

Streszczenie

Procesy termodynamiczne zachodzące w atmosferze kształtują pogodę i klimat danego obszaru. Na przebieg tych procesów ma wpływ wiele czynników, między innymi: orografia, bliskość zbiorników wodnych, prądy oceaniczne, sposób użytkowania gruntów oraz obecność chmur. Rola chmur w atmosferze ziemskiej rozciąga się na szeroki zakres skal czasowych i przestrzennych. Ilościowy opis tych wieloskalowych zjawisk jest trudnym zadaniem badawczym. Poznanie mechanizmów tak złożonych procesów wymaga użycia specjalnych układów doświadczalnych oraz zaawansowanych technik modelowania. Wiedza w tym zakresie jest niezbędna do opracowania ulepszonych modeli numerycznych do prognozowania pogody i klimatu. W tym kontekście szczególne zainteresowanie budzą efekty mikrofizyczne chmur, w szczególności te związane z oddziaływaniami kropla–kropla i kropla–powietrze. Te drobnoskalowe procesy mają wpływ na częstotliwość zderzeń kropelek a w konsekwencji na tempo formowania opadu atmosferycznego. Niestety nie mogą być one reprezentowane (rozwiązywane) *explicite* w mezoskalowych numerycznych modelach prognozy pogody (NWP – *numerical weather prediction*). Wynika to z ogromnej różnicy pomiędzy rozdzielczością poziomą współczesnych modeli NWP, $\mathcal{O}(1 \text{ km})$, a typowymi rozmiarami kropelek chmurowych, $\mathcal{O}(10 \text{ }\mu\text{m})$. Dlatego też procesy w małych (nierozwiązywanych) skalach można uwzględnić jedynie w sposób statystyczny, to znaczy stosując tzw. parametryzacje. Parametryzacje są jednak istotnym źródłem niepewności prognoz numerycznych.

Opracowanie bardziej realistycznych parametryzacji dla mezoskalowych modeli NWP wymaga szczegółowej wiedzy o drobnoskalowych procesach chmurowych. Do ich ilościowego opisu niezbędne jest odpowiednie narzędzie numeryczne. W ostatnich dziesięcioleciach powszechne uznanie zyskały bezpośrednio symulacje numeryczne (DNS – *direct numerical simulations*). Narzędzie to jest przydatne do modelowania szerokiego zakresu skal przepływów, aż do tych najdrobniejszych tj. skal Kołmogorowa. W połączeniu ze śledzeniem cząstek w podejściu lagranżowskim (LPT – *Lagrangian particle tracking*) i przybliżeniem cząstek punktowych metoda ta umożliwia precyzyjne modelowanie ruchu dużej liczby kropelek w przepływach turbulentnych. Dodatkowo takie podejście można uzupełnić o oddziaływanie aerodynamiczne kropla–kropla (AI – *aerodynamic interaction*), np. poprzez superpozycję zaburzeń Stokesa pochodzących od sąsiednich kropelek. Taka metoda prowadzi do tzw. hybrydowych DNS (HDNS). Choć HDNS dokładnie reprezentują oddziaływanie aerodynamiczne dla dużych odległości separacji (kropelek) to nie uwzględnia silnych sił smarowania krótkiego zasięgu. W związku z tym jednym z głównych celów tej rozprawy jest poprawa dokładności reprezentacji oddziaływań aerodynamicznych w HDNS poprzez włączenie efektów smarowania. Oryginalnie zaproponowana metoda uwzględnienia AI została następnie użyta do modelowania statystyk zderzeniowych rozproszonych układów kropelek w homogenicznej i izotropowej turbulencji. Statystyki te to jądro zderzeniowe

(tempo zderzeń), średnia radialna prędkość względna (RRV – *radial relative velocity*) pomiędzy kroplami oraz funkcja rozkładu radialnego (RDF – *radial distribution function*), która jest miarą grupowania się przestrzennego kropeł. Uzyskane wyniki dowodzą, że przy braku grawitacji siły smarowania redukują RRV i jądro zderzeniowe, ale zwiększają RDF (grupowanie) na odległościach porównywalnych w rozmiarem kropeł.

Wydajność obliczeniowa tego masowo zrównoleżonego kodu HDNS, z innowacyjną metodą reprezentowania oddziaływań aerodynamicznych, została zbadana przez wykonanie pomiarów i analiz czasów wykonywania głównych operacji numerycznych. Zaobserwowano, że czas obliczeń wzrasta nie tylko wraz z liczbą i wielkością cząstek, ale także z wielkością „obszaru smarowania”. Co więcej, symulacje z użyciem większych domen wykazały poprawę wydajności przy zastosowaniu większej liczby procesorów. Uzyskane dane są przydatne w planowaniu eksperymentów numerycznych, zwłaszcza tych z siatkami o większych rozdzielczościach przestrzennych.

Kontynuując badania nad ulepszeniem reprezentacji AI skupiono się na dwóch innych aspektach związanych z siłami smarowania krótkiego zasięgu. Pierwszy z nich dotyczy efektów nieciągłości ośrodka w przepływie powietrza pomiędzy kroplkami, gdy wielkość szczeliny jest porównywalna ze średnią drogą swobodną cząsteczek gazów wchodzących w skład powietrza. Drugi aspekt odnosi się do wewnętrznej cyrkulacji wody wewnątrz kropeł. Cyrkulacja ta jest wywołana naprężeniem stycznym działającym na ich powierzchni. W tym podejściu krople traktuje się jako nieodkształcalne kuliste objętości płynu, które posiadają ruchome ścianki w otaczającym je strumieniu powietrza. Obydwa podejścia skutkują zmniejszeniem współczynnika oporu w sytuacji, gdy krople zbliżają się do siebie. W następstwie prowadzi to do zwiększenia prawdopodobieństwa ich zderzeń.

Aby ocenić różnicę pomiędzy dwoma modelami, obliczono współczynnik wychwytu pary kropeł wody opadających grawitacyjnie w nieruchomym powietrzu. Obydwa efekty prowadzą do zwiększenia współczynnika wychwytu; jednakże poprawka uwzględniająca „smarowanie nieciągłe” przekłada się na większe wartości niż „model cząstki płynnej”. Wyniki pokazują również, że przy większej bezwładności kropeł znaczenie „nieciągłego smarowania” lub wewnętrznej cyrkulacji wody zanika w porównaniu z efektami bezwładnościowymi. Wyniki te pozwalają wstępnie ocenić wpływ reprezentacji AI na dynamikę zderzeń, torując drogę do wykorzystania tych modeli w układach kropeł oddziałujących w przepływach turbulentnych.

Podążając tym nurtem w kolejnym etapie zbadano wpływ różnych modeli AI na statystyki zderzeniowe kropeł poruszających się w przepływach turbulentnych. Uzyskane wyniki porównano ze standardowym HDNS, tj. bez sił smarowania oraz symulacjami, w których całkowicie pominięto wpływ AI. Przeprowadzone eksperymenty numeryczne doprowadziły do szeregu oryginalnych wyników i wniosków. Po pierwsze określono ilościowo konsekwencje uwzględnienia efektów smarowania w AI kropla–kropla. Po drugie udowodniono, że traktowanie powietrza, jako ośrodka ciągłego jest podejściem wystar-

czająco dokładnym do modelowania dynamiki średniej wielkości kropeł chmurowych. Po trzecie założenie dotyczące cząstek sztywnych dla kropełek wody w powietrzu jest wystarczająco precyzyjne i nie ma potrzeby uwzględniać cyrkulacji wewnętrznej wody w modelowaniu ich statystyk zderzeniowych. Przeprowadzone symulacje obejmują szeroki zakres udziałów masowych kropeł, dzięki czemu można ocenić również wpływ zawartości wody w stanie ciekłym. Ponadto wyniki symulacji pozwalają na ocenę wpływu grawitacji na częstość zderzeń kropeł i inne parametry statystyczne.

Alternatywną metodą numeryczną pozwalającą uwzględnić AI kropeł jest włączenie do modelu dwustronnego sprzężenia pędu. Takie podejście umożliwia reprezentowanie wzajemnych oddziaływań pomiędzy płynem i cząstkami. W rezultacie nie tylko przepływ powietrza wpływa na ruch kropełek, ale także obecność kropeł moduluje przepływ turbulentny. W sensie matematycznym jest to realizowane poprzez odpowiedni człon źródłowy w równaniach pędu (Naviera–Stokesa). Wyniki symulacji zostały zweryfikowane przez porównanie z wynikami analogicznych symulacji przeprowadzonych przy rozważaniu jednostronnego sprzężenia pędu. Zaobserwowano, że wraz ze wzrostem liczby cząstek (udziału masowego) rozkład przestrzenny kropeł staje się bardziej równomierny (mniejsza RDF) i następuje niewielki wzrost średniej prędkości względnej pomiędzy kropełkami (większa RRV). Dodatkowo symulacje przeprowadzono na siatkach o różnych rozdzielczościach, odpowiadających różnym objętościom domen. Ich celem było zbadanie wpływu zakresu skal turbulentnych, określonych liczbą Reynoldsa opartej na mikroskali Taylora, na fazę rozproszoną. Tu pojawia się ważna kwestia dotycząca dużego kosztu obliczeniowego takich symulacji, w szczególności tych z dużymi udziałami masowymi kropeł. Modelowanie takich układów wymaga stosowania parametryzacji, jak np. model super-cząstki. Taka parametryzacja znacząco redukuje złożoność numeryczną, ale niestety wpływa na pogorszenie dokładności wyników.

Wyniki i dyskusje przedstawione w tej rozprawie stanowią szczegółową i rozbudowaną analizę wpływu oddziaływań aerodynamicznych na kinematykę i dynamikę kropeł chmurowych poruszających się w turbulentnym powietrzu. Badania te są ważnym krokiem w pełniejszym zrozumieniu mikrofizyki chmur i torują drogę do opracowania dokładniejszych parametryzacji procesów chmurowych w modelach NWP.

Słowa kluczowe: krople chmurowe, turbulencja, DNS, oddziaływania aerodynamiczne, siły smarowania, statystyki zderzeniowe, dwustronne sprzężenie pędu, mikrofizyka chmur, inżynieria środowiska, obliczenia wysokiej wydajności