

Pomimo ogromnego postępu w dziedzinie wykorzystania odnawialnych źródeł energii, paliwa kopalne pozostaną jeszcze przez wiele lat zasadniczym źródłem energii w gospodarstwach domowych, przemyśle i transporcie. Ze względu na konieczność ciągłego obniżania emisji gazów cieplarnianych, niezwykle istotne jest dogłębne poznanie procesów fizycznych i chemicznych wpływających na proces spalania. Znakomita większość procesów spalania w zastosowaniach technicznych to spalanie w warunkach przepływu turbulентnego. Turbulencja jest zjawiskiem bardzo złożonym wymagającym dalszych badań zarówno teoretycznych jak i eksperymentalnych. Najistotniejszym wyzwaniem dla metod eksperymentalnych oraz symulacji komputerowych jest wieloskalowość przepływów turbulентnych. Oznacza to, że w przepływie obecne są struktury przepływu o skalach dużych, określonych przez geometrię przepływu, oraz bardzo małe struktury wirowe, które poprzez lepkość rozpraszają energię przepływu w ciepło. Przeprowadzenie symulacji komputerowej takiego zjawiska wymaga zdefiniowania siatki punktów węzłowych, która pokryje cały kanał przepływowy, ale na tyle gęstej, aby kilka punktów węzłowych przypadało na najmniejsze struktury wirowe. W efekcie, wymagane siatki numeryczne muszą się składać z miliardów punktów węzłowych, co przekracza możliwości obliczeniowe obecnych superkomputerów. Koszty obliczeniowe znacznie rosną, gdy w przepływie turbulентnym zachodzą reakcje chemiczne np. spalanie. Po pierwsze, konieczne jest rozwiązanie dodatkowych równań opisujących transport składników chemicznych. Ponadto, skale czasowo-przestrzenne charakterystyczne dla reakcji chemicznych są najczęściej znacznie mniejsze niż skale najdrobniejszych struktur wirowych, co wymusza jeszcze większe zagęszczenie siatki. Problem matematycznego opisu przepływów turbulентnych, pozwalającego na uzyskanie rozwiązania przy ograniczonych mocach obliczeniowych, jest w centrum prac badawczych wielu ośrodków naukowych od ponad 50. lat. Dziedzina nauki zajmująca się tym zagadnieniem nazywana jest modelowaniem turbulencji. Interesującą cechą turbulencji jest to, że kinetyczna energia struktur gruboskalowych, zgodnie z hipotezą Kołmogorowa, przekazywana jest poprzez kaskadę coraz mniejszych struktur wirowych do struktur dyssypatywnych. Interakcja struktur o bardzo różnych skalach jest zatem ograniczona, a „pamięć” o anizotropowym charakterze struktur największych jest w tym kaskadowym procesie przekazywania energii stopniowa tracona. W efekcie, struktury najmniejsze mają charakter izotropowy, a ich rozmiar jest określony przez szybkość dyssypacji energii oraz lepkość płynu. Ponieważ struktury drobnoskalowe są izotropowe i niezależne od geometrii przepływu, to łatwiej jest dla nich sformułować model matematyczny niż dla anizotropowych struktur gruboskalowych. Metodą wykorzystującą tę cechę turbulencji, rozwijaną w ostatnich latach bardzo intensywnie, jest tzw. Symulacja Wielkich Wirów. Metoda ta polega na oddzieleniu struktur gruboskalowych i drobnoskalowych. Z matematycznego punktu widzenia separacja zjawisk gruboskalowych polega na zastosowaniu dolnopasmowego filtra do równań ruchu a informacje o ich dynamice uzyskuje się bezpośrednio z rozwiązania równań odfiltrowanych. Wymagana siatka punktów węzłowych nie musi być bardzo gęsta, ponieważ reprezentuje rozwiązanie o skalach stosunkowo dużych. Wpływ struktur drobnoskalowych, o skalach mniejszych niż odległość pomiędzy punktami węzłowymi, musi być w równaniach ruchu uwzględniony w postaci odpowiedniego modelu. Metoda Symulacji Wielkich Wirów jest wykorzystywana również dla przepływów turbulентnych z reakcjami chemicznymi. Jednak jej zastosowanie w odniesieniu do równań opisujących transport składników chemicznych nastęrcza szczególnych trudności. Wynika to z zależności szybkości reakcji chemicznych od temperatury oraz koncentracji składników chemicznych. Zależność ta jest dość skomplikowaną funkcją nieliniową. W efekcie, podstawienie do tej funkcji temperatury oraz koncentracji składników chemicznych reprezentujących jedynie gruboskalowe struktury przepływu prowadzi do wartości znacznie różniącej się od tej, którą otrzyma się poprzez filtrację członu źródłowego odpowiadającego szybkości reakcji w równaniu transportu składnika chemicznego. W ostatnich latach zaproponowano nowatorskie podejście do matematycznego modelowania przepływów turbulентnych z reakcjami chemicznymi. Nowa metoda polega na przybliżonej odwrotnej filtracji, która na podstawie struktur gruboskalowych pozwala na estymację pola przepływu o skalach znacznie mniejszych niż rozmiar siatki. Pole takie pozwala na wyznaczenie odfiltrowanej wartości członów źródłowych. W dotychczasowych pracach metoda ta została wykorzystana w połączeniu z metodami numerycznymi niskiego rzędu dokładności. W modelowaniu przepływów z reakcjami chemicznymi ważne jest wykorzystanie schematów numerycznych wyższych rzędów, umożliwiających uzyskanie rozwiązania przy możliwie najniższych nakładach obliczeniowych. Rozwój metody w ramach projektu polegał będzie na opracowaniu odwrotnych filtrów odpowiadających schematom numerycznym wyższego rzędu oraz uwzględnieniu wpływu nieliniowych oddziaływań struktur gruboskalowych na skale podsiatkowe. Model ten posłuży do analizy struktury turbulентnych płomieni kinetycznych i dyfuzyjnych, z lokalnym wygaszaniem, które są niezwykle trudne do zamodelowania. Oczekuje się, że zaproponowany model będzie znacznie bardziej efektywny obliczeniowo.