

Bernard Geurts

Faculteit der Toegepaste Wiskunde, Universiteit Twente

Postbus 217, 7500 AE Enschede

b.j.geurts@math.utwente.nl

Overzichtsartikel

Turbulente

Het mengen van onderling niet-oplosbare vloeistoffen geeft aanleiding tot complexe stromingsverschijnselen. Hiervan bestaan tal van voorbeelden uit de chemische, farmaceutische en cosmetische industrie. Maar ook in diverse biologische processen of, dichter bij huis, tijdens voedselbereiding in de keuken is een goede menging vaak essentieel. Menging in een turbulente stroming verloopt aanzienlijk sneller dan zogenaamde 'laminaire' menging en staat mede hierdoor sterk in de belangstelling. Bernard Geurts, hoogleraar Dynamics of Complex Fluids aan de Faculteit der Toegepaste Wiskunde van de Universiteit Twente, beschrijft hoe dergelijke processen gesimuleerd en gemodelleerd kunnen worden. In het bijzonder gaat hij in op de vraag hoe de primaire dynamische verschijnselen kunnen worden behouden bij een meer globale en daarmee minder rekenintensieve aanpak.

Menging en dispersie van viskeuze vloeistoffen zijn het resultaat van een complex samenspel tussen vloeistofstroming aan de ene kant en materiaaleigenschappen aan de andere kant. Beide elementen tesamen bepalen hoe gebiedjes met de te vermengen vloeistoffen door de stroming worden meegevoerd, erdoor worden 'uitgerekt', 'opgevouwen', in kleinere gebiedjes worden opgebroken of zich vanuit kleinere gebiedjes samenvoegen, ook wel *coalesceren* genoemd. Dit lokale opbrek- en coalescentiegedrag is relatief goed begrepen. Echter, het verweven van deze kennis met

macroscopische eigenschappen van de stroming die zich onder meer uiten in chaotische, turbulente verschijnselen, is daarentegen nog verre van compleet, zie [1]. In dit artikel zal een schets van turbulente mengproblemen en hun globale, geregulariseerde large-eddy beschrijving worden gegeven.

Laminaire en turbulente menging

Een eerste indruk van de complexiteit van een alledaagse vloeistofstroming krijgt men door voorzichtig wat koffiemelk in een kopje koffie te gieten en vervolgens behoedzaam met een lepeltje de koffie te roeren. Aanvankelijk kan men nog duidelijk herkennen op welke plek men de koffiemelk in het kopje heeft gegoten en er is nog een heldere tweedeling zichtbaar tussen de lichtgekleurde koffiemelk en de donkere koffie. De stroming in het kopje, en het mengen van de twee vloeistoffen, worden door vrij grote structuren in de stroming gekenmerkt, typisch in de orde van de diameter van het kopje. Dit is karakteristiek voor zogeheten 'laminaire' stroming. Door langzaam verder te roeren wordt deze structuur almaar complexer en het onderscheid tussen lichte en donkere gebieden in de vloeistof wordt gaandeweg moeilijker vast te stellen. Er kan bijvoorbeeld een gedetailleerde, gelaagde structuur ontstaan zoals in figuur 1. Als het roeren steeds vrij langzaam plaatsvindt dan blijft de stroming gedurende het gehele proces laminair en zal moleculaire warmte-beweging voor

menging

het diffusieve transport op kleine schaal moeten zorgen. Dit zogenaamde diffusieve transport verloopt in de meeste gevallen veel te langzaam om van enig praktisch nut te zijn. (Uw koffie zou inmiddels al koud zijn geworden.) Daarom zullen we ons richten op zogenaamd convectief gedomineerd transport dat voor een veel snellere menging kan zorgen vanwege het ontstaan van turbulentie in de stroming.

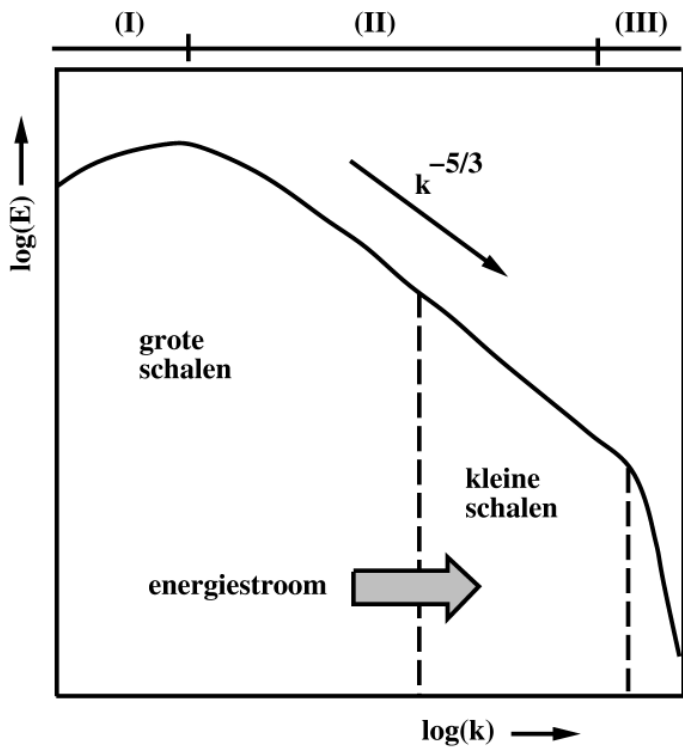
Om het mengproces te versnellen kan men met meer kracht in het kopje roeren of tijdens het roeren op een aantal momenten abrupt de richting van het roeren omdraaien. Hierdoor voert men sneller energie toe aan de stroming en kan men duidelijk waarnemen dat het mengproces bijzonder veel sneller verloopt. In deze gevallen is de stroming aanzienlijk complexer gemaakt door het roeren en vertoont turbulente eigenschappen. Dit is een mooi voorbeeld waarin een turbulente stroming grote pluspunten heeft vergeleken met een laminaire stroming. Hoewel men vaak hinder ondervindt van het turbulent worden van een stroming, bijvoorbeeld uitgedrukt in een verhoogde weerstand van de auto, de boot of het vliegtuig waarmee we ons willen verplaatsen, is turbulentie een welkome ondersteuning om in korte tijd goede menging te krijgen. In tal van toepassingen en processen is het snel en tamelijk volledig homogeen worden van een mengsel van groot belang. Daarbij kan men bijvoorbeeld denken aan de farmaceutische industrie waarin men de samenstelling van medi-

cijnen binnen vrij nauwe grenzen wil kunnen garanderen, of in levensmiddelen-industrie waarin men de smaak, voedingswaarde en consistentie van een product zo goed mogelijk uniform wil houden.

In een turbulente stroming zijn de convectieve effecten zoveel sterker dan de viskeuze bijdragen dat de energietoevoer aanleiding geeft tot het ontstaan van een continu spectrum aan



Figuur 1 Illustratie van complexe laminaire menging die na enige tijd ontstaat. De verdeling vertoont verschillende kenmerken van een fractale verzameling [2].



Figuur 2 Het Kolmogorov beeld van een turbulente stroming. Energie E als functie van de afmeting $k \sim 1/l$ van de wervelstructuren. Het spectrum van een turbulente stroming is onderverdeeld in drie gebieden. In (I) bevinden zich de grotere lengteschalen, (II) is het inertiaal gebied en (III) het viskeuze gebied. Gemiddeld gesproken is er een energie-overdracht van grotere naar kleinere structuren in de energie-cascade.

stromingsdetails. Daarbij kan men structuren met zeer diverse lengteschalen herkennen. De structuren met vrij grote lengteschalen corresponderen direct met de concrete bewegingen van het lepeltje en de dimensies van het kopje. Deze structuren zijn derhalve probleem-specifiek. Daarnaast ontstaan meer gelocaliseerde vloeistofbewegingen uit de interacties tussen stromingsdetails met verschillende lengteschalen. Zo kan de interactie tussen een aantal wervels in de stroming aanleiding zijn voor het ontstaan van kleinere wervels en omgekeerd. Dit proces dat de *energie-huishouding* in een turbulente stroming kenschetst, staat beter bekend als de zogenaamde *energie-cascade* waarbij energie die is toegevoerd in de grotere lengteschalen, gemiddeld gesproken, door convectieve effecten verdeeld raakt over een scala aan kleinere stromingsdetails.

Aan de hand van de viskeuze Burgers-vergelijking kunnen de primaire dynamische effecten nader worden geïllustreerd. Voor het gemak kijken we in deze illustratie naar de één-dimensionale situatie die voldoende is om de belangrijkste bijdragen aan te wijzen. De Burgers-vergelijking is een zogenaamde behoudswet die een aantal aspecten van vloeistofstroming modelleert. Deze vergelijking is in dimensieloze variabelen gegeven door

$$\partial_t u + \partial_x \left(\frac{1}{2} u^2 \right) - \frac{1}{Re} \partial_{xx} u, \equiv B(u) = 0 \quad (1)$$

waarin u geïnterpreteerd kan worden als de geschaalde vloeistof-snelheid, B de Burgers-operator aangeeft die we later nog zullen gebruiken, Re het zogenaamde Reynolds-getal is en t en x de tijd respectievelijk ruimtelijke coördinaat weergeven met ∂_t en ∂_x de corresponderende partiële afgeleides. De tweede term aan de linkerkant van (1) kan ook geschreven worden als $u \partial_x u$ en levert de

(niet-lineaire) convectieve bijdrage tot de evolutie. Deze term is verantwoordelijk voor het optreden van gecompliceerde, lokaal mogelijk snel variërende oplossingen die vanuit relatief eenvoudige begincondities kunnen ontstaan. De derde term aan de linkerkant van (1) geeft de (lineaire) viskeuze bijdrage tot de totale flux. Deze term geeft aanleiding tot het 'uitsmeren' van kleinere details in een oplossing en zorgt voor dissipatie.

Wanneer we ons richten op een structuur in de oplossing met lengteschaal l dan kan worden aangetoond dat de orde-grootte van de convectieve flux in de dimensieloze formulering $\sim l^{-1}$ terwijl de grootte van de viskeuze flux gegeven is door $\sim Re^{-1} l^{-2}$. Voor voldoende grote structuren en bij voldoende groot Reynolds-getal wordt de evolutie gedomineerd door de convectieve flux en zijn de uitsmerende viskeuze bijdragen verwaarloosbaar. Turbulente stromingen gaan juist gepaard met een hoog Reynolds-getal waarbij een sterk wervelende stroming ontstaat terwijl laminaire stroming met een laag Reynolds-getal correspondeert en veel meer 'stroperig' is. Convectief gedomineerde dynamica zal optreden indien $l^{-1} \gg Re^{-1} l^{-2}$ ofwel $l \gg Re^{-1}$. Pas bij voldoende kleine waarden van l zal er sprake zijn van significante viskeuze bijdragen tot de dynamica. Concreet betekent dit dat in één en dezelfde stroming de grotere structuren in de stroming effectief met viscositeitsloze dynamica kunnen worden geïnterpreteerd terwijl viskeuze dynamica altijd zal domineren voor voldoende kleine structuren.

Het samenspel van convectieve en viskeuze invloeden is ook kenmerkend voor de Navier-Stokes vergelijkingen die de stroming van vloeistoffen in detail beschrijven. Het kan worden gekarakteriseerd in het Kolmogorov beeld van een turbulente stroming zoals in figuur 2 is samengevat. Bij voldoende hoge Reynoldsgetallen ontstaat een zogenaamd inertiaal gebied met stromingsstructuren die aan de ene kant veel kleiner zijn dan de stromingsgeometrie (zeg de diameter van het koffiekopje) maar tegelijkertijd veel groter zijn dan de zogenaamde dissipatieve lengteschaal vanaf welke de viskeuze flux domineert. Deze structuren in het inertiaal gebied hebben een aantal in het oog springende eigenschappen. Hun evolutie wordt voornamelijk door convectieve dynamica beheerst. Bovendien wordt verondersteld dat deze structuren universeel zijn. In het bijzonder wordt daarmee bedoeld dat hun eigenschappen niet direct samenhangen met probleem-specifieke grotere stromingspatronen. Deze dynamische structuren komen in elke turbulente stroming op min of meer vergelijkbare wijze voor. Ze vervullen de rol van doorgeefluik voor de energie die er via de grotere structuren wordt ingebracht en door viskeuze dissipatie bij de kleinere stromingsdetails via warmtegeneratie verdwijnt. Dit inertiaal gebied vormt het terrein waar *large-eddy* modellering zich met name op richt in de verwachting dat de dynamische consequenties van de universele structuren in dit gebied met relatief eenvoudige modellen kunnen worden geparametriseerd.

Volledige en globale beschrijvingen

Een belangrijk probleem uit de (numerieke) mathematische fysica dat ook centraal staat in tal van technologische toepassingen is het kwalitatief begrijpen en voldoende nauwkeurig beschrijven van turbulente stromingen. Om althans in principe zeker te zijn van nauwkeurige voorspellingen kan men teruggrijpen op een referentie-methode die op de volledige, ongemodelleer-

de Navier-Stokes vergelijkingen is gebaseerd. Deze aanpak staat bekend als directe numerieke simulatie (DNS). Hiermee kunnen alle details van de stroming worden beschreven. De volledige rekenkracht van moderne grootschalige rekenapparatuur dient bij DNS te worden ingezet om een betrouwbare oplossing van de stromingsvergelijkingen te verkrijgen zonder verdere benaderingen anders dan van numerieke aard.

De complexiteit van turbulente stromingen impliceert dat alleen relatief eenvoudige stromingen daadwerkelijk nauwkeurig kunnen worden gesimuleerd met de beschikbare computers. Een interessante introductie in deze simulatie-aanpak is recent in dit tijdschrift verschenen, zie [3]. Het aantal vrijheidsgraden van een turbulente stroming kan wat nader worden gespecificeerd. Het spectrum aan lengteschalen varieert van een *integrale* schaal L (de diameter van ons koffiekopje) tot en met een *dissipatieve* lengteschaal l_d . Via Kolmogorov's theorie [4] kan men aangeven dat L/l_d schaalt met $Re^{3/4}$. Hiermee is het aantal roosterpunten N dat in 3D noodzakelijk is in een rekenrooster met voldoende ruimtelijk oplossend vermogen te schrijven als

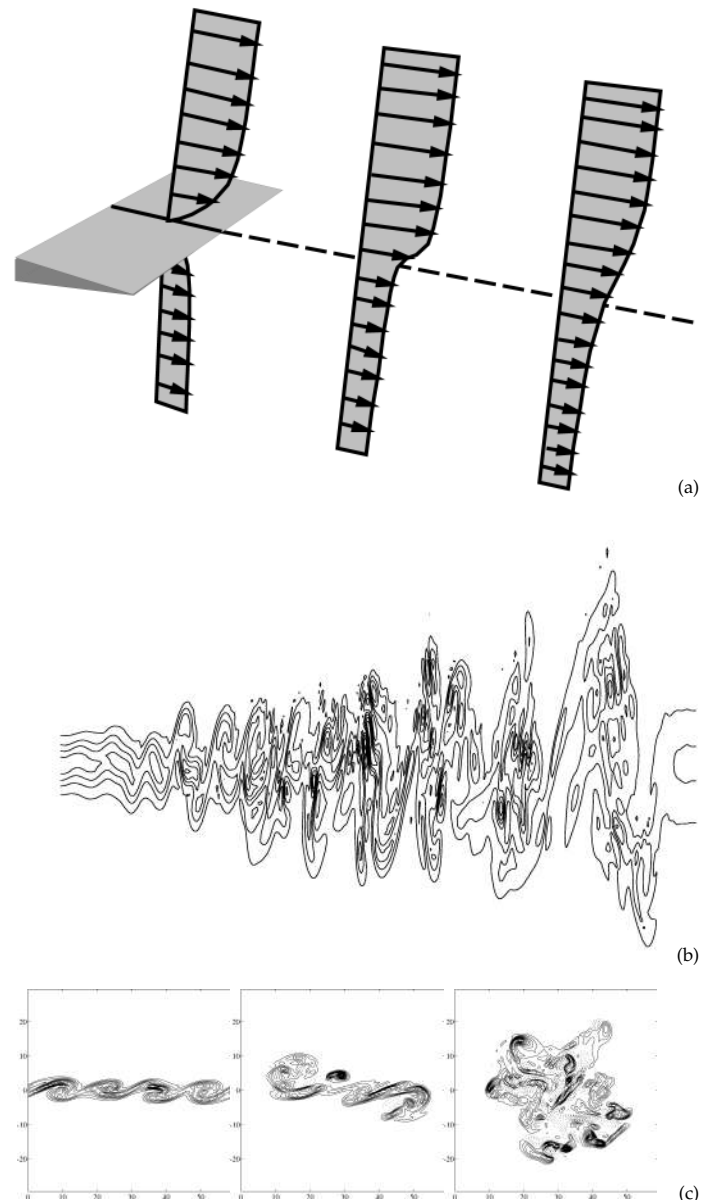
$$N = \left(\frac{L}{l_d/n} \right)^3 \sim n^3 Re^{9/4}, \quad (2)$$

waarbij n het aantal roosterpunten is dat voor de beschrijving van structuren van schaal l_d vereist is (typisch $n \approx 3 - 5$). Het computergeheugen nodig voor een turbulente stroming neemt snel een astronomische omvang aan; met elke factor 10 toename in het Reynoldsgetal moet de resolutie worden opgehoogd met een factor $10^{9/4} \approx 175$. Als we de tijdsintegratie in de overwegingen meenemen dan schaalt de hoeveelheid werk zelfs als $\sim Re^3$. Hoewel computers de afgelopen decennia gemiddeld elke 5-10 jaar een factor 10 sneller zijn geworden illustreert deze schalingswet een groot probleem voor DNS van praktisch relevante problemen. Zelfs een factor $10^3 - 10^4$ toename in verwerkingssnelheid levert niet veel meer dan ongeveer een factor 10 toename in Reynoldsgetal bij gelijkblijvende rekentijd, die overigens al snel kan oplopen tot enkele honderden uren op een moderne supercomputer. Het enige alternatief is de fysische beschrijving te vereenvoudigen en de turbulente effecten te modelleren. Dit maakt het probleem numeriek eenvoudiger en tegelijkertijd veel rijker geschakeerd door verbanden met fenomenologische fysica en mathematische modellering. We gaan hier verderop nader op in.

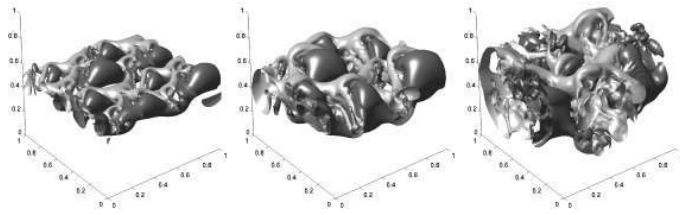
Wanneer we terugkeren naar het mengprobleem dan kunnen we ons afvragen of de directe simulatie aanpak zinvol kan worden toegepast. In het algemeen zullen mengprocessen zich afspelen in vrij gecompliceerde stromingsdomeinen waarbij tal van parameters de precieze menging zullen beïnvloeden. Als we ons richten op het begrijpen en in kaart brengen van de belangrijkste fenomenen en mechanismen dan kunnen we in eerste instantie een veel eenvoudiger model beschouwen. Bij het bepalen van zo'n meer gestyleerde modellering is het voldoende om een eenvoudige afschuifstroming te bekijken. Een karakteristiek model voor zo'n menglaag kan men experimenteel laten ontstaan door twee parallelle vloeistofstromen, elk met hun eigen stroomsnelheid, samen te brengen. In figuur 3 (a) is dit geschetst. Als gevolg van de snelheidsverschillen die boven en onder de scheidingsplaat heersen ontstaan zogenaamde afschuifspanningen wanneer de vloeistofstromen worden samengebracht. Kleine verstoringen worden in dit snelheidsveld danig versterkt en wanneer we ons met de stroming mee stroomafwaarts bewegen dan zien we uit

deze groeiende verstoringen karakteristieke wervelpatronen ontstaan waarbij vloeistof uit de onderste laag met die uit de bovenste laag wordt vermengd en omgekeerd. We kunnen deze stroming volledig modelleren in een numeriek model met behulp van een geschikte behandeling van de randen van het rekendomein [5]. Een momentopname van de oplossing is in figuur 3 (b) te zien.

Het ruimtelijke menglaagmodel geeft direct toegang tot het bestuderen van menging in een getrouwe weergave van een experimentele situatie. Echter, omdat het volledige probleem in één keer wordt gemodelleerd is de benodigde rekeninspanning van zo'n simulatie zeer hoog en is men in de praktijk beperkt tot relatief lage Reynoldsgetallen. Er is een aanvullende vereenvoudiging mogelijk die ons probleem nog wat verder stileert maar ons deson-



Figuur 3 Schets van de stromingsgeometrie in een ruimtelijke menglaag die zich stroomafwaarts van een scheidingsplaat ontwikkelt (a). Daaronder is een momentopname van de vorticeit opgenomen van een directe simulatie van deze stroming (b). Een aantal corresponderende momentopnames ($t = 20, 40, 80$ van links naar rechts) verkregen met een 'temporal' menglaagmodel zijn opgenomen in (c). Dit illustreert dat de stroming verder stroomafwaarts in het ruimtelijke model voor wat de stromingsverschijnselen betreft ruwweg overeenstemt met de ontwikkelende stroming in het 'temporal' model.



Figuur 4 Momentopnames van de snelheid in de verticale richting op $t = 20$, $t = 40$ en $t = 80$ (van links naar rechts) in een *temporal* menglaag. De lichte (donkere) contouren corresponderen met opwaartse (neerwaartse) stroming.

danks in staat stelt om de belangrijkste verschijnselen te bestuderen. Daartoe stellen we ons voor dat we met de gemiddelde snelheid van de twee vloeistofstromen meebewegen en in dit nieuwe coördinatenstelsel de ontwikkeling van de stroming registreren. Met behulp van periodieke randvoorwaarden in het meebewegende venster dat we op deze manier over de stroming leggen, komen we tot de kanonieke zogenaamde *temporal* menglaag. De ontwikkeling van de oplossing in de tijd in dit laatste model correspondeert goed met de ruimtelijke ontwikkeling in het meer complete ruimtelijke model zoals in figuur 3 (c) is gesuggereerd. Het grote voordeel van het *temporal* model is dat de benodigde rekeninspanning aanzienlijk is teruggebracht en goede referentiesimulaties mogelijk zijn. Een driedimensionale indruk van de oplossing is in figuur 4 opgenomen.

Uit bovenstaande schattingen van het benodigde aantal roosterpunten in (2) komt naar voren dat elke nu bekende numerieke methode zal struikelen over de complexiteit van turbulente stroming bij voldoende hoge Reynoldsgetallen. Het alternatief van een minder gedetailleerde beschrijving van de turbulente stroming dient zich derhalve aan. Hiervoor zijn in principe diverse 'gemiddelde' beschrijvingen ontwikkeld, bijvoorbeeld gebaseerd op een statistische representatie van de turbulentie, zoals in 'Reynolds gemiddelde' formuleringen. Wij zullen ons hier richten op zogenaamde *large-eddy simulaties* (LES) die gebaseerd zijn op een ruimtelijk gefilterde weergave van de stroming. Hierbij probeert men een geregulariseerde, meer globale, beschrijving van de complexe vloeistofdynamica te bepalen. Deze globale beschrijving kan men op een systematische manier ontwikkelen door gebruik te maken van een ruimtelijk convolutie filter. Met een dergelijk filter kan men via middeling over kleine volumes in de vloeistof een indruk van de oplossing krijgen waaruit de kleinere structuren zijn verwijderd. Ter illustratie kijken we naar een zogenaamd *top-hat* filter $u \rightarrow \bar{u}$ waarbij

$$\bar{u}(x, t) = G * u = \int_{-\infty}^{\infty} G(x - \xi) u(\xi, t) d\xi = \frac{1}{\Delta} \int_{x-\Delta/2}^{x+\Delta/2} u(\xi, t) d\xi.$$

Hierin is Δ de extern gekozen breedte van het filter en G de kern. Andere populaire filters in LES zijn het Gaussische filter en het spectrale filter die elk hun eigen, genormeerde kern hebben. In drie dimensies gebruiken we productfilters waarbij we drie ééndimensionale filters na elkaar toepassen. Signalen die langzaam variëren over afstanden Δ worden nauwelijks door het filter gewijzigd terwijl snel variërende structuren over afstanden Δ na toepassing van het filter vrijwel geheel zijn verwijderd. In figuur 5 is het effect van ruimtelijke filtering geïllustreerd voor de situatie die op $t = 80$ is ontstaan in de *temporal* menglaag. We zien duidelijk een afname van het belang van de kleinere structuren bij

toenemende breedte van het filter.

Het zal duidelijk zijn dat een gefilterde oplossing met minder rekeninspanning kan worden behandeld. In het bijzonder kan men de gefilterde oplossing met aanzienlijk minder roosterpunten toch voldoende nauwkeurig numeriek bepalen. Tegelijkertijd zien we dat de zo verkregen oplossing minder informatie zal bevatten omtrent de stroming en we dus beperkt worden in de voorspellingen die we nog nauwkeurig kunnen doen. Het bepalen van een goede balans tussen deze twee eisen is essentieel bij large-eddy simulatie. Bovendien ontstaan door het filteren van de niet-lineaire termen nieuwe termen in de large-eddy vergelijkingen die niet uitsluitend in de gefilterde oplossing kunnen worden uitgedrukt. Dit is het centrale sluitingsprobleem in LES. Het is dus niet voldoende om alleen maar met minder roosterpunten te simuleren vanuit een gefilterde beginoplossing. Men zal daarnaast een directe modellering voor het sluitingsprobleem moeten introduceren.

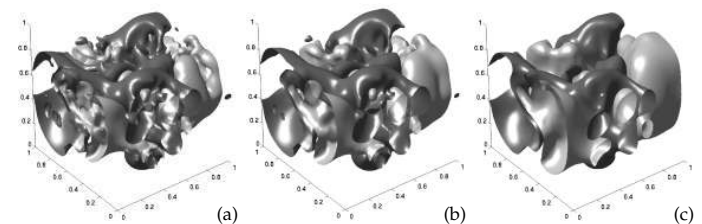
Large-eddy modellering

In de LES-aanpak introduceren we extern een nieuwe lengteschaal met de filter-breedte Δ . Hierdoor krijgt men een externe controle over de kleinere details die in de gladgestreken of geregulariseerde stroming nog worden toegestaan. Daarmee kan men in het bijzonder de numerieke behandeling minder kostbaar maken. Echter, de extern bepaalde lengteschaal Δ zal er ook voor zorgen dat de informatie die in de kleinere stromingsdetails aanwezig is, niet langer beschikbaar is en daarmee kan men verwachten dat de mate van detailering in de beschrijving afneemt. Wanneer Δ te groot zou worden, in ons geval zeg van de orde van de diameter van het koffiekopje, dan ontbreken er wellicht te veel details in de gefilterde voorspelling om nog zinnige kwantitatieve voorspellingen te kunnen doen. Er is dus een zekere limiet aan de hoeveelheid informatie die men straffeloos uit de beschrijving kan wegfilteren.

Toepassing van een filter $u \rightarrow \bar{u}$ op de Navier-Stokes vergelijkingen levert de basisvergelijkingen voor large-eddy simulatie. Traditioneel worden hiervoor filters gebruikt met de eigenschap dat $\partial_t \bar{u} = \partial_t \bar{u}$ en $\partial_x \bar{u} = \partial_x \bar{u}$ terwijl $u^2 \neq \bar{u}^2$. Ter illustratie, filteren van de Burgersvergelijking geeft aanleiding tot

$$\partial_t \bar{u} + \partial_x \left(\frac{1}{2} \bar{u}^2 \right) - \frac{1}{Re} \partial_{xx} \bar{u} = B(\bar{u}) = -\partial_x \left(\frac{1}{2} [\bar{u}^2 - \bar{u}^2] \right) = -\partial_x \tau.$$

In deze decompositie komt naar voren dat de gefilterde Burgersdynamica wordt omschreven door $B(\bar{u}) = -\partial_x \tau$ waarbij het filteren van de niet-lineaire termen aanleiding heeft gegeven tot de turbulente spanningstensor τ . In het algemene, driedimensionale geval geeft filteren aanleiding tot $\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j$



Figuur 5 Illustratie van het effect van ruimtelijke filtering met een impressie van de snelheid in de verticale richting op $t = 80$. De oplossing verkregen met directe simulatie is gefilterd met verschillende filterbreedtes: $\Delta = L/32$ (a), $\Delta = L/16$ (b) en $\Delta = L/8$ (c). De lichte (donkere) contouren corresponderen met opwaartse (neerwaartse) stroming.

als nieuwe termen in de gefilterde Navier-Stokes vergelijkingen. Deze nieuwe termen hangen zowel van de gefilterde als de ongefilderde oplossing af en kunnen dus niet worden uitgedrukt als functie van \bar{u} alleen. Het is noodzakelijk om een model $M(\bar{u})$ te introduceren voor τ . Hoe een dergelijk model M eruit ziet en op basis van welke overwegingen men tot een bepaalde constructie komt is onderwerp van levendige discussie in de literatuur.

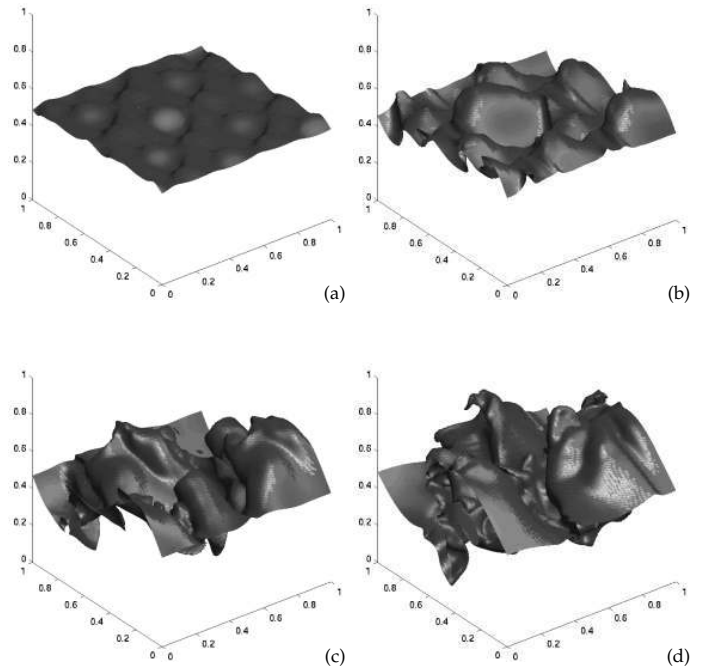
Een model voor de turbulente spanningstensor τ_{ij} wordt een *subgrid-model* genoemd om aan te geven dat het de modellering van vooral de structuren kleiner dan de filterbreedte Δ betreft. In de meeste simulaties is de filterbreedte ook direct gerelateerd aan de roosterafstand h , bijvoorbeeld $\Delta = 2h$. Met subgrid-modellering richt men zich dus op de dynamische consequenties van turbulente bewegingen die zich op schalen kleiner dan de roosterafstand (subgrid) afspelen. Voor het opstellen van een goed subgrid-model is fysisch inzicht in de eigenschappen van de kleine structuren essentieel. Daarnaast kunnen rigoreuze eigenschappen van de turbulente spanningstensor worden aangewend om de subgrid-modellering te sturen. Wanneer men eist dat concrete subgrid-modellen deze rigoreuze eigenschappen ook hebben kan men langs wiskundige weg de familie van mogelijke modellen sterk beperken. Het behoud van bepaalde transformatie-eigenschappen, zoals bijvoorbeeld Galileï-invariantie, maar ook het voldoen aan de zogenaamde realiseerbaarheids-condities en het respecteren van algebraïsche identiteiten van τ springen hierbij als voorbeelden in het oog. Om dit laatste verder toe te lichten schrijven we de turbulente spanningstensor als

$$\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j = L(S(u_i, u_j)) - S(L(u_i), L(u_j)) = [L, S](u_i, u_j)$$

in termen van de filter-operatie L en de product operator $S(u_i, u_j) = u_i u_j$. Dit laat zien dat de turbulente spanningstensor kan worden uitgedrukt als een commutator $[L, S]$ die een aantal belangrijke eigenschappen met de zogenaamde *Poisson-haak* uit de klassieke mechanica deelt. Als voorbeeld, Leibniz' regel voor de Poisson-haak is in de context van LES beter bekend als Germaino's identiteit (zie [6]) die de basis vormt van de succesvolle dynamische subgrid-modellering. Daarnaast kan worden getoond dat $[L, S]$ aan Jacobi's identiteit voldoet.

Wanneer een ruimtelijk filter op een turbulent stromingsveld wordt toegepast dan probeert men de filterbreedte $l_d \ll \Delta \ll L$ te kiezen om LES-modellering tot de universele structuren in het inertieële gebied te kunnen beperken. Hiermee bereikt men aan de ene kant een grote reductie in de rekeninspanning die nodig is voor een nauwkeurige simulatie van de LES oplossing terwijl aan de andere kant de kleinste behouden structuren in de simulatie veel kleiner zijn dan de integrale lengteschaal en gemodelleerd kunnen worden zonder expliciete verwijzing naar stromingsspecifieke details. Met de keuze $\Delta \gg l_d$ correspondeert toepassing van een ruimtelijk filter met de verwijdering van vrijwel alle kleine dissipatieve structuren uit de stroming. De energiestroom in de energie-cascade dient echter gerespecteerd te worden.

Een eerste belangrijke eis aan een goed model voor de turbulente spanningstensor is te zorgen voor een voldoende bijdrage tot de energie-afvoer door stromingsstructuren met een grootte van orde Δ . Dit kan bijvoorbeeld worden gerealiseerd door direct toegevoegde dissipatie via een zogenaamd eddy-viscositeits model. In een dergelijke modellering representeert men de dynamische consequenties van de kleinere structuren door een term van dezelfde vorm als de viskeuze flux. Naast de gebruikelijke



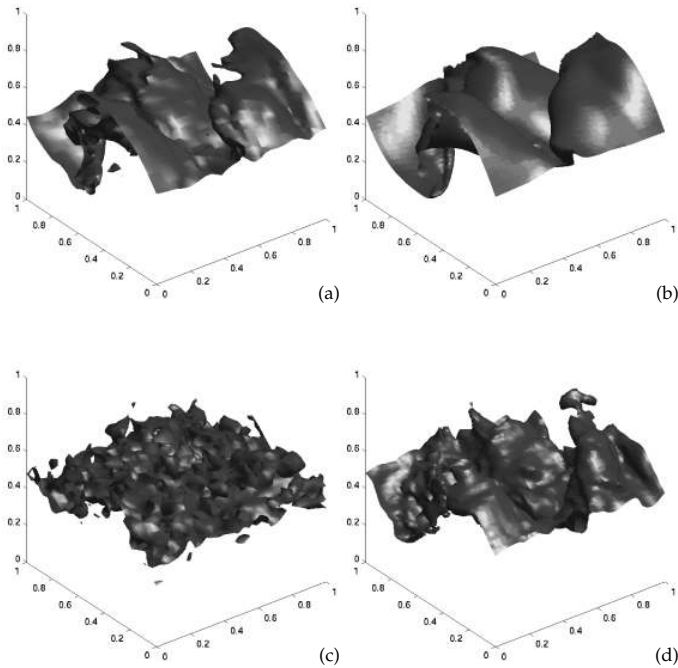
Figuur 6 Evolutie van het scheidingsvlak tussen de bovenste en onderste vloeistoflaag in een 'temporal' menglaag op $t = 10$ (a), $t = 30$ (b), $t = 60$ (c) en $t = 100$ (d).

geschaalde moleculaire viscositeit $\nu = (1/Re)$ introduceert men een turbulente viscositeit ν_t die qua dimensies te schrijven is als $\nu_t \sim L_r U_r$ waarbij L_r en U_r karakteristieke lengte- en snelheidschalen zijn. In de LES context ligt het voor de hand om $L_r \sim \Delta$ te kiezen. Voor de karakteristieke snelheid op deze lengteschaal wordt veelal, naar analogie met het bekende menglengte model van Prandtl, $U_r \sim \Delta |\partial_x \bar{u}|$ gekozen. We zien dat in dit model een lokaal hoge viscositeit resulteert uit grote lokale gradiënten in de oplossing, dat wil zeggen, met kleine, gelocaliseerde structuren in de oplossing. Door gebruik te maken van een dergelijk model worden deze gelocaliseerde structuren uitgesmeerd en wordt de voorspelde oplossing gladder. Een eenvoudig dissipatief model dat deze filosofie representeert wordt verkregen met Smagorinsky's model dat in drie ruimtelijke dimensies gedefinieerd is als:

$$M_{ij}^S = -(C_S \Delta)^2 |\sigma(\bar{\mathbf{u}})| \sigma_{ij}(\bar{\mathbf{u}}) \quad \text{met} \quad |\sigma(\bar{\mathbf{u}})|^2 = \frac{1}{2} \sigma_{ij}(\bar{\mathbf{u}}) \sigma_{ij}(\bar{\mathbf{u}}),$$

waarbij $\sigma_{ij} = \partial_i u_j + \partial_j u_i$ en de zogenaamde Smagorinsky constante C_S gelijk gesteld wordt aan 0.1.

Een tweede belangrijke eis is dat modellering alleen betrekking heeft op structuren in het inertieële gebied. Structuren in het inertieële gebied zijn voor alle turbulente stromingen duidelijk verwant en men veronderstelt dat een relatief eenvoudig, parameter vrij en algemeen bruikbaar model gevonden kan worden. Aangezien er sprake is van een gelijkvormigheidsstructuur in het inertieële gebied van een turbulente stroming is *gelijkvormigheid* (similarity) een tweede eis aan modellen. Hierbij is het model van Bardina een belangrijk voorbeeld. Met de commutatornotatie kan dit basis gelijkvormigheids model worden geschreven als $M_{ij}^B = [L, S](\bar{u}_i, \bar{u}_j)$, dat wil zeggen, we volgen direct de definitie van de turbulente spanningstensor maar nu toegepast op het beschikbare LES veld. Verdere verfijningen van dit idee zijn nader uitgewerkt in de literatuur en gebruiken bijvoorbeeld inverse



Figuur 7 Momentopnames van het scheidingsvlak tussen de bovenste en onderste laag in een *temporal* menglaag op $t = 80$ verkregen met *large-eddy simulatie*. We vergelijken verschillende subgrid-modellen bij verschillende subgrid-resoluties bij een filterbreedte $\Delta = L/16$. Te zien zijn resultaten verkregen met het Smagorinsky model met een resolutie van 32^3 (a) en 64^3 (b) en resultaten met het Bardina model en een resolutie van 32^3 (c) en 64^3 (d). Het grove rooster (32^3) correspondeert met $\Delta/h = 2$ en het fijnere rooster (64^3) met $\Delta/h = 4$.

modellering waarin geprobeerd wordt om sommige details van de ongefilterde oplossing bij benadering uit de LES oplossing te reconstrueren [8]. Dit staat ook wel bekend als deconvolutie.

Deze twee modellen representeren de basis dissipatieve en dispersieve eigenschappen van subgrid modellen voor de turbulente spanningstensor. Deze basisideeën kunnen verder worden gecombineerd met de zogenaamde dynamische procedure die op algebraïsche eigenschappen van τ is gebaseerd zoals hierboven beschreven. Op die manier ontstaan gemengde modellen waarbij het similarity idee met subgrid dissipatie wordt gecombineerd. Voor steeds meer stromingen worden goede resultaten geboekt met deze zogenaamde dynamisch gemengde modellen waarbij zowel een eddy-viscositeits term als een similarity-term in het model worden opgenomen. De bijdrage van beide termen wordt door de stroming zelf dynamisch bepaald, waarbij gebruik wordt gemaakt van de identiteit van Germano. Daarmee heeft men een modellering van de dynamische consequenties van de kleine turbulente structuren verkregen die eenvoudig combineert met het ontbreken van ad hoc parameters die extern moeten worden aangegeven. Het zou hier te ver voeren om nader in te gaan op meer recente ontwikkelingen in subgrid modellering. We beperken ons tot simulaties gebaseerd op het Smagorinsky en Bardina model en richten ons op een verdere specificatie van het mengproces, waarbij we ons concentreren op de dynamica van passief meebevegende interfaces.

Turbulente dynamica in een menglaag

Om een eerste indruk te krijgen van het voortschrijden van een mengproces kan het voldoende zijn om een aantal opnames van de oplossing te bestuderen, of om een animatie te creëren. Echter,

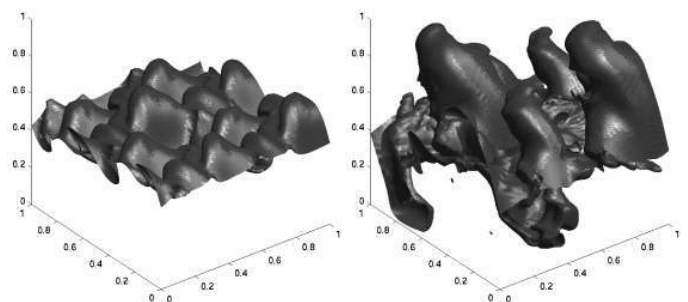
als een meer kwantitatieve en objectieve analyse vereist is of wanneer men een parameter-studie van de meng-efficiëntie wil ondernemen dan zijn meer specifieke en nauwkeurigere maten noodzakelijk. Hier zullen we kijken naar het kwantificeren van het mengproces met behulp van globale eigenschappen van denkbeeldige interfaces die met de stroming mee bewegen. In figuur 6 zijn een aantal momentopnames verzameld van het deformerende scheidingsvlak tussen de bovenste vloeistofstroom en de onderste. We zien duidelijk een toename in de complexiteit van de structuur van dit oppervlak, corresponderend met eerder getoonde opnames van de oplossing. Het oppervlakte van het scheidingsvlak kan worden gezien als een maat voor het voortschrijden van de menging die we verder kunnen uitwerken.

Eigenschappen van dergelijke interfaces zijn van centraal belang bijvoorbeeld in verbrandingsonderzoek en in de chemie maar ook in relatie tot meerfase-stromingen. In het geval van verbrandingsprocessen is het mengen van componenten geassocieerd met chemische reacties. De warmte die vrijkomt bij deze reacties kan de stroming beïnvloeden. Op vergelijkbare wijze kan het scheidende interface eigen fysische eigenschappen bevatten zoals oppervlaktespanning, en daarmee grote lokale kromming weerstaan. Al deze effecten zullen hun invloed hebben op het ontwikkelen van de stroming. Wij zullen ons hier richten op het mengen van een onstabiel gestratificeerde afschuiflaag waarbij we veronderstellen dat een laag met zware vloeistof afschuift over een laag met lichte vloeistof. De toename van deze oppervlakte kan gezien worden als een maat voor veranderingen in complexiteit van de oplossing en kan ook dominante verschijnselen in dispersieve processen karakteriseren. Om dit te kwantificeren introduceren we de oppervlaktegroei parameter of *meng-efficiëntie* η als volgt:

$$\eta(t) = \frac{A(t)}{A(0)},$$

waarin $A(t)$ het oppervlakte op tijd t weergeeft. Door vervorming, oprekken en opvouwen van het scheidingsvlak ten gevolge van de interactie met de vloeistofstroming stijgt η en kwantificeert op die manier het complexer worden van de stroming en het voortschrijden van het mengproces.

De voorspelling van η met behulp van DNS kan worden vergeleken met die verkregen met LES en zodoende bijdragen tot de validatie van de LES aanpak. Uit simulaties komt naar voren dat de dynamische effecten van modelleer- en ruimtelijke discretisatiefouten vrij aanzienlijk kunnen zijn. In LES wil men Δ relatief groot

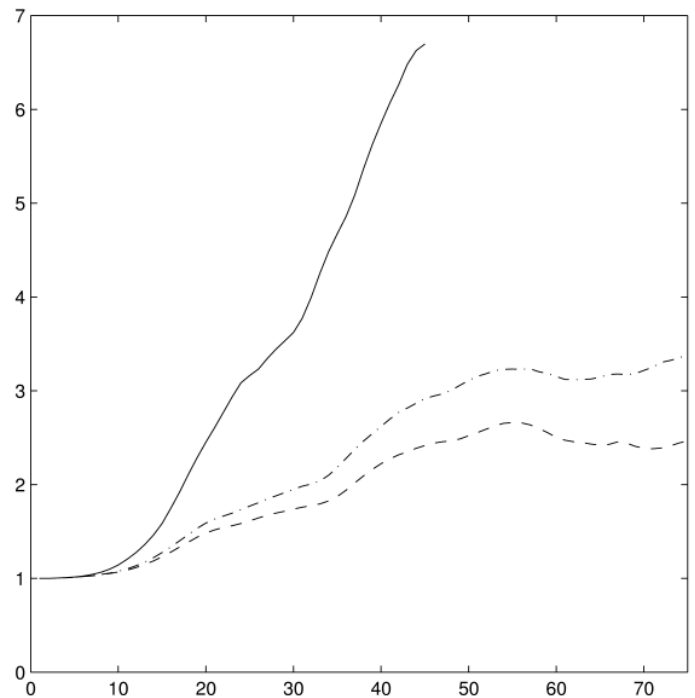


Figuur 8 Momentopname van het scheidingsvlak tussen een zware (boven) en een lichte vloeistof (onder) op $t = 20$ (a) en $t = 40$ (b) met sterke zwaartekrachtseffecten. Een kenmerkende structuur van in elkaar grijpende 'vingers' treedt naar voren.

stellen om effectief te zijn met betrekking tot de vereiste rekeninspanning ten opzichte van DNS. Dit impliceert dat de subgrid termen van belang zullen zijn en daarmee ook modelleerfouten die optreden. Op vergelijkbare wijze kunnen ruimtelijke discretisatiefouten van belang zijn. De resolutie van de kleinere behouden lengteschalen in LES is meestal marginaal en een subgrid-resolutie $\Delta/h = 1$ is gewoon in LES. Deze twee foutbronnen beïnvloeden de nauwkeurigheid van de LES voorspellingen en om deze effecten te kunnen beoordelen en te kunnen onderscheiden, kan men referentie-simulaties die bijvoorbeeld met sterk gereduceerde discretisatiefouten overeenstemmen in de overwegingen betrekken [9].

In figuur 7 hebben we een aantal snapshots van het scheidingsvlak opgenomen zoals verkregen met twee subgrid modellen en bij twee verschillende subgrid resoluties, dat wil zeggen, $\Delta/h = 2$ en $\Delta/h = 4$. We zien dat bij lage Δ/h de oplossing veel kleine structuren bevat, die voor een groot deel verdwijnen wanneer de ruimtelijke resolutie verbetert. Klaarblijkelijk zijn de kleinere structuren volkomen artificieel. Dit effect komt vooral sterk naar voren bij het Bardina model dat te weinig dissipatie lijkt toe te voegen. Hoewel enige informatie omtrent de grote lengteschalen nog herkenbaar is in de Smagorinsky voorspelling, is duidelijk dat de Bardina voorspellingen op een grof rooster compleet verstoord zijn door numerieke invloeden. Wanneer de subgrid resolutie wordt verhoogd zien we dat het inderdaad numerieke invloeden zijn die deze foute resultaten genereren; de oplossingen bij hogere subgrid resolutie lijken sterker op elkaar en stemmen ook aanmerkelijk beter overeen met de voorspellingen van bijvoorbeeld η verkregen met DNS.

In veel situaties heeft de zwaartekracht een duidelijke invloed op het menggedrag van de vloeistoffen. Ter illustratie beschouwen we een simulatie waarin een zware laag vloeistof boven op een lichtere laag is geplaatst. Een tweetal snapshots van deze stroming is te zien in figuur 8. Bij voldoende sterke zwaartekrachtseffecten ontstaat een karakteristiek patroon van in elkaar grijpende 'vingers' met zware vloeistof in een lichtere omgeving, en omgekeerd. Dit effect heeft een sterke invloed op de meng-efficiëntie zoals in figuur 9 te zien is. Deze stroming is als laminaire stroming geïnitieerd en de geringe menging in de laminaire situatie wordt duidelijk uit het nagenoeg constant blijven van η tot dat t tussen 10 en 15 komt. Daarna zorgt een snelle transitie ervoor dat de stroming aanzienlijk complexer en turbulent wordt, wat te zien is aan een sterke stijging van η . Toenemende zwaartekrachtseffecten



Figuur 9 Evolutie van de oppervlakte van het scheidingsvlak bij sterke (getrokken lijn), zwakke (streep-punt) en afwezig (gestippeld) zwaartekrachtseffecten.

invloeden laten een verhoogde menging met wel een factor drie à vier zien.

Epiloog

De large-eddy simulatie aanpak van turbulente stromingen kenmerkt zich vooral door de zoektocht naar een geschikte balans tussen complexiteitsreductie aan de éne kant en het behouden van voldoende details van de stroming om betrouwbare voorspellingen te kunnen doen aan de andere kant. Bij gebrek aan een omvattend inzicht in de globale eigenschappen en invloeden van (numerieke) turbulentie blijft dit een exercitie die vooral proefondervindelijk kan worden uitgevoerd. Voor dat laatste is simulatie slechts ondersteunend, op een manier die complementair is aan daadwerkelijke metingen en kan men alleen via een verdere analyse proberen meer wezenlijke inzichten te krijgen in de diversiteit aan niet-lineaire verschijnselen die zo kenmerkend zijn voor turbulente stromingen. ←

Referenties

- Ottino J.M.: 1989. *The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos, and Transport*. Cambridge University Press.
- http://pg.chem-eng.nwu.edu/mixing/geom_mix/geom_fl.html
- Veldman, A., Verstappen, R.: 2001. Turbulentie, golfballetjes en discrete afgeleiden. *Nieuw Archief voor Wiskunde*. 5/2 nr. 4, p. 342–347.
- Tennekes H., Lumley J.L.: 1994. *A first course in turbulence*. MIT-Press.
- Bruin, I.C.C. de: 2001. Direct and large-eddy simulation of the spatial turbulent mixing layer. Ph-D Thesis; University of Twente.
- Germano, M.: 1992. Turbulence: the filtering approach. *J. Fluid Mech.* 238, p. 325.
- Vreman A.W., Geurts B.J., Kuerten J.G.M.: 1997. Comparison of subgrid-models in large eddy simulation of the temporal mixing layer. *J. Fluid Mech.* 339, p. 357.
- Geurts B.J.: 1997. Inverse Modelling for Large-Eddy Simulation. *Phys.of Fluids* 9, p. 3585.
- Geurts, B.J., Fröhlich, J.: 2001. Numerical effects contaminating LES: a mixed story. *Modern simulation strategies for turbulent flow*. Edwards Publishing, Ed. B.J. Geurts. 309.