Nukleráris reaktorok termohidraulikai problémáinak numerikus modellezése különböző mérettartományokban

Házi Gábor

MTA Doktori Értekezés

Budapest, 2011. szeptember 19.

Tartalomjegyzék

1.	Bev	ezetés	3
2 .	Két	fázisú áramlások rendszerszintű modellezése	5
	2.1.	Rendszerszintű modellezés	5
	2.2.	Alapegyenletek	6
	2.3.	Az egyenletek diszkretizálása	7
	2.4.	Záró összefüggések	8
		2.4.1. Ugrási feltételek	9
		2.4.2. Párolgás és kondenzáció modellezése	9
		2.4.3. Falsúrlódás modellezése	11
		2.4.4. Falhőátadás modellezése	12
		2.4.5. A driftflux modell	13
	2.5.	Járulékos modellek	13
		2.5.1. Hőstruktúrák modellezése	14
		2.5.2. Szelepek modellezése	14
		2.5.3. Szivattyúk modellezése	14
		2.5.4. Víz- és gőzelvételek modellezése	15
		2.5.5. Víz- és gőzbevitelek modellezése	16
	2.6.	Numerikus megoldás	17
		2.6.1. A Newton-Raphson módszer	17
		2.6.2. A particionált inverz formula	18
		2.6.3. Kondicionálás, konvergencia, automatikus lépésközválasztás	20
		2.6.4. A Jacobi mátrix meghatározása	21
	2.7.	A modellrendszer beépítése a teljesléptékű szimulátorba, ellenőrzése	21
	2.8.	Példák a rendszer használatára	23
		2.8.1. Három főkeringtető szivattyú kiesése	23
		2.8.2. Térfogatkompenzátor biztonsági szelepének nyitása	24
		2.8.3. Gőzvezetéktörés	24
	2.9.	Összefoglaló	26
3.	Teri	mohidraulikai folyamatok mezoszkopikus modellezése	28
	3.1.	Kétfázisú áramlások finomskálás numerikus modellezési módszerei	29
	3.2.	A rács-Boltzmann módszer	30

5.	Kite	ekintés		97			
4.	Össz	zefogla	ló	92			
	3.5.	A mód	lszer kiterjesztése szuperkritikus nyomású közegek vizsgálatára	85			
		3.4.5.	A pszeudopotenciál-módszer alkalmazása	72			
		3.4.4.	Falak nedvesíthetőségének modellezése	71			
		3.4.3.	Az energiamegmaradás kérdésköre	70			
		3.4.2.	A modell termodinamikai konzisztenciája	66			
		3.4.1.	A pszeudopotenciál-módszer	65			
	3.4.	A mód	lszer kiterjesztése kétfázisú áramlások modellezésére	64			
		3.3.3.	Turbulens áramlás fűtőelempálcák szubcsatornáiban	61			
		3.3.2.	Lecsengő kétdimenziós turbulencia fallal határolt esetben	56			
		3.3.1.	Lecsengő kétdimenziós turbulencia periodikus tartományban	54			
	3.3. A módszer alkalmazása turbulens áramlások modellezésére						
		3.2.5.	A kompresszibilitási hiba	51			
		3.2.4.	A módszer pontossága	41			
		3.2.3.	A makroszkopikus egyenletek származtatása	34			
		3.2.2.	A BGK modell	32			
		3.2.1.	Rövid történeti áttekintés	30			

2

1. fejezet

Bevezetés

Könnyűvízzel hűtött és moderált nukleáris reaktorok optimális és biztonságos üzemvitelének feltétele, hogy az ilyen reaktorokban megfigyelhető, vagy üzemzavari és baleseti szituációkban kialakuló termohidraulikai folyamatokat kellő mértékben értsük és modellezni tudjuk. Bár a műszaki gyakorlatban a modellezés igénye rendszerszinten jelenik meg, ez az igény kielégíthetetlen az alapvető folyamatok, mint például kétfázisú áramlások esetén a fázisok (víz és gőze) között kialakuló tömeg-, impulzus- és energiatranszfer alapos ismerete nélkül. Nukleáris erőművekben a termohidraulikai folyamatok igen széles paramétertartományban zajlanak, így a modellezőnek nincs könnyű dolga. A fűtőelemkazetták néhány milliméteres szubcsatornáiban viszonylag nagy sebességgel áramló víz és a fűtőelempálcák közötti hőátadás pontos modellezése éppúgy fontos, mint a gőzfejlesztők óriási tartályaiban zajló intenzív forrásé. A 80-as években minden jelentősebb nukleáris potenciállal rendelkező országban intenzív fejlesztések indultak meg olyan kétfázisú termohidraulikai modellrendszerek létrehozására, amelyek lehetővé teszik termohidraulikai folyamatok rendszerszintű modellezését. Ezek a kódrendszerek egy-térdimenziós megmaradási egyenleteket oldanak meg, és alkalmasak egy nyomottvizes erőmű akár teljes primerkörében zajló - normál üzemi, üzemzavari vagy baleseti - folyamatok modellezésére. Napjainkban ezeknek a modellrendszereknek a felhasználásával végzik a nukleáris erőművek biztonsági értékelését, és ezek a rendszerek alkotják az erőművek operátorainak képzésében kulcsszerepet játszó szimulátorok egyik legfontosabb elemét.

A 90-es évek végén a KFKI Atomenergia Kutatóintézetben felmerült annak az igénye, hogy intézetünk rendelkezzen egy saját fejlesztésű rendszerrel, amely kétfázisú termohidraulikai folyamatokat rendszerszinten képes modellezni. Nyilvánvalóvá vált ugyanis, hogy a paksi teljesléptékű szimulátorban az akkor már csak egyetlen külföldi fejlesztés eredményeként működő kétfázisú modellrendszer - újabb és újabb igények szerinti - hazai továbbfejlesztése ellehetetlenedik. Kutatásaim egyik alapvető célja egy, a kétfázisú áramlási problémákat rendszerszinten modellezni képes eszköz megtervezése és létrehozása volt. Értekezésemben termohidraulikai folyamatok modellezése kapcsán elért kutatási eredményeimet mutatom be, a modellezés problematikáját különböző mérettartományokban tárgyalva.

Az értekezés második fejezetében kétfázisú áramlások rendszerszintű modellezésével foglalkozom. Ebben a fejezetben mutatom be kutatásaim egyik, műszaki szempontból legfontosabb eredményét, a RETINA kétfázisú áramlásokat modellező programrendszert, amely ma a paksi teljesléptékű szimulátorban kétfázisú áramlások modellezését végzi. Mivel a világban számos hasonló programrendszer létezik, így e fejezetben igyekszem azokra a tényekre fókuszálni amelyek e rendszert egyedivé teszik.

A RETINA fejlesztésének egyik legfontosabb eredménye volt, hogy megismerkedhettem azokkal a problémákkal, amelyek egy ilyen rendszer készítése során óhatatlanul felbukkannak, és amelyek a rendszereket csak használó szakemberek előtt általában rejtve maradnak. Nyilvánvalóvá vált, hogy a kétfázisú folyamatok modellezésének pontosságát néhány alapvető fizikai jelenség alapos ismerete korlátozza.

Mivel ezek a jelenségek jellemzően kis mérettartományban, sok esetben molekuláris szinten zajlanak, viszont komplexitásuk miatt analitikus eszközökkel nem kezelhetők, ezért megértésükhöz jól megtervezett és az adott folyamatra fókuszáló valós vagy numerikus kísérleteket kell elvégezni.

Napjainkban a kutatások a kísérletek egyre növekvő költsége, valamint a számítástechnikai eszközök növekvő teljesítménye és csökkenő ára miatt egyértelműen a folyamatok finomskálás modellezésére irányulnak. Kísérletekkel ellenőrzött finomskálás numerikus modellek ugyanis lehetővé tehetik a folyamatok mélyebb megértését és pontosabb modellek kidolgozását. Továbbá, a numerikus modellek által szolgáltatott eredmények sok esetben olyan részletekbe nyújtanak betekintést, amelyeket még a legjobban kontrollált kísérlet, a legmodernebb méréstechnika alkalmazása sem biztosít.

Látni kell azonban, hogy kétfázisú áramlások finomskálás numerikus modellezése nem egyszerű és letisztult folyamat. Kutatásaim kezdetekor olyan numerikus módszert kerestem, amely ha hosszabb távon is, de előbb vagy utóbb lehetőséggel kecsegtet arra, hogy segítségével néhány alapvető termohidraulikai folyamatot (turbulens áramlások bizonyos formái, párolgás, kondenzáció stb.) részletesen megismerjünk. A jól ismert tradicionális megközelítések helyett (végestérfogat-, végeselem-módszer, szinguláris interfész megközelítés stb.) egy akkoriban még csak néhány fizikus által fejlesztett és a gyakorlatban alig alkalmazott módszer keltette fel az érdeklődésemet: ez volt a rács-Boltzmann módszer. Ismerve az akkor előszeretettel használt megközelítések hátrányait, e módszerrel kezdtem foglalkozni, mivel úgy gondoltam, hogy részecskeszemlélete miatt a kétfázisú áramlások területén ez a módszer nagyobb lehetőségeket kínál, mint elődei. Kutatásaim alapvetően kettéágaztak, részben a módszer fejlesztésével, korlátainak felismerésével, részben pedig a módszer alkalmazásával foglalkoztam. Bár elsődleges célom kétfázisú áramlások alaposabb megismerése volt, nyilvánvaló, hogy ehhez olyan módszerre van szükség, amely egyfázisú problémák megoldása esetén is megállja a helvét. A nukleáris gyakorlatban előforduló termohidraulikai problémák vizsgálatánál ugyanis nemcsak a két fázis jelenlétével kell megküzdeni, hanem azzal a ténnyel is, hogy az áramlás turbulens, amely tény már önmagában is igencsak megnehezíti a modellezést.

Dolgozatom harmadik fejezetében bemutatom a rács-Boltzmann módszert, amelyet hazánkban én kezdtem először használni és fejleszteni. E fejezetben összefoglalom a módszer fejlesztése és alkalmazása során elért saját eredményeimet.

2. fejezet

Kétfázisú áramlások rendszerszintű modellezése

Nukleáris reaktorok esetén az operátorok képzését segítő szimulátorokban fontos szerepet játszik a kétfázisú áramlások pontos numerikus modellezése. A paksi erőmű teljesléptékű szimulátorában 1991-2009-ig a finn fejlesztésű SMABRE programcsomag végezte e fontos feladatot. Az idő múlásával a programmal kapcsolatos hazai ismeretek megkoptak, így a blokkokon bekövetkező változások átültetése a szimulátorba egyre nehézkesebbé vált. 2009-ben az új gadoliniumos fűtőelemkazetták bevezetése a paksi erőműben oly mértékű változásokat tettek szükségessé a szimulátorban, amelyeket a régi neutronfizikai és termohidraulikai modellrendszereket felhasználva lehetetlen lett volna megvalósítani. Időszerűvé vált e két modellrendszer teljes lecserélése. Ezért 2008-ban megbízást kaptunk a termohidraulikai modellrendszer megújítására. E munka során a régi finn kétfázisú termohidraulikai programrendszert az általam tervezett és kifejlesztett RETINA programrendszerrel váltottuk ki. E fejezetben kétfázisú áramlások rendszerszintű modellezését tekintem át, bemutatva a RETINA modellrendszerét. Terjedelmi okok miatt azonban nem térek ki minden részletre, ehelyett igyekszem kiemelni azokat a specifikumokat, amelyek a RETINÁ-t nemzetközileg is egyedivé teszik. A RETINÁról további részleteket találhat az Olvasó az [1] és [2] cikkeimben.

2.1. Rendszerszintű modellezés

Kétfázisú termohidraulikai folyamatok rendszerszintű modellezését alapvetően három területen használja a nukleáris ipar: tervezés, biztonsági elemzések és a reaktor üzemeltetését végző operátorok oktatásához használt szimulátorokban. Mindhárom esetben a modellezés alapvető feladata, hogy az erőművekben elképzelhető legfontosabb, normál üzemi, üzemzavari és baleseti szituációkban kialakuló kétfázisú folyamatokat kellő pontosággal reprodukáljuk, és így lehetővé tegyük megalapozott következtetések levonását. Rendszerszintű modellezés esetén a modellezés általában kiterjed egy erőművi blokk teljes primerkörére és a szekunder kör legfőbb komponenseire, a gőzfejlesztőkre, gőzkollektorokra és az azokat összekötő vezetékekre. Így a modellrendszer felhasználható olyan komplex rendszerekben, pl. erőművi szimulátorokban,

amelyek segítségével az üzemeltető személyzet felkészíthető a várható üzemviteli események megfelelő kezelésére. Figyelembe véve ezen események teljes körét, elmondható, hogy rendszerszintű modellezés esetén kétfázisú áramlások tetszőleges formája kialakulhat a primerkör szinte bármely részén. A paksi erőmű primerkörében például normál üzemi állapotban a hűtőközeg kb. 123 bar nyomású és folyékony halmazállapotban van jelen a térfogatkompenzátor egy részének kivételével. Egy csőtöréses baleset esetén azonban - a gyors nyomáscsökkenés hatására - intenzív fázisátalakulás indulhat meg a primerkör jelentős részén, és így a törés hatására kétfázisú áramlási formák széles skálája pl. buborékos, dugos, diszperz stb. áramlás alakulhat ki, amelyeket a modellrendszernek kellő pontossággal le kell tudnia írni.

2.2. Alapegyenletek

A nukleáris iparban alkalmazott kétfázisú termohidraulikai folyamatok alapegyenleteinek származtatásával kapcsolatos részletek a [3], [4] és [5] irodalmakban találhatók, itt csak a származtatás azon legfontosabb lépéseit ismertetem, amelyek a további tárgyalást megkönnyítik.

A folyamatok rendszerszintű leírására az ún. fázisátlagolt Euleri-Euleri egyenletek bizonyultak alkalmazhatónak. Az alapegyenletek származtatásánál a tömeg-, impulzus- és energiamegmaradási egyenletekből indulunk ki, és bevezetve egy ún. fázisindikátor-függvényt tér, idő vagy sokaság szerint átlagolunk. Az átlagolás után az egyes fázisokra vonatkozó megmaradási egyenletcsoportokat kapunk, amelyek egymással csatoltak. A csatolások felelősek az individuális fázisok közötti tömeg-, impulzus- és energiatranszport-folyamatok leírásáért, és ezeket ún. interfésztranszport-modellekkel vesszük figyelembe. Az interfész a két fázist elválasztó felület, amely pl. buborékok esetén maguknak a buborékoknak a felülete, amelyen keresztül pl. párolgás vagy kondenzáció révén tömegtranszport zajlik. Attól függően, hogy kiinduló egyenleteink milyen részletességgel írják le az alapvető transzportfolyamatokat, és az átlagolást milyen mélységben végezzük, a kapott fázisátlagolt egyenletek komplexitása változik. A nukleáris iparban alkalmazott talán legkomolyabb egyszerűsítés, hogy az átlagolást az áramlási keresztmetszetre nézve is elvégezzük, így a kapott egyenletek végül egydimenziósak lesznek. Bár napjainkban léteznek olyan törekvések, amelyek biztonsági analízisekben többdimenziós kétfázisú termohidraulikai egyenletekre alapoznak, valós idejű szimulátorokban ilven komplexitású modellrendszert még nem alkalmaznak.

A RETINA modellrendszerének szimulátorban alkalmazott megmaradási egyenletei a következő alakban írhatók fel:

$$\frac{\partial \left(\alpha_{\sigma} \rho_{\sigma}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\alpha_{\sigma} \rho_{\sigma} u_{\sigma}\right)}{\partial x} = \Gamma_{\sigma}, \qquad (2.1)$$

$$\rho_m \frac{\partial u_m}{\partial t} + \rho_m u_m \frac{\partial u_m}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = -\tau_w + \rho_m g \cos(\phi), \qquad (2.2)$$

$$\frac{\partial \left[\alpha_{\sigma}\rho_{\sigma}\left(h_{\sigma}+0.5u_{\sigma}^{2}\right)\right]}{\partial t} + \frac{\partial \left[\alpha_{\sigma}\rho_{\sigma}u_{\sigma}\left(h_{\sigma}+0.5u_{\sigma}^{2}\right)\right]}{\partial x} - \alpha_{\sigma}\frac{\partial p}{\partial t} =$$

$$\Gamma_{\sigma}\left(h_{\sigma}+0.5u_{\sigma}^{2}\right) + q_{i\sigma} + q_{w\sigma} + \alpha_{\sigma}\rho_{\sigma}u_{\sigma}g\cos(\phi),$$

$$(2.3)$$

ahol α az ún. gáztérfogattört, ρ a sűrűség, u a sebesség, Γ az interfész tömegtranszporttag, p a nyomás, τ_w a falsúrlódási tag, g a gravitációs gyorsulás, ϕ a dőlési szög, h az entalpia, q_i az interfész hőátadási tag, q_w a falhőátadási tag. A σ index az adott fázis jelölésére szolgál, tehát $\sigma = \{f, g\}$ indexek a folyadékra, illetve annak gőzére míg az m index keverékre utal.

A RETINA szimulátoros verziójában a valós idejű szimuláció érdekében egy gyakran alkalmazott egyszerűsítéssel éltem. Amennyiben a fázisátlagolás után kapott impulzusegyenleteket összegezzük, az impulzusegyenlet jelentősen egyszerűsíthető, és egy ún. keverék impulzusegyenlethez jutunk. A keverék impulzusegyenlet önmagában nem alkalmas olyan folyamatok leírására, amelyeknek során a fázisok különböző sebességgel áramolnak, mivel azonban ilyen jellegű áramlások gyakran előfordulnak a gyakorlatban, így a keverék impulzusegyenletet ki kell egészíteni egy modellel, amelyből a fázisok sebességének különbsége meghatározható.

A gáztérfogattört a fázisátlagolás eredménye, és térszerinti átlagolás esetén szemléletes jelentése, hogy az adott térrészben a térfogat mekkora részét tölti ki a gőz

$$\alpha = \frac{V_g}{V}.\tag{2.4}$$

Ahogy már említettem, az interfész tömegtranszport-taggal vesszük figyelembe az egyes fázisok közötti tömegcserét, amely párolgás vagy kondenzáció révén jöhet létre. Az interfész hőátadási taggal az interfész tömegtranszporttal párhuzamosan fellépő energiacserét vesszük figyelembe. A falsúrlódási tag a hűtőközeget határoló falakon fellépő impulzusveszteség modellezéséért felelős, míg a falhőátadási taggal a határoló falak és a hűtőközeg közötti hőátadási folyamatokat modellezzük. Utóbbi két tag ilyen jellegű bevezetése lehetővé teszi, hogy komplex fizikai folyamatokat is viszonylag egyszerűen modellezzünk. Például meghatározva egy probléma Reynolds számát, eldönthető, hogy a falsúrlódás vagy falhőátadás modellezésére lamináris vagy turbulens áramlásokra jellemző összefüggést alkalmazunk.

A fenti öt egyenlet által alkotott egyenletrendszerben az alábbiak ismeretlenek: a gáztérfogattört, a nyomás, az entalpiák és a keveréksebesség.

Az összes további mennyiség ezeknek a változóknak az ismeretében meghatározható. Az alapegyenletekben közvetlenül megjelenő ismeretlen mennyiség még például a fázisok sűrűsége, amelyeket a vízre felírt állapotegyenletből határozhatunk meg.

2.3. Az egyenletek diszkretizálása

Az egyenletrendszer numerikus megoldásához az egyes megmaradási egyenleteket diszkretizálnunk kell. Ehhez a végestérfogatok módszerét használtam fel, vagyis egy adott probléma esetén a teljes vizsgálandó tartományt elemi térfogatokra bontjuk. Az egyes elemi térfogatokat nódusoknak, a teljes felbontott rendszert pedig nodalizált rendszernek nevezzük. A módszer nagy előnye, hogy az így diszkretizált rendszer - kellő odafigyeléssel - tömeg- és energiamegmaradás szempontjából konzervatív lehet. Kétfázisú áramlások számításánál leggyakrabban az ún. lépcsős (staggered) felosztást alkalmazzuk, amelynek az a lényege, hogy egy adott egyenletrendszerhez tartozó ismeretlen változók nem feltétlenül ugyanazokban az elemi térfogatokban lesznek meghatározva. Konkrétan, kétfázisú rendszerek esetén a skalár





2.1. ábra. Lépcsős rács és a rácspontokhoz rendelt ismeretlen változók.

mennyiségeket, mint a nyomás, entalpia, gáztérfogattört, az elemi térfogatok középpontjaiban határozzuk meg, míg a vektormennyiségeket - mint a sebességek - a nódusokat elválasztó felületeken, vagy ha úgy tetszik, olyan végestérfogatok nódusaiban, ahol a nódusközpontok az eredeti felosztáshoz képest fél nódussal el vannak tolva (ld. 2.1 ábra). A lépcsős felosztás segítségével a sebesség és nyomás meghatározása szétcsatolható, így elkerülhető az ún. sakktábla-effektus kialakulása a megoldásban.

A legtöbb kétfázisú rendszerkód explicit vagy szemi-implicit idő szerinti diszkretizálást használ. Ezzel szemben a RETINÁ-ban, elsősorban stabilitási okok miatt, teljesen implicit numerikus módszert alkalmaztam. Az időszerinti deriváltakat haladó végesdifferenciával helyettesítettem, a konvektív tagok diszkretizálásához tömeg- és energiafluxusokat vezettem be, és a fluxusok deriváltjait szélfelöli differenciával helyettesítettem. Az impulzusegyenletek konvektív tagjait szintén szélfelöli séma szerint diszkretizáltam.

A forrástagokat a csomópontokban (az impulzusegyenlethez), illetve a sebességeket a nódusokban (a tömeg- és energiaegyenlethez) áramlási keresztmetszet szerinti interpolációval határoztam meg, a szomszédos nódusok, illetve csomópontok megfelelő értékei alapján. Ahhoz, hogy az egyes nódusokra és csomópontokra felírhassuk a megfelelő megmaradási egyenleteket, szükség volt még a megfelelő forrástagok meghatározására. Ezeknek a számítását tárgyalom röviden a következő fejezetben. A modellek bemutatása során terjedelmi okok miatt csak a legfőbb tudnivalókat fogom ismertetni, nem fogok minden részletre kitérni, mivel legfontosabb eredményemnek e területen nem az egyes modellek esetén elvégzett fejlesztéseket tartom, hanem a modellek koherens keretbe foglalását.

2.4. Záró összefüggések

A (2.1)-(2.3) egyenletek ismeretlenjei a gáztérfogattört, a nyomás, a keveréksebesség és az entalpiák. Hogy ezeket a mennyiségeket meghatározzuk, szükség van az interfésztranszporttagok és a környezettel kapcsolatot tartó tagok meghatározására, továbbá egy állapotegyenletre, amelynek segítségével a megfelelő anyagjellemzők pl. a sűrűségek és a modellekben

szükséges termofizikai paraméterek (pl. hővezetés, viszkozitás stb.) kiszámíthatók.

2.4.1. Ugrási feltételek

Az interfésztranszport-tagok modelljeinek kialakításánál természetes módon merül fel, hogy bizonyos feltételeket, az ún. ugrási feltételeket ki kell elégítenünk [3], [4], [5]. Mivel a tömegnek se forrása, se nyelője nincs az interfészben, így nyilvánvaló, hogy például az interfész tömegtranszport esetén

$$\Gamma_i \equiv \Gamma_f = -\Gamma_q, \tag{2.5}$$

amely feltétel kifejezi, hogy az egyik fázisból kilépő tömeg a másik fázisba kell, hogy belépjen.

Hasonlóan egyértelmű, hogy amennyiben elhanyagoljuk a felületi deformációból származó energiát és az interfészen fellépő erők hatását, az interfész-hőátadásra felírható, hogy

$$\Gamma_i(h_{g,sat} - h_{f,sat}) + q_{if} + q_{ig} = 0, \qquad (2.6)$$

amely az előző feltétellel analóg, csak éppen az energiára vonatkozik.

Vegyük észre, hogy milyen kapcsolat van az interfész energia- és tömegtranszport tagok között

$$\Gamma_i = \frac{-q_{if} - q_{ig}}{h_{q,sat} - h_{f,sat}},\tag{2.7}$$

vagyis az interfész-hőátadást és tömegtranszportot nem lehet egymástól független modellekkel meghatározni, azokat összeköti a látens hő.

Fontos megemlíteni, hogy ezt az ugrási összefüggések közötti kapcsolatot a paksi teljesléptékű szimulátorban alkalmazott korábbi modellrendszer nem alkalmazta. Így a párolgás és kondenzáció modellezése nem volt koherens a kapcsolódó energiatranszporttal. Ennek folyományaképpen egy meglehetősen komplex modellt kellett kidolgozni e folyamatok modellezésére, amit az elmúlt évtizedek során többször kellett módosítani. A specifikus térrészekhez új modelleket kellett beilleszteni, annak érdekében, hogy a számítások elfogadható pontosságúak legyenek. Az új modellrendszerrel - többek között - ezt az állapotot tudtuk megszüntetni.

2.4.2. Párolgás és kondenzáció modellezése

Ahogy az előzőekben láttuk, a párolgás és kondenzáció révén létrejövő tömegtranszport lényegében az energiatranszportból következik. Olyan modellre van tehát szükségünk, amelynek segítségével meghatározhatjuk az interfész-hőátadási tényezőket, majd azok és a (2.7) összefüggés segítségével a tömegtranszport értékét.

Az interfész-hőátadás modellezését lényegében két részre lehet bontani. Szükségünk van egy modellre a folyadékfázis és az interfész, illetve a gőzfázis és az interfész közötti hőátadás leírására. A problémát leegyszerűsítve az interfészt elképzelhetjük úgy, mint egy szilárd falat,

amelynek a hőmérséklete a pillanatnyi nyomásnak megfelelő telítési értéken van. Így a hőátadási problémát visszavezethetjük egy klasszikus hőátadási problémára, az interfész és fázisok közötti hőfluxus pedig meghatározható a

$$q_{i\sigma} = \kappa_{i\sigma} \left(T_{\sigma} - T_{\sigma,sat} \right) \tag{2.8}$$

összefüggéssel, ahol $\kappa_{i\sigma}$ a hőátadási tényező. A hőátadási tényező természetesen számos paraméter függvénye, és értéke erősen függ az éppen kialakult áramlási formától is. Annak érdekében, hogy a teljes paramétertartományt viszonylag jól leíró összefüggést kapjunk, a (2.8) egyenletet a következő alakra hozhatjuk:

$$q_{i\sigma} = \rho_{\sigma} f_1(\alpha_{\sigma}) \frac{h_{\sigma} - h_{\sigma,sat}}{\tau} = \rho_{\sigma} f_1(\alpha_{\sigma}) \frac{\Delta h_{\sigma}}{\tau}.$$
(2.9)

Ebben az összefüggésben az energiaegyenletünk megoldásaként közvetlenül számolt entalpia jelenik meg, továbbá bevezettünk egy $f_1(\alpha_{\sigma})$ simítófüggvényt, amely folytonos átmenetet biztosít a gőztartalom függvényében a túlhevített és aláhűtött fázisokra vonatkozó hőátadási mechanizmusok között.

A (2.9) összefüggésben megjelenő τ időállandó egyrészről közvetlen kapcsolatban van a hőátadási tényezővel, másrészről szemléletes képet lehet neki adni metastabil állapotok (pl. túlhevített folyadék stb.) esetén. Értéke meghatározza, hogy egy magára hagyott metastabil rendszer milyen gyorsan jut telítési állapotba, amennyiben az csak az interfészhőátadáson keresztül van kapcsolatban a külvilággal. Ennek az időállandónak a segítségével érjük el, hogy az entalpiakülönbségek függvényében kialakuló lehetséges állapotok között az átmenet sima és folytonos legyen.

- A lehetséges állapotok a következők:
- 1. aláhűtött folyadék $(\Delta h_l < \Delta h_{l,\inf})$,
- 2. túlhevített folyadék $(\Delta h_l > \Delta h_{l,\sup})$,
- 3. aláhűtött gőz $(\Delta h_g < \Delta h_{g,inf})$,
- 4. túlhevített gőz $(\Delta h_g > \Delta h_{g,inf})$,
- 5. telítésközeli folyadék $(\Delta h_{l,\inf} \leq \Delta h_l \leq \Delta h_{l,\sup})$,
- 6. telítésközeli gőz $(\Delta h_{g,\inf} \leq \Delta h_g \leq \Delta h_{g,\sup})$,

ahol $\Delta h_{x,inf}$ és $\Delta h_{x,sup}$ az adott fázis aláhűtésére és túlhevítésére vonatkozó határok, amelyek bevezetésére numerikus okokból van szükség. Ezekhez a határokhoz ugyanis a fizikai folyamatok sebességét korlátozó időállandókat rendelünk, például aláhűtött gőz esetén feltételezzük, hogy ez a metastabil állapot hosszú ideig nem állhat fent, és egy kellően kicsi - de a folyamatok numerikus közelítésénél használt időlépésnek megfelelő - időállandóval modellezzük a hőátadás folyamatát:

$$\Delta h_g < \Delta h_{g,\text{inf}}$$
, $\tau = \tau_{sg} = \tau_{g,\text{sup}}$. (2.10)

Hasonló módon járunk el túlhevített folyadék esetén is

$$\Delta h_l > \Delta h_{l, \text{sup}} \quad , \quad \tau = \tau_{sl} = \tau_{l, \text{sup}}. \tag{2.11}$$

Túlhevített gőz és aláhűtött folyadék esetén a jól ismert Dittus-Boelter korrelációt vesszük alapul, amely igen pontos eredményeket ad egyfázisú áramlások esetén kényszerkonvekciós hőátadásnál [6]. Mivel azonban a hőátadást nemcsak turbulens áramlásban, kényszerkonvekció mellett kell modelleznünk, ezért a korrelációt úgy módosítottuk, hogy $u \to 0$ határátmenetben közelítse a lamináris áramlásra jellemző Nusselt számot [7]. Vagyis, felhasználva az adott fázisra jellemző hasonlósági számokat (pl. $Re_{\sigma} = \frac{\alpha_{\sigma} u_{\sigma} D_{H}}{v_{\sigma}}$, ahol D_{H} az ekvivalens hidraulikus átmérő) a

$$Nu_{\sigma,DB}(Re_{\sigma}, \Pr_{\sigma}) = 0,023Re_{\sigma}^{0,8}\Pr_{\sigma}^{0,4}$$
(2.12)

összefüggésből meghatározzuk a Nusselt számot, majd annak felhasználásával kiszámoljuk az időállandó értékét:

$$\tau_{\sigma} = g\left(u_{\sigma}, \alpha, o\right) \frac{\rho_{\sigma} c_{p,\sigma} L^2}{\lambda_{\sigma}} f_2(N u_{\sigma,DB}), \qquad (2.13)$$

ahol L a hőátadási probléma jellemző mérete (pl. ekvivalens hidraulikus átmérő, buboréksugár stb.).

Az időállandó meghatározásában szereplő f_2 összetett függvény folytonos átmenetet biztosít a különböző áramlási formák között.

Az időállandó - numerikus szempontból fontos - folytonosságát a

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{g,\inf}} + \left(\frac{1}{\tau_{l,\sup}} - \frac{1}{\tau_{g,\inf}}\right) f_3\left(\frac{\Delta h_{\sigma} - \Delta h_{\sigma,\inf}}{\Delta h_{\sigma,\sup} - \Delta h_{\sigma,\inf}}\right)$$
(2.14)

összefüggéssel biztosítjuk, ahol f_3 szintén egy simító függvény.

A (2.13) összefüggésben szereplő g függvénnyel az adott térrészben kialakult áramlási formát vesszük figyelembe, a nódus o orientációjától függően.

2.4.3. Falsúrlódás modellezése

Az áramló közegek és az azokat határoló falak, illetve az áramlási ellenállások által okozott impulzusveszteség a következő általános összefüggéssel modellezhető:

$$\tau_w = \frac{(k_s + k_a) \, u_m \, |u_m| \, \rho_x}{2D_H},\tag{2.15}$$

ahol k_s a lokális súrlódási, k_a pedig az átfolyási együttható. Utóbbival vesszük figyelembe a különböző szerkezeti elemek kapcsolódása, illetve alakváltozása miatt elszenvedett nyomásveszteséget. Az együtthatók meghatározására számos modell létezik. A gyakorlat azonban azt mutatta, hogy az általános célú átfolyásiegyüttható modellek nem mindig eredményeznek kielégítő pontosságú nyomásesést a számítások során, ezért e modellek beépítése mellett lehetőséget biztosítottam a paraméter külső beállítására. A falsúrlódás modellezésére a legegyszerűbb modellt, az ún. Blasius korrelációt használtam fel [8]:

$$k_s = 0,079 R e_{wm}^{-0,25},\tag{2.16}$$

ahol a homogén elegyre vonatkoztatott Reynolds szám

$$Re_{wm} = \frac{|u_m| D_H \rho_m}{\mu_m},\tag{2.17}$$

és ahol a keverék dinamikai viszkozitását a

$$\mu_m = \alpha_g \mu_g + \alpha_l \mu_l \tag{2.18}$$

összefüggésből számoljuk.

2.4.4. Falhőátadás modellezése

Mivel a hőátadás mechanizmusát nagymértékben befolyásolja az éppen kialakult kétfázisú áramlási forma, az áramló közegek és a velük kontaktusban lévő falak közötti hőátadás modellezése meglehetősen összetett feladat. Az e számításokat végző falhőátadás-modell a gáztérfogattört értéke alapján először kiválaszt egyet az alább felsorolt hőátadási zónák közül

- 1. folyadék-hőátadási zóna ($\alpha_q < \alpha_{wf}$),
- 2. gőz-hőátadási zóna ($\alpha_q > \alpha_{wq}$),
- 3. átvezető hőátadási zóna ($\alpha_{wf} \leq \alpha_g \leq \alpha_{wg}$).

Ezután hőátadási korrelációk segítségével meghatározzuk a hőfluxust, amely függ a fal, a fázisok és a telítési hőmérsékletek viszonyától.

Folyadék hőátadási zóna esetén a fal nem ad át közvetlenül hőt a gőzfázisnak, vagyis $q_{wg,1} = 0$, a folyadék felé irányuló hőtranszfer tekintetében pedig három alapvető mechanizmus közül választunk:

- a. egyfázisú konvekcióra jellemző hőátadás $(T_w \leq T_{sat})$,
- b. forrásra jellemző hőátadás $(T_w > T_{sat}, T_f > T_{sat}),$
- c. aláhűtött forrásra jellemző hőátadás ($T_w > T_{sat}, T_f \leq T_{sat}$).

A megfelelő hőfluxusokat a következő összefüggésekből számoljuk:

$$q_{wf,1} = \begin{cases} \kappa_{wf,konvekci\delta} \left(T_w - T_f\right) & \text{ha} \quad T_w \leq T_{sat} \\ \kappa_{wf,forrás} \left(T_w - T_{sat}\right) & \text{ha} \quad T_w > T_{sat}, T_f > T_{sat} \\ \kappa_{wf,konvekci\delta} \left(T_{sat} - T_f\right) + \kappa_{wf,forrás} \left(T_w - T_{sat}\right) & \text{ha} \quad T_w > T_{sat}, T_f \leq T_{sat} \end{cases}$$
(2.19)

A hőátadási tényezőket konvekció esetén az interfész-hőátadásnál már megismert módosított Dittus-Boelter korrelációt felhasználva számoljuk, forrás esetén pedig Thom korrelációját használjuk [9].

Gőz-hőátadási zóna esetén a fal nem ad át hőt a vízfázisnak, vagyis $q_{wf,2} = 0$, a gőz felé pedig konvekcióra jellemző hőátadási mechanizmust feltételezünk, $q_{wg,2} = \kappa_{wg} (T_w - T_g)$. A hőátadási tényezőt ebben az esetben is a módosított Dittus-Boelter korrelációt felhasználva számoljuk ki.

Az átvezető hőtranszferzónában sima és folytonos átmenetet biztosítottam a másik két zóna között az $f_4(\alpha)$ simító függvény segítségével

$$q_{wf,3} = q_{wf,1} \left[1 - f_4(\alpha) \right], \qquad (2.20)$$
$$q_{wg,3} = q_{wg,2} f_4(\alpha).$$

A kritikus hőfluxus kialakulásának detektálására és a hőfluxusok korlátozására Griffith és Zuber korrelációját használtam fel [10].

2.4.5. A driftflux modell

Ahogy már említettem, kétfázisú áramlások esetén a két fázis közötti sebességkülönbséget többféleképpen lehet figyelembe venni. A RETINA esetén az egyik ilyen lehetőség, hogy egy algebrai modell segítségével meghatározzuk az ún. driftflux sebességet, majd ezt felhasználva a keverék sebességéből számítjuk ki az egyes fázisok sebességét. Ez utóbbi számításhoz a következő összefüggéseket használjuk fel:

$$u_g = C_0 j + u_{gj} , \quad u_l = \frac{(1 - C_0 \alpha_g) j - \alpha_g u_{gj}}{\alpha_l},$$
 (2.21)

ahol $j = \alpha_g u_g + \alpha_l u_l$ a kétfázisú lokális térfogati sebesség, u_{gj} a gőz sodródási vagy driftsebessége és C_0 az ún. fáziseloszlás-paraméter [11]. Utóbbi empirikus paraméter értéke függőlegesen álló nódusoknál 1,2, amennyiben az áramlás felfelé irányul, és 1,0 lefelé áramlásnál. Vízszintes nódusoknál $C_0 = 1, 2$.

A driftsebesség

$$u_{gj} = F\left[0, 3 + 0, 2\left(D_{H,D} + D_{H,A}\right)\right], \qquad (2.22)$$

ahol $D_{H,D}$ és $D_{H,A}$ a donor és akceptor nódusok hidraulikus átmérője. A (2.22)-ben szereplő F függvény a fázisok ellenáramát hivatott korlátozni. Függőleges nódusoknál

$$F = \min\left[(1,0001 - \alpha_q) / 0, 17; 1, 0 \right], \tag{2.23}$$

és vízszintes nódusoknál

$$F = \min(30\eta, 0, 8 + 2\eta), \qquad (2.24)$$

ahol $\eta = \frac{2D_H(\alpha_{g,D} - \alpha_{g,A})}{E_D + E_A}$ és E_D, E_A a donor és akceptor nódusok magassági koordinátái.

2.5. Járulékos modellek

Az alapmodelleken kívül számos olyan kiegészítő modellre van szükség, amelyek a modellrendszer alkalmazási körét kiterjeszthetik. Az alábbi fejezetben ezekről a modellekről adok áttekintést.

2.5.1. Hőstruktúrák modellezése

A fűtőelempálcákban fejlődő vagy a külvilág felé leadott, tárolt hőt modellezni kell annak érdekében, hogy a modellezés valósághű legyen. Ezért a RETINÁ-ba egy hőstruktúra-modell került beépítésre. Egy hőstruktúra több rétegből állhat, geometriai leírása szerint pedig lehet négyszögletes, illetve henger alakú. A hőstruktúra-modell lényegében a hővezetési egyenletet oldja meg, peremfeltételként külső hőmérsékletet vagy hőátadásból származó hőfluxust felhasználva. Egy hőstruktúra kapcsolódhat egy ugyanolyan felépítésű másik hőstruktúrához, így segítségükkel a falakon belüli axiális hővezetés is modellezhető. A hővezetési egyenleteket a Crank-Nicholson módszerrel oldjuk meg, a hatékonyság érdekében az alternatív irányok módszerét is felhasználva [12].

2.5.2. Szelepek modellezése

A szelepek a legegyszerűbb esetben az ellenállási tényező megváltoztatásán keresztül modellezhetők. Mivel a szelepek a csomópontokhoz vannak rendelve, így a szelep pillanatnyi állapotától és karakterisztikájától függően a csomóponthoz rendelt ellenállási tényezőt változtatjuk meg.

2.5.3. Szivattyúk modellezése

A szivattyú a termohidraulikai egyenletek szintjén egyrészt mint nyomásnövelő elem jelenik meg, ahol a nyomásnövekedést a következő összefüggés alapján számoljuk

$$\Delta p = p_{sziv} = \rho_m g H, \qquad (2.25)$$

ahol H a szivattyú emelőmagassága. Másrészt a szivattyúk a súrlódás következtében felmelegítik a hűtőközeget, amit az energiaegyenletekben megjelenő energiaforrástagokkal modellezünk:

$$Q_{eg} = \alpha_g \frac{\rho_g}{\rho_m} Q_e \quad , \quad Q_{el} = \alpha_l \frac{\rho_l}{\rho_m} Q_e, \tag{2.26}$$

ahol

$$Q_e = \tau_H \omega. \tag{2.27}$$

Ezek az additív energiatagok az áramlási iránytól függően a szivattyú után elhelyezkedő térfogatok energiaegyenleteiben jelennek meg.

A szivattyúk teljesítményét alapvetően négy paraméter határozza meg: a szögsebesség ω , a térfogati áram Q, az emelőmagasság H és a forgatónyomaték τ . Ezeknek a paramétereknek a kapcsolata egy konkrét szivattyú esetén méréseken alapuló négy-kvadránsos grafikonból állapítható meg. A probléma az, hogy az ilyen görbék numerikus célokra nemigen használhatók, mivel alkalmazásuk esetén kétdimenziós interpolációt és nagyon nagy mennyiségű adatpont tárolását kellene megoldanunk. Ezek a gondok elkerülhetők a centrifugál-szivattyúk hasonlóságán alapuló homológ átalakítás alkalmazásával.

Ehhez az átalakításhoz a szivattyú jellemzőit át kell alakítani dimenziómentes alakra, ami egy összetartozó referencia szállítóképesség, szögsebesség, emelőmagasság és referencianyomaték bevezetésével tehető meg. Az ezekből kapott mértékegység nélküli változók az $\alpha_p = \frac{\omega}{\omega_0}$ szögsebességarány, a $v_p = \frac{Q}{Q_0}$ áramlási arány, a $h_p = \frac{H}{H_0}$ emelőmagasság-arány, a $\beta_p = \frac{\tau}{\tau_0}$ nyomatékarány és végül a $\rho_p = \frac{\rho_l}{\rho_0}$ sűrűségarány.

Megoldva a szivattyúra felírható perdületmegmaradási törvényt, a szivattyú rotorjának pillanatnyi szögsebességét és a referenciaértéket ismerve meghatározhatjuk a sebességarányt, míg másik kiinduló paraméterünk a szivattyún keresztül áramló közeg térfogatárama, amely a szivattyúhoz kapcsolódó donorcellából kilépő közeg térfogatáram-értékével azonos. Ennek értékét és a hozzátartozó referenciaértéket felhasználva meghatározhatjuk az áramlási arányt. A sebesség- és áramlásiarány ismeretében kiválasztható a szivattyú-üzemállapot és a hozzá tartozó homológ görbe, vagy egy ennek megfelelő táblázat, amely összefoglalja a hasonló szivattyúk jellemzőit egyfázisú áramlás esetére.

Ha az áramlás kétfázisú, akkor a szivattyú-üzemállapottól függően az egy- és kétfázisú homológ emelőmagasságok és nyomatékok arányainak értékei közötti különbségeket kell meghatározni, és ezzel kell korrigálni az egyfázisra számolt értéket.

2.5.4. Víz- és gőzelvételek modellezése

A RETINA egyik alapvető feladata, hogy üzemzavari és baleseti szituációkban is valósághű eredményeket produkáljon. Ezeknek a szituációknak egy része a primerkörben bekövetkező hűtőközegvesztéssel jár. Bármilyen nem tervezett hűtőközegelvételt törések definiálásával oldottam meg. Egy törést aktiválva az adott ponton, adott keresztmetszeten keresztül hűtőközegvesztés történhet.

Egy törésen keresztül távozó folyadék mennyiségét a Bernoulli tömegfluxus alapján határozzuk meg, vagyis

$$Q = C_D \sqrt{2\rho \left(p - p_c\right)},\tag{2.28}$$

ahol p_c a külső nyomás és C_D egy tapasztalati úton meghatározott ún. leürülési együttható. A RETINÁ-ban ezt az alapösszefüggést használtam a törésforgalom meghatározására, ahol a leürülési együttható megegyezik a törés keresztmetszetével, vagyis $C_D = A_{törés}$.

A valóságban azonban a kiáramló hűtőközeg mennyiségét a kritikus áramlás jelensége korlátozhatja, vagyis hiába növeljük a nyomáskülönbséget egy adott érték fölé, a kiáramló közeg sebessége és így a megfelelő törésforgalom nem fog változni. A törésforgalmat tehát korlátoznunk kell.

A kritikus törésforgalom attól függ, hogy a távozó hűtőközegben melyik halmazállapot dominál, vagyis a keverék entalpia

$$h_m = \frac{\alpha_g \rho_g h_g + \alpha_l \rho_l h_l}{\rho_m},\tag{2.29}$$

milyen viszonyban van a folyadék, illetve a gőz telítési entalpiákkal. Ettől a viszonytól függően módosítjuk a valódi nyomáskülönbséget egy empirikus értékre, amelyet felhasználva aztán meghatározzuk a kritikus áramlás értékét:

$$Q_{crit} = A_{t\ddot{o}r\acute{e}s}\sqrt{2\rho_l \Delta p_{corr}} \tag{2.30}$$

víz, és

$$Q_{crit} = A_{t\ddot{o}r\acute{e}s}\sqrt{0.416\rho_g\Delta p_{corr}}$$
(2.31)

gőz esetén. Az egy- és kétfázisú kiáramlások közötti folytonos átmenetet simító függvény alkalmazásával érjük el.

Törés esetén a megfelelő tömegmegmaradási egyenletet

$$(T\ddot{O}MEGMEGMARADASI EGYENLET) + \frac{\alpha_{\sigma}Q_{t\ddot{o}r\acute{e}s}}{\Delta z} = 0$$
(2.32)

szerint módosítottam, míg az impulzusveszteséget nem vettem figyelembe. Az energiamegmaradási egyenletben a veszteség szintén nyelőként jelenik meg:

$$(\text{ENERGIAMEGMARADÁSI EGYENLET}) + \frac{\alpha_{\sigma} Q_{t\"or\acute{es}}}{\Delta z} h_{\sigma,t\"or\acute{es}} = 0.$$
(2.33)

A törések mellett történhet üzemszerű víz- vagy gőzelvétel is. Ilyen szituáció például a primerkörből a víztisztítókon keresztül elvitt víz, vagy a szekunderoldalon a gőzfejlesztőkből a turbinák felé szállított gőz elvétele. Ezekben az esetekben a peremfeltételként kapott elvett mennyiségeket vesszük figyelembe a megmaradási egyenletekben.

2.5.5. Víz- és gőzbevitelek modellezése

Vízbevitel mind a primer-, mind a szekunderkör oldalán normál üzemben folyamatosan történik. A primerköri oldalon a víztisztítók felé elvett víz visszakerül a primerköri hurkokba, egy másik elvett rész pedig a térfogatkompenzátorba jut. A szekunder oldalon a termelt és elszállított gőz utánpótlásaként tápvíz jut a gőzfejlesztőkbe. Továbbá üzemzavari és baleseti szituációkban az elvesztett vizet nagynyomású szivattyúk vagy hidroakkumulátorok pótolhatják.

A különféle befecskendezéseket egyszerű forrástagokkal vettem figyelembe a megmaradási egyenletekben.

A befecskendezett anyag sebességét a

$$v_{\sigma,be} = \frac{Q_{\sigma,be}}{A_{be}\rho_{\sigma}} \tag{2.34}$$

egyenlet alapján határozzuk meg.

Befecskendezés esetén tehát a megfelelő tömeg-, impulzus- és energiamegmaradási egyenletek

$$(TOMEGMEGMARADÁSI EGYENLET) - \frac{Q_{\sigma,be}}{\Delta z} = 0, \qquad (2.35)$$

$$(IMPULZUSMEGMARADASI EGYENLET) + \frac{Q_{\sigma,be}}{\Delta z} (v_{\sigma} - |v_{\sigma,be}|\cos\theta) = 0, \quad (2.36)$$

$$(ENERGIAMEGMARADASI EGYENLET) - \frac{Q_{\sigma,be}}{\Delta z} \left(h_{\sigma,be} + \rho_{\sigma,be} \frac{v_{\sigma,be}^2}{2} \right) = 0, \quad (2.37)$$

ahol θ a befecskendező cső szöge a csatlakozási pontnál.

2.6. Numerikus megoldás

A korábbiakban már bemutattam, hogy az egyenletekben található tagokat hogyan diszkretizáltam. A diszkretizálás eredményeként egy nemlineáris egyenletrendszerhez jutunk, amelynek megoldására a Newton-Raphson módszert használtam fel. Ebben a fejezetben röviden összefoglalom az egyenletrendszer megoldására kidolgozott módszert, amelynek a hatékonysága biztosítja, hogy az egyenleteket valós időben meg tudjuk oldani.

2.6.1. A Newton-Raphson módszer

A diszkretizálás után tehát a következő nemlineáris egyenletrendszer megoldása a feladatunk

$$F_i(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0, (2.38)$$

ahol i = 1, 2..., N az ismeretlenek száma. Bevezetve az **x** ismeretlenek vektorát, az **F** vektorfüggvényt és a parciális deriváltakból képezve a Jacobi mátrixot

$$J_{ij} \equiv \frac{\partial F_i}{\partial x_j},\tag{2.39}$$

az ${\bf x}$ pont környezetében felírható a függvények Taylor sora

$$\mathbf{F}(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}) + \mathbf{J}\delta \mathbf{x} + O(\delta \mathbf{x}^2).$$
(2.40)

Elhanyagolva a másodrendű tagokat, és feltételezve, hogy

$$\mathbf{F}(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}) = 0, \tag{2.41}$$

a következő lineáris egyenletrendszerhez jutunk:

$$\mathbf{J}\delta\mathbf{x} = -\mathbf{F}.\tag{2.42}$$

Vagyis a megoldáshoz a Jacobi mátrix inverzét kell meghatároznunk:

$$\delta \mathbf{x} = \mathbf{J}^{-1} \left(-\mathbf{F} \right). \tag{2.43}$$

Ennek az egyenletrendszernek a megoldása a pillanatnyi megoldáshoz adandó korrekcióvektort szolgáltatja, amely minden egyes függvényt egyszerre közelebb mozgat az eredeti nemlineáris egyenletrendszer megoldásához:

$$\mathbf{x}_{\acute{u}j} = \mathbf{x}_{r\acute{e}gi} + \delta \mathbf{x}.$$
 (2.44)

A megoldás konvergáltnak tekinthető, ha a kapott korrekciós vektor által okozott változások már elhanyagolhatók, vagyis ha egy előre definiált konvergenciakritériumnak eleget tesznek. Amennyiben a kapott eredménnyel nem vagyunk elégedettek, az eljárás megismételhető, az iteráció folytatható.

Az eddig elmondottakból tulajdonképpen már látszik, mi az implicit módszer két nagy hátránya: meg kell határozni a Jacobi mátrixot, ami egyáltalán nem egyszerű feladat, és nagyszámú nódust tartalmazó probléma esetén a megoldandó algebrai egyenletrendszer igen nagy méretű lehet.

Például 100 nódust alkalmazva egy modellezési feladatnál, a bemutatott öt egyenletes rendszert használva nódusonként, a probléma egy 500 × 500 méretű mátrix többszöri invertálása minden egyes lépésben, amíg a Newton-Raphson módszer nem konvergál. Általános esetben a probléma valós idejű megoldása még a mai számítástechnikai apparátus alkalmazása esetén is kockázatos. Egy klasszikus nyomottvizes erőmű nodalizációja esetén azonban szerencsére a Jacobi mátrix ritka mátrix, vagyis nagyszámú elemének értéke zérus. Továbbá egy csőszakasz esetén, mint például a primerköri hurkok, a Jacobi mátrix pl. sávmátrix, vagyis nem zérus elemek csak az átló mentén, egy adott sávban jelennek meg, hiszen információáramlás csak a szomszédos nódusok között valósul meg. Mivel ennek a struktúrának a tárolására speciális módszerek ismertek, ezért ezek felismerése és gazdaságos tárolása fontos feladat. A sávmátrixok invertálására szintén ismertek gyors numerikus módszerek, tehát ha már felismertük az ilyen szerkezeteket, akkor a teljes rendszermátrixot célszerű particionálni, és kihasználni az egyes almátrixok szerkezetét.

2.6.2. A particionált inverz formula

Elmondhatjuk tehát, hogy a diszkretizálás után kapott Jacobi mátrix elemeit tekintve ritka mátrix, és bizonyos particiói szabályos struktúrákat mutatnak. Ezek a szabályos struktúrák lehetővé teszik, hogy speciális mátrixinvertáló algoritmusokkal a megoldás sebességét növeljük. A valós idő elérése érdekében célszerű ezeket az algoritmusokat párhuzamosítani, hiszen napjainkban a többprocesszoros gépek már egyáltalán nem számítanak csodamasináknak, sőt legtöbbünk asztalán ott találhatók.

Könnyűvizes reaktorok nodalizációjának két tulajdonságát használjuk fel: a nodalizáció hurkokat tartalmaz, amelyek csak a reaktortartály nódusain keresztül csatoltak, és a hurkok szekvenciálisan kapcsolódó nódusokat tartalmaznak.

A 2.2 ábrán bal oldalon például a paksi teljesléptékű szimulátorban alkalmazott primerés szekunderköri nodalizációt láthatjuk az 1-es és 4-es hurkok esetén, a jobb oldali ábra pedig a zónában eredetileg alkalmazott nodalizációt szemlélteti.



2.2. ábra. A paksi teljesléptékű szimulátorban eredetileg alkalmazott nodalizáció az 1. és 4. primerköri hurkok és a zóna esetén.

A hurkokban egy nódus az áramlási iránytól függően csak a két szomszédos, míg a zónában akár féltucat másik nódussal is közvetlen kapcsolatban lehet. Érdemes tehát a nódusokat és természetesen a hozzájuk tartozó egyenleteket úgy rendezni a teljes rendszermátrixban, hogy azok végeredményben olyan mátrixstruktúrát eredményezzenek, amelynek megoldása hatékonnyá tehető. Mivel a nodalizáció a szimulátor futása közben nem változik, így erre a rendezésre csak egyszer van szükség, a szimuláció megkezdése előtt.

Legyen \mathbf{H}_n az n-edik hurok nodalizációjához tartozó mátrix, míg \mathbf{R} a zóna nodalizációjához rendelhető mátrix és végül $\mathbf{C}_{n1}, \mathbf{C}_{n2}$ az n-edik hurkot a reaktorhoz csatoló nódusoknak megfelelő ún. csatolási mátrix. Ekkor a teljes egyenletrendszer a következő hipermátrix alakban írható fel:

ſ	R	$\mathbf{C}_{n,2}$	$\mathbf{C}_{n-1,2}$		$\mathbf{C}_{2,2}$	$\mathbf{C}_{1,2}$ -]	$\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \end{bmatrix}$		b_1		Γ	\mathbf{B}_1	
	$\mathbf{C}_{n,1}$	\mathbf{H}_n	0		0	0		\mathbf{x}_2		\mathbf{b}_2]	
	$\mathbf{C}_{n-1,1}$	0	\mathbf{H}_{n-1}		0	0		\mathbf{x}_3	_	\mathbf{b}_3	_			(2.45)
									_		_		\mathbf{B}_2	(2.40)
	$\mathbf{C}_{2,1}$	0	0		\mathbf{H}_2	0		\mathbf{x}_n		\mathbf{b}_n				
	$\mathbf{C}_{1,1}$	0	0		0	\mathbf{H}_1		\mathbf{x}_{R}		\mathbf{b}_R]]	
-							~						\sim	
		\mathbf{A}						\mathbf{X}	=			В		

Ebben az egyenletrendszerben szereplő valamennyi mátrix ritka, vagyis többségben vannak a zérus elemek. Továbbá, szerkezetüket tekintve a **H** mátrixok sávmátrixok. Tételezzük fel,

hogy a zónamátrix és a hurokmátrixok mérete $r \times r$, illetve rendre $h_1 \times h_1, h_2 \times h_2, ..., h_n \times h_n$. Ekkor a feladat egy $k \times k$ méretű hipermátrix invertálása lenne, ahol $k = r + \sum_{i=1}^{n} h_i$.

Az ilyen módon szervezett egyenletrendszer megoldására azonban egy particionált inverz formulát alkalmazhatunk, melynek használata során az A mátrix közvetlen invertálása helyett a következő összefüggést használjuk fel [13]:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_{22}^{-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{I} \\ -\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21} \end{bmatrix} \left(\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21} \right)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{I} \\ -\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1} \end{bmatrix}^{T},$$
(2.46)

ahol

$$\mathbf{A}_{11} = \mathbf{R},\tag{2.47}$$

$$\mathbf{A}_{12} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{n,2} & \mathbf{C}_{n-1,2} & \dots & \mathbf{C}_{2,2} & \mathbf{C}_{1,2} \end{bmatrix},$$
(2.48)

$$\mathbf{A}_{21} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{n,1} & \mathbf{C}_{n-1,1} & \dots & \mathbf{C}_{2,1} & \mathbf{C}_{1,1} \end{bmatrix}^T,$$
(2.49)

$$\mathbf{A}_{22} = diag \left[\mathbf{H}_{n}, \mathbf{H}_{n-1}, ..., \mathbf{H}_{2}, \mathbf{H}_{1} \right].$$
(2.50)

Vegyük észre, hogy bár most az eredeti feladatunk helyett két invertálást kell elvégeznünk, az invertálandó mátrixok mérete $r \times r$, illetve $\sum_{i=1}^{n} h_i \times \sum_{i=1}^{n} h_i$. Továbbá mivel az \mathbf{A}_{22} hipermátrix diagonális, annak invertálása elvégezhető az átlóban szereplő mátrixok egymástól független invertálásával. Nem elhanyagolható szempont az sem, hogy ezek a mátrixok sávmátrixok, így invertálásuk hatékonyan megtehető. A függetlenség szintén fontos tulajdonság, hiszen ez biztosítja, hogy megfelelő számítási architektúrán ezeknek a mátrixoknak az invertálása párhuzamosan elvégezhető. A RETINÁ-ban a Jacobi mátrix invertálására a (2.46) összefüggést használtam fel. A mátrix összeállításához pedig egy algoritmust dolgoztam ki, amely a nodalizációt leíró táblázatból a szimuláció megkezdése előtt elrendezi az egyenleteket.

2.6.3. Kondicionálás, konvergencia, automatikus lépésközválasztás

Érdemes még megemlíteni, hogy SI mértékegységrendszert használva és dimenziós egyenleteket megoldva a probléma általában rosszul kondicionált, vagyis az így invertált Jacobi mátrix jelentős hibával lenne terhelt. Ezt elkerülendő érdemes a mátrix kondicionáltságán javítani, amire az oszlopok kiegyenlítésének módszerét használtam fel.

A nemlineáris egyenletrendszer megoldásakor fokozatosan (iterálva) jutunk el az egyre pontosabb megoldáshoz. Minden egyes iteráció után ellenőriznünk kell, hogy vajon elértük-e már a kellő pontosságot vagy sem. A konvergencia ellenőrzésére különböző módszerek léteznek, én a változónkénti ellenőrzés mellett döntöttem. Vagyis a megoldást akkor tekintjük elegendően pontosnak, ha az entalpiák, nyomás, sebesség és gáztérfogattört korrekció előírt értékek alá kerülnek.

Attól függően, hogy egy adott lépés megtételéhez hány iterációra volt szükség, célszerű a lépésközt úgy beállítani, hogy a megoldás effektív legyen. Ennek érdekében az előző lépésekben felhasznált iterációk számának függvényében állítjuk be a lépésközt. Mivel a paksi teljesléptékű szimulátorban valós idejű futás a követelmény, így a beállított lépésköznek igazodnia kell a szimulátor 0,2 sec-os lépésközéhez, a számítások elvégzéséhez tehát maximum ennyi idő áll rendelkezésre.

2.6.4. A Jacobi mátrix meghatározása

Ahogy korábban láttuk, a nemlineáris egyenletrendszer megoldásához szükségünk van a probléma Jacobi mátrixának felépítéséhez, vagyis meg kell határoznunk az egyenletek által létrehozott függvényeknek (2.38) az ismeretlen változókra vonatkozó parciális deriváltjait (2.39). Tulajdonképpen három lehetőségünk van ezek meghatározására: explicit számítás, automatikus számítás vagy véges-differencia közelítés.

A legelegánsabb megoldás kétségtelenül az automatikus számítás. Ebben az esetben a deriváltak meghatározását a program maga végzi, felhasználva a különböző műveletekre vonatkozó deriválási szabályokat. Az explicit számítás során a deriváltakat mi határozzuk meg analitikusan előre, deriválva az egyenletek által diktált függvényeket. Figyelembe véve azonban, hogy meglehetősen sok feltétel alkalmazásával jutunk el a megmaradási egyenletek egyes tagjaihoz, így ez a módszer nehézkes, és a kapott progamszerkezet is meglehetősen kusza lenne. Továbbá, ez a megoldás szintén nehézkessé tenne bármilyen későbbi módosítást. A végesdifferencia közelítés esetén az éppen kapott megoldás környezetében meg kell határoznunk a deriváltak véges-differencia közelítését. Ez a közelítés sok veszélyt rejt magában, többek között pontatlanságokat, amelyek miatt a megoldás hitelessége megkérdőjelezhető lenne. Az említett okok miatt az automatikus számítás alkalmazása mellett döntöttem. Az automatikus deriváltszámítás megvalósításánál kihasználtam azt a tényt, hogy az alapvető deriválási szabályok egyszerű számítási előírásoknak tekinthetők. Így az alapműveletek használata helyett olyan operátorokat vezettem és programoztam be, amelyek nemcsak az alapműveleteket, de az egyes változók kiszámításával párhuzamosan a megfelelő deriválásokat is elvégzik. A műveletek, amelyeknek az automatikus deriválási szabályait meg kellett valósítani: összeadás, kivonás, szorzás, osztás, hatványozás, maximum-, minimum- és abszolútérték-képzés.

Az automatikus deriválás hátránya, hogy a módszer lassú, ezért ahol lehetett és nem volt várható a program későbbi módosítása, pl. állapotegyenletek esetén, ott explicit deriválást, használtam fel.

2.7. A modellrendszer beépítése a teljesléptékű szimulátorba, ellenőrzése

A RETINA fejlesztése során numerikus, szeparálteffektus- és összetett teszteket végeztem, így verifikálva és validálva az alkalmazott numerikus megközelítést és a beépített modelleket. A numerikus és szeparálteffektus-tesztek a következő vizsgálatokat foglalták magukban [14]: áramlás vízszintes csőben a forrástagok kikapcsolása mellett, folytonossági teszt, Bernoulli teszt, áramlás fúvókában (egyfolyadékos rakéta), kiáramlás csapból (faucet flow), oszcilláló manométer, tartályfeltöltés, szelepteszt, szivattyúteszt, radiális és axiális hővezetésteszt, falhőátadási teszt és interfészhőátadási teszt.

Összetett tesztként a PMK-n (paksi modellkísérletekhez épített berendezés [15]) végzett vizsgálatok közül egy kis átmérőjű törés vizsgálatához tartozó kísérletet reprodukáltunk sikerrel, felépítve egy a PMK-nak megfelelő nodalizációt [1]. Ezután elkészítettük egy VVER-440 reaktor hathurkos nodalizációját, majd a modellrendszert a teljesléptékű szimulátortól függetlenül csatoltuk az intézetünkben fejlesztett KIKO3D neutronkinetikai kóddal. A csatolt rendszerrel egy főkeringtetőszivattyú kiesését vizsgáltuk [2].

Mivel a paksi teljesléptékű szimulátorban használt nodalizáció kis mértékben ugyan, de eltért az általunk elkészített és a KIKO3D-vel csatolt primerköri nodalizációtól, ezért elkészítettük azt a nodalizációs sémát, amelyet a paksi szimulátorban éveken keresztül használtak (ld. 2.2 ábra). Ezután megkezdődött a teljes modellrendszer ellenőrzése, az eredmények összevetése a korábbi üzemeltetési tapasztalatokkal. A végső fázisban a nodalizációt jelentősen finomítottuk elérve annak végső, jelenlegi állapotát. Ennél a nodalizációnál teljes körű tesztelést végeztünk. Alapvető elvárásként megfogalmazódott, hogy a RETINÁ-val számított 100%-os stacioner állapothoz tartozó főbb fizikai paraméterek értékei a valós mérésektől 2%-nál kisebb mértékben térhessenek csak el [16]. Ezek a paraméterek a primer hűtőkörök hidegági és melegági vízhőmérséklete, a hűtőkörök forgalmai, a főkeringtető szivattyúk nyomáskülönbsége, a nyomásesés a reaktorzónában, a térfogatkompenzátor nyomása és vízszintje, a gőzfejlesztők gőzforgalma és gőznyomása, a gőzkollektorok nyomása.

Fontos megemlíteni, hogy a megfelelő állandósult állapot eléréséhez néhány, mérésekből nem ismert, termohidraulikai paraméter finomítására volt szükség. Ilyen paraméterek a hidrodinamikai ellenállások (pl. a zóna alsó keverőterében), a párolgás és kondenzáció mértéke (pl. a gőzfejlesztőben és térfogatkompenzátorban), a hőátadási tényezők (pl. a zónában és gőzfejlesztőkben). Ennek a finomhangolásnak az eredményeként a legtöbb folyamatparaméter esetén 1%-on belüli egyezést sikerült elérni. Az állandósult állapot beállítása után megkezdődött a tranziens folyamatok ellenőrzését. Alapvető vizsgálatként a következő tranziens folyamatokat teszteltük [16]: turbinák le- és felterhelése 15MW-tal, főkeringtető szivattyúk kiesése (egy, három és hat szivattyú kiesése különböző kombinációkban), turbinakiesés és teherledobás. Ezek a reaktoroperátorok által jól ismert üzemzavari folyamatok, amelyek lefutásáról mérések, az események láncáról üzemviteli tapasztalatok állnak rendelkezésre.

Az alapvető tranziens folyamatok vizsgálata után különböző csőtöréses üzemzavarokat és baleseteket vizsgáltunk. Ezeknél a folyamatoknál referenciaként, közvetve, a hatóság által elfogadott, validált rendszerkódok által végzett számítások szolgáltak: térfogatkompenzátor lefúvató szelep nyitása, különböző méretű törések a primer- és szekunderkörben, különböző helyeken.

A tesztek elvégzése során a korábban már említett termohidraulikai paraméterek további finomítására volt szükség.

Ezeknek a teszteknek az elvégzése után a paksi instruktorok közel fél éven keresztül különböző üzemi állapotokat létrehozva tovább tesztelték a rendszert. Ellenőrizték, hogy a rendszer alkalmas-e a blokkok lehűtésének, leállításának, felfűtésének és elindításának a modellezésére. Vizsgálták, hogy a gőzfejlesztők feltöltése után kialakult ún. víz-vizes üzemmódban kiszakaszolt hurkok mellett kialakuló természetes cirkuláció is valósághű képet mutat-e. Végül a tesztek elvégzése után megkezdődött és azóta is napi két műszakban folyik a rendszer üzemszerű használata az oktatásban [17].

2.8. Példák a rendszer használatára

Annak érdekében, hogy képet adjak a rendszer által vizsgálható folyamatok komplexitásáról, három szimulált tranziens folyamatot ismertetek röviden.

2.8.1. Három főkeringtető szivattyú kiesése

Az első példában azt mutatom be, hogy mi történik, ha normál üzem közben három főkeringtető szivattyú (FKSZ) üzemszerű működése leáll tápfeszültség-kiesés miatt. A folyamat névleges teljesítményű állapotból indul. A szimulációt megállítva (FREEZE üzemmód), a paksi instruktorok az ún. instruktori rendszeren keresztül, a primerköri üzemzavarok közül FKSZ betáp-kiesés üzemzavart címeznek a 2., 4. és 6. hurkok főkeringtető szivattyúira egyszerre, majd a szimulációt újra elindítják. Ezután a vezénylőben az összes, az instruktori rendszeren keresztül pedig néhány fontosabb folyamatparaméter alakulását nyomon tudják követni. A 2.3 ábrán az instruktori rendszeren keresztül kiválasztott néhány paraméter alakulása látható. A piros görbe a neutronteljesítmény, a zöld a térfogatkompenzátor szintje, a kék a térfogatkompenzátorban kialakuló nyomás, a sárga az 1. gőzkollektor nyomása, a világoskék és rózsaszínű görbék pedig az 1. és 2. gőzfejlesztők szintjei.

A tranziens során azokban a hurkokban, amelyekben a főkeringtető szivattyúk kiestek, a forgalom lecsökken, sőt, egy idő után az áramlás iránya meg is fordul, mivel a még üzemben lévő szivattyúk a zónán keresztül hűtőközeget juttatnak ezekbe a hurkokba is. Természetesen a forgalomcsökkenés a zónára is kihat, így itt rövid időre megnövekszik a hűtőközeg hőmérséklete és így a nyomás is. Ezzel párhuzamosan a szivattyúk kiesése miatt a reaktorteljesítményszabályzó 40%-ra csökkenti a reaktorteljesítményt, aminek hatására mind a hűtőközeg hőmérséklete, mind a nyomása lecsökken. A teljesítmény stabilizálódása után a főbb folyamatváltozók az új állapotban szintén stabilizálódnak. A csökkenő hűtőközeghőmérséklet természetesen a szekunderoldalra is kihat, ahogy az a gőzfejlesztők szintjén és a gőzkollektor nyomásán is látható. Ennek a tranziensnek számos olyan sarokpontja van, amelynek alapján a RETI-NA helyes viselkedése megítélhető. Jól ismert például az az időtartam, amely alatt a kiesett hurkokban az áramlás iránya megfordul, ismert az elért maximális és minimális primerköri nyomás, a gőzfejlesztőkben kialakuló minimális és maximális vízszint, valamint a gőzkollektorokban a nyomás alakulása. Túl ezeken a jellemzőkön számos egyéb paraméter alakulása is ellenőrizhető. Bár ennél a tranziensnél csak a térfogatkompenzátorban és a gőzfejlesztőkben zajlik intenzív kétfázisú folyamat, azok pontos modellezése elengedhetetlen a fent említett mennyiségek helyes reprodukálásához. A probléma szintén kiválóan alkalmas volt néhány járulékos elem, pl. szivattvúk modelljeinek ellenőrzésére.



2.3. ábra. Fontosabb folyamatparaméterek három főkeringtető szivattyú kiesése esetén.

2.8.2. Térfogatkompenzátor biztonsági szelepének nyitása

Második példánkban azt követjük nyomon, hogy mi történik, amikor a térfogatkompenzátor biztonsági szelepét kinyitjuk és nyitva hagyjuk. Ez a folyamat is névleges teljesítményről indul, majd az instruktori rendszeren kiválasztva a TK biztonságiszelep-szivárgást, 50%-os paraméterrel hozhatjuk létre az üzemzavart. A legfontosabb paraméterek a 2.4 ábrán láthatók. Itt a piros görbe a térfogatkompenzátor nyomása, a zöld a biztonsági szelep forgalma, a kék a térfogatkompenzátor szintje, a sárga a zóna feletti nyomás, a világoskék a buborékoltató tartály nyomása és végül a rózsaszínű az 1. zsomp vízszintje.

A szelep nyitása után a térfogatkompenzátor a buborékoltató tartályba fúj le, gyorsan megemelve annak a nyomását. A tartályban a nyomás addig növekszik, amíg eléri hasadótárcsájának nyomását és azt átszakítja. A tárcsán keresztül a hűtőközeg a konténmentbe távozik, ahol a kifolyt víz hatására a zsomp szintje elkezd emelkedni. A tárcsa átszakadása után a buborékoltató tartály nyomása visszaesik. Eközben a primerkörben a nyomás fokozatosan csökken. A térfogatkompenzátor tetején a forrás folyamatos, és a szelepen keresztül újabb és újabb adag víz-gőz elegy kerül a buborékoltató tartályba, amelyet a térfogatkompenzátor vízszintjének alakulásán is láthatunk. A primerköri nyomás csökkenésével párhuzamosan csökken a kikerülő hűtőközeg mennyisége is, ahogy az a szelep forgalmán megfigyelhető.

2.8.3. Gőzvezetéktörés

Utolsó példaként a 2. gőzfejlesztő gőzvezetékében bekövetkezett 200%-os törés szimulációját mutatom be, feltételezve, hogy a gőzfejlesztő izolációs szelepek nem képesek lezárni. A tranzienst névleges teljesítményű kezdeti állapotból indítjuk, bénítva a 2. gőzfejlesztő Rockwell



2.4. ábra. Fontosabb folyamatparaméterek alakulása a térfogatkompenzátor biztonsági szelepének nyitása után.

szelepét és az ezzel sorba kötött tolózárat is. A tranzienst a 2. gőzfejlesztő gőzvezetékének törése indítja, amihez a szekunderköri üzemzavarok közül főgőzvezeték- és kollektortörést kell címezni a STEAMLIN2 vezetékre az instruktori rendszerben. Az üzemzavar paramétere: 200, vagyis egy guillotine-szerű törést modellezünk, melynek során az eltört vezeték mindkét ágán folyamatos a hűtőközegvesztés. A legfontosabb folyamatváltozók alakulása a 2.5 ábrán nyomon követhető. Itt a piros görbe a primerköri nyomást, a zöld a térfogatkompenzátor szintjét, a kék a ZÜHR szivattyúk forgalmát, a sárga és világoskék görbék pedig a gőzkollektor, illetve gőzfejlesztő nyomását mutatják.

A szimuláció során feltételezzük, hogy a sérült gőzfejlesztő izolációs szelepei nem zárnak le, emiatt a gőzfejlesztő a törésen keresztül állandóan kifújhat. A tranziens elején a szekunderkör nyomásának csökkenése ÜV1 védelmi jelet generál, ami a reaktor teljesítmény leviteléhez vezet. Emiatt a primerkör nyomása gyorsan esik. Beindulnak a nagynyomású ZÜHR szivattyúk, így a primerkör nyomása visszanő, és a befecskendezés forgalma leáll. A maradványhő lassan növeli a primerkör nyomását, amelyet a térfogatkompenzátorba periodikusan bekerülő hidegebb víz okozta kondenzáció lecsökkent. A csökkenő nyomásnál ciklikusan újrainduló ZÜHR befecskendezés a nyomást újra és újra megnöveli. Valahányszor a nyomás visszaesik, a ZÜHR befecskendezési forgalom leáll. A ZÜHR befecskendezések miatt a vízszint a térfogatkompenzátorban folyamatosan nő, amíg a térfogatkompenzátor teljesen fel nem telik. Ekkor beáll egy állandósult állapot.



2.5. ábra. Fontosabb folyamatparaméterek gőzvezetéktörés esetén.

2.9. Összefoglaló

A fejezetben összefoglaltam a RETINA kétfázisú programrendszer legfontosabb jellemzőit. A rendszert magam terveztem, a fejlesztést, néhány járulékos modelltől eltekintve, szintén magam végeztem. Irányítottam azokat a munkákat, amelynek során a rendszert csatoltuk a paksi szimulátorral. A rendszer tesztelését jelentős részben magam végeztem. Bár kb. féltucat hasonló komplexitású rendszer létezik a világban, ezeket a rendszereket jellemzően biztonsági analízisek végzéséhez használják, és legtöbbjük alkalmatlan valós idejű szimulációs feladatok megoldására. Azokról a kódokról, amelyek alkalmasak szimulációs célokra, viszonylag kevés a nyilvánosan elérhető információ, hiszen komoly szellemi értéket képviselnek. Ennek megfelelően nem egyszerű megítélni, hogy mi tekinthető új, innovatív eredménynek e területen. Kiindulva azonban a paksi szimulátorban korábban alkalmazott rendszerből és a rendszerkódok használata kapcsán szerzett tapasztalatokból, úgy gondolom, több szempontból sikerült előrelépni.

Az alkalmazott numerikus megoldó módszer egyedivé teszi az általam fejlesztett rendszert. A teljesen implicit numerikus megközelítés alkalmazása, a Jacobi mátrix meghatározása automatikus deriválással és a kapott egyenletrendszerhez kapcsolódó ritka mátrixok szervezése és invertálása egy robusztus, jól párhuzamosítható, hatékony eszközt eredményezett, amely képes valós időben szimulálni üzemzavari és baleseti szituációkat a paksi igényeknek megfelelően. Utóbbi igények eltérnek valamelyest a nemzetközi gyakorlattól. Az általános gyakorlat ugyanis az, hogy folyamatoknak csak egy adott köre vizsgálható a szimulátorral, jól behatárolt operátori beavatkozásokkal (követve az állapotorientált kezelési utasítást). Ezzel szemben a paksi oktatók nagy hangsúlyt helyeznek a "gondolkodó operátorok" képzésére, vagyis az ope-

rátori beavatkozások nincsenek korlátozva, így az operátorok bizonyos szimulációs gyakorlatok során lényegében bármilyen módon, bármikor beavatkozhatnak. Természetesen elvárás, hogy a szimuláció bármely kialakult helyzetben fizikailag plauzábilis képet mutasson, amely igen komoly követelmény a termohidraulikai rendszerrel szemben.

Ezenkívül érdemes még megjegyezni, hogy biztonsági elemzések során végzett rendszertechnikai számításokban a nodalizációt és paraméterkészletet gyakorlatilag vizsgálatról vizsgálatra változtathatjuk, finomítva a nodalizációt például ott, ahol a minket érdeklő fizikai folyamatok zajlanak. A legtöbb rendszerkódban összetett, sok paraméteres modellek közül választhatunk ugyanazon fizikai folyamat modellezésére. Ezzel szemben egy valós idejű szimulátorban nincs lehetőség a nodalizáció, a modellek és a paraméterkészlet variálására, vagyis egyetlen olyan koherens modell- és paraméterkészletet kellett létrehozni, amely a minket érdeklő folyamatok teljes köre esetén valósághű eredményekhez vezet. Így bár a RETINÁ-ban alkalmazott modellek mindegyike már korábban is létező korrelációkon alapul, azok általánosítását és paraméterezését úgy, hogy gyakorlatilag a teljes üzemi, üzemzavari és baleseti vizsgálati kört képesek legyenek lefedni, szintén fontos, saját eredménynek tartom. A modellek választásánál az egyszerűségre törekedtem, vagyis egy-egy jelenség modellezésénél a lehető legegyszerűbb modellt igyekeztem alkalmazni annak érdekében, hogy minimalizáljam a paraméterek hangolási lehetőségét, amelynek kérdéskörével a következő fejezetben foglalkozom.

3. fejezet

Termohidraulikai folyamatok mezoszkopikus modellezése

Az előző fejezetben kétfázisú termohidraulikai folyamatok rendszerszintű modellezésével foglalkoztam. Ismertettem egy modellrendszert és a kapcsolódó numerikus apparátust, amellyel a paksi erőmű teljes primerkörében és a szekunderkör egy releváns részében zajló folyamatokat tudjuk modellezni. A rendszer tesztelése kapcsán többször megemlítettem, hogy a valósághű eredmények elérése érdekében bizonyos paraméterek "hangolására" volt szükség. Ez a fajta megközelítés sajnos nem idegen a gyakorlattól, az ismeretlen paraméterek hangolását Zuber találóan "kód- dzsokéságnak" (code jocking) nevezte, és felhívta a figyelmet arra, hogy a jövő rendszerkódjait lehetőség szerint úgy kellene felépíteni, hogy szükségtelen legyen ennek a gyakorlatnak a használata [18]. Ezt természetesen úgy lehet elérni, hogy az alapvető fizikai folyamatokat jobban megismerve olyan - a lehető legegyszerűbb, minimális paraméterhalmazzal rendelkező - korrelációkat dolgozunk ki, amelyek parametrizálása rutinfeladat. A folyamatok alaposabb megismerésére használhatunk jól megtervezett, valódi fizikai vagy numerikus kísérleteket. Nem elfeledve a valódi fizikai kísérletek jelentőségét, számos érv szól a numerikus megközelítések használata mellett. A legfontosabb talán az az információmennyiség, amelyet a numerikus kísérletek szolgáltathatnak a mérésekkel szemben. Még egy, a legkorszerűbb méréstechnikát alkalmazó mérés sem képes információt adni a vizsgálati tartomány egészéről és az összes termohidraulikai paraméterről, amely egy numerikus kísérlet esetén természetes módon áll rendelkezésre. Továbbá a numerikus kísérletezés lehetővé teszi, hogy termohidraulikai paramétereket egymástól függetlenül variáljunk, ami jelentősen megkönnyítheti a modellalkotást és -ellenőrzést. Ennek megfelelően a RETINA fejlesztése után olyan numerikus módszert kerestem, amely lehetővé teszi kétfázisú áramlások finomskálás modellezését. Ebben a fejezetben ennek az útkeresésnek a során elért eredményeimet összegzem.

3.1. Kétfázisú áramlások finomskálás numerikus modellezési módszerei

2002-ben összefoglaltam a RETINA fejlesztésének tapasztalatait, és ismertettem azokat a numerikus modellezési módszereket, amelyeket abban az időben kétfázisú áramlások finomskálás numerikus modellezésére használtak, több-kevesebb sikerrel [19]. Finomskálás modellezés alatt a problémák olyan részletességű leírására gondolok, ami lehetővé teszi akár egyetlen buborék viselkedésének vizsgálatát. Ilyen részletességű modellezés esetén a szakirodalomban gyakran találkozhatunk a kétfázisú áramlások direkt numerikus szimulációja (Direct Numerical Simulation - DNS) megnevezéssel. Ez az elnevezés azonban sok esetben kissé szerencsétlen, hiszen DNS alatt jellemzően olyan metodikai megközelítést értünk, amely során olyan alapvető egyenleteket oldunk meg, melveknek a megoldása, kellően finom numerikus felbontás esetén, mindenféle kiegészítő modell alkalmazása nélkül képes a fizikai folyamatok pontos reprodukciójára. Például turbulens áramlások esetén, a Navier-Stokes egyenleteket a Kolmogorov skála nagyságrendjébe eső felbontás mellett numerikusan megoldva a pontos megoldást kaphatjuk turbulencia-modell alkalmazása nélkül [20]. Kétfázisú áramlások esetén azért szerencsétlen ez az elnevezés, mert közel sem beszélhetünk egy olyan jól letisztult egyenletrendszerről, mint egyfázisú áramlásoknál. Kétfázisú áramlások leírásához szinte minden esetben szükség van valamilyen modellre, ami eleve megkérdőjelezi ennek az elnevezésnek a használatát. Igy a továbbiakban inkább a *finomskálás modellezés* kifejezést fogom használni, utalva arra a tényre, hogy vizsgálataimhoz olyan módszerre van szükség, amely a fázisokat elválasztó interfészt valamilyen szinten képes felbontani.

Az interfész felbontása alapján a módszereket lényegében két csoportba lehet sorolni: szinguláris és diffuzivinterfész-módszerek. A szingulárisinterfész-módszerek a két fázist elválasztó felületet mint a termofizikai paraméterekben (nyomás, hőmérséklet, sűrűség, viszkozitás, fajhő, hővezetés stb.) bekövetkező szingularitás fogják fel. A felületen a mennyiségek ugrásszerűen változnak. Mivel a gyakorlatban, a kritikus ponthoz közeli helyzeteket leszámítva, az interfész vastagsága néhány Angström, ez a fajta megközelítés a legtöbb esetben indokoltnak tekinthető. Ugyanakkor numerikus szempontból és sok valós fizikai folyamat modellezése esetén, ott, ahol az interfész komolyabb strukturális változáson megy keresztül (pl. buborékok keletkezése, eltűnése, összeolvadása stb.) ennek a megközelítésnek a használata igencsak nehézkes, és fizikai szempontból is sok esetben megkérdőjelezhető.

A diffuzivinterfész-módszerek ezzel szemben az interfészen keresztül bekövetkező termofizikai paraméterek változását folytonosnak tekintik. Ennek a leírásnak a szigorú használata megköveteli, hogy a probléma felbontására használt rács olyan finomságú legyen, hogy az interfésznél bekövetkező átmeneteket folytonosnak tekinthessük, és az itt fellépő gradienseket numerikusan pontosan tudjuk kezelni. Vagyis, további megfontolások nélkül, a rácsfelbontásnak Angström nagyságrendűnek kell lennie, amely számos valódi műszaki probléma modellezését kizárhatja. Nagy előnye e módszernek, hogy az interfész kezelése rendkívül egyszerű, gyakorlatilag nem igényel különösebb numerikus befektetést.

A szingulárisinterfész-módszerek közül a gyakorlatban szinte kizárólag az ún. beágyazott interfész-módszerek bizonyultak használhatónak. Ennél a módszernél egy stacioner alaprácson

oldjuk meg a problémát egy speciális modellt használva, mely az éppen aktuális interfészstruktúrának megfelelő adaptív rácsot fektet az alaprácsra. Az interfészen keresztül, a rendszerkódokhoz hasonlóan, ugrási feltételeken keresztül kapcsolódik a két fázist leíró egyenletrendszerek halmaza. Ez a megközelítés jól alkalmazható olyan esetekben, amikor egy-egy strukturális elem (buborék, csepp) dinamikai viselkedését akarjuk tanulmányozni, ugyanakkor a megoldás egyre bonyolultabbá válik, minél több elem kerül a vizsgálatok kereszttüzébe.

A diffuzivinterfész-módszerek közül a klasszikus megközelítés egy transzportegyenletet vezet be az interfész modellezésére, e megközelítés mellett azonban számos további módszer alakult ki (level-set, volume of fluid stb.) [21]. Vizsgálataim megkezdésekor választásom azért esett a rács-Boltzmann módszerre, mert részecsketermészete miatt olyan megközelítést kínált kétfázisú áramlások modellezésére, amely a valós fizikai folyamatokhoz igen közel állt, szemben más megközelítésekkel, amelyek inkább matematikai alapokon igyekeztek a problémát megoldani. Az alábbiakban a módszer fejlesztése és alkalmazása kapcsán elért eredményeimet tekintem át.

Fontos hangsúlyozni, hogy a finomskálás modellezés napjainkban és várhatóan a közeljövőben sem lesz alkalmas arra, hogy segítségével műszaki problémák széles körét oldjuk meg, közvetlenül. Erre szolgálnak az ún. CFD (Computational Fluid Dynamics) kódok, amelyekben az alkalmazott modellek fejlesztéséhez azonban komoly segítséget nyújthatnak a finomskálás modellezésből szerzett információk. A finomskálás számításokkal felderíthetjük és ellenőrizhetjük a folyamatváltozók közötti funkcionális kapcsolatot, lehetőség van paraméterek szélsőértékeinek felderítésére, ahogy azt értekezésem e fejezetében bemutatom. Végül megjegyzem, hogy pont ennek a hierarchikus fejlesztésnek a megvalósítására jött létre 2005-ben egy európai uniós projekt, a NURESIM. Termohidraulikai oldalon a projekt alapvető célja létrehozni a nukleáris ipar számára egy kifejezetten kétfázisú áramlások pontos modellezésére alkalmas CFD kódot. A projektben 2005 és 2007 között, majd a munka folytatásaként létrejött NURISP projektben 2009 és 2011 között én is részt vettem és veszek, vezetem a magyar kutatásokat, amelyeknek egyik célja volt megmutatni, hogyan lehet a finomskálás modellezés eredményeit felhasználni a CFD kódok fejlesztésében. Ennek az elképzelésnek a további részleteiről a projekt résztvevőivel közösen készített publikációból kaphat általános képet az Olvasó [22].

3.2. A rács-Boltzmann módszer

3.2.1. Rövid történeti áttekintés

A rács-Boltzmann módszer jelentősen eltér az alapvető folyadékmechanikai problémák megoldására használt módszerektől, amelyek jellemzően a makroszkopikus megmaradás-egyenleteket (Navier-Stokes egyenletek, stb.) oldják meg valamilyen numerikus módszerrel (pl. végestérfogatmódszerrel).

A rács-Boltzmann módszer esetén a probléma megoldását egy diszkretizált kinetikus egyenlet megoldásán keresztül keressük. Mielőtt azonban ennek az egyenletnek az ismertetésébe belekezdenék, érdemes röviden megismerkedni azzal az úttal, amely ehhez az egyenlethez vezetett. Így talán könnyebb megérteni a ma használt modellek mögött rejlő filozófiát, és azt, hogy miért tartom mind a mai napig e módszert a legígéretesebbnek a kétfázisú folyamatok modellezése területén.

Annak ellenére, hogy a folyadékokat és gázokat mikroszkopikus szinten diszkrét atomok és molekulák építik fel, makroszkopikus szinten mind a folyadékok, mind a gázok legtöbb esetben folytonos viselkedést mutatnak, és dinamikájuk leírására parciális differenciálegyenleteket használhatunk. Ezeknek az egyenleteknek az alakja független a mikroszkopikus részletektől, mivel ha a molekulák közötti kölcsönhatások kielégítenek bizonyos megmaradási törvényeket, akkor ezek a kölcsönhatások csak a transzportegyütthatókat (pl. viszkozitás, hővezetési ténvező) befolvásolják, az egyenletek alakját nem. Vagyis makroszkopikus szinten képesek lehetünk valósághű eredményeket produkálni, a molekuláris kölcsönhatások részletes ismerete nélkül. Ezt használják ki a tradicionális megközelítések, amelyek, mint már említettem, a makroszkopikus egyenleteket oldják meg. Akadnak ugyanakkor olyan problémák, elsősorban az anyagtudományi kutatások területén, ahol a molekulák közötti kölcsönhatások részletes modellezésére van szükség. Ilyen esetekben lehetőség van arra, hogy egy rendszerben az összes (vagy legalábbis statisztikai szempontból elegendő) molekula mozgását, és a köztük lévő kölcsönhatásokat (pl. ütközés) figyelembe vegyük a rendszer modellezése során. Ezt a megközelítést molekuláris dinamika szimulációnak hívjuk, és segítségével csak igen kisléptékű folyamatok vizsgálatára nyílik lehetőség, még a mai korszerű számítógépek jelentős teljesítménye mellett is.

Ilyen szimulációkban egy lehetséges mód arra, hogy a számítási erőforrásigényt jelentősen redukáljuk, a vizsgált rendszer szabadsági fokszámának csökkentése, pl. úgy, hogy a molekulák lehetséges mozgását egy szabályos rácsra kényszerítjük. Ilyen esetekben már nem beszélhetünk individuális molekulákról, hanem ehelyett részecskecsoportokról, amelyek valamilyen szabály, átlagolás stb. alapján csak a kijelölt irányokban mozoghatnak. Mivel itt szakítunk az egyes részecskék dinamikájának vizsgálatával, ezeket a módszereket mezoszkopikus módszereknek nevezzük.

Bár az ún. rácsmódszereket már a múlt évszázad húszas éveitől kezdve használták, Hardy, Pomeau és Pazzis 1976-ban fejlesztette ki az első ún. rács-gáz automatát, amelyet hidrodinamikai szimulációra használtak [23]. Ebben a szerzők neve alapján később HPP modellnek nevezett automatában egy szabályos négyszög alakú rácsot fektettek a geometriai tartományra, a rácspontok között egységnyi hosszúságú rácséleket használva. Egy logikai változót rendeltek minden élhez, melynek értéke 1 volt, ha ott volt részecske, különben 0. Vagyis egy adott helyen, egy adott időpillanatban csak egy részecske ún. Boolean molekula lehetett, amely az adott irányban mozgott. A szimuláció maga két egyszerű lépésből állt: terjedés és ütközés. Az első lépésben minden egyes részecske a rács élei által kijelölt irányba mozgott, majd a második lépésben az alkalmazott ütközési szabálynak megfelelően vagy megváltoztatták mozgásuk irányát vagy sem. Az első modellben az ütközési szabály rendkívül egyszerű volt, irányváltás csak akkor történt, ha a részecskék "frontálisan" ütköztek, vagyis ha két részecske szemben találta magát egymással. Ilyenkor mozgásukat az eredeti irányra merőlegesen folytatták. Érdemes megemlíteni, hogy mindkét lépés térben lokális, így a módszer könnyedén használható volt párhuzamos architektúrájú számítógépeken. Adott térrészre integrálva a részecskék tömegét és impulzusát, makroszkopikus mennyiségeket lehetett származtatni, amelyekről kimutatták,

hogy kielégítenek egy, a Navier-Stokes egyenletekhez hasonló egyenletrendszert. Három alapvető különbség volt az így származtatott egyenletek és a Navier-Stokes egyenletek között. Egyrészről az impulzusáram-sűrűség tenzor nem volt izotróp, másrészről az így kapott egyenlet nem volt Galilei invariáns, és végezetül az így alkotott modell rendelkezett néhány a valós fizikai folyamatoktól távol álló gyanús megmaradási tulajdonsággal. Mivel mindhárom tulajdonság a rács-Boltzmann módszer részletes tárgyalásánál is előkerül, így itt csak röviden azt érdemes megjegyezni, hogy a fenti problémák mindegyikét sikerült elkerülni egy Frisch, Hasslacher és Pomeau által bevezetett új, háromszög alakú rácsot alkalmazó, a szerzők neve után FHP-nek keresztelt modellel [24]. Mivel a rács-gáz módszerek esetén a makroszkopikus mennyiségek egy adott térrészrre vonatkozó átlagolás eredményeként adódtak, a probléma térés időszerinti felbontásától függően a megoldás zajjal terhelt volt. A zaj elkerülésére McNamara és Zanetti [25] részecskeeloszlás-függvények bevezetését javasolta, vagyis ahelyett, hogy Boolean molekulák mozogtak volna a rácson, az eloszlásfüggvényeket mozgatták, és ütközési szabályok alkalmazása helyett bevezettek egy ütközési operátort, amely az ütközések által okozott eloszlásfüggvények közötti impulzuselosztást végezte. Megszületett a rács-Boltzmann módszer, amelynek alapegyenlete a fent leírt algoritmus szerint

$$\underbrace{f_i(\mathbf{r} + \delta_x, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{r}, t)}_{\text{terjedés}} = \underbrace{\Omega(f_i)}_{\text{ütközés}}, \tag{3.1}$$

ahol \mathbf{c}_i a részecskesebesség, δ_t az időlépés, $\delta_x = \delta_t \mathbf{c}_i$ a rácspontok közötti távolság és $f_i(r, c, t)$ az egy-részecske eloszlásfüggvény. A függvényt úgy definiálhatjuk, hogy $f_i(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{c}$ megadja azon molekulák számát a t időpillanatban, amelyek az \mathbf{r} és $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ térrészben \mathbf{c} és $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ sebességintervallumba eső sebességgel mozognak. A jobb oldalon szereplő $\Omega(f_i)$ operátort kezdetben egy mátrix segítségével definiálták, megadva, hogy az egyes irányokba mozgó eloszlásfüggvények között milyen módon történjen meg az impulzus újraelosztása. Ennek az operátornak a létrehozásánál számos "játékszabályt" be kellett tartani, vagyis biztosítani kellett, hogy az ütközés ne befolyásolja a tömeg- és impulzusmegmaradást, valamint, hogy az ütközések makroszkopikus szinten izotrópiát garantáljanak, vagyis tetszőleges módon fektethessük rácsunkat a vizsgált geometriai tartományra, az eredményt ne befolyásolja a rács és a vizsgált geometria viszonya.

A módszer fejlődése a továbbiakban több szálon futott, és talán a legsikeresebb ágnak tekinthető a következő fejezetben bemutatott BGK modell.

3.2.2. A BGK modell

Mivel az általam elért legtöbb eredmény a BGK modell fejlesztéséhez és alkalmazásához kapcsolódik, ezért részletesen tárgyalom az e modellel kapcsolatos legfontosabb tudnivalókat. Megadom azokat a levezetéseket, amelyek szükségesek eredményeim megértéséhez és értékeléséhez.

Az ütközési operátor legegyszerűbb alakja az ún. BGK (Bhatnagar, Gross, Krook) ütközési operátor, mely az ütközés folyamatát egy egyszerű relaxációs folyamatként írja le, és amelynek

dc 143 10



3.1. ábra. Síklapok közötti áramlás vizsgálatához az áramlási tartományt elemi cellákra bontjuk. Minden egyes cellában rácsvektorok helyezkednek el, amelyekhez eloszlásfüggvényeket rendelünk.

során a részecskeeloszlás-függvények mindegyike egy lokális egyensúly felé tart [26]. Az így felírható egyenlet az ún. rács-BGK egyenlet

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau} \left[f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) \right], \qquad (3.2)$$

ahol τ a relaxációs állandó és f_i^{eq} a lokális egyensúlyi eloszlásfüggvény amely felé az eloszlásfüggvények ütközés során tartanak.

Az egyensúlyi eloszlásfüggvény legegyszerűbb lehetséges alakja

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[1 + \frac{u_\gamma c_{i\gamma}}{c_s^2} + \frac{u_\gamma u_\zeta}{2c_s^4} \left(c_{i\gamma} c_{i\zeta} - c_s^2 \delta_{\gamma\zeta} \right) \right], \tag{3.3}$$

ahol ρ a sűrűség, u a hidrodinamikai sebesség, míg w_i egy súlytényező és c_s az ún. rácsvagy pszeudohangsebesség. Utóbbi két mennyiség minden modell esetén konstans, és szerepük ismertetésére hamarosan kitérek. Itt és a továbbiakban is a tenzoroknál az Einstein-féle összegzési konvenciót fogom használni, vagyis az egy tagon belül ismétlődő görög indexek az összes térdimenzióra vonatkozó implicit összegzést is jelölik.

Ezt az egyenletet felhasználva egy rács-Boltzmann szimuláció a következő módon építhető fel. A vizsgált geometriai tartományra egy szabályos rácsot fektetünk, a 3.1 ábrán pl. két sík fal között egy csatornát töltünk fel elemi rácscellákkal, amelyekben a rácsvektoraink elhelyezkednek. Minden egyes rácsvektorhoz hozzárendelünk egy eloszlásfüggvényt, amely a fent leírt egyenlet alapján lesz újraszámolva. Ehhez az újraszámoláshoz használhatjuk a rács-gáz módszernél már megismert kétlépéses algoritmust, hiszen az egyenlet baloldala itt is egy terjedési fázist, míg az egyenlet jobb oldala egy ütközési fázist ír le. A jobb oldalon szereplő egyensúlyi eloszlás meghatározásához szükség van a pillanatnyi sűrűség és a hidrodinamikai sebesség meghatározására. Ezt az eloszlásfüggvények megfelelő momentumaiként számolhatjuk:

$$\rho = \sum_{i} f_i , \quad \rho u_\alpha = \sum_{i} f_i c_{i\alpha}.$$
(3.4)

dc 143 10

Chapman-Enskog sorfejtés segítségével megmutatható, hogy a (3.2) egyenlet alapján számolva az eloszlásfüggvényeket, a (3.4) által minden lépésben kiértékelt momentumok adott pontossággal kielégítik a Navier-Stokes egyenleteket. Mivel néhány eredményem e származtatáshoz kapcsolódik, ezért a következő fejezetben kitérek ennek részleteire is. Érdemes azonban néhány észrevételt tenni anélkül, hogy a levezetés részleteiben elmerülnénk. A folyadékmechanika alapegyenletei a tömeg és impulzus makroszkopikus megmaradását fejezik ki. Márpedig, ha ezeket a megmaradási törvényeket "kicsiben", mezoszkopikus szinten tiszteletben tartjuk, úgy nyilvánvaló, hogy "nagyban" makroszkopikus szinten is teljesülni fognak. Tulajdonképpen ez történik itt is. A rács-Boltzmann egyenlet bal oldala egy egyszerű terjedési mechanizmust ír le, így az a tömeg- és impulzusmegmaradást nem befolyásolja. Ha tehát garantáljuk, hogy az ütközés a tömegre és impulzusra nézve is konzervatív, akkor mezoszkopikus szinten megtettünk mindent, hogy garantáljuk: a (3.4) momentumként számított makroszkopikus mennyiségek is megőrződnek. Ahhoz, hogy az ütközési operátor a tömeg- és impulzusmegmaradást biztosítsa, az ún. ütközési invariánsoknak ki kell elégíteniük a következő összefüggéseket

$$\sum_{i} \Omega_{i} = 0 , \qquad \sum_{i} \mathbf{c}_{i} \Omega_{i} = 0.$$
(3.5)

A BGK operátor esetén ez a

$$\sum_{i} f_i^{neq} = 0 \quad , \qquad \sum_{i} \mathbf{c}_i f_i^{neq} = 0 \tag{3.6}$$

kritériumokkal egyenértékű, ahol $f_i^{neq} = f_i - f_i^{eq}$ az ún. nemegyensúlyi eloszlásfüggvény. Mivel $\rho = \sum_i f_i$ és $\rho u_{\alpha} = \sum_i f_i c_{i\alpha}$ ezért ezeket a kritériumokat a legegyszerűbben úgy tudjuk kielégíteni, hogy a lokális egyensúly eloszlásfüggvények alkalmas megválasztásával biztosítjuk, hogy

$$\rho = \sum_{i} f_{i}^{eq} , \quad \rho u_{\alpha} = \sum_{i} f_{i}^{eq} c_{i\alpha}.$$
(3.7)

Könnven ellenőrizhető, hogy a (3.3) alakban megadott egyensúlvi eloszlásfüggvények kielégíthetik ezeket a kritériumokat, amennyiben egy alkalmasan megválasztott rács esetén a w_i súlyokat és c_s rács-hangsebességet helyesen választjuk meg.

3.2.3. A makroszkopikus egyenletek származtatása

Mivel a rács-Boltzmann módszer pontosságának meghatározása nem olyan triviális feladat, mint a hagyományos megoldó módszereknél, ezért számos félreértéssel, hibás következtetéssel találkozhatunk a szakirodalomban. Ahhoz, hogy megértsük e hibák mibenlétét, szükség van néhány alapvető fogalom tisztázására.

Rácstulajdonságok

A 3.1 ábrán már láthattunk egy rácsot, amelyet rács-Boltzmann szimulációkban alkalmazni szoktunk. Fontos azonban megjegyezni, hogy tulajdonképpen rácsok széles köréből választ-

hatunk, amennyiben azok kielégítenek bizonyos szimmetriatulajdonságokat. Konkrétan ezek a szimmetriatulajdonságok ahhoz kellenek, hogy a makroszkopikus szinten származtatható Navier-Stokes egyenletben az impulzusáram-sűrűség tenzor izotrópiáját biztosítsuk. Ha a (3.3) összefüggés alapján határozzuk meg az egyensúlyi eloszlást, akkor a megfelelő rácsok hiányzó páratlan rangú tenzorokat

$$\sum_{i} w_{i}c_{i\alpha} = \sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma} = \sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}c_{i\zeta}c_{i\eta} = 0, \qquad (3.8)$$

és izotróp páros rendű tenzorokat kell, hogy adjanak negyedrendig (termikus modellek esetén hatodrendig, a termikus modellekkel külön foglalkozok majd):

$$T_{\alpha\beta}^{(2)} = \sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta} = \Psi_{1}\delta_{\alpha\beta}, \qquad (3.9)$$

$$T_{\alpha\beta\gamma\zeta}^{(4)} = \sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}c_{i\zeta} = \Phi_{4}\Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta} + \Psi_{4}\left(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\zeta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta}\delta_{\beta\gamma}\right), \qquad T_{\alpha\beta\gamma\zeta\eta\theta}^{(6)} = \sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}c_{i\zeta}c_{i\eta}c_{i\theta} = \Phi_{6}\Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta\eta\theta} + + \Psi_{6}\left(\delta_{\alpha\beta}\Delta_{\gamma\zeta\eta\theta} + cp\{\alpha - \theta\}\right) + \Gamma_{6}\left(\delta_{\alpha\beta}T_{\gamma\zeta\eta\theta}^{(4)} + cp\{\beta - \theta\}\right),$$

ahol

$$\begin{split} \delta_{\alpha\beta} &= \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \alpha = \beta \\ 0 & \text{máskülönben} \end{array} \right, \\ \Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta} &= \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \alpha = \beta = \gamma = \zeta \\ 0 & \text{máskülönben} \end{array} \right, \\ \Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta\eta\theta} &= \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \alpha = \beta = \gamma = \zeta = \eta = \theta \\ 0 & \text{máskülönben} \end{array} \right. \end{split}$$

és c.p. az összegzés folytatását jelöli az indexek ciklikus permutációjával. Minden más paraméter a rácstól függő konstans.

Egy konkrét rács választása esetén (ld. például a 3.1 ábrán látható D3Q19 - háromdimenziós 19 sebességes rács) a fenti rácsösszefüggések jelentősen egyszerűsíthetők.

Az értekezésben használt rácsok esetén (D2Q9, D2Q17, D3Q15, D3Q19, D3Q27) például a hatodrendű tenzor kifejezhető a következő egyszerűbb módon is

$$T^{(6)}_{\alpha\beta\gamma\theta\zeta\eta} = \Phi_6 \Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta\eta\theta} + \Psi_6 P_{\alpha\beta\gamma\theta\zeta\eta}, \qquad (3.10)$$

,

ahol


3.2. ábra. Kétdimenziós kilencsebességes rács (D2Q9).

$$P_{\alpha\beta\gamma\theta\zeta\eta} = \delta_{\alpha\beta}\Delta_{\gamma\zeta\eta\theta} + \delta_{\alpha\gamma}\Delta_{\beta\zeta\eta\theta} + \delta_{\alpha\zeta}\Delta_{\beta\gamma\eta\theta} + \delta_{\alpha\eta}\Delta_{\beta\gamma\zeta\theta} + \delta_{\alpha\theta}\Delta_{\beta\gamma\zeta\eta}$$
(3.11)
+ $\delta_{\beta\gamma}\Delta_{\alpha\zeta\eta\theta} + \delta_{\beta\zeta}\Delta_{\alpha\gamma\eta\theta} + \delta_{\beta\eta}\Delta_{\alpha\gamma\zeta\theta} + \delta_{\beta\theta}\Delta_{\alpha\gamma\zeta\eta}$
+ $\delta_{\gamma\zeta}\Delta_{\alpha\beta\eta\theta} + \delta_{\gamma\eta}\Delta_{\alpha\beta\zeta\theta} + \delta_{\gamma\theta}\Delta_{\alpha\beta\zeta\eta}$
+ $\delta_{\zeta\eta}\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} + \delta_{\zeta\theta}\Delta_{\alpha\beta\gamma\eta}$
+ $\delta_{\eta\theta}\Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta}.$

Az egyik leggyakrabban alkalmazott D2Q9 (kétdimenziós kilencsebességes) modell esetén (ld. 3.2 ábra) a rácsvektorok:

$$\mathbf{c}_{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_{1-4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_{5-8} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Ahhoz, hogy e rács esetén a (3.7) teljesüljön, a súlyoknak a következő értékeket kell felvenniük:

$$w_0 = 4c_s^4$$
, $w_{1-4} = c_s^4$, $w_{5-8} = \frac{c_s^4}{4}$ (3.13)

a modellben szereplő rácshangsebesség pedig

$$c_s = 1/\sqrt{3}.\tag{3.14}$$

Hasonlóan megmutatható, hogy egy háromdimenziós tizenöt, illetve tizenkilenc sebességes modell esetén, ahol

dc_143_10



3.3. ábra. Háromdimenziós 19 sebességes rács (D3Q19).

a rácssúlyokra a következő értékeket kapjuk

$$w_0^{D3Q15} = 2c_s^4$$
, $w_{1-6}^{D3Q15} = c_s^4$, $w_{7-14}^{D3Q15} = \frac{c_s^4}{8}$, (3.16)

$$w_0^{D3Q19} = 3c_s^4$$
, $w_{1-6}^{D3Q19} = \frac{c_s^4}{2}$, $w_{7-18}^{D3Q19} = \frac{c_s^4}{4}$. (3.17)

a modellben szereplő rácshangsebesség pedig megegyezik (3.14)-el.

Chapman-Enskog sorfejtés

Feltételezve, hogy az alkalmazott rács rendelkezik az előző fejezetben bemutatott szimmetriatulajdonságokkal, megmutatható, hogy a rács-Boltzmann egyenletből hogyan származtathatók a kívánt makroszkopikus egyenletek. Mivel a levezetés szükségszerű ahhoz, hogy az Olvasó eredményeim közül néhányat értékelni tudjon, ugyanakkor igen összetett, így néhány részletet az Olvasó a függelékben fog megtalálni, ahogy majd hivatkozni fogok rá.

Vezessük be az $\epsilon = \delta_t$ paramétert és a következő operátort $D_t \equiv (\partial_t + c_{i\alpha}\partial_{\alpha})$.

Taylor sorba fejtve a (3.2) rács-Boltzmann egyenlet bal oldalát írhatjuk, hogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\epsilon^n}{n!} D_t^n f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau} \left[f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) \right], \qquad (3.18)$$

ami átrendezés után

$$f_i(\mathbf{r},t) = f_i^{eq}(\mathbf{r},t) - \tau \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\epsilon^n}{n!} D_t^n f_i(\mathbf{r},t)$$
(3.19)

alakban írható fel. Vezessünk be három időskálát és a megfelelő sorfejtéseket

$$t_{0} = t, t_{1} = \epsilon t, t_{2} = \epsilon^{2} t, (3.20)$$
$$f_{i} = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^{n} f_{i}^{(n)}, \partial_{t} = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^{n} \partial_{t_{n}}, D_{t} = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^{n} \partial_{t_{n}} + c_{i\alpha} \partial_{\alpha}.$$

Behelyettesítve az eloszlásfüggvények sorfejtését a (3.19) bal oldalába és másodrendig megtartva a tagokat, kapjuk a következő összefüggést

$$f_{i} \equiv f_{i}^{(0)} + \epsilon f_{i}^{(1)} + \epsilon^{2} f_{i}^{(2)} = f_{i}^{eq} \left(\mathbf{r}, t\right) - \tau \left(\epsilon D_{t} + \frac{\epsilon^{2}}{2} D_{t}^{2}\right) f_{i}(\mathbf{r}, t) + O(\epsilon^{3}).$$
(3.21)

Behelyettesítve a sorfejtéseket a (3.19) jobb oldalába, kapjuk, hogy

$$f_{i} \equiv f_{i}^{(0)} + \epsilon f_{i}^{(1)} + \epsilon^{2} f_{i}^{(2)} = f_{i}^{eq} \left(\mathbf{r}, t\right) - \tau \epsilon \left(\partial_{t_{0}} + \epsilon \partial_{t_{1}} + \epsilon^{2} \partial_{t_{2}} + c_{i\alpha} \partial_{\alpha}\right) \left(f_{i}^{(0)} + \epsilon f_{i}^{(1)} + \epsilon^{2} f_{i}^{(2)}\right) - \tau \frac{\epsilon^{2}}{2} \left(\partial_{t_{0}} + \epsilon \partial_{t_{1}} + \epsilon^{2} \partial_{t_{2}} + c_{i\alpha} \partial_{\alpha}\right)^{2} \left(f_{i}^{(0)} + \epsilon f_{i}^{(1)} + \epsilon^{2} f_{i}^{(2)}\right).$$
(3.22)

Csoportosítsuk most a (3.22) tagjait ϵ szerinti rendjüknek megfelelően

$$\begin{array}{ll}
O(\epsilon^{0}): & f_{i}^{(0)} = f_{i}^{eq} \\
O(\epsilon^{1}): & -\frac{1}{\tau}f_{i}^{(1)} = D_{t_{0}}f_{i}^{(0)} \\
O(\epsilon^{2}): & -\frac{1}{\tau}f_{i}^{(2)} = \partial_{t_{1}}f_{i}^{(0)} + D_{t_{0}}f_{i}^{(1)} + \frac{1}{2}D_{t_{0}}^{2}f_{i}^{(0)}
\end{array} ,$$
(3.23)

ahol $D_{t_n} \equiv (\partial_{t_n} + c_{i\alpha}\partial_{\alpha})$ és az egyszerűség kedvéért elhagytam a függvények (**r**, t) argumentumát. Itt látható, hogy a nulladrendű tag tulajdonképpen nem más, mint az egyensúlyi eloszlásfüggvény.

Felhasználva a D_{t_n} operátort és behelyettesítve a 0-ad rendű egyenletet az elsőrendű egyenletek, a következő egyenletet kapjuk

$$-\frac{1}{\tau}D_{t_0}f_i^{(1)} = D_{t_0}^2f_i^{(0)}, \qquad (3.24)$$

ami behelyettesítve a másodrendű egyenletbe a következő egyenlethez vezet

$$-\frac{1}{\tau}f_i^{(2)} = \partial_{t1}f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)D_{t_0}f_i^{(1)}.$$
(3.25)

Ahhoz, hogy makroszkopikus egyenletekhez jussunk, összegezzük az elsőrendű egyenlet mindkét oldalát az összes rácsélre:

$$-\frac{1}{\tau}\sum_{i} f_{i}^{(1)} = D_{t_{0}}\sum_{i} f_{i}^{(0)}, \qquad (3.26)$$

és felhasználva a (3.6) ütközési invariánsokra felírt kritériumot kapjuk, hogy

$$0 = (\partial_{t_0} + c_{i\alpha}\partial_{\alpha})\sum_i f_i^{(0)} = \partial_{t_0}\sum_i f_i^{(0)} + \partial_{\alpha}\sum_i c_{i\alpha}f_i^{(0)},$$

$$0 = \partial_{t_0}\rho + \partial_{\alpha}(\rho u_{\alpha}).$$
(3.27)

A (3.27) egyenlet nem más mint az elsőrendű folytonossági egyenlet.

Megszorozva (3.23)-ben az elsőrendű egyenletet $c_{i\beta}$ -vel, összegezve

$$-\frac{1}{\tau}c_{i\beta}\sum_{i}f_{i}^{(1)} = c_{i\beta}D_{t_{0}}\sum_{i}f_{i}^{(0)},$$
(3.28)

és felhasználva (3.6)-t és a (3.7) összefüggéseket kapjuk, hogy

$$0 = \partial_{t_0} \left(\rho u_\beta \right) + \partial_\alpha \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)}.$$
(3.29)

Definiáljuk az egyensúlyi feszültségtenzort a következő módon

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_{i}^{(0)}.$$
(3.30)

Behelyettesítve (3.30)-t (3.29)-be, megkapjuk az elsőrendű impulzusegyenletet

$$0 = \partial_{t_0} \left(\rho u_\beta \right) + \partial_\alpha \Pi^{(0)}_{\alpha\beta}. \tag{3.31}$$

Hasonló eljárást követve juthatunk el a másodrendű egyenletekig, vagyis összegezve (3.25)t az összes rácsélre, kapjuk a

$$0 = \partial_{t1}\rho + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)\partial_{t_1}\sum_i f_i^{(1)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)\partial_\alpha\sum_i c_{i\alpha}f_i^{(1)}$$
(3.32)

egyenletet.

Szorozva (3.25)-t $c_{i\beta}$ -vel és összegezve jutunk a

$$0 = \partial_{t1} \left(\rho u_{\beta} \right) + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \partial_{t_1} \sum_{i} c_{i\beta} f_i^{(1)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \partial_{\alpha} \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)}$$
(3.33)

egyenlethez.

Felhasználva a (3.6) ütközési invariánsokra vonatkozó kényszert, a (3.32) és (3.33) egyenletek jelentősen egyszerűsíthetők:

$$0 = \partial_{t1}\rho, \tag{3.34}$$

$$0 = \partial_{t1} \left(\rho u_{\beta}\right) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_{\alpha} \Pi^{(1)}_{\alpha\beta}, \qquad (3.35)$$

ahol az ún. nem-egyensúlyi feszültségtenzor:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)}.$$
(3.36)

Most az egyensúlyi és nem-egyensúlyi feszültségtenzorokat kell makroszkopikus mennyiségekkel kifejeznünk. Ennek részleteit az Olvasó a függelékben találhatja, itt csak annyit jegyzünk meg, hogy az előző fejezetben bemutatott rácstulajdonságokat felhasználva egy hosszadalmas, de nem túl bonyolult számítás eredményeként az egyensúlyi feszültségtenzor a következő alakban írható fel:

$$\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} = \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \qquad (3.37)$$

míg a nem-egyensúlyi feszültségtenzor

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\tau \begin{bmatrix} -u_{\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\alpha}u_{\gamma} - u_{\beta}\partial_{\alpha}\rho c_{s}^{2} - u_{\alpha}\partial_{\beta}\rho c_{s}^{2} - \rho u_{\alpha}u_{\gamma}\partial_{\gamma}u_{\beta} - \\ c_{s}^{2}\delta_{\alpha\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\gamma} + c_{s}^{2}\left(\delta_{\alpha\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\gamma} + \partial_{\beta}\rho u_{\alpha} + \partial_{\alpha}\rho u_{\beta}\right) \end{bmatrix}.$$
(3.38)

Elhanyagolva azokat a tagokat ahol a sebesség harmadrendű

$$\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} = -\tau c_s^2 \rho \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha\right) + O(u^3).$$
(3.39)

Behelyettesítve (3.37)-t (3.31)-be, a következő elsőrendű impulzusegyenlethez jutunk:

$$\partial_{t_0} \left(\rho u_\beta \right) + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha u_\beta \right) = -\partial_\alpha \left(\rho c_s^2 \right) \delta_{\alpha\beta}. \tag{3.40}$$

Végül összegezve a (3.27), (3.40) első és az ϵ -nal beszorzott (3.34), (3.35) másodrendű egyenleteket a következő egyenletrendszert kapjuk

$$\partial_{t_0}\rho + \epsilon \partial_{t_1}\rho + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha\right) = 0, \qquad (3.41)$$

$$\partial_{t_0} \left(\rho u_\beta\right) + \epsilon \partial_{t_1} \left(\rho u_\beta\right) + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha u_\beta\right) = -\partial_\alpha \left(\rho c_s^2\right) - \epsilon \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}. \tag{3.42}$$

Felhasználva a (3.20) sorfejtéseket megkapjuk a folytonossági és impulzusegyenlet végső alakját

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha \right) = 0, \tag{3.43}$$

$$\partial_t \left(\rho u_\beta\right) + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha u_\beta\right) = -\partial_\beta \left(\rho c_s^2\right) + 2\nu \partial_\alpha \left(\rho S_{\alpha\beta}\right) + O(u^3), \tag{3.44}$$

ahol

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\partial_{\alpha} u_{\beta} + \partial_{\beta} u_{\alpha} \right), \qquad (3.45)$$

és a kinematikus viszkozitás

$$\nu = \epsilon c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right). \tag{3.46}$$

A (3.44) egyenlet jobb oldalán szereplő első tag nem más, mint a nyomás, amely a jelen esetben

$$p = \rho c_s^2 \tag{3.47}$$

egy ideális gáz állapotegyenletét ölti.

3.2.4. A módszer pontossága

A fenti levezetés alapján látható, hogy a módszer másodrendű pontosságú mind térben, mind időben, továbbá látható, hogy a konvencionális Navier-Stokes megoldó módszerekkel szemben megjelenik egy olyan hibatag $O(u^3)$, melynek értéke a hidrodinamikai sebességtől függ. A levezetés összetettsége miatt kezdetben ezeket az eredményeket sokan kétkedve fogadták. Nem meglepő tehát, hogy a kezdeti vizsgálatok során számos numerikus kísérletet végeztek, amelyek egyik célja volt alátámasztani a Chapman-Enskog sorfejtéssel kapott analitikus eredmények helyességét.

A módszer pontosságának vizsgálata analitikus eredmények alapján lamináris áramlás esetén

Az egyik ilyen vizsgálat meglepő eredményeként a szerzők azt találták, hogy kétdimenziós síkfalak közötti áramlás esetén a módszer által számított sebességprofil (Poiseuille profil) számábrázolási pontosságig megegyezik az analitikus eredménnyel [27].

Később Zou és társai [28] analitikus számításokkal meghatározta az eloszlásfüggvényeknek azt az alakját, amely pontosan kielégíti a következő makroszkopikus függvényeket

$$u_x = u_0(1 - y^2)$$
, $u_y = 0$, $\frac{\partial p}{\partial x} = -2\rho\nu u_0$, $\frac{\partial p}{\partial y} = 0$, (3.48)

vagyis a Poiseuille profilt egységnyi szélességű horizontális csatorna esetén.



3.4. ábra. Rácsélek és egyirányú áramlás viszonya.

Zou-ék származtatásuk során kihasználták e áramlási profil speciális jellemzőit és eredményeik helytállóak a teljes paramétertartományban (τ , δ_t , u_0). Ugyanakkor ezek az eredmények nem tették nyilvánvalóvá, hogy az analitikus pontosságot csak az alkalmazott rács és a csatorna kedvező viszonya esetén lehet elérni. Erre a [29]-ben hívtam fel a figyelmet, származtatva azon függvények teljes halmazát, amelyeknél állandósult állapotban az analitikus pontosság elérhető.

Ehhez az analízishez egy egyszerű ötletet használtam fel. $\tau=1$ választás esetén a (3.2) rács-Boltzmann egyenlet a következő alakot ölti:

$$f_i(\mathbf{r},t) = f_i^{eq}(\mathbf{r} - \delta_t \mathbf{c}_i, t - \delta_t).$$
(3.49)

Ha egy adott állandósult állapotbeli megoldás analitikus pontosságú a rács-Boltzmann módszer esetén, akkor a megoldást behelyettesítve az egyensúlyi eloszlásba, majd összegezve mindkét oldalt a rácsélekre, az egyenletnek makroszkopikus szinten is teljesűlnie kell. Vagyis pl. a Poiseuille profil esetén behelyettesítve a makroszkopikus megoldást a (3.49) jobb oldalába, a megfelelő (3.4) momentumokat véve ellenőrizhető, hogy a sűrűség és hidrodinamikai sebesség időben változik-e.

Ezt az ötletet használva megvizsgáltam, hogy a Poiseuille áramlás ferde csatorna esetén (vagyis olyan esetben, amikor a csatorna és a rács viszonya nem feltétlenül kedvező ld. 3.4 ábra jobb oldala) is analitikus megoldása-e a rács-Boltzmann egyenletnek.

Az egyszerűség kedvéért először egy olyan esetet vizsgáltam, amelyben a csatorna szöge $-\frac{\pi}{4}$ volt (ld. 3.4 ábra). A transzformált Poiseuille profil ebben az esetben

$$u_x(x,y) = u_y(x,y) = \frac{\sqrt{2}}{2}u_0 \left[1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\left(y - x\right)^2\right].$$
(3.50)

D2Q9 modell esetén az $\mathbf{r}=(x,y)$ pozícióban keresve a megoldást és behelyettesítve (3.50)-t az egyensúlyi eloszlásfüggvényekbe a (3.49) egyenletnek megfelelően, a következő függvényeket kapjuk:

$$\begin{aligned}
f_{0}^{eq}(x,y) &= \frac{4\rho}{9} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[u_{x}^{2}(x,y) + u_{y}^{2}(x,y) \right] \right\} \\
f_{1}^{eq}(x^{-},y) &= \frac{\rho}{9} \left[1 + 3u_{x}(x^{-},y) + 3u_{x}^{2}(x^{-},y) \right] \\
f_{2}^{eq}(x,y^{-}) &= \frac{\rho}{9} \left[1 + 3u_{y}(x,y^{-}) + 3u_{y}^{2}(x,y^{-}) \right] \\
f_{3}^{eq}(x^{+},y) &= \frac{\rho}{9} \left[1 - 3u_{x}(x^{+},y) + 3u_{y}^{2}(x^{+},y) \right] \\
f_{4}^{eq}(x,y^{+}) &= \frac{\rho}{9} \left[1 - 3u_{y}(x,y^{+}) + 3u_{y}^{2}(x,y^{+}) \right]
\end{aligned}$$
(3.51)

$$\begin{aligned} f_{5}^{eq}(x^{-},y^{-}) &= \frac{\rho}{36} \left\{ \begin{array}{c} 1+3\left[u_{x}(x^{-},y^{-})+u_{y}(x^{-},y^{-})\right]+\\ \frac{9}{2}\left[u_{x}(x^{-},y^{-})+u_{y}(x^{-},y^{-})\right]^{2}-\frac{3}{2}\left[u_{x}^{2}(x^{-},y^{-})+u_{y}^{2}(x^{-},y^{-})\right] \right\} \end{aligned} (3.52) \\ f_{6}^{eq}(x^{-},y^{+}) &= \frac{\rho}{36} \left\{ \begin{array}{c} 1+3\left[-u_{x}(x^{-},y^{+})+u_{y}(x^{-},y^{+})\right]+\\ \frac{9}{2}\left[-u_{x}(x^{-},y^{+})+u_{y}(x^{-},y^{+})\right]^{2}-\frac{3}{2}\left[u_{x}^{2}(x^{-},y^{+})+u_{y}^{2}(x^{-},y^{+})\right] \right\} \\ f_{7}^{eq}(x^{+},y^{+}) &= \frac{\rho}{36} \left\{ \begin{array}{c} 1+3\left[-u_{x}(x^{+},y^{+})+u_{y}(x^{+},y^{+})\right]+\\ \frac{9}{2}\left[-u_{x}(x^{+},y^{+})-u_{y}(x^{+},y^{+})\right]^{2}-\frac{3}{2}\left[u_{x}^{2}(x^{+},y^{+})+u_{y}^{2}(x^{+},y^{+})\right] \right\} \\ f_{8}^{eq}(x^{+},y^{-}) &= \frac{\rho}{36} \left\{ \begin{array}{c} 1+3\left[u_{x}(x^{+},y^{-})-u_{y}(x^{+},y^{-})\right]+\\ \frac{9}{2}\left[u_{x}(x^{+},y^{-})-u_{y}(x^{+},y^{-})\right]^{2}-\frac{3}{2}\left[u_{x}^{2}(x^{+},y^{+})+u_{y}^{2}(x^{+},y^{+})\right] \right\} \end{aligned} \end{aligned}$$

ahol a tömörség kedvéért bevezettem a + és - indexeket, amelyek jelentése pl.

$$f_7^{eq}(x^+, y^+) \equiv f_7^{eq}(x + \delta, y + \delta)$$
(3.53)

ahol $\delta = \delta_x = \delta_y$.

Ezek a függvények fogják alkotni az eloszlásfüggvényeket az \mathbf{r} pontban $t + \delta_t$ időpillanatban. A makroszkopikus mennyiségek \mathbf{r} -nél a (3.4) összegek segítségével határozhatók meg. Ha az így kapott makroszkopikus mennyiségek analitikus megoldások \mathbf{r} -nél, akkor ezek az eloszlásfüggvények pontos reprezentációi lesznek ugyanitt a dőlt Poiseuille profilnak is. Ha elvégezzük a fenti eloszlásfüggvények összegzését, a következő sűrűséget kapjuk:

$$\widetilde{\rho} = \rho (1 - E u_0^2 \delta^4), \qquad (3.54)$$

ahol E=1/4.

Ez az eredmény világosan demonstrálja hogy az eloszlásfüggvények nem vezetnek analitikus pontossághoz, mivel a számított makroszkopikus sűrűség függ a maximális sebességtől és a rácsméret negyedik hatványától. Vagyis a geometriai tartomány elforgatása csökkenti az eredetileg analitikus pontosságot. Konkrétan: a pontosság ebben az esetben negyedrendű, hiszen a hiba a rácsméret negyedik hatványával arányos.

A sűrűség vizsgálatához nem volt szükség annak figyelembevételére, hogy az áramlás létrehozásához valamilyen hajtóerőre van szükség. Ahhoz azonban, hogy a sebességben elkövetett hibát értékeljük, egy az áramlást hajtó, térfogati erő bevezetésére van szükség, amely ugyanakkora impulzust juttat a folyadékba, mint a (3.48)-ban szereplő $\frac{\partial p}{\partial x}$ nyomásgradiens. A térfogati erő bevezetésére többféle megközelítést is használhatunk a rács-Boltzmann módszer esetén. Hogy eredményeim minél könnyebben értelmezhetők legyenek, követtem Zou-t és társait, így a hajtóerőt

$$\mathbf{G} = \frac{w_i}{c_s^2} \delta g_\alpha e_{i\alpha},\tag{3.55}$$

mint egy additív tag modelleztem a (3.2) egyenlet jobb oldalán.

Hasonló módon eljárva, mint a sűrűségnél,
- $\frac{\pi}{4}$ szöggel elforgatott csatorna esetén a következő hibát kapjuk a se
bességre:

$$u_{x,err} = 0$$
, $u_{y,err} = u_0^2 y \delta^3$. (3.56)

Ahogy látható, az elforgatás hatására létrejön egy y irányú sebességkomponens, vagyis az elforgatás a sebesség pontosságát harmadrendűvé csökkenti.

Kimutatható továbbá, hogy a sűrűség esetén talált Eegyüttható a következő módon függ az elforgatás szögétől, α -tól

$$E = -\cos^2(\alpha) + \cos^4(\alpha), \qquad (3.57)$$

vagyis maximuma van $-\pi/4$ -nél és zérus 0 and $-\pi/2$ szögeknél. Így tehát bizonyítottam, hogy csak kedvező rács és áramlási irány viszony esetén lehet analitikus pontosságot elérni.

Ugyanezt az analízist elvégeztem Kolmogorov áramlásra és a Jeffery-Hamel (csatorna adott szögben konvergáló vagy divergáló falakkal) probléma esetén is, amely egy fallal határolt radiális áramlási probléma, és ahol egy forrás vagy nyelő hozza létre az áramlást. Általános esetben utóbbi problémának a megoldása csak implicit elliptikus integrálok alakjában ismert, de alacsony áramlási sebességek esetén egy explicit alakot kaphatunk a sebességprofilra [30].

Ennek az analízisnek a legfontosabb eredményeit összefoglalva elmondható, hogy sem a Kolmogorov áramlás, sem a Jeffery-Hamel probléma esetén nem lehet analitikus pontosságot elérni a rács-Boltzmann egyenlet segítségével, és a sebesség megoldásának konvergenciája másodrendű, ahogy azt a Chapman-Enskog sorfejtés általános esetben is mutatja.

Felhasználva ezt a technikát további analíziseket végeztem, és azt vizsgáltam, hogy ún. egyirányú áramlások esetén, vagyis $u_x = u_x(y)$ és $u_y = 0$ esetben, mikor a rács és az áramlás irányának viszonya kedvező, melyek azok a függvények, melyek analitikus megoldásai lehetnek a rács-Boltzmann egyenletnek [31]. Ez a vizsgálat azt mutatta, hogy kétdimenziós, egyirányú áramlások esetén a sűrűség minden esetben analitikus pontossággal visszakapható, míg a sebesség hibájára a következő összefüggést kaptam:

$$u_{x,err} = -1/6 \left[2u_x(y) - 6G_x \delta/\rho - u_x(y^-) - u_x(y^+) \right],$$

$$u_{y,err} = G_y/\rho.$$
 (3.58)

A (3.58) összefüggés jól mutatja, hogy a hibák eliminálhatók, alkalmasan megválasztott sebesség u_x és hajtóerő segítségével. Nyilvánvaló például, hogy ha nincs y komponense a hajtóerőnek, vagyis $G_y = 0$ akkor u_y szintén analitikus. Szintén kézenfekvő, hogy egy y-ra nézve elsőrendű megoldás

$$u_x = u_0 y, \qquad u_y = 0, \qquad G_x = G_y = 0,$$
(3.59)

amely nem más, mint a Couette áramlás szintén analitikus megoldása a rács-Boltzmann egyenletnek.

Mindezek a vizsgálatok rávilágítottak arra, hogy a rács és az áramlási profil viszonya erősen befolyásolhatja a megoldás pontosságát, de a módszer konvergenciáját tekintve az analitikus eredmények nem mondtak ellent a Chapman-Enskog analízis eredményeinek. Továbbá az alkalmazott metodika egyszerű módszert kínált peremfeltételek megvalósításának *a priori* tesztelésére, vagyis azt ellenőrizendő, hogy egy konkrét peremfeltétel megvalósítása (pl. falak) milyen módon befolyásolja (csökkenti) a megoldás pontosságát.

A módszer pontosságának vizsgálata analitikus eredmények alapján turbulens áramlás esetén

Az előző fejezetben bemutatott módszer nemcsak analitikus megoldások keresésére alkalmas, de lehetőséget biztosít a pontosság analitikus ellenőrzésére, talán kissé meglepő módon, olyan komplex problémák esetén is, mint pl. homogén izotróp turbulencia modellezésénél. Ebben az esetben természetesen csak azt tudjuk ellenőrizni, hogy statisztikailag állandósult állapotbeli megoldások során származtatható korrelációk milyen hibával terheltek. Ennek az analízisnek a részleteit a [32]-ben ismertettem, és itt csak röviden tekintem át az alkalmazott technikát, illetve a kapott eredményeket. Ehhez az analízishez, az egyszerűség kedvéért, egy kismértékben módosított modellt használtam fel [33], amelyben az egyensúlyi eloszlásfüggvények a következő alakban írhatók fel:

$$f_i^{eq} = w_i \left[p + p_0 \left[\frac{u_\gamma c_{i\gamma}}{c_s^2} + \frac{u_\gamma u_\zeta}{2c_s^4} \left(c_{i\gamma} c_{i\zeta} - c_s^2 \delta_{\gamma\zeta} \right) \right] \right].$$
(3.60)

továbbá a nyomást a $p = \sum_i f_i$, míg a sebességet a $p_0 u_\alpha = \sum_i c_{i\alpha} f_i$ momentumokból határoztam meg. Itt $p_0 = \rho_0 c_s^2$ a referencianyomás.

Kiindulópontunk ismét az (3.49) egyenlet (tehát $\tau = 1$ feltételezéssel élünk), amely, mint már láttuk, az egyenlet mindkét oldalán a momentumokat véve, implicit kapcsolatot teremt makroszkopikus mennyiségek között.

Két egymástól \mathbf{R} távolságban lévő egyensúlyi eloszlásfüggvény közötti korreláció:

$$B_{ij}^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left\langle f_i^{eq}(\mathbf{r}) f_j^{eq}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \right\rangle, \qquad (3.61)$$

ahol a $\langle ... \rangle$ operátor sokaság szerinti átlagolást jelent.

Anélkül, hogy a kapott eredmények általánosságából veszítenénk, tételezzük fel, hogy a referencianyomás $p_0 = 1$. Behelyettesítve a (3.60) egyensúlyi eloszlásokat a (3.61)-ba kapjuk, hogy

$$B_{ij}^{eq}(\mathbf{R}) = \Gamma_{ij} \langle [p(\mathbf{r}) + \Psi_{i\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{r}) + \Phi_{i\alpha\beta} u_{\alpha}(\mathbf{r}) u_{\beta}(\mathbf{r})]$$
(3.62)
$$p(\mathbf{r} + \mathbf{R}) + \Psi_{j\gamma} u_{\gamma}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) + \Phi_{j\gamma\eta} u_{\gamma}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) u_{\eta}(\mathbf{r} + \mathbf{R})] \rangle,$$

ahol bevezettük a következő jelöléseket:

$$\Gamma_{ij} = w_i w_j \ , \quad \Psi_{i\alpha} = \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} \ , \quad \Phi_{i\alpha\beta} = \frac{c_{i\alpha}c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}}{c_s^4}. \tag{3.63}$$

Statisztikai homogenitást feltételezve (homogén izotróp turbulencia modellezését vizsgáljuk) a korrelációk függetlenek \mathbf{r} -től, így a (3.62) egyenlet jobb oldala átírható a következő alakra

$$B_{ij}^{eq}(\mathbf{R}) = \Gamma_{ij}[T_{ij0}(\mathbf{R}) + T_{ij1}(\mathbf{R}) + T_{ij2}(\mathbf{R}) + T_{ij3}(\mathbf{R}) + T_{ij4}(\mathbf{R}) + T_{ij5}(\mathbf{R})], \qquad (3.64)$$

ahol

$$T_{ij0}(\mathbf{R}) = B_{p,p}(\mathbf{R}), \qquad (3.65)$$

$$T_{ij1}(\mathbf{R}) = \Psi_{i\alpha}B_{\alpha,p}(\mathbf{R}) + \Psi_{j\alpha}B_{p,\alpha}(\mathbf{R}), \qquad (3.65)$$

$$T_{ij2}(\mathbf{R}) = \Phi_{i\alpha\beta}B_{\alpha\beta,p}(\mathbf{R}) + \Phi_{j\alpha\beta}B_{p,\alpha\beta}(\mathbf{R}), \qquad T_{ij3}(\mathbf{R}) = \Psi_{i\alpha}\Psi_{j\beta}B_{\alpha,\beta}(\mathbf{R}), \qquad T_{ij4}(\mathbf{R}) = \Phi_{i\alpha\beta}\Psi_{j\gamma}B_{\alpha\beta,\gamma}(\mathbf{R}) + \Phi_{j\alpha\beta}\Psi_{i\gamma}B_{\gamma,\alpha\beta}(\mathbf{R}), \qquad T_{ij5}(\mathbf{R}) = \Phi_{i\alpha\beta}\Phi_{j\gamma\eta}B_{\alpha\beta,\gamma\eta}(\mathbf{R}).$$

Itt a B-k kétpont-korrelációs függvények a megfelelő makroszkopikus mennyiségek között

$$B_{p,p}(\mathbf{R}) = \langle p(\mathbf{r})p(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle, \qquad (3.66)$$

$$B_{p,\alpha}(\mathbf{R}) = \langle p(\mathbf{r})u_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle,$$

$$B_{\alpha,p}(\mathbf{R}) = \langle u_{\alpha}(\mathbf{r})p(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle,$$

$$B_{\alpha\beta,p}(\mathbf{R}) = \langle u_{\alpha}(\mathbf{r})u_{\beta}(\mathbf{r})p(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle,$$

$$B_{p,\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \langle p(\mathbf{r})u_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{R})u_{\beta}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle,$$

$$B_{\alpha,\beta}(\mathbf{R}) = \langle u_{\alpha}(\mathbf{r})u_{\beta}(\mathbf{r})u_{\gamma}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle,$$

$$B_{\alpha\beta,\gamma}(\mathbf{R}) = \langle u_{\alpha}(\mathbf{r})u_{\beta}(\mathbf{r})u_{\gamma}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle,$$

$$B_{\gamma,\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \langle u_{\alpha}(\mathbf{r})u_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{R})u_{\beta}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle,$$

$$B_{\alpha\beta,\gamma\eta}(\mathbf{R}) = \langle u_{\alpha}(\mathbf{r})u_{\beta}(\mathbf{r})u_{\gamma}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle,$$

Ha a probléma statisztikailag nemcsak homogén, hanem izotróp is, akkor a kétpontkorrelációk csak a két pont közötti távolságtól függnek, és az egyensúlyi eloszlások közötti korrelációs függvények tagjait átírhatjuk, felhasználva a homogén, izotróp mezőkre felírható kétpont korrelációs függvényeket [34]:

$$T_{ij0}(\mathbf{R}) = Q(R), \qquad (3.67)$$

$$T_{ij1}(\mathbf{R}) = \Pi^{1}_{ij,\alpha} \frac{r_{\alpha}}{r} D(R), \qquad (3.67)$$

$$T_{ij2}(\mathbf{R}) = \Pi^{2}_{ij,\alpha\beta} \left[E_{1}(R) R_{\alpha} R_{\beta} + E_{2}(R) \delta_{\alpha\beta} \right], \qquad (3.67)$$

$$T_{ij2}(\mathbf{R}) = \Pi^{3}_{ij,\alpha\beta} \left[A_{1}(R) R_{\alpha} R_{\beta} + A_{2}(R) \delta_{\alpha\beta} \right], \qquad (3.67)$$

$$T_{ij3}(\mathbf{R}) = \Pi^{4}_{ij,\alpha\beta\gamma} \left[B_{1}(R) R_{\alpha} R_{\beta} R_{\gamma} + B_{2}(R) \left(\delta_{\beta\gamma} R_{\alpha} + \delta_{\alpha\gamma} R_{\beta} \right) + B_{3}(R) \delta_{\alpha\beta} R_{\gamma} \right], \qquad (3.67)$$

$$T_{ij4}(\mathbf{R}) = \Pi^{4}_{ij,\alpha\beta\gamma} \left[B_{1}(R) R_{\alpha} R_{\beta} R_{\gamma} + B_{2}(R) \left(\delta_{\beta\gamma} R_{\alpha} + \delta_{\alpha\gamma} R_{\beta} \right) + B_{3}(R) \delta_{\alpha\beta} R_{\gamma} \right], \qquad (3.67)$$

$$T_{ij5}(\mathbf{R}) = \Pi^{5}_{ij,\alpha\beta\gamma\eta} \left[C_{1}(R) R_{\alpha} R_{\beta} R_{\gamma} + B_{2}(R) \left(\delta_{\beta\gamma} R_{\alpha} + \delta_{\alpha\gamma} R_{\beta} \right) + E_{3}(R) \delta_{\alpha\beta} R_{\gamma} \right], \qquad (3.67)$$

ahol $Q(R), A_{1..2}(R), B_{1..3}(R), C_{1..5}(R), D(R)$ és $E_{1..2}(R)$ ismeretlen skalár függvények, továbbá

$$\Pi^{1}_{ij,\alpha} = \Psi_{i\alpha} - \Psi_{j\alpha} , \quad \Pi^{2}_{ij,\alpha\beta} = \Phi_{j\alpha\beta} + \Phi_{i\alpha\beta}, \qquad (3.68)$$
$$\Pi^{3}_{ij,\alpha\beta} = \Psi_{i\alpha}\Psi_{j\beta} , \quad \Pi^{4}_{ij,\alpha\beta\gamma} = \Phi_{i\alpha\beta}\Psi_{j\gamma} - \Phi_{j\alpha\beta}\Psi_{i\gamma}, \\ \Pi^{5}_{ij,\alpha\beta\gamma\eta} = \Phi_{i\alpha\beta}\Phi_{j\gamma\eta}.$$

A (3.67) és (3.68) összefüggések származtatásához felhasználtuk, hogy a homogenitás miatt pl. $B_{p,\alpha}(\mathbf{R}) = B_{\alpha,p}(-\mathbf{R})$ és $B_{\alpha,p}(\mathbf{R}) = \frac{R_{\alpha}}{R}D(R)$ így $B_{p,\alpha}(\mathbf{R}) = -\frac{R_{\alpha}}{R}D(R)$.

Tegyük most fel, hogy egy olyan rács-Boltzmann szimulációt végzünk, ahol a felbontás elegendően finom ahhoz, hogy a turbulens mezők releváns skáláit felbontsuk (a rácsméret a Kolmogorov skálák mérettartományába esik).

Felhasználva (3.60)-t, a makroszkopikus mennyiségek az eloszlásfüggvények momentumaiként származtathatók egy adott t időpillanatban:

$$p(\mathbf{r},t) = \sum_{i} f_{i}^{eq}(\mathbf{r} - \mathbf{c}_{i}\delta_{t}, t - \delta_{t}), \qquad (3.69)$$

$$u_{\alpha}(\mathbf{r},t) = \sum_{i} c_{i\alpha} f_{i}^{eq} (\mathbf{r} - \mathbf{c}_{i} \delta_{t}, t - \delta_{t}).$$
(3.70)

Érdemes megjegyezni, hogy eddig a folytonos térben dogoztunk, de mostantól \mathbf{r} -t és \mathbf{R} -t egy rácsra kényszerítjük, és azt vizsgáljuk, hogy a rácson kialakuló korrelációk milyen módon torzulnak.

A kétpont-nyomáskorrelációt a következő alakban írhatjuk például fel:

$$\widetilde{B}_{p,p}(\mathbf{R},t) = \langle p(\mathbf{r},t)p(\mathbf{r}+\mathbf{R},t)\rangle = \left\langle \left[\sum_{i} f_{i}^{eq}(\mathbf{r}-\mathbf{c}_{i}\delta_{x},t-\delta_{t})\right] \left[\sum_{j} f_{j}^{eq}(\mathbf{r}+\mathbf{R}-\mathbf{c}_{j}\delta_{x},t-\delta_{t})\right] \right\rangle$$
(3.71)



3.5. ábra. Szeparációs vektor kétpont-korrelációk esetén.

Statisztikai stacionaritást feltételezve eldobhatjuk az időargumentumot, aminek eredményeként a következőt kapjuk:

$$\widetilde{B}_{p,p}(\mathbf{R}) = \sum_{i} \sum_{j} \left\langle f_i^{eq}(\mathbf{r} - \mathbf{c}_i \delta_t) f_j^{eq}(\mathbf{r} + \mathbf{R} - \mathbf{c}_j \delta_t) \right\rangle = \sum_{i,j} B_{ij}^{eq}(\mathbf{M}_{ij}).$$

Jól látható, hogy a nyomáskorreláció kifejezhető a egyensúlyi eloszlások korrelációinak kombinációjaként, ahol $\mathbf{M}_{ij} = \mathbf{R} + \delta_t (\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j)$ (ld. 3.5 ábra).

Felhasználva (3.64)-t kapjuk, hogy

$$\widetilde{B}_{p,p}(\mathbf{R}) = \sum_{i,j,k} \Gamma_{ij} T_{ijk}(\mathbf{M}_{ij}), \qquad (3.72)$$

ahol pl.

$$T_{ij1}(\mathbf{M}_{ij}) = \prod_{ij,\alpha}^{1} \frac{M_{ij,\alpha}}{M_{ij}} D(M_{ij}), \qquad (3.73)$$

és $M_{ij} = |\mathbf{M}_{ij}|$ a szeparációs vektor hossza.

A rács-Boltzmann módszer esetén kapott $\widetilde{B}_{p,p}(\mathbf{R})$ nyomáskorrelációt kifejezve a (3.72) segítségével, vissza kell kapnunk az alapkorrelációt $B_{p,p}(\mathbf{R}) = Q(R)$, amely csak *R*-től függ. A véges rácsméretnek köszönhetően azonban az eredmény kissé komplikáltabb, mivel olyan tagok is megjelennek, melyeknek argumentumában $\delta_x = |\mathbf{c}_i \delta_t|$ is szerepel.

Taylor sorba fejtve a $\widetilde{B}_{p,p}(R)$ korrelációs függvényt és elsőrendig megtartva a tagokat azt kapjuk, hogy

$$\widetilde{B}_{p,p} = Q + 2\frac{\lambda D + RD'}{R}\delta_x + O(\delta_x^2), \qquad (3.74)$$

ahol D' = dD/dR és $\lambda = 2$ a D3Q19 modell esetén.

Vagyis azt találtuk, hogy a kétpont-nyomáskorreláció rács-Boltzmann módszer esetén a (3.74) alakot ölti. Vagyis egy elsőrendű hibatagot kaptunk a kétpont-korrelációs függvényben, és a hibatag a D(R) kevert kétpont nyomás-sebesség korreláció skalár függvényével van kapcsolatban.

Egy egyszerű analízissel megmutatható, hogy ez a tag eltűnik alacsony Mach szám esetén, vagyis amikor a közeg összenyomhatatlannak tekinthető. Valóban, ez tag zérus, ha D(R) kielégíti a következő differenciálegyenletet:

$$\lambda D/R + D' = 0. \tag{3.75}$$

Mivel ennek az egyenletnek a megoldása $D(R) = cR^{-\lambda}$, amely végtelenné válik R = 0-nál és $c \neq 0$ -nál, így D(R) = 0 az egyetlen lehetséges megoldás. Tulajdonképpen ez egy jól ismert eredménye az izotróp mezők klasszikus analízisének; a kevert korrelációk hiányoznak összenyomhatatlan közegek esetén [34]. Mivel az általam vizsgált rács-Boltzmann modelleket az alacsony Mach számú tartományban érdemes alkalmazni, így ez az eredmény összhangban van a rács-Boltzmann módszer elméletével (ld. még a következő fejezet, ahol a kompresszibilitási hibával fogok foglalkozni).

Az előzőekhez hasonlóan származtathatjuk a kétpont-sebességkorrelációs függvényeket, amelyek felhasználva (3.60)-t a következő alakban írhatók fel

$$\langle u_{\alpha}(\mathbf{r})u_{\beta}(\mathbf{r}+\mathbf{R})\rangle = \left\langle \left[\sum_{i} c_{i\alpha} f_{i}^{eq}(\mathbf{r}-\mathbf{c}_{i}\delta_{x})\right] \left[\sum_{j} c_{j\beta} f_{j}^{eq}(\mathbf{r}+\mathbf{R}-\mathbf{c}_{j}\delta_{x})\right]\right\rangle = \sum_{i,j} c_{i\alpha} c_{j\beta} B_{ij}^{eq}(\mathbf{M}_{ij})$$
(3.76)

Felhasználva (3.64)-t kapjuk, hogy

$$\widetilde{B}_{\alpha,\beta}(\mathbf{R}) = \sum_{i,j,k} c_{i\alpha} c_{j\beta} \Gamma_{ij} T_{ij,k}(\mathbf{M}_{ij}).$$
(3.77)

A fenti korrelációt Taylor sorba fejtve és megtartva a tagokat elsőrendig, a korreláció a következő alakot ölti

$$\widetilde{B}_{\alpha,\beta} = (A_1 R_\alpha R_\beta + A_2 \delta_{\alpha\beta}) + \{4\delta_{\alpha\beta} (\kappa B_2 + RB_2' + B_3)
+ 4R_\alpha R_\beta [(\kappa + 1) B_1 + RB_1' + R^{-1} (B_2' + B_3')]\}\delta_x + O(\delta_x^2),$$
(3.78)

ahol $\kappa=4$ a D3Q19 modell esetén.

Érdemes megemlíteni, hogy ahhoz, hogy (3.78)-t kapjuk, feltételeztük, hogy D(R) zérus, amely feltételezést az imént igazoltuk, amennyiben összenyomhatatlan közeget modellezünk.

A longitudinális korrelációs függvényt megkaphatjuk a (3.78) egyenlet átírásával:

$$\widetilde{B}_{L,L} = \left(A_1 r^2 + A_2\right) + \left\{4\left(\kappa B_2 + r B_2' + B_3\right) + 4r^2\left[\left(\kappa + 1\right) B_1 + r B_1' + r^{-1} \left(B_2' + B_3'\right)\right]\right\} \delta_x + O(\delta_x^2)$$
(3.79)

Divergenciamentes sebességmező (vagyis összenyomhatatlan közeg) esetén a harmadik momentumok skalár függvényei kielégítik a következő relációkat [34]:

$$B_1 = \frac{1}{R}B'_3 , \quad B_2 = -\frac{3}{2}B_3 - \frac{R}{2}B'_3.$$
 (3.80)

Behelyettesítve (3.80)-t (3.79)-be a következőt kapjuk

$$\widetilde{B}_{L,L} = B_{L,L} + 4\left[B_3\left(1 - \frac{3}{2}\kappa\right) + B_3'R\left(\frac{1}{2}\kappa - 3\right)\right]\delta_x + O(\delta_x^2).$$

Hogy értékelni tudjuk, hogy a rács-Boltzmann szimulációk esetén kapott kétpont-sebességkorreláció milyen mértékben tér el az elvárt korrelációtól, felhasználhatjuk a Kármán-Howarth egyenletet, amely kapcsolatot teremt a másod- és harmadrendű momentumok között:

$$\frac{\partial B_{L,L}(R,t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial R} + \frac{4}{R}\right) \left[B_{LL,L}(R,t) + 2\nu \frac{\partial B_{L,L}(R,t)}{\partial R} \right], \qquad (3.82)$$

ahol a longitudinális harmadrendű korreláció a következő alakban írható fel [34]:

$$B_{LL,L} = B_1 R^3 + (2B_2 + B_3) R. ag{3.83}$$

Felhasználva a (3.80) relációkat kapjuk, hogy

$$B_{LL,L} = -2RB_3. (3.84)$$

Statisztikai állandósult állapotot figyelembevéve és behelyettesítve a harmadrendű korrelációt a (3.82) Kármán-Howarth egyenletbe a következő közönséges differenciálegyenlethez jutunk:

$$\left(\frac{d}{dR} + \frac{4}{R}\right)(RB_3) = \nu \left(\frac{d}{dR} + \frac{4}{R}\right)\frac{dB_{L,L}}{dR}.$$
(3.85)

Az egyenlet megoldása

$$B_3(R) = \frac{R^{-5}}{6} \left[\int \delta_x R^3 \left(R B_{L,L}'' + 4 B_{L,L}' \right) dR + c \right], \qquad (3.86)$$

ahol kihasználtuk, hogy a vizsgált modell esetén a kinematikus viszkozitás $\nu=\frac{\delta_x}{6},$ amennyiben $\tau=1.$

Behelyettesítve a (3.86)-t a (3.82) egyenletbe a következőt kapjuk:

$$B_{3}\left(1-\frac{3}{2}\kappa\right)+B_{3}'R\left(\frac{1}{2}\kappa-3\right)=\frac{1}{12}\left[\left(\kappa-6\right)\delta_{x}\left(B_{L,L}''+4B_{L,L}'R^{-1}\right)+8R\left(4-\kappa\right)\left(6c+\delta_{x}I\right)\right],$$
(3.87)

ahol

$$I = \int R^3 \left(RB_{L,L}'' + 4B_{L,L}' \right) dR.$$
 (3.88)

Parciális integrálás után

$$\int R^4 B_{L,L}'' dR = R^4 B_{L,L}' - 4 \int R^3 B_{L,L}' dR, \qquad (3.89)$$

így

$$I = R^4 B'_{L,L}. (3.90)$$

Vagyis a rács-Boltzmann módszer esetén a korreláció a következő alakban írható fel

$$\widetilde{B}_{L,L} = B_{L,L} + \phi_1 R^{-5} \delta_x + \phi_2 R^{-1} \delta_x^2 + O(\delta_x^2), \qquad (3.91)$$

ahol

$$\phi_1 = 16 (4 - \kappa) c, \tag{3.92}$$

$$\phi_2 = \frac{4}{3} \left(2 - \kappa\right) B'_{L,L}.$$
(3.93)

Vegyük észre, hogy az elsőrendű hibatag gyorsan csökken a szeparációs távolsággal bármely modell esetén, és értéke zérus a D3Q19 modell esetén, mivel itt $\kappa = 4$. Így a hiba másodrendű δ_x -re nézve. Vagyis az eredmények ismét csak összhangban vannak a klasszikus Chapman-Enskog analízis eredményével.

3.2.5. A kompresszibilitási hiba

Ahogy láttuk a rács-Boltzmann módszer esetén, eltérően a konvencionális Navier-Stokes megoldó módszerektől, megjelenik egy olyan hibatag $O(u^3)$, amelynek értéke a hidrodinamikai sebességtől függ. Egyrészről ez a hiba a Galilei invariancia sérülését okozhatja, de szokás ezt a hibát kompresszibilitási hibának is nevezni, mivel a sebesség kellően alacsony értéken történő megválasztásával lehetőség van e hiba kontrollálására. Az előző fejezetben szintén láttuk, hogy a módszer másodrendű pontosságát összenyomhatatlan közegek modellezése esetén érhetjük el. Valóban, amennyiben a sebesség O(0, 1) nagyságrendű, úgy ez a hibatag egy nagyságrenddel kisebb az impulzusegyenletben szereplő legkisebb tagnál, így a megoldást a hiba nem torzítja jelentősen, amit számos numerikus vizsgálat is bizonyít. Mindamellett jónéhány erőfeszítés történt e hiba teljes eliminálására. Sajnos e kísérletek némelyike nem tekinthető kielégítőnek, amire a [35] dolgozatban hívtam fel a figyelmet.

Qian és Zhou [36] a következő egyensúlyi eloszlásfüggvény bevezetését javasolta a kompresszibilitási hiba megszüntetésére:

$$f_{\sigma,i}^{eq} = \rho w_{\sigma,i} \left[1 + \frac{u_{\gamma} c_{\sigma,i\gamma}}{c_s^2} + \frac{u_{\gamma} u_{\zeta}}{2c_s^4} \left(c_{\sigma,i\gamma} c_{\sigma,i\zeta} - c_s^2 \delta_{\gamma\zeta} \right) + K \frac{u_{\gamma} u_{\zeta} u_{\eta} c_{\sigma,i\gamma}}{6c_s^6} \left(c_{\sigma,i\zeta} c_{\sigma,i\eta} - 3c_s^2 \delta_{\zeta\eta} \right) \right],$$

$$(3.94)$$

továbbá megadták egy 17 sebességes modell paramétereit anélkül, hogy a modell paramétereinek származtatását ismertették volna.

Az egyensúlyi eloszlásnak ez az alakja az utolsó kompenzációs tagban tér el a korábban már megismert (3.3) egyensúlyi eloszlásfüggvénytől, és a szerzők kijelentették, továbbá numerikus számításokkal demonstrálták, hogy a K tényező alkalmas megválasztásával és a D2Q17 adott paraméterekkel történő használatával a kompresszibilitási hiba megszüntethető. Mivel kezdeti vizsgálataim ennek ellentmondtak, egy részletes vizsgálatot végeztem állításaik ellenőrzésére.

A Qian és Zhou által használt D2Q17-es modell esetén a rácsvektorok [36]:

$$\mathbf{c}_{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{1-4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{5-8} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.95)$$
$$\mathbf{c}_{9-13} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{14-17} = \begin{pmatrix} 2 & -2 & -2 & 2 \\ 2 & 2 & -2 & -2 \end{pmatrix},$$

és a rácssúlyokat úgy kell megválasztani, hogy a tömeg- és impulzusmegmaradást kielégítsük, továbbá teljesítsük a feszültségtenzor izotrópiájával kapcsolatos elvárásokat. Felhasználva a (3.8) és (3.9) összefüggéseket, a következő egyenleteket származtathatjuk a súlyokra:

$$2w_1 + 4w_2 + 8w_3 + 16w_4 = \Psi_2, \tag{3.96}$$

$$w_0 + 4(w_1 + w_2 + w_3 + w_4) = 1, (3.97)$$

ahol $\Psi_2 = c_s^2$,

$$2w_1 + 4w_2 + 32w_3 + 64w_4 = 3\Psi_4, \tag{3.98}$$

$$4w_2 + 64w_4 = \Psi_4, \tag{3.99}$$

ahol $\Psi_4 = c_s^4$, és

$$2w_1 + 4w_2 + 128w_3 + 256w_4 = \Phi_6 + 15\Psi_6, \tag{3.100}$$

$$4w_2 + 256w_4 = \Psi_6. \tag{3.101}$$

Végül Φ_6, Ψ_6 -ot a kompenzáció figyelembevételével kell meghatároznunk, a Chapman-Enskog sorfejtés eredményét is számításba véve, ami alapján a feladat a harmadrendű tag kompenzálása, vagyis a következő egyenlet kielégítése

$$\partial_{\gamma}\rho u_{\alpha}u_{\beta}u_{\gamma} = -\frac{K}{6c_s^6}\partial_{\theta}\rho u_{\gamma}u_{\zeta}u_{\eta}\left(T^{(6)}_{\alpha\beta\gamma\theta\zeta\eta} - 3c_s^2\delta_{\zeta\eta}T^{(4)}_{\alpha\beta\gamma\theta}\right).$$
(3.102)

Itt baloldalon látható a harmadrendű hibatag, míg jobboldalon az annak kompenzációjára bevezetett összefüggés.

Behelyettesítve a (3.9) rácsra vonatkozó relációkat a (3.102)-be, egyszerűsítve és egyelőre az $\alpha = \beta = x$ esetre fókuszálva egy igencsak méretes, de egyszerű egyenlet származtatható. Ezen egyenlet alapján a következő feltételeket kell kielégítenünk ahhoz, hogy a (3.102) teljesüljön:

$$K\left(\frac{\Phi_6}{6c_s^6} + 15\frac{\Psi_6}{6c_s^6} - \frac{3}{2}\right) = 1 , \quad \frac{\Psi_6}{6c_s^6} - \frac{1}{2} = 0 , \quad \frac{\Psi_6}{2c_s^6} - \frac{1}{2} = 1.$$
(3.103)

Az egyenletrendszer megoldása

$$K = 1, \qquad \Psi_6 = 3c_s^6, \qquad \Phi_6 = -30c_s^6. \tag{3.104}$$

Vagyis a köbös hibatag kompenzációjára K = 1 kompenzációs paramétert kell választanunk, és a (3.96-3.101) egyenleteket kell megoldanunk felhasználva a fenti (3.104) értékeket.

Sajnos valós gyökökkel a (3.96-3.101) egyenletek nem kielégíthetők a (3.104) paraméterek esetén. Vagyis a köbös hibatagok tökéletes kompenzálása nem lehetséges a D2Q17 modellt használva ahogy azt Qian és Zhou állította, és sajnos hasonló konklúzióra jutottam a D2Q9 modellel kapcsolatban is.

Megmutatható, hogy a (3.103) relációk egy részét kielégítve, a köbös hibatagoknak egy része eliminálható, és az egyedül megmaradó hibatag a $\partial_x \rho u_x^3$ (és $\partial_y \rho u_y^3$ amennyiben $\alpha = \beta = y$). Következésképpen a hibák egy része eltüntethető a $\Psi_6 = 3c_s^6$ választással, amely a D2Q9 modell esetén éppen fennáll (itt ugyanis $3c_s^6 = c_s^4$). Továbbá meghatározhatjuk a maradék hibatag együtthatóját a (3.103) egyenletekből, ami a

$$\left(\frac{\Phi_6}{6c_s^6} + 15\frac{\Psi_6}{6c_s^6} - \frac{3}{2}\right) - 1 = 1 \tag{3.105}$$

összefüggésre vezet.

Vagyis, a D2Q9 modellt használva K = 1 kompenzációs paraméterrel, a hibák egy része eltüntethető, de a megmaradó részt a kompenzáció egyáltalán nem befolyásolja.

A D2Q17 modell esetén, ha a Qian és Zhou által javasolt paramétereket használjuk (pl. $c_s^2 = 0,3741$), azt találjuk, hogy a (3.96-3.101) egyenletrendszer kielégül a $\Phi_6 = -1,7529$ paraméter mellett. Ezzel az értékkel a megmaradó hibatagok együtthatója

$$\left(\frac{K\Phi_6}{6c_s^6} + 15\frac{K\Psi_6}{6c_s^6} - \frac{3K}{2}\right) - 1 = -0,5810.$$
(3.106)

Ez tulajdonképpen azt jelenti, hogy a Qian és Zhou által javasolt modell a köböshibák egy részét tökéletesen eliminálja, de néhány tag értékét csak csökkenti. Qian és Zhou azért gondolhatta, hogy módszerük a teljes hibát kiküszöböli, mert az általuk demonstrációs célra választott fizikai probléma esetén (viszkozitásmérés - decaying shear flow), a köbös hibatagok egy része meg se jelenik, az x irányú sebességkomponens konstans, vagyis gradiense zérus.

Háromdimenziós modellek, mint pl. a D3Q15 és D3Q19, esetén a szituáció hasonló: tökéletes kompenzáció nem lehetséges ezekben a modellekben sem. Viszont redukálhatjuk a hibák egy részét pl. K = 1 választással.

Alapvető probléma a Qian és Zhou által bevezetett kompenzációval, hogy a modellnek csak két paramétere van, és három egyenletet kellene kielégítenünk (3.103). Hogy e problémán

túllépjünk, érdemes bevezetni egy további paramétert, amely a (3.103) egyenletrendszert jól meghatározottá teszi. Ezt a megközelítést használta Weimar és Boon [37], továbbá Chen és társaik [38], akik az egyensúly következő általános alakját vezették be:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + \frac{u_\gamma c_{i\gamma}}{c_s^2} + \frac{u_\gamma u_\zeta}{2c_s^4} \left(c_{i\gamma} c_{i\zeta} - c_s^2 \delta_{\gamma\zeta}\right) + E_i \frac{u_\gamma u_\zeta u_\eta c_{i\gamma}}{6c_s^6} \left(c_{i\zeta} c_{i\eta} - 3F_i c_s^2 \delta_{\zeta\eta}\right)\right], \quad (3.107)$$

Megmutatható, hogy ezzel a kompenzációs módszerrel a köbös hibatag megszüntethető, természetesen azon az áron, hogy több rácsélt és ennek megfelelően eloszlásfüggvényt kell használni a számítások során.

3.3. A módszer alkalmazása turbulens áramlások modellezésére

Kutatásaim megkezdésekor feltételeztem, hogy a rács-Boltzmann módszer, mint a Navier-Stokes egyenlet megoldására alkalmas numerikus megközelítés, felhasználható lehet turbulens áramlások direkt-numerikus és nagyörvény-szimulációs vizsgálatára. A feltételes módot több minden indokolja. Többek között, mind direkt-numerikus, mind nagyörvény-szimulációhoz olyan numerikus módszerre van szükség, amely a pontosság mellett hatékony is, hiszen e vizsgálati módszerek használata esetén jelentős térszerinti felbontásra van szükség. Továbbá, ezek a megközelítések időfüggő folyamatok modellezésén keresztül jutnak el a termohidraulikai paraméterek várható értékeihez, vagyis a szimulációs időnek olyan széles időintervallumot kell átfognia, hogy a pillanatnyi értékek átlagolásán keresztül származtatott várható értékek statisztikailag állandósuljanak.

Vizsgálataim megkezdésekor még viszonylag kevés számú olyan numerikus kísérletet végeztek, amelyben e módszert turbulens áramlások vizsgálatára használták. Ezek a vizsgálatok is javarészt olyan egyszerű alkalmazásokat ismertettek, ahol a kapott eredmények csak kvalitative voltak kiértékelve (ld. pl. [39]).

3.3.1. Lecsengő kétdimenziós turbulencia periodikus tartományban

Ezért egy olyan vizsgálatsorozatot kezdtem el, ahol egy egyszerű turbulens áramlási probléma, konkrétan lecsengő kétdimenziós turbulencia néhány legfontosabb jellemzőjét vizsgáltam különböző rács-Boltzmann modelleket felhasználva. Eredményeimet egy spanyol kolléga által végzett és a turbulenciakutatásban általánosan elfogadott, összenyomhatatlan közegekre vonatkozó pszeudospektrális számítás eredményeivel vetettük össze [40].

Vizsgálatainkat egy, az oldalain periodikus négyzet alakú tartományban végeztük, ahol a kezdeti örvénymezőt úgy állítottuk be, hogy a Mach szám a rács-Boltzmann módszer esetén kissé magasabb legyen a 0,3-as értéknél. Így a folyamatok elején, az előző fejezetben már bemutatott kompresszibilitási hibát és a kompenzációra felhasználható módszereket is tanulmányozni tudtuk. Mivel lecsengő turbulencia esetén a kinetikus energia (és a sebességek) folyamatosan csökken, így a kompresszibilitási hiba is monoton csökkenő függvénye az időnek.



3.6. ábra. Az ábrákon az örvényesség mezője látható kétdimenziós lecsengő turbulencia evolúciója esetén, három időpillanatban.

Kétdimenziós lecsengő turbulencia esetén a kezdeti turbulens áramlási mezőből egyre nagyobb koherens struktúrák (örvények) alakulnak ki, ahogy az a 3.6 ábrán látható, míg végül egy dipólus marad csak a tartományban. Vizsgálataimban több rács-Boltzmann modellt kipróbáltam, és a következő általános konklúzióra jutottam. Az idő haladtával gyakorlatilag ugyanazt az áramlási képet kaptuk a rács-Boltzmann módszer és a pszeudospektrális számítások esetén. Néhány százalékos hiba (<2%) a kinetikus energia evolúciójában, csak a kezdeti, viszonylag nagy Mach számú időintervallumban volt megfigyelhető, és ezt a hibát is csökkenteni lehetett az előző fejezetben bemutatott módszerekkel.

A vizsgálat azonban felhívta arra is a figyelmet, hogy ilyen pontosságot csak akkor lehet elérni, ha fokozott figyelmet fordítunk a kezdeti eloszlásfüggvények beállítására. Mivel eddig nem foglalkoztam a rács-Boltzmann módszer által végzett szimulációk inicializálásával, ezért érdemes itt néhány észrevételt tenni. Folyadékdinamikai problémák vizsgálatánál általában ismernünk kell a probléma kezdeti feltételeit (bizonyos esetekben nem szükséges ezeket pontosan specifikálni, pl. turbulens áramlások vizsgálata), amelyet nyilvánvalóan makroszkopikus szinten fogalmazunk meg. Vagyis megadjuk a kezdeti sebesség- és nyomásmezőt. A rács-Boltzmann módszer esetén azonban eloszlásfüggvényekkel dolgozunk, ezért itt, e mennyiségek beállítására van szükség. Ezeket a mennyiségeket legegyszerűbben a kezdeti makroszkopikus mező által meghatározott egyensúlyi eloszlásokra állíthatjuk. Vizsgálatainkban kimutattuk, hogy ez az egyszerű módszer tulajdonképpen okozhat némi hibát a számítások során, de mértéke elenyésző ahhoz képest, mint amit akkor okozunk, ha a kezdeti sebesség- és nyomásmezőnk nem konzisztens, vagyis ha azok nem elégítik ki az összenvomhatatlan közegek esetén származtatható nyomás Poisson egyenletet. További értékes megfigyelés volt, hogy a pontos megoldások elérése érdekében nem volt szükség extrém finom rácsfelbontást alkalmazni a rács-Boltzmann módszer esetén a pszeudospektrális módszerhez viszonyítva. Sőt, gyakorlatilag hasonló finomságú rácsfelbontást tudtunk használni a két metodikai megközelítés esetén. Így a rács-Boltzmann módszer mindenképpen egy ígéretes numerikus megközelítésnek bizonyult, hiszen a módszer számítási ideje mindössze töredéke a pszeudospektrális számítások igényének. Továbbá a rács-Boltzmann módszer jól párhuzamosítható, szemben sok más megközelítéssel.

Összeségében tehát elmondhatom, hogy első numerikus kísérleteim, amelyben a rács-Boltzmann módszert turbulens áramlások modellezésére használtam, igazolták elvárásaimat, és lökést adtak további alkalmazásokhoz. Egy sor különböző komplexitású turbulens áramlási problémát vizsgáltam e módszer segítségével, amelyek kapcsán elért eredményeimet foglaltam össze a következő fejezetben.

3.3.2. Lecsengő kétdimenziós turbulencia fallal határolt esetben

A lecsengő kétdimenziós turbulens áramlási probléma vizsgálatát egy PhD hallgató segítségével kiterjesztettem például fallal határolt esetre is [41]. Korábban mások ezt a problémát csak pszeudospektrális módszerrel, Csebisev polinomok felhasználásával vizsgálták. E probléma vizsgálata sok érdekes megfigyelésre adott lehetőséget, amelyek közül néhányat szeretnék itt kiemelni.

Ez az eset azért is különösen érdekes, mert azok a fizikai kísérletek, amelyek a kétdimenziós turbulencia megismerésére irányulnak, térben minden esetben határoltak. Egy tipikus kísérlet esetén például a kezdeti örvénymezőt egy tartályban vékony elektrolitrétegben, polaritásukat tekintve sakktábla-elrendezésű mágnesekkel hozhatjuk létre, majd a mágneses tér megszüntetésével követhetjük az örvények evolúcióját. Nehéz az így kapott eredményeket olyan numerikus számításokkal összevetni, ahol a vizsgálati tartomány periodikus. Annál is inkább, mivel egy fallal határolt négyzet alakú tartományban beállított kezdeti örvénymezőt magára hagyva, a folyamatok alapvetően eltérnek attól az esettől, amikor a vizsgálatokat végtelen kiterjedésű tartományban végezzük. Míg fal nélküli esetben mind a kinetikus energia, mind az enstrópia (az örvényesség négyzete) monoton csökkenő függvénye az időnek, addig fallal határolt esetben az utóbbi időben lokálisan növekedhet. Ennek oka az örvények kölcsönhatása a tartomány falaival, amely kölcsönhatás nagy intenzitású ún. szekunder örvényeket generál (ld. 3.7 ábra a falak mentén). Az így létrejövő kis örvények kölcsönhatásba lépnek a tartomány belsejében található örvényekkel. Összességében, az egyre nagyobb koherens struktúrák kialakulása nem olyan egyszerű folyamat, mint fal nélküli esetben.

Vizsgálataimhoz egy olyan szabályos kezdeti örvénymezőt állítottam fel, amelyben szabályos sakktábla-elrendezésben ún. árnyékolt Gaussi örvények helyezkedtek el. Ez azt jelenti, hogy egy-egy örvény a közepén tartalmaz egy forgó magot, amely körül egy azzal ellentétes irányban forgó mező található. Hasonló örvényeket a természetben is megfigyeltek már, és kölcsönhatásukról sok érdekesség látott napvilágot, amelyekre még vissza fogok térni. Fallal határolt lecsengő turbulencia esetén az egyik fontos megfigyelés, hogy mind a kinetikus energia, mind az enstrópia csökkenése időben hatványfüggvényt követ. Ezt az én szimulációim is alátámasztották.

Szimulációs eredményeim úgyszintén igazolták, hogy a falak környezetében létrejövő örvényeknek köszönhetően az enstrópia nem monoton csökkenő függvénye az időnek, ugyanakkor e csökkenés fluktuációkkal ugyan, de hatványfüggvényt követ, amelynek a kitevője függ a Reynolds számtól.

A 3.8 ábrán látható, hogy amikor Re = 35000 az általunk számított kitevő jól összhangban

dc_143_10



3.7. ábra. Kétdimenziós lecsengő turbulencia fallal határolt esetben. A falak mellett jól láthatók a nagyobb örvények és a falak kölcsönhatásaként létrejövő ún. szekunder örvények kialakulása.

volt a Clercx és Nielsen [42] eredményei alapján extrapolálható értékkel, míg Re = 5000-nél értéke valamelyest nagyobb volt, mint a [42]-ban. A kinetikus energia szintén hatványfüggvény szerint csökken az időben n = -0, 5 és n = -0, 15 kitevővel rendre Re = 5000 és Re = 35000 esetén (ld. 3.8 ábra).

Az enstrópia és kinetikus energia hányadosa esetén az általam számított kitevő n = -0, 89közel esik a [42]-ben számított n = -0, 8 értékhez Re = 5000-nél. Magasabb Reynolds számnál, Re = 35000-nél a mi kitevőnk n = -0, 62, hasonlóan a [42]-hez, ahol az n = -0, 65értéket érték el a náluk számított legnagyobb Reynolds számnál.

Először határoztam meg a kétdimenziós energiaspektrumot fallal határolt esetben, ami az inerciatartományban - a periodikus esethez hasonlóan - szintén hatványfüggvényt követ. Re = 5000-nél a hatványfüggvény kitevője -3, és ez az érték növekedett a Reynolds szám növekedésével (ld. 3.9 ábra). Érdemes megemlíteni, hogy a hasonló megfigyeléseknek műszaki szempontból is nagy jelentősége van, mivel nagy komplexitású folyamatok modellezésénél fontos, hogy felderítsük azokat a jellemzőket, amelyek univerzális jelleget mutatnak. Ezek a vonások teszik ugyanis lehetővé, hogy olyan egyszerű modelleket dolgozzunk ki, amelyek a legalapvetőbb jellemzőket reprodukálni tudják. Tipikus példa erre a nagyörvény-szimulációnál használt alrácsmodell, amellyel a háromdimenziós energiakaszkádot, illetve a kaszkád végén az energiadisszipáció folyamatát igyekszünk reprodukálni. Végezetül vizsgálataimmal megmutattam, hogy az ún. Okubo-Weiss függvény integrálja közel zérus maradt, ahogy azt nemrégiben analitikusan Sanson és Sheinbaum [43] is kimutatta.

Árnyékolt Gaussi örvények perturbálása és az örvények kölcsönhatásai

Ahogy említettem, a turbulens számításaim árnyékolt Gaussi örvényeket tartalmazó kezdeti mezőből indultak ki. A szimulációk során többször megfigyeltem ezeknek az örvényeknek az összeolvadását, annak ellenére, hogy abban az időben a szakirodalomban többen úgy vélték, hogy ezek az örvények ilyen kölcsönhatásba nem lépnek, mivel az árnyék megakadályozza

dc_143_10



3.8. ábra. Az enstrópia és a kinetikus energia idő szerinti változása, fallal határolt lecsengő turbulencia esetén.



3.9. ábra. Kétdimenziós energi
aspektrum fallal határolt lecsengő turbulencia esetén Re=5000-nél (b
al) és Re=35000-nél (jobb), két időpillanatban ($\theta = 130, 260.$)



3.10. ábra. Árnyékolt örvények összeolvadása és tripóluskialakulás. A folytonos vonal pozitív, a szaggatott pedig negatív örvényességű kontúrokat mutat.

ezt [44]. Mivel a turbulens áramlások kutatásában központi kérdés a koherens örvények dinamikájának jobb megértése [45], ezért célszerűnek láttam megfigyeléseimnek komolyabban utánajárni. Egy PhD hallgatóval részletes vizsgálatsorozatot kezdtem, annak felderítésére, hogy milyen körülmények között olvadnak össze árnyékolt örvények. A számítási sorozat keretében különböző távolságban elhelyezett, árnyékolt Gaussi örvények kölcsönhatását vizsgáltuk [46]. Megállapítottuk, hogy e kölcsönhatásoknak az örvényközéppontok távolságától és a Reynolds számtól függően alapvetően két kimenetele lehet. Az örvények összeolvadnak (3.10 ábra) vagy két dipólust alakítanak ki (3.11 ábra), amelyek eltávolódnak egymástól. Összeolvadás után szintén két alapvető alakzat alakulhat ki: egy új, árnyékolt Gaussi örvény vagy egy ún. tripólus.

A koherens struktúrák világában, komplexitását tekintve a tripólus a monopólust és dipólust követi, és rendszerint dipólusok összeütközése révén jön létre [48]. Mindamellett kialakulását laboratóriumokban és a természetben is megfigyelték már [49]. Tripólusok és más, kísérletekben is megfigyelt, még egzotikusabb formák kialakulásához árnyékolt örvények azimutális perturbációja vezet. A [50]-ben bemutattam, hogy a rács-Boltzmann módszerrel lehetőség van e perturbációk hatásának vizsgálatára. Ehhez egy periodikus, négyzet alakú tartomány közepén olyan árnyékolt örvényt helyeztem el, amelynek örvényessége

$$\omega(r) = -\omega_0 \left[\frac{1}{2} \alpha \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\alpha} - 1 \right] e^{-\left(\frac{r}{r_0} \right)^{\alpha}}, \qquad (3.108)$$

ahol ω_0 a kezdeti örvényesség a középpontban. Jól látható, hogy az örvényesség előjelet vált $r = r_0$ -nál, továbbá az örvényességprofilnak van egy pozitív α paramétere, amellyel az ör-



3.11. ábra. Árnyékolt örvények kölcsönhatása után kialakuló dipólusok.

vényesség változásának meredeksége szabályozható. Korábbi stabilitásanalízisek kimutatták, hogy $\alpha < 1,85$ esetén az örvények lineárisan stabilak, míg e felett az érték felett instabillá válnak k = 2 modusszámú azimutális perturbációkra. Ahhoz, hogy a modusokat felgerjesszük, a kezdeti örvényességprofilt a következő függvénnyel perturbáltam:

$$\omega'(r,\theta) = \mu \left(\frac{r}{r_0}\right)^k \cos(k\theta) e^{-\left[\frac{\alpha \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\alpha} - 2}{2\sigma}\right]^2}.$$
(3.109)

ahol μ és σ paraméterekkel változtatható a perturbáció amplitúdója és szélessége.

Carnevale és Koosterziel [47] laboratóriumi kísérletekkel mutatta ki, hogy k = 3 hullámszámú perturbáció hatására, árnyékolt Gaussi örvényekből kvadrapólus (háromszög alakú örvény három ún. szatelitörvénnyel) alakulhat ki. Numerikus kísérleteink hasonló eredményre vezettek. A 3.12 ábrán látható, hogy egy $\alpha = 7$ paraméterű örvény esetén, elegendően nagy perturbációt alkalmazva az örvény árnyéka három helyen először elvékonyodik, majd ezek a régiók teljesen elkülönítenek egymástól három régiót, amelyekből a három szatelit kialakul. Eközben középen három örvényszál alakul ki, amely kölcsönhatásba kerül a három szatelittel. Amint az örvényszálak erodálódnak, középen egy háromszög alakú örvény alakul ki, amely továbbra is az eredeti örvény forgási irányának megfelelően forog, miközben a szatelitek ezzel ellentétes irányú forgást végeznek. Az így kialakult struktúra igen stabil, ami azt jelenti, hogy többször körbefordul, mielőtt a viszkózus disszipáció hatására eltűnik. Egy sor további numerikus kísérlettel demonstráltuk, hogy komplexebb struktúrák is létrehozhatók hasonló módon, amelyek stabilitása azonban jóval kisebb, mint a kvadrapólusé.



3.12. ábra. Arnyékolt Gaussi örvények azimutális perturbációjának hatására kialakuló kvadrapólus. Az ábrán a kialakulás négy állomása látható.

3.3.3. Turbulens áramlás fűtőelempálcák szubcsatornáiban

Az előző fejezetekben elvégzett vizsgálatok mindegyike részben arra irányult, hogy demonstráljam: a rács-Boltzmann módszer alkalmazható összetett egyfázisú áramlási jelenségek vizsgálatára, megalapozva így a műszaki alkalmazást.

2006-ban egy PhD-hallgatóval elsőként publikáltam eredményeket csőkötegek szubcsatornáiban longitudinálisan áramló folyadékok direkt- és nagyörvény-szimulációjáról [51], [52]. E vizsgálatok kapcsolódtak az akkoriban zajló, paksi fűtőelem-modernizálási törekvések kapcsán érdekessé váló keveredési folyamatok vizsgálatához. Ebben az időszakban a kereskedelmi célú CFD kódokat használók, a vizsgálatokat javarészt a $k - \varepsilon$ turbulenciamodell használatával végezték. Ezért célszerűnek láttam az [53]-ben felhívni arra a figyelmet, hogy a szubcsatornák geometriájának következtében számítani lehet ún. szekunder áramlás kiakulására, ami miatt az izotróp turbulenciamodellek használata nem célravezető. Bár a szekunder áramlások kialakulásának lehetőségét kísérletek - ugyan csak implicit, a Reynolds-féle normál feszültségek anizotrópiája révén - egyértelműen alátámasztották, célszerűnek láttam e jelenséget numerikusan, explicit is kimutatni. Ennek érdekében egy numerikus kísérletet terveztem, amelyben háromszög alakú elrendezésű csőkötegben longitudinális irányban turbulensen áramló folyadékot modelleztünk a rács-Boltzmann módszer segítségével. A vizsgálatokkal szerettem volna azt is demonstrálni, hogy a módszer alkalmas nagyörvény-szimulációs vizsgálatok elvégzésére, valamint, hogy a kapott eredmények nem csak kvalitatívan, hanem kvantitatívan is értékelhetők, szemben a korábban publikált rács-Boltzmann módszerrel végzett nagyörvény-szimulációk eredményeivel.

A rács-Boltzmann módszer kiterjesztése nagyörvény-szimulációkhoz viszonylag egyszerű feladat, amennyiben örvényviszkozitás-modellt alkalmazunk a turbulencia modellezésére. A kiterjesztés legfontosabb lépése, hogy a molekuláris viszkozitás mellett, a fel nem bontott örvények hatását valamely alrácsmodellel meghatározott turbulens viszkozitással vesszük figyelembe. Mivel, ahogy láttuk a rács-Boltzmann módszer esetén, a viszkozitás a relaxációs idővel van kapcsolatban, így lényegében a relaxációs időt kell minden szimulációs időlépésben, minden rácspontnál megváltoztatnunk. Kimutatható, hogy az ily módon tér- és időfüggővé

váló relaxációs idő nem befolyásolja a kapott makroszkopikus egyenleteket, leszámítva azt a tényt, hogy a viszkozitás is tér- és időfüggő változóvá alakul. A legegyszerűbb esetben a turbulens viszkozitást a Smagorinsky modellt felhasználva határozhatjuk meg. Ezt a modellt használva feltételezzük, hogy az ún. alrácshoz tartozó feszültség, a deformációs ráta tenzorával algebrai kapcsolatban van:

$$\tau_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \tau_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} = -2\nu_t S_{\alpha\beta}, \qquad (3.110)$$

ahol $\tau_{\alpha\beta}$ az alrács-feszültség és ν_t a turbulens viszkozitás.

A Smagorinsky modell esetén az örvényviszkozitás

$$\nu_t = C_s^2 \sqrt{2S_{\alpha\beta}S_{\alpha\beta}},\tag{3.111}$$

ahol ${\cal C}_s$ az ún. Smagorinsky konstans.

A rács-Boltzmann módszer esetén nagy könnyebbség, hogy a deformációs ráta tenzora közvetlen kapcsolatban van a nem-egyensúlyi feszültségtenzorral ld. (3.39) és (3.45), vagyis $S_{\alpha\beta}$ az eloszlásfüggvényekből lokális műveletekkel meghatározható, és nincs szükség a sebességderiváltak közelítésére:

$$\Pi^{1}_{\alpha\beta} = \sum_{i} \left(f_{i} - f_{i}^{eq} \right) c_{i\alpha} c_{i\beta} = \rho \tau S_{\alpha\beta}.$$
(3.112)

Így a turbulens viszkozitás, illetve az annak megfelelő relaxációs idő könnyedén meghatározható.

Az így kiterjesztett módszert használtuk fel üzemanyagkötegek szubcsatornáinak nagyörvényszimulációjára. VVER-440 reaktorokban használt fűtőelemkötegekben a fűtőelempálcák háromszög-elrendezésben vannak elhelyezve. A pálcák közötti szubcsatornákra fókuszálva az általunk modellezett tartomány csupán egy piciny része a teljes kötegnek, ahogy az a 3.13 ábrán látható. Mivel teljesen kifejlődött turbulens áramlásban megfigyelhető jelenséget akartuk megvizsgálni, ezért a 3.13 ábrán látható tartomány minden oldalán periodikusan csatolt, így amiről képet kapunk, az egyfajta végtelen kiterjedésű homogén tér, amelyben háromszögelrendezésben találhatók a fűtőelempálcák, távtartók és egyéb szerkezeti elemek nélkül. Különböző felbontással végeztünk szimulációkat, annak érdekében, hogy demonstrálni tudjuk a rácsfüggetlen megoldás kialakulását. A legfinomabb felbontás esetén $208 \times 240 \times 200$ (laterális \times laterális \times axiális) rácspontot alkalmaztunk. Az áramlást egy konstans térfogati erővel hajtottuk, ami megfelelt egy adott nyomásgradiensnek, és különböző Reynolds számok mellett végeztünk vizsgálatokat. A 3.14 ábrán egy pillanatkép látható e szimulációk eredményéből, a szubcsatornában kialakuló axiális sebességről. Megfelelően hosszú ideig átlagolva a szimulációs eredményeket meghatároztuk az eredmények várható értékeit és a Reynolds feszültségeket, majd számítási eredményeinket összevetettük a Trupp és Azad által végzett mérések eredményével [54].

A szimulációs eredményekből meghatározott Reynolds feszültségek összevetése mérési eredményekkel elfogadható egyezést mutatott, és ennek köszönhetően a szimulációs eredmények

dc_143_10



3.13. ábra. Szubcsatornák és periodikus csatolásuk.



3.14.ábra. Pillanatkép az axiális sebesség
profilról turbulens áramlás esetén a szubcsatornában.



3.15. ábra. A laterális sebességek várható értékei alapján kialakuló másodlagos áramlási cellák a szubcsatorna egy keresztmetszetében.

egyértelműen alátámasztották a másodlagos áramlási cellák kialakulását, ahogy az a 3.15 ábrán látható. Vagyis explicit kimutattuk, hogy ilyen jellegű csatornaáramlásokban a fő áramlási irányra merőlegesen is kialakul egy átlagértékében kimutatható mértékű másodlagos áramlási forma, ami hozzájárul a szubcsatornák közötti hűtőközegkeveredéshez.

3.4. A módszer kiterjesztése kétfázisú áramlások modellezésére

Az előző fejezetekben bemutattam a rács Boltzman módszert és annak egyfázisú áramlások modellezése kapcsán elért eredményeimet. Ebben a fejezetben bemutatom, hogy a módszer hogyan terjeszthető ki kétfázisú áramlások modellezésére, és az így alkotott modellel milyen problémákat sikerült megoldanom. A [19]-es áttekintő tanulmányomban összefoglaltam azokat a lehetőségeket, amelyekkel az alapmódszer kiterjeszthető kétfázisú áramlások modellezésére. Ezen kiterjesztések közül is kiemelten foglalkoztam az ún. pszeudopotenciál módszerrel, mivel úgy gondoltam, ez a megközelítés rendelkezik a legtöbb lehetőséggel. E választást az elmúlt időszak igazolta, hiszen a legtöbb alkalmazás ehhez a megközelítéshez nyúlt vissza és fejlesztette tovább specifikus problémák megoldásához. Az általam vezetett PhD-hallgatók segítségével szintén ezt a modellt továbbfejlesztve jutottunk el mára oda, hogy numerikus buborékdinamikai kísérleteket tudunk végezni a módszerrel. Értekezésemben ezért e modellre fogok fókuszálni.

3.4.1. A pszeudopotenciál-módszer

A rács-Boltzmann módszer kiterjesztése a pszedupotenciál-módszerrel alapvetően egy alulrólfelfelé építkezésnek tekinthető abban az értelemben, hogy a kétfázisú folyamatok kialakulásának modellezését mezoszkopikus szinten igyekszik megoldani. Vagyis, szemben számos egyéb probálkozással, a modellezésnél nem egy makroszkopikus egyenletcsoport mezoszkopikus reprodukcióját igyekszik - matematikai alapokon - elérni, hanem a molekuláris szintű folyamatokat igyekszik utánozni. Konkrétan, bevezet egy az eloszlásfüggvények (molekulacsoportok) között fellépő erőt, amellyel a molekulák közötti rövid és hosszú távú kölcsönhatásokat igyekszik reprodukálni. Az így bevezetett erők lehetővé teszik, hogy adott feltételek mellett, folyadékban kialakuló fázisszeparációt (párolgást, kondenzációt) modellezzünk. Az eloszlásfüggvények között kialakuló erőt az eloszlásfüggvényekhez rendelt potenciál alapján határozzuk meg, innen származik a módszer elnevezése [55].

Az erő bevezetését a hidrodinamikai sebesség átdefiniálásával érhetjük el:

$$u_{\alpha}\rho = u_{\alpha}'\rho + 1/2\delta_t F_{\alpha}, \qquad (3.113)$$

ahol

$$u'_{\alpha} = \sum_{i} c_{i\alpha} f_i, \qquad (3.114)$$

és ahol az F_{α} erőt a ψ potenciálfüggvény gradienséből $\nabla\psi$ -ből számolhatjuk. Utóbbit közelíthetjük a

$$F_{\alpha}(\mathbf{r}) = -G\psi(\mathbf{r})\sum_{i} w_{i}\psi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_{i}\delta t)c_{i\alpha}$$
(3.115)

összefüggéssel. Az így módosított sebesség esetén a (3.3) egyensúlyi eloszlásokban használt sebességet is át kell definiálnunk:

$$u_{\alpha}^{eq} = u_{\alpha}' + \frac{\tau}{\rho} F_{\alpha}. \tag{3.116}$$

Felhasználva a bevezetett erőt, Taylor sorba fejtve ψ -t és megtartva az elsőrendű tagokat azt kapjuk, hogy:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \delta_t) = \psi(\mathbf{r}) + \delta_t c_{i\alpha} \partial_\alpha \psi(\mathbf{r}) + O\left(\delta_t^2\right).$$
(3.117)

Behelyettesítve ezt a (3.115)-ba és felhasználva a rácsrelációkat, megkapjuk az erő alakját, ami $\psi(\mathbf{r})$ gradiense:

$$F_{\alpha}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}G\delta_t c_s^2 \partial_{\alpha} \psi^2(\mathbf{r}).$$
(3.118)

Mivel a (3.118) erő az impulzusegyenlet jobb oldalán mint a potenciálfüggvény gradiense jelenik meg, így e modell esetén az állapotegyenlet az eredeti állapotegyenlethez képest módosul:

$$p = \frac{1}{3} \left(\rho + \frac{1}{2} \psi^2 \right), \qquad (3.119)$$

ahol tehát a ψ potenciálfüggvénnyel megválaszthatjuk az állapotegyenlet alakját. Shan és Chen eredetileg a következő potenciálfüggvény használatát javasolta [55]:

$$\psi = \rho_0 \left[1 - \exp(-\frac{\rho}{\rho_0}) \right], \qquad (3.120)$$

ahol ρ_0 egy szabad paraméter, míg modellükben a hőmérséklet szerepét a (3.118) egyenletben található *G* paraméter játszotta. Ezután potenciálfüggvények széles körét kezdték alkalmazni, de ahogy áttekintő cikkemben is felhívtam erre a figyelmet, a potenciálfüggvények egyike sem volt termodinamikailag konzisztensnek tekinthető.

3.4.2. A modell termodinamikai konzisztenciája

A fent bemutatott modellel számos vizsgálatot végeztünk. Kezdetben elsősorban azt vizsgáltuk, hogy alapvető kétfázisú folyamatok, mint például fázisátalakulás, milyen pontossággal modellezhető. A modellre jellemző fázisegyensúlyi görbét például egy sor szimulációval határoztuk meg, úgy választva meg a kezdeti feltételt, hogy spinodális dekompozíció jöjjön létre.

Egy négyzet alakú tartományban ha pl. úgy választjuk meg a kezdeti sűrűséget, hogy az az adott hőmérséklethez tartozó spinodálisok közé essen, majd elindítunk egy szimulációt, a fázisok kezdenek elkülönülni egymástól, mivel a folyadék metastabil állapotban van $\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} < 0\right)$. A folyamat megindításához szükség van egy kis hőmérséklet- vagy sűrűségzajra, mivel a folyamatot a potenciálgradiensek hajtják. A kezdeti feltételektől függően a spinodális dekompozíció végső állapotaként a fázisok rétegződhetnek, vagyis egy sík interfész választhatja el őket egymástól, vagy kialakulhat egy buborék, illetve csepp a tartomány közepén.

Bármely ilyen jellegű modellel szemben követelmény, hogy mind dinamikailag, mind statikailag helyesen reprezentálja a fizikai valóságot. Ebben az esetben ez többek között azt jelenti, hogy a spinodális dekompozíció hatására kialakuló egyensúlyi állapotnak ki kell elégítenie a jól ismert termodinamikai relációkat, ami sík interfész esetén azt jelenti, hogy a kapott sűrűségeknek meg kell felelniük Maxwell egyenlő területek rekonstrukciójának, míg csepp és buborék kialakulása esetén a Laplace egyenlet kielégítése várható el [56].

2002-ben He és Doolen [57] kijelentette, hogy a pszeduopotenciál-módszer esetén tulajdonképpen termodinamikailag konzisztens csak a $\psi \propto \rho$ potenciál választása lehet, amely azonban az ún. tömegösszeroppanás jelenségéhez vezet. A [58]-ben felhívtam a figyelmet arra, hogy ez a megállapítás valójában helytelen, és létezik olyan potenciálfüggvény, amellyel a modell termodinamikailag konzisztenssé tehető. Röviden demonstrálom, miben is áll a modell inkonzisztenciája.

Követve Shan és Chen [61] munkáját, vizsgáljunk egy konténert, amelyben egy a z síkra merőlegesen egy interfész helyezkedik el, amely két fázist választ el egymástól.

Mint tudjuk, a nyomástenzor normál komponense p_0 konstans kell, hogy legyen egyensúlyban a teljes tartományban, az interfészrégiót is ideértve. Az interfésztől távol a folyadékban

és gázban a sűrűségek ρ_l és ρ_g . Ahhoz, hogy ez az állapot termodinamikailag konzisztensnek legyen tekinthető, a modellnek ki kell elégítenie Maxwell egyenlő területek konstrukcióját [56], vagyis, hogy

$$\int_{v_l}^{v_g} \left(p_0 - p \right) dv = 0, \tag{3.121}$$

ahol $v \sim 1/\rho$ a moláris térfogat, vagyis felírhatjuk, hogy

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \frac{p_0 - p}{\rho^2} d\rho = 0.$$
 (3.122)

Szintén elvárható, hogy egy modell esetén a felületi feszültség az állapotegyenlettől függetlenül hangolható legyen. Sík interfész esetén a felületi feszültség definíciója [59]:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} (p_N - p_T) dz, \qquad (3.123)$$

ahol p_N, p_T az interfészre vonatkoztatva a
a nyomástenzor normál és tangenciális komponense.

Másrészről a van der Walls által termodinamikailag megfogalmazott összefüggésnek is teljesülnie kell [60]:

$$\sigma \propto \int_{-\infty}^{+\infty} |\nabla \rho|^2 \, dz. \tag{3.124}$$

Összességében a (3.123) és (3.124) egyenletek alapján egy koherens termodinamikai leíráshoz a következőnek kell teljesülnie:

$$p_N - p_T \propto |\nabla \rho|^2 \,. \tag{3.125}$$

Mivel egyensúlyban nincs áramlás a tartományban, így a nyomástenzor a következő alakban írható fel:

$$-\partial_{\alpha} \left(c_s^2 \rho \right) + F_{\alpha} = \partial_{\beta} P_{\alpha\beta}, \qquad (3.126)$$

ahol $P_{\alpha\beta}$ a nyomástenzor.

Taylor sorba fejtve $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \delta_t)$ -t és megtartva a (3.118) tagjait harmadrendig azt kapjuk, hogy:

$$F_{\alpha} = -Gc_s^2 \delta_t \left(\psi_1 \partial_{\alpha} \psi_1\right) - c_s^4 G_{11} \frac{\delta_t^3}{2} \left(\psi_1 \partial_{\alpha} \partial_{\gamma}^2 \psi_1\right).$$
(3.127)

A nyomástenzor (3.126)-ból egyszerűen származtatható:

$$P_{\alpha\beta} = c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} c_s^2 \left(G \psi^2 \right) \delta_{\alpha\beta} + \frac{c_s^4}{2} G \left[\left(\psi \partial_\gamma^2 \psi \right) + \frac{1}{2} \left(\partial_\gamma \psi \right)^2 \right] \delta_{\alpha\beta} - \frac{c_s^4}{2} G \left(\partial_\alpha \psi \right) \left(\partial_\beta \psi \right). \quad (3.128)$$

Innen a normál és érintőirányú komponensek szintén egyszerűen meghatározhatók. Ehhez vezessük be a következő változót:

$$y = \left(\partial_z \rho\right)^2 \tag{3.129}$$

és a $y'=dy/d\rho, \ \psi'=d\psi/d\rho$ jelöléseket. Felhasználva a

$$\partial_z^2 \psi = \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} \tag{3.130}$$

összefüggést a nyomás normál komponensére a következőt kapjuk:

$$P_{zz} = p_{eos} + \frac{c_s^4}{4} G \frac{\psi^2}{\psi'} \frac{d}{d\rho} \left[y \frac{(\psi')^2}{\psi} \right], \qquad (3.131)$$

ahol p_{eos} a (3.119)-al definiált állapotegyenlet.

Ahogy már említettük, egyensúlyban a normál komponensnek p_0 konstansnak kellene lenni, ezért

$$\frac{\psi'}{\psi^2} \frac{c_s^4}{4G} \left(p_0 - p_{eos} \right) = \frac{d}{d\rho} \left[y \frac{(\psi')^2}{\psi} \right].$$
(3.132)

Integrálva az egyenlet mindkét oldalát a következő megoldást kapjuk:

$$y = \frac{\psi}{(\psi')^2} \frac{c_s^4}{4G} \int \frac{\psi'}{\psi^2} (p_0 - p_{eos}) d\rho.$$
(3.133)

Mivel az interfésztől távol a sűrűségek konstansok, az y definíciójának megfelelően a következő határozott integrálnak zérusnak kell lennie:

$$0 = \int_{\rho_g}^{\rho_l} \frac{\psi'}{\psi^2} \left(p_0 - p_{eos} \right) d\rho.$$
 (3.134)

Ezt az integrált kell összevetni a (3.122)-vel, ami a következő differenciálegyenlethez vezet:

$$\frac{\psi'}{\psi^2} = \frac{C_0}{\rho^2},$$
(3.135)

melynek teljesülnie kell, hogy Maxwell egyenlő területekre vonatkozó konstrukciójának is eleget tegyünk egyensúlyban.

Hasonló eredményre jutottak [61]-ben és [57]-ben, de figyelmen kívül hagyták, hogy az integrálás során a C_0 konstanst büntetlenül be lehet vezetni. Enélkül a konstans nélkül az egyenlet megoldása $\psi = \rho$, amelynek használata egy interfésznél folyamatosan növekvő sűrűséghez és valóban az ún. tömegösszeomlás jelenségéhez vezet, ahogy azt [57]-ben is megállapították. A C_0 bevezetése azonban jelentősen megváltoztatja a képet, mivel ekkor a megoldás

$$\psi = \frac{\rho}{C_0 + C_1 \rho},$$
(3.136)

ahol C_1 egy új szabad modellparaméter.

Ez a pszeudopotenciál kompatibilis Maxwell egyenlő terület konstrukciójával, és nem vezet tömegösszeomláshoz. Most nézzük meg, hogy mi a helyzet a felületi feszültséggel! A normál és érintőirányú nyomástenzor-komponensek különbsége:

$$P_{zz} - P_{xx} = -\frac{c_s^4}{2} G \left(\partial_z \psi \right)^2.$$
 (3.137)

A (3.124)-nek megfelelően a termodinamikai konzisztenciához a

$$-\frac{2}{c_s^4}\sigma\left(\partial_z\rho\right)^2 = G\left(\partial_z\psi\right)^2\tag{3.138}$$

egyenletet kell kielégíteni.

Felhasználva (3.129)-t a felületi feszültség a következő alakban írható fel:

$$\sigma = -\frac{c_s^4}{2} G(\psi')^2, \qquad (3.139)$$

és bevezetve a (3.136) pszeudopotenciált azt kapjuk, hogy:

$$\sigma = -G \frac{c_s^4}{2} \frac{C_0^2}{(C_0 + C_1 \rho)^4}.$$
(3.140)

Bár a modell nem tökéletesen konzisztens, mivel a felületi feszültség a sűrűség függvénye, ez a függőség befolyásolható a C_1 modellparaméterrel, amely ha elegendően alacsony, akkor a felületi feszültség a G hőmérsékletszerű paraméter lineáris függvénye. Végül megjegyezzük, hogy bár a felületi feszültség nem független az állapotegyenlettől, egy ún. többtartományos potenciál megközelítéssel a függetlenség elérhető [62].

Hogy demonstráljuk az eddig elmondottakat, egy sor numerikus szimulációval fázisszeparációt modellezve meghatároztuk a modellre vonatkozó koexisztencia-görbét.

Az adott modell esetén a kritikus sűrűség és "hőmérséklet" meghatározható a $\partial_{\rho}p_{eos} = \partial_{\rho}^2 p_{eos} = 0$ differenciálegyenlet-rendszer megoldásával, amelynek eredménye $\rho_c = \frac{C_0}{2C_1}$ és $G_c = -27\frac{C_0C_1}{4}$. $C_0 = 1$ és $C_1 = 0.01$ választással a kritikus értékek $\rho_c = 50$ és $G_c = -0.675$. Egy minden oldalán periodikusan csatolt négyzet alakú tartományban beállítva a négyzet felében egy adott sűrűséget, míg a másik felében egy másik értéket, és elindítva egy szimulációt, a sűrűségek elkezdenek változni, míg végül a hőmérsékletnek megfelelő egyensúlyi értéknél stabilizálódnak. Az így kapott sűrűségek a koexisztencia-görbén meghatározzák az adott ponthoz tartozó egyensúlyi folyadék- és gázsűrűséget.

A 3.16 ábrán a szimulációs eredményeket szimbólumokkal jelöltem, míg a vonalak a Maxwell egyenlő terület konstrukciója alapján meghatározott értékeket reprezentálják. Jól látható, hogy a szimuláció tökéletesen illeszkedik az analitikus számítás eredményéhez, ahogy az a fenti levezetésből is várható volt.



3.16. ábra. Koexisztencia-görbe.

Megjegyzem még, hogy a (3.115) potenciálgradiens-közelítés helyett a [65]-ben egy másik módszert javasoltunk, szignifikánsan javítva a módszer robosztusságát. Ennek a módszernek a bemutatására itt azonban nem térek ki.

3.4.3. Az energiamegmaradás kérdésköre

Az eddigiekben nem foglalkoztam az energiamegmaradás kérdéskörével, ugyanakkor az előző fejezetben már felbukkant a hőmérséklet fogalma, amely nyilván kérdéseket vetett fel az Olvasóban. A rács-Boltzmann módszer esetén az energia bevezetésére alapvetően két módszer áll rendelkezésre. Az egyik lehetőség, hogy az energiát mezoszkopikus szinten az eloszlásfüggvények második momentumaként vezetjük be. Bár ez egy vonzó megközelítés, az eddigi tapasztalatok megmutatták, hogy alkalmazásának komoly korlátai vannak, elsősorban numerikus stabilitás szempontjából. Ezek a korlátok pedig egyelőre csak a rácsélek és a hozzájuk tartozó eloszlásfüggvények számának szignifikáns növelésével tágíthatók, ami a számításigény jelentős növekedéséhez vezet.

Megtartandó a módszer hatékonyságát, én az energiamegmaradás kérdéskörét makroszkopikusan közelítettem meg, vagyis az elvárt makroszkopikus energiamegmaradás-egyenletből indultam ki. Mint már láttuk, a rács-Boltzmann módszer alkalmas arra, hogy egy igen általános alakban rendelkezésre álló transzport-egyenletet oldjunk meg vele, és ezt a tulajdonságot kihasználhatjuk a makroszkopikus energiamegmaradás egyenletének megoldására is.

Ennek érdekében definiálunk egy újabb eloszlásfüggvény-csoportot g_i -t és a következő rács-Boltzmann egyenletet:

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\kappa} \left(g_i - g_i^{eq} \right) - w_i \triangle tq, \qquad (3.141)$$

ahol az egyensúlyi eloszlást a következő egyszerű alakban adjuk meg:

$$g_i^{eq} = w_i \left[T + 3c_{i\alpha} \left(T u_\alpha - D_T \partial_\alpha T \right) \right].$$
(3.142)

Az egyensúlyi eloszlásban szereplő sebesség a folyadékdinamikai egyenletekből, míg a hőmérséklet a g_i eloszlásfüggvények megfelelő momentumából számolható:

$$T = \sum_{i} g_i. \tag{3.143}$$

A korábbiakhoz hasonlóan Chapman-Enskog sorfejtéssel megmutathatjuk, hogy a (3.141) megoldása a

$$\partial_t T + \partial_\alpha \left(u_\alpha T \right) = \partial_\alpha \left(\widetilde{D}_T \partial_\alpha T \right) - q, \qquad (3.144)$$

makroszkopikus egyenlet megoldásához vezet, ahol

$$\widetilde{D}_T \equiv \frac{k}{\rho c_v} = D_T + \frac{\Delta t}{3} \left(\kappa - \frac{1}{2} \right)$$
(3.145)

a hődiffúziós együttható és k a hővezetési tényező, míg c_v az állandó térfogaton vett fajhő.

A q taggal számos fizikai folyamatot reprezentálhatunk, segítségével forrás modellezése esetén pl. a párolgás hatására bekövetkező energiaváltozást modellezhetjük. Fázisátalakulás modellezése esetén az így bevezetett hőmérséklet, mint az állapotegyenlet paramétere, természetesen a pszeudopotenciálban explicit jelenik meg, és a G paraméter jelentőségét veszti.

3.4.4. Falak nedvesíthetőségének modellezése

Hogy modellünk minél szélesebb körben alkalmazható legyen, figyelembe vehetjük a folyadék és fal kölcsönhatását, a fal nedvesíthetőségét. Ezt az adott modell esetén megtehetjük, követve Martys és társai munkáját, bevezetve egy erőt a fal és a folyadék között [63]:

$$F_{\alpha} = -G_w \psi(\mathbf{x}) \sum_i w_i s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) \mathbf{c}_i, \qquad (3.146)$$

ahol $s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)$ egy bináris függvény, értéke 1 falak esetén és 0 folyadék-rácspontoknál.

A G_w paraméterrel kontrollálhatjuk a kölcsönhatási erők erősségét a fal és folyadéknódusok között, és így közvetve a fal nedvesíthetőségét. Mivel makroszkopikus szinten a kontaktszöget használjuk a nedvesíthetőség mértékének meghatározására, így annak érdekében, hogy G_w -t kapcsolatba hozzuk ezzel a mennyiséggel, előzetes szimulációkat lehet végezni. A vizsgálati tartomány ebben az esetben egy téglalap alakú tartomány periodikus peremekkel a bal és jobb oldalán, és csúszásmentes fallal az alján. A szimuláció elején a kezdeti sűrűségmezőt úgy állítjuk be, hogy egy fél buborékot helyezünk el a tartomány alján (a folyadék- és gázsűrűségek megfelelnek a koexisztencia-görbe két ágán az adott hőmérsékleten kapott két fázis sűrűségének). Ezután a G_w paramétertől függően különböző buborékprofilokat kapunk, miután a számítás állandósul, ahogy azt a 3.17 ábrán láthatjuk. Ezeket a kontúrokat használhatjuk
dc_143_10



3.17. ábra. Buborékalakok különböző kontaktszögek esetén.

fel a statikus kontaktszög meghatározására. Az ábrákon látható értékekből gyakorlatilag kiderül, hogy a G_w paraméter lineáris kapcsolatban van a kontaktszöggel (pl. $G_w = -0,06$, $G_w = -0,12$ és $G_w = -0,18$ értékek rendre megfelelnek a 60°, 90° és 120° kontaktszögeknek).

3.4.5. A pszeudopotenciál-módszer alkalmazása

Az előző fejezetekben röviden bemutattam a pszeudopotenciál-módszert, illetve azokat a problémákat, amelyeket a módszer megismerése során sikerült megoldani. A továbbiakban rátérek e módszer alkalmazása kapcsán elért eredményeim ismertetésére.

Buborékdinamikai vizsgálatok csőkötegek szubcsatornáiban

Kétfázisú áramlások rendszerszintű modellezése esetén az interfésztranszfer tagok modellezésére jellemzően olyan modellek kiterjesztéseit használjuk fel, amelyeket egyszerű problémák analitikus megoldásán keresztül származtattak, általában jelentős egyszerűsítések alkalmazásával (súrlódásmentes áramlás, Stokes áramlás stb.).

Buborékos áramlásnál az interfész impulzustranszfer alatt lényegében a buborékokra ható erőket értjük. Az elmúlt évtizedben számos numerikus kísérletet végeztek, amelyekben ezeket az erőket tanulmányozták, de a legtöbb ilyen tanulmány olyan egyszerű problémák vizsgálatára fókuszált mint pl. emelkedő buborék egy periodikus négyszög alakú tartományban, és csak néhány kísérlet történt, amelyben fallal határolt esetben vizsgálták a buborékokra ható erőket.

Könnyűvizes erőművekben buborékok jelenhetnek meg a fűtőelemkazettákban, mind üzemzavari, mind baleseti szituációkban, és mint láttuk az üzemanyagkazettákban helyet kapott fűtőelempálcák igen szűk csatornákba (a szubcsatornákba) kényszerítik a hűtőközeg áramlását. Számos bizonyíték van arra, hogy a buborékokra ható erők egy csőben függnek a $\lambda = d/D$ hányadostól, ahol d a buborék és D a csatorna átmérője, amennyiben ezek aránya rendre meghaladja a 0,06-ot és 0,12-öt alacsony, illetve nagy Reynolds számok esetén [64]. Mivel egy szubcsatorna ekvivalens átmérője milliméter nagyságrendű, így a falak hatása már néhány tizedmilliméteres buborékok esetén jelentkezhet.

Ez a tény motiválta, hogy numerikus kísérleteket végezzek, amelyekben a buborékok szubcsatornákon belüli dinamikai viselkedését vizsgáltam.





3.18. ábra. Buborékok a szubcsatornákban. A középső tartományban végezzük a vizsgálatot, amit az oldalain azonban periodikusan csatolunk. A csatolás miatt a buborék kölcsönhat önmagával mind az axiális, mind a laterális irányban.

A kísérletekben buborékokat helyeztem el a már korábban megismert geometriájú szubcsatornában, majd három különböző térfogati erővel (felhajtó
erő $F_g = g\Delta\rho$) gyorsítottam azokat. A legkisebb gyorsítás esetén az E
ötvös és Morton számok

$$Eo = \frac{g\Delta\rho d_{bub}^2}{\sigma} = 0, 3, \qquad Mo = \frac{g\mu^4\Delta\rho}{\rho^2\sigma^3} = 10^{-4}, \qquad (3.147)$$

voltak.

Mivel a periodikus peremek hatására a buborék kölcsönhatásba lép saját magával mind a laterális, mind az axiális irányokban (ld. 3.18 ábra), ezért egy három halmazból álló szimuláció-sorozatot terveztem, minden egyes g paraméter esetén szisztematikusan variálva a szimulációs tartomány méretarányát (laterális/longitudinális méret). Minden egyes halmazban négy szimulációt végeztünk egy PhD-hallgatóval úgy, hogy a méretarány nem, de a szimulációs tartomány mérete változott.

Szisztematikusan változtatva a tartományméretet tanulmányozhattam a "buborékok közötti" kölcsönhatást, és információt kaphattam az erők $\alpha = V_b/V$ -től való függéséről, ahol V_b a buborék és V a szubcsatorna térfogata. Ezután a szimulációs eredményeket extrapoláltuk $\alpha \to 0$ esetre, hogy képet kaphassunk az egy buborékra jellemző erőről.

A 3.19 bal felső ábrán pl. $g = 10^{-4}$ esetén látható a buborék sebességének alakulása a 2. halmaz esetén. Jól látható, hogy a buboréksebesség először nő a felhajtóerő következtében, majd elér egy végsebességet, amikor a felhajtóerő egyensúlyba kerül a folyadék ellenállásával, vagyis az állandósult állapotbeli súrlódási erővel. A szimulációkból kiderül az is, hogy a végsebesség nő, ahogy a tartomány méret is nő, ami a buborékok csökkenő axiális és laterális irányú kölcsönhatásának köszönhető.

Hogy a laterális és axiális kölcsönhatásokat különválasszuk, a végsebességeket mutatom a 3.19 jobb oldali ábrán, $g = 10^{-4}$ esetén azoknál a szimulációknál amikor csak a tartomány hossza változik. Vagyis ezek olyan szimulációs eredmények, ahol a laterális kölcsönhatás megegyezik, de az axiális méret változik, és így az axiális irányú kölcsönhatás is.

Jól látható, hogy a végsebesség csökkent növekvő tartományhossznál, vagyis amikor a buborékok közötti axiális szeparáció növekszik. Így nyilvánvaló, hogy a buborékok közötti axiális kölcsönhatás kooperatív, míg a laterális kölcsönhatás gátló, mi több, utóbbi erősebb hatás, mint az axiális, mivel a végsebesség növekszik, amikor a tartományméret mindkét irányban növekszik. Megjegyzem, hogy ugyanerre a konklúzióra jutottam más g értékek esetén is.

Hogy egy izolált buborék emelkedési sebességét meghatározhassam, a végsebességeket a gáztérfogattört függvényében is ábrázoltam (3.19 alsó ábra).

Minden egyes halmazban a végsebesség növekszik, ahogy a gáztérfogattört csökken, és ami még fontosabb, a kettő között lineáris a kapcsolat, így egy izolált buborék sebessége könnyedén extrapolálható ($\alpha \rightarrow 0$). A 3.19 ábrán azok az összefüggések is láthatók, amelyeket a lineáris illesztések esetén kaptam. A 2. és 3. halmaznál az ordináták közel esnek egymáshoz, értékük 0,00361 és 0,00369, míg az 1. halmaznál ennek értéke kissé magasabb, 0,00382. Szintén észre kell vennünk, hogy az 1. halmaz esetén a lineáris kapcsolat kevésbé tűnik nyilvánvalónak, mint a 2. és 3. halmazoknál. Más gyorsulások esetén hasonló megfigyeléseket tehettem. A 3.20 bal oldali ábrán látható a becsült végsebesség a gravitáció függvényében. A hibasávok az extrapolált végsebességek szórását mutatják. Megállapítható, hogy a végsebesség és a gravitáció között szintén lineáris a kapcsolat, sőt mi több, az a minimum elvárás, hogy zérus gravitáció esetére extrapolált végsebességértékek zérusok legyenek, szintén jól kielégül, alátámasztva az alkalmazott metodika alkalmazhatóságát.

A buborékok kooperációjával kapcsolatban, szabadon felszálló buborékok esetén Sankaranarayanan és munkatársai [66] azt találták, hogy a Richardson-Zaki korreláció [67] jó közelítést ad, vagyis

$$\frac{u_T}{u_{T,\infty}} = (1-\alpha)^p,$$
(3.148)

ahol p az RZ kitevő és $u_{T,\infty}$ egy izolált buborék végsebessége. A teljesség kedvéért mi is megvizsgáltuk $\log_{10}(u_T)$ -t a $\log_{10}(1 - \alpha)$ függvényében g = 0,00075 esetén. Az 3.20 jobb oldali ábrán jól látható, hogy a Richardson-Zaki korreláció ebben az esetben is jól működik, holott azt vártuk, hogy a falak hatására a korreláció érvényét veszti. Másrészről három különböző kitevőt kaptunk három különböző buborék-konfigurációra ugyanolyan Eötvös és Morton számok mellett, ami azt jelenti, hogy a kitevő erősen függ a buborékok egymáshoz viszonyított elhelyezkedésétől.

Amint a buborékok elérik végsebességüket, az állandósult állapotbeli súrlódási együttható meghatározható az $F_g = F_{D,z}$ összefüggésből, ahol $F_{D,z}$ az állandósult állapotbeli z irányú komponense az erőnek, amely a következő alakban írható fel:



3.19. ábra. Buborékok sebességének és végsebességének alakulása az idő és a gáztérfogattört függvényében.



3.20. ábra. Extrapolált végsebesség a gravitáció függvényében (bal oldal) és a Richardson-Zaki korreláció vizsgálata (jobb oldal).

$$F_D = \frac{1}{2} C_D A_b \rho_l u^2. aga{3.149}$$

Jól ismert tény, hogy a C_D súrlódási együttható függvénye a buborék végsebességéhez tartozó Reynolds számnak [64]:

$$Re_T = \frac{u_T d}{\nu}.\tag{3.150}$$

A 3.21 bal oldali ábrán a súrlódási együtthatót mutatom az összes szimuláció esetén, mint ennek a Reynolds számnak a függvénye, míg a vonal egy allometrikus illesztést mutat.

Jól látható, hogy az összes szimulációs eredmény egy egyszerű relációhoz vezet, ahol

$$C_D \approx \frac{16,74}{Re}.\tag{3.151}$$

Érdemes megemlítenünk, hogy ez a reláció nagyon közel esik a

$$C_D = \frac{16}{Re}, \qquad Re \ll 1 \tag{3.152}$$

$$C_D = \frac{16}{Re} \left(1 + \frac{Re}{8} \right), \qquad Re \approx 1 \tag{3.153}$$

$$C_D = 13,725Re^{-0.74}, \quad 4 < Re < 100$$
 (3.154)

összefüggésekhez, amelyeket rendre Stokes áramlásra, Stokes áramlásra Oseen korrekcióval, illetve magas Reynolds számokra javasoltak [64], (ld. 3.21 jobb oldali ábra az összehasonlításhoz).

dc 143 10



3.21. ábra. Súrlódási együttható a Reynolds szám függvényében

Tulajdonképpen a jó egyezés valamelyest meglepő, mivel ezek az összefüggések szabadon felszálló buborékok esetére lettek származtatva, és mi azt vártuk, hogy fallal határolt esetben a fal hatására nő a súrlódási tényező. Például csövekben, ahol egy parabolikus sebességprofil alakul ki forgó folyadékrészecskék előtt és után, egy korrekciót javasolnak az együtthatóra (ld. pl. [64]-ben). Fontos azonban, hogy ez a korrekció erősen függ a $\lambda = d/D$ aránytól. A mi szimulációinkban λ a 0,05-0,2 intervallumban mozgott, ahol a falkorrekció valóban nem jelentős, és így a tényező kismértékű növekedése indokoltnak tűnik.

Egy másik érdekes eredmény, amelyre ezek a szimulációk rávilágítottak a buborékok virtuális tömegéhez kapcsolódik. A virtuális tömeg, a buborék látszólagos tömege, amely abból adódik, hogy a buborék gyorsulása során kénytelen a folyadéknak egy részét is megmozgatni, így gyorsulása nem az igazi tömegének megfelelően alakul. A virtuálistömeg definició szerint a buborék aktuális tömege plusz egy hozzáadott tömeg, amely a környező folyadék ellenállásának köszönhető, így

$$m_V = \left(\rho_q + C_V \rho_l\right) V_B,\tag{3.155}$$

ahol C_V a virtuális tömeg együtthatója. Egy szabadon felszálló buborék esetén ennek elméleti értéke $C_V = 0, 5$. Ha a buborékok kölcsönhatásba lépnek egymással, akkor ennek értéke változik, fallal határolt esetben pedig további változásokra lehet számítani. Mivel szimulációinkban a felhajtóerő a buborékot nyugalomból gyorsította fel, feltételezhetjük, hogy a szimuláció kezdetén ez az egyetlen erő, amely a buborékra hat, így a virtuális tömeg együtthatója meghatározható a felhajtóerő és a virtuálistömegnek köszönhető erő egyensúlyából:

$$g\Delta\rho V_B = m_V a,\tag{3.156}$$

ahol a a buborék kezdeti gyorsulása.

Behelyettesítve (3.155)-t a (3.156)-be, átrendezés után azt kapjuk, hogy



3.22. ábra. A virtuális tömeg együtthatója a gáztérfogattört függvényében.

$$C_V = \frac{g\Delta\rho}{a\rho_l} - \frac{\rho_g}{\rho_l}.$$
(3.157)

Hogy meghatározzam a kezdeti gyorsulást, kiszámoltam a gázsebesség idő szerinti deriváltját a szimuláció elején. Mivel a gázsebesség az első néhány száz szimulációs lépésben lineáris függvénye volt az időnek, így lineáris illesztéssel a kezdeti gyorsulás meghatározható volt. Ezután (3.157)-t felhasználva meghatároztam a virtuális tömeg együtthatóját, amelyet a gáztérfogattört függvényében g = 0,0015 esetén a 3.22 ábra mutat.

A végsebességhez hasonlóan itt is extrapolálhatunk $\alpha \to 0$ esetre, hogy képet kapjunk izolált buborékok virtuálistömeg-együtthatójáról. Ezek az extrapolációk szisztematikusan a 7,2 értéket adták g-től függetlenül, ami több mint tízszerese a szabadon emelkedő buborék virtuális tömeg együtthatójának ($C_V = 0, 5$).

Sajnos viszonylag keveset tudunk a virtuálistömeg-erőről alacsony Reynolds számú áramlások esetén, bár ennek növekedését számos potenciál-elméletet használó számításban megjósolták [68]. Érdemes azt is megjegyezni, hogy eredményeink értékelésekor feltételeztük, hogy a szimulációk elején az egyetlen buborékra ható időfüggő erő a virtuálistömeg-erő, holott a buborék által indukált áramlás visszahat a buborékra, vagyis a buborék mozgásának történetét és az azokat leíró erőket (az ún. történeti erőket) is figyelembe kellene venni. Mivel azonban a falak a történeti erők hatását csökkentik és meggátolják az örvényesség diffúzióját, így a történeti erők magfüggvénye és így az erők maguk is lecsökkennek. Mindent összevetve tehát úgy gondolom, a virtuális tömeg jelentős növekedésével kell számolni, amennyiben buborékok szűk csőkötegekben mozognak.

dc_143_10



3.23. ábra. Homogén forrás egy szubcsatornában.

Heterogén forrás modellezése

A [69]-ben bemutattam, hogy a módszert szintén fel lehet használni heterogén forrás tanulmányozására. Vizsgálataimban egy síkfalat fűtve hoztam létre buborékokat, és a szimulációkból meghatároztam a buborékok átmérőjét a falról történő leszakadáskor, illetve leválási gyakoriságukat. E két paraméter kulcsfontosságú szerepet játszik a kritikus hőfluxus meghatározásában, amely pl. nukleáris erőművek esetén fontos biztonsági paramétereket befolyásol. Mivel számos hasonló tanulmány jelent meg már az elmúlt években, érdemes megemlíteni, hogy miben sikerült előrébb lépni elődeimhez képest.

Talán a legfontosabb eredmény, hogy a buboréknövekedést és -leválást a legtöbb korábbi modellben a geometriai tartomány felosztásával érték el, létrehozva egy ún. mikro- és makrorégiót, amelyekben különböző hőátadási mechanizmusokat feltételeztek. Ezzel szemben az általam fejlesztett modell mechanisztikusan írja le a hőátadás folyamatát, figyelembevéve a falak nedvesítését is.

A megközelítés alapja a rács-Boltzmann módszer már jól ismert pszeudopotenciál-kiterjesztése. Ebben, mint láttuk, spinodális dekompozíciót könnyedén modellezhetünk, termodinamikai fluktuációk bevezetésével pedig lehetővé válik homogén forrás modellezése. Ehhez egy stabil állapotban (pl. telített folyadékhoz) termodinamikai fluktuációkat kell adnunk, hogy a rendszer metastabil régióba kerüljön. Ekkor beindul a fázisátalakulás. Mivel a metastabil állapot a spinoldálisok között helyezkedik el, a termodinamikai fluktuációknak elegendően nagynak kell lenniük ahhoz, hogy elérjük ezt a régiót. A 3.23 ábrán egy csőköteg-szubcsatornában elhelyezett telített folyadékban hoztam létre ilyen állapotot, aminek eredményeként homogén forrás indult meg.

A heterogén forrás tanulmányozásához azonban kontrolláltabb körülmények kellenek.

Egy téglalap alakú tartományban, amely az oldalain periodikusan csatolt, egy fűtött falat helyeztem el a tartomány alján. A tartomány tetején konstans hőmérsékletet és nyomást ál-

dc_143_10



3.24. ábra. Végesméret hatásának vizsgálata. A buborékleválás folyamata két különböző tartományméret mellett (150 × 300 és 300 × 600), ugyanazon időpillanatokban. A leválás folyamata ekkora felbontás mellett gyakorlatilag független a tartománymérettől.

lítottam be. A hőmérséklet megfelelt a nyomáshoz tartozó telítési hőmérsékletnek. Konstans hőfluxust alkalmaztam a fűtött falon, középen egy vékony zónával, ahol a hőfluxus értékét megemeltem, így modellezve egy repedés hatására kialakuló nagyobb felületet. Vagyis ebben a modellben nem alkalmaztam egy kezdeti buborékmagot, amelyből a forrás megindul. Ilyen jellegű vizsgálatokat jelenleg is végzünk, ezekre a későbbiek során még visszatérek. A hőfluxusnak köszönhetően a fal közepén egy buborék kezd el növekedni, és egy termikus határréteg alakul ki a fal mellett a hővezetésnek köszönhetően. A buborék növekszik, majd amikor eléri a leválási átmérőjét, egy kis buborékmagot maga után hagyva leszakad a falról, amiből egy újabb növekedési és leválási ciklus indul meg. A leváló buborék nem feltétlenül egy stabil objektum. Ha mérete kisebb, mint a kritikus buborékméret, akkor ahogy felemelkedik, átmérője csökken, lekondenzál. A kritikus méret felett azonban a buborék eléri a felső határt, és eltűnik a tartományból.

Mivel horizontális irányban tartományunk periodikus, a buborék ebben az irányban kölcsönhat önmagával. Annak érdekében, hogy meghatározzam azt a szimulációs tartományméretet, amelyben a peremfeltételek hatása már nem mérvadó, egy sor előzetes számítást végeztem különböző tartományméretekben modellezve a leválás folyamatát. Így határoztam meg, hogy melyik az a tartományméret, amelynél a leválási folyamat egyetlen leváló buborék viselkedését írja le. A 3.24 ábrán két ilyen tartományméret esetén kapott szimulációs eredmények láthatók (150 × 300 és 300 × 600).

Mindkét szimuláció esetén ugyanazt a hőfluxust alkalmaztam a tartomány alján. Az ábrán jól látszik, hogy a tartományméret itt már nem befolyásolja a buboréknövekedés és -leválás

3.25. ábra. A buborék alakja leválás előtt és után, továbbá a sebességmező, egységnyi sebességvektorokat használva.

folyamatát, de hatással van a buborékok emelkedésére, amelynek oka inkább a tartomány tetején alkalmazott nyomásperem, mint a buborék laterális kölcsönhatása önmagával. Csökkentve ugyanis a gravitációs erőt, a buborékok nagyobbra nőnek, és a laterális gátlás intenzívebbé válik. Az előzetes szimulációkból, lényegében levonhattam a következtetést, hogy a buboréknövekedési és -leválási folyamat gyakorlatilag nem változik 150 × 300-as szimulációs felbontás felett, amennyiben a buborékátmérő nem haladja meg a távolságuk felét, vagyis $D_h < 75$. A paramétervizsgálatot ezért ennél a felbontásnál végeztem álló folyadék esetén, míg megdupláztam a horizontális felbontást lassan, horizontálisan áramló közegeknél, hogy redukáljam a laterális kölcsönhatást.

A 3.25 ábrán pillanatképek láthatók a buborékkontúrról $g=3\cdot 10^{-5}$ gravitációs gyorsítás esetén.

Jól látható, hogy először egy kis nukleus alakul ki a nagy hőfluxusú magnál, aztán a buborék elkezd növekedni, és a buborék alatti száraz zóna (dry spot) szélesedik. Elérve egy maximumot a száraz zóna elkezd összehúzódni, és végül a buborék elkezd nyakasodni, mielőtt leválik. A leválás után egy kis gőzbuborékmag marad a falhoz ragadva, ez lesz a forrása egy újabb növekedési és leválási ciklusnak.

A 3.25 ábrán a leválás előtti és utáni pillanatokban láthatók a sebességmezők egységnyi hosszúságú vektorokat alkalmazva.

A buborék mindkét oldalán a folyadék forgása figyelhető meg, amely folyamat hideg folyadékot juttat a buborék nyakához, támogatva a Haider és Webb [73] által javasolt ún. tranziens mikro-konvekciós modell alkalmazhatóságát. A leváló buborék nyomában örvények jönnek létre, amelynek hatására kényszerkonvekciós hőátadás alakul ki a leválási pont környékén.

A szimulációs eredményekből meghatározhatjuk a leváló buborék átmérőjét. Bár statikus erőegyensúly alapján azt várnánk, hogy a leválási átmérő D_b kielégíti a következő relációt:

$$D_b \sim \sqrt{\frac{\sigma}{g\left(\rho_l - \rho_g\right)}},\tag{3.158}$$

Dhir áttekintése [70] felhívja a figyelmet arra, hogy számos olyan korreláció létezik, ahol a leválási átmérő $g^{-1/3}$ -dal korrelál. Továbbá Buyevich és Webbon [72] szintén megkérdőjelezi egy egyszerű erőegyensúly alkalmazhatóságát a leválási átmérő meghatározására. Végül, de nem utolsósorban, néhány újkeletű kísérlet alapján illesztett korrelációban a gravitáció explicit módon meg sem jelenik (ld. pl. [74]).

A modellel lehetőségem volt a gravitáció leválási átmérőre gyakorolt hatását vizsgálni. Ehhez a gravitációs erőt változtatva egy sor numerikus kísérletet végeztem, és meghatároztam a leválási átmérőt.

Utóbbi alakulása a gravitáció függvényében látható a 3.26 baloldali ábráján. Szimbólumok reprezentálják a szimulációs eredményeket, a vonal pedig a $D_b \sim g^{-1/2}$ függvénykapcsolatot. Eredményeim egyértelműen alátámasztják ez utóbbi függvénykapcsolat létezését. Megjegyzem ugyanakkor, hogy az értekezés időpontjában még nem publikált eredményeink a kitevő növekedését (-0,4) mutatják abban az esetben, amikor a leválás apró résekből történik. Mindezek arra utalnak, hogy a leválás folyamatát jelentősen befolyásolja a felület geometriája.

Néhány korrelációban a kontaktszög szintén megjelenik mint fontos paraméter. Ezért ennek hatását szintén tanulmányoztam, változtatva a G_w kölcsönhatási potenciált a fal és folyadék között, azt vizsgálva, hogy e változás hatására hogyan változik a leválási átmérő.

A 3.26 jobboldali ábráján a leválás előtti pillatokban készült buborékalakok láthatók, különböző kontaktszögek esetén. Látható, hogy a buborékátmérő csak kismértékben függ a kontaktszögtől, és semmilyen általános összefüggés sem figyelhető meg a kontaktszög és a leválási átmérő között.

Másrészről, a szimulációs eredmények azt mutatták, hogy a buboréknövekedés felgyorsul a növekvő kontaktszöggel, ami ellentmondott néhány korábi numerikus szimuláció eredményének [70], ezért további vizsgálatokba kezdtem.

Mivel szimulációimban az első leváló buborék nem egy buborékmagból képződik, így a buborékleválás egy kváziperiodikus folyamat. Vagyis az első buboréknak több időre van szüksége, hogy elérje a leválási méretet, mint az ezt követőknek. Továbbá a leváló buborék meleg vizet ragad el a faltól, megváltoztatva így a tartomány közepén a hőmérsékletet, szintén gyorsítva a második buborék növekedési folyamatát. Mindezen változások ellenére elmondható, hogy az első buborék leválása után néhány buborékleválási ciklus jelentősebb eltérések nélkül megy végbe, ahogy ez a 3.27 baloldali ábrán is látható, ahol a 7000-edik, 12 000-edik, 17 000-edik, 22 000-edik és 32 000-edik szimulációs lépésben vett pillanatképek láthatók. Ezek az eredmények azt mutatják, hogy az első leválás után a buborékok periodikusan 5000 lépésenként válnak le hosszabb ideig, vagyis a szimulációkból a leválási frekvencia is meghatározható. Az f buborék leválási frekvencia meghatározására Zuber [76] a következő összefüggést javasolta:

dc 143 10



3.26. ábra. A baloldali ábrán a leválási átmérő látható a gravitáció függvényében, míg a jobboldali ábra a buborékok alakját és méretét mutatja leválás előtt, különböző kontaktszögek esetén.

$$f^{-1} \sim D_b \left[\frac{\sigma g \left(\rho_l - \rho_g \right)}{\rho_l^2} \right]^{-1/4}.$$
 (3.159)

Ismerve a leválási átmérő és a gravitációs erő közötti $D_b \sim g^{-1/2}$ kapcsolatot, azt várjuk, hogy a leválási frekvencia $g^{3/4}$ -del lesz arányos. A 3.27 jobboldali ábrán szimbólumok mutatják a szimulációkból származtatott leválási periodust, és a vonal egy $5.2g^{-3/4}$ függvényt reprezentál. Nyilvánvalóan a leválási frekvencia $g^{3/4}$ -nel arányos, ahogy azt vártuk. Vagyis eredményeim ismét alátámasztották síkfal esetén az erőegyensúly alapján származtatott összefüggést. Ahogy már említettük, a kontaktszög növekedésének hatására a buborékok gyorsabban növekednek. A 3.28 ábrán a szimulációk során tapasztalt leválási periódus látható (szimbólumok) a kontaktszög függvényében, és az illesztett görbe segít e két mennyiség közötti összefüggés felderítésére. Jól látható, hogy a buborékleválási periódusidő közel exponenciálisan csökken a kontaktszöggel.

Figyelembevéve, hogy a buborékleválási átmérő nem függvénye a kontaktszögnek, így elmondhatjuk, hogy a növekedési és leválási folyamat kvalitatívan nem változik változó kontaktszögnél, viszont a folyamatok más időskálán kezdenek mozogni. Nagyobb kontaktszög nagyobb vonzóerőt jelent a folyadék és a fal között, az erősebb kölcsönhatás így megnöveli a fallal szomszédos folyadékréteg ott-tartozkódását. Mivel a fázisátalakulás felgyorsul nagyobb túlhevítés esetén, így a nagyobb kontaktszög gyorsabban növekvő buborékokhoz vezet. Ráadásul a nagyobb vonzóerő felgyorsítja a száraz régió újranedvesítését, tovább gyorsítva a leválási ciklust.

Kiaknázva a modell adta lehetőségeket, megvizsgáltam azt is, hogy a leválást milyen módon befolyásolja a közeg lassú áramlása. Vagyis különböző térfogati erőkkel gyorsítva a folyadékot horizontális irányban meghatároztam a leválási átmérőt. A 3.29 ábra mutatja a buborék

dc_143_10



3.27. ábra. A leválló buborék periodicitása és a leválási frekvencia a gravitációs gyorsulás függvényében.



3.28. ábra. A leválási periódusidő a kontaktszög függvényében.



3.29. ábra. A buborék növekedése lassú háttéráramlásban.

alakjának alakulását időben, horizontális áramlás esetén. Csakúgy, mint álló folyadék esetén, először egy kis buborékmag formálódik a falon, ami aztán elkezd növekedni. A növekedés alatt két különböző kontaktszög alakul ki az áramlási iránytól függően, csakúgy, mint Kandlikar és Stumm [71] méréseiben. A leválás előtt az álló folyadékhoz hasonlóan a buborék nyakasodik.

A 3.30 ábrán látható a sebességmező leválás előtt és után egységnyi sebességvektorokat alkalmazva. Látható, hogy hideg víz áramlik a buborék nyaka felé bal oldalról, az áramlás irányából, amelyet aztán a buborék magával ragad, és a tartomány belseje felé szállít. A buborék másik oldalán pedig egy cirkulációs zóna alakul ki, amely kényszerkonvekciós hőátadást hoz létre. A leválás után a buborék a tartomány tetejének irányában mozog, és az álló közegben történő leváláshoz hasonlóan, cirkulációs zóna alakul ki a buborék mindkét oldalán. A leváló buborék magával ragadja a tartomány közepéből érkező hideg folyadékot, ami így nem tudja elérni a következő fejlődő buborék esetén a falközeli régiót, hanem a buborék teteje felé áramolva lelassítja a növekedést.

Növelve a laterális erőt azt tapasztaltam, hogy a buborékleválási átmérő exponenciálisan csökkent (3.31 ábra), ami összhangban van a [77]-ben bemutatott mérési eredményekkel.

3.5. A módszer kiterjesztése szuperkritikus nyomású közegek vizsgálatára

A 4. generációs nukleáriserőműterv-koncepciók egyike a szuperkritikus nyomású vízzel hűtött reaktor, amelynek tervezésével kapcsolatos kutatásba 2006-ban kapcsolódott be az általam vezetett csoport is. Elsődleges célunk az volt, hogy magyarázatot adjunk néhány, szuperkritikus nyomású közegek hőátadási folyamatában megfigyelt furcsaságra, mivel a hőátadási folyamatok pontos ismerete mind gazdasági, mind biztonsági szempontból fontos egy erőmű tervezése során. Vizsgálataink megkezdésekor tudni lehetett, hogy szuperkritikus nyomáson



3.30. ábra. A buborék alakja leválás után és a sebességmező egységnyi vektorokkal ábrázolva.



3.31. ábra. Leválási átmérő a háttéráramlást létrehozó erő függvényében.

végzett hőátadási mérések esetén a hőátadás visszaesését és erős nyomáslengéseket figyeltek meg az ún. pszeudokritikus hőmérséklet közelében. Ezt a két megfigyelést kapcsolatba hoztam az űrsiklókon, a kritikus pont környékén végzett mikrogravitációs kísérletek megfigyeléseivel, és a rács-Boltzmann módszeren alapuló modellt dolgoztam ki a folyamatok vizsgálatára.

Ha egy folyadékban növeljük a nyomást és a hőmérsékletet, akkor a kritikus pont felett (T_c, p_c) a közeg szuperkritikus állapotba kerül. Ehhez a ponthoz közeledve a folyadék számos termofizikai paramétere erős változáson megy keresztül, pl. az izoterm összenyomhatósága és izobár hőtágulása rendkívül megnő, míg termikus diffúziója zérushoz közeledik [79]. Ezek az anyagjellemző-változások egy új és összenyomhatatlan közegek hőátadásához szokott szakemberek számára szokatlan hőátadási mechanizmushoz vezetnek, a piston-effektuson alapuló hőátadáshoz, amelyet mikrogravitációs környezetben már többen megfigyeltek [80],[81].

Ha egy tartályt a kritikus ponthoz közeli állapotú folyadékkal töltünk meg, és a tartály falát elkezdjük melegíteni, akkor termikus határréteg alakul ki a falon. Mivel a folyadék hőtágulása ebben az állapotban igen nagy, ezért a termikus határréteg elkezd gyorsan kitágulni, és mint egy dugattyú, összenyomja a tartányban található nagy összenyomhatósággal rendelkező folyadékot. A kompresszió hatására a folyadék hőmérséklete homogén módon megemelkedik. Mikrogravitációs környezetben ez a hőátadás "felgyorsulásához" vezet, a "kritikus lelassulás" helyett, amit a kritikus pont környékén csökkenő termikus diffúzió miatt várnánk [83].

A jelenlegi tervek szerint szuperkritikus nyomású vízzel hűtött reaktorban a hűtőközeg nyomása a kritikus pont felett van (22,064 MPa), míg hőmérséklete a reaktorzónában kb. 300 és 500-600 Celsius fok között változik. Ekkora nyomáson, az ún. pszeudokritikus hőmérséklet közelében a kritikus pont közeli változásokhoz hasonló módon változnak a termofizikai paraméterek, pl. a fajhő gyorsan növekszik. Az átmenet mértéke lényegében hasonló a fázisátmeneteknél tapasztaltakkal, azzal a különbséggel, hogy ebben az esetben az átmenet folytonos. Úgy gondoltam, hogy a kritikus pont környékén megfigyelhető változások az ott tapasztaltakhoz hasonló módon okozhatják a földi körülmények között megfigyelt hőátadási anomáliákat a pszeudokritikus hőmérséklet közelében, ahogy azt a [78]-ben is kifejtettem.

A mikrogravitációs kísérletek reprodukciójára korábban ún. akusztikusan szűrt egyenletek megoldását használták fel. Mivel azonban a földi megfigyelések során gyakran jelentős nyomásoszcillációkat tapasztaltak, ezért olyan modell fejlesztését céloztam meg, amelyben ezek a fluktuációk is reprodukálhatók.

Az akusztikusan szűrt egyenletek esetén a nyomás egy térfüggetlen részre és egy aszimptotikusan kisebb dinamikus részre van osztva:

$$p = p_0(t) + Ma^2 p^{(1)}(\mathbf{x}, t) + o(Ma^2), \qquad (3.160)$$

ahol $p^{(1)}$ -et használjuk fel az impulzusegyenletben, továbbá az állapotegyenlet:

$$\rho = \rho(T, p_0). \tag{3.161}$$

Vagyis a nyomásfluktuációkat kiszűrjük, azok nem jelennek meg az állapotegyenletben.

A megközelítésem alapja lényegében a már korábban megismert rács-Boltzmann modell pszeudopotenciállal történő kiterjesztése, amelyet azonban ebben az esetben a kritikus pont környékén használunk.

dc 143 10



3.32. ábra. A hőmérséklet alakulása a csatorna közepén, különböző kezdeti hőmérsékletek esetén.

A modell alkalmazhatóságát több numerikus kísérlettel szemléltettem [84], [85]. Az egyik ilyen példában két síklap között kritikus pont környékén lévő folyadékréteget melegítettem egy kis hőmérsékletugrást adva az alsó síklapra, míg a fenti lap hőmérsékletét konstans értéken tartottam. A 3.32 ábrán a normalizált hőmérséklet $(T/T_{initial})$ alakulása látható a réteg függőleges középvonalán és a határrétegben. Ha a diffúziós forgatókönyv szerint a hő csak egyszerű hővezetéssel terjedne, akkor a csatorna közepén a hőmérséklet lassan kellene hogy emelkedjen a falban bekövetkező hőmérsékletugrás után egy kis idővel. Ehelyett a lassú forgatókönyv helyett azonban a hőátadás felgyorsul, és a piston-effektusnak köszönhetően szinte a hőmérsékletugrás után rögtön hő jut a tartomány közepére a vékony határréteg kitágulásának és a benti réteg összenyomásának hatására bekövetkező felmelegedésnek a következtében. Vegyük észre, hogy a termoakusztikusan átadott hő folyamatosan csökken, ahogy távolodunk a kritikus hőmérséklettől, ami a csökkenő kompresszibilitásnak és hőtágulási együtthatónak köszönhető.

A 3.32 ábrán pillanatképek sorozata látható a csatornán belüli hőmérsékleteloszlásról. A hőmérséklet homogén módon melegszik fel a csatorna belsejében, miközben egy hideg és meleg termikus határréteg alakul ki a két falon. Jól kivehető, hogy az első néhány lépésben az eloszlások nem teljesen homogének a csatornában, szemben más numerikus tanulmányokkal ahol akusztikus szűrést alkalmaztak. Ennek oka, hogy modellemben a nyomáshullámokat nem átlagoljuk ki, így azok hatása sem homogén a csatornán belül, a nyomáshullámok terjedése és a kapcsolódó hőátadás folyamata követhető mind térben, mind időben. Világos, hogy a hőátadásnak ez a formája jelentős nyomáslengések kialakulásával jár.

A modell alkalmazhatóságának további vizsgálatára meghatároztam a konvekció megindulását Rayleigh-Benard cellában. Vagyis az előbb bemutatott problémát kiterjesztve a gravitáció figyelembevételével, meghatároztam azt a kritikus Rayleigh számot, amelynél áramlás alakul ki. L hosszúságú csatorna esetén T_L hőmérséklettel melegítve az alsó síklapot, míg a



3.33. ábra. Hőmérséklet alakulása a cellában, kritikus nyomásnál a kritikus hőmérséklet közelében, különböző időlépéseknél.

felső lapot $T_U = T_L - \Delta T$ hőmérsékleten tartva nem alakul ki konvekció, amíg ΔT elegendően kicsi. Növelve ΔT -t a rendszer elveszíti stabilitását, és ΔT_{onset} -nél konvekció indul meg. Összenyomhatatlan közeg esetén a konvekció megindulását jellemző kritikus Rayleigh szám $Ra = Ra_c \simeq 1708$, ahol

$$Ra = \frac{\alpha_p \Delta T g L^3}{\nu D_{T,v}},\tag{3.162}$$

és α_p az állandó nyomáson vett hőtágulási együttható. Összenyomható közegek esetén az elméleti számítások alapján a kritikus érték magasabb [82]. Ez az adiabatikus hőmérsékletgradiens $ATG \equiv \frac{g\rho}{\alpha_p} (\kappa_T - \kappa_S)$, stabilizáló hatásának köszönhető, ahol κ_S az izentropikus kompresszibilitás. Így közel a kritikus ponthoz, ahol a közeg összenyomhatósága jelentősen megnő, átmenet alakul ki a Rayleigh és a Schwarzschild kritériumok között:

$$Ra_{corr} > Ra_c \simeq 1708, \tag{3.163}$$

ahol

$$Ra_{corr} = \frac{gl^4 \alpha_p \rho_c c_p}{\nu D_{T,v}} \left(\frac{\delta T}{l} - \frac{gT \alpha_p}{c_p} \right), \qquad (3.164)$$

és la meleg falnál kialakuló határréteg vastagsága, δT pedig a határréteghez tartozó hőmérsékletgradiens.

Kogan és Meyer szuperkritikus héliumban végzett mérései alátámasztották ezeket az elméleti számításokat [82]. Modellünket felhasználva numerikus kísérleteket végeztem ennek a jelenségnek a reprodukciójára. A kritikus Rayleigh számot úgy határozhatjuk meg, hogy a kezdeti hőmérsékletugrás hatását nyomon követjük. Összenyomhatatlan közegekben ha $\Delta T < \Delta T_{onset}$, akkor a kezdeti perturbáció amplitudója exponenciálisan csökken, míg e felett exponenciálisan növekszik. Vagyis változtatva ΔT -t és meghatározható. Mivel azonban összenyomható közegek esetén az exponenciális növekedési fázis csak nagy α_p esetén alakul ki, ezért először előzetes számításokkal közelítőleg meghatároztam ΔT_{onset} -et, aztán néhány további szimulációt végeztem ekörül a ΔT érték körül. Végül a kritikus Rayleigh számot lineáris interpolációval határoztam meg a növekedési és csökkenési fázisok eredményeiből.

A 3.34 ábrán a maximális függőleges irányú sebesség látható két különböző α_p értékre. Jól látható, hogy $\alpha_p = 1$ esetén a kritikus Rayleigh szám 1704 és 1716 közé esik. Figyelembevéve ezt a két határértéket a számítás hibája kevesebb, mint 1% az elméleti 1708-as értékre vonatkoztatva. Ezekben a számításokban az ATG járuléka elhanyagolható.

Ahogy közeledünk a kritikus ponthoz, a kritikus Rayleigh szám értéke folyamatosan növekszik, és $\alpha_p = 5$ esetén pl. a kritikus érték 1944 körül alakul.

A 3.35 ábrán a kritikus Rayleigh számot ábrázoltam $\alpha_p/\Delta T$ függvényében. Ahogy várható, a kritikus Rayleigh szám közel lineárisan növekszik, mivel a meleg oldali határréteg vastagsága nem változik jelentősen abban a paramétertartományban, amelyben vizsgálataimat végeztem.

dc_143_10



3.34. ábra. A kritikus Rayleigh szám meghatározása különböző



3.35. ábra. A kritikus Rayleigh szám függése a folyadék állapotától.

4. fejezet Összefoglaló

Ertekezésemben két, alapjaiban különböző módszertani megközelítést mutattam be termohidraulikai folyamatok modellezésére. Míg az egyik alkalmas rendszerszintű - pl. nyomottvizes erőművek teljes primerkörében zajló - folyamatok modellezésére, addig a másik megközelítés akár molekuláris szintű modellezést is lehetővé tesz.

A dolgozat első felében a vezetésemmel tervezett, fejlesztett és tesztelt, kétfázisú RETINA kódrendszert mutattam be, igyekezve azokra a részletekre fókuszálni, amelyek e rendszert egyedivé teszik. A dolgozat fennmaradó részében a rács-Boltzmann módszer fejlesztése és alkalmazása kapcsán elért eredményeimet ismertettem.

Az alábbiakban megfogalmazom téziseimet továbbá összefoglalom, hogy eredményeim, hogyan hasznosultak:

1. Tézis Kétfázisú áramlások rendszerszintű modellezésére alkalmas rendszer tervezése és megépítése

Egy új, kétfázisú áramlások modellezésére alkalmas rendszert terveztem és fejlesztettem. Numerikus és szeparálteffektus tesztek segítségével bizonyítottam a rendszer alkalmazhatóságát. Irányítottam azokat a munkákat, melyek révén az általam tervezett és fejlesztett rendszer a paksi teljesléptékű szimulátorba került beépítésre. Vezetésemmel sor került a modellrendszer teljes körű tesztelésére, a modellek paramétereinek beállítására és a modellrendszer kiterjesztésére különleges üzemállapotokra.

A tervezett modellrendszer több szempontból is előrelépést jelent más hasonló rendszerekhez viszonyítva:

a. A diszkretizált megmaradásegyenletek megoldására teljesen implicit megoldó módszert alkalmaztam Newton-Raphson iterációval, felhasználva a particionált inverz formulát a probléma Jacobi mátrixának invertálására. Így a particionált rendszermátrix egyes ún. hurokmátrixainak invertálásához ki tudtam használni e mátrixok speciális struktúráját, és ritka mátrix megoldó módszert alkalmazhattam invertálásukra. Ennek a módszernek az alkalmazása teszi lehetővé a rendszer valós idejű alkalmazását, továbbá mivel a hurokmátrixok párhuzamosan invertálhatók, a rendszer párhuzamos számítógép-architektúrán is működik. b. Az egyenletrendszer Jacobi mátrixának meghatározásához automatikus deriválási algoritmusokat dolgoztam ki és alkalmaztam. így az egyes modellek átláthatók, könnyedén módosíthatók, nincs szükség a Jacobi mátrix numerikus vagy a priori analitikus meghatározására.

c. Paraméterek és modellek egy teljes halmazát állítottam össze a paksi erőmű primer körének és a szekunderkör egy részének a modellezéséhez. Ezekkel a paraméterekkel és modellekkel elértem, hogy névleges üzemi állapotban a fő rendszerparaméterek mindegyike (pl. primer hűtőkörök forgalma, melegági hőmérséklete, nyomásesés a reaktorzónán, térfogatkompenzátor nyomása, szintje, gőzfejlesztőkben gőznyomás, forgalom, gőzkollektorok nyomása stb.) 2%-on (legtöbbje 1%-on) belüli pontossággal adja vissza a mért értékeket. Az operátorok oktatása szempontjából fontos üzemzavari tranziensek esetén sikerült elérni, hogy a számítások - ismert esetekben (pl. turbinák le- és felterhelése, teherledobás, főkeringtető szivattyúk kiesése, turbinakiesés stb.) - a paksi instruktorok tapasztalatainak megfelelő módon alakuljanak. Sikerült a tapasztalatoknak megfelelő reaktorindítási, lehűtési és felfűtési dinamikát reprodukálni. Baleseti szituációk (pl. csőtöréses balesetek) esetén sikerült megmutatni, hogy az általam fejlesztett modellrendszer a korábbi független számítások eredményeivel összhangban van. Összességében több mint ötven rendszerszintű teszt bizonyítja a modellrendszer alkalmazhatóságát.

2. Tézis A rács-Boltzmann módszer elméleti hátterének megalapozása műszaki feladatok megoldásához

Lamináris és turbulens áramlási problémákat analitikusan vizsgálva alátámasztottam, hogy a rács-Boltzmann módszer alkalmas a Navier-Stokes egyenletek numerikus megoldására. A fellépő numerikus hibákat azonosítottam, és megmutattam, hogy melyek azok a kompenzációs módszerek, melyek segítségével a hibák kontrollálhatók, megalapozva így a módszer műszaki alkalmazását.

a. Elméleti eredmények alapján a rács-Boltzmann módszer tér szerinti diszkretizációja másodrendű pontosságot mutat. Peremfeltételek, pl. csúszásmentes fallal határolt probléma esetén a falperemek modellezése azonban ronthat a módszer konvergenciáján. Amennyiben például a fal modellje csak elsőrendű pontosságot ad, úgy az elsőrendűre degradálhatja a teljes probléma megoldását. A Jeffery-Hamel problémát (divergáló falak közötti lamináris áramlás) vizsgálva rámutattam, hogy a módszer másodrendű térszerinti pontossága nem mérhető, aminek oka a falak és a rácsvektorok kedvezőtlen orientációja vagy a falperemeknél alkalmazott modell lehet. Analitikus számításokkal kimutattam, hogy a rács-Boltzmann módszer számábrázolási pontosságig képes meghatározni Poiseuille és Coutte áramlás esetén a sebességprofilt, amennyiben a rácsvektorok és a falak orientációja kedvező, és a peremfeltételeket megfelelő módon valósítják meg. Ugyanakkor azt találtam, hogy kedvezőtlen rácsorientáció esetén is másodrendű pontosságú a módszer, tehát a korábban a Jeffery-Hamel probléma esetén mért elsőrendű pontosság egyértelműen a peremfeltételek modellezésének a következménye. Megmutattam, hogy az általam javasolt analitikus módszert hogyan lehet felhasználni peremfeltételek megvalósítására alkalmas modellek pontosságának *a priori* tesztelésére.

b. Analitikus és numerikus számításokkal kimutattam, hogy azok közül a módszerek közül, melyeket korábban a módszer kompresszibilitási hibájának kiküszöbölésére dolgoztak ki, valójában nem mindegyik alkalmas a kompresszibilitási hiba megszüntetésére.

c. Analitikus számításokkal kimutattam, hogy homogén, izotróp turbulencia modellezése esetén milyen jellegű torzítás várható a kétpontos sebesség korrelációs függvényekben. így bizonyítottam, hogy még direkt numerikus szimulációk esetén is fontos a rácsfinomítás és a rácsfüggetlen eredmény demonstrálása, amennyiben turbulens áramlások magasabbrendű statisztikáit vizsgáljuk.

3. Tézis Turbulens áramlások vizsgálata a rács-Boltzmann módszerrel

A rács-Boltzmann módszeren alapuló, turbulens áramlások modellezésére alkalmas modelleket építettem. Ezek segítségével örvények kölcsönhatását, kétdimenziós lecsengő turbulenciát és szubcsatornák közötti keveredési folyamatokat vizsgáltam. Eredményeim összevetése mérésekkel és más numerikus számításokkal igazolták a modellek alkalmazhatóságát, és lehetőséget adtak számos újabb következtetés levonására.

a. Kétdimenziós lecsengő turbulenciát vizsgálva végtelen kiterjedésű (periodikus) tartományban, megállapítottam, hogy a kinetikus energia spektruma hatványfüggvénnyel jól leírható a bomlás hosszabb szakaszában, és a spektrum meredeksége az elméleti értéknél meredekebb más numerikus számításokhoz hasonlóan. Először közöltem eredményeket a kétdimenziós energiaspektrumról fallal határolt esetben [14]. Megmutattam, hogy a spektrum itt is hatványfüggvényt követ, valamint, hogy annak értéke nagyobb, mint az elméleti érték. Sikerült továbbá kimutatni, hogy a bomlás hosszú átmeneti időintervallumában az általam bevezetett regionális enstrópia univerzális - a háromdimenziós áramlásoknál jól ismert - jelleget mutat. Vizsgálataimban ún. árnyékolt Gauss örvényeket használtam, és megfigyeltem ezek összeolvadását. Korábban ezekről az örvényekről azt gondolták, hogy összeolvadásukat a külső örvénygyűrű megakadályozza. Paramétertérképet készítettem, megmutatva, mely tartományban várható ezeknek az örvényeknek az összeolvadása, dipólus-, illetve tripóluskialakulás [15]. Árnyékolt Gauss örvények speciális perturbációival megmutattam, hogy a viszkózus tartományban is lehetséges - kísérletekben is megfigyelt - összetett örvénystruktúrákat létrehozni.

b. Az egyszerű turbulens áramlásokat megalapozó számítások mellett, irányításommal elsőként végezték el csőkötegek szubcsatornáiban zajló áramlás direkt numerikus és nagyörvényszimulációját [17,18]. Ezeket a számításokat elsősorban az motiválta, hogy a paksi erőműben fűtőelemmodernizálási program indult, melynek kapcsán minél többet szerettünk volna megtudni a VVER-400 atomreaktorok üzemanyagkötegeiben zajló keveredésről. Felhívtam a figyelmet arra, hogy CFD (Computational Fluid Dynamics) számításokban a turbulencia- modell választását meg kell alapozni, és a konkrét esetben, csőkötegekben, a Reynolds feszültség transzport modellt célszerű alkalmazni.

4. Tézis A rács-Boltzmann módszer kétfázisú kiterjesztésének megalapozása műszaki alkalmazásokhoz

Létrehoztam egy, a rács-Boltzmann módszer pszeudopotenciál-kiterjesztésén alapuló, kétfázisú áramlások vizsgálatára alkalmas modellt. Igazoltam annak termodinamikai konzisztenciáját, és numerikus kísérletekkel bizonyítottam annak alkalmazhatóságát fázisátalakulással járó problémák vizsgálatára.

a. Ismertettem a rács-Boltzmann módszer lehetséges kiterjesztéseit kétfázisú áramlások modellezésére, továbbá felhívtam a figyelmet az egyes kiterjesztések problémáira. Rámutattam, hogy e módszer alkalmazása esetén a korábbi számítások egy ponton szükségtelenül szűkítették a termodinamikailag konzisztens potenciálfüggvények körét, és megadtam azt a függvényalakot, mellyel a kiterjesztés termodinamikailag konzisztenssé válik. A potenciál-gradiens meghatározására egy olyan módszert javasoltunk, mely a korábban alkalmazott módszerekhez képest numerikusan stabilabb.

b. Az alapmodellt továbbfejlesztettem, lehetővé téve, hogy azt heterogén forrás vizsgálatára használhassam. Annak érdekében, hogy a falak nedvesítésének hatását is vizsgálni tudjam, a modellt kiterjesztettem a falak és a folyadék közötti molekuláris erők számításával. Numerikus számítások sorozatával meghatároztam a falnedvesítés és molekuláris erők közötti kapcsolatot.

5. Tézis A rács-Boltzmann módszer alkalmazása kétfázisú áramlási problémák vizsgálatára Először határoztam meg numerikus buborékdinamikai vizsgálatokkal a buborékokra ható súrlódási és virtuálistömeg erőt szubcsatornákban. Megállapítottam, hogy az általam vizsgált paramétertartományban a súrlódási erőt nem befolyásolja jelentősen a szubcsatorna falainak jelenléte, ugyanakkor a buborékok virtuális tömege jelentősen megnő. Továbbá kimutattam, hogy a buborékok kölcsönhatása egy Richardson-Zaki típusú korrelációval írható le. A korábbi numerikus vizsgálatoknál összetettebb modellt készítettem heterogén forrás modellezésére. E modell segítségével a forrás hatására falról leváló buborékok átmérőjét és leválási frekvenciáját vizsgáltam. Megállapítottam, hogy síkfal esetén e két paraméter, a Zuber által felírt erőegyensúly alapján korrelál a gravitációval, ugyanakkor a falak nedvesítése nem hat a leváló buborékok átmérőjére, de befolyásolja a leválási frekvenciát.

6. Tézis Rács-Boltzmann módszer alapú modell fejlesztése és alkalmazása szuperkritikus nyomású közegek vizsgálatára

Erzékenységvizsgálattal kimutattam, hogy a pszeudokritikus hőmérséklet környékén a termofizikai paraméterek hőmérséklet- és nyomásfüggése azonos nagyságrendű lehet, így nem indokolt a korábbi gyakorlat, mely csak a hőmérsékletfüggést veszi figyelembe. A rács-Boltzmann egyenleten alapuló módszert fejlesztettem szuperkritikus nyomású közegekben zajló hőtranszfer modellezésére. Felvetettem, hogy szuperkritikus nyomású közegek esetén a hőátadást befolyásolhatja a pszeduokritikus hőmérséklet környékén jelentőssé váló és - az ipari gyakorlatban - az energiaegyenletben e problémák vizsgálata során mindig elhanyagolt, kompresszibilitásból származó munka. Modellemben figyelembe vettem e munka hatását, és megmutattam, hogy a piston-effektusból származó munka milyen hatással lehet a hőátadásra. Rámutattam, hogy a kompresszibilitásból származó munka okozhatja a szuperkritikus nyomású ipari rendszerekben gyakran megfigyelt nyomáslengéseket, az ún. termoakusztikus oszcillációt.

Eredményeim a következő módon hasznosultak:

A kétfázisú áramlások rendszerszintű modellezésével kapcsolatban fejlesztésem közvetlenül hasznosult, hiszen az általam fejlesztett modellrendszer alkotja ma a paksi erőmű teljesléptékű szimulátorának - melyen két műszakban zajlik az operátorok oktatása - az egyik legfontosabb modulját. Továbbá a Paksi Atomerőmű megrendelésére megkezdődött e rendszer beépítése a paksi zónamonitorozó rendszer szakértői változatába, így az a fűtőelem-modernizációs tervek megvalósításának egyik kulcseleme lehet. A rács-Boltzmann módszer elméletével kapcsolatos vizsgálataim közvetve hasznosultak. E munkák minket és másokat is arra motiváltak, hogy a felismert problémák kiküszöbölésére alkalmas módszereket dolgozzunk ki. Az így továbbfejlesztett módszer gyakorlati alkalmazási köre jelentősen bővült, és lehetővé vált, hogy a későbbiek során a módszert különböző turbulens áramlások vizsgálatára használhassam. A turbulens áramlásokkal kapcsolatos eredmények szintén közvetve hasznosultak, mivel a paksi fűtőelemmodernizálási program egyik sarkalatos pontja volt, hogy a fűtőelemkazettákban zajló keveredést jobban megismerjük. Vizsgálataim hatására nemcsak hazánkban, de a világ számos országában kezdték el alkalmazni a Reynolds feszültség transzport modellt a fűtőelemkeveredési számításokban, és a nagyörvény-szimulációs technikát a csőkötegekben zajló keveredés vizsgálatára. A NURESIM európai uniós projekt keretein belül fejlesztett NEPTUNE CFD kódba, elsősorban eredményeim hatására és javaslatomra került beépítésre a Reynolds feszültség transzport modell. Egy nemrégiben megjelent nemzetközi áttekintő cikkben többek között az általunk végzett munkára hivatkozva állapítja meg a szerző, hogy csőkötegek áramlási problémáinak megismerése csak direkt-numerikus vagy nagyörvény-szimulációs technikák segítségével, illetve nem-állandósult állapotbeli Reynolds átlagolt egyenletek megoldásával és anizotróp turbulenciamodell alkalmazásával lehetséges. Szintén munkám közvetlen hasznosulásának tartom, hogy a nukleáris ipar területén hazánkban is megindult a CFD számítások kísérleti megalapozása. Intézetünkben, az országban először, bevezetésre került a PIV (Particle Image Velocimetry) méréstechnika alkalmazása, melyet azóta számos validációs számítás megalapozására használtak fel. A kétfázisú rács-Boltzmann modellek fejlesztése kapcsán elért eredményeim több szempontból hasznosultak. A téma kapcsán megjelent áttekintő dolgozatomban felsorolt problémák többségére például sikerült nekünk vagy másoknak - sok esetben e munkára hivatkozva - megoldást találni. Ezek a fejlesztések részben megalapozták későbbi munkánkat, részben lökést adtak a módszer szélesebb körű alkalmazásának és fejlesztésének. A kétfázisú áramlási problémák vizsgálatára irányuló munkáim szintén közvetve hasznosulnak, mivel az itt felsorolt vizsgálatok egy nemzetközi együttműködés részei, a NURESIM és (később NURISP) - Európai Unió által támogatott - projekt részfeladatai. A projekt alapvető célja olyan szimulációs eszközök létrehozása, melyek lehetővé teszik nukleáris erőművekben zajló folyamatok korábbinál sokkal részletesebb modellezését. A termohidraulikai kutatások oldalán ez egy kifejezetten kétfázisú áramlásokat pontosan modellező CFD kód létrehozását jelenti. A kódban felhasználandó modellek megalapozására szolgálnak az általam vezetett finomskálás vizsgálatok.

5. fejezet

Kitekintés

A kétfázisú rendszerszintű modellezés területén a RETINA fejlesztésével eljutottunk oda, hogy ma képesek vagyunk a legfontosabb kétfázisú termohidraulikai folyamatokat rendszerszinten elfogadható pontossággal modellezni. A pontosság a szimulátoros oktatás szempontjából elfogadható. Ugyanakkor már a dolgozat megírásával párhuzamosan felmerült az az igény, hogy a RETINÁ-t továbbfejlesszük, és az bekerüljön a paksi zónamonitorozó rendszer (VERONA) szakértői változatába, létrehozva így egy olyan eszközt, amely a paksi fűtőelemmodernizálási tervek zászlóshajója lehet. A fejlesztés egyik fontos eredménye lesz, hogy a zónamonitorozó rendszeren keresztül elérhető mérések, különböző bekövetkezett és majdan bekövetkező üzemzavari események esetén közvetlenül összevethetők lesznek a RETINA és egy csatolt neutronfizikai rendszer által számított eredményeivel. Így a RETINA különböző korrelációinak további finomítására mód nyílik, továbbá az így finomított eszköz bekapcsolható a jövő zónatervezési feladataiba. Természetesen ehhez szükség lesz a zónanodalizáció jelentős finomítására, illetve bizonyos számítások új alapra helyezésére és a finomskálás számítások eredményeinek felhasználására.

Ahogy a dolgozatban bemutattam, a finomskálás modellezés területén eljutottunk oda, hogy a rács-Boltzmann módszer segítségével képesek vagyunk turbulens áramlások alapvető tulajdonságait vizsgálni, továbbá a pszeduopontenciál-kiterjesztéssel kétfázisú termohidraulikai (pl. forrás, buborékdinamika) folyamatokat kis léptékben ugyan, de nagy pontossággal modellezni. Adott, hogy mindkét területen érdemes tovább lépni, továbbá e két területet érdemes összekapcsolni. Értekezésem megírásával párhuzamosan már befejeződtek azok a vizsgálatok, amelyekben a heterogén forrás numerikus vizsgálatát kiterjesztettük úgy, hogy a buborékleválás nem síkfalról, hanem a valósághoz hasonlóan a falon lévő kis egyenlőtlenségből indul, figyelembevéve a fűtött falban zajló hővezetést. Továbbá e vizsgálatok egy részében a leválás nemcsak egyetlen, hanem több pontban történik, lehetővé téve, hogy a nukleációs pontok sűrűségének forrásra gyakorolt hatását is felderítsük. Fontos jövőbeli kutatási irány e vizsgálatok további kiterjesztése, és a végső cél, hogy a forrás jelenségét turbulens háttéráramlásban vizsgáljuk majd.

Köszönetnyilvánítás

Az értekezésben bemutatott eredményeim egy részét az elmúlt években szakmai vezetésemre bízott kollégák segítségével sikerült elérnem, amiért köszönettel tartozom nekik. Névszerint, Farkas István és Dr. Mayer Gusztáv részt vett a RETINA kódrendszer fejlesztésében. Páles József intenzív segítségével vált e rendszer a paksi teljesléptékű szimulátor használható részévé. Szintén az ő, valamint a segítőkész, lelkiismeretes paksi instruktorok: Czekmeister Sándor, Kovács Miklós, Mittler József, Puch Ignác és paksi szimulátoros kollégák: Borbély Sándor és Nagy György segítségével végeztük el a rendszer teljes körű szimulátoros tesztelését.

A rács-Boltzmann módszer fejlesztése és alkalmazása kapcsán végzett kutatásaimban nagy segítségemre voltak Dr. Mayer Gusztáv, Márkus Attila és Tóth Gábor PhD-hallgatók. A módszer alkalmazásával kapcsolatos vizsgálatok elvégzésében többek között Dr. Imre Attila, Dr. Carmen Jimenez, Dr. Luis Valino, Dr. Jesus Martin és Dr. Thomas Kraska segítette munkámat.

Túl e kollégák közvetlen segítségén köszönettel tartozom az AEKI vezetésének, Dr. Gadó Jánosnak és Jánosy János Sebestyénnek, hogy az elmúlt évtizedben nemcsak hagyták, de támogatták is, hogy a saját utamat járjam a termohidraulika kutatásában. Az elmúlt években természetesen az AEKI számos munkatársa járult hozzá egy-egy előadásom után feltett kérdéssel, vitával ahhoz, hogy a témában jobban elmélyüljek, amiért e kollégáknak is hálás vagyok.

Függelék - Az egyensúlyi és nem-egyensúlyi feszültségtenzorok származtatása

Az alábbiakban bemutatom, hogy hogyan származtathatók a Chapman-Enskog sorfejtés során felhasznált egyensúlyi és nem-egyensúlyi feszültségtenzorok. Ehhez helyettesítsük be az egyensúlyi eloszlást (3.94)-t az (3.30) egyensúlyi feszültségtenzorba

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \rho \sum_{\sigma,i} c_{i\alpha} c_{i\beta} w_i \left[1 + \frac{u_{\gamma} c_{i\gamma}}{c_s^2} + \frac{u_{\gamma} u_{\zeta}}{2c_s^4} \left(c_{i\gamma} c_{i\zeta} - c_s^2 \delta_{\gamma\zeta} \right) \right]$$

$$= \rho \sum_{\sigma,i} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} + \frac{\rho u_{\gamma}}{c_s^2} \sum_{\sigma,i} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} + \rho \frac{u_{\gamma} u_{\zeta}}{2c_s^4} \sum_{\sigma,i} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \left(c_{i\gamma} c_{i\zeta} - c_s^2 \delta_{\gamma\zeta} \right)$$
(5.1)

Most válik érthetővé, hogy a rácsnak miért kell bizonyos szimmetria-tulajdonságokkal rendelkeznie, felhasználva ugyanis a rácstulajdonságokat (3.8)-t és (3.9)-t azt kapjuk, hogy

$$\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} = \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho \frac{u_\gamma u_\zeta}{2c_s^4} \left[\Phi_4 \Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta} + \Psi_4 \left(\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\zeta} \right) - \Psi_1 \delta_{\alpha\beta} c_s^2 \delta_{\gamma\zeta} \right].$$
(5.2)

Használjuk fel a következő összefüggéseket:

$$u_{\gamma}u_{\zeta}\Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta} = u_{\alpha}u_{\beta}\delta_{\alpha\beta},\tag{5.3}$$

$$u_{\gamma}u_{\zeta}\left(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta}\delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\zeta}\right) = \delta_{\alpha\beta}u^2 + 2u_{\alpha}u_{\beta}$$
(5.4)

mivel

$$u_{\gamma}u_{\zeta}\delta_{\alpha\zeta}\delta_{\beta\gamma} = u_{\gamma}u_{\zeta}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\zeta} = u_{\alpha}u_{\beta} \tag{5.5}$$

$$u_{\gamma}u_{\zeta}\delta_{\gamma\zeta} = u^2 \tag{5.6}$$

Kifejtve így a (5.2) második tagját

$$\rho \frac{u_{\gamma} u_{\zeta}}{2c_s^4} \Phi_4 \Delta_{\alpha\beta\gamma\zeta} + \rho \frac{u_{\gamma} u_{\zeta}}{2c_s^4} \Psi_4 \left(\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\zeta} \right) - \rho \frac{u_{\gamma} u_{\zeta}}{2c_s^4} c_s^4 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\zeta} =$$

$$\rho \frac{\delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} u_{\alpha} u_{\beta} \Phi_4 + \left(\delta_{\alpha\beta} u^2 + 2u_{\alpha} u_{\beta} \right) \frac{\rho}{2c_s^4} \Psi_4 - \frac{\rho}{2c_s^4} u^2 c_s^4 \delta_{\alpha\beta} =$$

$$\frac{\rho}{c_s^4} u_{\alpha} u_{\beta} \Psi_4 + \delta_{\alpha\beta} u^2 \frac{\rho}{2c_s^4} \left(\Psi_4 - c_s^4 \right) + \rho \frac{\delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} u_{\alpha} u_{\beta} \Phi_4$$
(5.7)

Az itt szereplő összeg első tagja lesz felelős a konvektív tag kialakításáért, így $\Psi_4 = c_s^4$ választással kell élnünk. Ahhoz, hogy sebességfüggetlen nyomást kapjunk, a második tagnak el kell tűnnie, így ebben az esetben is a $\Psi_4 = c_s^4$ feltételhez jutunk. Hogy a kapott egyenletünk Galilei invariáns legyen, az utolsó tagnak szintén el kell tűnnie, így $\Phi_4 = 0$ -t kell választanunk.

Vagyis, hogy az impulzus-áramsűrűség tenzor megfelelő alakú legyen, a következő feltételeket kell kielégíteni:

$$\Psi_4 = c_s^4 , \quad \Phi_4 = 0. \tag{5.8}$$

Felhasználva ezeket a paramétereket, az egyensúlyi feszültségtenzor a következő alakban írható fel:

$$\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} = \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta.$$
(5.9)

Nézzük most a nem-egyensúlyi feszültségtenzort, (3.36)-t.

Felhasználva a (3.23)-ban szereplő elsőrendű egyenletet, és behelyettesítve a (3.36)-be a következőt kapjuk:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\tau \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} \left(\partial_{t_0} + c_{i\theta} \partial_{\theta} \right) f_i^{(0)} =$$

$$= -\tau \partial_{t_0} \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} - \tau \partial_{\theta} \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\theta} f_i^{(0)} = -\tau \partial_{t_0} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} - \tau \partial_{\theta} \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\theta} f_i^{(0)}.$$
(5.10)

Behelyettesítve az egyensúlyi eloszlást (3.94)-t, és felhasználva a (3.8) és (3.9) rácstulajdonságokat:

$$\sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\theta} f_i^{(0)} = \left(\rho c_s^2 u_\gamma\right) \left(\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\theta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\theta} + \delta_{\alpha\theta} \delta_{\beta\gamma}\right).$$
(5.11)

A nem-egyensúlyi feszültségtenzor tovább egyszerűsíthető:

$$\partial_{\theta} \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\theta} f_{i}^{(0)} = c_{s}^{2} \partial_{\theta} \rho u_{\gamma} \left(\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\theta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\theta} + \delta_{\alpha\theta} \delta_{\beta\gamma} \right) =$$

$$= c_{s}^{2} \partial_{\theta} \rho \left(u_{\gamma} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\theta} + u_{\gamma} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\theta} + u_{\gamma} \delta_{\alpha\theta} \delta_{\beta\gamma} \right) =$$

$$= c_{s}^{2} \left(\delta_{\alpha\beta} \partial_{\gamma} \rho u_{\gamma} + \partial_{\beta} \rho u_{\alpha} + \partial_{\alpha} \rho u_{\beta} \right).$$
(5.12)

Felhasználva a (3.27) folytonossági egyenletet és az egyensúlyi feszültségtenzor (3.37) végső alakját kapjuk a

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\tau \left[\partial_{t_0} \left(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta \right) + c_s^2 \left(\delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma \rho u_\gamma + \partial_\beta \rho u_\alpha + \partial_\alpha \rho u_\beta \right) \right] =$$

$$= -\tau \left[c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \partial_{t_0} \rho + \partial_{t_0} \rho u_\alpha u_\beta + c_s^2 \left(\delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma \rho u_\gamma + \partial_\beta \rho u_\alpha + \partial_\alpha \rho u_\beta \right) \right] =$$

$$= -\tau \left[\partial_{t_0} \rho u_\alpha u_\beta - c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma \rho u_\gamma + c_s^2 \left(\delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma \rho u_\gamma + \partial_\beta \rho u_\alpha + \partial_\alpha \rho u_\beta \right) \right].$$
(5.13)

összefüggést. Az első tag egyszerűsíthető felhasználva az elsőrendben kapott Euler egyenleteket (3.40)-t és (3.27)-t:

$$\partial_{t_0}\rho u_{\alpha}u_{\beta} = u_{\beta}\partial_{t_0}\rho u_{\alpha} + \rho u_{\alpha}\partial_{t_0}u_{\beta} =$$

$$= u_{\beta}\left(-\partial_{\alpha}\rho c_s^2 - \partial_{\gamma}\rho u_{\alpha}u_{\gamma}\right) + u_{\alpha}\partial_{t_0}\rho u_{\beta} - u_{\alpha}u_{\beta}\partial_{t_0}\rho =$$

$$= -u_{\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\alpha}u_{\gamma} - u_{\beta}\partial_{\alpha}\rho c_s^2 + u_{\alpha}u_{\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\gamma} - u_{\alpha}\left[\partial_{\gamma}\rho u_{\gamma}u_{\beta} + \partial_{\beta}\rho c_s^2\right] =$$

$$= -u_{\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\alpha}u_{\gamma} - u_{\beta}\partial_{\alpha}\rho c_s^2 - u_{\alpha}\partial_{\beta}\rho c_s^2 + u_{\alpha}u_{\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\gamma} - u_{\alpha}u_{\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\gamma} - \rho u_{\alpha}u_{\gamma}\partial_{\gamma}u_{\beta} =$$

$$- u_{\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\alpha}u_{\gamma} - u_{\beta}\partial_{\alpha}\rho c_s^2 - u_{\alpha}\partial_{\beta}\rho c_s^2 - \rho u_{\alpha}u_{\gamma}\partial_{\gamma}u_{\beta}.$$

$$(5.14)$$

Felhasználva ezt az összefüggést a nem-egyensúlyi feszültségtenzor a következő alakban írható fel

$$\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} = -\tau \left[\begin{array}{c} -u_{\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\alpha}u_{\gamma} - u_{\beta}\partial_{\alpha}\rho c_{s}^{2} - u_{\alpha}\partial_{\beta}\rho c_{s}^{2} - \rho u_{\alpha}u_{\gamma}\partial_{\gamma}u_{\beta} - \\ c_{s}^{2}\delta_{\alpha\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\gamma} + c_{s}^{2}\left(\delta_{\alpha\beta}\partial_{\gamma}\rho u_{\gamma} + \partial_{\beta}\rho u_{\alpha} + \partial_{\alpha}\rho u_{\beta}\right) \end{array} \right].$$
(5.15)

Elhanyagolva azokat a tagokat, ahol a sebesség harmadrendű, kapjuk a végső alakot

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\tau \left[c_s^2 \partial_\alpha \rho u_\beta + c_s^2 \partial_\beta \rho u_\alpha - u_\beta \partial_\alpha \rho c_s^2 - u_\alpha \partial_\beta \rho c_s^2 \right] + O(u^3) =$$

$$= -\tau \left[\begin{array}{c} c_s^2 \rho \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha \right) + c_s^2 u_\beta \partial_\alpha \rho + c_s^2 u_\alpha \partial_\beta \rho - \\ u_\beta c_s^2 \partial_\alpha \rho - u_\alpha c_s^2 \partial_\beta \rho \end{array} \right] + O(u^3)$$

$$= -\tau c_s^2 \rho \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha \right) + O(u^3).$$
(5.16)

Irodalomjegyzék

- Házi G., Mayer G., Farkas I., Makovi P., El-Kafas A. A., Simulation of a Small Loss of Coolant Accident by Using RETINA V1.0D Code, Annals of Nuclear Energy, Annals of Nuclear Energy, 28, 1583-1594 (2001)
- [2] Farkas I., Házi G., Mayer G., Keresztúri A., Hegyi Gy., Panka I., First experience with a six-loop nodalization of a VVER-440 using a new coupled neutronic-thermohydraulics system KIKO3D-RETINA V1.1D, Annals of Nuclear Energy, 29, 2235-2242, (2002)
- [3] Ishii M., Hibiki T., Thermo-fluid Dynamics of Two-Phase Flow, Springer Science Business Media Inc., (2006)
- [4] Drew D.A., Passman S.L., Theory of multicomponent fluids, Springer-Verlag, New York, (1999)
- [5] Todreas N.E., Kazimi M.S., Nuclear systems I. Thermal Hydraulic Fundamentals, Hemisphere publishing corporation, (1990)
- [6] Dittus F.W., Boelter L.M.K., Heat transfer in automobile radiators of the tubular type, University of California, Publications in Engineering, Október, (1930)
- [7] Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N., Transport Phenomena, John Wiley and Sons, (2007)
- [8] Blasius P.R.H., Das aehnlichkeitsgesetz bei reibungsvorgangen in flüssigkeiten, Forschungsheft, 131, 1-41, (1913)
- [9] Thom J.R.S., Prediction of pressure drop during forced circulation boiling of water, International Journal of Heat and Mass Transfer, 7, 709-724, (1964)
- [10] Griffith P., Pearson J.F., Lepkowski R.J., Critical heat flux during a loss-of-coolant accident, Nuclear Safety, 18, 298-305, (1977)
- [11] Zuber N., Findlay J.A., Average volumetric concentration in two-phase flow systems, Journal of Heat Transfer, 87, 453-468, (1965)
- [12] Anderson D.A., Tannehill J.C., Pletcher R.H., Computational fluid mechanics and heat transfer, Hemisphere Publishing Corporation, (1984)

- [13] Rózsa P., Lineáris algebra es alkalmazásai, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, (1976)
- [14] Házi G., Farkas I., Mayer G., Numerikus és szeparált effektus tesztek, OMFB zárójelentés, ALK-00093/98, (2000)
- [15] Szabados L., Ezsol Gy., Perneczky L., Toth I., Results of the experiments performed in the PMK-2 facility for VVER safety studies, Akademia Kiado, Budapest, (2007)
- [16] Bürger Gné., Házi G., Péles J., Végh E., Szimulátor rekonstrukció, PA ZRt. 4500126907, AEMI-310/2007, SIMRET-10, (2007)
- [17] Nagy Gy., Czekmeister S., Házi G., Jánosy J.S., Páles J., Szimulátor elfogadási tesztek, PA Zrt., (2009)
- [18] Zuber N., Scaling: From quanta to nuclear reactors, Nuclear Engineering and Design, 240, 1986-1996, (2010)
- [19] Házi G., Imre A., Mayer G., Farkas I., Lattice-Boltzmann Methods for Two-Phase Flow Modeling, Annals of Nuclear Energy, 29, 1421-1453, (2002)
- [20] Moin P., Mahesh K., Direct numerical simulation: A tool in turbulence research, Annual Review Fluid Mechanics, 30, 539-578, (1998)
- [21] Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A., Diffuse-interface methods in fluid mechanics, Annual Review in Fluid Mechanics, 30, 139-165, (1998)
- [22] Bestion D., Anglart H., Caraghiaur D., Peturaud P., Smith B. Andreani M. Niceno B., Krepper E., Lucas D., Moretti F., Galassi M. C., Macek J., Vyskocil L., Koncar B., Hazi G., Review of Available Data for Validation of NURESIM Two-Phase CFD Software Applied to CHF Investigations, Science and Technology of Nuclear Installations, Article ID=214512, (2009)
- [23] Hardy J., Pazzis O., Pomeau Y., Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions, Physical Review A, 13, 1949-1961, (1976)
- [24] Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y., Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation, Physical Review Letters, 56, 1505-1508, (1986)
- [25] McNamara G.R., Zanetti G., Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, Physical Review Letters, 61, 2332-2335, (1988)
- [26] Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M., A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems, Physical Review, 94, 511-525, (1954)
- [27] Noble D., Chen S., Georgiadis J., Buckius R., A consistent hydrodynamic boundary condition for the lattice Boltzmann method, Physics of Fluids 7, 203-209 (1995)

- [28] Zou Q., Hou S., Doolen G., Analytical solutions of the lattice Boltzmann BGK model, Journal of Statistical Physics 81, 319-334, (1995).
- [29] Házi G., Accuracy of the lattice Boltzmann method based on analytical solutions, Physical Review E, 67, 056705 (2003)
- [30] Házi G, Farkas I, The Jeffery-Hamel problem: A numerical lattice Boltzmann study, International Journal of Modern Physics B, 17, 139, (2003)
- [31] Házi G., Steady-state analytical solutions for the lattice Boltzmann equation, Central European Journal of Phycics, 2, 453-462, (2003)
- [32] Házi G., Bias in the numerical simulation of isotropic turbulence using the lattice Boltzmann method, Physical Review E, 71, 036705, (2005)
- [33] He X., Luo. L., Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier- Stokes equation, Journal of Statistical Physics, 88, 927-944, (1997)
- [34] A.S. Monin, A.M. Yaglom, Statistical Fluid Dynamics, Vol. 2, The MIT Press, Cambridge, (1975)
- [35] Házi G., Kávrán P., On the cubic velocity deviations in lattice Boltzmann methods, Journal of Physics A-Math. Gen., 39, 3127-3136, (2006)
- [36] Qian Y.H., Zhou Y., Complete Galilean-invariant lattice BGK models for the Navier-Stokes equation, Europhysics Letters, 42, 359-364, (1998)
- [37] Weimar J.R., Boon J.P., Nonlinear reactions advected by a flow, Physica A, 224, 207-215, (1996)
- [38] Chen Y., Ohashi H., Akiyama M., Thermal lattice Bhatnagar-Gross-Krook model without nonlinear deviations in macrodynamic equations, Physical Review E, 50, 2776-2783, (1994)
- [39] Lu Z., Liao Y., Qian D., McLaughlin J.B., Derksen J.J., Kontomaris K., Large eddy simulation of a stirred tank using the lattice Boltzmann method on a nonuniform grid, Journal of Computational Physics, 181, 675, (2002)
- [40] Házi G., Jiménez C., Simulation of two-dimensional decaying turbulence using the "incompressible" extensions of the lattice Boltzmann method, Computers and Fluids, 35, 280-303, (2006)
- [41] Házi G., Tóth G., Lattice Boltzmann simulation of two-dimensional wall bounded turbulent flow, International Journal of Modern Physics C, 21, 669-680, (2010)
- [42] Clercx H.J.H., Nielsen A.H., Vortex statistics for turbulence in a Container with rigid boundaries, Physical Review Letters, 85, 752-755, (2000)

- [43] Sanson Z.L., Sheinbaum J., Elementary properties of the enstrophy and strain fields in confined two-dimensional flows, European Journal of Mechanics - B/Fluids, 27, 54-61, (2008)
- [44] Beckers M., Clercx H.J.H., van Heijst G.J.F., Verzicco R., Dipole formation by two interacting shielded monopoles in a stratified fluid, Physics of Fluids, 14, 704, (2002)
- [45] Holmes P.J., Lumley J.L., Berkooz G., Mattingly J.C., Wittenberg R.W., Lowdimensional models of coherent structures in turbulence, Physics Reports, 287, 337-384, (1997)
- [46] Tóth G., Házi G., Merging of shielded Gaussian vortices and formation of a tripole at low Reynolds numbers, Physics of Fluids, 22, 053101, (2010)
- [47] Carnevale G.F., Kloosterziel R.C., Emergence and evolution of triangular vortices, Journal of Fluid Mechanics, 259, 305-331, (1994)
- [48] van Heijst G.J.F., Kloosterzeil R.C., Tripolar vortices in a rotating fluid, Nature, 338, 369, (1989)
- [49] Pingree R.D., Le Cann B., Three anticyclonic slope water ocean eddies (SWODDIES) in the southern Bay of Biscay in 1990, Deep-Sea Res., 39, 1147, (1992)
- [50] Házi G., Tóth G., Lattice BGK simulation of multipolar vortex formation, Advances in Applied Mathematics and Mechanics, 2, 533-544, (2010)
- [51] Mayer G., Házi G., Direct numerical and large-eddy simulation of longitudinal flow along triangular array of rods using the lattice Boltzmann method, Mathematics and Computers in Simulation, 72, 173-178, (2006)
- [52] Mayer G, Páles J., Házi G, Large eddy simulation of subchannels using the lattice Boltzmann method, Annals of Nuclear Energy 34, 140-149, (2007)
- [53] Házi G., On the Turbulence Models for Rod Bundle Flow Computations, Annals of Nuclear Energy, 32, 755, (2005)
- [54] Trupp A.C., Azad R.S., The structure of turbulent flow in triangular array rod bundles, Nuclear Engineering and Design, 32, 47-84, (1975)
- [55] Shan X., Chen H., Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, Physical Review E, 47, 1815-1819, (1993)
- [56] Vehkamaki H., Classical nucleation theory in multicomponent systems, Springer-Verlag, Berlin, (2006)
- [57] He X., Doolen G.D., Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice Boltzmann models for multiphase flows, Journal of Statistical Physics, 107, 309-328, (2002)

- [58] Házi G, Márkus A, Lattice Boltzmann simulation of boiling in subchannels, In: 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. Egyesült államok 2007.09.30.-2007.10.04., (2007)
- [59] Landau L.D., Lifsic E.M., Elméleti fizika VI., Hidrodinamika, Tankönyvkiadó, Budapest, (1980)
- [60] Stanley H.E., Introduction to phase transitions and critical phenomena, International Series of Monographs on Physics, Oxford University Press, Oxford, (1971)
- [61] Shan X., Chen H., Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation, Physical Review E, 49, 2941-2948, (1994)
- [62] Sbragaglia M., Benzi R., Biferale L., Succi S., Sugiyama K., Toschi F., Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential, Physical Review E, 75, 026702, (2007)
- [63] Martys N.S., Chen H., Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method, Physical Review E, 53, 743-750, (1996)
- [64] Clift R., Grace J.R., Weber M.E., Bubbles, drops and particles, Dover publications, (1978)
- [65] Márkus A., Házi G., Determination of the pseudopotential gradient in multiphase lattice Boltzmann model, Physics of Fluids, 20, 022101, (2008)
- [66] Sankaranarayanan K., Shan X., Kevrekidis I.G. and Sundaresan S., Analysis of drag and virtual mass forces in bubbly suspensions using an implicit formulation of the lattice Boltzmann method, Journal of Fluid Mechanics, 452, 61-96, (2002)
- [67] Richardson J.F., Zaki W.N., Sedimentation and fluidisation, Transactions in Institutional Chemical Engineering In, 32, 35-54, (1954)
- [68] Cai X., Wallis G.B., The added mass coefficient for rows and arrays of spheres oscillating along the axes of tubes, 5, 1614-1630, (1993)
- [69] Házi G., Márkus A., On the Bubble Departure Diameter and Release Frequency Based on Numerical Simulation Results, International Journal of Heat and Mass Transfer, 52, 1472-1480, (2009)
- [70] Dhir V.K., Mechanistic prediction of nucleate boiling heat transfer Achievable or a hopeless task?, Journal of Heat Transfer, 128, 1-12, (2006)
- [71] Kandlikar S.G., Steinke M.E., Contact angles and interface behaviour during rapid evaporation of liquid on a heated surface, International Journal of Heat and Mass Transfer, 45, 3771-3780, (2002)

- [72] Buyevich Y.A., Werbon B.W., Dynamics of vapour bubbles in nucleate boiling, International Journal of Heat and Mass Transfer, 39, 2409-2426, (1996)
- [73] Haider S.I., Webb R.L., A transient micro-convection model of nucleate pool boiling, International Journal of Heat and Mass Transfer, 40, 3675-3688, (1997)
- [74] Yang C., Wu Y., Yuan X., Ma C., Study on bubble dynamics for pool nucleate boiling, International Journal of Heat and Mass Transfer, 43, 203-208, (2000)
- [75] Zhou Q., He X., On pressure and velocity boundary condition for the lattice Boltzmann BGK model, Physics of Fluids, 9, 1591-1598, (1997)
- [76] Zuber N., Hydrodynamic aspects of boiling heat transfer, PhD thesis, Research Laboratory, Los Angeles and Ramo-Wooldridge Corporation, University of California, Los Angeles
- [77] Helden W.G.J., Geld C.W.M., Boot P.G.M., Forces on bubbles growing and detaching in flow along a vertical wall, International Journal of Heat and Mass Transfer, 38, 2075, (1995)
- [78] Hazi G., Farkas I., On the Pressure Dependency of Physical Parameters in Case of Heat Transfer Problems of Supercritical Water, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 131, 012904 (2009)
- [79] Zhong F., Meyer H., Density equilibration near the liquid-vapor critical point of a pure fluid: Single phase T>Tc, Physical Review E, 51, 3223-3241, (1993)
- [80] Zappoli B., Response of a nearly super critical pure fluid to a thermal disturbance, Physics of Fluids, 4, 1040, (1992)
- [81] Zappoli B., Bailly D., Garrabos Y., Le Neindre B., Guenoun P., Beysens D., Anomalous heat transport by the piston effect in supercritical fluids under zero gravity, Physical Review A, 41, 2264-2267, (1990)
- [82] Kogan A.B., Meyer H., Onset of convection in a very compressible fluid: The transient toward steady state, Physical Review E, 63, 056310, (2001)
- [83] Straub J., Eicher L., Haupt A., Dynamic temperature propagation in a pure fluid near its critical point observed under microgavity during the German Spacelab Mission D-2, Physical Review E, 51, 5556-5563, (1995)
- [84] Házi G., Márkus A., Modeling heat transfer in supercritical fluid using the lattice Boltzmann method, Physical Review E, 77, 026305, (2008)
- [85] Házi G., Márkus A., Simulation of the Piston effect by the lattice Boltzmann method, The European Physical Journal, 171, 229-236, (2009)