

# Symulacje wielkowirowe przepływów turbulentnych jednofazowych oraz dwufazowych z fazą rozproszoną

mgr inż. Michał Rajek

Promotor: prof. Jacek Pozorski

## Ogólne wprowadzenie

Turbulentne przepływy dwufazowe z fazą rozproszoną w postaci pęcherzyków gazu, kropeł cieczy lub cząstek stałych stanowią znaczącą grupę przepływów obserwowanych zarówno w środowisku naturalnym, jak i procesach przemysłowych. Należy podkreślić, że zjawisko transportu turbulentnego fazy rozproszonej stanowi wciąż duże wyzwanie tak w kontekście teoretycznym, jak i obliczeniowym. Do powodów takiego stanu rzeczy można niewątpliwie zaliczyć nieliniowość tego procesu oraz szeroki zakres skal czasowych i przestrzennych związanych nie tylko z przepływem turbulentnym, ale również z samą fazą rozproszoną. Opis przepływu dwufazowego komplikuje się jeszcze bardziej, gdy w prowadzonych rozważaniach uwzględnia się wpływ pola grawitacyjnego, reakcje chemiczne lub przemiany fazowe, ale także sprzężenie pędu fazy rozproszonej (dyskretnej) z fazą nośną (ciągłą), zderzenia i koalescencję w fazie rozproszonej oraz inne oddziaływania pomiędzy unoszonymi cząstkami. Choć w niektórych przypadkach możliwe jest wprowadzenie daleko idących uproszczeń, to w ogólności pełniejsze zrozumienie zjawisk zachodzących w przepływach dwufazowych wymaga zastosowania podejścia multidyscyplinarnego, łączącego między innymi modelowanie matematyczne, techniki eksperymentalne oraz metody obliczeniowe mechaniki płynów. Niestety pomimo znacznego rozwoju metod eksperymentalnych, ograniczenia aparatury pomiarowej oraz niekiedy inne ograniczenia techniczne często utrudniają lub nawet uniemożliwiają przeprowadzenie pomiarów zarówno w warunkach laboratoryjnych, jak i rzeczywistych. Z tego powodu, przyszłe osiągnięcia w dziedzinie modelowania przepływów dwufazowych będą prawdopodobnie uwarunkowane rozwojem nie tylko w zakresie modelowania matematycznego, ale również w dziedzinie obliczeniowej mechaniki płynów. Należy podkreślić, że znaczący postęp w zakresie możliwości obliczeniowych przyczynił się w ostatnich latach do istotnego rozwoju metod numerycznych, otwierając tym samym zupełnie nowe perspektywy eksploracji turbulentnych przepływów dwufazowych.

## Tło i motywacja

Jednym z przykładów przepływu dwufazowego, gdzie niepełne zrozumienie zjawiska transportu turbulentnego fazy rozproszonej prowadzi do wciąż istotnych rozbieżności pomiędzy wynikami symulacji numerycznych a rzeczywistością, jest zjawisko formowania się tak zwanego „ciepłego” deszczu. Przy czym należy podkreślić, że określenie to dotyczy warunków, w których taki opad powstaje. Proces formowania ciepłego deszczu może zachodzić wtedy, gdy średnia temperatura chmury utrzymuje się powyżej punktu zamarzania. Opad ten stanowi około 30 % całkowitego opadu atmosferycznego na Ziemi. Krople chmurowe powstają w wyniku transportu pary wodnej w turbulentnej atmosferze oraz kondensacji tej pary na cząstkach aerozolu. Przyjmuje się, że mechanizm dyfuzyjnego wzrostu kropli chmurowych pozostaje efektywny w zakresie promieni kropli około  $5\text{ }\mu\text{m}$  to (numerical range)  $20\text{ }\mu\text{m}$ , po przekroczeniu którego dalszy wzrost następuje na skutek zderzeń prowadzących do koalescencji. Pole grawitacyjne ma dominujący wpływ na zderzenia kropli chmurowych dopiero wtedy, gdy ich promień przekroczy około  $60\text{ }\mu\text{m}$  to (numerical range)  $80\text{ }\mu\text{m}$ . Pozostawia to zatem pewną lukę w opisie mechanizmu wzrostu kropli chmurowych. Badania z ostatnich kilku dekad pozwalają stwierdzić, że w zakresie promieni kropli  $20\text{ }\mu\text{m}$  to (numerical range)  $60\text{ }\mu\text{m}$ , wzrost ten jest indukowany przez turbulencję wewnątrz chmur oraz oddziaływania aerodynamiczne pomiędzy samymi kroplami. O ile turbulencja atmosferyczna jest zjawiskiem istotnie wieloskalowym, w którym charakterystyczne skale przestrzenne mogą zmieniać się w zakresie od jednego milimetra do nawet kilkuset kilometrów, o tyle samo pogłębienie zrozumienia mechanizmu formowania ciepłego deszczu może być uzyskane również wtedy, gdy prowadzone rozważania zostaną ograniczone do modelowania procesów charakterystycznych dla mikrofizyki chmur, tj. w skalach przestrzennych zbliżonych do najmniejszych, dyssypatywnych skal przepływu turbulentnego.

Jednym z podstawowych narzędzi wykorzystywanych do badania przepływów dwufazowych są symulacje numeryczne metodą DNS (ang. *Direct Numerical Simulation*) polegającą na całkowaniu pełnych równań Naviera-Stokesa, tj. równań rządzących ruchem płynu newtonowskiego. Turbulencję atmosferyczną w mikroskali często modeluje się jako turbulencję homogeniczną i izotropową, niekiedy również statystycznie stacjonarną. Tę ostatnią cechę realizuje się zazwyczaj poprzez wprowadzenie do równania bilansu pędu dodatkowego członu wymuszającego, którego zadaniem jest kompensacja strat energii wynikających z jej dyssypacji w najmniejszych rozwiązywanych skalach przepływu turbulentnego. Należy w tym miejscu podkreślić, że o ile jest on członem sztucznym, o tyle w sensie fizycznym może być interpretowany jako zewnętrzny mechanizm zapewniający warunki sprzyjające powstawaniu turbulencji. W istocie, produkcja energii kinetycznej w rzeczywistych przepływach związana jest zazwyczaj z

pewnym średnim gradientem ciśnienia lub temperatury, co implikuje anizotropię, natomiast występowanie ograniczeń geometrycznych wymusza z kolei niehomogeniczność tych przepływów. Z tych powodów model turbulencji izotropowej jest częściowo niefizyczny, choć w pewnym zakresie możliwy do zrealizowania eksperymentalnie. Przykładem turbulencji izotropowej swobodnie zanikającej w czasie może być tak zwana turbulencja zasiatkowa generowana w tunelu aerodynamicznym, natomiast przykładem statystycznie stacjonarnej turbulencji izotropowej może być (w pewnym zakresie skal przestrzennych) przepływ w pobliżu osi kanału lub rury.

Metoda DNS pozwala na symulowanie zjawisk charakterystycznych dla procesów mikrofizyki chmur w zakresie skal zmieniających się od pojedynczych milimetrów do kilku metrów. Mniej więcej od początku lat 70-tych turbulencję izotropową rozwiązuje się najczęściej metodą pseudo-spektralną w obszarze obliczeniowym będącym sześcianem o określonym rozmiarze, w którym statystyczną izotropię zapewnia się poprzez wymuszenie zerowego przepływu średniego oraz zastosowanie okresowych warunków brzegowych. Statystyczną stacjonarność uzyskuje się najczęściej albo w sposób deterministyczny albo stochastyczny, przy czym należy podkreślić, że żadnego z powszechnie stosowanych członów wymuszających nie można zrealizować eksperymentalnie. Ze względu na początkowo niewielki rozmiar kropel chmurowych w odniesieniu do najmniejszych struktur wirowych w przepływie turbulentnym, są one najczęściej przybliżane za pomocą punktów materialnych, których ruch symulowany jest stosując podejście lagranżowskie, co prowadzi do tak zwanych symulacji DNS cząstek punktowych, w skrócie PP-DNS (ang. *point-particle*, PP). Pomimo wielu daleko idących uproszczeń, taki model doprowadził na przestrzeni ostatnich lat do pogłębienia zrozumienia szeregu zjawisk fizycznych charakterystycznych dla procesów mikrofizyki chmur.

W ostatnich latach odnotowano znaczący postęp zarówno w zakresie technik pomiarowych, jak i możliwości obliczeniowych. Najnowsze badania w dziedzinie przepływów dwufazowych pozwalają stwierdzić, że podejście PP-DNS bywa w obecnym sformułowaniu niewystarczające i może prowadzić do znacznych rozbieżności pomiędzy wynikami uzyskanymi na drodze symulacji numerycznych i pomiarów laboratoryjnych. Należy w tym miejscu podkreślić, że w przypadku przepływów jednofazowych, wyniki uzyskane metodą DNS pozostają w doskonałej zgodności z wynikami badań eksperymentalnych, a sama metoda uzyskała na przestrzeni ostatnich dekad status eksperymentu numerycznego. Postęp w zakresie metod obliczeniowych oraz powszechna dostępność komputerów o dużej mocy dały początek symulacjom DNS uwzględniającym skończony rozmiar cząstek, w skrócie PR-DNS (ang. *particle-resolved*, PR). W tym podejściu rozwiązuje się również ruch płynu w otoczeniu cząstek, co pozwala na dokładną reprezentację sił, z jakimi płyn oddziałuje na cząstki i odwrotnie. Niestety ze względu na ogromny

koszt obliczeniowy tej metody, liczba symulowanych cząstek jest zazwyczaj niewielka. Wydaje się, że głównie ze względu na znaczący aspekt praktyczny metody PP-DNS, będzie ona w dalszym ciągu wykorzystywana do studiowania przepływów dwufazowych, jednakże przewiduje się również, że dalsze pogłębienie zrozumienia ich dynamiki będzie następować na skutek połączenia rozważań teoretycznych, badań eksperymentalnych oraz symulacji PP-DNS, choć prawdopodobnie ulepszonych dzięki informacjom uzyskanym w metodzie PR-DNS.

Z uwagi na brak nie tylko przepływu średniego, ale również jednoznacznie określonego wymiaru charakterystycznego, turbulencję izotropową często opisuje się wykorzystując liczbę Reynoldsa opartą na mikroskali Taylora  $\lambda$ , która związana jest z korelacją przestrzenną pola prędkości. Należy w tym miejscu podkreślić, że tak określona skala długości może być stosunkowo prosto wyznaczona zarówno na drodze symulacji numerycznych, jak i eksperymentów. Koszt obliczeniowy metody DNS jest na tyle duży, że obecnie nie jest możliwe symulowanie turbulencji z liczbą Reynoldsa charakterystyczną dla przepływów atmosferycznych, gdzie  $Re_\lambda \sim 10000$ . Według najlepszego stanu wiedzy autora, obecne zasoby obliczeniowe pozwalają na symulacje DNS turbulencji izotropowej z liczbą Reynoldsa  $Re_\lambda \sim 2500$  przy rozdzielczości przestrzennej  $\sim 32786^3$  węzłów oraz symulacje PP-DNS z liczbą Reynoldsa  $Re_\lambda \sim 600$  wymagające nie tylko  $\sim 4096^3$  węzłów, ale także około  $\sim 1024^3$  cząstek punktowych, w celu uzyskania stosownego udziału objętościowego fazy rozproszonej.

Jednym z osiągnięć obliczeniowej mechaniki płynów o dużym znaczeniu praktycznym jest opracowanie tak zwanej metody dużych wirów LES (ang. *Large Eddy Simulation*), w której bezpośrednio rozwiązuje się tylko duże struktury wirowe charakterystyczne dla danego przepływu turbulentnego. Turbulencja drobnoskalowa, ze względu na swoją uniwersalność (tj. niezależność od rodzaju przepływu turbulentnego i jego uwarunkowań geometrycznych), może zostać odfiltrowana, co prowadzi do znacznych oszczędności obliczeniowych. W wyniku rozpadu struktur wirowych na mniejsze, turbulencja drobnoskalowa staje się coraz bardziej izotropowa, w efekcie czego jej wpływ na dynamikę dużych wirów może zostać do pewnego stopnia sparametryzowany. Wydaje się, że metoda LES, choć coraz częściej stosowana w zagadnieniach zarówno przemysłowych, jak i środowiskowych, nie znalazła dotychczas szerokiego zastosowania w ramach badań podstawowych dotyczących dynamiki cząstek o niezerowej bezwładności. Przyczyną tego może być fakt, że o ile w przypadku przepływów jednofazowych efekt filtrowania przestrzennego może być stosunkowo prosto skompensowany, o tyle w przypadku przepływów dwufazowych nierozwiązanie turbulencji drobnoskalowej wpływa bezpośrednio na dynamikę fazy rozproszonej, co może wymagać dodatkowego, bardziej złożonego modelowania. Stosunkowo uboga literatura naukowa poświęcona

jest głównie modelowaniu turbulencji drobnoskalowej, a jej głównym celem wydaje się być wyłącznie rekonstrukcja podstawowych statystyk uzyskanych w metodach DNS i PP-DNS. Literatura ta nie dostarcza natomiast informacji o tym, czy i jakie możliwości metody LES i PP-LES oferują w zakresie parametrów, dla których zostały zasadniczo opracowane.

## Streszczenie

Choć jednym z ważniejszych celów tej pracy było określenie możliwości zastosowania metody dużych wirów do eksploracji przepływów dwufazowych w zakresie parametrów charakterystycznych dla zjawisk mikrofizyki chmur, to zarówno same symulacje numeryczne, jak i uzyskane w tej pracy wyniki mają charakter ogólny i mogą posłużyć do częściowego opisu różnych rodzajów przepływów turbulentnych z fazą rozproszoną, jak również zjawisk fizycznych im towarzyszących, pod warunkiem zachowania zgodności odpowiednich liczb kryterialnych. Niniejsza rozprawa została podzielona na dwie zasadnicze części dotyczące modelowania DNS i LES turbulencji odpowiednio jednofazowej i dwufazowej z przybliżeniem cząstek punktowych.

W pierwszej części opracowano nowy kod pseudo-spektralny zarówno dla turbulencji swobodnie zanikającej, jak i statystycznie stacjonarnej. Wykazano, że powszechnie raportowana w literaturze konstrukcja członu wymuszającego jest niepoprawna, co prowadzi do degradacji rozwiązania poprzez intensyfikację wpływu okresowych warunków brzegowych, w efekcie czego wyniki symulacji numerycznych istotnie różnią się od przewidywań modelu matematycznego. Wykazano również, że istnieje taka konfiguracja zasilania określonych modów Fouriera, która pozwala na uzyskanie poprawnych korelacji przestrzennych pola prędkości, w szczególności zanikających na odległościach równych połowie obszaru obliczeniowego. W zależności od liczby Stokesa, będącej w pewnym sensie miarą bezwładności cząstek, może to mieć istotnie korzystny wpływ na dynamikę fazy rozproszonej. Uzyskane wyniki pokazały, że dla zadanej rozdzielczości przestrzennej liczba Reynoldsa oparta na mikroskali Taylora jest silnie zależna od konfiguracji zasilanych modów Fouriera, co może prowadzić do nieprawdziwych wniosków dotyczących rzeczywistej zdolności rozdzielczej metody DNS. W ostatnich latach w literaturze pojawiło się co najmniej kilka prac dotyczących autonomizacji metody LES, tj. takiej parametryzacji nierozwiązanej turbulencji drobnoskalowej, która wszystkie potrzebne informacje uzyskuje na bieżąco z rozwiązywanego pola prędkości płynu. Dotyczą one zarówno klasycznego modelowania matematycznego, jak i tego opartego na sztucznych sieciach neuronowych. W ramach tej pracy zaproponowano własny model adaptacyjnie parametryzujący wpływ nierozwiązanej turbulencji drobnoskalowej

na ewolucję dużych wirów poprzez wprowadzenie lepkości turbulentnej będącej funkcją charakterystycznej skali długości poszczególnych rozwiązywanych struktur wirowych. Wartość tej lepkości określa się poprzez minimalizację różnicy pomiędzy rozwiązywanym widmem energii kinetycznej a zadaniem widmem referencyjnym, które może być uzyskane zarówno na drodze symulacji numerycznych lub rzeczywistych eksperymentów, jak i analitycznie, wykorzystując dobrze znane widma modelowe. Wykazano, że nowy model działa poprawnie we właściwym dla metody LES zakresie parametrów. W tej części określono również warunki niezbędne do tego, aby metoda LES mogła być rozważana w kontekście modelowania przepływów o liczbach Reynoldsa zbliżonych do obserwowanych zarówno w środowisku naturalnym, jak i procesach przemysłowych. W szczególności dotyczy to parametrów nowego modelu oraz wymagań dotyczących rozdzielczości przestrzennej samej metody LES.

W drugiej części, poświęconej dynamice cząstek o niezerowej bezwładności w przepływie turbulentnym, skupiono się głównie na określeniu przydatności metody LES do eksploracji niektórych zjawisk fizycznych charakterystycznych dla przepływów z fazą rozproszoną, takich jak m.in. preferencyjna koncentracja (ang. *preferential concentration*), czy preferencyjne unoszenie (ang. *preferential sweeping*). Do ilościowego opisu ruchu fazy rozproszonej wykorzystano m.in. takie statystyki jak prędkość opadania, funkcja (rozkład) gęstości prawdopodobieństwa drugiego niezmiennika tensora gradientu prędkości określonego w położeniu cząstek, widmo gęstości liczbowej cząstek oraz radialna funkcja rozkładu (ang. *radial distribution function*, RDF), czy radialna prędkość względna (ang. *radial relative velocity*, RRV). Przykładowo, dwie ostatnie statystyki stanowią główny element parametryzacji częstości zderzeń kropeł chmurowych, która z kolei ma istotny wpływ na jakość mezoskalowych modeli prognozowania pogody. Wykazano, że jeżeli stosunek rozdzielczości przestrzennej DNS do LES jest rzędu 4, to statystyki cząstek o niezerowej bezwładności uzyskane w metodzie LES pozostają w doskonałej zgodności jakościowej oraz satysfakcjonującej zgodności ilościowej z metodą DNS. Wyniki najnowszych badań pokazują, że cząstki o niezerowej bezwładności wykazują tendencję do grupowania (ang. *clustering*) nie tylko na odległościach porównywalnych z rozmiarem najmniejszych rozwiązywanych wirów, ale także w skalach długości charakterystycznych dla zakresu bezwładnościowego. W pracy wykazano, że nowy model pozwala na uzyskanie statystycznego opisu tego zjawiska, który pozostaje w doskonałej zgodności jakościowej oraz bardzo dobrej zgodności ilościowej z metodą DNS. Uzyskane wyniki badań wskazują, że metoda LES wzbogacona o statystyczną parametryzację turbulencji drobnoskalowej pozwala na eksplorację przepływów dwufazowych w zakresie parametrów zbliżonym do rzeczywistych przepływów turbulentnych.

Wydaje się, że nadejście symulacji zarówno petaskalowych, jak i eksaskalowych

stwarza zupełnie nowe możliwości zastosowania metody LES do eksploracji przepływów turbulentnych, w szczególności tych z fazą rozproszoną, w nieosiągalnym dotąd zakresie liczb Reynoldsa. Mimo nieuniknionych niedoskonałości samej metody, uzyskane wyniki pozwalają stwierdzić, że analizowane w tej pracy podejście stwarza potencjał do formułowania i weryfikacji nowych hipotez badawczych z zakresu dynamiki cząstek o niezerowej bezwładności w przepływie turbulentnym. Choć większość symulacji numerycznych w tej pracy została zrealizowana z wykorzystaniem komputera osobistego o przeciętnych możliwościach obliczeniowych, to wydaje się, że naturalnym jej rozszerzeniem jest rozwój nowego kodu w kierunku symulacji wielkoskalowych, z wykorzystaniem komputerów o dużej mocy obliczeniowej.