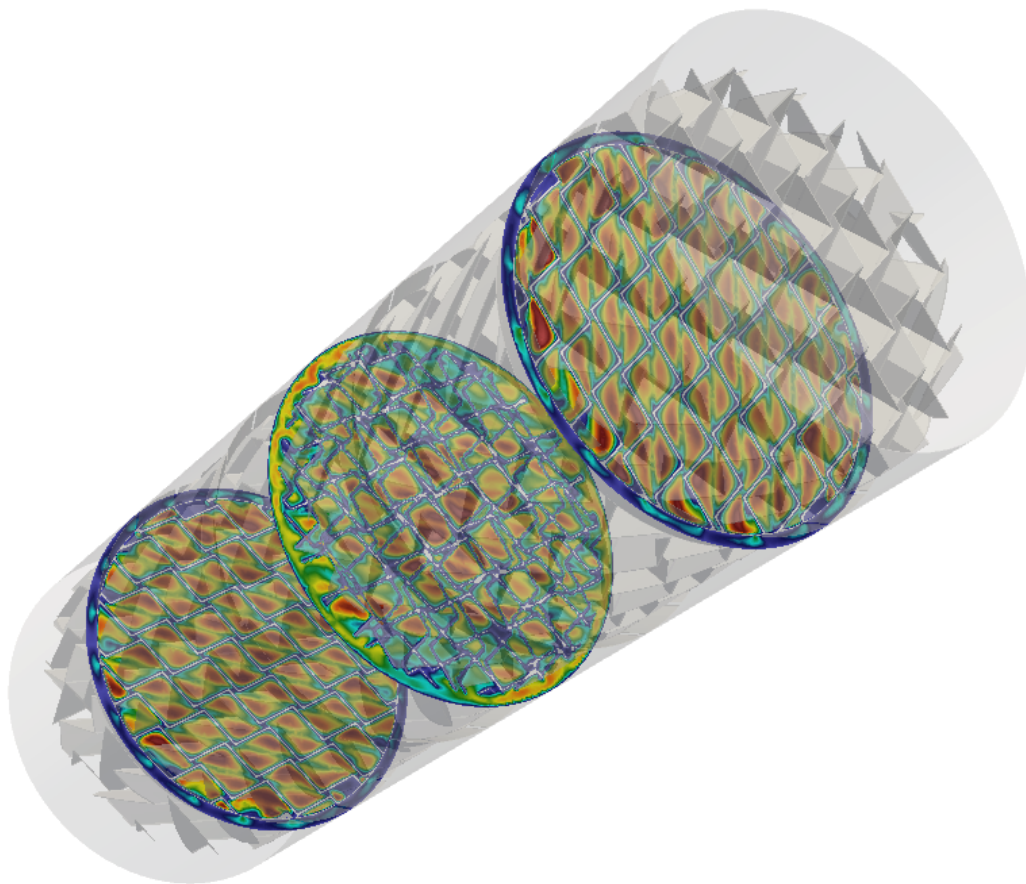


## 2. seminář VŠCHT k OpenFOAM OpenFOAM na VŠCHT



13. prosince 2016



ÚSTAV  
CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ



ÚSTAV  
MATEMATIKY



VYSOKÁ ŠKOLA  
CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ  
V PRAZE

# Obsah

Modelování porézního média na základě dat z rentgenové mikrotomografie ( <i>Adéla Arvajová</i> )	2
Numerická simulace hoření methanu ( <i>Anna Čížinská</i> )	3
Modelování proudění v separačních kolonách ( <i>Martin Isoz</i> )	4
Užití řešiče FireFOAM v požárním inženýrství ( <i>Milan Jahoda</i> )	5
OpenFOAM a koloidní disperze: Spojení CFD a metody diskrétních elementů (DEM) ( <i>Martin Kroupa, Juraj Kosek, Miroslav Šoóš</i> )	6
Vliv diskretizace konvekčních členů VoF-Navier-Stokesových rovnic při simulaci kapilárními řízenými ději ( <i>Jakub Smutek</i> )	7
CFD simulace vícefázového proudění na nakloněné desce: porovnání smáčivosti různých kapalin ( <i>Martin Šourek</i> )	8
Seznam přednášejících	9

# MODELOVÁNÍ PORÉZNÍHO MÉDIA NA ZÁKLADĚ DAT Z RENTGENOVÉ MIKROTOMOGRAFIE

Adéla Arvajová

arvajova(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav chemického inženýrství*

Filtr pevných částic je zařízení používané ve výfukovém potrubí dieselových a nově také benzínových automobilů. Jak název napovídá, slouží k zachycení pevných částic, které vznikají v motoru jako produkt nedokonalého spalování. Zařízení je tvořeno sítí rovnoběžných kanálků, které mají vždy jeden konec zaslepený, aby byl proudící plyn obsahující částice (saze) nucen projít porézní stěnou filtru. Tím však vzrůstá tlaková ztráta ve výfukovém potrubí.

Materiál použitý k výrobě filtrů pevných částic musí splňovat vysoké požadavky na mechanickou a tepelnou odolnost a vykazovat dostatečnou filtrační účinnost. Pro výběr vhodného materiálu filtru je zapotřebí provést poměrně rozsáhlý soubor měření a experimentů, což je časově i finančně náročné. Užitečný nástroj v těchto případech je modelování porézního média v mikroměřítku na základě znalosti charakteristiky materiálu z dostupných analytických metod, jako je elektronová mikroskopie či rentgenová tomografie.

V rámci této studie byla k dispozici data z rentgenové mikrotomografie obsahující údaje o jednotlivých voxelech v podobě čísel od 0 do 1 v rozlišení  $1,08 \mu\text{m}$  na 1 hranu voxelu. Pro vygenerování souboru blockMeshDict potřebného k vytvoření výpočetní sítě utilitou blockMesh pro OpenFOAM byl vytvořen program GeomGen v jazyce Fortran, neboť nebylo možné sehnat dostupný komerční software pro tento specifický případ. Na vzniklé výpočetní síti bylo studováno proudění a tlaková ztráta za použití řešiče simpleFoam.

## NUMERICKÁ SIMULACE HOŘENÍ METHANU

Anna Čížinská

cizinska(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav chemického inženýrství*

Prezentace se zabývá řešením hoření methanu v uzavřeném prostoru s otevřeným dveřním prostorem. Pro simulace je použito rozšíření řešiče OpenFOAM zaměřené na problematiku hoření – FireFOAM. Cílem práce byla validace upraveného tutoriálu a porovnání výsledných dat ze simulace s experimentálními daty publikovanými v literatuře. Byl počítán vývoj rychlostního a teplotního pole. Bylo zjištěno, že po dosažení pseudo-ustáleného stavu se výsledná data dobře shodovala s experimentálními daty.

## MODELOVÁNÍ PROUDĚNÍ V SEPARAČNÍCH KOLONÁCH

Martin Isoz

isozm(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav matematiky*

V roce 2009 činil, dle společnosti BASF, podíl chemického průmyslu na celkové energetické spotřebě Evropské unie 19%, přičemž energetičtější nejnáročnější technologií tohoto odvětví jsou destilační kolony. I přesto je ale návrh destilačních kolon prováděn převážně na základě odhadů a kopírování již existujících řešení. Jedním z důvodů tohoto stavu je komplexita technologie separačních kolon. Je například prakticky nemožné experimentálně získávat data o proudění v těchto zařízeních.

Z tohoto důvodu je nanejvýš žádoucí disponovat spolehlivými numerickými simulacemi proudění v separačních kolonách. S využitím CFD modelů je následně možné studovat vlastnosti proudění v komplexních vnitřních geometriích plněných kolon. Jako příklady takto získatelných vlastností uved'mě studium schopnosti kolony promíchávat plyn či způsob rotace plynu na styku dvou kanálů strukturovaných výplní.

Charakteristika výplně kolony pro proudění plynu bývá obvykle založena na měření takzvané suché tlakové ztráty. Suchá tlaková ztráta je rozdíl tlaků měřený nad a pod výplní při jednofázovém proudění plynu skrz nesmočenou výplň vztažený na celkovou výšku výplně. Tento měřený parametr je možné využít k validaci numerických simulací.

V průběhu přednášky stručně představíme problematiku simulování dějů v separačních kolonách, projdeme princip automatizované přípravy geometrie strukturované výplně a stručně představíme získané výsledky, zejména napočtené suché tlakové ztráty výplní Mellapak 250.X a Mellapak 250.Y.

## UŽITÍ ŘEŠIČE FIREFOAM V POŽÁRNÍM INŽENÝRSTVÍ

Milan Jahoda

jahodam(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav chemického inženýrství*

Řešič FireFOAM (FM Global, USA) je zaměřen na simulace jevů souvisejících s požáry a obsahuje všechny požadované modely pro předpověď chování požárů včetně pyrolýzy, radiace, tvorby sazí, toku tekutiny u stěny a sdílení tepla v materiálech. Příspěvek ukazuje obecné možnosti řešiče FireFOAM a příklad řešení dynamiky hoření propanu ve cvičném prostoru hasičského polygonu ve Zbirohu.

# OPENFOAM A KOLOIDNÍ DISPERZE: SPOJENÍ CFD A METODY DISKRÉTNÍCH ELEMENTŮ (DEM)

Martin Kroupa, Juraj Kosek, Miroslav Šoóš

kroupam(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav chemického inženýrství*

Koloidní disperze hrají důležitou roli v různých oblastech lidské činnosti, mezi jejich zástupce totiž patří látky jako je mléko, krev, či kosmetické výrobky. Nalézají však uplatnění i v řadě průmyslových procesů či výrobků, jako jsou nátěrové hmoty či polymery. Jejich chování, obzvláště při vysokých koncentracích, je však velmi komplikované, což motivuje vývoj matematických modelů těchto systémů. Model koloidní disperze musí zahrnovat všechny vlivy, které mají na její chování vliv, tedy jak interakce mezi částicemi, vnější síly, kontakt se stěnami nádob, ale především interakci částic s okolním prostředím. Z tohoto důvodu přichází kromě klasických modelů částicové dynamiky (zde metoda diskretních elementů - DEM) na řadu i techniky pro výpočet mechaniky tekutin. Situaci v případě koncentrovaných koloidních disperzí však komplikuje fakt, že částice a tekutina se ovlivňují navzájem. Proto v našem modelu používáme tzv. two-way coupling, tedy techniku, která zohledňuje jak vliv toku na částice, tak vliv částic na tok. Implementace tohoto přístupu vyžaduje propojení existujícího DEM modelu s prostředím OpenFOAMu, což je předmětem tohoto příspěvku. Takto propojený model byl úspěšně využit pro modelování dynamiky koagulace ve stabilizovaných disperzích, velikosti vznikajících agregátů a v neposlední řadě reologie, tedy neneutonského chování těchto systémů.

VLIV DISKRETIZACE KONVEKČNÍCH ČLENŮ VOF-NAVIER-STOKESOVÝCH ROVNIC PŘI  
SIMULACI KAPILARITOU ŘÍZENÝCH DĚJŮ

Jakub Smutek

smutekj(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav matematiky*

Velké množství chemicko-inženýrských procesů je možné simulovat pomocí CFD. Počítačové simulace jsou možnou alternativou pro jejich zefektivnění. V této práci budeme modelovat vícefázové děje řízené kapilárními jevy. Konkrétně se jedná o kapku na vodorovném a nakloněném substrátu. Především se zaměříme na nalezení ideálního diskretizačního schématu pro konvekční člen v Navier-Stokesových rovnicích rozšířených metodou Volume of Fluid.

Bude demonstrováno, že nevhodné použití diskretizačního schématu může vést k nefyzikálnímu řešení. Ukážeme, že pro simulace stacionární kapaliny je nejvhodnější použít schéma Gamma pro advekční člen a schéma interfaceCompression pro kompresivní člen ve VoF rovnici. Diskretizace rychlostního konvekčního členu v Navier-Stokesových rovnicích nemá výrazný vliv na výsledky simulace. Simulace kapky na nakloněném substrátu neodpovídaly reálným experimentům, jelikož u všech schémat se kapka pohybovala příliš rychle. Nicméně jsme našli taková schémata, pro která kapka stéká nejpomaleji. Důvodem nefyzikálnosti řešení může být nevhodný model dynamického kontaktního úhlu implementovaný v softwaru OpenFOAM.



# CFD SIMULACE VÍCEFÁZOVÉHO PROUDĚNÍ NA NAKLONĚNÉ DESCE: POROVNÁNÍ SMÁČIVOSTI RŮZNÝCH KAPALIN

Martin Šourek

sourek(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav matematiky*

Vícefázové proudění lze nalézt v široké škále inženýrských aplikací. Tlak na optimalizaci průmyslových výrob tedy motivuje snahu o co nejlepší pochopení vícefázových toků. Jedním z nástrojů umožňujících studium proudění jsou, díky rozvoji numerické matematiky a výpočetní techniky, počítačové simulace. V této práci je představen jeden z možných přístupů k simulaci vícefázového proudění založený na metodě konečných objemů a metodě objemu kapaliny. Dále je představena implementace těchto metod v řešiči interFoam, který je součástí open source softwaru OpenFOAM. Nástroj interFoam je následně využit pro simulaci stékání kapaliny po nakloněné desce. Nejprve byly simulace validovány na, v literatuře dostupných, experimentálních datech a publikovaných výsledcích simulací. Následně byla porovnávána smáčivost dané desky v závislosti na vlastnostech kapaliny a intenzitě proudění. Na základě dostupnosti experimentálních dat a průmyslového významu byly jako testovací kapaliny vybrány: voda, lehké alkoholy, hexan a heptan. Vzhledem k nastavení numerických experimentů lze získané výsledky využít například k odhadu provozních podmínek nutných pro dosažení předepsané smočenosti strukturované výplně danou kapalinou.

## Seznam přednášejících

Čižinská

Anna, 3

Šourek

Martin, 8

Arvajová Adéla, 2

Isoz

Martin, 4

Jahoda

Milan, 5

Kroupa

Martin, 6

Smutek

Jakub, 7