

MTA doktori értekezés tézisei

Folyékony kontinuumokban kialakuló turbulens
struktúrák numerikus vizsgálata

Numerical Investigation of Turbulent Structures
in Fluids

Dr. Janiga Gábor

2019. május

1. Előzmények

A mérnöki gyakorlatban előforduló problémák esetén számos esetben meghatározó a folyékony kontinuumok – folyadékok vagy gázok – mozgása. E problémák az energetikától kezdve a járműiparon át az eljárástechnikáig rendkívül széles körben jelentkeznek. Ezekben az esetekben fellépő folyékony kontinuumok mozgásánál az egyszerűbb lamináris áramlás csak ritkán figyelhető meg, ugyanis a mérnöki feladatokban sokkal inkább jellemző a folyadék részecskéinek ingadozó és kaotikus, más néven turbulens mozgása.

Számos eljárástechnikai, kémiai, élelmiszeripari vagy gyógyszeripari folyamatban döntő jelentőséggel bír a megfelelő komponensek hatékony keveredése. Ennek egyik gyakori eszköze a keverők alkalmazása, melyek hidrodinamikai jellemzői döntően befolyásolják az előállított termékek minőségét. Ezért a keveredés során létre jövő turbulens áramlási struktúrák részletes vizsgálata kulcsfontosságú.

Az égési folyamatok hasznosítását az emberiség egyik legősibb eljárásai közé soroljuk. Az energiaátalakítás túlnyomó része még napjainkban is a fosszilis energiahordozók elégetéséből fakad. A háztartási és ipari égési-rendszerek elterjedése mind inkább előtérbe hozta e rendszerek problémáit is. A fosszilis energiahordozók tartalékainak a csökkenése, a szennyezőanyagok és az atmoszférában felhalmozódó CO₂ megköveteli a tüzelőanyagok hatékony és kíméletes felhasználását, melynek előfeltétele az égési folyamatok pontos megértése és ismerete.

2. Az értekezés célkitűzése

A kifejlesztés alatt álló új, illetve a meglévő mérnöki rendszerek hatékonyabbá tételéhez elengedhetetlen a folyékony kontinuumok turbulens mozgásának alapos vizsgálata és megismerése. A

számítástechnika rohamos fejlődésének köszönhetően kézenfekvő a számítógépes szimulációk alkalmazása. A folyadékmozgást leíró mozgásegyenletek időátlagolásával nyert ún. RANS (Reynolds averaged Navier-Stokes) modellek széles körben használatosak, de az elmúlt évtizedekben ezen RANS modellek fejlesztése messze nem tartott lépést a számítástechnika által diktált ugrásszerű fejlődési folyamattal. Bár a RANS modellek bizonyos esetekben kielégítő eredményekre vezetnek, eddig egyikük sem bizonyult univerzálisnak. A jelen dolgozat három alkalmazási példát is felvonultat, ahol ezek a modellek nem alkalmasak a folyadékmozgás kellően pontos leírására. Ezért a RANS eljárástól eltérő, más jellegű és lényegesen részletesebb modelleket alkalmaztam, melyek még napjaink számítógépein is kihívást jelentenek.

A keverőkben lejátszódó turbulens folyadékmozgások – melyek számos kémiai és eljárás technikai folyamat fontos alappillérei – döntően befolyásolják a keveredés hatékonyságát. E turbulens áramlások numerikus vizsgálatára a szokásos turbulencia-modellek pontossága nem kielégítő, ezért ehelyett a nagy örvények szimulációjával (NÖSZ, angolul: large eddy simulation, LES) nyert számítási eredmények kerülnek széles körben alkalmazásra. Ezért ez utóbbi eljárással megvizsgáltam a keverő lapátjairól leváló turbulens struktúrákat, melyek részben követik a lapátok mozgásának frekvenciáját. Másrészt kimutattam az ennél jellemzően kisebb frekvenciák jelenlétét is, melyeket makroinstabilitásnak (MI) nevezünk. [9]

Az értekezésben áttekintem az égéssel csatolt turbulens áramlási folyamatok véges differenciák diszkretizációjával nyert megoldásának lehetőségét. Ismertetem e fizikai és kémiai folyamatok leírásához szükséges alapegyenleteket, azok diszkretizációjának lépéseit, melyek eredményeként a numerikus módszer alapját képező lineáris algebrai egyenletrendszerek adódnak. Ennek segítségével a háromdimenziós

turbulens lángok vizsgálatára a ma ismert legrészletesebb és legpontosabb eljárást – az ún. direkt numerikus szimulációt (DNS) – alkalmaztam. A módszer számítási volumene olyan nagy, hogy már szuperszámítógépek alkalmazását igényli. [1], [5], [6], [7], [12]

Valamennyi bemutatott számítás nagy előnye, hogy azokat egy adott feladat megoldása során – a paraméterek változtatásával – akár több változatban is kivitelezhetjük. Ezáltal lehetőség nyílik a probléma megoldásának az optimalizálására, ami különösen előnyös lehet a fejlesztési munkálatok költséghatékony bonyolítása, illetve a már meglévő rendszerek működési feltételeinek a javítása során.

3. A feladat megoldásának a módszere

Az első alkalmazási példában egy hirtelen keresztmetszet-változással rendelkező fúvókában kialakuló folyadékmozgást vizsgáltam. Ezt a mérésekkel is jól dokumentált esetet 28 tudományos műhelyben vizsgálták egy nemzetközi szimulációs feladatként meghirdetett versenyben¹. A mérésekkel való összehasonlítás meglepetésszerűen pontatlan eredményekre vezetett². Ez nem véletlen, hiszen az egyszerű geometria ellenére, a folyadékmozgás rendkívül összetett: helyenként lamináris, másutt turbulens, ezért egyes helyeken átmeneti – tranziens – is. Ez a klasszikus RANS modelleket ugyancsak próbára teszi. Ezzel szemben az általam kivitelezett nagy örvények szimulációja egy nagyfelbontású strukturált véges térfogatós hálózaton alkalmasnak bizonyult arra, hogy nagyon jó egyezést érjek el a mérési eredményekkel

¹ Hariharan, P., et al.: Multilaboratory particle image velocimetry analysis of the FDA benchmark nozzle model to support validation of computational fluid dynamics simulations. *Journal of Biomechanical Engineering* 133, 041002/1–14 (2011)

² Stewart, S.F.C., et al.: Assessment of CFD performance in simulations of an idealized medical device: Results of FDA's first computational interlaboratory study. *Cardiovascular Engineering and Technology* 3(2), 139–160 (2012)

való összevetésben [8].

Az ortogonális dekompozíció (proper orthogonal decomposition, POD) során a folyadéksebességek autokorrelációjából nyert rendszer sajátértékeit határozzuk meg [2], [3]. A sajátértékek segítségével a kizárólag helytől függő – emellett egy ortonormált rendszert alkotó – úgynevezett módusok, illetve a rendszer időegyütthatói határozhatók meg. A módusok és az időegyütthatók lineáris kombinációjával leírható a vizsgált sebességtér. A sajátértékek megadják azt is, hogy az adott módusok milyen súlyozással vesznek részt a vizsgált áramlásban. A legdominánsabb módusok segítségével az úgynevezett koherens struktúrák definiálhatók. Amíg az első – legdominánsabb – módus az időbeli átlagot adja vissza, addig a következő az áramlás másodlagos – szekunder – struktúráját hivatott reprezentálni.

A sajátértékek együtthatóinak az eloszlásából bevezethető a spektrális entrópia fogalma [2]. Egy időben állandó áramlás esetén a teljes kinetikus energia kizárólag csak egy móduson koncentrálódik, ezért a spektrális entrópia értéke minimális, vagyis zérus értékű. Maximális akkor lenne, ha a kinetikus energia valamennyi móduson egyformán oszlana el.

Szemben az áramlási sebességek időbeli változásából számított kinetikus energia-spektrummal, melynek a segítségével csak teljesen kifejlődött turbulencia jellemezhető [8], a spektrális entrópia ezen felül előnyösen alkalmazható lamináris vagy a lamináris-turbulens átmeneti áramlások karakterizálására is [4].

Egy keverő geometriájában az időben változó folyadékmozgásra vonatkozó számításokat a nagy örvények szimulációjával végeztem. A számítási hálózatot kizárólag strukturált blokkokba rendezett hexaéder-elemek alkották. A vizsgált propeller lapátjait figyelembe véve egy ilyen hálózat előállítása különösen összetett. [9]

A makroinstabilitások vizsgálatát a számítási térrész több mint egymillió pontjában végeztem el az időben változó folyadéksebességek Fourier transzformációjának a segítségével. Ezt a vizsgálatot kiegészítve egy ortogonális dekompozíció (POD) alkalmazásával a teljes háromdimenziós tartományra meghatároztam az áramlás úgynevezett koherens struktúráit. [9]

Az égéssel kísért turbulens áramlási problémák mélyreható vizsgálata részletes kémiai és transzport modellekre épített numerikus szimulációt igényel. Az általunk kifejlesztett és az értekezésben bemutatott diszkretizációs eljárás keretében a folyamatot leíró transzportegyenletek numerikus megoldását párhuzamos számítógépek egyidejű használata teszi lehetővé [1]. Ez esetben nincs szükség egyszerűsítő kémiai modellek használatára, mint például kereskedelmi programok használata esetén, ahol legfeljebb csak a főbb kémiai komponensek meghatározására kerül sor.

A párhuzamos számítás csaknem ideális skálázhatóságát 4096 számítógépes mag egyidejű felhasználása bizonyította az Európai Unió 7-es keretprogramjában meghirdetett DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications) égisze alatt használt IBM BlueGene/P rendszeren. Ez a „numerikus kísérletnek” is nevezhető eljárás elvezet a csatolt áramlási és égési folyamatok jobb megértéséhez.

A direkt numerikus szimuláció (DNS) hatalmas számítási igényét napjaink szuper-számítógépei is csak egyszerű tartományokra és kis Reynolds-számok mellett tudják kielégíteni. Mivel a DNS nem turbulencia-modellre épül, ezért rendkívül fontos szerepet játszik olyan alap kutatásokban, ahol a turbulens lángok struktúrájának részletes tanulmányozása a cél.

Az egyszerűbb modellek megalkotását illetve azok finomítását a DNS

számításokból nyert rendkívül nagy mennyiségű számítási eredmény alapos feldolgozása segítheti, mely csak kifinomult és célirányosan fejlesztett kiértékelő eljárásokkal lehetséges [13].

4. Új tudományos eredmények

- I. Bevezettem az ortogonális dekompozícióval (angolul: proper orthogonal decomposition, POD) definiált *spektrális entrópia* fogalmát, ami előnyösen használható a lamináris, átmeneti és turbulens áramlások kategorizálására.
A dimenziótlan spektrális entrópiát a POD analízisből nyert sajátértékek segítségével definiáltam, melynek értéke zérus egy időben állandó – stacionér – áramlás esetén, ettől eltérő esetben pedig pozitív. A korábbi szisztematikus vizsgálataink eredményeképpen megállapítottam, hogy a teljesen kifejlődött turbulencia a 0,7–1,1 tartománynál nagyobb spektrális entrópiával jellemezhető [2].
- II. A nagy örvények szimulációján (NÖSZ, angolul: large eddy simulation, LES) alapuló új *eljárást* fejlesztettem ki hirtelen (nem folytonosan) változó keresztmetszetű csőáramlás számítására, mely számítási eljárás először mutatott rendkívül jó egyezést a mérési eredményekkel. A különféle turbulencia-modellekkel számított és publikált eredmények a vizsgált geometriában ugyanis nem bizonyultak kellően alkalmasnak lamináris, átmeneti és turbulens áramlások egyidejű meghatározására. [8] (3. fejezet)
- III. Bizonyítottam, hogy a spektrális entrópia jól követi a különböző áramlási régiók – lamináris, átmeneti és turbulens – változását. Igazoltam, hogy ez a jellemző mennyiség előnyösen alkalmazható az ún. hibrid-számításokra [4], ahol finom térbeli felbontásra csak a spektrális entrópiával meghatározott turbulens tartományokban kerül

- sor; ezzel jelentősen csökkentve a számítási igényeket. (3. fejezet)
- IV. Keverőkre vonatkozóan elsőként végeztem el a teljes háromdimenziós térben a turbulens áramlási sebességek POD vizsgálatát, melynek segítségével az ún. koherens áramlási struktúrák (pl. a szekunder struktúrák) is meghatározhatók. [9] (4. fejezet)
- V. A POD analízis együttthatóinak a Fourier-analízisével megvizsgáltam a keverőkben kialakuló ún. makroinstabilitásokat (MI). Az így nyert frekvenciák lényegesen kisebbek, mint a keverő lapátjai által létrehozott frekvenciák (a vizsgált keverő esetében 1/8 ill. 1/5 része az utóbbinak). Mivel a makroinstabilitásokat döntően befolyásolja a keveredés minőségét, és így a bemutatott módszerek alkalmasak lehetnek a keverők optimalizálására. [9] (4. fejezet)
- VI. A kémiai reakciókkal kísért turbulens áramlási folyamatokat az irodalomból ismert direkt numerikus szimuláció (DNS) alkalmazásával vizsgáltam. E vizsgálatokhoz az összenyomható közegre érvényes Navier-Stokes egyenleteket részletes kémiai modellekkel, valamint többkomponensű transzportmodellekkel egészítettem ki. Az értekezésben bemutatott nagy pontosságú véges differenciákra épülő *diszkrétizációs eljárás* a deriváltakat hatod rendben pontos centrális sémákkal kezeli, melyek a határok mentén negyed rendben pontos sémákra redukálódnak. Az időbeli deriváltakat explicit módon egy negyed rendben pontos Runge-Kutta módszer írja le. [1], [5], [6], [7]
- VII. A direkt numerikus szimulációt a számítási tartomány háromdimenziós felbontása után párhuzamosan kapcsolt számítógépeken és az MPI kommunikációs könyvtár segítségével valósítottam meg. A metán égését 16 komponenssel és 50 elemi reakció-egyenlet segítségével modelleztem, melynek során az áramlást leíró alapegyenleteken kívül még további 16 transzportegyenlet

megoldása vált szükségessé. A bemutatott számítási eredményekben alkalmazott Reynolds-számok meghaladják a legtöbb napjainkban ismert DNS-sel számított turbulens égési feladat megoldásában szereplő értékeket. [5], [6], [7] (5. fejezet)

VIII. Részt vettem egy DNS-en alapuló program kifejlesztésében, mely alkalmas turbulens áramlások kémiai reakciókkal való együttes kezelésére. Igazoltam, hogy az így nyert nagy pontosságú számítások lehetővé teszik az áramlástan paraméterek és a kémiai folyamatok közötti összefüggések alaposabb megértését. A Reynolds-szám szisztematikus változtatásával megvizsgáltam a turbulencia lángra gyakorolt hatását. A vizsgálat során megfigyelhető volt, hogy a turbulencia intenzitásának a növekedésével a láng egyre gyakrabban alszik ki. [5], [6], [7] (5. fejezet)

5. Az eredmények hasznosítása, lehetőségek a továbbfejlesztésre

Az értekezésben ismertetett POD analízis [3] hasznos eszköz lehet a folyékony kontinuumok turbulens mozgásának részletes elemzésére. Ennek segítségével kinyerhetők a turbulens mozgás koherens struktúrái. Ezek tovább segíthetik a turbulencia összetett problémájának alaposabb megértését, végeredményként a turbulens áramlások pontosabb modellezését. A POD analízis ezen felül előnyösen alkalmazható instacionárius áramlások kvantitatív összevetésére [10], de hasznos eszköz lehet az időben változó áramlások újszerű vizualizációjában is [11].

A POD analízisből származtatott spektrális entrópia alkalmasnak mutatkozott az áramlás különböző tartományainak a meghatározására is [2]. Ez elősegítheti az ún. hibrid-szimulációk kivitelezését [4], ahol a számítási hálózat kizárólag a turbulens tartományokban részletes,

egyébként csak mérsékelten finom. Ezzel nagy mértékben csökkenthető a számítás mennyisége.

A csatolt áramlási és égési folyamatok vizsgálatára vonatkozó, s az értekezésben részletesen ismertetett numerikus eljárások alkalmazhatók gázégőkben kialakuló turbulens áramlások sebességeloszlásainak és termodinamikai jellemzőinek meghatározására. [1], [5], [6], [7], [12]

Az itt bemutatott numerikus eljárások nemcsak az energetikai gépekben és berendezésekben lejátszódó fizikai folyamatok vizsgálatában bírnak nagy jelentőséggel, hanem ezek tervezésében és fejlesztési munkálataiban is. Továbbá egy numerikus eljárás mindig hasznos segédeszköz a gépészeti és energetikai berendezésekben lejátszódó fizikai folyamatok elemzésében.

Az értekezésben bemutatott numerikus szimulációs eljárások egyrészt hasznos eszközei lehetnek a már meglévő ipari berendezések hatékonysága növelésének, másrészt segítséget nyújthatnak az új berendezések megtervezésében és azok korszerű kialakításában.

6. Az értekezés témájában megjelent tudományos közlemények

[1] Abdelsamie, A., Fru, G., Oster, T., Dietzsch, F., **Janiga, G.** and Thévenin, D., *Towards Direct Numerical Simulations of low-Mach number turbulent reacting and two-phase flows using Immersed Boundaries*. Comput. Fluids 131, (2016) 123–141.

[2] Abdelsamie, A., **Janiga, G.** and Thévenin, D., *Spectral entropy as a flow state indicator*. Int. J. Heat Fluid Flow 68, (2017) 102–113.

[3] Arányi, P., **Janiga, G.**, Zähringer, K. and Thévenin, D., *Analysis of different POD methods for PIV-measurements in complex unsteady flows*. Int. J. Heat Fluid Flow 43, (2013) 204–211.

[4] Daróczy, L., Abdelsamie, A., **Janiga, G.** and Thévenin, D.: *State detection and hybrid simulation of biomedical flows*. In: 10th International

Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Chicago, IL, 280/1–6, 2017.

[5] Fru, G., **Janiga, G.** and Thévenin, D., *Impact of volume viscosity on the structure of turbulent premixed flames in the thin reaction zone regime*. Flow Turbul. Combust. 88, (2012) 451–478.

[6] Fru, G., **Janiga, G.** and Thévenin, D., *Direct Numerical Simulations of the impact of high turbulence intensities and volume viscosity on premixed methane flames*. J. Combust., (2011) 746719/1–12.

[7] Fru, G., Thévenin, D. and **Janiga, G.**, *Impact of turbulence intensity and equivalence ratio on the burning rate of premixed methane-air flames*. Energies 4(6), (2011) 878–893.

[8] **Janiga, G.**, *Large-eddy simulation of the FDA benchmark nozzle for a Reynolds number of 6500*. Comput. Biol. Med. 47, (2014) 113–119.

[9] **Janiga, G.**, *Large-eddy simulation and 3D proper orthogonal decomposition of the hydrodynamics in a stirred tank*. Chem. Eng. Sci. 201, (2019) 132–144.

[10] **Janiga, G.**, *Quantitative assessment of 4D hemodynamics in cerebral aneurysms using proper orthogonal decomposition*. J. Biomech. 82, (2019) 80–86.

[11] **Janiga, G.**, *Novel feature-based visualization of the unsteady blood flow in intracranial aneurysms with the help of proper orthogonal decomposition (POD)*. Comput. Med. Imaging Graph. 73, (2019) 30–38.

[12] Thévenin, D., Hilbert, R., Shalaby, H., and **Janiga, G.**, *Initial flame propagation in a turbulent flow*. In P.J. Coehlo, V. Semiao, and J.L. Toste de Azevedo, editors, *ECCOMAS Conference on Computational Combustion*, pages 25/1–20, Lisbon, Portugal, June 21-24, 2005.

[13] Zistl, C., Hilbert, R., **Janiga, G.** and Thévenin, D., *Increasing the efficiency of postprocessing for turbulent reacting flows*. Comput. Visual. Sci. 12, (2009) 383–395.