



národní
úložiště
šedé
literatury

Matematické modelování chování aerosolů v reálném čase

Pušman, Jan
2013

Dostupný z <http://www.nusl.cz/ntk/nusl-166065>

Dílo je chráněno podle autorského zákona č. 121/2000 Sb.

Tento dokument byl stažen z Národního úložiště šedé literatury (NUŠL).

Datum stažení: 17.07.2024

Další dokumenty můžete najít prostřednictvím vyhledávacího rozhraní nusl.cz .

Matematické modelování chování aerosolů v reálném čase

*Doktorand: Mgr. Jan Pušman
Školitel: Ing. Vladimír Ždímal, Dr.*

Matematické a počítačové modelování aerosolů nachází uplatnění v širokém spektru aplikací od atmosférické fyziky a chemie, ochranu životního prostředí přes jadernou bezpečnost po průmyslové aplikace jako je např. produkce nanomateriálů. Následující příspěvek sleduje dva cíle. Prezentovat bližší aspekty matematického modelování aerosolů jako subdisciplíny mechaniky kontinua. Dlouhodobějším cílem autorů je vytvoření nového řešiče dynamiky aerosolu na platformě OpenFOAM. OpenFOAM je volně šiřitelný (ve smyslu všeobecné veřejné licence GNU) soubor CFD knihoven napsaných v jazyce C++. Toto řešení plně implementuje myšlenky objektově orientovaného programování a umožňuje pracovat s vysokoúrovňovou syntaxí kódu, která je velmi blízko konvenční notaci parciálních diferenciálních [1]. Výchozím bodem našeho popisu jsou bilance hmoty, energie a hybnosti. Ústřední roli v matematickém popisu chování dispergované fáze hraje obecná dynamická rovnice (General Dynamic Equation, GDE) [2]. Matematická formulace kompletní úlohy uvažuje nestlačitelný Navierův-Stokesův-Fourierův systém svázaný s evoluční rovnicí (1) řídící vývoj velikostního rozdělení aerosolů a zahrnuje popis fyzikálně chemických procesů koagulace, kondenzace, vypařování a nukleace.

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{x}, t, v)}{\partial t} + \operatorname{div} [n(\mathbf{x}, t, v) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)] - \operatorname{div} [D \nabla n(\mathbf{x}, t, v)] = \\ = \operatorname{div} [n(\mathbf{x}, t, v) \mathbf{c}(\mathbf{x}, t)] - \frac{\partial}{\partial v} [G(v) n(\mathbf{x}, t, v)] + \\ + \frac{1}{2} \int_0^v K(v - v', v') n(v - v', t) n(v', t) dv' - \\ - n \int_0^\infty K(v', v) n(v', t) dv' + s(\mathbf{x}, t, v) - r(\mathbf{x}, t, v). \quad (1) \end{aligned}$$

Význam použitých symbolů: n – funkce popisující rozdělení velikosti částic, \mathbf{x} – kartézské souřadnice, t – čas, v – parametr odpovídající

velikosti částice, u – rychlost disperzní fáze, c – externí silové pole, D – difuzní koeficient, G – koeficient růstu částic, K – koagulační kernel, s – zdroje, r – ztráty.

Obecná dynamická rovnice byla pro potřeby numerického řešení přeformulována na úlohu obsahující pouze transportní rovnice pro váhy a uzly kvadraturní formule. V současnosti je naprogramován řešič pro případ, kdy se v Obecné dynamické rovnici (a tedy i v transportních rovnicích pro váhy a uzly kvadraturní formule) omezíme jen na některé členy. Vyvíjený řešič je využit k realizaci numerického řešení pro konkrétní úlohu na omezené oblasti – 2D kanál.

Literatura

1. S. K. Friedlander. *Smoke, dust and haze: Fundamentals of aerosol behavior*. 1977.
2. H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in physics*, 12:620, 1998.