

LATTICE BOLTZMANN MÓDSZER ALKALMAZHATÓSÁGÁNAK VIZSGÁLATA GÁZTURBINÁS SUGÁRHAJTÓMŰ ÉGŐTERÉBEN LEJÁTSZÓDÓ PORLASZTÁSI FOLYAMATOK MODELLEZÉSÉRE

ÖSSZEFOGLALÁS

A tüzelőanyag befecskendezés és porlasztás többfázisú numerikus áramlástani szimulációja napjaink egyik kiemelt kutatási területét képezi az olyan belsőégésű gépekben lejátszódó folyamatok modellezésének, mint például a gázturbinás sugárhajtóművek égőterében kialakuló jelenségek. A fázishatár dinamikai viselkedése, a porlasztás és a párolgás fontos szerepet játszik az égési hatásfok alakulásában, azonban a folyamatok lefolyása teljes egészében nem ismert. Ezért, ennek a munkának az elsődleges célja az, hogy választ adjon a kinetikus gázelmélet alapú mikroszkopikus Lattice Boltzmann Method (LBM) módszer alkalmazhatóságára olyan összetett fizikai jelenségek vizsgálata esetén, mint például a folyadékoszlop és a folyadékfelület szétföredése a fűvóka környezetében. Az eljárás magába foglalja a komponensek sűrűségével és viszkozitásával leírt fázisok közötti határfelület-dinamikát, felületi feszültséget és olyan határozottsági egyenleteket, mint például a Van der Waals típusú valóságos állapot-egyenletek.

BEVEZETÉS

Napjainkban az ipari termelés, különösen a repülőipar, meghatározó jelentőségű gazdasági tényező. A gázturbinás sugárhajtóművek szerkezeti elemeiben lejátszódó áramlástani jelenségek modellezésével jobban megérthetővé válnak a költséges mérések és kísérletek segítségével reprodukálható folyamatok.

A gázturbinák égőtere olyan összetett gépészeti egységet képez, amelyben a termodinamikai és áramlástani folyamatok különféle csatolt kémiai és fizikai jelenségek kölcsönhatásaiként alakulnak ki. Az energiaforrásként használt folyékony tüzelőanyagot célszerűen apró cseppekre kell porlasztani, hogy minél nagyobb effektív felülettel rendelkezzenek a gyors elpárolgathatáshoz és az oxigénben gazdag környezettel való elkeveredéshez. A porlasztás dinamikájának és az égésnek a tanulmányozása kiemelten fontos a különböző üzemállapotbeli lángfront stabilitása és az oszcilláció-mentes, állandó tüzelőanyag-tömegáram biztosítása érdekében, amelyek nélkül szintén nehezen valósítható meg a biztonságos és hatékony energia-felszabadítás. Az égés során felszabaduló energia és a károsanyag-

kibocsátás nagyságára a legnagyobb befolyást a porlasztás minősége és a cseppek kezdeti mérete, illetve eloszlása gyakorolja. A tüzelőanyag részecskék mozgása és párolgása azonban leginkább a fűvókák tüzelőtérbeli elhelyezésétől, a geometriától és az alkotók kémiai és fizikai paramétereitől függ. A porlasztási folyamat analitikus és numerikus vizsgálata egyaránt jelent mélyebb betekintést és könnyebb megértést a kémiai folyamatok által létrehozott szennyezőanyagok keletkezésének és átalakulásának megértésében, amelyek az áramlástan és termodinamikai folyamatokkal együtt jelentős szerepet játszanak a zajképződésben, és jelentősen befolyásolják az égőtér és a turbinalapátok élettartamát. Fontos azonban megjegyezni azt, hogy a porlasztási folyamat modellezése – az összetettségéből adódóan – nagy kihívást jelent, és az olyan tényezők, mint például a folyadék-gáz komponensek aerodinamikai kölcsönhatásának, a fűvókában lejátszódó folyamatoknak (pl. forrás), a fűvócső geometriájának és az összetevők termo-fizikai tulajdonságainak figyelembevétele nélkül az eredmények pontossága bizonyos esetekben megkérdőjelezhető.

Napjainkban leginkább, a repülőgép gázturbinák égőtereiben alkalmazott porlasztó fűvóka kialakítások – az atomizálási folyamat alapján – a nagy sebességű levegővel való porlasztás elvét követik a nagy sebességű tüzelőanyag befecskendezés módszerével szemben. A módszer segítségével kisebb tüzelőanyag-tömegáram esetén jöhet létre a porlasztás, amelynek következtében kisebb teljesítményű és könnyebb tüzelőanyag szivattyú alkalmazható nagy nyomású befecskendezéssel ellentétben.

A térbeli elhelyezkedéstől függően, általában a két fő részre osztható a folyadék oszlop felaprózódásának folyamata. Az első a fűvókában lejátszódó jelenségek (pl. kavitáció), amelyek magában az injektor belsejében hoznak létre apró folyadékrészecskéket. A második esetben a folyadékoszlop széttöredezése a fűvókán kívül jön létre a nyomáshullámok és az aerodinamikai kölcsönhatások eredményeként. Figyelembe véve napjaink fejlesztési irányelveit – amely elsősorban a nagy sebességű levegővel való porlasztás elvét követi – a továbbiakban a fő hangsúlyt a komprimált levegő okozta dezintegrációra helyezzük. Az égőtérben lejátszódó folyamat a következő négy fő részre bontható: porlasztás (elsődleges és másodlagos), áramlás és keveredés (turbulens tovaterjedés, szétszóródás és moduláció), párolgás és turbulens égés. Az elsődleges porlasztási zónában, a hidrodinamikai instabilitás következtében a folyadékoszlop apró szalagok kötelékeire, folyadék elemek csoportjaira és cseppekre töredezik szét. Az atomizációnak ennek a korai szakasza két további két részre bontható, amelyek a folyadékoszlop felszínének, illetve a belső magjának az eróziója. A felületi erózió a folyadékoszlop felszínének fokozatos elaprózódását jelenti, amelynek során cseppek szakadnak ki a folyadék sugár felszínéből a nyírás és a depresszió miatt, miközben a folyadékoszlop magja nem vesz részt közvetlenül a folyamatokban. A folyadékoszlop magjának széttöredezése a hullámterjedés (lökéshullám, entrópiahullám és nyíróhullám) intenzitásának növekedése miatt jön létre, melynek eredményeként folyadék-nyalábok, illetve részecskecsoportok jönnek létre. A másodlagos porlasztási zónára jellemző olyan fizikai jelenségek, mint például a folyadék csoportok és cseppek további degradálódása, folyadék permet elemek interakciója (ütközések és összeolvadások) a tüzelőanyag permetben dús áramlási területeken alakulnak ki. A szegényebb porlasztási zónákban a kialakult optimális cseppméretek szoros kölcsönhatásba kerülnek a turbulens áramlással, amelynek során a

közöttük kialakuló tömeg, impulzus és energia áramlás az entrópia minimumra való törekvés irányába valósul meg. Ezáltal, az intenzív keveredésnek és párolgásnak köszönhetően, a keverék hőmérséklete az optimális eloszlású és sztöchiometrikus állapot esetén éri el a gyulladási hőmérsékletet.

Napjainkban, számos makroszkopikus (kontinuum mechanika elvű) közelítés létezik a porlasztási folyamatok modellezésére, amelyekben különféle méréseken alapuló tapasztalati összefüggéseket alkalmaznak. A porlasztási folyamat leggyakrabban aerodinamikai kölcsönhatások következtében kialakuló folyadék-gáz határfelületi – például Rayleigh-Taylor vagy Kelvin-Helmholtz – instabilitások miatt jön létre. A Rayleigh-Taylor instabilitás esetén a sűrűbb folyadék gyorsulása – a tehetetlensége miatt – ellentétes a rendszer gyorsulásával. A gyorsulás iránya merőleges a fázishatárra. A Kelvin-Helmholtz instabilitást a fázisok sebességkülönbsége miatt kialakuló viszkózus erők hozzák létre. 2 D-s súrlódásos összenyomhatatlannak feltételezett folyadék nem viszkózus szintén összenyomhatatlannak feltételezett közegen történő keresztáramoltatásának lineáris instabilitás vizsgálata alapján Reitz és Bracco [1] a következő főbb csoportokra osztott fel a porlasztási tartományokat: 1. Raylight zóna, 2. elsődleges légáramlat-indukált zóna 3. másodlagos légáramlat-indukált zóna 4. porlasztási zóna. Az egyes csoportok a Reynolds és Weber számok segítségével választhatók el egymástól. Az első két zónában a cseppek átmérője nagyobb vagy egyenlő, mint a fűvóka átmérője és a porlasztás a fűvóka kilépő keresztmetszetétől távolabb jön létre. A második két csoport esetén a cseppek mérete összemérhető a fűvóka kilépő keresztmetszetének méretével és a porlasztás a kilépő keresztmetszet közelében alakul ki.

Intenzív kutatások folynak a különféle instabilitási jelenségek jobb megértése érdekében [1-3]. A legelterjedtebben alkalmazott módszerek a mérések eredményeit használják fel tapasztalati összefüggések formájában. A porlasztási modellek két nagy csoportra oszthatók. Ezeket elsődleges és másodlagos porlasztási modelleknek nevezik. A legismertebb elsődleges porlasztási modellek a következők: Sheet Break-up (folyadék film porlasztás), Air Blast (levegő befúvatásos porlasztás), Blob Jet (folyadéksugár-széttöredezéses porlasztás) és BLS (Boundary-Layer Stripping) (határréteg leválasztásos porlasztás) modellek. A legelterjedtebb másodlagos porlasztási modellek a következők: Rayleigh-Taylor, TAB (Taylor Analogy Break-up) és ETAB (Enhanced Taylor Analogy Break-up) modellek [4]. A Sheet Break-up elsődleges porlasztási modell esetén az energia egyenlet speciális alakját alkalmazzák – empirikus állandókkal kiegészítve – a sebességeloszlás meghatározására [5,6]. Az eljárás elsősorban folyadékdali nyomásperdítő (centrifugális v. örvénykamrás) porlasztás modellezésére alkalmas. Az Air Blast elsődleges atomizációs modell – az előző eljáráshoz hasonlóan – a folyadéksugár és összenyomhatatlannak feltételezett gáz Kelvin-Helmholtz instabilitás vizsgálatán és aerodinamikai analízisen alapul. A különbség a folyadék film kezdeti sebességének és vastagságának meghatározásában van. A Blob Jet típusú befecskendezés Hinze feltételezésén alapszik (1948), amely szerint a folyadék film porlásának dinamikája leírható hullámjelenségek következtében kialakuló és egyenlő átmérőjű cseppekre való bomlások láncolatával. A BLS módszerben a folyadék film tömegcsökkenése az aerodinamikai nyírás következtében jön létre. A TAB típusú modellek alapjául O'Rourke and Amsden [7] módszere szolgál. Az eljárás, Taylor javaslatának köszönhetően, a gerjesztett rugós lengőrendszer és a cseppben kialakuló aszimmetrikus lengések hasonlóságán alapul.

Az előzőekben említett statisztikus közelítéseken túl, a Large Surface Structure (LSS) (nagy felületek szerkezete) módszer potenciális lehetőséget rejt a magasabb rendű eljárások közül a gyors és pontos számítások tekintetében. Az LSS modell a level set/vortex sheet módszeren alapul, amely Large Eddy Simulation (LES)-ben (nagy örvény szimuláció) jelent meg először [8]. Az LSS módszerben az elsődleges atomizációs folyamatok közelítése két részre van bontva. Azok a fázishatáron kialakuló dinamikai folyamatok, amelyek mértéke nagyobb, mint a lokális hálóméret, a level set közelítés alapján, közvetlenül, explicit módon kerülnek meghatározásra. A számítási tér azon részein azonban, ahol a fázishatár dinamika területi eloszlása kisebb, mint a hálóméret, egy megfelelően megválasztott subgrid scale (hálóméret alatti lépték) modell segítségével határozhatók meg a keresett paraméterek. Az LSS hálóméret alatti eljárása leválasztja a folyadék-kontinuumból leszakadt, illetve a hálóméret alatti cseppeket, és átadja a másodlagos atomizációs folyamat modellezésére szolgáló eljárásnak.

Az előbbi áttekintésben szereplő modellek sajátossága, hogy az alapegyenleteik (tömeg-, impulzus- és energia-megmaradás) a kontinuum mechanika segítségével írhatók fel. Ennek értelmében az elemi részecskék egyenletes eloszlással töltik ki áramlási teret, ami jelentősen lekorlátozza mérnöki szempontból elfogadható pontosságú számítást széles Knudsen szám tartományban. Napjainkban azonban, egyre inkább előtérbe kerülnek olyan a repüléstudományokkal is szoros kapcsolatban álló, jelentősen fejlődő diszciplínák, mint például a mechatronika vagy más néven MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems). Az említett technológiák alkalmazása például a szárnyakon, égőtérben vagy az utánégetőben az Euler és Navier-Stokes egyenletek alkalmazhatósági tartományán kívül esik. Ezért, komplexebb, olyan numerikus eljárás bevezetése szükséges az égőtérben lezajló folyamatok modellezésére, amely szélesebb Knudsen szám tartományban érvényes.

Bár a Lattice Boltzmann (LBM) [9, 10, 11] módszer szűk keresztmetszete a jelentős számítási kapacitás igény, azonban az informatikai technológia ugrásszerű fejlődésének köszönhetően az LBM módszer egyre inkább előtérbe kerül az olyan komplex mérnöki problémák megoldásában, mint például az elsődleges és másodlagos porlasztási folyamatok modellezése. A Lattice Boltzmann módszer a makroszkopikus dinamikának egy mikroszkopikus vagy részecske-szintű közelítésének tekinthető. Az eljárás Boltzmann transzport egyenletén alapul, amely a részecske eloszlásfüggvény időbeli változását írja le egy jellemző állapotban. A Boltzmann egyenlet azt fejezi ki, hogy a részecskék számának időbeli megváltozása egy adott tér, idő, anyag állapotban megegyezik az állapotba belépő és kilépő részecskék különbségével. A molekuláris dinamika alapú LBM módszer jobb közelítést jelent a kontinuum mechanika segítségével felírt makroszkopikus modellekkel szemben. A eljárás alkalmazásával jelentős eredmények érhetők el az alapvető fizikai kölcsönhatások megismerésében, összetett peremfeltételek megadásában, új diszkrétizációs technikák és párhuzamos számítások implementálásában.

BOLTZMANN EGYENLET

Jelöljük $f(r,v,t)$ -vel az infinitenzimálisan kicsi r helyvektorú térfogatban lévő azon részecskék számát, amik t időpillanatban v sebességgel mozognak. Legyen N darab részecskénk, amit r,v,t fázistérben

vizsgálunk. Ha nincs a részecskék között kölcsönhatás praktikusán ütközés, és ha az egyéb, pl. elektromágneses erőktől eltekintünk akkor Liuvile tétele alapján írható fel az (1) egyenlet.

$$\frac{df(r,v,t)}{dt} = \frac{\partial f(r,v,t)}{\partial t} + v \nabla f(r,v,t) = 0 \quad (1)$$

Az ütközések által reprezentált megzavarások, azaz az f időbeli változása az ütközések időegység alatt bekövetkezett számával lesz arányos (lásd (2))

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ütközések}} \quad (2)$$

Ha a külső erőket is figyelembe vesszük, akkor a (2) egyenlet a (3) alakot ölti.

$$\frac{\partial f(r,v,t)}{\partial t} + v \nabla f(r,v,t) + \frac{F}{m} \nabla_v f(r,v,t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ütközések}} \quad (3)$$

A jobb oldalon álló tagot az egyensúlyi helyzet közelében lehet közelíteni (4) (BGK approximáció).

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ütközések}} = - \frac{f - f^{eq}}{\tau} \quad (4)$$

Az f^{eq} az egyensúlyi helyzetben kialakuló eloszlás. A jobb oldalon álló tag azt fejezi ki, hogy a statisztikus egyensúly elérésének mechanizmusát ütközések képezik, amelyek csökkentőleg hatnak az eloszlásfüggvényeknek az egyensúlyi eloszlástól való eltérésére. Itt a τ relaxációs idő, ami alatt a gáz egyensúlyba jut. Gázokban az egyensúlyt Maxwell-Boltzmann egyenlet írja le:

$$f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = n(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m}{2kT} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) \quad (5)$$

Ahol n a gáz sűrűsége u pedig az átlagsebesség, ami valójában a makroszkopikus sebesség, továbbá:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad (6)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int \mathbf{v} \cdot f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad (7)$$

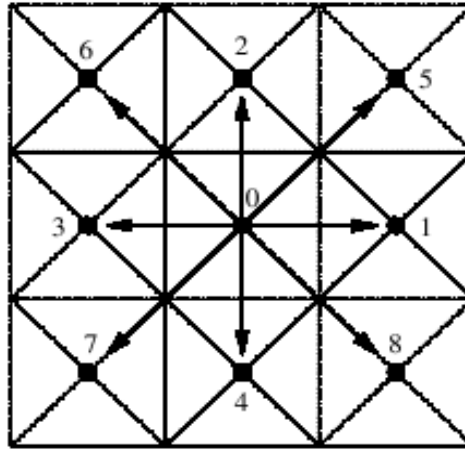
Ha feltesszük, hogy a rendszer nincs messze az egyensúlytól akkor a (3) egyenlet bal oldalának utolsó tagja, ami sebesség szerinti gradienst tartalmaz jól közelíthető a következő alakkal:

$$\nabla_v f(\mathbf{v}, t) \approx \nabla_v f^{eq}(\mathbf{v}, t) = \frac{-m}{kT} \mathbf{u} \cdot \nabla f^{eq}(\mathbf{v}, t) \quad (8)$$

Ebben az esetben a Boltzmann egyenlet a (9) alakot ölti.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} + \frac{F}{kT} \mathbf{u} \cdot \nabla f^{eq} \quad (9)$$

A térbeli diszkretizáció 2D esetben az 1 ábrán látható. Ez az úgynevezett



1. ábra. Térbeli diszkretizáció 2D-s esetben

D2Q9 rács ahol D2 a dimenziót a Q9 pedig a lehetséges sebesség irányokat jelöli. A lehetséges sebességeket konstansnak véve matematikailag a (10) kifejezés írja le a rácsot.

$$e_i = \begin{cases} 0 & i = 0 \\ \left[\cos \pi \frac{i-1}{2}, \sin \pi \frac{i-1}{2} \right] c & i = 1..4 \\ \left[\cos \left(\frac{\pi}{4} + \pi \frac{i-5}{2} \right), \sin \left(\frac{\pi}{4} + \pi \frac{i-5}{2} \right) \right] \sqrt{2} c & i = 5..8 \end{cases} \quad (10)$$

Ahol c a pszeudo hangsebesség. Ekkor a Maxwell-Boltzmann egyenletet a (11) közelítő alak határozza meg,

$$f^{eq_i} = \omega_i n \left[1 + \frac{e_i \cdot u}{\chi c^2} + \frac{e_i \cdot u^2}{2 \chi^2 c^4} - \frac{u \cdot u}{2 \chi c^2} \right] \quad (11)$$

ahol $\chi = 1/3$, $\omega(0) = 4/9$, $\omega_i(1..4) = 1/9$ és $\omega_i(5..8) = 1/36$.

Az időbeli diszkretizálást követően D2Q9 rácson tehát a Boltzmann egyenlet azaz a rács-Boltzmann modell a (12, 13a, 13b) formában írható fel.

$$f_i(\mathbf{x}, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\delta t}{\tau} \left[f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq} \right] - \delta t e_i \cdot \nabla f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta t}{kT} F(\mathbf{x}, t) - U(\mathbf{x}, t) f_i^{eq} \quad (12)$$

$$n = \sum f_i(\mathbf{x}, t) \quad \text{és} \quad u = \frac{1}{n} \sum e_i f_i \quad (13a, 13b)$$

A leírt modell a Navier-Stokes egyenletet másodrendben oldja meg úgy, hogy molekuláris erőket is figyelembe lehet venni az F tagon keresztül, ezzel utat nyitva a több komponensű és fázisú szimulációk előtt. Az f , F , τ , e változókat kevert folyadékok esetén természetesen komponensenként külön-külön kell felírni. A viszkozitást a (14) összefüggés csatolja a rács-Boltzmann egyenlethez.

$$\nu = c_s^2 - 0.5 c_s^2 \delta t \quad (14)$$

TÖBB KOMPONENSŰ ÁRAMLÁS MODELLEZÉSE

A több komponensű keveredő és nem keveredő folyadékok dinamikáját a molekuláris erőkhöz (adhéziós, kohéziós erők, felületi feszültség, stb.) keresztül lehet modellezni, amely a makroszkópikus sebességgel együtt kapcsolja össze a modellezni kívánt teret. A (12) és (13a) egyenletet folyadékonként célszerű felírni, míg a (13b) egyenlet a baricentrikus sebességgel helyettesítendő. Legyen $\sigma=1,2$ a komponensek jelölése. Ekkor, a baricentrikus sebesség a (15a) alakban írható fel,

$$u = \frac{\sum_{\sigma} m^{\sigma} n^{\sigma} u^{\sigma}}{\sum_{\sigma} m^{\sigma} n^{\sigma}} \quad (15a, 15b, 15c)$$

$$u^{\sigma} = \frac{1}{n^{\sigma}} \sum e_i f_{i^{\sigma}}$$

$$n^{\sigma} = \sum f_{i^{\sigma}}$$

amelyben m a molekula tömeg. A baricentrikus sebesség azt fejezi ki, hogy jelen esetben két különböző folyadék keveredik, ami mikroszkópikus mérettartományban azt jelenti, hogy két akár jelentősen eltérő sebesség skála van a molekuláris tömegkülönbségek miatt. Mivel a komponensek sebességei nem összeadhatóak ezért átlagolni sem lehet őket, viszont az impulzusokat már lehet összeadni és átlagolni. Tehát az impulzus átlagból már lehet közös sebesség átlagot számolni, és ezt fejezi ki a 15a egyenlet.

A legelterjedtebben használt molekuláris erő-modellek közül az úgynevezett Shan Chen [12, 13] modell került alkalmazásra (16), amelyben G a komponensek közötti molekuláris erőt szabályozó konstans.

$$F^\sigma = -G_{\bar{\sigma}\sigma} \nabla n^{\bar{\sigma}} \quad (16)$$

$$\bar{\sigma} = 1 - \sigma$$

RÁCS-BOLTZMANN EGYENLET MEGOLDÁSA

Mivel üzemanyag porlasztás szimulációról lévén szó a sűrűség különbség az áramló komponensek (üzemanyag-levegő) között jelentős, nagyságrendileg $\sim N \times 100 - 1000$ arányban változhat a nyomás és hőmérséklet viszonyoktól függően. Ezért, elengedhetetlen a (12) egyenlet megfelelően pontos és robusztus algoritmussal való megoldása. A feltételeket kielégítő Strang time splitting módszer lényege, hogy egy időlépést több részre bont, melyben nem magát a teljes (12)-es egyenletet, hanem abból generált részegyenleteket oldja meg. Ennek alapján, első lépésben a (12)-es egyenlet a $\delta t/2$ paraméterrel oldandó meg, a $\delta t e \nabla f$ tag elhagyása mellett. Ebben az esetben csak egy időfüggő differenciál-egyenletet (ODE (Ordinary Differential Equation)) kell megoldani. A következő lépésben a forrás tagokat, azaz a (9) egyenlet jobboldala (a (12) egyenlet jobb oldalának második és utolsó tagja) hanyagolható el. Ez egy Riemann problémára vezet. Végezetül az utolsó művelet az első lépés megismétlése. Ez az időben másodrendű megoldását eredményezi a (12) egyenletnek, amely egyenletekkel kifejezve a (17)-(19) formában írható fel.

$$\frac{df_i}{dt} + \sum_k \left(\frac{1}{2} \left(\frac{f_i + f_k}{2} \right) \left(\frac{f_i - f_k}{2} \right) \right) = 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial f_{i^{n+2/3}}}{\partial t} + e_i \nabla f_{i^{n+1/3}} = 0 \quad (18)$$

$$\frac{df_i}{dt} + \sum_k \left(\frac{1}{2} \left(\frac{f_i + f_k}{2} \right) \left(\frac{f_i - f_k}{2} \right) \right) = 0 \quad (19)$$

A (17) és (19) egyenlet implicit trapezoidal módszerrel oldható meg míg a (18) explicit TVD (Total Variation Diminishing) módszerrel. A megoldó választásokat az indokolja, hogy a molekuláris erők miatt egy úgynevezett „stiff” (merev) egyenletet kell a (17) és (19) kifejezésben megoldani, ezért célszerű az implicit módszerek közül választani. A folyadék komponens határoknál lévő nagy sűrűség különbség miatt a (18) egyenletet (Riemann) a TVD módszerrel célszerű megoldani [14, 15]. Ez a módszer nem engedi kialakulni a nagy gradienseknél általában létrejövő oszcillációkat ezáltal segítve a numerikus stabilitást. Másik fontos érv a választás során, hogy a rács-Boltzmann eljárás időben és térben is másodrendű megoldása az inkompresszibilis Navier-Stokes egyenletnek és ennek megfelelően az implicit trapezoidal módszer időben míg a TVD térben másodrendű megoldó.

IMPLICIT TRAPEZOIDÁL ELJÁRÁS

A jól ismert eljárás esetünkben ((16), (18) egyenlet) a (20) algoritmushoz vezet. A kifejezés egy

$$f_{i+1} = f_i - \frac{F_N(f_i)}{J_N(f_i)} \quad (20)$$

$i = 1 \dots N$ dimenziós nemlineáris egyenletrendszer. Ennek megoldására az úgynevezett diszkrét Newton módszer került alkalmazásra „line search” konvergencia gyorsító eljárással. A (20) egyenlet $F_N(f) = 0$ rendezését követően Newton Raphson iterációval oldható meg (21). Az egyenletben J az F_N

$$f^{n+1} = f^n - J^{-1} \cdot F_N(f^n) \quad (21)$$

kifejezés Jakobi mátrixa, amely jelen esetben egy nagyon bonyolult analitikus kifejezésre vezet, azaz igen költséges a kiszámítása időlépésenként kétszer. Ezért ezt a mennyiséget célszerű becsülni, ebben az esetben a Secant eljárás többdimenziós kiterjesztésével (22) [16].

$$J \approx \frac{F_N(f_i) - F_N(f_{i-1})}{f_i - f_{i-1}} \quad (22)$$

Ez a Jakobi mátrix másodrendű becslése az inverzét, pedig LU dekompozícióval kapjuk. A delta nagyságára több módszert is kidolgoztak [16], amelyek közül a (23) került alkalmazásra. A képletben

$$\delta = \sqrt{\epsilon_m + \|f\|_{\epsilon_m}} \quad (23)$$

az ϵ_m a számítógép numerikus pontossága. A (21) egyenletnél a konvergencia gyorsítására az úgynevezett „line search” eljárás került implementálásra. Ennek többféle változata van, azonban a jelen esetben az aranymetszés szabályát felhasználó eljárás került implementálásra [17]. Ez a (21) egyenlet módosításával kezdődik, amely a (24) összefüggésre vezet. Az egyenletben az α -nak a (25)-ös egyenlőtlenségnek kell kielégítenie. A megfelelő α megtalálása az aranymetszés szabályát

$$f^{n+1} = f^n - \alpha J^{-1} \cdot F_N(f^n) \quad (24)$$

$$\|F_N(f^n) - \alpha J^{-1} \cdot F_N(f^n)\| \leq \|F_N(f^n)\| \quad (25)$$

felhasználó iteratív kereséssel történik. Defináljunk egy intervallumot α lehetséges értékeinek, kezdetben: $\alpha_n \in [0, 1]$ és legyen $t = 0.618$. A következő iterációs lépésben szűkítsük α intervallumát a

következőképp. Legyen az új intervallum $[0, 1-t]$ ha $\| \mathbf{f}^n - \mathbf{f}^{n-1} \|$ különben $[t, 1]$ (L_2 normát alkalmaztunk).

TVD (TOTAL VARIATION DIMINISHING) MÓDSZER

A (16)-os egyenletet egydimenziós TVD módszerrel [14, 15] oldjuk meg $i = 1..N$ irányonként függetlenül. Ez a séma standard TVD-hez képest egy anti-numerikus diffúziós tagot is tartalmaz (26).

$$f_i^n = f_i^{n-1} + \Delta t \left(\frac{F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n}{\Delta x} - \frac{CFL}{2} \frac{F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n}{\Delta x} \right) \quad (26)$$

Az egyenletben F a numerikus fluxus és a $CFL = \Delta t / \Delta x$ a Courant szám, illetve a továbbiakban legyen $f_i = f_i^n$. Ekkor a

$$F_{i+1/2}^n = \frac{1}{2} (F_{i+1/2}^{n-1} + F_{i+1/2}^n) + \frac{1}{2} (F_{i+1/2}^n - F_{i+1/2}^{n-1}) \quad (27)$$

$$\Delta_{i+1/2} = f_{i+1} - f_i \quad (28)$$

$$g_i = M(g_{i-1/2}, \tilde{g}_{i+1/2}) \quad (29)$$

$$F_{i+1/2}^n = \frac{1}{2} (F_{i+1/2}^{n-1} + F_{i+1/2}^n) + \frac{1}{2} (F_{i+1/2}^n - F_{i+1/2}^{n-1}) \quad (30)$$

A (27-30) egyenletekben az M a minmod függvény (31).

$$M(a, b) = \begin{cases} a & \text{ha } |a| \leq |b| \\ b & \text{ha } |b| < |a| \end{cases} \quad (31)$$

illetve γ

$$\gamma_{i+1/2} = \begin{cases} (g_{i+1} - g_i) / \Delta_{i+1/2} & \Delta_{i+1/2} \neq 0 \\ 0 & \Delta_{i+1/2} = 0 \end{cases} \quad (32)$$

A Q függvény az entrópia megsértés megakadályozását végzi

$$Q(x) = \begin{cases} x^2 / (4\varepsilon) + \varepsilon & |x| < 2\varepsilon \\ |x| & |x| \geq 2\varepsilon \end{cases} \quad (33)$$

Itt az ε pozitív konstans 0.1 és 0.5 között jelen esetben 0.2. A (34) egyenletben szereplő L és v^{LM} tag a numerikus diffúzió korrekcióját végzi.

$$v_{i+1/2}^{LM} = \begin{cases} \frac{L_{i+1} - L_i}{\Delta_{i+1/2}} & \text{ha } \Delta_{i+1/2} \neq 0 \\ 0 & \text{ha } \Delta_{i+1/2} = 0 \end{cases} \quad (34)$$

$$L_i = S \cdot \max\left(0, M \left(\frac{L_{i-1/2} + L_{i+1/2}}{2} - S, M \left(\frac{L_{i-1/2} + \eta L_{i+1/2}}{2} - S \right) \right) \right) \quad (35)$$

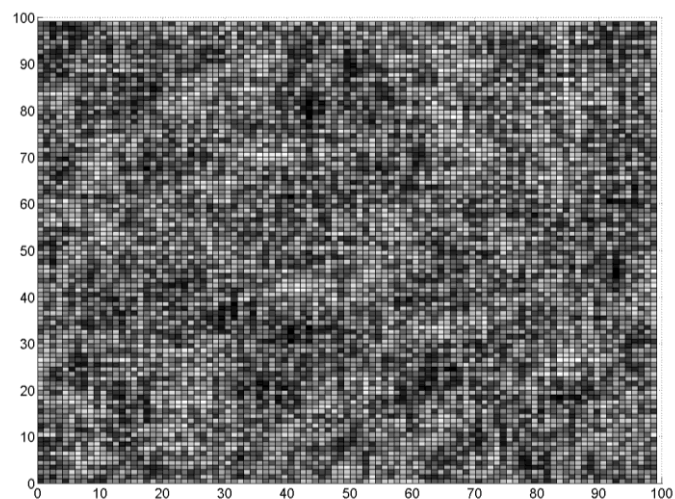
$$L_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left(\frac{L_{i+1} + L_i}{2} - CFL \cdot e^2 \left(\frac{L_{i+1} - L_i}{\Delta_{i+1/2}} - M \left(\frac{L_{i-1/2} + \Delta_{i+1/2}, \Delta_{i+3/2}}{2} \right) \right) \right) \quad (36)$$

$$\eta = 2 \frac{\left| \frac{\Delta_{i+1/2}}{\Delta_{i+1/2}} \right|^\beta - \left| \frac{\Delta_{i-1/2}}{\Delta_{i-1/2}} \right|^\beta}{\left| \frac{\Delta_{i+1/2}}{\Delta_{i+1/2}} \right|^\beta + \left| \frac{\Delta_{i-1/2}}{\Delta_{i-1/2}} \right|^\beta} \quad (37)$$

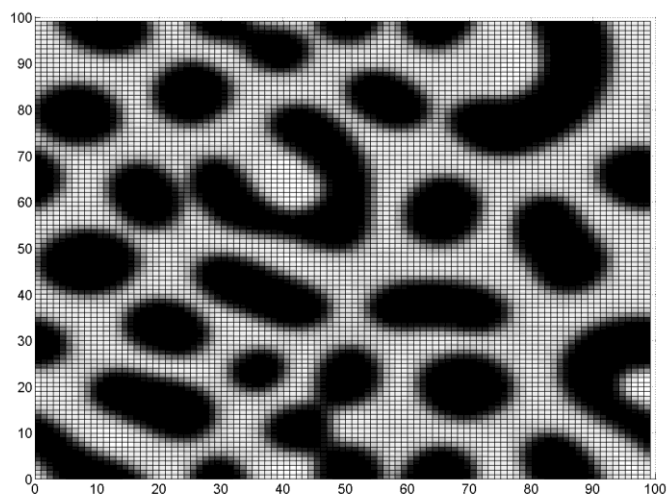
$$\beta = 2.5$$

VALIDÁCIÓ

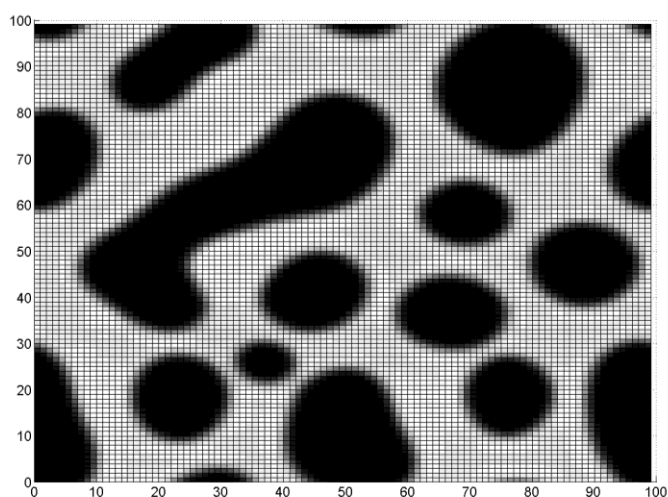
Az első és legegyszerűbb tesztelése az algoritmusnak, hogy a kezdetben kevert egymásban nem oldódó folyadékok szétváljanak. Az időben a folyadék komponensek egyre nagyobb cseppeké állnak össze a folyadékhatároknál élesen elkülönülve. Az ábrsorozat 2-4-ig ezt a folyamatot mutatja be.



2. ábra: $t = 10 \cdot \Delta t$ időlépésél a térbeli sűrűségeloszlás.



3. ábra $t = 2500 \cdot \Delta t$ időlépésnél a térbeli sűrűségeloszlás

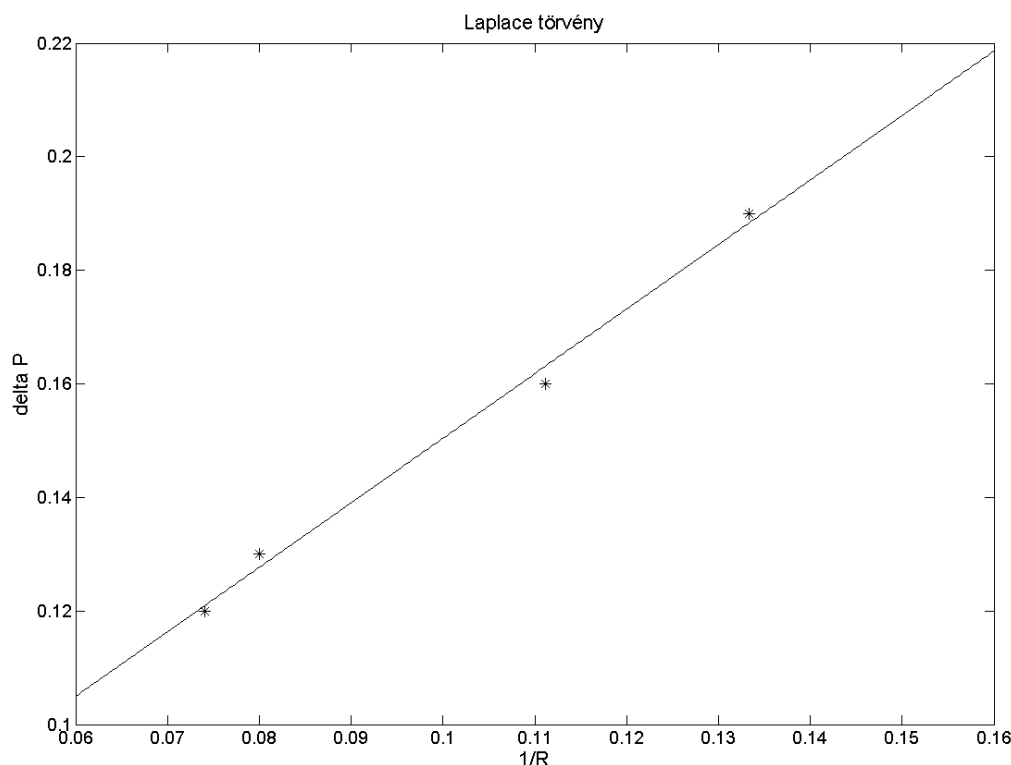


4. ábra $t = 5000 \cdot \Delta t$ időlépésnél a térbeli sűrűségeloszlás

A következő validáció kvalitatív ellenőrzés a Laplace törvény (38) igazolására.

$$\Delta P = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (38)$$

A ΔP a folyadék komponensekben mért nyomás különbsége, σ a felületi feszültség, valamint R_1 és R_2 a folyadékok határvonala által alkotott felület fő görbületi sugarai (gömb alakú csepp esetében a sugár). Jelen esetben az eredményeket az 5. ábra szemlélteti, amelyből jól látszik, hogy az analitikus és numerikus eredmények közötti eltérés – mérnöki szempontból – az elfogadható határérték alatt van.



5. ábra. A Laplace törvény igazolása (folytonos vonal: analitikus eredmény, csillag: numerikus eredmény)

IRODALOMJEGYZÉK

- [1] Reitz R D and Bracco F V. Mechanism of Atomization of a Liquid Jet. *Physics of Fluids*, Vol. 25, ch. 10, Oct., 1982.
- [2] Reitz R D and Diwakar R. Structure of High-Pressure Fuel Sprays, *SAE paper 870598*, 1987.
- [3] Reitz R D. Modeling Atomization Processes in High-Pressure vaporizing Sprays. *Atomization and Spray Technology*, Vol. 3, pp. 309-337, 1987.
- [4] Raju M. S. Numerical Investigation of Various Atomization Models in the Modeling of a Spray Flame. *NASA/CR—2005-214033, AIAA-2006-0176 Report*, 2006.
- [5] Schmidt D, Nouar I, Senecal P, Rutland C, Martin J, Reitz R. Pressure-Swirl Atomization in the Near Field., *SAE Technical Paper Series 1999-01-0496*.
- [6] Senecal P, Schmidt D, Nouar I, Rutland C, Reitz R, Corradini M. Modeling High-speed Viscous Liquid Sheet Atomization., *Int. J. of Multiphase Flow*, 25, pp. 1073-1097, 1999.
- [7] Peter J. O'Rourke and Anthony A. Amsden The Tab Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Break-up, *SAE paper 872089*, 1987.
- [8] Hermann M. Modeling primary break-up: A three-dimensional Eulerian level set/vortex sheet method for two-phase interface dynamics. Center for Turbulence Research Annual Research Briefs, 2003.
- [9] S. Chen and G. D. Doolen, Lattice Boltzmann method for fluid flows, *Ann. Rev. Fluid Mech.* 30, pp. 329-364, 1998.
- [10] L.-S. Luo, The lattice-gas and lattice Boltzmann methods: Past, Present, and Future, *Proceedings of the International Conference on Applied Computational Fluid Dynamics*, Beijing, China, pp. 52-83, 2000.
- [11] R.R. Nourgaliev, T.N. Dinh, T.G. Theofanous and D. Joseph: The lattice Boltzmann equation method: theoretical interpretation, numerics and implications, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 29, pp. 117-169. 2003
- [12] Shan, X. & Chen, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. Rev. E* 47, 1815-1819. 1993
- [13] Shan, X. & Chen, H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E* 49, 2941-2948. 1994
- [14] Shulong Teng, Yu Chen, Hirotada Ohashi, Lattice Boltzmann simulation of multiphase fluid flows through the total variation diminishing with artificial compression scheme. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 21 112-121, 2000
- [15] Artur Cristea, Victor Sofonea, Two component lattice Boltzmann model with flux limiters, *Central European Journal of Physics*, 382-396, 2004
- [16] D.A. Knoll, D.E. Keyes, Jacobian-free Newton-Krylov methods: a survey of approaches and applications, *Journal of Computational Physics* 193, 357-397, 2004
- [17] Gill, P.E., Murry W., Wright M.H., *Practical Optimization*. Academic Press, New York. 1981