

# Załącznik 2

## Autoreferat

Dr Bogdan Rosa  
Instytut Meteorologii i Gospodarki Wodnej  
Państwowy Instytut Badawczy

Warszawa, 27.03.2017 r.

## AUTOREFERAT

### 1. Imię i Nazwisko

**Bogdan Rosa**

### 2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania – oraz tytuł rozprawy doktorskiej.

**Doktor nauk fizycznych w zakresie fizyki**, 2005 r., Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski, Instytut Geofizyki

Tytuł rozprawy doktorskiej: *Analiza turbulencji powstających za osłoną samolotowego ultraszybkiego termometru chmurowego*

Promotor rozprawy: prof. dr hab. Tomasz Jan Szoplik

**Magister w zakresie optyki fourierowskiej**, 2000 r., Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski, Instytut Geofizyki, Zakład Optyki Informacyjnej

Tytuł pracy magisterskiej: *Konstruowanie trójwymiarowego modelu zlewni rzeki Rega na podstawie ręcznie rysowanych map topograficznych*

Promotor pracy magisterskiej: prof. dr hab. Tomasz Jan Szoplik

### 3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

październik 2000 r. – czerwiec 2005 r.	Studia doktoranckie na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, specjalność geofizyka
wrzesień 2005 r. – grudzień 2005 r.	Stanowisko adiunkta na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, specjalność geofizyka
styczeń 2006 r. – grudzień 2008 r.	Stanowisko post-doc'a w Department of Mechanical Engineering, University of Delaware, USA
styczeń 2009 r. – grudzień 2009 r.	Stanowisko głównego specjalisty w Instytucie Meteorologii i Gospodarki Wodnej
styczeń 2010 r. do chwili obecnej	Stanowisko adiunkta w Instytucie Meteorologii i Gospodarki Wodnej – Państwowym Instytucie Badawczym

### 4. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.):

a) autor, rok wydania, tytuł publikacji, nazwa wydawnictwa

Osiągnięciem habilitacyjnym, określonym zgodnie z obowiązującą „Ustawą o stopniach naukowych art.16 ust. 2” jest dzieło opublikowane w całości w postaci monografii habilitacyjnej:

**Bogdan Rosa**, 2016, Dynamika cząstek inercyjnych w przepływach turbulentnych, IMGW-PIB, Seria Monografie IMGW, ISBN 978-83-64979-19-4, Warszawa.

**b) omówienie celu naukowego ww. pracy i osiągniętych wyników wraz z wynikającymi z nich wnioskami**

Przepływy turbulenty i towarzyszący im transport cząstek to zjawiska, które w środowisku naturalnym są powszechne i zachodzą nieustannie. Większość przepływów spotykanych w przyrodzie to właśnie przepływy turbulenty. Zjawisko transportu turbulentnego jest także podstawą wielu procesów technologicznych. Procesy te znajdują liczne zastosowania w różnych branżach przemysłu oraz dziedzinach pokrewnych, związanych z energetyką czy motoryzacją. Warto w tym kontekście wymienić takie zastosowania, jak: efektywne spalanie pyłu węglowego w kotłach energetycznych, transport pneumatyczny w rurociągach, efektywne spalanie mieszanki paliwowo-powietrznej w silnikach oraz rozpylanie nawozów i środków ochrony roślin.

Transport cząstek w przepływach turbulentnych jest istotny także w obszarze ochrony i inżynierii środowiska. Dotyczy to problemów związanych z dyspersją zanieczyszczeń w atmosferze, prognozowania katastrof środowiskowych (ocena stopnia zagrożenia na podstawie danych o maksymalnych stężeniach szkodliwych substancji w atmosferze lub zbiornikach wodnych), a także zagadnień przemieszczania się materii organicznej w oceanach oraz transportu zanieczyszczeń i osadów w zbiornikach wodnych. Dokładne poznanie mechanizmów oddziaływania cząstek z przepływami turbulentnymi jest ważne również w kontekście licznych zastosowań meteorologicznych. Można tu wymienić takie zadania, jak: modelowanie burz piaskowych, transport popiołów wulkanicznych czy też formowanie opadu z kropel chmurowych lub kryształków lodu. Zbadanie mechanizmów transportu i zderzania się cząstek może mieć również czysto poznawcze zastosowanie. Przykładem są tu zagadnienia z dziedziny astrofizyki dotyczące modelowania wzrostu cząstek w dyskach protoplanetarnych.

Dokładna analiza mechanizmów transportu turbulentnego jest ważnym zadaniem badawczym, ponieważ prowadzi do lepszej kontroli wyżej wymienionych procesów, pozwala na ich optymalizację, przyczynia się do projektowania nowych urządzeń oraz umożliwia opracowanie dokładniejszych prognoz pogody.

Badanie mechanizmów związanych z dynamiką cząstek w przepływach turbulentnych wiąże się z szeregiem poważnych trudności i ograniczeń. Głównymi problemami są tu: nieliniowość tych procesów, niejednorodność rozkładów cząstek oraz sprzężenia na różnych skalach długości i czasu. Ruch cząstek o niezerowej bezwładności w przepływach turbulentnych ma wpływ na zmianę ich ułożenia w przestrzeni (grupowanie cząstek), częstotliwość zderzeń oraz, jeśli cząstki znajdują się

w polu grawitacyjnym, to również na prędkość ich opadania. Dodatkowo turbulencja wpływa na oddziaływanie aerodynamiczne (hydrodynamiczne) pomiędzy poszczególnymi cząstkami, a także pomiędzy całymi skupiskami cząstek [1]. Duże praktyczne znaczenie tych procesów przyczyniło się do powstania bogatej literatury naukowej. Niemniej jednak pełny ilościowy opis tych mechanizmów jest w dalszym ciągu niewystarczający.

Badania eksperymentalne przepływów wielofazowych są zazwyczaj bardzo trudne, ponieważ przepływy te cechują się szerokim zakresem skal przestrzennych i czasowych. Ponadto aparatura pomiarowa ma swoje ograniczenia w zakresie precyzyjnego pomiaru położenia i prędkości cząsteczek w trójwymiarowej przestrzeni, w tym samym czasie. W przypadku badania procesów chmurowych dodatkową trudnością jest wykonywanie pomiarów bezpośrednio w chmurze. Pomiarzy teledetekcyjne za pomocą radarów nie pozwalają uzyskać pożądanej dokładności.

Rozwiązania ściśle, które można znaleźć w literaturze są poprawne tylko dla bardzo uproszczonych przypadków, jak np. trajektoria cząstek w dwuwymiarowym przepływie stacjonarnym [2] lub oddziaływanie cząstek z osiowo symetrycznymi wirami [3]. Uogólnienie tych wyidealizowanych rozwiązań analitycznych na przypadek trójwymiarowej, zależnej od czasu, homogenicznej i izotropowej turbulencji może prowadzić do błędnych wniosków.

W ostatnich latach jednym z ważniejszych narzędzi do badania przepływów wielofazowych stały się bezpośrednie symulacje numeryczne DNS (ang. *Direct Numerical Simulations*). W symulacjach DNS przepływ turbulentny modeluje się zazwyczaj w ujęciu Eulera poprzez rozwiązywanie nieściśliwych równań Naviera-Stokesa [4]. Modelowanie ruchu cząsteczek jest realizowane w podejściu lagranżowskim i polega na śledzeniu trajektorii indywidualnych cząstek. Turbulencję wymusza się specjalnym algorytmem numerycznym, który parametryzuje ruch płynu w dużych skalach. Transfer energii z dużych skal do małych jest rządzony przez równania Naviera-Stokesa i opisany teorią Kołmogorowa [4].

W mojej pracy skupiłem się głównie na badaniu procesów charakterystycznych dla mikrofizyki chmur. W ostatnich latach zainicjowano szereg prac badawczych ukierunkowanych na ilościową analizę roli turbulencji powietrza w procesie wzrostu kropelek chmurowych. Dokładne zbadanie tego mechanizmu jest ważne w kontekście pełnego zrozumienia procesu formowania się ciepłego deszczu. Jest to problem szczególnie istotny, ponieważ ciepłe deszcze stanowią około 31% łącznej sumy opadów i aż 72% opadów w obszarach tropikalnych [5]. Warto również podkreślić, że proces powstawania ciepłego deszczu (z powodu rzadkości występowania kryształków lodu) może zachodzić w każdej strefie klimatycznej i o każdej porze roku.

Jednym z ważniejszych mechanizmów, który decyduje o tempie formowania się ciepłego deszczu jest turbulencja atmosfery. Turbulencja wpływa na zwiększenie częstotliwości zderzeń kropelek chmurowych, co w konsekwencji prowadzi do częstszych przypadków koalescencji. Należy jednak zaznaczyć, że turbulencja jest tylko jednym z kilku mechanizmów, które decydują o szybkości formowania się opadu. W przypadku małych kropelek, o promieniu do 10  $\mu\text{m}$ , bardziej efektywnym od turbulencji jest mechanizm dyfuzyjnego wzrostu. Kropelki o małej bezwładności zachowują się podobnie, jak elementy płynu i wówczas rola turbulencji w procesie zderzeń jest dość ograniczona. Innym ważnym mechanizmem jest zderzanie się dużych kropelek chmurowych, które opadają w polu grawitacyjnym z różnymi

prędkościami granicznymi [6, 7]. Te duże krople mogą zbierać wszystkie małe kropelki znajdujące się na ich drodze. Mechanizm ten jest efektywny tylko dla kropeł o rozmiarach (promieniach) większych niż 60  $\mu\text{m}$ . Również i w tym przypadku rola turbulencji jest ograniczona, a wynika to bezpośrednio z dużej bezwładności tych kropeł. Ruch ciężkich kropeł jest uwarunkowany głównie przyspieszeniem grawitacyjnym, a nie turbulencją. Z uwagi na te procesy badania wpływu turbulencji na efektywność powstawania opadu koncentrują się głównie na kroplach o rozmiarach pośrednich, czyli o promieniach od 10 do 60  $\mu\text{m}$ .

Celem mojej pracy była ilościowa analiza statystyk zderzeniowych kropeł chmurowych o promieniach od 10 do 60  $\mu\text{m}$ , poruszających się w przepływach turbulentnych o ściśle zadanej charakterystyce. Do modelowania turbulencji i badania dynamiki kropeł posłużyłem się metodą bezpośrednich symulacji numerycznych DNS. W numerycznym modelowaniu tego typu procesów ważne jest zapewnienie zgodności parametrów statystycznych symulowanej turbulencji z tymi, które charakteryzują realistyczne przepływy. Jednym z takich parametrów jest liczba Reynoldsa oparta na mikroskali Taylora  $R_\lambda$  [8]. Liczba ta definiuje zakres skal długości reprezentowanych w przepływie. Największe skale turbulentne są ograniczone wielkością domeny, a najmniejsze – wielkością oczka siatki obliczeniowej. Domena jest reprezentacją obszaru obliczeniowego (ang. *domain*). W realistycznych warunkach, takich jak np. przepływy atmosferyczne, liczba Reynoldsa jest rzędu  $R_\lambda \sim 10^4$ . Osiągnięcie tak dużej separacji skal w DNS nie jest obecnie możliwe. Niemniej jednak dla szerokiej klasy problemów, jak na przykład zderzenia kropeł chmurowych i formowanie opadu, kluczowa jest dynamika przepływu w małych skalach. W związku z tym przybliżenie DNS jest do tego celu zupełnie wystarczające.

### Narzędzie badawcze

Moim narzędziem badawczym jest innowacyjny kod DNS, który rozwiązuje równania Naviera-Stokesa metodą pseudospektralną. Kod ten powstał we współpracy z naukowcami z uniwersytetu z Delaware. Jego główną zaletą jest duża dokładność obliczeniowa, wynikająca z użycia metody pseudospektralnej oraz to, że może być uruchamiany na maszynach wieloprocesorowych z modelem pamięci rozproszonej. Zastosowana w tym programie metoda zrównoleglenia opiera się na dwuwymiarowej dekompozycji domeny obliczeniowej. Komunikacja między wątkami jest realizowana za pomocą standardowych bibliotek programowania równoległego MPI (ang. *Message Passing Interface*). Takie podejście pozwala wykorzystać w obliczeniach większą liczbę procesorów, więcej pamięci RAM (ang. *random-access memory*), a dodatkowo zwiększyć efektywność wykorzystania pamięci procesora (ang. *cache*). W konsekwencji można uzyskać znacznie lepszą wydajność obliczeniową i modelować przepływy na siatkach o większej rozdzielczości (większej liczbie węzłów). Dzięki temu warunki symulacji są bardziej zbliżone do tych, jakie panują w typowych chmurach.

## Szczegółowe zadania i cele badawcze

1. Pierwszym celem moich prac było zbadanie, w jaki sposób struktura i statystyki przepływu turbulentnego zależą od rozdzielczości siatki obliczeniowej. Problem ten można sformułować również w odniesieniu do parametrów fizycznych, czyli, jak przy zadanej szybkości dyssypacji energii zmienia się charakter przepływu w zależności od wartości liczb Reynoldsa. Biorąc pod uwagę, że przepływ w dużych skalach może być uwarunkowany sposobem generowania turbulencji (schematu wymuszającego, ang. *turbulence forcing scheme*), symulacje DNS przeprowadziłem dla różnych schematów wymuszania.
2. Jednym z ważniejszych celów mojej pracy było obliczenie i analiza statystyk dwupunktowych odnoszących się do przestrzennego rozkładu kropel (radialna funkcja rozkładu, ang. *Radial Distribution Function – RDF*) i ich radialnej prędkości względnej (ang. *radial relative velocity – RRV*). Podałem analizie statystyki zarówno w ujęciu kinematycznym, jak i dynamicznym (dynamiczne jądro zderzeniowe). Celem tego zadania jest sprawdzenie czułości statystyk zderzeniowych na liczbę Reynoldsa, bezwładność cząstek i sposób wymuszania turbulencji.
3. Trzecim celem moich prac było zbadanie, w jakim zakresie parametrów (modelowanych cząstek) grawitacja zmienia dynamikę cząstek i statystyki kinematyczne oraz, czy grawitacja ma wpływ na częstotliwość zderzeń cząstek. Zbadanie tych problemów jest szczególnie istotne dla zawiesin monodispersyjnych, czyli takich, w których wszystkie cząstki mają tę samą bezwładność (i rozmiar) oraz ich prędkość graniczna (prędkość opadania w nieruchomym ośrodku) jest identyczna.
4. Czwarte zadanie dotyczy roli stałej czasowej losowego schematu wymuszania turbulencji. Wyjaśnienie wpływu tego parametru na strukturę, statystyki przepływu turbulentnego i dynamikę cząstek jest ważne w kontekście poprawnej interpretacji wyników symulacji DNS. Zazwyczaj wartość tej stałej czasowej dobiera się w taki sposób, aby była ona znacznie mniejsza niż charakterystyczny czas obrotu wirów (ang. *eddy turnover time*), ale większa od długości kroku czasowego użytego do całkowania równań Naviera-Stokesa. Takie podejście pozwala otrzymać pożądaną szybkość dyssypacji energii. W ogólności można przyjąć, że różne wartości stałej czasowej w odniesieniu do skal czasowych przepływu turbulentnego reprezentują różne mechanizmy dostarczania energii. Na przykład krótka stała czasowa odpowiada losowemu wprowadzaniu energii, a długie skale czasowe (rzędu całkowitej skali czasu) są charakterystyczne dla transferu energii z dużych skal, które nie są reprezentowane w symulacji. W tym sensie różne skale czasowe mają znaczący wpływ na charakterystykę przepływu. Do tej pory implikacje wynikające z użycia różnych skal czasowych nie były dokładnie zbadane.
5. Piąty cel prowadzonych przez mnie prac to analiza prędkości opadania małych cząstek o parametrach zbliżonych do kropel chmurowych w izotropowym i homogenicznym przepływie turbulentnym. Zbadałem rolę podstawowych mechanizmów, tj. preferencyjne unoszenie (ang. *preferential sweeping*), nieliniowość współczynnika oporu, błędzenie (ang. *loitering*) oraz wychwyty

cząstek przez wiry. Mechanizmy te mogą powodować wzrost lub redukcję średniej prędkości opadania cząstek. Symulacje DNS wykonałem dla szerokiego zakresu liczb Reynoldsa, tzn. aż do  $R_\lambda = 500$ . W symulacjach śledziłem ruch cząstek charakteryzujących się różnymi wartościami granicznej prędkości opadania (w odniesieniu do prędkości Kolmogorowa). Dodatkowo zbadałem zależność prędkości opadania cząstek od szybkości dysypacji energii oraz różnych sposobów wymuszania turbulencji.

6. Szóstym celem mojej pracy było przygotowanie modelu numerycznego pozwalającego na dokładną reprezentację oddziaływań aerodynamicznych pomiędzy kroplami/cząstkami w przepływie Stokesa. Opracowałem metodologię, która pozwala w sposób wydajny numerycznie i z włączeniem krótkozasięgowych oddziaływań, czyli tak zwanych sił smarowania (ang. *lubrication forces*), rozwiązać problem cząstek poruszających się względem siebie zarówno ruchem translacyjnym, jak i rotacyjnym.

## Omówienie wyników prac

### Zadanie 1

Przy użyciu kodu pseudospektralnego przeprowadziłem szereg symulacji DNS, mających na celu modelowanie turbulencji homogenicznej i izotropowej. Symulacje wykonałem dla różnych rozdzielczości przestrzennych, używając siatek o rozmiarach (liczbie węzłów) od  $32^3$  do aż  $1024^3$ . Do wymuszania turbulencji wykorzystałem dwa różne algorytmy wymuszające, tj. deterministyczny [9] i stochastyczny [10]. Podstawowe parametry symulacji i uśrednione po czasie statystyczne charakterystyki modelowanych przepływów zostały opublikowane w monografii habilitacyjnej. Z porównania statystyk wynika, że przy ustalonej rozdzielczości siatki obliczeniowej deterministyczny schemat wymuszania pozwala osiągnąć większą liczbę  $R_\lambda$  niż schemat stochastyczny. Największą liczbę Reynoldsa  $R_\lambda = 500$  uzyskałem w symulacji z użyciem schematu deterministycznego i siatki o liczbie węzłów  $1024^3$ .

W celu sprawdzenia, czy symulowane przepływy mają istotnie cechy trójwymiarowej, homogenicznej i izotropowej turbulencji obliczyłem jednowymiarowe widmo energii i porównałem je z wynikami pomiarowymi wykonanymi w tunelu aerodynamicznym. W eksperymentach turbulencja była generowana w strumieniu powietrza przepływającego przez kratę. Z porównania wynika, że dla zakresu bezwładnościowego i dysypacji widma energii z eksperymentu i symulacji są ze sobą ilościowo zgodne. Wykazałem również, że nie ma żadnych istotnych różnic w widmach przepływów modelowanych z wykorzystaniem różnych schematów wymuszania turbulencji.

### Zadanie 2

Przeanalizowałem konsekwencje stosowania różnych mechanizmów generowania turbulencji na statystyki dwupunktowe kropel, czyli radialną funkcję rozkładu oraz radialną prędkość względną. Motywacją do zbadania tego problemu były pewne różnice pojawiające się w wynikach wcześniejszych prac badawczych,

jak np. [11]. Wynikały one najprawdopodobniej ze stosowania różnych algorytmów wymuszania przepływu turbulentnego. Moje symulacje zostały wykonane przy użyciu dwóch różnych schematów wymuszania, ale zaimplementowanych w tym samym programie komputerowym. Pozwoliło to z dużą dokładnością oszacować czułość statystyk zderzeniowych kropeł na sposób generowania turbulencji. Powszechnie przyjmuje się, że względny ruch kropeł jest zdeterminowany głównie przez małe struktury wirowe. Takie uproszczenie jest do pewnego stopnia uzasadnione, ponieważ krople chmurowe mają małe rozmiary w stosunku do skal Kołmogorowa ( $a \ll \eta$ ), a zatem i małą bezwładność (liczba Stokesa jest rzędu  $St \sim 1$  lub mniejsza). Te małe struktury wirowe są dokładnie reprezentowane w symulacjach DNS. Jednakże w przypadku większych kropeł chmurowych, poruszających się w przepływach o małej liczbie Reynoldsa, takie uproszczenie przestaje być prawdziwe. Krople o większej bezwładności mogą oddziaływać również z wirami o większych skalach. Wykonane przeze mnie symulacje pokazały, że różne schematy wymuszania dają jakościowo bardzo podobne wyniki, ale są też pewne różnice. Otóż wartości funkcji RDF uzyskane przy zastosowaniu schematu deterministycznego są nieco większe od tych, jakie uzyskałem przy zastosowaniu schematu stochastycznego. Prowadzi to do kolejnych implikacji, a mianowicie jądro zderzeniowe jest do 20% większe dla największych kropeł ( $a = 60 \mu\text{m}$ ) rozważanych w symulacjach i do 15% dla tych o promieniu  $a = 50 \mu\text{m}$ . Należy jednak wziąć pod uwagę, że część tej różnicy wynika z większej liczby Reynoldsa dla przepływów wymuszanych schematem deterministycznym. Różnice są zaniedbywane dla kropeł o promieniach mniejszych niż  $a < 30 \mu\text{m}$ .

Drugi aspekt dotyczy czułości statystyk zderzeniowych na liczbę Reynoldsa, czyli na zakres skal przestrzennych reprezentowanych w DNS. W symulacjach wykonanych przy zastosowaniu siatek obliczeniowych o rozdzielczości  $1024^3$  zakres  $R_\lambda$  jest dostatecznie duży, aby móc zbadać tę zależność. Analiza wyników DNS pozwala sformułować wniosek, że rola  $R_\lambda$  jest w tym przypadku raczej drugorzędna. Oddziaływanie kropeł z dużymi wirami nasycy się dla pewnych granicznych wartości  $R_\lambda$ . Poprzez symulacje DNS i analizę teoretyczną wykazałem, że nasycenie to zachodzi przy mniejszych wartościach  $R_\lambda$  dla mniejszych kropeł. Wyniki moich symulacji i analiz opublikowałem w monografii habilitacyjnej.

### Zadanie 3

W zdecydowanej większości wcześniejszych prac badawczych odnoszących się do problemu zderzeń cząstek inercyjnych w przepływach turbulentnych nie uwzględniano grawitacyjnego opadania. Jednym z celów moich prac było zbadanie wpływu grawitacji na statystyki zderzeń. Wykonane symulacje i analiza teoretyczna dowiodły, że statystyki zderzeniowe nie są czułe na grawitację, gdy rozmiar kropeł nie przekracza pewnej krytycznej wartości (promień  $a < a_c$ ). Dla większych kropeł grawitacja zmienia czas oddziaływań kropla-wir, co prowadzi do znacznej redukcji RRV. Ten krytyczny rozmiar kropeł ( $a_c$ ) to około  $30 \mu\text{m}$  dla RRV oraz w przybliżeniu  $20 \mu\text{m}$  dla RDF. Dodatkowo  $a_c$  rośnie wraz z szybkością dyssypacji energii. Wpływ grawitacji na RDF jest raczej złożony, a mianowicie grawitacja zmniejsza RDF dla średnich rozmiarów kropeł i zwiększa dla dużych kropeł. Najprawdopodobniej jest to efekt dwóch różnych mechanizmów, czyli skracania (przez grawitację) czasu oddziaływań kropla-wir oraz grupowania się kropeł w klastry (indukowanego bezwładnością [8]).



Poddałem również szczegółowej analizie wykładniki skalujące funkcji RDF oraz RRV. Dla nieopadających kropeł wyniki z moich symulacji są w doskonałej zgodności z opublikowanymi wynikami pochodzącymi z innych niezależnie prowadzonych prac badawczych. Wykazałem, że grawitacja modyfikuje wykładnik skalujący funkcji RDF zarówno dla średnich, jak i dużych kropeł. Zmiany te są analogiczne do tych obserwowanych w zachowaniu funkcji RDF dla „niemal stykających” się kropeł. W symulacjach z grawitacyjnym osiadaniem obydwie wykładniki mają większe wartości niż w symulacjach bez grawitacji. Wykonanie tych symulacji i analiza teoretyczna stanowią ważny materiał do opracowania wiarygodnych parametryzacji procesów powstawania chmur i formowania opadów.

#### Zadanie 4

Przy użyciu bezpośrednich symulacji numerycznych (DNS) zbadałem wpływ skali czasowej wymuszania ( $t_f$ ) na charakterystyki przepływu turbulentnego. Symulacje numeryczne wykonałem, używając standardowego, losowego algorytmu wymuszającego, który opracowali Eswaran i Pope [10]. Główny nacisk położyłem na zbadanie związku pomiędzy skalą czasową wymuszania a strukturą wirów. Przeanalizowałem szereg statystyk, między innymi:  $R_\lambda$ , całkowitą skalę długości, współczynnik spłaszczenia i skośność. Zbadałem również efekt wpływu  $t_f$  na kinematyczne statystyki zderzeń cząstek inercyjnych. Uzyskane wyniki dają lepszy wgląd w strukturę izotropowej i homogenicznej turbulencji oraz poszerzają wiedzę dotyczącą stosowalności stochastycznego sposobu wymuszania przepływów.

Wykazałem także, że widma energii przepływów turbulentnych wymuszanych z różnymi skalami czasowymi są zgodne z danymi eksperymentalnymi, tj. z pomiarami wykonanymi w tunelu aerodynamicznym. Funkcje gęstości prawdopodobieństwa znormalizowanej wirowości obliczone dla przepływów wymuszanych z różnymi wartościami  $t_f$  są do siebie podobne. Niewielkie różnice można zaobserwować jedynie w ogonach rozkładów, tzn. dla skrajnie dużych wartości wirowości. Wyniki symulacji pozwalają sformułować wniosek, że te niewielkie różnice w kształcie widma wynikają z różnych wartości liczb Reynoldsa. Rozmiar struktur wirowych dla małych skal wymuszania rośnie wraz  $t_f$ . Szybkość dyssypacji energii w symulacjach DNS jest zgodna z analityczną formułą, którą zaproponowali Eswaran i Pope [10]. Wartość szybkości dyssypacji energii jest stała dla  $t_f$  mniejszych od skali czasowej Kołmogorowa oraz dla  $t_f < 0.1Te$ , gdzie  $Te$  jest charakterystycznym czasem obrotu wirów (ang. *eddy turnover time*). Podobne wnioski można sformułować w odniesieniu do pozostałych statystyk. Liczba Reynoldsa oparta na mikroskali Taylora, integralna skala długości, skośność i współczynnik spłaszczenia nie zmieniają się, jeśli  $t_f < \tau_K$ . Dla większych skal czasowych wymuszania skośność i współczynnik spłaszczenia są czułe na  $t_f$ , co może wynikać z bardzo małej wartości liczby  $R_\lambda$ .

W szeregu symulacji zbadałem również wpływ skali czasowej wymuszania na kinematyczne statystyki zderzeń kropeł chmurowych. Radialna funkcja rozkładu nie wykazuje istotnych różnic, jeśli  $t_f / \tau_K < 600$  ( $\tau_K$  – skala czasu Kołmogorowa). Zgodnie z oczekiwaniami różnice te są większe dla kropeł o większej bezwładności. Wykazałem również, że dla bardzo dużych skal czasowych, jak na przykład  $t_f / \tau_K \approx 600$  różnice w RDF stają się istotne. Należy jednak podkreślić, że ich wielkość zależy od rozmiaru domeny, a w konsekwencji – od  $R_\lambda$ .

Kinematyczne statystyki zderzeń (RDF i RRV) obliczone w symulacjach ze stochastycznym schematem wymuszającym porównałem z analogicznymi statystykami, obliczonymi przy zastosowaniu schematu deterministycznego. Symulacje wykonane z różnymi metodami wymuszania dają te same wyniki dla cząstek o małej bezwładności ( $St < 0.5$ ). Jedynym wyjątkiem są tu symulacje wykonane z bardzo dużymi skalami czasowymi ( $t_f / \tau_K \approx 600$ ). Wpływ metody wymuszania staje się widoczny dla cząstek o większej bezwładności i w szczególności zmienia wartość funkcji RDF. Dla większych kropeł ( $a > 25 \mu\text{m}$ ) funkcja RDF obliczona w symulacjach z deterministycznym schematem wymuszającym jest o około 15% większa niż w analogicznych symulacjach z użyciem schematu stochastycznego. Radialna prędkość względna jest mniej czuła na mechanizm wymuszający. Symulacje wykonane z użyciem siatki o liczbie węzłów  $128^3$  pokazują, że różnica w RRV (pomiędzy symulacjami wykonanymi z różnymi schematami wymuszania) maleje wraz ze zmniejszaniem  $t_f$ . Dla symulacji w większych rozdzielczościach ( $256^3$ ) statystyki RRV są w ilościowej zgodności.

Wyniki symulacji prowadzą do wniosku, że RDF i RRV mogą w ogólności zależeć od skali czasowej wymuszania, jeśli ta jest dostatecznie duża. Tą zależność można wytłumaczyć jako efekt różnych liczb Reynoldsa i zmian zakresu skal przestrzennych przepływu turbulentnego. W przypadku, gdy skala czasowa wymuszania jest mniejsza niż  $\tau_K$ , to kinematyczne statystyki zderzeń cząstek nie są czułe na  $t_f$ . Aby uniknąć niepożądanego zależności od  $t_f$  należy używać skal czasowych z przedziału  $dt < t_f < \tau_K$ .

Zbadałem także wpływ stałej czasowej schematu wymuszającego na statystyki warunkowe cząstek. W kilku seriach eksperymentów numerycznych wyznaczyłem dwupunktowe statystyki warunkowane lokalną enstrofią i szybkością dyssypacji energii. Wykazałem, że obszary o większym prawdopodobieństwie zderzeń są skorelowane z obszarami o mniejszej wirowości. Obszary, w których jest większe prawdopodobieństwo znalezienia dwóch cząstek w bliskim sąsiedztwie są mocno skorelowane z obszarami o dużej dyssypacji energii. Znormalizowane statystyki warunkowe obliczone z różnymi skalami czasowymi są do siebie bardzo podobne, ale zależą w sposób nieliniowy od rozmiaru cząstek, lokalnej wirowości i dyssypacji energii.

## Zadanie 5

Wykorzystując symulacje DNS, zbadałem różne mechanizmy i szereg czynników, które mogą mieć wpływ na prędkość opadania cząstek inercyjnych w przepływach turbulentnych. Moje badania koncentrowały się głównie na problemie kropeł chmurowych o promieniach od 10 do 60  $\mu\text{m}$ , poruszających się w turbulentnym powietrzu o zadanej wartości dyssypacji energii. Wykazałem, że różnica pomiędzy średnią prędkością opadania a prędkością graniczną jest z dobrym przybliżeniem liniową funkcją szybkości dyssypacji energii w potęgę  $1/2$ . Symulacje ze współczynnikiem oporu Stokesa i różnymi stosunkami gęstości dowodzą, że średnia prędkość cząstek jest konsekwentnie większa od prędkości granicznej lub jej równa. Dodatkowo pokazałem, że maksymalny wzrost prędkości opadania ściśle zależy od intensywności turbulencji lub równoważnie od szybkości dyssypacji energii, przy ustalonej  $R_\lambda$  i lepkości kinematycznej.

Celem moich prac było także sprawdzenie wpływu liczby Reynoldsa, opartej na mikroskali Taylora, na prędkość opadania kropeł. Otrzymane wyniki DNS są zgodne z obserwacjami z pracy [12] i pozwalają sformułować wniosek, że dla ustalonej szybkości dyssypacji energii i małej liczby Reynoldsa ( $R_\lambda < 100$ ) maksymalny wzrost prędkości skaluje się z  $R_\lambda$ , a w związku z tym również z rms fluktuacji prędkości ( $u'$ ). Z drugiej strony dla większych  $R_\lambda$  wzrost prędkości opadania nasycy się, a nasycenie to jest obserwowalne tylko dla cząstek o małej bezwładności ( $a < 30 \mu\text{m}$ ).

Korzystając z wyników DNS, przygotowałem empiryczną parametryzację, która pozwala oszacować prędkość opadania cząstek na podstawie trzech bezwymiarowych parametrów, takich jak liczba Stokesa, liczba Froude'a ( $Fr$ ) i  $R_\lambda$ . Dokładność nowej parametryzacji sprawdziłem, porównując wyniki empiryczne z danymi DNS. Dla szerokiego zakresu bezwymiarowych parametrów uzyskałem ilościową zgodność pomiędzy wynikami DNS i wynikami parametryzacji. Tylko dla bardzo dużych  $R_\lambda$  i  $1 < Fr < 20$  parametryzacja jest w jakościowej zgodności z wynikami z symulacji.

Zbadałem także możliwe efekty wynikające ze specyfiki użytego schematu wymuszającego. Wyniki DNS uzyskane przy użyciu różnych metod wymuszania turbulencji wykazują podobny trend, chociaż zachodzi wyraźna różnica w wartościach prędkości dla konkretnego rozmiaru cząstki (kropki) oraz  $R_\lambda$ . Dla zadanej rozdzielczości siatki obliczeniowej, cząstki opadają szybciej w przepływie wymuszonym schematem deterministycznym. To wynika częściowo z różnych wartości  $R_\lambda$ .

Dodatkowo zbadałem wpływ przyspieszenia grawitacyjnego na opadanie cząstek/kropeł. Wykazałem, że dla dużych wartości  $g$  prędkość opadania cząstek o dużej bezwładności ( $St > 0.2$ ) szybko zbiega do prędkości granicznej. Dla cząstek o małej bezwładności ( $St < 0.0504$ ) można zaobserwować nieznaczny wzrost prędkości opadania, gdy wartość przyspieszania grawitacyjnego wzrasta dwukrotnie (tzn. z  $1g$  do  $2g$ ).

Przeprowadziłem również analizę wpływu nieliniowości współczynnika oporu na prędkość opadania cząstek. Pokazałem, że w rozważanym zakresie liczb Stokesa różnice prędkości opadania, wynikające z użycia różnych definicji sił oporu, są bardzo małe i nie zależą od tempa dyssypacji energii. Wyniki te są w jakościowej zgodności z wynikami z pracy [8]. Na podstawie nowych danych można potwierdzić tezę, że nieliniowość współczynnika oporu redukuje wzrost prędkości opadania cząstek, ale tylko nieznacznie.

Wykazałem również, że dynamika oddziaływań cząstka-wir w płaszczyźnie horyzontalnej jest głównym czynnikiem, który determinuje prędkość opadania cząstek. Wnioski te można sformułować, bazując na wynikach symulacji, w których ruch cząstek w kierunku prostopadłym do kierunku grawitacji był zablokowany. Blokowanie ruchu w kierunku horyzontalnym powoduje, że mechanizm preferencyjnego unoszenia przestaje być aktywny.

## Zadanie 6

Kolejnym celem moich prac badawczych było udoskonalanie modelu oddziaływań aerodynamicznych pomiędzy kroplami. W literaturze można znaleźć szereg prac, w których zostały wyprowadzone analityczne sformułowania sił (dla małych liczb Reynoldsa) dla problemu dwóch poruszających się względem siebie kul. Rozwiązania te mają formę nieskończonych szeregów i dotyczą tylko wybranych

typów ruchu, jak np. ruch translacyjny wzdłuż linii prostej przechodzącej przez środki tych kul [13]. Istotnym problemem, uniemożliwiającym skuteczne użycie tych rozwiązań w programach komputerowych, jest brak cech powtarzalności (rekurencji) w wyznaczaniu kolejnych członów rozwinięcia.

Opracowana przeze mnie metodologia pozwala w sposób wydajny numerycznie i z włączeniem krótkozasięgowych oddziaływań modelować ruch dwóch kropelek chmurowych w nieruchomym ośrodku lepkim, z uwzględnieniem ich grawitacyjnego opadania. Nowa metoda łączy trzy różne techniki obliczania sił i momentów sił w zależności od odległości pomiędzy kroplami. Dla oddziaływań dalekozasięgowych zastosowałem rozwinięcie multipolowe FTS [14] (ang. *Force-Torque-Stresslet*). Oddziaływania krótkozasięgowe, tzw. siły smarowania, są aproksymowane rozwinięciem bisferycznym rozwiązania równania Stokesa. Oddziaływania na pośrednich odległościach są aproksymowane wielomianami trzeciego stopnia. Jedną z charakterystycznych cech nowej metody jest dekompozycja złożonego ruchu względnego kropeł na sześć elementarnych przypadków. Dla każdego z tych przypadków przygotowałem dokładne rozwiązanie (FTS), które definiuje siły oraz momenty sił działające na krople. Formuły matematyczne dotyczące rozwinięcia FTS zostały uogólnione i można je stosować do modelowania ruchu względnego kropeł o różnych rozmiarach. Większość wcześniejszych zastosowań rozwinięcia FTS dotyczyła cząstek o jednakowych rozmiarach.

Dla każdego z sześciu przypadków dobrałem odpowiedni typ wielomianu i przeprowadziłem optymalizację lokalizacji punktów dopasowania. Taka konstrukcja modelu, integrująca różne typy oddziaływań, pozwala dokładnie reprezentować siły i momenty sił. Formuły i wyniki będące owocem tej pracy można stosować do reprezentacji oddziaływań dowolnych cząstek sferycznych (mających cechy ciała stałego) w przepływie Stokesa.

Za pomocą nowej metody obliczyłem współczynnik wychwytu kropeł. Współczynnik ten jest ściśle uzależniony od wielkości kropeł i może się zmieniać, w zależności od ich rozmiaru, nawet o kilka rzędów wielkości. Obliczenie współczynnika wychwytu jest zadaniem złożonym numerycznie, a wynika to z nieliniowej reprezentacji sił i momentów sił. W ogólności jest to problem wieloskalowy, który łączy efekty inercyjne, dalekozasięgowe siły oddziaływań aerodynamicznych, lokalne siły smarowania i przyciągające siły van der Waalsa, prowadzące do zderzeń i koalescencji kropeł. Dlatego też, aby precyzyjnie wyznaczyć współczynnik wychwytu konieczne jest równoczesne rozważanie bezwładności kropeł i szybko zmieniających się sił smarowania. Żadna z dostępnych do tej pory metod nie była wystarczająco efektywna numerycznie, aby dokładnie oszacować wartość współczynnika wychwytu.

Opracowanie dokładnej reprezentacji oddziaływań aerodynamicznych pozwoliło osiągnąć dużą precyzję symulacji, co w konsekwencji przełożyło się na dużą dokładność obliczonego współczynnika wychwytu. W większości przypadków, tzn. dla różnych rozmiarów kropeł i różnych stosunków promieni, błąd względny pomiędzy modelem zintegrowanym a rozwiązaniem ścisłym wynosi około 2%. Największy błąd względny nie przekracza 18%. Nie jest to wartość znacząca, jeśli weźmie się pod uwagę, że współczynnik wychwytu zmienia się o kilka rzędów wielkości w zależności od rozmiaru kropeł. Warto również podkreślić, że obliczenia przy użyciu modelu zintegrowanego trwały mały ułamek czasu, jaki jest potrzebny na uzyskanie rozwiązania ścisłego. Stopień dokładności wyników jest znacząco lepszy

od tych, które można uzyskać przy zastosowaniu ulepszonej metody superpozycji ISM (ang. *Improved Superposition Method*), stosowanej w modelowaniu HDNS (ang. *Hybrid Direct Numerical Simulations*) [15].

Ważnym osiągnięciem mojej pracy było również obliczenie współczynnika wychwytu w oparciu o dokładną reprezentację oddziaływań aerodynamicznych [16]. Wyniki symulacji zostały opublikowane w monografii i mogą służyć jako wzorzec dla przyszłych prac badawczych. Nowe, dokładne wartości współczynnika wychwytu posłużyły do weryfikacji wyników, które opublikowali Hocking i Jonas [17] oraz Davis i Sartor [18]. Z porównania wynika, że dane w tych dwóch klasycznych pracach są obciążone pewnym błędem. Nowe symulacje zostały przeprowadzone również dla kilku dodatkowych przypadków w granicy, gdy stosunek promieni kropeł dąży do zera. Jest to zakres, w którym wartość współczynnika wychwytu jest mała, a obliczenia bardzo kosztowne numerycznie.

Wykonane przeze mnie symulacje dowodzą, że ruch rotacyjny kropeł wpływa na redukcję współczynnika wychwytu. Efekt ten jest szczególnie istotny w przypadku małych kropeł o zbliżonych rozmiarach. Problem ten nie był szczegółowo analizowany we wcześniejszych pracach badawczych. Davis i Sartor [18] bardzo ogólnie odnieśli się do wpływu ruchu obrotowego kropeł na współczynnik wychwytu. Porównali oni wyniki własnych symulacji z wynikami z pracy [19], w której nie rozpatrywano ruchu rotacyjnego. To porównanie jest dość niekompletne z powodu bardzo ograniczonego zakresu stosunku promieni kropeł i uproszczeń użytych w ich metodzie [19]. W mojej pracy bardzo dokładnie zbadałem wpływ ruchu rotacyjnego na współczynnik wychwytu. Pozwala to oszacować błąd, jaki może pojawić się, gdy ruch rotacyjny kropeł zostanie pominięty. Z porównania wynika, że dla kropeł o rozmiarze  $a > 30 \mu\text{m}$  wpływ rotacji ma drugorzędne znaczenie.

We wcześniejszych pracach badawczych, w których podejmowano wysiłki obliczenia współczynnika wychwytu stosowano pewne uproszczenia, po to, aby skrócić czas całkowania równań. Polegały one między innymi na wprowadzeniu parametru, takiego jak minimalna dozwolona odległość między kroplami, po przekroczeniu której zakładano, że dochodzi do zderzenia i koalescencji kropeł. Takie podejście zastępuje w pewnym sensie krótkozasięgowe oddziaływanie molekularne, jak na przykład oddziaływanie van der Waalsa. W mojej pracy wykonałem symulacje z uwzględnieniem explicite oddziaływań van der Waalsa. Dla par kropeł o zbliżonych rozmiarach i tych znacząco różnych udowodniłem, że włączenie sił van der Waalsa jest konieczne. Uproszczony model z parametryzacją odległości wyznaczającej zderzenie prowadzi do znacznych błędów współczynnika wychwytu. Błąd ten jest większy w przypadku małych kropeł. W przypadku większych kropeł włączenie sił van der Waalsa redukuje wpływ ruchu obrotowego kropeł na współczynnik wychwytu.

Nowy model oddziaływań aerodynamicznych dla układu dwóch poruszających się względem siebie cząstek został niedawno włączony do kodu DNS służącego do modelowania ruchu wielu cząstek w przepływach turbulentnych. Szczegóły organizacji obliczeń oraz wstępne wyniki symulacji można znaleźć w pracy [20]. W symulacjach tych siły oddziaływań aerodynamicznych pomiędzy kroplami były obliczane za pomocą modelu hybrydowego, który powstał z połączenia nowego algorytmu (modelu zintegrowanego) z algorytmem uproszczonej/binarnej metody superpozycji (BiSM) (ang. *binary-based superposition method*) [21]. Konstrukcja metody BiSM pozwala w relatywnie prosty sposób uwzględnić efekt krótkozasięgowych sił smarowania. W metodzie tej zakłada się, że oddziaływanie

aerodynamiczne grupy cząstek z wybraną cząstką jest w niewielkim stopniu zależne od wzajemnych oddziaływań cząstek w grupie. Takie przybliżenie jest poprawne tylko w przypadku, gdy cząstki mają małe rozmiary, a ich koncentracja w domenie jest niewielka. Z dobrym przybliżeniem można przyjąć, że takie warunki są typowe dla procesów chmurowych. Dla uzupełnienia warto dodać, że do modelowania trójwymiarowej homogenicznej i izotropowej turbulencji użyto kodu DNS, w którym metoda całkowania bazuje na schemacie różnic skończonych [21]. Wnioski płynące z tych symulacji są takie, że dla kropelek o małej bezwładności ( $7.5 \mu\text{m}$ ) siły smarowania redukują częstotliwość zderzeń o około 20%. Dla cząstek o większej bezwładności wpływ sił smarowania na częstotliwość zderzeń jest znacznie mniejszy. W przypadku kropelek o promieniu  $30 \mu\text{m}$  obserwowana redukcja częstości zderzeń była rzędu kilku procent.

## Podsumowanie

Wykonane przeze mnie prace badawcze dotyczą modelowania procesów charakterystycznych dla mikrofizyki chmur. W szczególności prace te koncentrują się na analizie mechanizmów związanych z powstawaniem ciepłego deszczu. Ciepłe deszcze stanowią ponad 30% łącznej sumy opadów na kuli ziemskiej i mogą powstawać w każdej strefie klimatycznej. Ilościowa analiza tych procesów jest ważna w kontekście opracowania możliwie dokładnych parametryzacji dla mezoskalowych prognoz pogody. Czas formowania się ciepłego deszczu zależy od tempa wzrostu kropelek chmurowych. W przypadku kropelek o promieniach od  $10$  do  $60 \mu\text{m}$  ich wzrost jest głównie skutkiem zderzania się małych kropelek i ich koalescencji. Z kolei tempo zderzeń jest uwarunkowane parametrami przepływu turbulentnego.

Chociaż wykonane symulacje i przeprowadzone analizy dotyczą głównie procesów chmurowych, to wyniki symulacji mają charakter ogólny i mogą posłużyć jako referencja do opisu innych procesów fizycznych. Kluczowe jest tu uzgodnienie liczby Reynoldsa przepływu oraz bezwładności cząstek (liczby Stokesa).

## Literatura

- [1] O. Ayala, W. W. Grabowski, L.-P. Wang, *A hybrid approach for simulating turbulent collisions of hydrodynamically-interacting particles*, J. Comput. Phys., 225 (2007), 51–73.
- [2] C. Pasquero, A. Provenzale, E. A. Spiegel, *Suspension and fall of heavy particles in random two-dimensional flow*, Phys. Rev. Lett., 91 (2003), 054502.
- [3] M. J. Manton, *On the motion of a small particle in the atmosphere*, Boundary-Layer Meteorology, 6 (1974), 487–504.
- [4] S. B. Pope, *Turbulent Flows*, Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [5] K.-M. Lau, H.-T. Wu, *Warm rain processes over tropical oceans and climate implications*, Geophys. Res. Lett., 30 (2003), 2290–2294.
- [6] K. V. Beard, H. T. Ochs, *Warm-rain initiation: An overview of microphysical mechanisms*, J. Appl. Meteor., 32 (1993), 608–625.
- [7] M. B. Pinsky, A. P. Khain, *Turbulence effects on droplet growth and size distribution in clouds - A review*, J. Aerosol Sci., 28 (1997), 1177–1214.
- [8] L.-P. Wang, M. R. Maxey, *Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence*, J. Fluid Mech., 256 (1993), 26–68.

- [9] N. P. Sullivan, S. Mahalingam, R. M. Kerr, *Deterministic forcing of homogeneous isotropic turbulence*, Phys. Fluids, 6 (1994), 1612.
- [10] V. Eswaran, S. B. Pope, *An examination of forcing in direct numerical simulations of turbulence*, Comp. Fluids, 16 (1988), 257–278.
- [11] O. Ayala, B. Rosa, L.-P. Wang, W. W. Grabowski, *Effects of turbulence on the geometric collision rate of sedimenting droplets. Part 1. Results from direct numerical simulation*, New J. Phys., 10 (2008), 075015.
- [12] C. Y. Yang, U. Lei, *The role of turbulent scales in the settling velocity of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence*, J. Fluid Mech., 371 (1998), 179–205.
- [13] A. D. Maude, *End effects in a falling-sphere viscometer*, Brit. J. Appl. Phys., 12, (1961), 293-295.
- [14] L. Durlofsky, J. F. Brady, G. Bossis, *Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles*, J. Fluid Mech., 180 (1987), 21–49.
- [15] L.-P. Wang, O. Ayala, W. W. Grabowski, *Improved formulations of the superposition method*, J. Atmos. Sci., 63 (2005), 1255–1266.
- [16] D. J. Jeffrey, Y. Onishi, *Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low-Reynolds-number flow*, J. Fluid. Mech., 139 (2006), 261–290.
- [17] L. M. Hocking, P. R. Jonas, *The collision efficiency of small drops*, Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 85 (1970), 44–50.
- [18] M. H. Davis, J. D. Sartor, *Theoretical collision efficiencies for small cloud droplets in Stokes flow*, Nature, 215 (1967), 1371–1372.
- [19] L. M. Hocking, *The collision efficiency of small drops*, Quart. J. R. Met. Soc., 85 (1959), 44–50.
- [20] R. Onishi, B. Rosa, L.-P. Wang, O. Ayala, K. Takahashi, *Efficient Numerical Simulation for Full-Range Hydrodynamic Interactions among Cloud Droplets in Isotropic Turbulence*, Proceedings of the 8th International Conference on Multiphase Flow, Jeju, Korea, (2013).
- [21] R. Onishi, K. Takahashi, J. S. Vassilicos, *An efficient parallel simulation of interacting inertial particles inhomogeneous isotropic turbulence*, J. Comp. Phys., 242 (2013), 809–827.

## **5. Istotne osiągnięcia naukowo-badawcze dotyczące badania dynamiki cząstek w przepływach turbulentnych**

**a) Przygotowanie kodu pseudospektralnego (zrównoleglonego przy użyciu bibliotek MPI) do symulacji DNS z modelem zrównoleglenia opartym na jednowymiarowej dekompozycji domeny obliczeniowej.**

Moim pierwszym narzędziem do modelowania przepływów wielofazowych był kod pseudospektralny, w którym do zrównoleglenia obliczeń zastosowano biblioteki programowania równoległego OpenMP. Kod ten może być uruchamiany na maszynach z modelem pamięci współdzielonej lub rozproszonej, ale wyłącznie z wykorzystaniem jednego węzła obliczeniowego. Za pomocą tego programu można efektywnie wykonywać symulacje na siatkach obliczeniowych o liczbie węzłów nie większej niż  $256^3$ . Wyniki symulacji DNS wykonanych za pomocą tego programu zostały opublikowane w serii artykułów w czasopiśmie z listy JCR [A13-A17].

W 2010 r. ukończyłem prace nad nowym kodem DNS do modelowania przepływów wielofazowych. W nowym programie zastosowałem metodę zrównoleglenia opartą na jednowymiarowej dekompozycji domeny obliczeniowej. W przyjętej przeze mnie strategii zrównoleglenia domena jest podzielona na warstwy, przy czym liczba tych warstw odpowiada liczbie użytych procesorów/rdzeni. Komunikacja pomiędzy wątkami jest realizowana za pomocą standardowych bibliotek programowania równoległego MPI (ang. *Message Passing Interface*). Trójwymiarowa transformata Fouriera jest obliczana sekwencyjnie poprzez wykonanie dwóch kolejnych po sobie transformat, tj. dwuwymiarowej (2D) i jednowymiarowej (1D). W pierwszym kroku wykonywana jest tylko 2D FFT przy wykorzystaniu danych w dostępnym obszarze pamięci. Następnie procedura równoległej transpozycji przenosi odpowiednie bloki danych pomiędzy wątkami w taki sposób, aby uzyskać dostęp do danych, które są niezbędne do obliczenia 1D FFT (w trzecim brakującym kierunku).

Nowy kod DNS, zrównoleglony przy użyciu bibliotek MPI, może być uruchamiany na maszynach z modelem pamięci rozproszonej, a symulacje nie są ograniczone do jednego węzła obliczeniowego. Pozwala to znacznie efektywniej wykorzystywać zasoby obliczeniowe niż w przypadku wcześniejszych kodów sekwencyjnych lub tych zrównoleglonych przy użyciu bibliotek OpenMP.

Opis algorytmów, wyniki skalowalności nowego kodu oraz wstępne wyniki symulacji zostały opublikowane w artykułach [B4 i B6]

## **b) Osobliwości rozwiązań równań NS związane z dywergencją pola prędkości**

W trakcie pracy nad nowym kodem DNS natknąłem się na trudny do identyfikacji problem związany z niedostateczną kontrolą błędów zaokrągleń podczas całkowania równań Naviera-Stokesa. W przypadku, kiedy błąd zaokrągleń odnoszący się do warunku zapewnienia bezdywergentności pola prędkości nie jest ściśle kontrolowany, zachodzi niefizyczna ewolucja przepływu turbulentnego. Trudność wykrycia tego błędu polega na tym, że kumuluje się on bardzo powoli, a symptomy zaczynają być widoczne po bardzo długim czasie całkowania, tzn. odpowiadającym około  $50Te$  ( $Te$  – *eddy turnover time*). Dodatkowo błąd ten nie powoduje numerycznej niestabilności. Równania Naviera-Stokesa można nadal rozwiązywać numerycznie, ale modelowany przepływ nie ma cech fizycznych charakterystycznych dla płynów nieściśliwych.

Identyfikacja problemu była możliwa dzięki wykorzystaniu dużych zasobów obliczeniowych, a to z kolei było możliwe dzięki przygotowaniu nowej wersji kodu dostosowanego do komputerów z modelem pamięci współdzielonej [B6]. W artykule [A12] przedstawiono dokładnie przyczyny tego problemu i zaproponowano kilka metod jego rozwiązania.

## **c) Modelowanie wpływu grawitacji na przyspieszenia i statystyki zderzeniowe cząstek inercyjnych**

Prowadzone przeze mnie prace badawcze obejmowały również problem wpływu grawitacji na statystyki przyspieszeń cząstek. Tu również skupiłem się na badaniu dynamiki cząstek o własnościach podobnych do kropeł chmurowych (długość promienia od 10 do 60  $\mu\text{m}$ ). Wspólnie z naukowcami z uniwersytetu z Delaware



uzyskaliśmy szereg oryginalnych wyników. Wykazaliśmy między innymi, że maksymalna wartość wariancji przyspieszeń zarówno w kierunku horyzontalnym, jak i pionowym przypada dla cząstek o liczbie Stokesa równej około 1.2. Przyspieszenia w kierunku horyzontalnym takich cząstek są wyraźnie większe od przyspieszeń elementów płynu. Grawitacja w sposób ciągły wpływa na dynamikę cząstek, która jest generowana przez lokalny przepływ turbulentny. Ponadto grawitacja wzmacnia ekstremalne przypadki akceleracji cząstek zarówno w kierunku pionowym, jak i poziomym, a tym samym skutecznie zmniejsza bezwładnościowy mechanizm filtrowania.

W pracy [A4] przedstawiona została szczegółowa analiza zależności radialnej prędkości względnej od grawitacji. Prędkość względna została zdekomponowana na trzy składowe: (i) różnica sedymentacji, (ii) lokalny przepływ ścinający i (iii) różnice wynikające z różnych wartości przyspieszeń. Dla zawieszin monodispersyjnych wykazano, że grawitacja nie wpływa na drugi komponent, czyli lokalny przepływ ścinający cząstek. Z drugiej strony grawitacja skraca ogony funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa tego komponentu (składowej prędkości), który odnosi się do różnicy przyspieszeń. Obserwowany efekt jest skutkiem krótszego czasu oddziaływań cząstka-wir (w obecności grawitacji).

W przypadku zawieszin bidispersyjnych grawitacja redukuje nieznacznie prędkość przepływu ścinającego. Natomiast prędkość cząstek wynikająca z różnicy przyspieszeń jest dodatnio skorelowana z komponentem różnicy sedymentacji. Korelacja ta jest bardziej wyraźna w przypadku, gdy zderzające się cząstki mają podobne rozmiary. W pracy [A4] zaproponowano model teoretyczny, który wyjaśnia wpływ grawitacji i turbulencji na poziome i pionowe składowe wariancji przyspieszeń cząstek. Model ten jest zgodny z wynikami DNS dla cząstek o małych liczbach Stokesa.

#### **d) Symulacje DNS i eksperymenty w tunelu aerodynamicznym**

W trakcie prac nad modelowaniem przepływów wielofazowych nawiązałem współpracę z grupą naukowców, którą kieruje profesor Alberto Aliseda z uniwersytetu w Waszyngtonie. Grupa ta wykorzystuje techniki eksperymentalne do badania przepływów wielofazowych. Eksperymenty i pomiary są wykonywane w tunelu aerodynamicznym. Celem naszej współpracy było porównanie wyników uzyskiwanych doświadczalnie z wynikami symulacji DNS. Pierwszym etapem tej współpracy było uzgodnienie parametrów przepływu turbulentnego. Dopasowując rozmiar domeny, lepkość i sposób wymuszania turbulencji, otrzymałem dobrą zgodność podstawowych (uśrednionych) charakterystyk przepływu z tymi, które profesor Aliseda zmierzył w tunelu aerodynamicznym. Drugi etap prac to porównanie intensywności grupowania się cząstek. Techniki pomiarowe stosowane do mierzenia przestrzennego rozkładu kropel/cząstek mają istotne ograniczenia i bazują na pomiarach jednowymiarowej funkcji rozkładu (1D RDF). Obecnie nie są znane dokładne metody pomiaru grupowania się cząstek w trzech wymiarach. Aby móc porównać 1D RDF z wynikami symulacji przygotowałem specjalny program komputerowy, który pozwala dokładnie odtwarzać warunki pomiarowe w tunelu aerodynamicznym.

Uzyskane przeze mnie wyniki DNS są w dobrej zgodności z danymi eksperymentalnymi. Rezultaty tej pracy zostały opublikowane w artykule [C8] oraz

zaprezentowane na kilku konferencjach naukowych, między innymi [D35, D37, D39, D43, D54].

### **e) Modelowanie opadania cząstek inercyjnych w przepływach turbulentnych metodą LES (ang. *Large Eddy Simulations*)**

Do modelowania osiadania cząstek inercyjnych w przepływach turbulentnych użyłem również innego podejścia, a mianowicie symulacji LES. W artykule [C1] przedstawiłem szczegółowe porównanie wyników uzyskanych w DNS z wynikami *a priori* LES oraz LES z modelem podskalowym, tzw. *a posteriori* LES. Symulacje *a priori* wykonuje się podobnie, jak standardowe DNS, z tą jednak różnicą, że prędkość płynu, która wchodzi do równań ruchu cząstek jest odpowiednio filtrowana filtrem dolnoprzepustowym. Do wykonania symulacji *a posteriori* LES użyłem modelu podskalowego, który bazuje na wprowadzeniu dodatkowej lepkości tzw. widmowej lepkości turbulentnej (ang. *spectral eddy viscosity*). Wnioski płynące z tych prac są takie, że dla cząstek o małej bezwładności prędkość opadania jest mniejsza w wynikach symulacji LES niż w wynikach DNS. Wraz ze wzrostem bezwładności cząstek wyniki symulacji LES, zarówno *a priori*, jak i *a posteriori* zbiegają do wyników z DNS. We wszystkich wykonanych symulacjach nie zaobserwowałem redukcji prędkości opadania w stosunku do prędkości granicznej.

Wyniki symulacji LES przedstawiłem także na międzynarodowej konferencji naukowej „8th International Conference on Multiphase Flow” [D5] oraz międzynarodowych warsztatach naukowych [D4].

## **6. Pozostałe osiągnięcia naukowo-badawcze**

### **a) Przygotowanie nowego rdzenia dynamicznego dla modelu prognozowania pogody COSMO**

Od 2009 r. jestem pracownikiem Instytutu Meteorologii i Gospodarki Wodnej – Państwowego Instytutu Badawczego (IMGW-PIB) i aktywnie uczestniczę w pracach zespołu, którego głównym celem jest przygotowanie nowego rdzenia dynamicznego dla numerycznego modelu prognozowania pogody COSMO (ang. *Consortium for Small-scale Modeling*). Model COSMO jest podstawowym narzędziem używanym w IMGW-PIB do przygotowywania numerycznych prognoz pogody. Konieczność opracowania nowego rdzenia dynamicznego dla modelu COSMO wynikała z tego, że w jego operacyjnej wersji wielkości dynamiczne, takie jak masa, pęd i energia nie były zachowywane. Zachowanie tych wielkości jest istotne w sytuacji, gdy horyzontalna rozdzielczość siatki obliczeniowej jest bliska 1 km. Oprócz tego oryginalny rdzeń dynamiczny COSMO, oparty na równaniach dla płynów ściśliwych i dyskretyzacji Runge-Kutta, wykazywał istotne problemy ze stabilnością w symulowaniu przepływów górskich na siatkach o dużej rozdzielczości horyzontalnej.

Z uwagi na powyższe ograniczenia konsorcjum COSMO podjęło decyzję, że jednym z kandydatów na przyszły rdzeń dynamiczny będzie model EULAG ([www.mmm.ucar.edu/eulag/](http://www.mmm.ucar.edu/eulag/) - Eulerian/semi-Lagrangian numeryczny model do symulowania przepływów). Decyzja o wyborze modelu EULAG wynikała z tego, że cechuje się on dużą stabilnością i zachowawczością zmiennych dynamicznych.

Zachowawczość modelu EULAG to skutek rozwiązywania równań ruchu w formie strumieniowej. Pierwsza wersja modelu EULAG była oparta na równaniach niehydrostatycznych i przybliżeniu anelastycznym.

Na początkowym etapie prac moje wysiłki koncentrowały się na przygotowaniu szeregu symulacji wyidealizowanych i półrealistycznych. Ich celem było potwierdzenie poprawności działania modelu EULAG w problemach charakterystycznych dla mezoskalowych prognoz pogody. Wyniki z tych symulacji zostały opublikowane w 3 artykułach z listy JCR [A9, A10, A11]. Drugi etap prac zespołu to przepisanie modelu EULAG z języka programowania FORTRAN 77 do nowego standardu Fortran 90. Podsumowanie prac z tego etapu zostało opublikowane w artykule [B3]. Kolejny etap to integracja obydwu modeli (modelu EULAG i COSMO) i ponowna weryfikacja poprawności działania modelu w testach wyidealizowanych. Końcowy etap prac to przygotowanie testów realistycznych przy użyciu nowej wersji modelu COSMO, wyposażonej w rdzeń dynamiczny modelu EULAG. Wyniki z tych eksperymentów zostały opublikowane w renomowanym czasopiśmie Monthly Weather Review [A2].

Od września 2015 r. jestem kierownikiem nowego projektu priorytetowego CELO i koordynuję aktualnie prowadzone prace zespołu w IMGW-PIB. Projekt ten jest także realizowany we współpracy z konsorcjum COSMO, a jego głównym celem jest zintegrowanie najnowszej wersji modelu EULAG z modelem COSMO. Nowa wersja modelu EULAG ma konstrukcję podobną do poprzedniej (opartej na przybliżeniu anelastycznym), ale bazuje na równaniach dla płynów ściśliwych.

Oprócz wyżej wymienionych artykułów realizacja tego projektu zaowocowała wieloma referatami konferencyjnymi, prezentacjami na spotkaniach konsorcjum COSMO oraz szeregiem artykułów konferencyjnych.

## **b) Adaptacja rdzenia modelu EULAG do procesorów graficznych**

Celem tych prac było dostosowanie modelu EULAG do nowych architektur superkomputerowych, wykorzystujących procesory wielordzeniowe, takie jak procesory graficzne GPU i architektury hybrydowe. Prace te realizowałem wspólnie z naukowcami z Poznańskiego Centrum Superkomputerowo-Sieciowego (PCSS) i Politechniki Częstochowskiej (PCz). Owocem tej współpracy było przygotowanie wydajnych algorytmów dla dwóch głównych modułów modelu EULAG, czyli wielowymiarowego, dodatnio określonego algorytmu adwekcji (MPDATA) oraz solvera eliptycznego. Zaproponowane rozwiązania to efekt szczegółowej analizy algorytmów i optymalizacji zapotrzebowania zasobów obliczeniowych, takich jak: rejestry, pamięć współdzielona i globalna. Przyjęta metoda pozwala identyfikować „wąskie gardła” algorytmów, które ograniczają/spowalniają przesyłanie danych pomiędzy różnymi obszarami pamięci.

Poprawność nowych algorytmów i ich skalowalność zostały przetestowane w wielu różnych symulacjach, między innymi: a) izotropowa, homogeniczna i zanikająca turbulencja w periodycznej kostce, b) przepływ na sferze i c) adwekcja pola skalarnego wokół osi diagonalnej domeny.

Realizacja tych prac była finansowana przez Narodowe Centrum Nauki (UMO-2011/03/B/ST6/03500). Byłem głównym wykonawcą projektu i zajmowałem się kierowaniem prac prowadzonych w IMGW-PIB. Owocem współpracy, prowadzonej w

ramach konsorcjum, są 3 artykuły [A5, B1, B2], których jestem współautorem oraz szereg wystąpień konferencyjnych [D9, D18, D19, D22].

## 7. Ilościowe zestawienie dorobku naukowego

#	Wyszczególnienie	Przed doktoratem	Po doktoracie	Łącznie
1	Monografie samodzielne	0	1	1
2	Artykuły naukowe, współautorskie w czasopismach z listy filadelfijskiej	1	17	18
3	Artykuły naukowe, recenzowane w czasopismach zagranicznych spoza listy filadelfijskiej	0	6	6
4	Artykuły konferencyjne	6	11	17
5	Łączny impact factor	1.527	34.522	36.049
7	Prezentacje na międzynarodowych konferencjach naukowych (nie włączając spotkań konsorcjum COSMO)	2	69	71
8	Prezentacje na spotkaniach COSMO	-	38	38
9	Raporty techniczne	1	10	11
10	Prezentacje na krajowych konferencjach/seminariach	-	3	3
11	Łączna liczba cytowań (Web of Science)	-	271	271
12	Łączna liczba cytowań (Google Scholar)	-	442	442
14	H-index (Web of Science)	-	7	7
15	H-index (Google Scholar)	-	9	9

## 8. Międzynarodowa działalność i współpraca naukowo-badawcza

- [1] Holandia, Amsterdam, *Vrije Universiteit Amsterdam*, stypendium Socrates/Erasmus w Instytucie Badania Środowiska (IVM), (1.09. 2000 – 1.03. 2001)
- [2] Francja, Tuluza, *Meteo-France*, wizyta robocza, (5/2005)
- [3] USA, Colorado, Boulder, *National Center for Atmospheric Research*, szereg wizyt roboczych i bliska współpraca z ekspertami z NCAR, (7-8/2006, 1/2007, 7-8/2007, 1/2008, 7-8/2008, 7-8/2009, 7-8/2009, 7-8/2010, 7-8/2011, 7-8/2012, 7-8/2013, 7-8/2014)
- [4] Japonia, *Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology (JAMSTEC)*, dwie wizyty robocze związane z przygotowaniem publikacji i programu komputerowego do modelowania dynamiki kropelek chmurowych w przepływach turbulentnych z uwzględnieniem pełnej reprezentacji oddziaływań aerodynamicznych (5/2013, 5/2014)
- [5] USA, Wirginia, Norfolk, *Old Dominion University*, współpraca związana z przygotowaniem publikacji dotyczącej prędkości osiadania kropelek chmurowych w przepływach turbulentnych. (8/2014)

- [6] Współpraca z europejskim konsorcjum COSMO (*Consortium for Small-scale Modeling*) 13.01.2009 – obecnie
- [7] Współpraca z doktorem Hosseinem Parishani z *Department of Earth System Science, University of California, Irvine, USA*, 2014 – obecnie
- [8] Współpraca z profesorem Alberto Alisedą z *University of Washington, Seattle, Washington, USA*, 2010
- [9] Współpraca z doktorem Marcinem Kurowskim z *Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, Kalifornia*
- [10] Współpraca z profesorem Piotrem Smolarkiewiczem z *European Centre For Medium-Range Weather Forecasts, Reading, UK*

## **9. Projekty badawcze wykonane po doktoracie i aktualnie realizowane**

- [1] UMO-2011/03/B/ST6/03500 Grant Narodowego Centrum Nauki. Tytuł projektu: *Metody i algorytmy organizacji obliczeń w klasie anelastycznych modeli numerycznych dla przepływów geofizycznych na nowoczesnych architekturach komputerowych z realizacją w modelu EULAG*. (główny wykonawca w IMGW-PIB).
- [2] AGS-1139743, ATM-0114100, ATM-0527140, ATM-0730766, OCI-0904534, CRI-0958512 i ATM-0731248 – National Science Foundation, USA (wykonawca).
- [3] CISL-35751010, CISL-35751014 i CISL-35751015 Zasoby obliczeniowe udostępnione przez *National Center for Atmospheric Research (Boulder, USA)* – *Computational and Information Systems Laboratory* (wykonawca).
- [4] ATM-130019 Zasoby obliczeniowe udostępnione przez *Texas Advanced Computing Center, USA* (wykonawca).
- [5] G49-15 Zasoby obliczeniowe udostępnione przez Interdyscyplinarne Centrum Modelowania (ICM), Polska (wykonawca).
- [6] Kierownik projektu priorytetowego CELO realizowanego w ramach współpracy z konsorcjum COSMO (obecnie).

## **10. Najważniejsze międzynarodowe wyróżnienia wynikające z prowadzenia badań naukowych**

- [1] Nagroda za najlepszy plakat naukowy na międzynarodowej konferencji *Parallel Processing and Applied Mathematics – PPAM* za plakat *A study on parallel performance of the EULAG F90/95 code*, Toruń 2011.
- [2] Dyplom za najlepszy artykuł naukowy na międzynarodowej konferencji *International Conference on Engineering Mathematics and Physics*. Tytuł artykułu *Porting Multiscale Fluid Model EULAG to Modern Heterogeneous Architectures*, Hong Kong, 2014.

## **11. Recenzowanie projektów międzynarodowych lub krajowych oraz publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych**

Recenzje artykułów zgłoszonych do czasopism międzynarodowych będących na liście JCR, m.in. *Fluid Dynamics Research* i *New Journal of Physics* oraz spoza listy JCR, np. *International Journal of Modeling and Optimization*.

## **12. Działalność dydaktyczna**

- [1] Pracownia komputerowa, zajęcia ze studentami pierwszego roku Nauczycielskiego Kolegium Fizyki, Uniwersytet Warszawski, Polska.
- [2] Fizyka środowiska, pracownia dla studentów Międzywydziałowych Studiów Ochrony Środowiska (MSOŚ), Uniwersytet Warszawski, Polska.
- [3] Pomoc dydaktyczna, *University of Delaware*, USA.

## **13. Przynależność do organizacji i stowarzyszeń związanych z działalnością zawodową**

- [1] Członek American Physical Society
- [2] Członek European Mechanics Society
- [3] Członek American Meteorological Society
- [4] Członek programu COST Action MP0806 "Particles in Turbulence"

## **14. Współpraca w organizowaniu konferencji międzynarodowych**

- [1] 3rd International Conference on Engineering Mathematics and Physics, Hong Kong, PRCh, 14 – 15 June 2014.
- [2] 4<sup>th</sup> International Conference on Engineering Mathematics and Physics, Kuala Lumpur, Malaysia, 11 – 12 June 2015.
- [3] European Conference on Design, Modeling and Optimization, Paris, France, 15 – 17 February 2017.

Warszawa, 27 marca 2017 r.

  
Bogdan Rosa