskozity buďto izotropně, nebo se směrovou závislostí.

V uvedeném postupu se však skrývá mnoho nepřesností. Konkrétně jde například o fakt, že k turbulentnímu přenosu dochází i ve směru opačném ke gradientům průměrovaných veličin, který je v přímém rozporu s předpoklady RANS modelů. Celkově se ukazuje, že vztah turbulentních vírů k hlavnímu proudu není univerzální a nedá se dobře popsat žádným z RANS modelů, viz např. [19]. Přestože v mnoha situacích se tyto modely osvědčily, jejich použití v nových typech úloh je vždy třeba vyhodnocovat pomocí naměřených dat.

2.4.3 Turbulentní separované proudění

Separace proudu tekutiny je velmi častým jevem v mnoha aplikacích. K separaci dochází díky silnému negativnímu gradientu tlaku například v difuzorech nebo na leteckých profilech, případně díky náhlým změnám v geometrii zařízení, například při prudkých změnám průtočného průřezu

(zpětný schod) nebo při obtékání překážek. Charakter proudění v separovaných zónách a zejména charakter proudění v blízkosti stěn uvnitř těchto oblastí je velmi odlišný od běžných zákonitostí v turbulentních mezních vrstvách, viz např. přehledové práce [20], [21], [22].

Zejména se ukazuje, že tzv. logaritmický zákon, který je základem okrajových podmínek na stěnách v turbulentním proudění, v separovaných cirkulačních zónách neplatí. Naopak, jak ukázala mnohá měření a jak bylo nedávno také teoreticky dokázáno [23], [24], zákonitosti platné v těchto oblastech jsou výrazně odlišné. Proto všechny modely, které používají pro okrajové podmínky na stěnách tzv. stěnové funkce postavené na logaritmickém zákonu, jsou výrazně nepřesné v predikcích konvektivního přenosu hmoty a tepla uvnitř separovaných cirkulačních oblastí. Existuje sice alternativní možnost, jak vytvořit okrajovou podmínku na stěně, ale její nevýhodou je nutnost použít v blízkosti stěn velmi jemnou výpočetní síť.

2.4.4 Vířivé turbulentní hoření

Průmyslové plynové difúzní hořáky jsou téměř vždy vybaveny tzv. poutačem plamene (vířičem), což bývají lopatky umístěné do přívodu vzduchu, které dávají proudění v plameni tangenciální složku rychlosti. Tento způsob stabilizace je spolehlivý, levný a při vývoji hořáku je možné pomocí vhodných úprav geometrie poutače výrazně ovlivnit tvar plamene. Podobně i jiné typy hořáků (například na práškové uhlí) bývají konstruovány tak, že proud vzduchu má výraznou tangenciální složku rychlosti. Taktéž při výzkumu plynových hořáků se sníženými emisemi NO_x, který probíhá na Ústavu procesního a ekologického inženýrství, se používají hořáky se stabilizací plamene pomocí lopatkového vířiče, jako na obrázku 2-7.



Obr. 2-7 Řez experimentálním hořákem se sníženými emisemi oxidů dusíku. Hořák má stupňovitý přívod plynu do primární tryskové hlavy a čtyř sekundárních hlav.

Vířivost proudu na výstupu z hořáku je velmi důležitým konstrukčním parametrem a proto se používají různé formy tzv. vírového čísla (swirl number) pro jednoznačný popis charakteru vstupního proudu vzduchu [25], [26]. Jak je dokumentováno v [27] a jak dokazují publikace z poslední doby (např. [28]), postupem času se nejpoužívanější formou stal vztah, udávající poměr axiálního toku tangenciální hybnosti a axiálního toku axiální hybnosti.

Predikce vířivého hoření pomocí RANS modelů turbulence se v minulosti ukázala jako výrazně problematická. Závěry učiněné například v IFRF (International Flame Research Foundation) při výzkumu vířivých hořáků na práškové uhlí [29] či skupinou kolem M.G. Carvalho při studiu hořáků na kapalná paliva [30] a znovu v poslední době pro plynné palivo [31] ukázaly, že predikce vířivých hořáků pomocí RANS modelů je velmi složitá. Důvody toho, proč jsou predikce vířivých hořáků pomocí RANS modelů výrazně odlišné od měření, zatímco predikce nevířivých hořáků se

ukazují jako spolehlivé [32], nejsou přesně známé. Faktem nicméně zůstává, že skutečně spolehlivé predikce vířivých hořáků se objevily až v poslední době a využívají vesměs dynamických výpočtů metodami přímého modelování velkých vírů (tzv. Large Eddy Simulations, LES) viz např. [33], [34], [35], takže jsou řádově náročnější na výpočetní hardware než RANS modely. To je také důvod, proč se dosud, až na výjimky, jedná jen o konstrukčně velmi jednoduché hořáky. Pouze na pracovištích jako je Centrum pro výzkum turbulence Stanfordské univerzity, kde dostupné výpočetní kapacity jsou na nejvyšší světové úrovni (včetně největšího současného superpočítače Blue Gene se 130 000 procesory), se dle dostupných informací pokoušejí o simulace skutečně průmyslově relevantních zařízení [36].

Cílem výzkumu vířivých hořáků na ÚPEI proto není přesná predikce všech vlastností v celém objemu plamene. Namísto toho je cílem využít segmentové konstrukce spalovací komory s monitoringem odvedeného tepla v jednotlivých sekcích pro empirické naladění CFD modelu. Lze předpokládat, že tímto způsobem bude možné sladit alespoň přibližně predikce délky plamene se skutečností. Důvody pro optimismus lze hledat v dobrých zkušenostech jiných autorů při řešení podobného úkolu, dokonce v podobné konfiguraci (viz [30], [37]), ačkoliv zde šlo o predikci vlastností uvnitř plamene, nikoliv o tepelné toky do stěn.

Z literatury není autorovi znám žádný dřívější pokus o podobnou analýzu tepelných toků do stěn spalovací komory u vířivého plamene. Segmentová konstrukce spalovací komory s vodním chlazením není unikátní, avšak dosud nikdy nebyla vybavena potřebnou instrumentací (měření průtoků a teplot). Ověřování vypočtených tepelných toků do stěn pomocí hodnot naměřených bylo publikováno mnohokrát (například v [38] pro elektrárenský kotel na práškové uhlí), avšak jednalo se vesměs o lokální (bodové) měření tepelného toku.

První výsledky výpočtů ukazují, že predikce vířivého hoření s hořákem se sníženou produkcí oxidů dusíku jsou skutečně značně vzdálené od naměřených údajů. Navíc se ukázalo, že nestabilita, způsobená zakřivením přívodu spalovacího vzduchu, je pravděpodobně příčinou pro velmi nereálný průběh odvodu tepla při ustáleném výpočtu. Ustálený výpočet byl proveden na čtvrtině geometrie hořáku a spalovací komory (viz publikace [39], [40]) a byl postaven na předpokladu, že nerovnoměrnost přívodu vzduchu do hořáku není pro proudění ve spalovací komoře a pro tvar plamene významná. Provedené výpočty tento předpoklad vyvracejí, ale i když predikce při simulaci celé komory jsou realističtější, stále je délka plamene příliš velká, jak dokumentuje obrázek 2-8.



Obr. 2-8 Srovnání naměřeného průběhu odvodu tepla do pláště komory s výpočtovými predikcemi. Čtvrtinový model je vybaven okrajovou podmínkou rotační periodicity a jeho řešení je ustálené. Model celé komory včetně přívodu vzduchu k hořáku byl řešen jako dynamický a uvedené profily jsou okamžitými hodnotami (po ustálení).

2.4.5 Atomizace

Při spalování tekutých paliv, ale i při mokrém praní spalin a v dalších aplikacích, se využívají spreje, jejichž vlastnosti (úhlové rozložení velikosti a četnosti kapek na výstupu z trysky) mají často zásadní vliv na provozní vlastnosti daného procesu. Z pohledu jednotek pro termické zpracování odpadů je další důležitou aplikací rozprašování redukčního činidla při selektivní nekatalytické redukci oxidů dusíku (SNCR).

Ve všech třech uvedených aplikacích je pro návrh procesu, a tedy pro jeho modelování, velmi důležitá znalost vlastností spreje. Bohužel se ukazuje, že predikce vlastností spreje, založená pouze na geometrii trysky a průtoku dané tekutiny – atomizace, je extrémně složitý problém, který doposud nebyl ani zdaleka uspokojivě vyřešen [41]. Při experimentálním zkoumání narážejí současné metody na problémy spojené s množstvím tekutiny obsažené v malém prostoru, které znemožňují podrobně prozkoumat oblasti, kde k atomizaci dochází [42], [43]. Složitost atomizace spočívá především ve faktu, že nejde o deterministický jev, podobně jako turbulence je při detailním zkoumání dosti chaotická a přesto její statistický výsledek ve formě populace kapiček lze snadno popsat.

Atomizace v některých nejčastěji používaných typech trysek byla dostatečně prozkoumána, takže jsou k dispozici empirické modely atomizace, např. [44], [45]. Přesto však je při jejich použití nutná značná opatrnost, protože většina z nich předpokládá alespoň dílčí experimentální informace o spreji vytvářeném danou konkrétní tryskou. Navíc, modely atomizace jsou vesměs vytvořeny a ověřeny pro jedinou kapalinu, obvykle vodu. Pokud se jedná o rozprašování kapaliny s výrazně odlišnými fyzikálními vlastnostmi, může atomizace probíhat podstatně jiným způsobem.

2.5 NUMERICKÝ MODEL

Na rozdíl od metody konečných prvků nejsou u metody konečných objemů k dispozici žádné odhady pro nepřesnosti vznikající nepřesným numerickým řešením rovnic matematického modelu. Nepřesnosti numerického řešení jsou proto v reálných úlohách jen obtížně oddělitelné od odchylek způsobených zjednodušeným matematickým popisem. Celkové odchylky CFD modelu lze samozřejmě určit pomocí experimentálního ověřování, ale pouze podrobná analýza je schopna odhalit jejich konkrétní zdroje.

Naproti tomu jsou zdroje numerických nepřesností dobře známé, a je proto možné zaměřit se při výpočtech na minimalizaci jejich vlivu. Těmito zdroji jsou zejména diskretizace řídících rovnic a nedostatečná konvergence výpočtů. Kromě očekávaných nepřesností matematického modelu a numerického řešení existuje však i zásadní možnost, že řešení není jednoznačné.

2.5.1 Diskretizace

Hlavním zdrojem chyb je samozřejmě diskretizace řídících rovnic na kontrolních objemech. Bohužel, stabilita výpočtů je při aplikaci diskretizačních schémat vyšších řádů často narušena. Jedním z důvodů bývá nesplnění podmínky ohraničenosti. Pomocí velmi jednoduchých příkladů lze ukázat, že i diskretizační schémata, u kterých je deklarováno splnění této podmínky, ji nejsou schopna plně respektovat.

Zřejmě nejjednodušší možnou úlohou, která umožňuje vyšetřit vlastnosti diskretizačních schémat, je úloha používaná pro demonstraci numerické difúze. Jde o proudění neviskózní tekutiny (které je tak automaticky laminární a má nulový součinitel difúzního přenosu). Specifikace tohoto příkladu je schématicky znázorněna na obrázku 2-9. Jedná se o čtvercovou oblast (vrcholy ABCD), kde tekutina proudí zcela bez překážek ve směru úhlopříčky CB. Stěnou AC vtéká tekutina odlišená určitou vlastností od tekutiny vtékající do oblasti stěnou CD. Díky tomu, že proudění je neviskózní, nemělo by docházet k žádnému promíchávání a tekutina by měla z oblasti vycházet nezměněná, tzn. co vchází stěnou AC, mělo by vycházet beze změny stěnou AB

a podobně na stěnách DC a DB. Tekutina může být na vstupu označena různými způsoby, např. koncentrací značkovacího barviva, také může mít jinou velikost rychlosti (ale vždy stejný směr) nebo dokonce teplotu (tepelná vodivost v neviskózní tekutině je také nulová).



Obr. 2-9 Schematické znázornění příkladu pro vyšetřování numerické difúze

Numerický výpočet však ukazuje, že i přes popsané vlastnosti proudící tekutiny dochází k promíchání obou částí tekutiny, tzn. napříč přes úhlopříčku CB. Tento přenos však nemá žádnou fyzikální podstatu, jde výlučně o efekt způsobený diskretizací úlohy. Proto se tomuto jevu říká numerická nebo také falešná difúze. Srovnání několika numerických schémat pomocí této úlohy (tekutina na vstupech je označena různou teplotou) ukazuje graf na obrázku 2-10.

Podrobná data z tohoto výpočtu (provedeném v programu FLUENT v. 6.3) navíc ukazují, že u schémat druhého a třetího řádu dochází k výkyvům značkovací vlastnosti (například teploty) mimo meze dané vlastnostmi vstupních proudů (výjimkou je schéma QUICK, použitelné pouze na obdélníkových, případně hexagonálních sítích). Toto pozorování je překvapivé zejména u schémat druhého řádu využívajících opatření, která by měla takovému chování zabraňovat [46].



Obr. 2-10 Průběhy přenášené veličiny (teplota) na úhlopříčce AD

Omezit numerickou difúzi lze v zásadě pouze dvěma způsoby. V první řadě použitím schématu vyššího řádu, což většinou bývá efektivnější cesta. Druhou cestou je zahuštění výpočetní sítě. V inženýrských úlohách, které mají 3D geometrii, je však výrazné zjemňování dělení výpočtové oblasti často limitováno dostupnými výpočetními prostředky. Je třeba zmínit, že počet

aritmetických operací roste s počtem kontrolních objemů exponenciálně. Přibližně lineárně rostou nároky na velikost operační paměti.

Bohužel v případech, kdy neohraničenost diskretizačních schémat vyšších řádů způsobuje divergenci výpočtu, je jedinou cestou pro zlepšení kvality predikcí zjemňování dělení výpočtové oblasti. V reálných výpočtech to často znamená, že ve druhém či třetím řádu přesnosti lze řešit pouze některé z řídících rovnic.

2.5.2 Neúplná konvergence

Méně častou příčinou nepřesnosti numerických výsledků bývá nedostatečná konvergence výpočtu. Taková situace nastává obvykle v případech, kdy proudění v úloze vykazuje nestabilitu, která se projevuje kolísáním (oscilacemi) bodových vlastností proudící tekutiny v průběhu výpočtu. Jedinou korektní cestou pro vyřešení takové situace je přidání času jako další nezávislé proměnné do formulace úlohy. Ukazuje se totiž (dle zkušeností autora), že bez přítomnosti akumulačních členů v řídících rovnicích může být vliv nestability "rozpuštěn" do ostatních členů, což může znamenat i poměrně velké chyby v integrálních bilancích.

Příklady, které demonstrují uvedený závěr, jsou obvykle výpočty turbulentního proudění v geometricky složitých oblastech; často se tento jev vyskytuje u simulací spalování. Nedokonale konvergovaná úloha pak typicky vykazuje výraznou chybu (až do řádu desítek procent) v celkové energetické bilanci.

2.5.3 Jednoznačnost řešení

Tato otázka je dle povědomí autora dosud otevřená. Jednoznačnost je třeba posuzovat metodami matematické analýzy aplikované na systém řídících rovnic. Zatímco pokusy o odpověď existují pro základní systém Navier-Stokesových rovnic ve třech prostorových dimenzích [47], ukazuje se, že zatím nejsou správné (jak později uznal sám autor uvedené publikace, viz taktéž [47]). Jednoznačnost řešení všech existujících rozšířených systémů řídících rovnic tak zůstává neprokázána. Je otázkou, jak významná je tato možnost v praxi. Získané výsledky není zvykem z tohoto pohledu posuzovat a lze se domnívat, že vesměs oprávněně. Prokázané případy nejednoznačných řešení však existují, což je znepokojivé.

Lze uvést příklad nedávné publikace renomovaných autorů v recenzovaném časopise [37], kde jsou dokumentována dvě různá řešení pro vířivé spalování plynu, závislá na způsobu inicializace výpočtu. V tomto případě šlo konkrétně o metodu, která je použita pro zapálení plamene a autoři dokazují, že různé metody zapálení vedou v jejich úloze ke kvalitativně zcela odlišným řešením. Pro vyhodnocení autoři použili teplotu v blízkosti hořáku a výpočtová řešení srovnávají s naměřenými daty, viz obrázek 2-11. Díky dostupnosti tohoto srovnání byli autoři schopni učinit závěr, že jedno z řešení je správné, neboť úzce koresponduje s naměřenými daty. Druhé řešení je diametrálně rozdílné a dle srovnání s experimentem také zcela nesprávné. Přesto obě řešení vyhovují z hlediska konvergence, a pokud by nebyla k dispozici naměřená data, bylo by těžké rozhodnout o tom, které z nich je lepší.



Obr. 2-11 Srovnání dvou různých numerických řešení a naměřeného rozložení teplot v blízkosti vířivého hořáku. Na pravých stranách obrázků a) i b) jsou naměřená data, na levých výsledky výpočtu. Řešení a) je viditelně zcela nesprávné, zatímco b) je blízké naměřeným datům. (Převzato z [37].)

2.6 ANALÝZA VÝSTUPNÍCH DAT, OVĚŘOVÁNÍ A LADĚNÍ MODELU

Bilanční model bývá obvykle podkladem pro stanovení okrajových podmínek výpočtu proudění. Zároveň je však bilanční modelování jedním z hlavních nástrojů, umožňujících primární kontrolu výsledků CFD výpočtů, neboť splnění integrálních bilančních poměrů je nutnou podmínkou správného řešení. Umožňuje také zkontrolovat, zda při zadávání CFD výpočtu nedošlo k chybě.

Jak již bylo zmíněno, často bývá nutné naladit některé části modelu pro konkrétní aplikaci, protože ne všechny parametry okrajových podmínek jsou dopředu známé. Jako příklad lze uvést emisivitu stěn spalovací komory, která ovlivňuje množství přeneseného tepla. Takových ne zcela spolehlivě známých parametrů může výpočet obsahovat více, závisí přitom na konkrétních fyzikálních jevech, které simulace modeluje.

Závažnější ladění modelů je předmětem trvajícího výzkumu. Například v oblasti modelování turbulence byla vyvinuta celá plejáda modelů, přičemž mnoho z nich, pravděpodobně většina, byla koncipována jako vylepšené verze starších modelů s cílem napravení nedostatků v konkrétní situaci, viz např. [48], [49]. Oblastí, ve kterých matematické modely nejsou dostatečné pro popis fyzikální podstaty dějů a vyžadují další ladění, je však mnoho, jmenujme za všechny ještě alespoň atomizaci kapaliny na výstupu z trysek [50].

Současné komerční CFD programy s touto potřebou stálého ověřování a ladění modelů počítají a nabízejí řadu možností pro potřebné zásahy. Tyto zásahy začínají u jednotlivých empirických parametrů a končí u celých uživatelských knihoven, které jsou potřeba pro řešení speciálních typů úloh, jejichž modelování není příliš obvyklé, a proto je výrobci CFD programů do svých programů neimplementují.

3 JEDNOTKA PRO ENERGETICKÉ VYUŽITÍ ODPADŮ JAKO REPREZENTANT TECHNOLOGICKÉ LINKY V PROCESNÍM PRŮMYSLU

Pojem "procesní průmysl" je z oborového hlediska nesmírně široký. Rozsah možného využití metod CFD tomu odpovídá. Není proto možné jmenovat pouze jedinou technologii, která by byla pro procesní průmysl jednoznačně nejtypičtější. Volba reprezentativní technologie v této práci vychází z převládajícího zaměření pracoviště autora a souvisí se skladbou v současnosti řešených výzkumných projektů.

Procesní inženýrství se zabývá jak vazbami mezi jednotlivými aparáty (tj. reaktory, výměníky tepla, spalovací komory, čerpadla, ventilátory atp.), ve kterých probíhají jednotkové operace (reakce, výměna tepla, spalování atd.), tak popisem jednotkových operací uvnitř aparátů. Obvyklý postup při navrhování konkrétní procesní linky tedy staví na bilancích, tepelných a hydraulických výpočtech, které slouží k základnímu dimenzování aparátů. V dalších krocích je nutné se zabývat dalšími otázkami v rámci procesu, jako je doprava materiálů, regulace proudů, automatické řízení či bezpečnost. Při těchto krocích se vychází, je-li to možné, ze známých výpočtových vztahů pro jednotlivé aparáty, které jsou často empirické.

Převažující způsob popisu jednotkových operací v procesním inženýrství je bilanční, tedy integrální, což umožňuje pružně pracovat s návaznostmi jednotlivých aparátů. CFD modelování je z tohoto pohledu doplňkovou činností, k jejímuž využití procesní inženýr sahá, teprve pokud množství informací o některém aparátu a jednotkové operaci, která v něm probíhá, je nedostatečné.

Technologické a konstrukční navrhování zcela nových aparátů často vyžaduje vyrobení a odzkoušení prototypu či alespoň zmenšeného laboratorního modelu. Pokud se v této fázi objeví problémy s funkcí prototypu, může to být další příležitost pro využití CFD k identifikaci a odstranění problémů, tzv. "troubleshooting". Podobné situace samozřejmě nastávají i v průmyslových provozech, kde správná identifikace příčiny problému má pro provozovatele mnohdy velmi vysokou hodnotu. Celkově lze tedy identifikovat tři základní motivace pro CFD modelování: podpora při konstruování, identifikace a odstraňování problémů v činnosti zařízení, a konečně optimalizace (provozní či konstrukční). Souhrnně byly tyto postupy dokumentovány na konkrétních příkladech z oblasti termického zpracování odpadů v publikaci [51].

V této kapitole je stručně představena technologie jednotky pro energetické využití odpadů, která tvoří rámec pro výzkumné práce, zaměřené na jednotlivé aparáty. Mezi výzkumnými aktivitami zařazenými do textu práce převažují ty, které již byly dokončeny, ale pozornost je věnována i rozpracovaným oblastem. Z důvodu prostorového omezení bylo však nutné v této zkrácené verzi popis konkrétních analýz vynechat.

3.1 TYPICKÁ JEDNOTKA PRO TERMICKÉ ZPRACOVÁNÍ ODPADŮ S VYUŽITÍM ENERGIE

Typickou jednotkou pro termické zpracování odpadů by mohla být spalovna komunálního odpadu, protože tato zařízení zpracovávají největší množství odpadů. Mohla by jí být ale i spalovna průmyslového nebo nebezpečného odpadu, neboť ty jsou nejvíce rozšířené. Mezi spalovnami nebezpečných odpadů se navíc vyskytují dva hlavní typy jednotek, které se liší v prvním stupni termického zpracování (spalovací vs. zplyňovací). V této kapitole (3.1) jde však pouze o naznačení aparátové skladby spalovacích jednotek a vytvoření kontextu, potřebného pro níže uvedené aplikace CFD na jednotlivá zařízení. Proto byla za typickou jednotku vybrána spalovna nebezpečného odpadu. Je nutné poznamenat, že výběr studovaných zařízení není omezen na jeden konkrétní druh spalovny (tedy i jeden druh odpadu), vychází nicméně ze zaměření na spalovací (nikoliv zplyňovací) jednotky.

Pro dosažení úplného spálení nebezpečných látek je ve spalovnách průmyslových a nebezpečných odpadů nejčastěji využíváno dvoustupňové spalování, naznačené spolu se zbytkem technologie na obrázku 3-1. První stupeň spalování je obvykle realizován v rotační peci, kde proběhne téměř úplné vyhoření odpadu – uvolňuje se zde téměř veškeré spalné teplo. Za rotační pecí následuje dohořívací komora, která zajišťuje dostatečnou zdržnou dobu při vysokých teplotách, tak aby byly zneškodněny i nejodolnější nebezpečné látky. Potřebná teplota je v dohořívací komoře udržována přídavnými hořáky, které spalují "čisté" palivo, obvykle zemní plyn.

Spaliny vycházející z dohořívací komory obsahují velké množství tepelné energie, která je obvykle využita v kotli pro výrobu přehřáté páry. Pára se spotřebovává jednak v technologii spalovny, případně může být zhodnocena také v turbínovém generátoru elektrické energie. Ochlazené spaliny jsou mechanicky a chemicky zbaveny jemných prachových částic a škodlivých produktů tepelné dekompozice odpadů. K tomu dochází v několika aparátech, mezi nimiž se obvykle vyskytuje filtr, mokrá vypírka a adsorbér.



Obr. 3-1 Typické uspořádání spalovny nebezpečného odpadu (upraveno z [52])

Spalovny komunálních odpadů používají obvykle jednostupňové spalování na roštu, umístěném přímo v kotli, který slouží zároveň pro výrobu páry. Konstrukce aparátů v sekci čištění spalin je obvykle také jiná, než u spaloven nebezpečných odpadů, což je dáno jinými koncentracemi znečišťujících látek a také řádově vyššími průtoky.

3.2 APLIKACE U CHARAKTERISTICKÝCH APARÁTŮ

Výše popsaná technologie spaloven zahrnuje celou řadu prvků, jejichž modelování pomocí CFD může být z různých hledisek přínosné. Postup prezentace jednotlivých analýz v plné verzi práce odpovídá řazení jednotlivých aparátů v lince jednotky pro termické zpracování odpadů, jak je zobrazeno na obrázku 3-1. Začíná proto u modelování difúzních plynových hořáků se sníženými emisemi NO_x, pokračuje přes modelování roštového spalování biomasy a odpadů, tvarovou optimalizaci dohořívací komory, optimalizaci homogenizačních vestaveb spalinovodu, analýzu přídavných Venturiho dýz v látkovém filtru, až k modelování aparátů mokrých vypírek spalin. Jak již bylo řečeno výše, z důvodu omezeného rozsahu byly v tomto zkráceném textu všechny konkrétní analýzy vypuštěny.

4 DALŠÍ APLIKACE VČETNĚ NETRADIČNÍHO VYUŽITÍ CFD

Kromě aplikací z okruhu termického zpracování a energetického využití odpadů se autor práce podílel také na řadě dalších výzkumných a inženýrských výpočtových analýz, z nichž tři jsou uvedeny v této části. Jedná se jmenovitě o modelování výměníku tepla, netradiční metodu modelování tvorby NO_x a modelování jednotky pro termické zpracování odpadní vzdušiny, znečištěné těkavými organickými látkami nebo oxidem uhelnatým. Stejně jako v předchozí kapitole bylo nutné i zde vypustit veškeré podrobnosti. V této zkrácené verzi práce jsou proto uvedena pouze krátká představení studovaných aplikací.

4.1 VÝPOČTOVÝ MODEL VÝMĚNÍKU "VODA – KAL"

Tato aplikace má původ v myšlence nedávno publikované spolupracovníky autora [53], která si klade za cíl prozkoumat možnosti zlepšení stupně odvodnitelnosti čistírenského kalu po úpravě teplem. Obsah vody v kalu totiž významně ovlivňuje ekonomické parametry metod pro jeho zpracování [54]. Simulace výměníku tepla, navrženého pro ohřev čistírenského kalu vodou [9], byla již předmětem diskuse o závislosti řešení na výpočetní síti v kapitole 2.3.2. Plný text práce na tomto místě doplňuje některé konkrétní výsledky výpočtové analýzy.

4.2 *CFD* ANALÝZA KOMPAKTNÍ JEDNOTKY PRO TERMICKÉ ČIŠTĚNÍ VZDUŠIN ZNEČIŠTĚNÝCH *VOC* LÁTKAMI

Analýza, představená v této podkapitole, byla provedena pro zařízení vyvinuté na ÚPEI k tepelné, případně kombinované tepelné a katalytické destrukci VOC a CO. Zařízení se skládá z těsně integrované spalovací komory a výměníku tepla. Výměník tvoří obálku spalovací komory, čímž jsou minimalizovány tepelné ztráty ze zařízení a zároveň je díky tomu uvedené zařízení menší a lehčí než ekvivalent, sestrojený z oddělené spalovací komory a výměníku tepla. Pro ověření a vyladění návrhových výpočtových vztahů jednotky, zejména šroubovicového výměníku tepla, byl postaven prototyp zařízení v provozním měřítku, který byl využit ke sběru naměřených dat. Detailní popis systému pro sběr dat a provedených měření byl publikován v [55] a [56]. CFD model zařízení a ověřování výsledků na měřeních bylo popsán v [57]. Další aspekty provedené CFD analýzy jsou obsaženy v publikaci [51], kde jsou popsány důležité informace, které pomohly k identifikaci zdroje a odstranění problémů v začátcích provozu zařízení.

4.3 SEMI-EMPIRICKÉ MODELOVÁNÍ TVORBY TERMICKÝCH OXIDŮ DUSÍKU

Výpočty tvorby termických oxidů dusíku (NO_x) jsou standardně založeny na faktu, že kinetika jejich tvorby je výrazně pomalejší než kinetika hlavních oxidačních reakcí při spalování plynných uhlovodíkových paliv. Díky tomu je možné s využitím několika zjednodušujících předpokladů počítat hrubé odhady jejich tvorby na základě výsledků simulace, která zahrnuje pouze proudění, přenos tepla a globální (např. jednokrokový) mechanismus spalování. Tato metoda, popsaná například v souhrnné publikaci [58], však neposkytuje ve většině případů dostatečně přesné (tj. kvantitativně spolehlivé) výsledky. Dosahuje v nejlepším případě přesnosti v rozsahu násobků skutečných hodnot emisí. Predikce trendů (citlivosti na změny parametrů) je u tohoto obecného modelů také problematická.

Cílem vyvíjeného semi-empirického modelu je proto odlišný postup, více spoléhající na empirická data a umožňující kvantitativně spolehlivější predikce. Ve srovnání s tradičními plně empirickými metodami (viz např. [59]) je zde očekávána větší schopnost přenositelnosti modelu na hořáky s upravenými konstrukčními parametry nebo při nasazení v jiné jednotce, než jaká byla využita při sběru dat pro tvorbu modelu (v jiné spalovací komoře).

Plný text práce na tomto místě shrnuje hlavní rysy vyvíjeného semi-empirického modelu, dosud dosažené výsledky i plán pokráčování výzkumu v této oblasti.

5 ZÁVĚR

Habilitační práce představuje problematiku CFD modelování se snahou o netradiční pojetí, nahlíží na ni ze strany omezení, kterým je nutné čelit při aplikacích. Zmíněna jsou omezení fundamentální i odstranitelná. Dále práce prezentuje vlastní výsledky autora a jeho spolupracovníků při aplikacích CFD metod v oblasti procesního průmyslu a energetiky a zároveň představuje perspektivní rozpracované směry výzkumu.

Aplikační rámec práce je definován pomocí kompaktní, reprezentativní technologie umožňující vcelku komplexní přístup – jednotky pro termické zpracování odpadů. V tomto kontextu jsou uvedeny všechny konkrétní analýzy, shrnující dosažené výsledky. Podobně jsou mezi již dokončené analýzy zasazeny hlavní směry současného výzkumu autora. Výsledky jednotlivých analýz lze jen stěží shrnout do jediného závěru, neboť jsou relativně pestré. Zahrnují jak jednoznačná doporučení a prakticky využitelné kvantitativní údaje, tak doporučení dalšího výzkumu v oblastech, kde dosavadní práce vedla k otevření nových otázek a specifikaci nových cílů v předmětné oblasti.

6 LITERATURA

- [1] Anderson J.D. Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications, McGraw Hill, 1995
- [2] A.J. Wagner. A practical introduction to the patrice Boltzmann Metod [online]. [cit. 2007-05-07]. URL: http://www.physics.ndsu.nodak.edu/wagner/LBbook.pdf>
- [3] EXA Corporation. Press release May 28, 2002: BMW doubles its PowerFLOW CFD software licenses [online]. [cit. 2007-05-07].

URL: <http://www.exa.com/newsite/frames/newseventsmaster.html>

- [4] Stern F., Wilson R.V., Coleman H.W. a Paterson E.G. Comprehensive approach to verification and validation of CFD simulations Part I: Methodology and procedures. Journal of Fluids Engineering Transactions of the ASME, 123(4): 793-802, 2001
- [5] Wilson R.V., Stern F., Coleman H.W. a Paterson E.G. Comprehensive approach to verification and validation of CFD simulations Part II: Application for RANS simulation of a cargo/container ship. Journal of Fluids Engineering Transactions of the ASME, 123(4): 803-810, 2001
- [6] Patankar S.V. "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation, 1980
- [7] Versteeg H.K., and Malalasekera, W. "An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method", Longman Group Ltd., 1995
- [8] Warnatz J., Maas U., and Dibble R.W. "Combustion", Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996
- [9] Piskovský M., Hájek J., Elseasser T., Kilkovsky B. and Stehlík P., Analysis of Helical Heat Exchanger Sludge-water by CFD, *Heat Transfer in Components and Systems for Sustainable Energy Technologies : Heat-SET 2007*, France (April 18 – 20, 2007)
- [10] Wolfstein M. The Velocity and Temperature Distribution of One-Dimensional Flow with Turbulence Augmentation and Pressure Gradient. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 12:301-318, 1969

- [11] Hájek J. Computation and optimisation of selected processes and equipment with the presence of combustion. Disertační práce, Vysoké učení technické v Brně, 2005
- [12] Smooke M.D., Mitchell R.E., and Keyes D.E. 'Numerical simulation of two-dimensional axisymetric laminar diffusion flames', *Combustion Science and Technology*, **67**, p. 85, 1989
- [13] Warnatz J. 'The structure of laminar alkane-, alkene-, and acetylene flames', 18th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburg, p. 369, 1981
- [14] Dixon-Lewis G., David T., Gaskell P.H., Fukutani S., Jinno H., Miller J.A., Kee R.J., Smooke M.D., Peters N., Effelsberg E., Warnatz J., and Behrendt F. 'Calculation of the structure and extinction limit of a methane-air counterflow diffusion flame in the forward stagnation region of a porous cylinder', 20th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, p. 1983, 1985
- [15] Orszag S.A., and Patterson G.S. 'Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence', *Physical Review Letters*, **28**, pp. 76-79, 1972
- [16] Bakker A. (2003) The Colorful Fluid Mixing Gallery [online]. [cit. 2007-05-07] URL: http://www.bakker.org/cfm/index.htm
- [17] Launder, B.E, and Spalding D.B. "Lectures in mathematical models of turbulence", Academic press, London/New York, 1972
- [18] Wilcox, D.C., "Turbulence modelling for CFD", DCW Industries, Inc., La Canada, California, 1998
- [19] Van Beeck J.P.A.J (editor). Introduction to turbulence modeling V. Von Karman Institute, 2004
- [20] Chang P. Separation of Flow. Pergamon Press, Oxford, 1970
- [21] Eaton, J.K., and Johnston, J.P., A Review of Research on Subsonic Turbulent Flow Reattachment. *AIAA JI*, Vol. 19, pp. 1093-1100, 1981
- [22] Simpson, S.L. Turbulent Boundary Layer Separation, *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 2, pp. 205-234, 1989
- [23] Gorin, A.V., and Sikovsky, D.Ph., Fundamental Laws of Heat and Mass Transfer in Turbulent Flows with Separated Zones. *Industrial Thermotechnics*, Vol. 21(1), pp.10-17, 2000
- [24] Gorin A. Turbulent separated flows in sustainable energy technologies. Heat Transfer in Components and Systems for Sustainable Energy Technologies: Heat-SET 2007, Chambery, France, 18-20 April 2007
- [25] Hagiwara A., Bortz S. and Weber R. Theoretical and experimental studies on isothermal, expanding swirling flows with application to swirl burner design, Results of the NFA 2-1 investigation, IFRF document No. F 259/a/3, 1986
- [26] Weber R., Dugué J. and Horsman H. The effect of combustion on Swirling and expanding flows, Results of the NFA 3-1 investigation, IFRF document No. F 59/a/6, 1989
- [27] Weber R., Dugué J. Combustion accelerated swirling flows in high confinements. Progress in Energy and Combustion Science, Vol 17, pp. 349-367, 1992

- [28] Weigand P., Meier W., Duan X.R., Stricker W., Aigner M. Investigations of swirl flames in a gas turbine model combustor I. Flow field, structures, temperature, and species distributions. Combustion and Flame, Vol. 114, pp. 205-224, 2006
- [29] Weber R., Peters A.A.F., Breithaupt P.P. and Visser B.M. Mathematical modeling of swirling flames of pulverized coal: What can combustion engineers expect from modeling? Journal of Fluids Engineering, Vol 117, pp. 289-297, 1995
- [30] Barreiros, A., Carvalho M.G., Costa M. and F.C. Lockwood. Prediction of the near burner region and measurements of NO_x and particulate emissions in heavy fuel oil spray flames. Combustion and Flame, Vol. 92, pp. 231-240, 1993
- [31] German A.E. and Mahmud T. Modelling of non-premixed swirl burner flows using a Reynolds-stress turbulence closure. Fuel, Vol. 84, pp. 583-594, 2005
- [32] Pfuderer D.G., Neuber A:A:, Fruchtel G., Hassel E.P. and Janicka J. Turbulence modulation in jet diffusion flames: Modeling and experiments. Combustion and Flame, Vol. 106, pp. 301-317, 1996
- [33] Sadiki A., Maltsev A., Wegner B., Flemming F., Kempf A., Janicka J.. Unsteady methods (URANS and LES) for simulation of combustion systems. International Journal of Thermal Sciences, Vol. 45, pp. 760-773, 2006
- [34] Fureby C., Grinstein F.F., Li G. and Gutmark E.J. An experimental and computational study of a multi-swirl gas turbine combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 31(2), pp. 3107-3114, January 2007
- [35] James S., Zhu J. and Anand M.S. Large eddy simulations of turbulent flames using the filtered density function model. *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 31(2), pp. 1737-1745, January 2007
- [36] Akselvoll K., Pierce C and Moin P. Large Eddy Simulations of Combustor Flows, Center for Turbulence Research [online]. [cit. 2007-05-07], URL: http://www.stanford.edu/group/ctr/gallery.html
- [37] Frassoldati A., Frigerio S., Colombo E., Inzoli F. and Faravelli T. Determination of NO x emissions from strong swirling confined flames with an integrated CFD-based procedure. Chemical Engineering Science, Vol. 60, pp. 2851-2869, 2005
- [38] Xu M., Azevedo J.L.T., Carvalho M.G. Modelling of the combustion process and NOx emission in a utility boiler. Fuel, Vol. 79, pp. 1611-1619, 2000
- [39] Šarlej M., Petr P., Hájek J. and Stehlík P., Computational support in experimental burner design optimisation, *Applied Thermal Engineering*, 27: 2727-2731, 2007
- [40] Šarlej M., Petr P., Hájek J. and Stehlík P., Low-NO_x burner design evaluation by CFD, *17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering ESCAPE 17*, Bucharest, Romania, 2007
- [41] Babinsky E., Sojka P.E. Modeling drop size distributions. Progress in Energy and Combustion Science, 28: 303-329, 2002
- [42] Arts T., Boerrigter H., Buchlin J.M., Carbonaro M., Degrey G., Dénos R., Fletcher D., Olivari D., Riethmuller M.L., Van den Braembussche R.A. Measurement techniques in fluid dynamics – An introduction. Von Karman Institute, 2001
- [43] Kuo K.K. (editor). Recent advances in spray combustion: spray atomization and drop burning phenomena, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., Vol 1, 1996

- [44] Soteriou C., Andrews R., Smith M.. Direct Injection Diesel Sprays and the Effect of Cavitation and Hydraulic Flip on Atomization. SAE Paper 950080, SAE, 1995
- [45] Schmidt D. P., Nouar I., Senecal P. K., Rutland C. J., Martin J. K., Reitz R. D. Pressure-Swirl Atomization in the Near Field. SAE Paper 01-0496, SAE, 1999
- [46] Hirsch, C. Numerical computation of internal and external flows, Volume 1: Fundamentals of numerical discretisation, Volume 2: Computational methods for inviscid and viscous flows, John Willey & Sons, 1990
- [47] Smith P. Immortal smooth solution of the free space dimensional Navier-Stokes system. [online]. [cit. 2007-05-07], URL: < http://arxiv.org/abs/math.DG/0609740>
- [48] W. C. Reynolds. Fundamentals of turbulence for turbulence modeling and simulation. Lecture Notes for Von Karman Institute Agard Report No. 755, 1987
- [49] T.-H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu. A New *k c*Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows Model Development and Validation. Computers Fluids, 24(3): 227-238, 1995
- [50] Beck J.C., Watkins A.C. On the development of spray submodels based on droplet size moments. Journal of Computational Physics, 182: 586-621, 2002
- [51] Hájek J., Computational fluid dynamics simulations in thermal waste treatment technology design, optimization and troubleshooting, *Energy*, accepted for publication, 2007
- [52] Stehlík P. and Oral J., Progress and Challenges in Thermal Processing of Various Types of Wastes, Proceedings of the 1st International Conference & Exhibition on Thermal Treatment and Resource Utilization of Wastes, Beijing, China, 2005
- [53] Kilkovsky B., Boran J., Stranak Z., Houdkova L., Jegla Z., Stehlík P., Research and Development of Heat Exchanger "Water-Sludge" and Heat Exchanger "Flue gas-Sludge", 17th international congress of chemical and process engineering CHISA 2006, 9th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction PRES 2006, Proceedings on CD ROM, Prague, 2006
- [54] Houdkova L., Boran J., Ucekaj V., Stehlík P., Impact of Sewage Sludge Dewatering on Economic and Environmental Balance of High Capacity Waste Water Treatment Plant, 17th international congress of chemical and process engineering CHISA 2006, 9th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction PRES 2006, Proceedings on CD ROM, Prague, 2006
- [55] Štulíř R, Stehlík P, Oral J. Compact Equipment for Thermal Treatment of Polluted Air. In: International Conference on Incineration & Thermal Treatment Technologies, Portland, Oregon, USA, 2000
- [56] Štulíř R, Stehlík P, Oral J. Efficient Equipment with Special Heat Exchanger for Thermal Treatment of Polluted Air Experiments, Computations, Applications. Heat Transfer Engineering, 24:60-69, 2003
- [57] Fabikovič V, Stehlík P, Střasák P, Kolář P, Štulíř R, Oral J. Simulation of Compact Equipment for Thermal Treatment of Wastes Using CFD and Experimental Validation. In: Davis GV, Leonardi E, editors. Proceedings of 2nd International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer CHT'01, Queensland, Australia. Begell House Inc, pp. 309 – 316, 2001

- [58] Hill S.C., Smoot L.D., Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems, Progress in Energy and Combustion Science, 26(4-6): 417-458, 2000
- [59] Bébar L., Čaněk J., Kermes V., Stehlík P. and Oral J. 'Low NO_x Burners Recent Development, Equipment, Experience, Modeling', *International Conference on Incineration & Thermal Treatment Technologies*, Philadelphia, Pennsylvania, 2001

ABSTRACT

The habilitation thesis endeavours to present Computational Fluid Dynamics (CFD) in a nontraditional way, by focusing on constraints one has to face in applications. The constraints discussed include both fundamental and removable ones. The thesis further cumulates results of previous research performed by the author and his coworkers in the area of process industry. Finally, promising directions of ongoing research are introduced.

Framework for the applications analysed in the work is defined by a compact technology, representative of the process industry and enabling complex approach – thermal waste treatment unit. Most of the case studies are presented within this context, with three exceptions. In a similar vein, finished studies are complemented by the main directions of the author's current research.

Results of the individual case studies cannot be summarised in a single conclusion, as they are quite varied. They include unambiguous recommendations and practical quantitative data as well as proposals for further research in areas, where the previous work has led to new questions and specification of new objectives.