

# **GRANULARNE OŚRODKI POROWATE**

**WOJCIECH SOBIESKI  
SEWERYN LIPIŃSKI  
WALDEMAR DUDDA  
ANNA TRYKOZKO  
MACIEJ MAREK  
JOANNA WIĄCEK  
MACIEJ MATYKA  
JAROSŁAW GOŁEMBIEWSKI**

**Katedra Mechaniki i Podstaw Konstrukcji Maszyn  
Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie**

---

**OLSZTYN**

**2016**



MONOGRAFIA NAUKOWA

# Granularne ośrodki porowate

Wojciech Sobieski, Seweryn Lipiński, Waldemar Dudda, Anna Trykozko, Maciej Marek,  
Joanna Wiącek, Maciej Matyka, Jarosław Golembiewski

Katedra Mechaniki i Podstaw Konstrukcji Maszyn  
Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie

Monografia naukowa: **Granularne ośrodki porowate**

Redakcja naukowa: **Wojciech Sobieski**  
Wydział Nauk Technicznych, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie

Recenzenci: **Dr hab. inż. Piotr Srokosz**, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski  
**Dr hab. inż. Adam Szymkiewicz**, Politechnika Gdańska

Autorzy: Wojciech Sobieski<sup>1</sup>, Seweryn Lipiński<sup>1</sup>, Waldemar Dudda<sup>1</sup>, Anna Trykozko<sup>2</sup>,  
Maciej Marek<sup>3</sup>, Joanna Wiącek<sup>4</sup>, Maciej Matyka<sup>5</sup>, Jarosław Golembiewski<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Wydział Nauk Technicznych, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie

<sup>2</sup> Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego,  
Uniwersytet Warszawski

<sup>3</sup> Wydział Inżynierii Mechanicznej i Informatyki, Politechnika Częstochowska

<sup>4</sup> Instytut Agrofizyki PAN w Lublinie

<sup>5</sup> Instytut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki i Astronomii, Uniwersytet Wrocławski

Projekt okładki: Waldemar Dudda  
Opracowanie wydawnicze: Waldemar Dudda

Wydawca: Katedra Mechaniki i Podstaw Konstrukcji Maszyn, Wydział Nauk Technicznych  
Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie

ISBN 978-83-60493-04-5

Druk na podstawie materiałów dostarczonych przez autorów.

© Copyright by: Wojciech Sobieski, Seweryn Lipiński, Waldemar Dudda, Anna Trykozko,  
Maciej Marek, Joanna Wiącek, Maciej Matyka, Jarosław Golembiewski  
• Olsztyn 2016

Adres:  
Katedra Mechaniki i Podstaw Konstrukcji Maszyn  
ul. Michała Oczapowskiego 11, pok.E126  
10-719 Olsztyn  
tel./fax: + 48 89 523 32 55  
e-mail: sekretariat.kmipkm@uwm.edu.pl

**Spis treści****str.**

Wstęp	5
Rozdziały:	
1. Wprowadzenie <i>W. Sobieski</i>	7
2. Badania eksperymentalne przepływu płynów przez złożę granularne <i>W. Sobieski, W. Dudda</i>	25
3. Pozyskiwanie informacji o typie rozkładu złoża granularnego oraz generacja rozkładów wirtualnych <i>S. Lipiński</i>	45
4. Badania struktury geometrycznej złóż granularnych technikami obrazowania <i>S. Lipiński, W. Dudda</i>	57
5. Generacja złóż wirtualnych Metodą Elementów Dyskretnych <i>J. Wiącek, W. Sobieski</i>	71
6. Wyznaczanie parametrów charakteryzujących strukturę przestrzenną złóż granularnych <i>W. Sobieski</i>	95
7. Wybrane aspekty modelowania przepływów płynów przez złoża porowate <i>A. Trykozko</i>	119
8. Modelowanie przepływu płynów przez ośrodek porowaty Metodą Objętości Skończonych <i>W. Sobieski</i>	135
9. Modelowanie przepływu płynów przez ośrodek porowaty Metodą Gazu Sietowego Boltzmanna <i>M. Matyka, J. Golembiński</i>	153
10. Modelowanie przepływu płynów przez ośrodek porowaty Metodą Zanurzonego Brzegu <i>M. Marek</i>	167



## Od Redaktora

Niniejsza monografia stanowi efekt współpracy grupy polskich naukowców zajmujących się badaniami ośrodków porowatych, w tym ośrodków granularnych. Grupa ta tworzyła się głównie w latach 2012-2015, choć niektóre osoby znalazły się i współpracowały już wcześniej. We wspomnianym okresie odbyło się kilka spotkań i seminariów, w ramach których rozpoznawano wzajemnie potencjał naukowy oraz określano możliwe obszary współpracy. Szybko okazało się, że potencjał ten jest bardzo duży i że łącząc wiedzę i umiejętności poszczególnych osób, uzyskać można wyraźną synergię oraz inspirację do prowadzenia nowych jakościowo prac badawczych.

W roku 2015 pojawił się pomysł, aby podsumować dotychczasowe działania i zorganizować spotkanie robocze wszystkich członków grupy. Pomysł ten rozwinął się, co w konsekwencji doprowadziło do zorganizowania w Olsztynie, w dniach 1-3 lipca 2016 roku, konferencji naukowej pt. „1st Workshop on Porous Media”. Słowo „warsztaty” miało podkreślić, że celem spotkania jest nie tylko klasyczne wygłoszenie referatu czy też zaprezentowanie posteru, ale również zachęcenie uczestników do podejmowania działań integrujących polskie środowisko naukowe. Ze swojej strony, członkowie wspomnianej grupy – będący jednocześnie Autorami monografii – postanowili podzielić się swoją wiedzą teoretyczną oraz praktyczną, mając przy tym nadzieję, że materiał zawarty w monografii stanie się impulsem do wzajemnej wymiany myśli i idei, a także inspiracją do dalszej pracy naukowej.

Ze swojej strony chciałbym serdecznie podziękować wszystkim Autorom za udział w przedsięwzięciu, jakim było napisanie tej monografii, a w szczególności za okazane mi zaufanie. To, że udało mi się namówić do współpracy tak znane i szanowane w kraju osoby, uważam za swój osobisty sukces. Obecnie nie wiem jak dalej rozwinie się nasza współpraca i co jeszcze uda się osiągnąć, ale wiem, że o efektach działań można przekonać się tylko wówczas, gdy się je rozpocznie. Moim celem było stworzenie takiego właśnie początku.

Serdecznie podziękowania składam również Recenzentom, którzy poświęcili swój czas i znacząco wpłynęli, poprzez przekazanie Autorom zbioru cennych uwag i wskazówek, na ostateczny kształt monografii.

Wojciech Sabieł



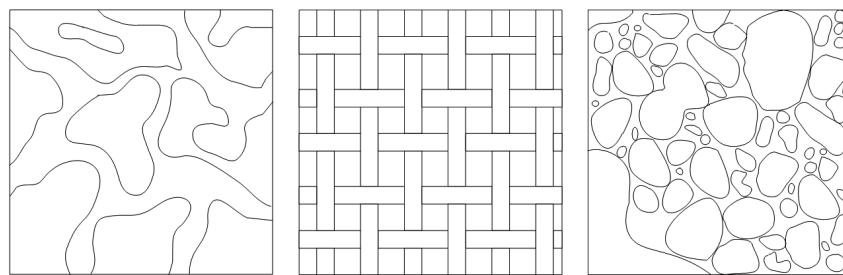


## 1. WPROWADZENIE

### 1.1. Ośrodek porowaty

W kontekście mechaniki płynów, ośrodek porowaty jest to ciało stałe, lub też zbiór takich ciał, zawierających na tyle dużą ilość wolnej przestrzeni, że możliwy jest przepływ przez nie pojedynczych płynów lub ich mieszanin, zwany przepływem filtracyjnym lub filtracją. W kontekście mechaniki ciał stałych aspekt połączeń między poszczególnymi przestrzeniami porowymi ma mniejsze znaczenie, chyba że analizuje się efekty kapilarne bądź też przepływ ciepła przez takie ośrodki.

Przestrzenie wolne, zwane również częścią porową, tworzą w ośrodku porowatym skomplikowaną i najczęściej nieregularną sieć kanalików, kieszeni, połączeń oraz przestrzeni odizolowanych (Rys. 1.1). Część stała ośrodka porowatego może mieć postać sztywnego szkieletu (np. skała wapienna), szkieletu elastycznego (np. układ warstw tkaniny) lub też zbioru cząstek: luźnych bądź też w jakiś sposób ze sobą połączonych (np. piasek). Poszczególne fragmenty bądź elementy szkieletu ośrodka porowatego mogą mieć bardzo różne kształty i wielkości oraz składać się z jednego lub wielu różnych materiałów (w tym nieorganicznych i organicznych).



Rys. 1.1. Przykłady struktur części stałej ośrodka porowatego:  
a) szkielet sztywny, b) szkielet elastyczny, c) szkielet luźny

Ośrodki porowate mogą być naturalne lub sztuczne, mogą również wykazywać właściwości izo- lub anizotropowe. W tym drugim przypadku prędkość przepływu płynu zależy od kierunku ruchu. Ponadto ośrodki porowate mogą być przestrzennie jednorodne lub niejednorodne, z właściwościami zmieniającymi się płynnie lub skokowo.

Inny podział ośrodków porowatych może być związany z aktywnością chemiczną: rozróżnia się ośrodki chemicznie nieaktywne (np. złożę piasku) lub też aktywne (np. paliwo w piecu fluidalnym lub ogniwie paliwowym). Niezależnie od występowania aktywności chemicznej, w ośrodku porowatym mogą zachodzić procesy wymiany ciepła i masy (np. podczas procesu suszenia ziarna zbóż). W niektórych obszarach badawczych istotne jest również uwzględnienie aktywności biologicznej (np. żwir w gruntowym wymienniku ciepła czy też kompost).

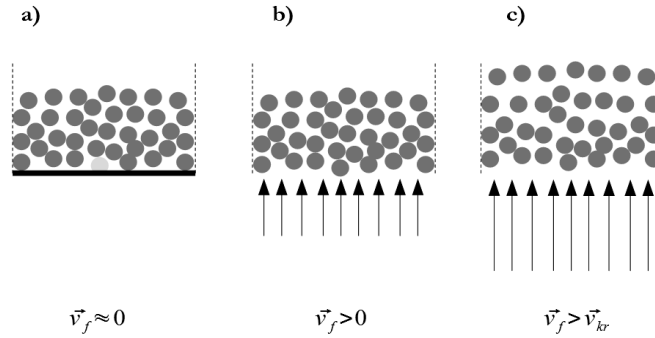
W przypadku przepływu cieczy przez ośrodek porowaty, część porowa może zostać wypełniona cieczą całkowicie (przykładem może być woda w warstwie wodonośnej) lub częściowo (tu z kolei przykładem może być wsiąkanie wody opadowej w glebę). W tym pierwszym przypadku tworzy się złożę nasycone, w drugim z kolei złożę nienasycone.

W niektórych przypadkach jeden ośrodek porowaty może posiadać przestrzenie porowe o kilku skalach rozmiarów. Przykładem może być pryzma żużlu, w której przestrzenie porowe występują zarówno między kawałkami żużlu, jak i we wnętrzu samego materiału.

### 1.2. Złożę granularne

Złożę granularne jest to ośrodek porowaty składający się z luźno ułożonych cząstek stałych. Cząstki te mogą mieć dowolny kształt, jednak materiał zawarty w monografii odnosi się

do złóż granularnych złożonych z cząstek sferycznych lub quasi-sferycznych, czyli zbliżonych kształtem do idealnej sfery.



Rys. 1.2. Rodzaje złóż granularnych (gdzie  $v_f$  to prędkość filtracji):

a) stacjonarne, b) stacjonarne z przepływem płynu, c) niestacjonarne (fluidyzacja)

Złóża granularne mogą być rozpatrywane w kontekście mechaniki ośrodków sypkich (Rys. 1.2a) lub też mechaniki płynów, o ile w przestrzeniach porowych między cząstkami odbywa się przepływ cieczy lub gazu. Jeśli tak jest, to złoża granularne można dodatkowo podzielić na stacjonarne (gdy cząstki nie zmieniają swojego położenia w czasie, Rys. 1.2b) oraz niestacjonarne (gdy pod wpływem sił generowanych przez przepływający płyn, cząstki zmieniają swoje położenia, Rys. 1.2c). Przykładem zjawiska, w którym występują naturalne złoża niestacjonarne może być upłynnienie gruntu. Sztuczne niestacjonarne złoża porowate występują np. w fontannowych suszarkach do ziarna lub też we fluidalnych reaktorach chemicznych. Rozważania zawarte w niniejszej monografii odnoszą się do złóż stacjonarnych.

### 1.3. Parametry charakteryzujące wielkość cząstek

Rozmiar cząstek sferycznych może być określony przez takie parametry jak promień, średnica, objętość oraz powierzchnia. Parametrem najczęściej używanym do zdefiniowania rozmiaru cząstek w złożu jest ich średnia średnica

$$d = \frac{\sum_{i=1}^n d_i}{n}, \quad (1.1)$$

gdzie:  $d$  - średnia średnica cząstek w złożu (lub w próbce złoża) [m],  $d_i$  - średnica  $i$ -tej cząstki w złożu (lub w próbce złoża) [m],  $n$  - liczba cząstek użytych do wyznaczenia wartości średniej [-].

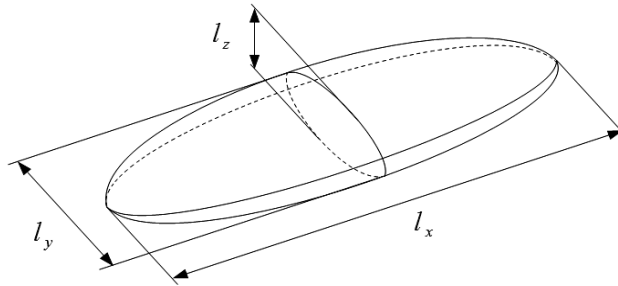
Przy większym rozproszeniu wartości korzystnie jest wykorzystać medianę, gdyż wartość średnia jest podatna na wielkości odstające. Medianą uporządkowanego rosnącego ciągu  $n$  danych liczbowych jest środkowy wyraz ciągu (dla  $n$  nieparzystego) lub też średnia arytmetyczna dwóch środkowych wyrazów ciągu (dla  $n$  parzystego).

Rozmiar cząstek niesferycznych określić można wykorzystując pojęcie tzw. średnicy zastępczej, definiowanej jako średnica sfery o takiej samej objętości jak objętość cząstki niesferycznej

$$d_{rep} = \sqrt[3]{\frac{6V_s}{\pi}}, \quad (1.2)$$

gdzie:  $d_{rep}$  - średnica zastępcza [m],  $V_s$  - objętość cząstki niesferycznej [m<sup>3</sup>].

Średnica zastępcza stosowana jest często w układach, w których ważne jest, aby cząstka zastępcza miała taką samą masę jak cząstka rzeczywista. Aspekt ten jest szczególnie istotny w złożach niestacjonarnych, ze względu na potrzebę poprawnego obliczenia sił masowych (siły ciężkości i sił bezwładności) działających na cząstkę.



Rys. 1.3. Schemat cząstki elipsoidalnej

Objętość cząstki, potrzebną do wyznaczenia średnicy zastępczej, określić można eksperymentalnie lub też analitycznie, bazując na rozmiarach cząstki w trzech charakterystycznych kierunkach przestrzennych. Zakładając, że cząstka ma kształt elipsoidy (Rys. 1.3), jej objętość wyrazi się formułą:

$$V_s = \frac{\pi}{6} l_x l_y l_z, \quad (1.3)$$

gdzie:  $l_x$  - długość cząstki (największy możliwy wymiar) [m],  $l_y$  - szerokość cząstki [m],  $l_z$  - grubość cząstki (najmniejszy możliwy wymiar w płaszczyźnie prostopadłej do kierunku wyznaczania długości) [m]. O tym, który wymiar jest długością, szerokością lub grubością cząstki decyduje następująca relacja wymiarów:  $l_x \geq l_y \geq l_z$ .

Inną metodą określenia rozmiaru cząstki niesferycznej może być wyliczenie, na podstawie charakterystycznych wymiarów cząstki, średniej wartości średnicy

$$d_{ave} = \frac{l_x + l_y + l_z}{3} \quad (1.4)$$

lub tzw. średnicy nominalnej [3]

$$d_{nom} = \sqrt[3]{l_x l_y l_z}. \quad (1.5)$$

Zależnie od podejścia, do dalszych celów – jako średnicę reprezentatywną – wykorzystać można wartość średnią średnicy zastępczej, średniej lub nominalnej.

#### 1.4. Parametry charakteryzujące zróżnicowanie wielkości cząstek

W przypadku złóż składających się z cząstek o różnych rozmiarach, średnice opisane w poprzednim punkcie mogą być niewystarczające do opisu cech złoża. W tym przypadku korzystniej jest podać informacje o rozkładzie wielkości cząstek

$$d = d(\mu, \sigma^2), \quad (1.6)$$

gdzie:  $d$  - średnica cząstki [m],  $\mu$  - wartość średnia [m],  $\sigma^2$  - wariancja [m<sup>2</sup>].

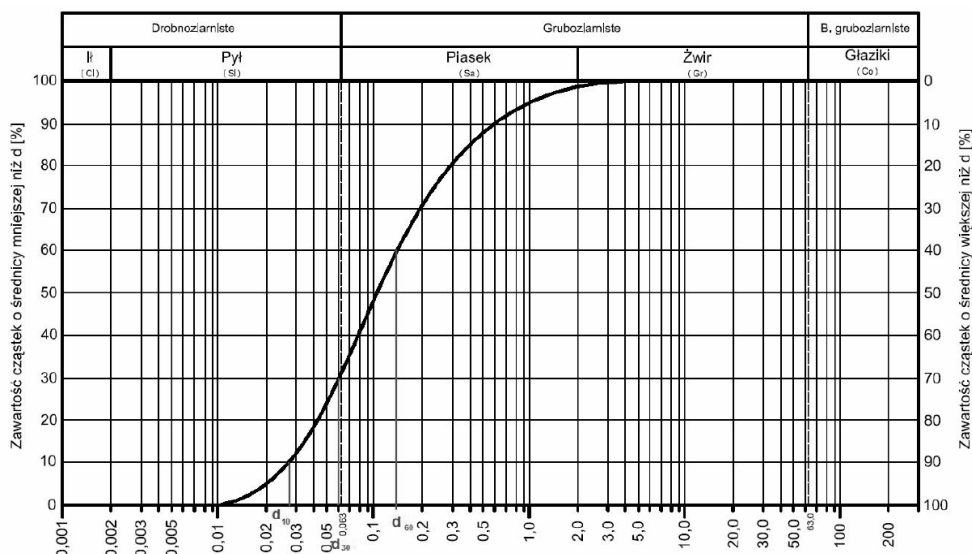
Niezwykle wartościową informacją jest zawsze określenie typu rozkładu, czyli znalezienie rozkładu teoretycznego dającego najlepsze dopasowanie do rozkładu empirycznego. W niektórych przypadkach wymaga to wprowadzenia kolejnych parametrów charakteryzujących złoże. Oprócz wartości średniej i wariancji, do opisu złożeń granulanych stosuje się czasem dodatkowe miary rozkładu, takie jak np. skośność (ang. skewness) czy kurtoza (ang. kurtosis) [3]. Skośność jest miarą asymetrii rozkładu wielkości cząstek, kurtoza zaś miarą koncentracji wyników.

W wielu obszarach zastosowań, np. w mechanice gruntów czy geologii, dużą rolę odgrywa tzw. analiza granulometryczna (np. analiza sitowa). Analiza taka polega na przesianiu próbki składającej się z cząstek o różnych rozmiarach przez zestaw sit o zmniejszających się wymiarach oczek. Znając masę próbki oraz masy poszczególnych frakcji, określić można procentową zawartość poszczególnych frakcji

$$P_i = \frac{m_i}{m} \cdot 100\%, \quad (1.7)$$

gdzie:  $m_i$  - masa i-tej frakcji [kg],  $m$  - masa próbki [kg].

Wyniki analizy granulometrycznej przedstawia się często w postaci graficznej, przy czym najpopularniejszą formą prezentacji jest tzw. krzywa skumulowana (nazywana również krzywą przesiewu lub krzywą uziarnienia), na której to – na kolejnych punktach wykresu – przedstawione są sumaryczne udziały procentowe mas (Rys. 1.4).



Rys. 1.4. Przykładowa krzywa uziarnienia (liczby na osi poziomej oznaczają średnice cząstek) [10]

Do opisu zróżnicowania wielkości cząstek stosuje się tzw. wskaźnik różnoziarnistości (ang. uniformity coefficient) [10]

$$C_U = \frac{d_{60}}{d_{10}}, \quad (1.8)$$

lub też wskaźnik krzywizny uziarnienia (ang. curvature coefficient) [10]

$$C_C = \frac{d_{30}^2}{d_{10} \cdot d_{60}}, \quad (1.9)$$

gdzie:  $d_{10}$ ,  $d_{30}$ ,  $d_{60}$  to średnice cząstek, które wraz z cząstkami mniejszymi stanowią odpowiednio 10, 30 i 60% masy granulatu.

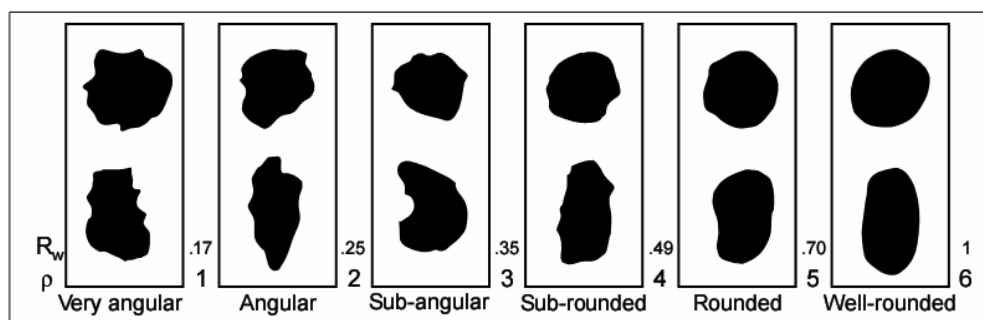
Wskaźnik  $C_U$  jest miarą nachylenia krzywej skumulowanej na odcinku między punktami odpowiadającymi wartościom  $d_{60}$  i  $d_{10}$ . Jeżeli wartość wskaźnika wynosi 1, to krzywa skumulowana jest pionowa, co oznacza że granulak jest jednorodny. Duża wartość wskaźnika  $C_U$  oznacza, że granulak jest wielofrakcyjny i drobne frakcje wypełniają przestrzenie porowe między cząstkami frakcji o większych średnicach.

### 1.5. Parametry charakteryzujące kształt cząstek

Do określenia kształtu cząstek niesferycznych najczęściej stosuje się takie parametry jak okrągłość (ang. roundness) lub sferyczność (ang. sphericity). Okrągłość  $R$  opisuje stopień zaokrąglenia krawędzi cząstki, zaś sferyczność  $\psi$  stopień podobieństwa cząstki do idealnej sfery [3]. Obie te wielkości mogą być opisywane różnymi formułami matematycznymi (patrz Tabela 1.1) i przyjmują wartości od 0 do 1.

Znaczenie symboli występujących w Tabeli 1.1 jest następujące:  $r_i$  – promień  $i$ -tej wypukłości na powierzchni cząstki [m],  $r_{\min}$  – promień najostrejszej mierzalnej wypukłości na powierzchni cząstki [m],  $n$  – liczba wszystkich wypukłości na powierzchni cząstki [-],  $r_{out}$  – promień najmniejszej możliwej sfery opisanej na cząstce [m],  $d_{out}$  – średnica najmniejszej możliwej sfery opisanej na cząstce [m],  $r_{in}$  – promień największej możliwej sfery wpisanej w cząstkę [m],  $d_{in}$  – średnica największej możliwej sfery wpisanej w cząstkę [m],  $V_s$  – objętość cząstki niesferycznej [m<sup>3</sup>],  $S_s$  – powierzchnia cząstki niesferycznej [m<sup>2</sup>],  $S_{rep}$  – powierzchnia cząstki sferycznej o takiej samej objętości jak cząstka niesferyczna (powierzchnia zastępcza) [m<sup>2</sup>],  $d_{rep}$  – średnica cząstki sferycznej o takiej samej objętości jak cząstka niesferyczna (średnica zastępcza) [m],  $V_{out}$  – objętość najmniejszej możliwej sfery opisanej na cząstce [m<sup>3</sup>].

Oprócz formuł zaprezentowanych w Tabeli 1.1, w literaturze spotyka się również wizualne skale określania kształtu cząstki, np. skalę Powera [3] (Rys. 1.5), Zingga (1935) [3], Krmubein-Slossa [6] i inne, jednak takie subiektywne sposoby określania kształtu nie są przez autorów zalecane – przynajmniej w metodologii przedstawionej w tej pracy.



Rys. 1.5. Wizualna skala określania okrągłości Powera (gdzie  $R_w$  jest wskaźnikiem okrągłości) [3]

Tabela 1.1. Przegląd formuł stosowanych do charakteryzowania kształtu cząstek niesferycznych

No	Źródło	Wzór obliczeniowy	Ang.
1	Wentworth (1919) [9]	$R_{We} = \frac{r_{\min}}{r_{out}}$	roundness
2	Wentworth (1922) [3]	$\psi_{We} = \frac{l_x + l_y}{2l_z}$	sphericity
3	Wadell (1932) [1,4]	$R_W = \frac{\sum_{i=1}^n r_i}{n}$	roundness
4	Wadell (1932) [9]	$\psi_{W,s} = \frac{S_{rep}}{S_s}$	specific surface ratio
5	Wadell (1934) [1,3]	$\psi_{W,v} = \sqrt[3]{\frac{V_s}{V_{out}}}$ lub $\psi_{W,d} = \frac{d_{rep}}{d_{out}}$	sphericity
6	Krumbein (1941) [11]	$\psi_K = \sqrt[3]{\frac{l_y l_z}{l_x^2}}$	sphericity
7	Riley (1941) [3]	$\psi_R = \sqrt{\frac{d_{in}}{d_{out}}}$	inscribed circle sphericity
8	Cailleux (1945) [9]	$\psi_{Ca} = \frac{l_x + l_y}{2l_z}$	flatness index
9	Corey (1949) [1,3]	$\psi_{Co} = \frac{l_z}{\sqrt{l_x l_y}}$	shape factor
10	Aschenbrenner (1956) [9]	$\psi_A^{ws} = \frac{12.8 \sqrt[3]{\left(\frac{l_z}{l_y}\right)^2 \left(\frac{l_y}{l_x}\right)}}{1 + \frac{l_z}{l_y} \left(1 + \frac{l_y}{l_x}\right) + 6 \sqrt{1 + \left(\frac{l_z}{l_y}\right)^2 \left(1 + \frac{l_y}{l_x}\right)^2}}$	working sphericity
11	Aschenbrenner (1956) [9]	$\psi_A^{sf} = \frac{l_x l_z}{l_y^2}$	shape factor
12	Sneed i Folk (1958) [1,3]	$\psi_{SF} = \sqrt[3]{\frac{l_z^2}{l_x l_y}}$	maximum projection sphericity
13	Williams (1965) [11]	$\psi_{Wi} = 1 - \frac{l_x l_z}{l_y}$ dla $l_y^2 > l_x l_z$ i $\psi_{Wi} = \frac{l_y^2}{l_x l_z} - 1$ dla $l_y^2 \leq l_x l_z$	shape factor
14	Janke (1966) [11]	$\psi_J = \frac{l_z}{\sqrt{\frac{1}{3}(l_x^2 + l_y^2 + l_z^2)}}$	form factor
15	Dobkins i Folk (1970) [3]	$R_{DF} = \frac{r_{\min}}{r_{in}}$	roundness
16	Dobkins i Folk (1970) [3]	$\psi_{DF} = 10 \frac{l_x}{l_z} \left( \frac{l_x - l_y}{l_x - l_z} - \frac{1}{2} \right)$	oblate-prolate index

Aspekt kształtu cząstek jest bardzo istotny w kontekście niniejszej monografii. Wiele metod i algorytmów, opisanych w dalszej części pracy, bazuje na założeniu, że cząstki są albo idealnie sferyczne, albo też mają kształt zbliżony do sferycznego. Jednak kwestie, które parametry należy przyjąć do określania stopnia podobieństwa cząstki do idealnej sfery oraz jakie powinny być ich wartości graniczne, są otwarte i wymagają dokładniejszego zbadania.

## 1.6. Parametry charakteryzujące stopień wypełnienia przestrzeni

Podstawowym parametrem charakteryzującym stopień wypełnienia przestrzeni fazą stałą jest tzw. współczynnik porowatości objętościowej (ang. porosity), określający objętościowy udział części porowej w ośrodku porowatym [7]:

$$\phi = \lim_{\Delta V \rightarrow V_g} \frac{\Delta V_p}{\Delta V}, \quad (1.10)$$

gdzie:  $\phi$  - współczynnik porowatości objętościowej [ $\text{m}^3/\text{m}^3$ ],  $V_p$  - sumaryczna objętość porów w objętości próbki [ $\text{m}^3$ ],  $V$  - objętość próbki [ $\text{m}^3$ ],  $V_g$  - objętość graniczna [ $\text{m}^3$ ].

Istnienie objętości granicznej wynika z konieczności dobrania odpowiednio dużej objętości próbki, tak aby uniknąć sytuacji, w których współczynnik porowatości przyjmie wartość 0 lub 1. Jeżeli przy zwiększaniu objętości granicznej współczynnik porowatości nie ulega znaczącym zmianom, uznaje się, że została ona dobrana prawidłowo.

Oprócz współczynnika porowatości objętościowej czasami wykorzystuje się jego dwuwymiarowy odpowiednik (ang. surface porosity) [7]:

$$\phi_s = \lim_{\Delta S \rightarrow S_g} \frac{\Delta S_p}{\Delta S}. \quad (1.11)$$

gdzie:  $\phi_s$  - współczynnik porowatości powierzchniowej [ $\text{m}^2/\text{m}^2$ ],  $S_p$  - sumaryczna powierzchnia porów w przekroju [ $\text{m}^2$ ],  $S$  - powierzchnia przekroju [ $\text{m}^2$ ],  $S_g$  - powierzchnia graniczna [ $\text{m}^2$ ].

Występująca tu powierzchnia graniczna  $S_g$  [ $\text{m}^2$ ] ma takie samo znaczenie jak omówiona wyżej objętość graniczna.

W analogiczny sposób określić można tzw. współczynnik upakowania (ang. packing coefficient). Definiuje się go jako objętościowy udział fazy stałej w ośrodku porowatym:

$$\varepsilon = \lim_{\Delta V \rightarrow V_g} \frac{\Delta V_s}{\Delta V}, \quad (1.12)$$

gdzie:  $\varepsilon$  - współczynnik upakowania [ $\text{m}^3/\text{m}^3$ ],  $V_s$  - sumaryczna objętość zajmowana przez fazę stałą [ $\text{m}^3$ ].

W rzeczywistości zarówno współczynnik porowatości objętościowej jak i współczynnik upakowania są szczególnymi przypadkami ogólniejszego pojęcia, stosowanego w układach wielofazowych, tzw. udziału objętościowego (ang. volume fraction)

$$\alpha_k = \frac{V_k}{\sum_{i=1}^n V_i}, \quad (1.13)$$

gdzie:  $\alpha_k$  - udział objętościowy k-tego składnika mieszaniny [-],  $V_k$  - sumaryczna objętość k-tego

składnika mieszaniny [ $\text{m}^3$ ],  $V_i$  - sumaryczna objętość i-tego składnika mieszaniny [ $\text{m}^3$ ],  $n$  - liczba składników mieszaniny [-].

Udział objętościowy składnika może przyjmować wartość od 0 do 1, przy czym

$$\alpha_k = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i, \quad (1.14)$$

gdzie:  $\alpha_i$  - udział objętościowy i-tego składnika mieszaniny [-].

W przypadku ośrodka porowatego, traktowanego jako przestrzenny układ ciała stałego oraz przestrzeni porowych, zachodzi zależność

$$\alpha_f + \alpha_s = 1, \quad (1.15)$$

lub, stosując wcześniej wprowadzoną symbolikę

$$\phi + \varepsilon = 1. \quad (1.16)$$

W stosowanych tu formułach indeks dolny  $p$  oznacza przestrzeń porową (ang. pore space), indeks  $s$  fazę stałą (ang. solid), a indeks  $f$  fazę płynną (ang. fluid). Brak indeksu przy symbolach objętości (powierzchni) oznacza całkowitą objętość (powierzchnię) zajmowaną przez ośrodek porowaty.

Innym parametrem charakteryzującym bezwymiarowo stopień wypełnienia przestrzeni jest tzw. wskaźnik porowatości (ang. void ratio), definiowany jako iloraz objętości porowej i objętości ciała stałego:

$$e = \frac{V_p}{V_s}. \quad (1.17)$$

Warto zwrócić uwagę, że w literaturze do oznaczania porowatości oraz wskaźnika porowatości stosuje się podobną symbolikę, najczęściej  $\phi$ ,  $e$  lub  $n$ , a czasami ten sam symbol oznacza w różnych pracach coś innego.

## 1.7. Parametry charakteryzujące strukturę wypełnienia przestrzeni

Jednym z historycznie pierwszych pojęć stosowanych do określenia ogólnego stopnia komplikacji struktury przestrzennej kanałów porowych jest tzw. powierzchnia wewnętrzna. Jest to całkowita powierzchnia przestrzeni porowych znajdujących się wewnątrz ośrodka porowatego. W kontekście przepływów płynów przez ośrodki porowate powierzchnię tę można podzielić na powierzchnię kanałów, którymi przepływa płyn, oraz powierzchnię innych pustek, nie biorących udziału w transporcie masy.

W przypadku złóż granularnych

$$S_p = S_s = \sum_{i=1}^{n_s} S_i = \sum_{i=1}^{n_s} \pi d_i^2, \quad (1.18)$$

gdzie:  $S_p$  - sumaryczna powierzchnia wewnętrzna przestrzeni porowych [ $\text{m}^2$ ],  $S_s$  - sumaryczna powierzchnia wszystkich cząstek złoża [ $\text{m}^2$ ],  $S_i$  - powierzchnia i-tej cząstki [ $\text{m}^2$ ],  $d_i$  - średnica i-tej cząstki [ $\text{m}$ ],  $n_s$  - liczba cząstek w złożu [-].



Wzór (1.18) jest prawdziwy przy założeniu, że cząstki tworzące złoże są sztywne – wówczas kontakt między nimi ogranicza się do punktów. W przypadku cząstek odkształcających się, wzór (1.18) opisuje teoretyczną powierzchnię maksymalną (rzeczywista powierzchnia wewnętrzna takiego złoże jest od niej mniejsza ze względu na występowanie niezerowych powierzchni styków).

Powierzchnię wewnętrzną, zależną od rozmiarów próbki ośrodka porowatego, wykorzystuje się do obliczenia tzw. powierzchni specyficznej, która to jest wielkością normalizowaną względem objętości. Rozróżnia się przy tym dwie możliwości wyboru objętości referencyjnej.

Według Kozeny (1927) [5] objętością referencyjną jest objętość próbki, wówczas

$$S_{0,Kozeny} = \frac{S_p}{V}, \quad (1.19)$$

zaś wg Carmana (1937) [2], objętość fazy stałej

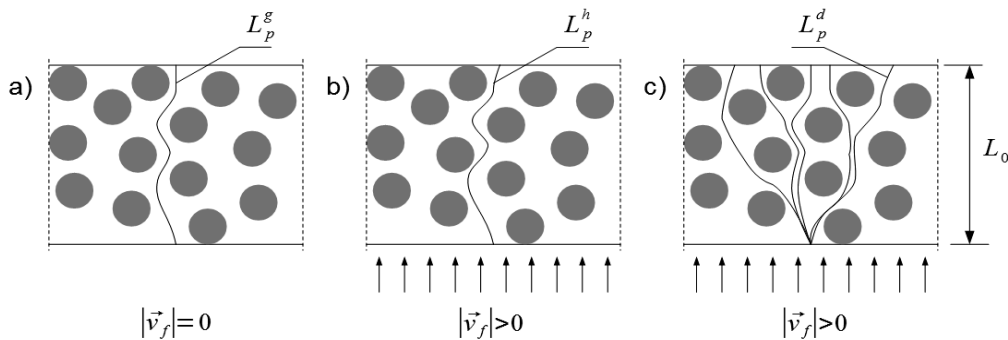
$$S_{0,Carman} = \frac{S_p}{V_s}, \quad (1.20)$$

gdzie:  $S_0$  - powierzchnia specyficzna [1/m].

Obie wielkości związane są zależnością [8]

$$\frac{S_{0,Kozeny}}{S_{0,Carman}} = 1 - \phi. \quad (1.21)$$

Inną wielkością charakteryzującą stopień skomplikowania struktury przestrzennej kanałów porowych jest krętość (ang. tortuosity).



Rys. 1.6. Schematyczna wizualizacja krętości: a) geometrycznej, b) hydraulicznej, c) dyfuzyjnej

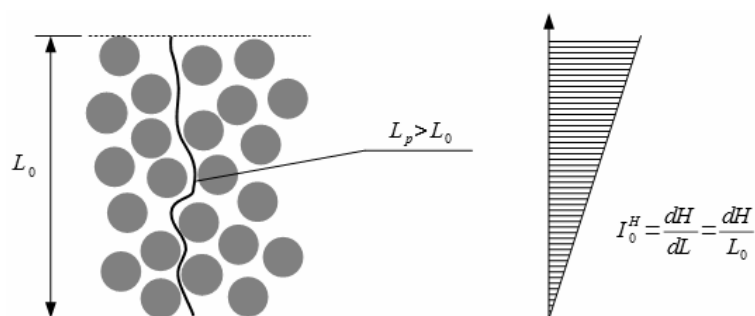
Krętość jest to stosunek długości drogi  $L_p$ , jaką należy przebyć w kanałach porowych, aby przemieścić się między dwiema równoległymi płaszczyznami, do odległości  $L_0$  między tymi płaszczyznami

$$\tau = \frac{L_p}{L_0}. \quad (1.22)$$

gdzie:  $\tau$  - krętość [m/m].

W literaturze rozróżnia się trzy rodzaje krętości (Rys. 1.6):

- krętość geometryczną  $\tau^g$  – jest to krętość, w której długość drogi  $L_p$  wyznacza się na podstawie geometrii kanałów. Zazwyczaj przyjmuje się, że droga ta przebiega przez środki geometryczne kolejnych przekrojów kanału porowego.
- krętość hydrauliczną  $\tau^h$  – jest to krętość, w której długość drogi  $L_p$  wyznacza się na podstawie długości linii prądu płynu poruszającego się w przestrzeni porowej. W ogólnym przypadku krętość hydrauliczna jest funkcją prędkości filtracji.
- krętość dyfuzyjną  $\tau^d$  – jest to krętość, w której długość drogi  $L_p$  wyznacza się na podstawie stopnia przemieszczania się cząstek w kierunkach prostopadłych do głównego kierunku ruchu. Krętość dyfuzyjna jest funkcją prędkości filtracji i własności dyfuzyjnych płynu.



Rys. 1.7. Krętość jako korekta spadku hydraulicznego

Pojęcie krętości wprowadzone zostało przez Kozeny'ego (1927) w celu skorygowania spadku wysokości piezometrycznej  $H$  (Rys. 1.7). Kozeny zauważył, że rzeczywista droga pokonywana przez płyn przemieszczający się przestrzeniami porowymi jest dłuższa od odległości między wybranymi punktami lub płaszczyznami ośrodka porowatego. Wobec powyższego spadek piezometryczny

$$I_0^H = \frac{dH}{L_0} \quad (1.23)$$

gdzie:  $I_0^H$  – spadek piezometryczny [mm H<sub>2</sub>O/m],  $H$  – wysokość piezometryczna [mm H<sub>2</sub>O], należy zapisać jako

$$I_p^H = \frac{dH}{L_p} \quad (1.24)$$

lub

$$I_p^H = \frac{dH}{L_0 \frac{L_p}{L_0}} = I_0^H \frac{1}{\tau} \quad (1.25)$$

Indeksy dolne przy symbolu spadku piezometrycznego wskazują, która droga została użyta do jej obliczenia.

W rozważaniach dotyczących spadków ciśnień w ośrodkach porowatych należy zwracać uwagę na sposób definiowania strat przepływu. Część autorów używa pojęcia spadku

piezometrycznego, część zaś spadku hydraulicznego, który to definiowany jest jako spadek ciśnienia wyrażony w paskalach, a nie milimetrach słupa wody

$$I^p = \frac{dp}{dL}, \quad (1.26)$$

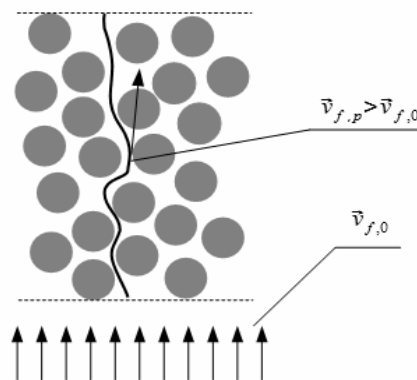
gdzie:  $dp$  – spadek ciśnienia [Pa] na odcinku  $dL$  [m].

W niniejszych rozważaniach doprecyzowanie sposobu wyznaczania oporów przepływu odbywa się za pomocą indeksu górnego:  $H$  oznacza spadek wysokości piezometrycznej (wyrażony wysokością słupa wody),  $p$  zaś spadek ciśnienia (wyrażony w paskalach).

Pojęcie krętości wykorzystuje się również do skorygowania prędkości filtracji (Rys. 1.8). Carman (1937) stwierdził, że skoro rzeczywista droga w przestrzeniach porowych jest dłuższa niż odległość, na której mierzy się spadek piezometryczny lub spadek hydrauliczny, to rzeczywista prędkość płynu na drodze  $L_p$  jest większa, niż na drodze  $L_0$ :

$$\vec{v}_{f,0} = \frac{L_0}{t}, \quad (1.27)$$

gdzie:  $\vec{v}_f$  – prędkość filtracji [m/s],  $t$  – czas [s].



Rys. 1.8. Krętość jako korekta prędkości filtracji

Według Carmana, prędkość filtracji powinna być wyrażona następująco

$$\vec{v}_{f,p} = \frac{L_p}{t} = \frac{L_0 \frac{L_p}{L_0}}{t} = \tau \vec{v}_{f,0}. \quad (1.28)$$

Należy zwrócić uwagę, że chociaż krętość została zdefiniowana w kontekście mechaniki płynów, to może ona być również używana jako jeden z ogólnych parametrów charakteryzujących strukturę przestrzeni porowych.

## 1.8. Skale badań ośrodków porowatych

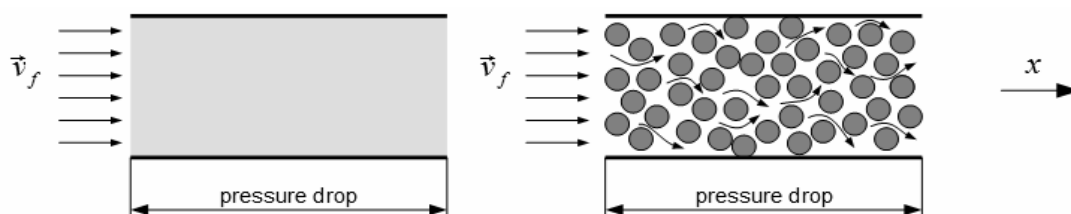
Oprócz typowego podziału na badania eksperymentalne, analityczne i symulacyjne, w obszarze badań ośrodków porowatych wyróżnić można jeszcze podejścia makro- i mikro-skalowe (Rys. 1.9). Więcej informacji na ten temat znajdzie czytelnik w Rozdziale 7.

Analiza ośrodków porowatych w skali makro charakteryzuje się następującymi cechami:

- ośrodek porowaty traktuje się jako jednorodną masę (w kontekście złóż granularnych nie rozróżnia się położenia i rozmiaru poszczególnych cząstek);
- podczas przepływu płynu przez ośrodek porowaty analizuje się efekt globalny (bez wnikania w zjawiska fizyczne powodujące ten efekt);
- stopień oporu ośrodka porowatego opisuje się prostymi prawami z wykorzystaniem globalnych współczynników.

W podejściu mikro-skalowym cechy te są inne:

- ośrodek porowaty traktuje się jako układ kanalików o konkretnej strukturze przestrzennej (w kontekście złóż granularnych położenia i rozmiary poszczególnych cząstek muszą być znane);
- podczas przepływu płynu przez ośrodek porowaty analizuje się efekty lokalne, zachodzące na poziomie poszczególnych kanalików;
- stopień oporu ośrodka porowatego opisuje się ogólnymi równaniami mechaniki płynów.



Rys. 1.9. Wizualizacja podejścia makro- (po lewej) oraz mikro-skalowego (po prawej)

W badaniach ośrodków porowatych stosuje się także podejście mieszane, zwane również hybrydowym lub dwu-skalowym. W tym podejściu próbuje się łączyć zalety obu wymienionych wcześniej skal – w szczególności dąży się to tego, aby uzyskać modele globalne, możliwe do wykorzystania w skali makro, ale oparte na fizyce zjawisk zachodzących w skali mikro. W niniejszej monografii to podejście również jest wykorzystywane.

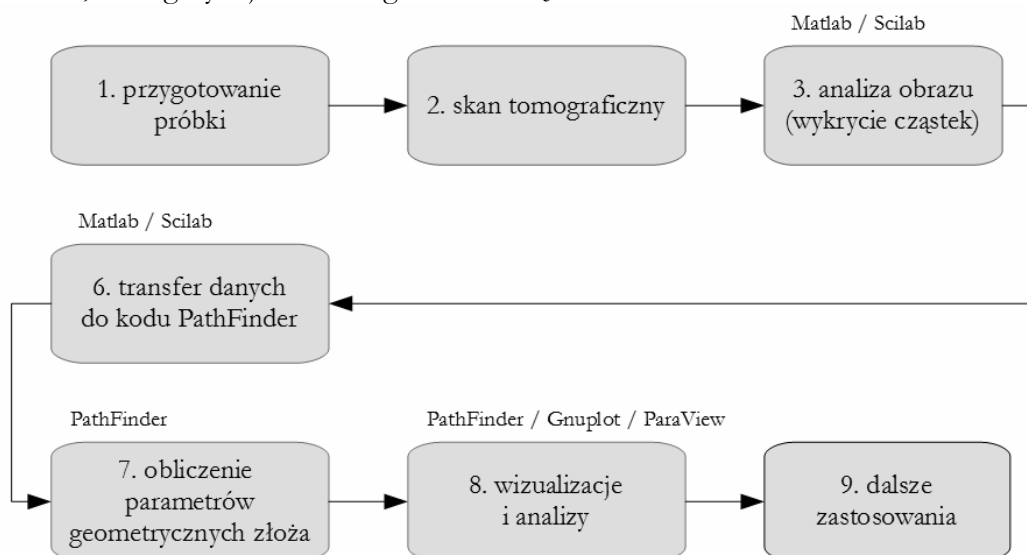
## 1.9. Metody określania struktury złoża

Z punktu widzenia niniejszej monografii podział ze względu na skalę obserwacji jest szczególnie ważny. Wiele poruszanych aspektów odnosi się do skali mikro, przez co niezbędne są szczegółowe informacje dotyczące geometrii złoża. W przypadku złóż granularnych, dane takie uzyskać można zasadniczo na trzy sposoby:

- analitycznie – poprzez wyliczanie współrzędnych i rozmiarów poszczególnych cząstek wg określonych wzorów matematycznych. To podejście nadaje się do tworzenia teoretycznych złóż o określonej i jednorodnej strukturze przestrzennej. Złoża takie mogą posłużyć w procesie weryfikacji różnych kodów i procedur obliczeniowych albo też jako wzorzec do przeprowadzenia walidacji modeli. W niniejszej monografii ten sposób generacji złóż nie jest wykorzystywany, gdyż zasadniczo jest ona dedykowana złożom rzeczywistym, a nie teoretycznym.
- eksperymentalnie – poprzez analizę struktury przestrzennej konkretnego złoża rzeczywistego (a właściwie próbki takiego złoża). W tym nurcie wykorzystuje się zazwyczaj różne metody tomografii komputerowej oraz analizę obrazu. Metodę stosowania tego podejścia przedstawiono w Rozdziale 4, w którym to szczegółowo przedstawiono sposób uzyskania informacji o położeniu oraz o rozmiarach każdej cząstki w złożu na podstawie wykonanego wcześniej skanu tomograficznego. Podejście to w monografii nazywane jest podejściem bezpośrednim.

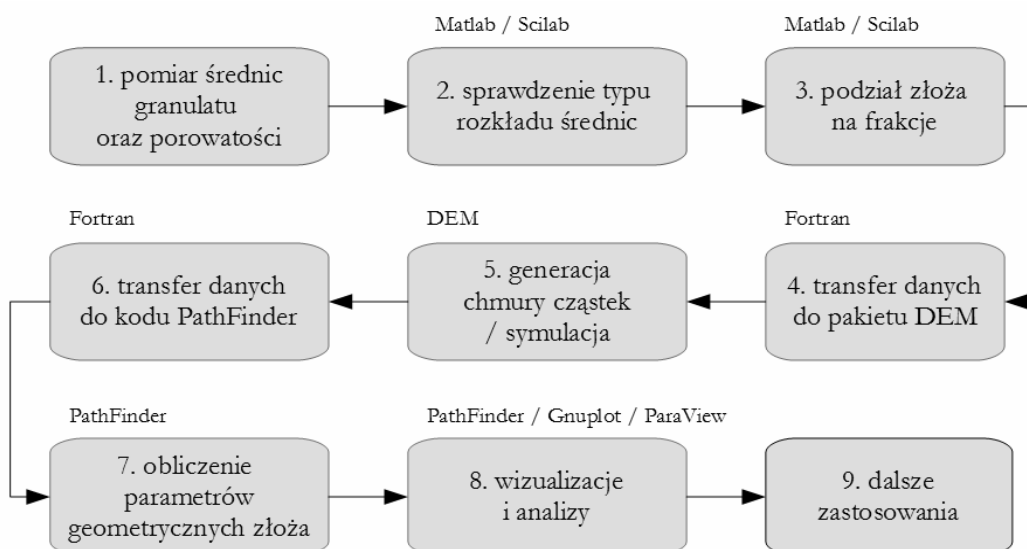
- symulacyjnie – poprzez zastosowanie matematycznych modeli dynamiki zbiorów cząstek. Najbardziej pomocna jest tu Metoda Elementów Dyskretnych, którą to omówiono szczegółowo w Rozdziale 5. W wyniku symulacji uzyskuje się dane o położeniu oraz o rozmiarach każdej cząstki w złożu. W monografii podejście to nazywane jest podejściem pośrednim.

Rys. 1.10 zawiera schemat działań realizowanych w podejściu bezpośrednim. Liczba kroków jest tu mniejsza niż w podejściu pośrednim i składa się z trzech głównych etapów. Jak już wspomniano, szczegóły tej metodologii zawarte są w Rozdziale 4.



Rys. 1.10. Struktura działań podejścia bezpośredniego

Na Rys. 1.11 przedstawiona jest schematycznie metodologia uzyskiwania danych o strukturze złoża za pomocą podejścia pośredniego (symulacyjnego). Krok 1 został omówiony w Rozdziale 2. Kroki 2 i 3 przedstawiono w Rozdziale 3. Kwestie związane z Metodą Elementów Dyskretnych (krok 5) zawarte są we wspomnianym już Rozdziale 5.



Rys. 1.11. Struktura działań podejścia pośredniego

## 1.10. Podejście dwu-skalowe

Dane numeryczne o położeniu i rozmiarach wszystkich cząstek w złożu można wykorzystać do przeprowadzenia analizy struktury przestrzennej złoża. Podstawowym efektem takiej analizy jest zbiór wartości  $\Phi$  opisujący geometryczne własności złoża:

$$\Phi = \{d(\mu, \sigma^2), \phi(V_p, V), \varepsilon(V_s, V), e(V_p, V_s), \tau^g(L_p, L_0), S_0(S_s, V_s, V), \dots\}, \quad (1.29)$$

gdzie:  $d$  - reprezentatywna średnica cząstki [m],  $\mu$  - wartość średnia<sup>1</sup> [m],  $\sigma^2$  - wariancja [m<sup>2</sup>],  $\phi$  - porowatość złoża [m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>],  $V_p$  - sumaryczna objętość porów [m<sup>3</sup>],  $V$  - objętość złoża [m<sup>3</sup>],  $\varepsilon$  - współczynnik upakowania [m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>],  $V_s$  - sumaryczna objętość cząstek stałych [m<sup>3</sup>],  $e$  - wskaźnik porowatości [m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>],  $\tau^g$  - krętość geometryczna [m/m],  $L_p$  - długość drogi liczonej wewnątrz kanałów porowych [m],  $L_0$  - grubość warstwy, na której liczona jest krętość [m],  $S_0$  - powierzchnia specyficzna [m<sup>2</sup>],  $S_s$  - zewnętrzna powierzchnia cząstek (równa powierzchni wewnętrznej) [m<sup>2</sup>].

Oczywiście – na podstawie tych samych danych wyjściowych lub też wyznaczonych już elementów zbioru  $\Phi$  – uzyskać można wiele innych istotnych informacji o złożu. Szczegóły związane z omawianymi tu aspektami przedstawiono w Rozdziale 6.

Istota podejścia dwu-skalowego polega na tym, że mając określony – na podstawie analizy mikro-skalowej – zbiór  $\Phi$ , a także dane o parametrach przepływającego przez złożo płynu, można formułować makro-skalowe matematyczne modele zachowawcze układu, w szczególności modele pozwalające na przewidywanie oporów przepływu

$$\frac{dp}{dx} = \frac{dp}{dx}(\Phi, \rho(T), \mu(T)), \quad (1.30)$$

gdzie:  $\frac{dp}{dx}$  - spadek ciśnienia w kierunku przepływu [Pa/m],  $\Phi$  - zbiór parametrów charakteryzujących geometryczne własności ośrodka porowatego (tu. złoża),  $\rho$  - gęstość płynu przepływającego przez złożo [kg/m<sup>3</sup>],  $\mu$  - współczynnik lepkości dynamicznej płynu przepływającego przez złożo [Pa·s],  $T$  - temperatura płynu [°C].

Szczegóły dotyczące metod modelowania przepływów płynów przez ośrodki porowate przedstawione są w Rozdziale 7. Tu zwraca się jedynie uwagę, że w ogólnym przypadku możliwe są dwie jakościowo różne metodologie:

- analityczna – w tym podejściu wykorzystuje się różne wzory analityczne, takie jak np. równanie Darcy'ego, Forchheimera, Erguna i inne. W efekcie ich użycia uzyskuje się informacje o spadku ciśnień w wybranym kierunku przestrzennym. Zbiór  $\Phi$  jest w tym przypadku zbiorem wielkości skalarnych.
- numeryczna – w tym podejściu wzory analityczne (mogą to być te same równania, co w podejściu pierwszym) wykorzystywane są do definiowania źródeł oporu w równaniu bilansu pędu. W tym przypadku zbiór  $\Phi$  zawierać może pola skalarnie lub wektorowe (dodatkowo stałe lub zmienne w czasie), a w wyniku symulacji, bazujących np. na Metodzie Objętości Skończonych, uzyskuje się pełne informacje o przepływie w przestrzeni 3D.

<sup>1</sup> Część symboli, jak np.  $\mu$ , posiada w monografii różne znaczenie, wynikające z przyjętej w literaturze nomenklatury.

Przykłady zastosowania metodologii analitycznej i symulacyjnej przedstawiono w Rozdziale 8.

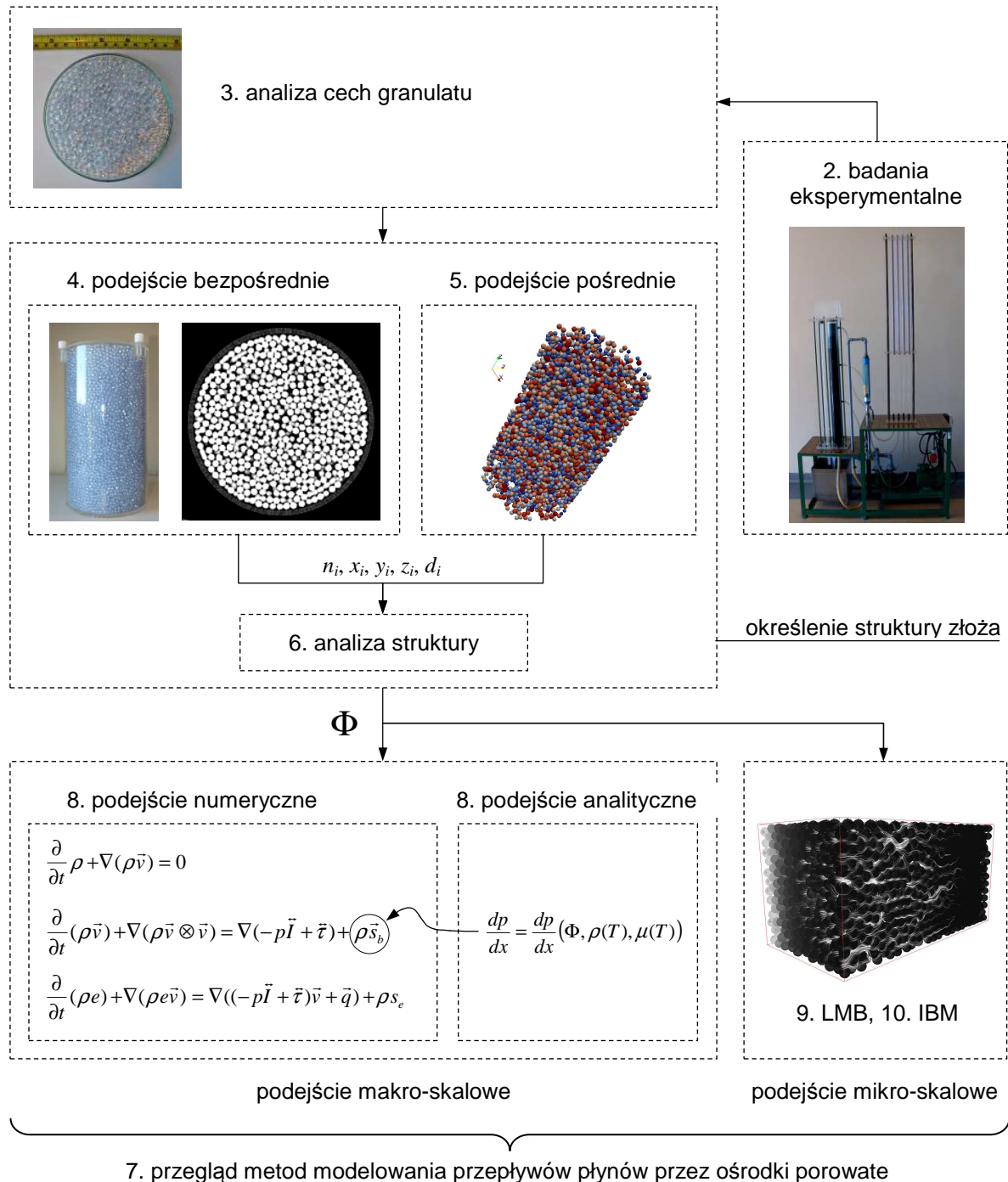
Niezależnie od obu wyżej wymienionych metodologii, dysponując wiedzą o geometrii złoza, można wygenerować w przestrzeniach porowych odpowiednią siatkę numeryczną i przeprowadzić na niej symulacje Metodą Objętości Skończonych (ang. Finite Volume Method, FVM), Metodą Elementów Skończonych (ang. Finite Element Method, FEM), Metodą Gazu Sietowego Boltzmanna (ang. Lattice-Boltzmann Method, LBM) czy też Metodą Zanurzonego Brzegu (ang. Immersed Boundary Method, IBM). Dwie ostatnie metody przedstawiono odpowiednio w Rozdziałach 9 oraz 10.

## Struktura monografii

Aspekty badawcze wzmiankowane w poprzednich punktach opisane są szczegółowo w kolejnych rozdziałach monografii. Układ treści jest następujący (Rys. 1.12):

- **Rozdział 2** zawiera opis materiału granularnego użytego w badaniach, opis stanowiska badawczego oraz wyniki makro-skalowego badania oporów przepływu wody przez ośrodek porowaty przy zmiennej prędkości filtracji. W dalszej części rozdziału wyznaczono, stosując zagadnienie odwrotne, charakterystyczne współczynniki ośrodka: współczynnik przepuszczalności oraz współczynnik Forchheimera.
- **Rozdział 3** obejmuje zagadnienia związane z analizą rozkładu średnic cząstek złoza rzeczywistego oraz generacją wirtualnego rozkładu średnic o zadanych cechach.
- **Rozdział 4** zawiera opis metodologii uzyskiwania danych o położeniu i rozmiarach wszystkich cząstek próbki złoza w oparciu o metody obrazowania komputerowego oraz analizę obrazu.
- **Rozdział 5** zawiera opis metodologii generowania chmur cząstek o takich samych parametrach jak w złożu rzeczywistym, z zastosowaniem Metody Elementów Dyskretnych. W rozdziale zamieszczono również ogólne wprowadzenie do tej metody. Jako porowatość docelową w modelu symulacyjnym przyjęto porowatość wyznaczoną eksperymentalnie (patrz Rozdział 2). Do zdefiniowania cech rozkładu cząstek posłużono się wynikami analiz przedstawionych w Rozdziale 3.
- **Rozdział 6** zawiera opis metodologii wyznaczania zbioru parametrów geometrycznych charakteryzujących strukturę przestrzenną złóż granularnych (zbioru  $\Phi$ ). W rozdziale przedstawiono odpowiednie algorytmy, a także wyniki obliczeń bazujące na bezpośrednich (patrz Rozdział 4) oraz pośrednich (patrz Rozdział 5) danych o geometrii złoza. Największy nacisk położono na aspekty związane z krętością geometryczną przestrzeni porowych.
- **Rozdział 7** obejmuje przegląd metod modelowania przepływów przez ośrodki porowate, ze szczególnym uwzględnieniem skal badawczych.
- **Rozdział 8** zawiera przykłady zastosowania zbioru  $\Phi$  do makro-skalowego modelowania przepływów płynów przez ośrodki porowate. W rozdziale przedstawiono zarówno podejście analityczne jak i numeryczne, a wyniki odniesiono do badań eksperymentalnych.
- **Rozdział 9** zawiera opis metodologii mikro-skalowego modelowania przepływów płynów przez ośrodki porowate z wykorzystaniem Metody Gazu Sietowego Boltzmanna. Metodę tę opisano pokrótce w pierwszej części rozdziału. W przykładach przedstawiono również symulacje odnoszące się do złoza wirtualnego, którego sposób generacji zawarto w Rozdziale 5.
- **Rozdział 10** posiada podobną zawartość jak Rozdział 9, z tym że symulacje wykonane zostały Metodą Zanurzonego Brzegu. Tu również odniesiono się do wyników uzyskanych w innych rozdziałach monografii.

Istotne jest, że wszystkie poruszane w monografii zagadnienia odnoszą się do tego samego materiału granularnego – kulek szklanych.



Rys. 1.12. Schemat struktury badań opisanych w monografii (liczby oznaczają numery rozdziałów)

## Literatura

1. Bunte K., Abt S.R.: Sampling Surface and Subsurface Particle-Size Distributions in Wadable Gravel- and Cobble-Bed Streams for Analyses in Sediment Transport, Hydraulics, and Streambed Monitoring. General Technical Report RMRS-GTR-74, United States Department of Agriculture, Rocky Mountain Research Station 2001.



2. Carman P.C.: Fluid Flow through a Granular Bed. Trans I Chem Eng 1997, Jubilee Supplement, 75, 32-48.
3. Chell R.J.: Introduction to Clastic Sedimentology. Department of Earth Sciences, Brock University St. Catharines, Ontario (Canada) 2005.
4. Drevin G.R., Vincent L.: Granulometric Determination Of Sedimentary Rock Particle Roundness. Proc Int Symp Math Morphol 2002, 315-325.
5. Kozeny J.: Über kapillare Leitung des Wassers im Boden. Akad Wiss Wien 1927, 136(2a), 271-306.
6. Krumbein W.C.: Measurement and geological significance of shape and roundness of sedimentary particles. J Sediment Petrol 1941, 11(2), 64-72.
7. Sawicki J., Szpakowski W., Weinerowska K., Wołoszyn E., Zima P.: Laboratorium z mechaniki płynów i hydrauliki. Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej 2004.
8. Sobieski W.: Jakość wiedzy bazowej w badaniach naukowych. Badania naukowe Katedry Mechaniki i Podstaw Konstrukcji Maszyn 2014, 29-47.
9. Rodriguez J., M., Edeskär T., Knutsson S.: Particle Shape Quantities and Measurement Techniques - A Review. Electr J Geotechn Eng 2013, 18(20), 169-198.
10. Wyroślak M., Szymkiewicz A.: Mechanika Gruntów 1, Przykłady oraz materiały pomocnicze w zarysie. Politechnika Gdańska. Wydział Inżynierii Lądowej i Środowiska, Gdańsk 2013 [on-line].
11. Zavala J.M.R.: Particle shape quantities and influence on geotechnical properties – a review. Division of Mining and Geotechnical Engineering, Department of Civil, Environmental and Natural Resources, Luleå University of Technology, Sweden 2012.



## 2. BADANIA EKSPERYMENTALNE PRZEPIYU PLYNÓW PRZEZ ZŁOŻA GRANULARNE

### 2.1. Materiał granularny

Wszystkie opisane w monografii badania odnoszą się do tego samego materiału granularnego, tj. kulek szklanych do młynów perelkowych o średnicach katalogowych<sup>2</sup> 4, 6 oraz 8 [mm] (SiLibeads Glass beads Type S [15]). W większości rozdziałów, do ilustracji omawianych zagadnień, wykorzystuje się złoże z kulkami o średnicy 6 [mm] (Rys. 2.1). Należy uzupełnić, że kwestie rozmiaru kulek oraz sposobu definiowania ich średnicy reprezentatywnej są zasadniczo niezależne od zagadnień przedstawianych w dalszej części rozdziału.



Rys. 2.1. Materiał granularny – kulki szklane o średnicy 6 [mm]

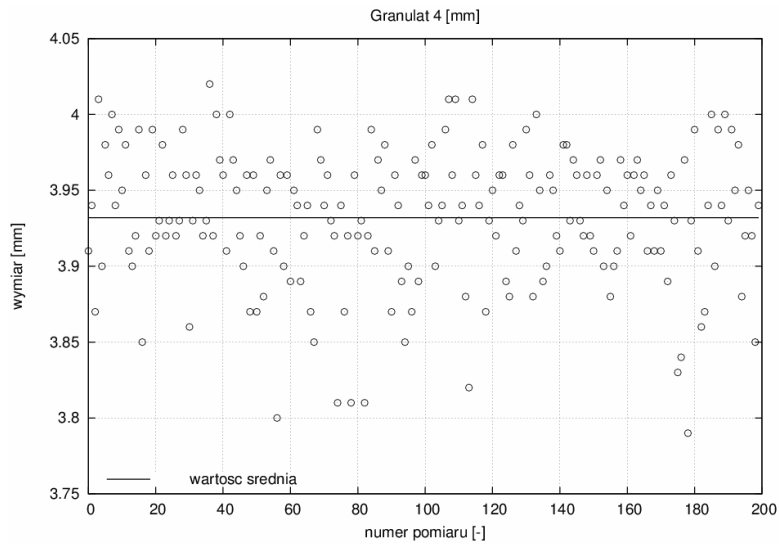
Istotną kwestią dotyczącą materiału granularnego jest określenie rozmiaru cząstek. W tym celu z każdego typu kulek wybrano losowo 100 sztuk, a następnie dla każdej z nich zmierzono dwukrotnie średnicę, w dwóch ortogonalnych kierunkach (Tabela. 2.1 oraz Rysunki 2.2-2.4). Pomiar średnic w trzech kierunkach okazał się kłopotliwy ze względu na trudności w dokładnym ustalaniu orientacji cząstek. Z tego względu zamiast indeksować wyniki symbolami osi lokalnego układu współrzędnych (patrz Rys. 1.3), indeksowano je numerem pomiaru. Średnie reprezentatywne, wyliczone dla każdego granulatu jako średnia z 200 pomiarów jednostkowych, wynoszą odpowiednio: 3.932, 6.072 oraz 7.916 [mm]. Pomiaru wykonano przy użyciu śruby mikrometrycznej o dokładności 0.01 [mm].

Oprócz pomiarów rozmiaru cząstek, wykonano również pomiary masy, gęstości oraz porowatości (Tabele 2.2-2.4). Porowatość próbki złoża wyznaczona została za pomocą dwóch cylindrów miarowych o pojemności 250 [ml]. Pierwszy cylinder zawierał próbkę złoża, drugi zaś wodę destylowaną. Przyjęto, że objętość części porowej równa się objętości wody destylowanej ( $V_f$ ) przelanej do cylindra zawierającego próbkę materiału granularnego (o objętości  $V$ ). Pomiar wykonano 10 razy, za każdym razem wykorzystując nową i suchą próbkę złoża, którą wcześniej ważono. Wartość średnia porowatości wyniosła odpowiednio: 0.407, 0.413 oraz 0.411 [-], licząc od kulek o najmniejszych rozmiarach. Uzyskane wyniki są typowe dla luźno usypanego granulatu sferycznego (0.40-0.41) [23]. Wartości te są również zbliżone do wartości teoretycznej, równej 0.3954, obliczonej dla sfer o jednakowych średnicach i regularnie ułożonych w przestrzeni w topologii romboidalnej [6].

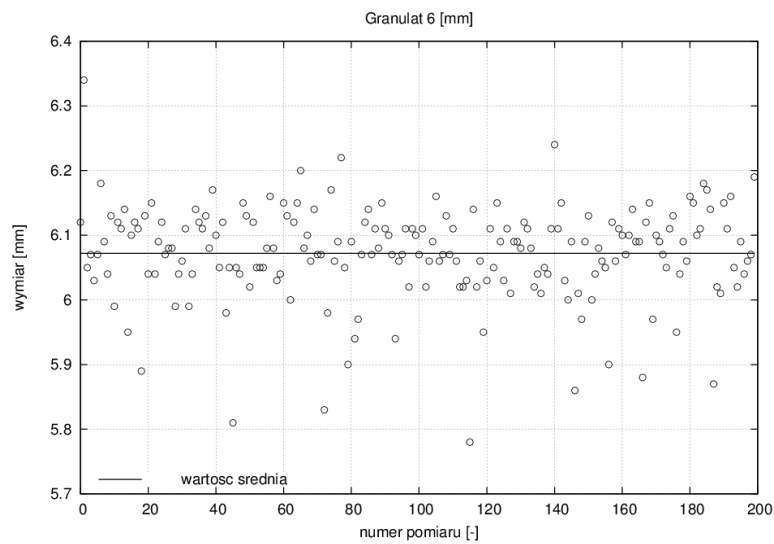
<sup>2</sup>Średnice katalogowe są dalej używane do identyfikacji poszczególnych złożeń.

Tabela. 2.1. Wyniki pomiarów wymiarów charakterystycznych cząstek

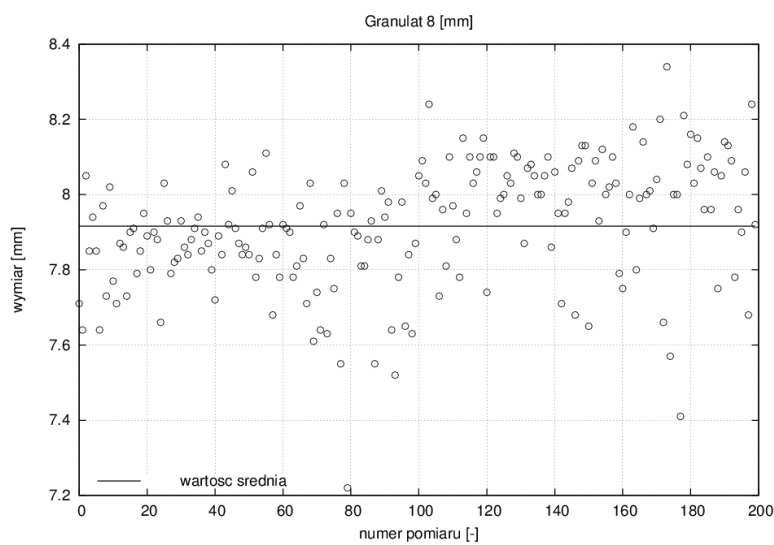
nr	Granulat 4 [mm]		Granulat 6 [mm]		Granulat 8 [mm]		nr	Granulat 4 [mm]		Granulat 6 [mm]		Granulat 8 [mm]	
	$l_1$	$l_2$	$l_1$	$l_2$	$l_1$	$l_2$		$l_1$	$l_2$	$l_1$	$l_2$	$l_1$	$l_2$
[mm]							[mm]						
1	3.91	3.96	6.12	6.07	7.71	8.05	51	3.87	3.91	6.02	6.13	7.84	7.65
2	3.94	3.94	6.34	6.11	7.64	8.09	52	3.92	3.96	6.12	6.00	8.06	8.03
3	3.87	3.98	6.05	6.02	8.05	8.03	53	3.88	3.97	6.05	6.04	7.78	8.09
4	4.01	3.90	6.07	6.06	7.85	8.24	54	3.95	3.90	6.05	6.08	7.83	7.93
5	3.9	3.93	6.03	6.09	7.94	7.99	55	3.97	3.95	6.05	6.06	7.91	8.12
6	3.98	3.94	6.07	6.16	7.85	8.00	56	3.91	3.88	6.08	6.05	8.11	8.00
7	3.96	3.99	6.18	6.06	7.64	7.73	57	3.80	3.90	6.16	5.90	7.92	8.02
8	4.00	4.01	6.09	6.07	7.97	7.96	58	3.96	3.91	6.08	6.12	7.68	8.10
9	3.94	3.96	6.04	6.13	7.73	7.81	59	3.90	3.97	6.03	6.06	7.84	8.03
10	3.99	4.01	6.13	6.07	8.02	8.10	60	3.96	3.94	6.04	6.11	7.78	7.79
11	3.95	3.93	5.99	6.11	7.77	7.97	61	3.89	3.96	6.15	6.10	7.92	7.75
12	3.98	3.94	6.12	6.06	7.71	7.88	62	3.95	3.92	6.13	6.07	7.91	7.90
13	3.91	3.88	6.11	6.02	7.87	7.78	63	3.94	3.96	6.00	6.10	7.9	8.00
14	3.90	3.82	6.14	6.02	7.86	8.15	64	3.89	3.97	6.12	6.14	7.78	8.18
15	3.92	4.01	5.95	6.03	7.73	7.95	65	3.92	3.95	6.15	6.09	7.81	7.80
16	3.99	3.96	6.10	5.78	7.90	8.10	66	3.94	3.96	6.20	6.09	7.97	7.99
17	3.85	3.94	6.12	6.14	7.91	8.03	67	3.87	3.91	6.08	5.88	7.83	8.14
18	3.96	3.98	6.11	6.02	7.79	8.06	68	3.85	3.94	6.10	6.12	7.71	8.00
19	3.91	3.87	5.89	6.06	7.85	8.10	69	3.99	3.91	6.06	6.15	8.03	8.01
20	3.99	3.93	6.13	5.95	7.95	8.15	70	3.97	3.95	6.14	5.97	7.61	7.91
21	3.92	3.95	6.04	6.03	7.89	7.74	71	3.94	3.91	6.07	6.10	7.74	8.04
22	3.93	3.92	6.15	6.11	7.80	8.10	72	3.96	3.94	6.07	6.09	7.64	8.20
23	3.98	3.96	6.04	6.05	7.90	8.10	73	3.93	3.89	5.83	6.07	7.92	7.66
24	3.92	3.96	6.09	6.15	7.88	7.95	74	3.92	3.96	5.98	6.05	7.63	8.34
25	3.93	3.89	6.12	6.09	7.66	7.99	75	3.81	3.93	6.17	6.11	7.83	7.57
26	3.96	3.88	6.07	6.03	8.03	8.00	76	3.94	3.83	6.06	6.13	7.75	8.00
27	3.92	3.98	6.08	6.11	7.93	8.05	77	3.87	3.84	6.09	5.95	7.95	8.00
28	3.93	3.91	6.08	6.01	7.79	8.03	78	3.92	3.97	6.22	6.04	7.55	7.41
29	3.99	3.94	5.99	6.09	7.82	8.11	79	3.81	3.79	6.05	6.09	8.03	8.21
30	3.96	3.93	6.04	6.09	7.83	8.10	80	3.96	3.93	5.9	6.06	7.22	8.08
31	3.86	3.99	6.06	6.08	7.93	7.99	81	3.92	3.99	6.09	6.16	7.95	8.16
32	3.93	3.96	6.11	6.12	7.86	7.87	82	3.93	3.91	5.94	6.15	7.9	8.03
33	3.96	3.88	5.99	6.11	7.84	8.07	83	3.81	3.86	5.97	6.1	7.89	8.15
34	3.95	4.00	6.04	6.08	7.88	8.08	84	3.92	3.87	6.07	6.11	7.81	8.07
35	3.92	3.95	6.14	6.02	7.91	8.05	85	3.99	3.94	6.12	6.18	7.81	7.96
36	3.93	3.89	6.12	6.04	7.94	8.00	86	3.91	4.00	6.14	6.17	7.88	8.10
37	4.02	3.90	6.11	6.01	7.85	8.00	87	3.97	3.90	6.07	6.14	7.93	7.96
38	3.92	3.96	6.13	6.05	7.90	8.05	88	3.95	3.99	6.11	5.87	7.55	8.06
39	4.00	3.95	6.08	6.04	7.87	8.10	89	3.98	3.94	6.08	6.02	7.88	7.75
40	3.97	3.92	6.17	6.11	7.80	7.86	90	3.91	4.00	6.15	6.01	8.01	8.05
41	3.96	3.91	6.10	6.24	7.72	8.06	91	3.87	3.93	6.11	6.15	7.94	8.14
42	3.91	3.98	6.05	6.11	7.89	7.95	92	3.96	3.99	6.1	6.11	7.98	8.13
43	4.00	3.98	6.12	6.15	7.84	7.71	93	3.94	3.95	6.07	6.16	7.64	8.09
44	3.97	3.93	5.98	6.03	8.08	7.95	94	3.89	3.98	5.94	6.05	7.52	7.78
45	3.95	3.97	6.05	6.00	7.92	7.98	95	3.85	3.88	6.06	6.02	7.78	7.96
46	3.92	3.96	5.81	6.09	8.01	8.07	96	3.90	3.92	6.07	6.09	7.98	7.90
47	3.90	3.93	6.05	5.86	7.91	7.68	97	3.87	3.95	6.11	6.04	7.65	8.06
48	3.96	3.92	6.04	6.01	7.87	8.09	98	3.97	3.92	6.02	6.06	7.84	7.68
49	3.87	3.96	6.15	5.97	7.84	8.13	99	3.89	3.85	6.11	6.07	7.63	8.24
50	3.96	3.92	6.13	6.09	7.86	8.13	100	3.96	3.94	6.10	6.19	7.87	7.92



Rys. 2.2. Wyniki pomiarów średnic dla granulatu 4 [mm]



Rys. 2.3. Wyniki pomiarów średnic dla granulatu 6 [mm]



Rys. 2.4. Wyniki pomiarów średnic dla granulatu 8 [mm]

Tabela. 2.2. Wyniki pomiarów porowatości granulatu 4 [mm]

$m$	$V$	$V_f$	$\phi$	$\rho$
[g]	[cm <sup>3</sup> ]	[cm <sup>3</sup> ]	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	[kg/m <sup>3</sup> ]
362.60	244	100	0.410	2518
359.59	246	102	0.415	2497
354.68	244	102	0.418	2498
370.62	244	106	0.434	2686
344.33	236	98	0.415	2495
352.73	240	100	0.417	2520
342.19	232	94	0.405	2480
379.98	246	88	0.358	2405
372.24	244	92	0.377	2449
356.87	242	102	0.421	2549
			<b>0.407</b>	<b>2510</b>

Tabela. 2.3. Wyniki pomiarów porowatości granulatu 6 [mm]

$m$	$V$	$V_f$	$\phi$	$\rho$
[g]	[cm <sup>3</sup> ]	[cm <sup>3</sup> ]	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	[kg/m <sup>3</sup> ]
345.76	238	98	0.412	2470
343.66	236	98	0.415	2490
360.10	246	102	0.415	2501
360.77	246	102	0.415	2505
355.21	240	98	0.408	2501
363.43	246	100	0.407	2489
340.57	238	102	0.429	2504
350.64	240	100	0.417	2505
364.43	248	102	0.411	2496
359.83	248	100	0.403	2431
			<b>0.413</b>	<b>2489</b>

Tabela. 2.4 Wyniki pomiarów porowatości granulatu 8 [mm]

$m$	$V$	$V_f$	$\phi$	$\rho$
[g]	[cm <sup>3</sup> ]	[cm <sup>3</sup> ]	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	[kg/m <sup>3</sup> ]
345.66	240	102	0.425	2505
352.78	238	96	0.403	2484
352.72	244	102	0.418	2484
347.10	244	104	0.426	2479
353.67	236	94	0.398	2491
356.19	244	100	0.410	2474
351.25	240	98	0.408	2474
364.93	244	96	0.393	2466
350.47	244	102	0.418	2468
350.28	244	100	0.410	2433
			<b>0.411</b>	<b>2476</b>

Warto zwrócić uwagę, że w kontekście dalszych rozważań (np. do generacji chmur cząstek za pomocą Metody Elementów Dyskretnych), zarówno masa jak i gęstość cząstek nie mają znaczenia. Dane te podane są tutaj wyłącznie do celów informacyjnych.

## 2.2. Równanie Forchheimera

Dalsza część badań eksperymentalnych dotyczy przepływu płynów przez złoża porowate. W takich sytuacjach, oprócz występujących zawsze, w przypadku przepływów płynów rzeczywistych, strat liniowych i lokalnych, w układzie pojawiają się dodatkowe opory wynikające z ograniczenia pola przepływu, zmian kierunku ruchu płynu oraz zwiększenia powierzchni tarcia. Ponieważ geometria przestrzeni porowych zależy silnie od rodzaju materiału porowatego, dlatego też różne ośrodki porowate generują różne opory (wyrażane najczęściej poprzez spadek hydrauliczny lub spadek piezometryczny).

Makroskopowe równania opisujące zależność między prędkością filtracji a spadkiem ciśnienia występującym podczas przepływu płynu przez ośrodek porowaty zawierają zazwyczaj dwa podstawowe czony: liniowy (związany z lepkością płynu) oraz nieliniowy (związany z oddziaływaniami dynamicznymi). Zależność tę opisuje tzw. równanie Forchheimera (1901) [28,29]:

$$\frac{dp}{dx} = \frac{1}{\kappa} \cdot (\mu \cdot \vec{v}_f) + \beta \cdot (\rho \cdot \vec{v}_f^2), \quad (2.1)$$

które to można również zapisać w sposób bardziej ogólny:

$$\frac{dp}{dx} = A(\Phi) \cdot (\mu \cdot \vec{v}_f) + B(\Phi) \cdot (\rho \cdot \vec{v}_f^2), \quad (2.2)$$

gdzie:  $p$  - ciśnienie [Pa],  $x$  - współrzędna kierunku, na którym występuje spadek ciśnienia [m],  $\kappa$  - współczynnik przepuszczalności [m<sup>2</sup>],  $\beta$  - współczynnik Forchheimera [1/m],  $A(\Phi)$  [1/m<sup>2</sup>] oraz  $B(\Phi)$  [1/m] - współczynniki zależne od zbioru  $\Phi$ , charakteryzującego strukturę przestrzenną ośrodka porowatego (zobacz Rozdział 1),  $\mu$  - współczynnik lepkości dynamicznej płynu [Pa·s],  $\rho$  - gęstość płynu [kg/m<sup>3</sup>],  $\vec{v}_f$  - prędkość filtracji [m/s].

W Tabeli 2.5 przedstawiono zestawienie formuł przeznaczonych dla materiałów granulanych, służących do wyznaczania tzw. współczynnika filtracji  $K$  (ang. hydraulic conductivity). Na jego podstawie obliczyć można – występujący w równaniu (2.1) – współczynnik przepuszczalności  $\kappa$  (ang. permeability). Związek między tymi współczynnikami jest następujący:

$$K = \frac{g}{\nu} \cdot \kappa, \quad (2.3)$$

gdzie:  $K$  - współczynnik filtracji [m/s],  $\nu$  - kinematyczny współczynnik lepkości [m<sup>2</sup>/s],  $g$  - przyspieszenie ziemskie [m/s<sup>2</sup>].

Symbole w Tabeli 2.5 oznaczają:  $d_i$  - średnice cząstek, które wraz z cząstkami mniejszymi stanowią  $i\%$  masy granulatu [mm],  $I_0$  - odległość między liniami wyznaczonymi przez wartości  $d_{10}$  oraz  $d_{50}$  na krzywej uziarnienia [mm],  $\varepsilon_f$  - czynnik upakowania cząstek [-],  $\alpha$  - czynnik kształtu cząstek [-],  $P_i$  - procentowy udział poszczególnych frakcji cząstek,  $d_i$  - średnica reprezentatywna poszczególnych frakcji cząstek,  $n_{frac}$  - liczba frakcji.

Należy uzupełnić, że w literaturze spotyka się czasami kilka różnych formuł przypisywanych temu samemu autorowi (przypadek taki dotyczy np. formuły Hazena). Biorąc pod uwagę kontekst dalszych rozważań, w tabeli zamieszczono te wersje, która posiadają związki z parametrami charakteryzującymi strukturę geometryczną złoża (elementami zbioru  $\Phi$ ).

Tabela 2.5. Zestawienie formuł obliczeniowych służących do wyznaczania wartości współczynnika filtracji

Lp.	Źródło	Formuła	Uwagi
1	Hazen (1892) [12,16,26]	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 6 \cdot 10^{-4} \cdot [1 + 10 \cdot (\phi - 0.26)] \cdot d_{10}^2$	$0.1 \leq d \leq 3.0$ [mm] $C_U < 5$
2	Slichter (1898) [11,16,26]	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 0.01 \cdot \phi^{3.287} \cdot d_{10}^2$	$0.01 \leq d \leq 5.0$ [mm] $C_U < 5$
3	Terzaghi (1925) [11,26]	$K = \frac{g}{\nu} \cdot C \cdot \left( \frac{\phi - 0.13}{\sqrt[3]{1 - \phi}} \right)^2 \cdot d_{10}^2$	dla cząstek gładkich: $C = 10.7 \cdot 10^{-3}$ dla cząstek nieregularnych $C = 6.1 \cdot 10^{-3}$
4	Fair & Hatch (1933) [17]	$K = \frac{g}{\nu} \cdot \varepsilon_f \left( \frac{\alpha \sum_{i=0}^{n_{frac}} P_i}{100 \sum_{i=0}^{n_{frac}} d_i} \right)^{-1} \cdot \frac{\phi^3}{(1 - \phi)^2}$	$\varepsilon_f \approx 5.0$ $6.0 \leq \alpha \leq 7.7$
5	Kozeny-Carman (1937) [3,13,11,16,26]	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 8.3 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{\phi^3}{(1 - \phi)^2} \cdot d^2$	$d \leq 3$ [mm]
6	Ergun (1952) [8]	$K = \frac{g}{\nu} \cdot \frac{1}{150} \cdot \frac{\phi^3}{(1 - \phi)^2} \cdot d^2$	-
7	Breyer (1966) [12,16,26]	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 6 \cdot 10^{-4} \cdot \log \frac{500}{C_U} \cdot d_{10}^2$	$0.06 \leq d \leq 0.6$ [mm] $1 < C_U < 20$
8	Freeze & Cherry (1979) [17]	$K = C \cdot d^2$	$C = 1.0$
9	Shepherd (1989) [17]	$K = C_1 \cdot d^{C_2}$	$4.79 \cdot 10^{-2} \leq C_1 \leq 9.86$ $1.11 \leq C_2 \leq 2.05$ [-]
10	Alyamani & Sen (1993) [17]	$K \approx 1300 \cdot [I_0 + 0.025 \cdot (d_{50} - d_{10})]^2$	-
11	United States Bureau of Reclamation [12,26]	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 4.8 \cdot 10^{-4} \cdot d_{20}^{2.3}$	$C_U < 5$

Warto zwrócić uwagę, że wszystkie formuły zebrane w Tabeli 2.5 posiadają jednakową strukturę [16,26]:

$$K = \frac{g}{\nu} \cdot C \cdot f(\phi) \cdot d^2, \quad (2.4)$$

gdzie:  $d$  - średnica reprezentatywna (nazywana również średnicą efektywną) [mm],  
 $f(\phi)$  - funkcja porowatości wyznaczana eksperymentalnie lub też wyliczana z wzoru empirycznego:

$$f(\phi) = 0.255 \cdot (1 + 0.82^{C_U}). \quad (2.5)$$

Podczas obliczania wartości współczynnika filtracji należy zwrócić uwagę na jednostki. Formuły zestawione w Tabeli 2.5 dają wynik w [m/s], natomiast w literaturze (np. w pracach [11,19,25]), wyniki podaje się często w [m/dzień].

Należy wspomnieć, że część autorów dzieli formuły służące do obliczania współczynnika filtracji na kilka charakterystycznych grup. Przykładem może być tu praca [31], w której wyróżniono trzy takie grupy: równania typu Kozeny'ego-Carmana, równania typu Hazena oraz równania typu „amerykańskiego”.



Tabela 2.6. Zestawienie formuł przeznaczonych do obliczania wartości współczynnika Forchheimera [30,32,35,36]

Lp.	Źródło	Formuła	Jednostki	Uwagi
1	Ergun (1952)	$\beta = 1.75 \cdot \frac{1-\phi}{\phi^3 \cdot d}$	-	ośrodek granularny złożony z cząstek sferycznych
2	Cooke (1973)	$\beta = b \cdot \kappa^{-a}$ $1.24 < a < 1.6, 2.32 > b > 1.1$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/ft]	wapień, dolomit, piaskowiec
3	Thauvin & Mohant (1998)	$\beta = \frac{1.55 \cdot 10^4 \tau^{3.35}}{\kappa^{0.98} \cdot \phi^{0.29}}$	$\kappa$ [D], $\beta$ [1/cm], $\tau$ [-]	wszelkie rodzaje ośrodków porowatych, przepływy z dużą prędkością
4	Geertsma (1974)	$\beta = \frac{0.005}{\kappa^{0.5} \phi^{5.5}}$	$\kappa$ [cm <sup>2</sup> ], $\beta$ [1/cm]	piasek (związany lub luźny), piaskowiec
5	Tek et al. (1962)	$\beta = \frac{5.5 \cdot 10^9}{\kappa^{1.25} \cdot \phi^{0.75}}$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/cm]	wapień
6	Liu et al (1995)	$\beta = \frac{8.91 \cdot 10^8 \cdot \tau}{\kappa \cdot \phi}$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/ft], $\tau$ [-]	związane lub luźne ośrodki porowate
7	Thauvin & Mohant (1998)	$\beta = 10^4 \cdot a \cdot b^{-0.5} \kappa^{-0.5} \phi^{-1.5}$ $1.8 < a < 4, b = 150$	$\kappa$ [D], $\beta$ [1/cm]	złoża porowate złożone z cząstek o nieregularnych kształtach
8	McDonald et al (1997)	$\beta = 10^4 \cdot a \cdot b^{-0.5} \kappa^{-0.5} \phi^{-1.5}$ $a = 1.75, b = 180$	$\kappa$ [D], $\beta$ [1/cm]	złoża porowate złożone z cząstek sferycznych
9	Janicek & Katz (1955)	$\beta = \frac{1.82 \cdot 10^8}{\kappa^{1.25} \phi^{0.75}}$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/cm]	wapień
10	Pascal et al (1980)	$\beta = \frac{4.8 \cdot 10^{12}}{\kappa^{1.176}}$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/m]	ściany studni
11	Jones (1987)	$\beta = \frac{6.15 \cdot 10^{10}}{\kappa^{1.55}}$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/ft]	wapień, piaskowiec
12	Coles & Hartman (1998)	$\beta = \frac{1.07 \cdot 10^{12} \cdot \phi^{0.449}}{\kappa^{1.88}}$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/ft]	-
13	Coles & Hartman (1998)	$\beta = \frac{2.49 \cdot 10^{11} \cdot \phi^{0.537}}{\kappa^{1.79}}$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/ft]	-
14	Liu et al (2001)	$\beta = \frac{11500}{\kappa \cdot \phi}$	$\kappa$ [D], $\beta$ [1/cm]	piaskowiec
15	Cooper et al (1999)	$\beta = \frac{1 \cdot 10^{-3.25} \cdot \tau^{1.943}}{\kappa^{1.023}}$	$\kappa$ [cm <sup>2</sup> ], $\beta$ [1/cm]	ośrodki porowate anizotropowe
16	Khaniniani njan & Goudarzi (2008)	$\beta = \frac{4.8 \cdot 10^{11}}{\kappa^{1.8} \cdot \phi^{-0.48}}$	$\kappa$ [mD], $\beta$ [1/ft]	luźne złoża piasku złożone z ziaren o różnych rozmiarach

W przypadku współczynnika filtracji dość łatwo można odszukać w literaturze formuły przeznaczone dla ośrodków granularnych. Nie jest ich wiele, ale są one dokładnie opisane – w szczególności powszechnie podaje się zakresy ich obowiązywania. Ze współczynnikiem Forchheimera sytuacja jest nieco inna: wielu autorów omawia różne formuły (Tabela. 2.6) [35,36], ale po dokładniejszym zapoznaniu się z zagadnieniem [32] okazuje się, że tylko nieliczne mogą być zastosowane do materiałów granularnych.

Wszystkie przedstawione w Tabeli 2.6 formuły są funkcjami trzech parametrów

$$K = C \cdot \kappa^a \cdot \phi^b \cdot \tau^c, \quad (2.6)$$

gdzie:  $C$  - stała modelu,  $a$ ,  $b$ ,  $c$  - współczynniki (określane zazwyczaj empirycznie).

### 2.3. Rozwiązanie zagadnienia odwrotnego

Stosowanie przedstawionych w poprzednim punkcie formuł obliczeniowych przeznaczonych do określania wartości współczynników równania Forchheimera jest w praktyce bardzo kłopotliwe. W literaturze często nie podaje się informacji dotyczących obszarów stosowalności omawianych formuł, a także zakresów parametrów, dla których one obowiązują. Nieraz brak jest również zgodności co do postaci poszczególnych formuł obliczeniowych. Zdarza się, że to samo równanie zapisane jest w różnych pracach w inny sposób (zobacz Tabela 2.7 albo dyskusja w pracy [27]) lub też równania wyglądające tak samo określane są różnymi nazwami. Wykorzystywanie formuł utrudnia również fakt, że Autorzy często nie podają jednostek poszczególnych wielkości.

W praktyce, najlepszym sposobem na wyznaczenie współczynników równania Forchheimera wydaje się być rozwiązanie zagadnienia odwrotnego [30]. W tym celu należy wykonać eksperyment testowy, a następnie wyznaczyć (na jego podstawie) niezbędne współczynniki. Po ich uzyskaniu, te same wartości można wykorzystywać w obliczeniach innych układów, w których występuje ten sam materiał granularny. Metoda ta nie uwzględnia co prawda takich aspektów jak np. sposób usypywania złoża czy też jego historia (np. występowanie wibracji), powinna być jednak dokładniejsza niż korzystanie z dość niepewnych wzorów obliczeniowych (uwaga ta dotyczy szczególnie współczynnika Forchheimera).

Do wyznaczania parametrów  $\kappa$  i  $\beta$  na podstawie wartości eksperymentalnych najczęściej wykorzystuje się metodę wykresu Forchheimera (ang. Forchheimer Plot Method) [10]. W tym celu równanie (2.1) jest przekształcane do postaci:

$$-\frac{dp}{dx} \frac{1}{\vec{v}_f \cdot \mu} = \frac{1}{\kappa} + \beta \left( \frac{\rho \cdot \vec{v}_f}{\mu} \right). \quad (2.7)$$

Wprowadzając oznaczenia:

$$\begin{cases} Y = -\frac{dp}{dx} \frac{1}{\vec{v}_f \cdot \mu} \\ X = \frac{\rho \cdot \vec{v}_f}{\mu} \end{cases} \quad (2.8)$$

uzyskuje się zależność liniową:

$$Y = \beta \cdot X + \frac{1}{\kappa}. \quad (2.9)$$

Po dopasowaniu danych eksperymentalnych do równania (2.9) określić można wartości  $\frac{1}{\kappa}$  i  $\beta$ .

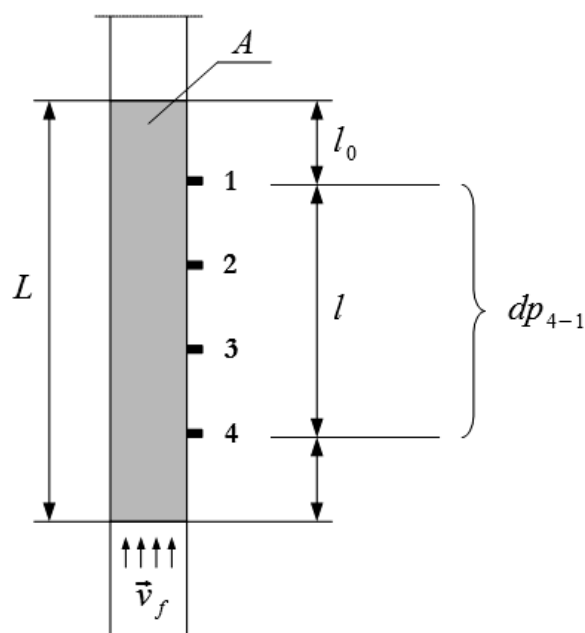
Tabela 2.7. Przegląd form zapisu równania Kozeny-Carmana (poprawne są tylko formuły (1) oraz (10), przy założeniu, że  $S_0$  oznacza powierzchnię specyficzną wg definicji Carmana)

Nr	Źródło	Formuła
1	Neithalath i in. [18] (autor powołuje się na książkę Beara z 1972)	$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot \tau_f \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
2	Fourie i in. [9] (autor powołuje się na książkę Beara z 1972)	$\frac{dp}{dx} = \frac{S_0}{C_{KC} \cdot \tau} \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
3	Dunn [7], Rainey i in. [21]	$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
4	Buyruk i in. [2]	$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
5	Ogilvie i in. [20]	$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot d^2 \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
6	Resch [22]	$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot \frac{(1-\phi)^2}{d^2 \cdot \phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
7	Rossel [24]	$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot \frac{(1-\phi)^2}{R^2 \cdot \phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
8	Vervoort [34]	$\frac{dp}{dx} = \frac{s^2}{C_{KC} \cdot \tau \cdot \phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
9	Carrier [4]	$\frac{dp}{dx} = \frac{1}{\rho \cdot g} \cdot C_{KC} \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1+e)}{e^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
10	Alam et all [1] (autor pisze, że jest to wersja Carmana z 1937 r)	$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot \tau_f \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
11	Chapuis [5]	$\frac{dp}{dx} = \frac{\rho}{g} \cdot C_{KC} \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1+e)}{e^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
12	Kutay & Aydilek [14]	$\frac{dp}{dx} = \frac{1}{\rho \cdot g} \cdot \frac{1}{C_{KC}} \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1-\phi^2)}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$
13	Thusyanthan & Madabhushi [33]	$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot \frac{1}{d^2} \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f)$

Na Rys. 2.5. przedstawiono schemat typowego układu pomiarowego służącego do wyznaczania oporów przepływu płynu przez ośrodek porowaty. Układ składa się z kolumny wypełnionej na odcinku  $L$  materiałem porowatym oraz z układu króćców pomiarowych (minimum dwóch). Powierzchnia przekroju poprzecznego kolumny wynosi  $A$  [m<sup>2</sup>].

W dalszej części pracy wykorzystano algorytm obliczeniowy przedstawiony na Rys. 2.6. Algorytm posłużył do stworzenia programu obliczeniowego<sup>3</sup>, ułatwiającego i przyspieszającego niezbędne obliczenia. Działanie algorytmu rozpoczyna się od określenia geometrii układu  $\{l, l_0, A\}$ , średnicy reprezentatywnej granulatu  $\{d\}$  oraz parametrów płynu  $\{\rho(T), \mu(T), \nu(T)\}$ . Istotne jest, aby wymiar  $l_0$  nie był zbyt mały, gdyż zmniejszy to dokładność odczytu na króćcu nr 1.

<sup>3</sup> Program ten, o nazwie „Forchheimer”, stanowi element projektu Pathfinder i dostępny jest jako dodatek na stronie projektu: <http://www.uwm.edu.pl/pathfinder/>.



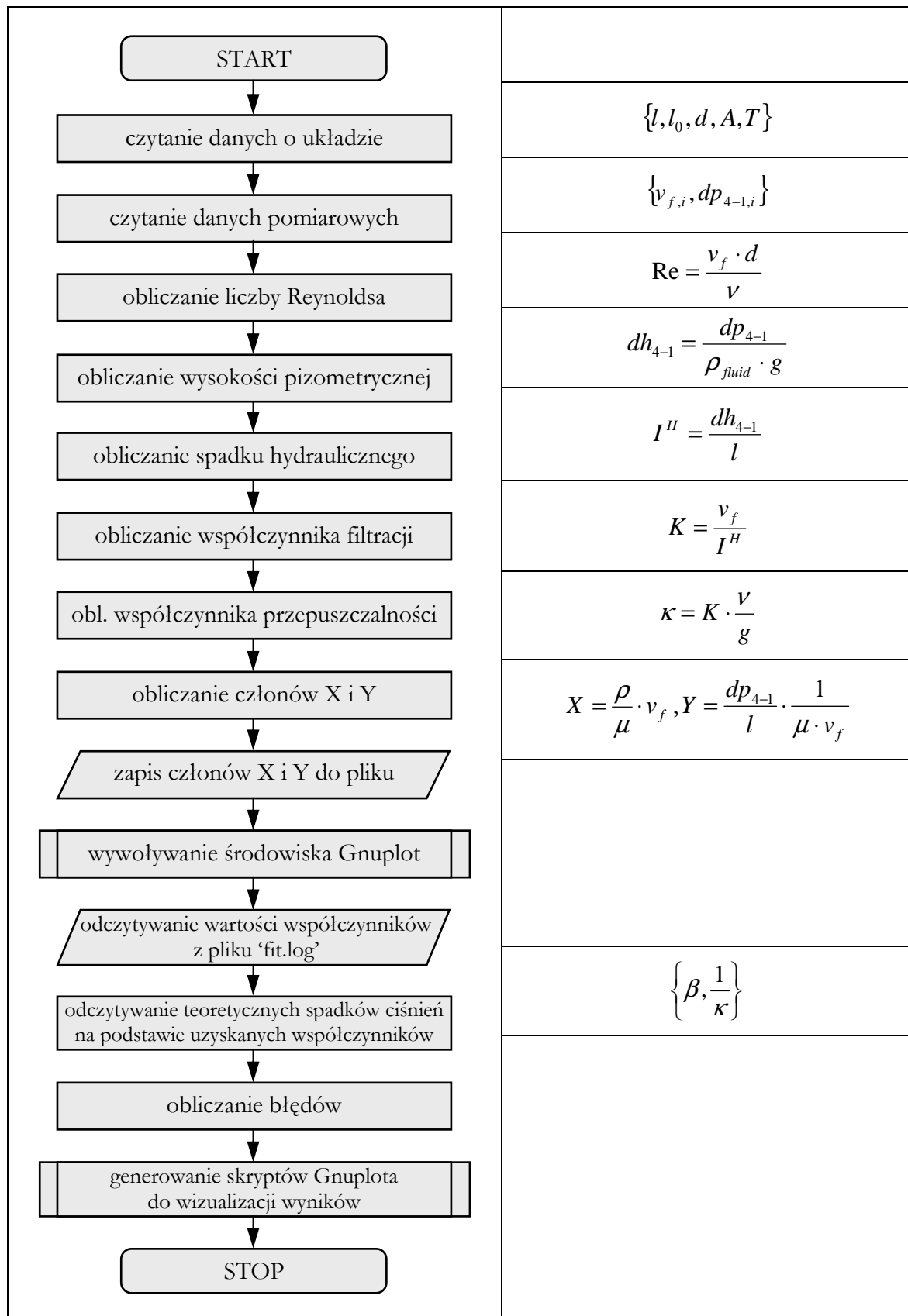
Rys. 2.5. Schemat typowego układu pomiarowego

Aby przeprowadzić obliczenia, należy podać zbiór par liczb odpowiadających poszczególnym punktom pomiarowym ( $\{v_{f,i}, dp_{4-1,i}\}$ ). Pierwsza liczba w parze określa prędkość filtracji (w [m/s]) druga zaś zmierzony spadek ciśnienia (w [Pa]). Sposób wyznaczania rozkładu ciśnienia jest niezależny od kwestii omawianych dalej, zaleca się jednak wykonać pomiary ciśnień w kilku punktach, a następnie określić wartość  $dp_{4-1}$  (lub wcześniej  $dh_{4-1}$ ) z funkcji aproksymacyjnej (Rys. 2.7). W ten sposób wykorzystane zostaną dane pochodzące z króćców pośrednich, a wynik obarczony będzie mniejszym błędem [28,29].

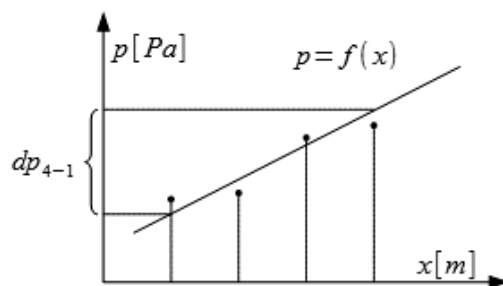
W dalszej kolejności obliczane są: liczba Reynoldsa  $Re$  [-], różnica wysokości piezometrycznych między wybranymi króćcami (zazwyczaj skrajnymi) wyrażona w [mm H<sub>2</sub>O] ( $dh_{4-1}$ ), spadek piezometryczny  $I^H$  [mm H<sub>2</sub>O/m], współczynnik filtracji  $K$  [m/s], współczynnik przepuszczalności  $\kappa$  [m<sup>2</sup>] oraz człony  $X$  i  $Y$  z równania (2.8). Znając wartości  $X$  i  $Y$  można dopasować współczynniki równania (2.9) do danych pomiarowych (zbioru par  $\{v_{f,i}, dp_{4-1,i}\}$ ).

W omawianej tu implementacji, główny kod programu napisany został w języku Fortran, dopasowanie zaś współczynników funkcji liniowej do danych odbywa się za pomocą środowiska Gnuplot poprzez użycie automatycznie generowanego skryptu. Oprócz wartości współczynników  $\kappa$  i  $\beta$ , wyliczane są również błędy względne i bezwzględne oraz tworzony jest zbiór wykresów:  $Re = f(v_f)$ ,  $dp_{4-1} = f(v_f)$ ,  $dh_{4-1} = f(v_f)$ ,  $I^H = f(v_f)$ ,  $K = f(v_f)$ ,  $\kappa = f(v_f)$ ,  $X = f(Y)$ . Oprócz tego tworzone są dwa wykresy, na których przedstawione jest porównanie między danymi pomiarowymi a spadkiem ciśnień wyliczonym na podstawie wartości współczynników wyznaczonych z rozwiązania zagadnienia odwrotnego.

Opisywany program obliczeniowy może być stosowany dla dowolnego rodzaju płynu, przy czym w przypadku wody istnieje możliwość bezpośredniego wyliczenia wartości współczynnika lepkości dynamicznej oraz kinematycznego współczynnika lepkości płynu z wbudowanych tablic termodynamicznych. Program działa w systemach operacyjnych Windows oraz UNIX/Linux.



Rys. 2.6. Schemat algorytmu programu użytego do wyznaczania współczynników równania Forchheimera

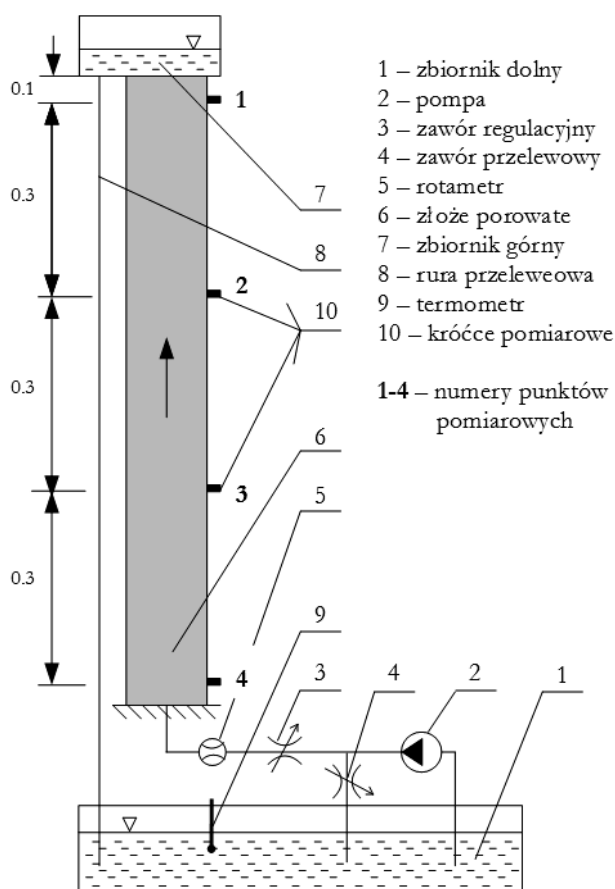


Rys. 2.7. Zalecany sposób wyznaczania różnicy ciśnień między skrajnymi króćcami pomiarowymi (kropki oznaczają wartości ciśnień zarejestrowane na poszczególnych króćcach pomiarowych)

## 2.4. Pomiar oporów przepływu wody przez ośrodki porowate

### 2.4.1. Stanowisko badawcze

Stanowisko do pomiaru oporów przepływu wody przez ośrodek porowaty przedstawiono na Rysunku 2.8. Składa się ono ze zbiornika (1), z którego woda – za pomocą pompy (2) – transportowana jest do cylindrycznej kolumny, o promieniu wewnętrznym 4 [cm], wypełnionej materiałem porowatym (6). Do regulacji natężenia przepływu służy zawór (3) oraz odprowadzający nadmiar wody, zawór przelewowy (4). Pomiar natężenia przepływu odbywa się za pomocą rotametr (5). Po przejściu przez kolumnę porowatą, woda gromadzi się w zbiorniku górnym (7), a następnie wraca do zbiornika dolnego rurą przelewową (8). Do pomiaru ciśnień służą króćce (10), podłączone do zestawu piezometrów (pionowo ustawionych rurek szklanych).



Rys. 2.8. Schemat stanowiska do pomiaru oporów przepływu wody przez ośrodek porowaty

## 2.4.2. Wyniki pomiarów

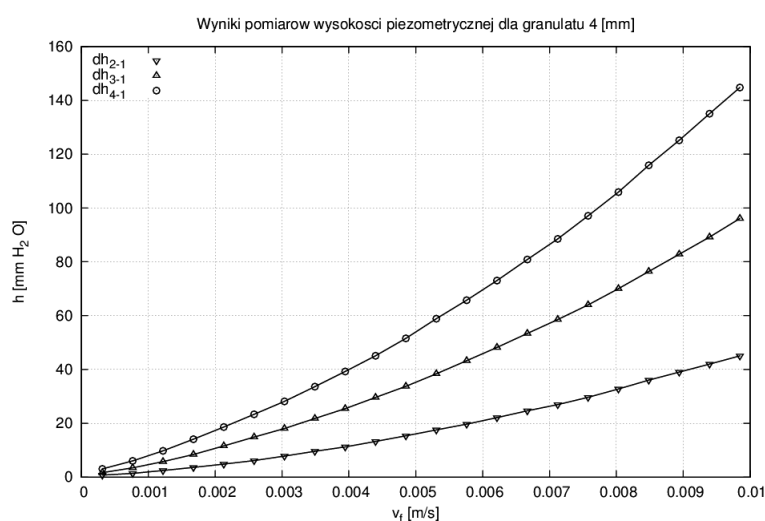
Na Rys. 2.9-2.11 przedstawiono bezpośrednie (przed aproksymacją) wyniki pomiarów wysokości piezometrycznej odnotowane podczas przepływu wody przez trzy analizowane w pracy złoża granularne. Każdy punkt na wykresie odpowiada średniej wyliczonej z 10 pomiarów. Wysokość piezometryczna rejestrowana była w czterech pionowo ustawionych rurkach szklanych za pomocą liniału kreskowego. Aby zniwelować ewentualne straty liniowe, wszystkie przewody łączące króćce z piezometrami miały takie same długości. Odległość między króćcami wynosiła 0.3 [m]. Odległość króćców skrajnych od początku i końca złoża wynosiła 0.1 [m]. Pole przekroju złoża w kierunku prostopadłym do kierunku przepływu wynosiło 0.005 [m<sup>2</sup>]. Pomiary wykonano z następującymi dokładnościami: temperatura  $\pm 0.1$  [°C]; natężenie przepływu  $\pm 1$  [mm] (co przekładało się na  $\pm 0.82$  [dm<sup>3</sup>/h]); wysokość piezometryczna  $\pm 1$  [mm].

Pomiary wykonywano tak, aby temperatura przepływającej wody była w całym zakresie pomiarów, a także dla wszystkich granulatów, taka sama. Aby to osiągnąć, stanowisko zawsze uruchamiano wcześniej, a pomiary rozpoczynano dopiero wówczas, gdy temperatura wody przestawała się zmieniać. Ustalanie się temperatury w układzie trwało około 1 godziny. Zestawienie wartości temperatur oraz ustalonych na ich podstawie parametrów wody zebrano w Tabeli 2.8. Zapewnienie stałości temperatury podczas pomiarów jest bardzo ważne, gdyż jak wykazano w pracy [30], równanie Forchhemera jest najbardziej wrażliwe właśnie na ten parametr. Co ciekawe, temperatury nie ma w samym równaniu, wpływa ona jednak na gęstość oraz współczynnik lepkości dynamicznej płynu (a te wielkości w równaniu Forchheimera już występują).

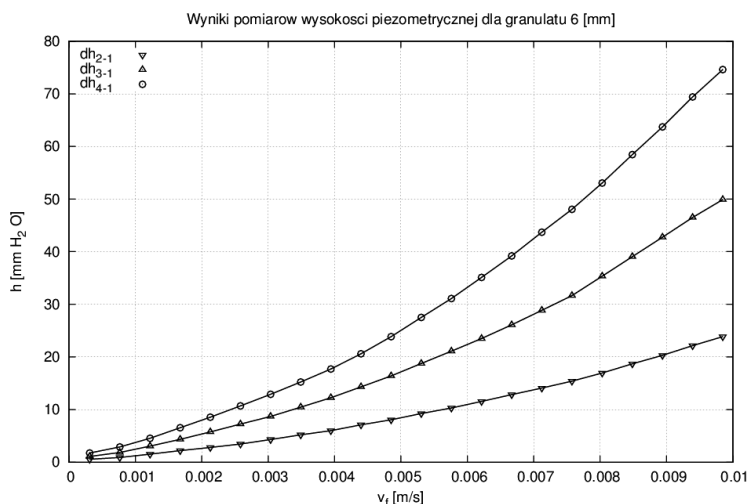
Tabela 2.8. Parametry wody

Granulat	$\bar{T}$	$T_{\min}$	$T_{\max}$	$\rho$	$\mu$
	[°C]	[°C]	[°C]	[kg/m <sup>3</sup> ]	[kg/(m·s)]
4 [mm]	32.57	32.1	32.8	994.9019	0.00075588
6 [mm]	34.67	34.6	34.8	994.1955	0.00072462
8 [mm]	31.57	31.4	31.7	995.2276	0.00077188

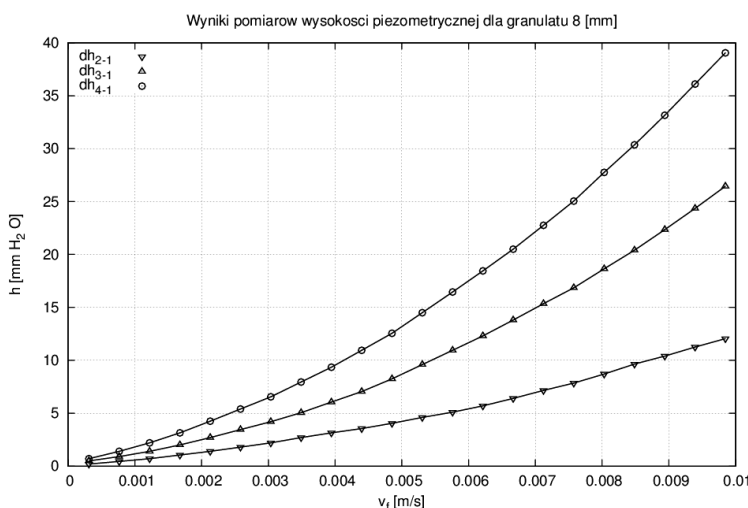
Wszystkie pomiary wykonano w identyczny sposób: po zmierzeniu i zanotowaniu bieżącej temperatury wody, ustawiano na rotametrze (wyskalowanym w [mm]) odpowiednie natężenie przepływu, a następnie spisywano wysokości piezometryczne w poszczególnych rurkach. Po dojściu do maksymalnego natężenia przepływu, procedurę rozpoczynało od nowa. Każde złożo badano innego dnia, a każdy pomiar powtarzano 10 razy.



Rys. 2.9. Wyniki pomiarów wysokości piezometrycznej dla granulatu 4 [mm]



Rys. 2.10. Wyniki pomiarów wysokości piezometrycznej dla granulatu 6 [mm]



Rys. 2.11. Wyniki pomiarów wysokości piezometrycznej dla granulatu 8 [mm]

### 2.4.3. Obliczenia

W Tabeli 2.9 oraz na Rys. 2.12 przedstawiono spadki ciśnień dla trzech badanych granulatów przy zmiennej prędkości filtracji, w zakresie od 0.002583 do 0.009847 [m/s]. Wartości spadków ciśnień uzyskano w następujących krokach:

- uśrednienie wysokości piezometrycznych uzyskanych w 10 pomiarach;
- odjęcie od każdego wyniku wartości wysokości piezometrycznej w króćcu nr 1;
- obliczenie współczynników liniowej funkcji regresji dla wartości uśrednionych;
- obliczenie wysokości piezometrycznych w punktach skrajnych z funkcji regresji;
- zamiana jednostek z [mm] na [m];
- obliczenie ciśnienia słupa wody o wysokości  $dh_{4-1}$  oraz gęstości i współczynników lepkości wynikających ze średniej wartości temperatury.

Wyniki wskazują, że do opisu spadków ciśnień dla tego zakresu prędkości musi być zastosowane równanie nieliniowe (rów. Forchheimera). Wskazują na to również wartości liczb Reynoldsa, które to w każdym przypadku przekraczają wartość 10. W pracach [28,29] stwierdzono, że dla tego typu materiałów porowatych wartość ta może być uznana za wartość graniczną między zakresami obowiązywania prawa Darcy'ego i prawa Forchheimera.



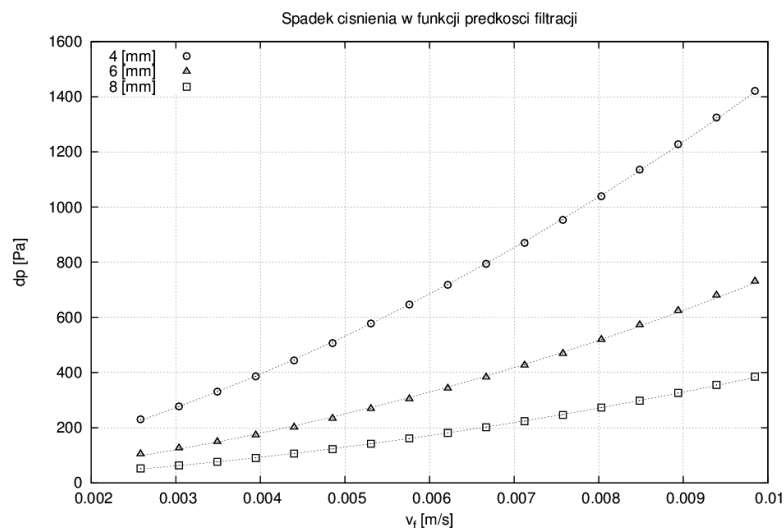
Liczbę Reynoldsa obliczono z następującej zależności

$$\text{Re} = \frac{v_f \cdot d}{\nu}, \quad (2.10)$$

gdzie:  $v_f$  - prędkość filtracji [m/s],  $d$  - średnica reprezentatywna (w tym przypadku jest to średnica średnia) [m],  $\nu$  - kinematyczny współczynnik lepkości [m<sup>2</sup>/s].

Tabela. 2.9 Wyniki pomiarów różnic ciśnień dla różnych prędkości filtracji

lp.	$v_f$	Granulat 4 [mm]		Granulat 6 [mm]		Granulat 8 [mm]	
		$dp_{4-1}$	Re	$dp_{4-1}$	Re	$dp_{4-1}$	Re
	[m/s]	[Pa]	[-]	[Pa]	[-]	[Pa]	[-]
1	0.002583	230.73	13.37	105.04	21.52	52.28	26.36
2	0.003037	277.28	15.72	126.11	25.30	63.41	30.99
3	0.003491	330.86	18.07	149.22	29.08	76.74	35.63
4	0.003945	386.35	20.42	173.65	32.86	90.65	40.26
5	0.004399	444.03	22.77	201.89	36.65	106.47	44.90
6	0.004853	506.69	25.11	233.78	40.43	122.58	49.53
7	0.005307	577.99	27.46	269.18	44.21	142.05	54.16
8	0.005761	646.50	29.81	304.59	47.99	161.68	58.80
9	0.006215	718.09	32.16	343.06	51.77	181.45	63.43
10	0.006669	794.37	34.51	382.86	55.56	201.81	68.07
11	0.007123	869.91	36.86	426.75	59.34	223.92	72.70
12	0.007577	953.50	39.21	469.32	63.12	246.47	77.33
13	0.008031	1039.29	41.56	519.50	66.90	272.98	81.97
14	0.008485	1135.77	43.91	572.60	70.69	298.17	86.60
15	0.008939	1227.56	46.26	624.83	74.47	326.29	91.23
16	0.009393	1324.48	48.61	680.42	78.25	355.57	95.87
17	0.009847	1420.96	50.96	731.04	82.03	385.30	100.50



Rys. 2.12. Wyniki pomiarów spadków ciśnień dla trzech rodzajów granulatu

W Tabelach 2.10-2.12 oraz na Rysunkach 2.13 i 2.14 przedstawiono wyniki obliczeń uzyskane metodą wykresu Forchheimera dla trzech omawianych w pracy granulatów. Finalne wartości współczynników  $\frac{1}{\kappa}$  i  $\beta$  wynosiły odpowiednio: 0.9948280000E+08 oraz 0.864587E+04 dla granulatu 4 [mm]; 0.3914000000E+08 oraz 0.545758E+04 dla granulatu 6

[mm]; 0.1835540000E+08 oraz 0.295523E+04 dla granulatu 8 [mm]. Po podstawieniu ich do równania Forchheimera (2.1) uzyskano, również widoczne na Rys. 2.14, rozwiązanie analityczne.

Warto zwrócić uwagę, że poza kilkoma punktami, błąd między modelem a eksperymentem nie przekracza trzech procent (Rys. 2.15). Jest to taki sam poziom błędów, jak we wcześniejszych analogicznych badaniach eksperymentalnych [28,29,30].

Tabela. 2.10 Wyniki obliczeń dla granulatu 4 [mm]

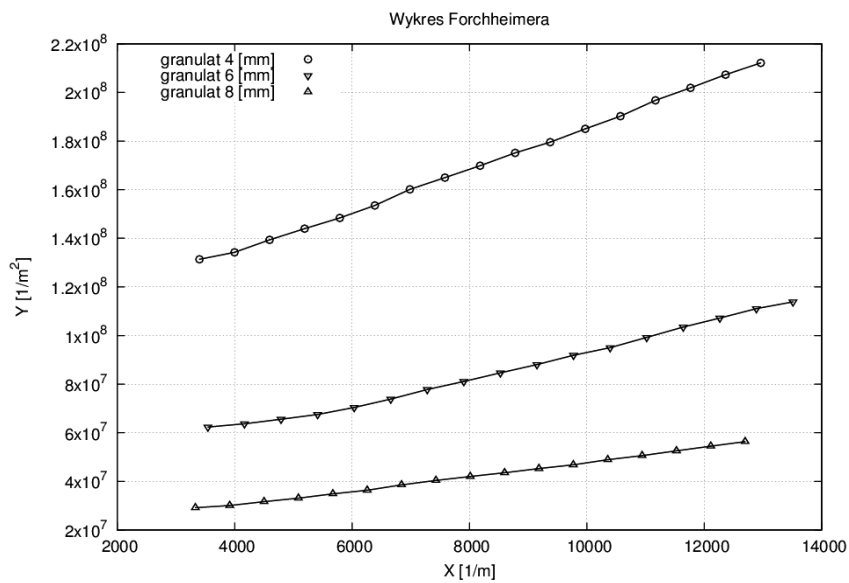
$v_f$	$dp_{4-1}$	$K$	$\kappa$	$X$	$Y$	$\delta$
[m/s]	[Pa]	[m/s]	[m <sup>2</sup> ]	[1/m]	[1/m <sup>2</sup> ]	[%]
0.002583	230.73	0.098315	0.761418E-08	0.340281E+04	0.131319E+09	-1.86
0.003037	277.28	0.096189	0.744953E-08	0.400098E+04	0.134221E+09	-0.14
0.003491	330.86	0.092663	0.717647E-08	0.459915E+04	0.139328E+09	-0.09
0.003945	386.35	0.089677	0.694517E-08	0.519733E+04	0.143969E+09	0.28
0.004399	444.03	0.087008	0.673846E-08	0.579550E+04	0.148385E+09	0.78
0.004853	506.69	0.084118	0.651465E-08	0.639368E+04	0.153483E+09	0.80
0.005307	577.99	0.080641	0.624536E-08	0.699185E+04	0.160101E+09	-0.14
0.005761	646.50	0.078262	0.606116E-08	0.759002E+04	0.164966E+09	0.04
0.006215	718.09	0.076013	0.588697E-08	0.818820E+04	0.169848E+09	0.21
0.006669	794.37	0.073734	0.571047E-08	0.878637E+04	0.175097E+09	0.16
0.007123	869.91	0.071915	0.556958E-08	0.938455E+04	0.179526E+09	0.56
0.007577	953.50	0.069792	0.540518E-08	0.998272E+04	0.184987E+09	0.39
0.008031	1039.29	0.067868	0.525615E-08	0.105809E+05	0.190232E+09	0.34
0.008485	1135.77	0.065614	0.508157E-08	0.111791E+05	0.196767E+09	-0.37
0.008939	1227.56	0.063956	0.495317E-08	0.117772E+05	0.201868E+09	-0.33
0.009393	1324.48	0.062286	0.482389E-08	0.123754E+05	0.207278E+09	-0.44
0.009847	1420.96	0.060864	0.471370E-08	0.129736E+05	0.212124E+09	-0.28

Tabela. 2.11 Wyniki obliczeń dla granulatu 6 [mm]

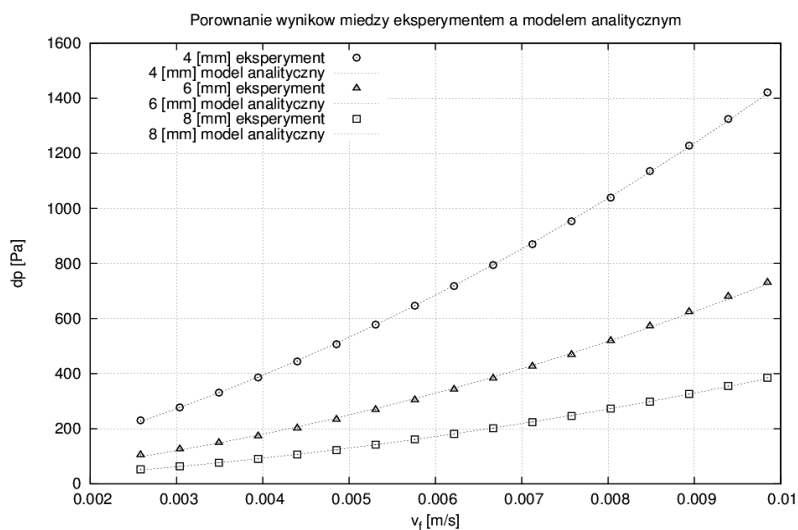
$v_f$	$dp_{4-1}$	$K$	$\kappa$	$X$	$Y$	$\delta$
[m/s]	[Pa]	[m/s]	[m <sup>2</sup> ]	[1/m]	[1/m <sup>2</sup> ]	[%]
0.002583	105.04	0.215802	0.160334E-07	0.354352E+04	0.623632E+08	-6.23
0.003037	126.11	0.211349	0.157026E-07	0.416643E+04	0.636772E+08	-2.82
0.003491	149.22	0.205314	0.152542E-07	0.478934E+04	0.655490E+08	-0.41
0.003945	173.65	0.199375	0.148129E-07	0.541225E+04	0.675014E+08	1.74
0.004399	201.89	0.191229	0.142077E-07	0.603516E+04	0.703769E+08	2.42
0.004853	233.78	0.182186	0.135358E-07	0.665807E+04	0.738702E+08	2.18
0.005307	269.18	0.173028	0.128554E-07	0.728098E+04	0.777800E+08	1.41
0.005761	304.59	0.165998	0.123331E-07	0.790389E+04	0.810738E+08	1.48
0.006215	343.06	0.158996	0.118129E-07	0.852680E+04	0.846443E+08	1.22
0.006669	382.86	0.152879	0.113584E-07	0.914971E+04	0.880312E+08	1.19
0.007123	426.75	0.146494	0.108840E-07	0.977262E+04	0.918684E+08	0.66
0.007577	469.32	0.141696	0.105275E-07	0.103955E+05	0.949791E+08	0.94
0.008031	519.50	0.135679	0.100805E-07	0.110184E+05	0.991908E+08	0.08
0.008485	572.60	0.130055	0.966265E-08	0.116414E+05	0.103480E+09	-0.78
0.008939	624.83	0.125561	0.932879E-08	0.122643E+05	0.107184E+09	-1.04
0.009393	680.42	0.121159	0.900171E-08	0.128872E+05	0.111078E+09	-1.45
0.009847	731.04	0.118220	0.878340E-08	0.135101E+05	0.113839E+09	-0.85

Tabela. 2.12 Wyniki obliczeń dla granulatu 8 [mm]

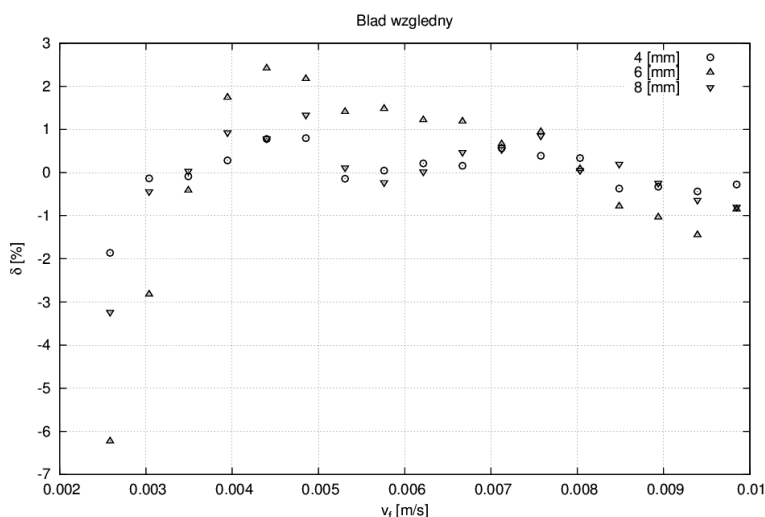
$v_f$	$dp$	$K$	$\kappa$	$X$	$Y$	$\delta$
[m/s]	[Pa]	[m/s]	[m <sup>2</sup> ]	[1/m]	[1/m <sup>2</sup> ]	[%]
0.002583	52.28	0.434014	0.343133E-07	0.333001E+04	0.291398E+08	-3.24
0.003037	63.41	0.420740	0.332638E-07	0.391539E+04	0.300591E+08	-0.44
0.003491	76.74	0.399651	0.315965E-07	0.450077E+04	0.316453E+08	0.03
0.003945	90.65	0.382319	0.302263E-07	0.508615E+04	0.330799E+08	0.93
0.004399	106.47	0.362987	0.286978E-07	0.567153E+04	0.348417E+08	0.79
0.004853	122.58	0.347825	0.274991E-07	0.625690E+04	0.363605E+08	1.34
0.005307	142.05	0.328214	0.259487E-07	0.684228E+04	0.385330E+08	0.11
0.005761	161.68	0.313048	0.247497E-07	0.742766E+04	0.403998E+08	-0.23
0.006215	181.45	0.300921	0.237909E-07	0.801304E+04	0.420279E+08	0.02
0.006669	201.81	0.290333	0.229538E-07	0.859842E+04	0.435606E+08	0.47
0.007123	223.92	0.279474	0.220953E-07	0.918380E+04	0.452532E+08	0.54
0.007577	246.47	0.270085	0.213530E-07	0.976917E+04	0.468263E+08	0.86
0.008031	272.98	0.258471	0.204348E-07	0.103546E+05	0.489303E+08	0.05
0.008485	298.17	0.250013	0.197661E-07	0.109399E+05	0.505856E+08	0.20
0.008939	326.29	0.240693	0.190293E-07	0.115253E+05	0.525444E+08	-0.25
0.009393	355.57	0.232085	0.183487E-07	0.121107E+05	0.544933E+08	-0.64
0.009847	385.30	0.224531	0.177514E-07	0.126961E+05	0.563268E+08	-0.80



Rys. 2.13. Wykres Forchheimera dla trzech badanych granulatów



Rys. 2.14. Wykres spadków ciśnień w funkcji prędkości filtracji dla trzech typów granulatu



Rys. 2.15. Wartości błędów względnych

## 2.5. Podsumowanie

Etap badań eksperymentalnych można zakończyć następującymi wnioskami:

- Opieranie się w badaniach ośrodków porowatych na danych tabelarycznych (dotyczących np. porowatości różnych rodzajów złóż) lub formułach obliczeniowych podawanych w książkach i artykułach jest mocno ryzykowne. Zawsze korzystniej jest wykonać własny eksperyment, a informacje literaturowe traktować jedynie jako dane pomocnicze.
- Wyniki pomiarów wysokości piezometrycznej można bezpośrednio wykorzystać do analizy jakości danych. Szczególnie pomocne okazały się wykresy typu  $h=f(v_f)$ . Sugeruje się, aby analizę taką wykonywać bezpośrednio w trakcie trwania pomiarów. Dzięki temu, po zauważeniu jakichkolwiek nieprawidłowości (np. niezmienniej wartości wysokości piezometrycznej na którymś z króćców pomiarowych, co oznacza zatkanie się przewodu), można od razu przystąpić do usunięcia przyczyn i powtórzenia pomiarów (w całości lub w części).

- Podczas pomiarów zauważono, że czasami zdarza się częściowe lub całkowite przytykanie króćców pomiarowych przez kulki. Zjawisko takie wydaje się charakterystyczne dla tego typu układów. Aby poprawić jakość danych, sugeruje się wykonywać pomiar wysokości piezometrycznej zawsze w kilku punktach, a wynikową wartość spadku piezometrycznego obliczać z funkcji aproksymacyjnych.
- Dysponując wynikami pomiarów o odpowiedniej jakości można, na podstawie rozwiązania zagadnienia odwrotnego, określić wartości współczynników  $\kappa$  i  $\beta$  z dokładnością do kilku procent w całym zakresie prędkości filtracji.
- Znając wartości współczynników  $\kappa$  i  $\beta$  można sprawdzić przydatność formuł obliczeniowych zebranych w Tabelach 2.5 i 2.6, kalibrować stałe tam występujące lub też tworzyć własne wzory korelacyjne.
- Należy dążyć do tego, aby zakres prędkości filtracji był jak największy, ale nie przekroczył granic stosowalności równania Forchheimera.
- Podczas wykonywania badań eksperymentalnych należy stosować się do ogólnie przyjętych zasad przeprowadzania pomiarów, w szczególności:
  - wszystkie pomiary należy przeprowadzać w takich samych warunkach (np. przy takiej samej temperaturze) i stosując takie same techniki pomiarowe (najlepiej te same przyrządy pomiarowe);
  - każdy pomiar należy kilkakrotnie powtórzyć, a do dalszych analiz przyjmować wartości uśrednione;
  - zakresy pomiarowe przyrządów (np. rotametry) należy dostosować do zakresów mierzonych wartości.
- Przeprowadzenie obliczeń za pomocą specjalnie przygotowanego programu komputerowego znacznie przyspieszyło prace, a także pozwoliło zminimalizować błędy wynikające z istnienia czynnika ludzkiego.

## Literatura

1. Alam M., Sharma R., Fabricius I.L., Prasad M.: Permeability Prediction in Chalks. AAPG Annual Convention, Denver, Colorado, United States 2009.
2. Buyruk E., Fertelli A., Sonmez N.: Numerical investigation for solidification around various cylinder geometries. J Sci Ind Res 2009, 68(2), 122-129.
3. Carman P.C.: Fluid Flow through a Granular Bed. Trans I Chem Eng 1997, Jubilee Supplement, 75, 32-48.
4. Carrier W.D.: Goodbye, Hazen; Hello, Kozeny-Carman. J Geotech Geoenviron Eng 2004, 129(11), 1054-1056.
5. Chapuis R.P., Aubertin M.: Predicting the coefficient of permeability of soils using the Kozeny-Carman equation. Department CGM, École Polytechnique de Montréal, Research Report EPM-RT-2003-03, Montreal, Canada 2003.
6. Cooke A.J., Rowe R.K.: Extension of Porosity and Surface Area Models for Uniform Porous Media. J Environ Eng 1999, 125(2), 126-136.
7. Dunn M.D.: Non-Newtonian Fluid Flow through Fabrics. National Textile Center Annual Report C98-P1. Philadelphia University, Pennsylvania, United States 1999.
8. Ergun S.: Fluid flow through packed columns. Chem Eng Prog 1952, 48(2), 89-94.
9. Fourie W., Said R., Young P., Barnes D.L.: The Simulation of Pore Scale Fluid Flow with Real World Geometries Obtained from X-Ray Computed Tomography. COMSOL Conference, Boston, Massachusetts, United States 2007.
10. Huang H., Ayoub J.: Applicability of the Forchheimer Equation for Non-Darcy Flow in Porous Media. SPE J 2008, 13, 112-122.
11. Ishaku J. M., Gadzama E.W., Kaigama U.: Evaluation of empirical formulae for the determination of hydraulic conductivity based on grain-size analysis. J Geol Min Res 2011, 3(4), 105-113.
12. Ismail M.M.: Mathematical Correlations Between The Effective Diameter Of Soil And Other Properties. Eng Technol 2008, 26(10), 1724-1774.
13. Kozeny J.: Über kapillare Leitung des Wassers im Boden. Akad Wiss Wien 1927, 136(2a), 271-306.

14. Kutay, M.E., Aydılek A.H.: Accuracy of the Two Common Semi-Analytical Equations in Predicting Asphalt Permeability. Proc 2nd Int Workshop X-ray CT Geomater, Grenoble, France 2006.
15. Lindner S.: Product Data Sheet. Version V13/2015.
16. Musavi-Jahromi S.H., Shiravand R.: Determination of hydraulic conductivity applying empirical formulae and physical modeling. Arch Sci 2012, 65(5), 15-21.
17. Nakhaei M.: Estimating the Saturated Hydraulic Conductivity of Granular Material, Using Artificial Neural Network, Based on Grain Size Distribution Curve. J Sci 2005, 16(1), 55-62.
18. Neithalath N., Weiss J., Olek J.: Predicting the Permeability of Pervious Concrete (Enhanced Porosity Concrete) from Non-Destructive Electrical Measurements. URL: <https://fp.auburn.edu/heinmic/perviousconcrete/Porosity.pdf> (dostęp 12 grudnia 2013).
19. Odong J.: Evaluation of Empirical Formulae for Determination of Hydraulic Conductivity based on Grain-Size Analysis. J Am Sci 2008, 4(1), 1-6.
20. Ogilvie S.R., Cuddy S., Lindsay C., Hurst A.: Novel methods of permeability prediction from NMR tool data. Dialog 2002.
21. Rainey T.J., Doherty W.O.S., Brown R.J., Kelson N.A., Martinez D.M.: Determination of the permeability parameters of bagasse pulp from two different sugar extraction methods. TAPPI Engineering, Pulping & Environmental Conference, Portland, Oregon, United States 2008.
22. Resch E.: Numerical And Experimental Characterisation Of Convective Transport In Solid Oxide Fuel Cells. MSc Thesis. Queen's University, Kingston, Ontario, Canada 2008.
23. Ribeiro A.M., Neto P., Pinho C.: Mean Porosity and Pressure Drop Measurements in Packed Beds of Monosized Spheres: Side Wall Effects. Int Rev Chem Eng 2010, 2(1), 40-46.
24. Rossel S.M.: Fluid Flow Modeling of Resin Transfer Molding for Composite Material Wind Turbine Blade Structures. Sandia National Laboratories on-line report no SAND04-0076. Department of Chemical Engineering. Montana State University-Bozeman, Bozeman, Montana, United States 2004.
25. Shiravand R.: Determination of hydraulic conductivity applying empirical formulae and physical modeling. Arch Sci 2012, 65(5), 15-21.
26. Siosemarde M., Nodehi D.A.: Review of Empirical Equations of Estimating Saturated Hydraulic Conductivity Based on Soil Grain Size Distribution. J Appl Environ Biol Sci 2014, 4(1s), 11-14.
27. Sobieski W.: Jakość wiedzy bazowej w badaniach naukowych. Badania naukowe Katedry Mechaniki i Podstaw Konstrukcji Maszyn 2014, 29-47.
28. Sobieski W., Trykozko A.: Darcy's and Forchheimer's laws in practice – Part 1: The experiment. Tech Sci 2014, 17(4), 221-335.
29. Sobieski W., Trykozko A.: Darcy's and Forchheimer's laws in practice – Part 2: The numerical model. Tech Sci 2014, 17(4), 337-350.
30. Sobieski W., Trykozko A.: Sensitivity aspects of Forchheimer's approximation. Transp Porous Media 2011, 89(2), 155-164.
31. Szymkiewicz A., Kryczallo A.: Obliczanie współczynnika filtracji piasków i żwirów na podstawie krzywej uziarnienia: przegląd wzorów empirycznych. Inżynieria Morska i Geotechnika, 2011(2), 110-121.
32. Takhanov D.: Forchheimer Model for Non-Darcy Flow in Porous Media and Fractures. Imperial College London, Department of Earth Science and Engineering, London 2011.
33. Thusyanthan N.I., Madabhushi S.P.G.: Scaling of Seepage Flow Velocity in Centrifuge Models. Cambridge University Engineering Department, Research Report CUED/D-SOILS/TR326, Cambridge, United Kingdom, 2003.
34. Vervoort R.W., Cattle S.R.: Linking hydraulic conductivity and tortuosity parameters to pore space geometry and pore-size distribution. Journal of Hydrology, Vol. 272, No. 1 (2003), pp. 36-49.
35. Wang X.: Advanced Natural Gas Engineering. Gulf Publishing Company, Houston, Texas, United States, 2009.
36. Zhang A.: Numerical investigation of multiphase Darcy-Forchheimer flow and contaminant transport during SO<sub>2</sub> co-injection with CO<sub>2</sub> in deep saline aquifers. PhD Thesis, Georgia Institute of Technology, Atlanta, United States, 2013.

### 3. POZYSKIWANIE INFORMACJI O TYPIE ROZKŁADU ZŁOŻA GRANULARNEGO ORAZ GENERACJA ROZKŁADÓW WIRTUALNYCH

#### 3.1. Wprowadzenie

Jednym z istotnych wątków pojawiających się w badaniach dotyczących złóż granularnych jest kwestia analizy rozkładu średnic cząstek (ang. Particle Size distribution, PSD), z których zbudowane jest złożo rzeczywiste – niezależnie od tego, czy jest to złożo naturalne, czy też stworzone sztucznie. Wątek ten jest nader złożony i mocno zależny od celu badań, a także od typu złoża, w szczególności jego złożoności. Innym ważnym aspektem jest sposób generacji wirtualnego rozkładu średnic o określonych parametrach.

Obie wspomniane kwestie zostały opisane w niniejszym rozdziale. W kontekście wątku pierwszego skupiono się na sposobie pozyskania najbardziej wiarygodnej informacji o typie rozkładu średnic cząstek, przy czym wcześniej wskazano rozkłady najczęściej spotykane i wykorzystywane w praktyce, ze wskazaniem konkretnych zastosowań.

W kontekście wątku drugiego opisano sposób generacji wirtualnego rozkładu średnic o zadanych cechach statystycznych i podziałem na określoną liczbę frakcji.

#### 3.2. Typy rozkładów średnic cząstek złóż granularnych

W podrozdziale zwięźle opisano rozkłady prawdopodobieństwa najczęściej wykorzystywane w celu analizy rozkładu średnic cząstek złóż granularnych. Dane są też ich funkcje gęstości prawdopodobieństwa (ang. probability density function, pdf) oraz podstawowe parametry statystyczne. W przypadku tych funkcji, których opis matematyczny różni się dla wartości dodatnich i ujemnych, bądź też dla wartości ujemnych występują pewne zastrzeżenia, nie odnoszono się do tychże, z uwagi na fakt, że z powodów oczywistych średnice cząstek, z których zbudowane są złoża granularne mają wartości dodatnie.

##### 3.2.1. Rozkład normalny

Klasycznym rozkładem prawdopodobieństwa, wykorzystywanym w analizie licznych zjawisk fizycznych, biologicznych czy ekonomicznych jest rozkład normalny, zwany też rozkładem Gaussa lub (rzadziej) Gaussa-Laplace'a. Jest on spotykany także w badaniach złóż granularnych, choć akurat w odniesieniu do rozkładu średnic cząstek nie jest on najczęściej spotykany. Rozkład średnic cząstek ma charakter normalny częściej w przypadku złóż sztucznych [10,33,42,48,59], ale zdarza się to także w przypadku złóż naturalnych, szczególnie takich jak lub skały osadowe [12,38,39,40].

Funkcja gęstości prawdopodobieństwa rozkładu normalnego ze średnią  $\mu = d_{sr}$  i odchyleniem standardowym  $\sigma$  (ewentualnie wariancją  $\sigma^2$ ) dana jest wzorem:

$$\phi_{\mu,\sigma} = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \exp\left(\frac{-(d - \mu)^2}{2 \cdot \sigma^2}\right). \quad (3.1)$$

Wykres funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla rozkładu normalnego ma kształt symetrycznej krzywej zwaną dzwonową. Symetryczny kształt tej krzywej decyduje o tym, że współczynnik skośności  $\gamma$  (uznawany za miarę asymetrii rozkładu) rozkładu normalnego jest równy 0. Z symetrią rozkładu normalnego związany jest również fakt, że wartość średniej, w tym przypadku  $\mu$ , jest tożsama z wartościami mediany i mody (dominanty).

Okazuje się, że w praktyce rozkłady średnic cząstek rzadko mają charakter symetryczny. Dzieje się tak nawet w przypadku cząstek wytwarzanych sztucznie, a których wielkość ma

znaczenie krytyczne, jak np. tabletki [22,57]. Stąd też znacznie częściej właściwszym dla opisu rozkładu średnic cząstek w złożu granularnym będzie rozkład logarytmiczno-normalny.

### 3.2.2. Rozkład logarytmiczno-normalny

Rozkład logarytmiczno-normalny jest najczęściej spotykanym jako przybliżenie rozkładu średnic cząstek, z których składa się złożo granularne. Stosuje się go bardzo często w odniesieniu do rozkładu średnic cząstek materiałów sproszkowanych [19,27,53,62], tabletek [57] i gleb [9,25,26,31], ale też np. aerozoli [11,28,29].

Funkcja gęstości prawdopodobieństwa rozkładu logarytmiczno-normalnego, zwanego też rozkładem Galtona, dana jest wzorem:

$$\phi_{\mu,\sigma} = \frac{1}{d \cdot \sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \exp\left(\frac{-(\ln(d) - \mu)^2}{2 \cdot \sigma^2}\right). \quad (3.2)$$

Rozkład Galtona jest blisko powiązany z rozkładem Gaussa. Najłatwiej jest powiedzieć, że rozkład jest logarytmiczno-normalny wtedy, kiedy jego zlogarytmowana postać posiada charakter normalny. Ma to szczególne znaczenie w kontekście opisanej w dalszej części rozdziału metodyki rozpoznawania typu rozkładu średnic cząstek. Parametry rozkładu  $\mu$  i  $\sigma$ , widoczne we wzorze (3.2), powiązane są ze średnią średnicą  $d_{sr}$  cząstek poprzez następujący wzór:

$$d_{sr} = \exp\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right). \quad (3.3)$$

Wykres funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla rozkładu logarytmiczno-normalnego ma kształt krzywej asymetrycznej. Z asymetryczności tej funkcji wynika fakt, że lepszymi od średniej średnicy cząstek parametrami opisującymi złożo będą mediana  $d_{med}$  lub moda (dominanta)  $d_{dom}$ , dane jako:

$$d_{med} = \exp(\mu), \quad (3.4)$$

$$d_{dom} = \exp(\mu - \sigma^2). \quad (3.5)$$

Współczynnik skośności dla rozkładu logarytmiczno-normalnego można obliczyć ze wzoru:

$$\gamma = (\exp(\sigma^2) + 2) \cdot \sqrt{\exp(\sigma^2) - 1}, \quad (3.6)$$

natomiast wariancję jako:

$$\text{var} = (\exp(\sigma^2 - 1)) \cdot (\exp(2 \cdot \mu + \sigma^2)). \quad (3.7)$$

W literaturze spotkać można wiele innych funkcji gęstości prawdopodobieństwa przewidzianych do celu opisu rozkładu cząstek w złożach granularnych [1,2,15,16,17,20,23,24,26,34,35,43,45,51,52,60,61]. Najczęściej spotykane rozkłady (poza normalnym i logarytmiczno-normalnym) opisano poniżej, jednak należy zaznaczyć, że temat ten nie został tu wyczerpany. Znane są też modyfikacje rozkładów podstawowych [24,26]. Jedne i drugie są jednak albo rzadko stosowane, albo przeznaczone do analiz bardzo specyficznych. Ich opis wychodzi poza zakres



niniejszego opracowania, niemniej zainteresowanych czytelników odsyła się do prac przywołanych w pierwszym zdaniu tego akapitu – w takim przypadku poza modyfikowanymi rozkładami logarytmiczno-normalnymi [26] godnymi zwrócenia szczególnej uwagi są następujące typy rozkładów:

- Andersona,
- Fredlunda,
- Gatesa-Gaudina-Schuhmanna,
- Gompertza,
- Jaky'ego,
- Johnsona  $S_B$ ,
- Lifshitz-Slyozova-Wagnera,
- Nukiyamy-Tanasawy,
- Skaggsa,

ale w znakomitej większości przypadków w zupełności wystarczający będzie opis złożeń oparty o jeden z rozkładów opisanych w niniejszym rozdziale.

### 3.2.3. Rozkład Weibulla (Rosina-Rammlera)

Rozkład Weibulla (tożsamy z rozkładem Rosina-Rammlera [8]) stosuje się najczęściej do opisu rozkładu średnic cząstek materiałów pozyskiwanych w procesach szlifowania, frezowania, mielenia, rozdrabniania i kruszenia [13,50,52,54], niemniej znajduje on zastosowanie również do opisu rozkładów średnic innych cząstek [17,30,43,53].

Funkcja gęstości prawdopodobieństwa najczęściej spotykanego dwuparametrycznego (istnieją również wersje jedno- i trójparametryczne) rozkładu Weibulla dana jest wzorem:

$$\phi_{\lambda,\kappa} = \frac{\kappa}{\lambda} \cdot \left(\frac{d}{\lambda}\right)^{\kappa-1} \cdot \exp\left(-\frac{d}{\lambda}\right)^{\kappa} \quad (3.8)$$

Parametry rozkładu  $\kappa$  i  $\lambda$  widoczne we wzorze (2.2) związane są ze średnią średnicą  $d_{sr}$  cząstek poprzez następujący wzór:

$$d_{sr} = \lambda \cdot \Gamma\left(1 + \frac{1}{\kappa}\right), \quad (3.9)$$

gdzie  $\Gamma$  jest funkcją gamma.

Mediana  $d_{med}$  i moda (dominanta)  $d_{dom}$  dla rozkładu Weibulla będą dane jako:

$$d_{med} = \lambda (\ln 2)^{\frac{1}{\kappa}}, \quad (3.10)$$

$$d_{dom} = \lambda \cdot \left(\frac{\kappa-1}{\kappa}\right)^{\frac{1}{\kappa}}, \quad (3.11)$$

z kolei współczynnik skośności można obliczyć ze wzoru:

$$\gamma = \frac{\Gamma\left(1 + \frac{3}{\kappa}\right) \cdot \lambda^3 - 3 \cdot d_{sr} \cdot \text{var} - d_{sr}^3}{\text{var}^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.12)$$

a wariancję jako:

$$\text{var} = \lambda^2 \cdot \left( \Gamma\left(1 + \frac{2}{\kappa}\right) - \left( \Gamma\left(1 + \frac{1}{\kappa}\right) \right)^2 \right). \quad (3.13)$$

### 3.2.4. Rozkład logarytmiczno-hiperboliczny

Rozkład logarytmiczno-hiperboliczny ma swój rodowód w pracach dotyczących sedymentacji, zwłaszcza naturalnej [4,21,56]. Później zakres jego zastosowań rozszerzono na inne, wciąż jednak mieszczącym się w obszarze badań nad złożami granularnymi [4,49]. Takie są też jego dzisiejsze podstawowe aplikacje, co wyróżnia go na tle pozostałych opisanych w rozdziale rozkładów, dla których statystyczne modelowanie rozkładu średnic cząstek złoża granularnego jest tylko jednym z bardzo wielu zastosowań i na pewno nie podstawowym. Niemniej, rozkład logarytmiczno-hiperboliczny znajduje też inne zastosowania w nauce, choć większość z nich odnosi się do rozkładu średnic cząstek różnego typu, jak na przykład aerozole [7].

Funkcja gęstości prawdopodobieństwa rozkładu logarytmiczno-hiperbolicznego dana jest następująco:

$$\phi_{\alpha,\beta,\delta,\mu} = \frac{\gamma}{2 \cdot \alpha \cdot \delta \cdot K_1(\delta \cdot \gamma)} \cdot \exp\left(-\alpha \cdot \sqrt{\delta^2 + (d - \mu)^2} + \beta(d - \mu)\right), \quad (3.14)$$

gdzie  $K_n$  jest zmodyfikowaną funkcją Bessela drugiego rodzaju z indeksem  $n$  natomiast  $\gamma = \sqrt{\alpha^2 - \beta^2}$ .

Średnia średnica  $d_{sr}$  cząstek oraz dominanta  $d_{dom}$  w rozkładzie logarytmiczno-hiperbolicznym są dane jako:

$$d_{sr} = \mu + \frac{\delta \cdot \beta \cdot K_2(\gamma \cdot \delta)}{\gamma \cdot K_1(\gamma \cdot \delta)}, \quad (3.15)$$

$$d_{dom} = \mu + \frac{\delta \cdot \beta}{\gamma}, \quad (3.16)$$

a wariancję można obliczyć z wzoru:

$$\text{var} = \frac{\delta \cdot K_2(\delta \cdot \gamma)}{\gamma \cdot K_1(\delta \cdot \gamma)} + \frac{\beta^2 \cdot \delta^2}{\gamma^2} \cdot \left( \frac{K_3(\delta \cdot \gamma)}{K_1(\delta \cdot \gamma)} - \frac{K_2^2(\delta \cdot \gamma)}{K_1^2(\delta \cdot \gamma)} \right). \quad (3.17)$$

Problemem dla rozkładu logarytmiczno-normalnego są niejednoznaczne rozwiązania analityczne dla niektórych parametrów statystycznych, jest to powód dla którego nie podano tu wzorów dla mediany i współczynnika skośności.

### 3.2.5. Skośny rozkład logarytmiczno-Laplace'a

W kontekście rozkładu logarytmiczno-hiperbolicznego warto jeszcze wspomnieć o skośnej dystrybucji logarytmiczno-Laplace'a, danej jako:

$$\phi_{\alpha,\beta,\delta} = \frac{1}{\delta} \cdot \frac{\alpha \cdot \beta}{\alpha + \beta} \cdot \begin{cases} \left(\frac{d}{\delta}\right)^{\beta-1} & \text{dla } 0 < d < \delta \\ \left(\frac{\delta}{d}\right)^{\alpha+1} & \text{dla } d \geq \delta \end{cases}. \quad (3.18)$$

Jest to ostatni z klasycznych rozkładów stosowanych w badaniach złóż granularnych. Został on zaproponowany jako alternatywa dla rozkładu logarytmiczno-hiperbolicznego w tych samych zastosowaniach [14]. Używanie go jest uzasadnione dla rozkładów z ostrym wierzchołkiem. Parametry statystyczne tego rozkładu są dane jako (kolejno: średnia, moda (dominanta), mediana i wariancja):

$$d_{sr} = \delta \cdot \frac{\alpha \cdot \beta}{(\alpha - 1) \cdot (\beta + 1)}, \quad (3.19)$$

$$d_{dom} = \delta, \quad (3.20)$$

$$d_{med} = \begin{cases} \delta \cdot \left(\frac{\alpha + \beta}{2 \cdot \alpha}\right)^{\frac{1}{\beta}} & \text{dla } \alpha \geq \beta \\ \delta \cdot \left(\frac{\alpha + \beta}{2 \cdot \beta}\right)^{\frac{1}{\alpha}} & \text{dla } \alpha < \beta \end{cases} \quad (3.21)$$

i

$$\text{var} = \delta^2 \cdot \left( \frac{\alpha \cdot \beta}{(\alpha - 2) \cdot (\beta + 2)} - \left( \frac{\alpha \cdot \beta}{(\alpha - 1) \cdot (\beta + 1)} \right)^2 \right). \quad (3.22)$$

### 3.2.6. Rozpoznanie typu rozkładu średnic cząstek

Pierwszym krokiem wykonanym w celu rozpoznania typu rozkładu średnic cząstek złoża granularnego danych próbą  $\mathbf{d}$ , powinno być sprawdzenie czy rozkład ten ma charakter normalny. W tym celu należy użyć jednego z kilkunastu znanych testów normalności [18,41,58] z właściwym (tzn. równym minimum 0.05) współczynnikiem ufności. Literatura [18,41,58] wskazuje, że najbardziej wskazanymi są testy Shapiro-Wilka [44] i Kołmogorowa-Smirnowa z poprawką Lillieforsa [32].

W przypadku, gdy wybrany test nie potwierdzi hipotezy o normalności rozkładu, kolejnym krokiem powinno być sprawdzenie, czy próba  $\mathbf{d}$  ma charakter logarytmiczno-normalny. Z definicji tego rozkładu wynika, że jeżeli próba  $\mathbf{d}$  pochodzi z populacji o charakterze logarytmiczno-normalnym, to odpowiadająca jej próba  $\mathbf{d}'$ , powstała przez wykonanie operacji:

$$\mathbf{d}' = \ln(\mathbf{d}), \quad (3.23)$$

ma charakter normalny. A zatem, jeżeli zastosujemy do próby  $\mathbf{d}'$  test normalności, to pozytywna weryfikacja hipotezy o normalności rozkładu danego próbą  $\mathbf{d}'$  wskazuje na logarytmiczno-normalny charakter rozkładu danego próbą  $\mathbf{d}$ .

W przypadku, gdy opisane wyżej kroki wskażą, że próba  $\mathbf{d}$  nie pochodzi ani z populacji o rozkładzie normalnym, ani logarytmiczno-normalnym, to kolejnym krokiem powinno być sprawdzenie kolejnych rozkładów opisanych w podrozdziale 3.2. W tym celu proponuje się zastosować niżej opisaną procedurę.

Dla próby  $\mathbf{d}$  należy utworzyć dyskretną funkcję gęstości prawdopodobieństwa. W tym celu należy:

- obliczyć odpowiednią liczbę przedziałów  $k_b$ , na którą podzielone zostaną dane o liczebności  $k_d$  z próby  $\mathbf{d}$ :

$$k_b = \sqrt{k_d}; \quad (3.24)$$

- obliczyć szerokość każdego z  $k_b$  przedziałów, na podstawie różnicy między maksymalną  $d_{\max}$  i minimalną  $d_{\min}$  średnicą w próbie  $\mathbf{d}$ :

$$d_{zakr} = \frac{d_{\max} - d_{\min}}{k_b}; \quad (3.25)$$

- ustalić dziedzinę (zbiór argumentów)  $d_0, d_1, \dots, d_{n_b-1}$  szukanej funkcji gęstości prawdopodobieństwa:

$$d_0 = d_{\min} + \frac{d_{zakr}}{2}, \quad (3.26)$$

$$d_n = d_{n-1} + d_{\min} + \frac{d_{zakr}}{2}, \text{ dla } k = 1, 2, \dots, k_b - 1; \quad (3.27)$$

- ustalić liczebność  $n_{d_0}, n_{d_1}, \dots, n_{d(k_b-1)}$  obserwacji odpowiadających każdemu z przedziałów;
- uzyskane liczebności  $n_{d_0}, n_{d_1}, \dots, n_{d(k_b-1)}$  znormalizować, dzieląc każdą z wartości przez  $k_b$  - znormalizowane wartości  $n_{d_0}, n_{d_1}, \dots, n_{d(k_b-1)}$  stanowią przeciwdziedzinę (zbiór wartości) szukanej funkcji gęstości prawdopodobieństwa:

$$f_{gp} : d_k \rightarrow n_k, \text{ dla } k = 0, 1, \dots, k_b - 1. \quad (3.28)$$

Do tak uzyskanej dyskretniej funkcji gęstości prawdopodobieństwa  $f_{gp}$  należy dopasować funkcje gęstości prawdopodobieństwa  $\phi$  dane wzorami (3.8), (3.14) i (3.18). Do dopasowania ciągłych funkcji regresji do funkcji dyskretniej wykorzystać można metodę LS oraz algorytm Levenberga - Marquardta (L-M) [36].

Rozkładem najlepiej opisującym populację, z której pochodzi próba  $\mathbf{d}$ , będzie ten, dla którego funkcja celu, liczona jako wariancja residuów, czyli suma kwadratów odchylek pomiędzy wartościami funkcji  $f_{gp}$  zmierzonymi, a odpowiadającymi im wartościami funkcji  $\phi$ :

$$FC = \frac{1}{k_d} \cdot \sum_{i=1}^{k_d} (f_{dp}(d_i) - \phi(d_i))^2, \quad (3.29)$$

przyjmuje wartość minimalną.

Warto zwrócić uwagę na fakt, że dopasowanie funkcji gęstości prawdopodobieństwa sprowadza się do wyznaczenia jej parametrów, co w konsekwencji oznacza, że zyskujemy nie tylko informację o typie rozkładu, ale też o jego cechach, czyli na przykład średniej, medianie czy dominancie.

W przypadku, gdyby znaczenie miała liczba parametrów funkcji gęstości prawdopodobieństwa, co może się zdarzyć przykładowo w przypadku wielokrotnego dopasowywania dużych zbiorów danych pomiarowych, to wybór typu rozkładu można oprzeć o jedno z kilku kryteriów wyboru modeli. Najbardziej znanymi są te zaproponowane przez Akaike, Rissanena, Schwartza, Hannana i Quinna [47]. Każdy z przywołanych testów może posłużyć zarówno do testowania nadparametryzacji modelu, jak i do porównywania modeli między sobą. Każdy z nich opiera się na funkcji celu, którą powinna być ta dana wzorem (3.29). Należy w tym miejscu zaznaczyć, że generalnie zastosowanie kryterium wyboru powinno być rozumiane jako wybór modelu niekoniecznie najlepiej dopasowanego do danych pomiarowych, lecz raczej optymalnego także w kontekście np. zapotrzebowania na moc obliczeniową.

W ramach podsumowania tego podrozdziału warto dodać, że szczególnie w przypadku małych prób  $\mathbf{d}$  warto jest wstępnie wizualnie ocenić histogram średnic cząstek złoża. Często dzięki takiemu podejściu można już na pierwszy rzut oka wyeliminować pewne typy rozkładów i uniknąć prostego błędu. Z drugiej strony, przykładowo ewidentnie ostry wierzchołek asymetrycznego histogramu może wskazywać na duże prawdopodobieństwo, że odpowiednim będzie rozkład logarytmiczny-Laplace'a.

Innym wartym poruszenia wątkiem jest kwestia rozkładów wielomodalnych. Histogram rozkładu wielomodalnego ma więcej niż jedno maksimum, co zwykle wskazuje na to, że próba nie jest jednorodna – obserwacje pochodzą z dwóch lub więcej populacji. Często spotykany jest rozkład bimodalny, czyli złożony z dwóch subpopulacji, co objawia się dwoma maksimami histogramu. Taka cecha histogramu wskazuje na przymus rozseparowania próby na dwie subpopulacje i analizowanie każdej z nich osobno [40]. W kontekście rozkładu bimodalnego warto wspomnieć o rozkładzie platykurtycznym, którego histogram co prawda posiada jedno maksimum, ale jest ono wyraźnie spłaszczone, co wskazuje na to, że rozkład składa się z dwóch niezależnych subpopulacji o niezbyt oddalonych od siebie średnich [55].

### 3.3. Generowanie wirtualnego rozkładu średnic o określonym typie i zadanych parametrach

Wirtualny rozkład średnic cząstek należy rozumieć jako informację o liczbie frakcji składających się na złoże, średnicę cząstek każdej z frakcji i jej udział w złożu. Punktem wyjścia dla generowanego rozkładu mogą być dowolne dane sensowne fizycznie, co oznacza, że parametry rozkładu nie mogą być dobrane tak, by np. pojawiły się frakcje o średnicach ujemnych. Niemniej, największy potencjał mają oczywiście takie dane wejściowe, które mają swój odpowiednik w złożu rzeczywistym. W przypadku generowania rozkładu o parametrach zaczerpniętych z literatury można się po prostu odnieść do rzeczywistego przypadku, ale jeśli odniesie się do złoża dostępnego w aspekcie badawczym, to pojawia się wówczas w sposób oczywisty bardzo cenna możliwość odniesienia wyników badań symulacyjnych do wyników eksperymentu.

Można także odwrócić to podejście. Mając do dyspozycji zestaw cząstek o określonych średnicach (przykładem budulca mogą być szklane kulki do młynów perelkowych, stanowiące materiał złoża badanego w kilku rozdziałach niniejszej monografii – opis w Rozdziale 2), na podstawie rozkładu teoretycznego, który da informację o tym, jakie powinny być proporcje

cząstek o określonych średnicach, można samodzielnie stworzyć złoże granularne o określonym (pożądanym) typie i parametrach statystycznych rozkładu.

Procedura tworzenia wirtualnego rozkładu jest następująca:

- W kroku pierwszym należy określić typ rozkładu do generacji oraz jego parametry. Typ i parametry rozkładu mogą oczywiście być dobrane dowolnie, ale najbardziej wskazanym jest podejście, w którym można je w jakiś sposób (literaturowo lub przez pomiar) odnieść do rzeczywistości.
- W kroku drugim należy wyznaczyć zakres średnic, dla którego będzie tworzony rozkład. Zakres ten powinien być dobrany tak, by pole pod krzywą obliczone w granicach wyznaczonych przez ten zakres było bliskie jedności, czyli obejmowało możliwie pełny zakres średnic mogących wejść w skład złoża. Większość funkcji gęstości prawdopodobieństwa oddalając się od maksimum krzywej zmierza do wartości zerowej asymptotycznie, a zatem celem nie może być w tym kroku osiągnięcie dokładnej wartości jedności, lecz jedynie zbliżenie się do niej. Należy założyć jaki odsetek średnic cząstek  $O_d$  powinien mieścić się w wygenerowanym rozkładzie i skorzystać z wzoru opartego na nierówności Czebyszewa [37]:

$$w_{\text{var}} = \sqrt{\frac{1}{O_d - 1}}, \quad (3.30)$$

do wyznaczenia wartości mnożnika wariancji  $w_{\text{var}}$ . Mnożnik  $w_{\text{var}}$  daje nam zakres, w którym powinien zostać wygenerowany rozkład jako  $\pm w_{\text{var}} \cdot \sqrt{\text{var}}$  w odniesieniu do  $d_{sr}$ . Zakres ten wykorzystuje wariancję, to między innymi w tym celu w podrozdziale 3.2 umieszczono wzory na wariancję każdego z opisanych rozkładów prawdopodobieństwa.

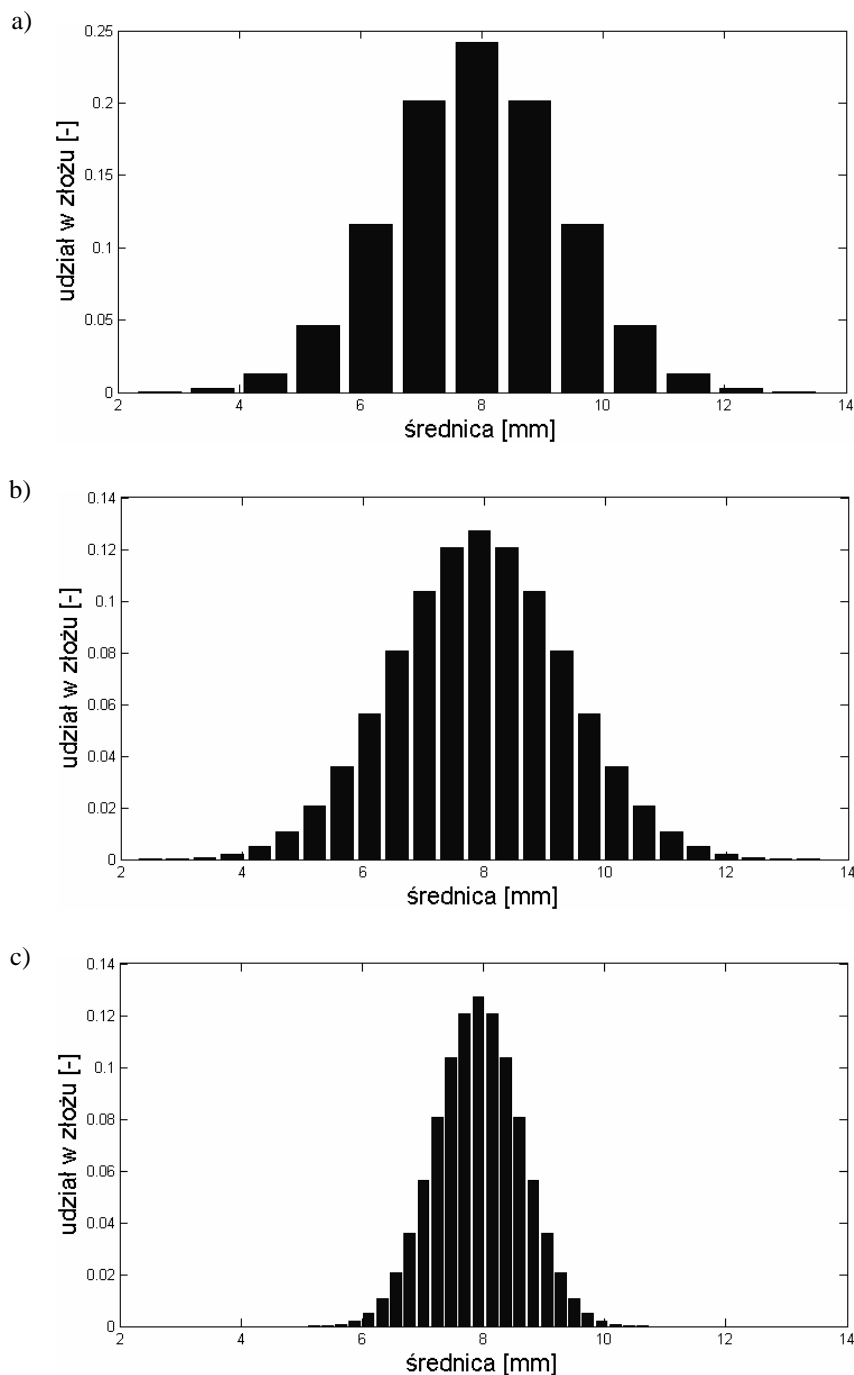
**Uwaga:** skorzystanie z nierówności Czebyszewa daje gwarancję, że odsetek wartości średnic w wygenerowanym zakresie będzie co najmniej równy  $O_d$ , co oznacza, że w większości przypadków będzie on większy niż założony, co jest oczywiście korzystne z punktu widzenia wiarygodności otrzymanych wyników.

- W kroku trzecim zakres wyznaczony w kroku drugim należy podzielić na podzakresy, których liczba jest równa założonej liczbie frakcji  $n_{fr}$ . Każdej frakcji przypisuje się średnicę równą środkowi odpowiadającego jej podzakresu.
- W kroku czwartym, ostatnim, dla każdej z  $n_{fr}$  frakcji oblicza się jej udział w złożu  $u_{fr_n}$ , jako całkę oznaczoną:

$$u_{fr_n} = \int_{a_n}^{b_n} \phi, \text{ dla } n = 1, 2, \dots, n_{fr}, \quad (3.31)$$

gdzie  $a_n$  i  $b_n$  są odpowiednio dolną i górną granicą  $n$ -tego podzakresu, natomiast  $\phi$  jest funkcją gęstości prawdopodobieństwa.

Na tym kończy się procedura. Na Rys. 3.1 pokazano przykładowe rozkłady wygenerowane z użyciem opisanej metodyki dla rozkładu normalnego.



Rys. 3.1. Wirtualne rozkłady średnic cząstek – rozkład normalny: rozkład ze średnią 8 [mm] i wariancją 2 [mm] podzielony na 13 (a) i 25 (b) frakcji oraz rozkład ze średnią 8 [mm] i wariancją 0.5 [mm] podzielony na 25 frakcji (c)

### 3.3.1. Podsumowanie

W ramach podsumowania rozdziału należy stwierdzić, że zarówno problematyka wskazania właściwej funkcji gęstości prawdopodobieństwa opisującej rozkład średnic cząstek z których zbudowane jest złożo granularne, jak i możliwość tworzenia wirtualnych rozkładów jest bardzo istotna w kontekście badań nad złożami granularnymi. Obie te kwestie uzupełniają się wzajemnie, co pozwala prowadzić na przykład badania dotyczące wpływu rozkładu średnic cząstek złoża na jego parametry takie jak przepuszczalność, porowatość, krętość czy inne [3,17,46,53].

## Literatura

1. Ajoodani P., Dalalian M.R., Darbandi S.: Estimation of Soil Particle-Size Distribution Models in Various Soil Textures in West Azarbaijan, Iran. *J Appl Environ Biol Sci* 2014, 4(11), 16-20.
2. Allen T.: Powder sampling and particle size determination. Elsevier 2003.
3. Arya, L.M., Paris J.F.: A physicoempirical model to predict the soil moisture characteristic from particle-size distribution and bulk density data. *Soil Sci Soc Am J* 1981, 45(6), 1023-1030.
4. Bader H.: The hyperbolic distribution of particle sizes. *J Geophys Res* 1970, 75(15), 2822-2830.
5. Bagnold R.A.: The physics of blown sand and desert dunes. Courier Corporation 2012.
6. Bagnold R.A. Barndorff-Nielsen: The pattern of natural size distributions. *Sedimentology* 1980, 27(2), 199-207.
7. Bhatia J.C., Domnick J., Durst F., Tropea C.: Phase-Doppler-Anemometry and the Log-Hyperbolic Distribution applied to Liquid Sprays. *Part Part Syst Char* 1988, 5(4), 153-164.
8. Brown W.K., Wohletz K.H.: Derivation of the Weibull distribution based on physical principles and its connection to the Rosin-Rammler and lognormal distributions. *J Appl Phys* 1995, 78(4), 2758-2763.
9. Buchan G.D.: Applicability of the simple lognormal model to particle-size distribution in soils. *Soil Sci* 1989, 147(3), 155-161.
10. Chandrasekhar B. K.: Particle-Size Distribution Errors by Sedimentation Technique for Mixtures of Powders. *Ceram Eng Sci Proc* 2009, 15(1), 39-52.
11. Chate D.M., Rao P.S.P., Naik M.S., Momin G.A., Safai P.D., Ali K.: Scavenging of aerosols and their chemical species by rain. *Atmos Environ* 2003, 37(18), 2477-2484.
12. Chew J.W., Wolz J.R., Hrenya C.M.: Axial segregation in bubbling gas-fluidized beds with Gaussian and lognormal distributions of Geldart Group B particles. *AIChE J* 2010, 56(12), 3049-3061.
13. Delagrammatikas G., Tsimas S.: Grinding process simulation based on Rosin-Rammler equation. *Chem Eng Commun* 2004, 191(10), 1362-1378.
14. Fieller N.R.J., Gilbertson D.D., Olbricht W.: A new method for environmental analysis of particle size distribution data from shoreline sediments. *Nature* 1984, 311, 648-665.
15. Fredlund M.D., Fredlund D.G., Wilson G.W.: An equation to represent grain-size distribution. *Can Geotech J* 2000, 37(4), 817-827.
16. Fredlund D.G., Rahardjo H., Fredlund M.D.: Unsaturated soil mechanics in engineering practice. John Wiley & Sons 2012.
17. Gbor P.K., Jia C.Q.: Critical evaluation of coupling particle size distribution with the shrinking core model. *Chem Eng Sci* 2004, 59(10), 1979-1987.
18. Ghasemi A., Zahedi S.: Normality tests for statistical analysis: a guide for non-statisticians. *Int J Endocr Metab* 2012, 10(2), 486-489.
19. Gil M., Arauzo I.: Hammer mill operating and biomass physical conditions effects on particle size distribution of solid pulverized biofuels. *Fuel Process Technol* 2014, 127, 80-87.
20. González-Tello P., Camacho F., Vicaria J.M., González P.A.: A modified Nukiyama-Tanasawa distribution function and a Rosin-Rammler model for the particle-size-distribution analysis. *Powder Technol* 2008, 186(3), 278-281.
21. Hartmann D., Bowman D.: Efficiency of the Log-Hyperbolic Distribution - A Case Study: Pattern of Sediment Sorting in a Small Tidal - Inlet-Het Zwin, The Netherlands. *J Coastal Res* 1993, 9(4), 1044-1053.
22. Horkovics-Kovats S., Brunovský P., Pichler A., Bulitta, J.B. Population data analysis of dissolution time profiles: Assessment of physicochemical properties of the drug, drug particles and the pharmaceutical formulation. *Eur J Pharm Sci* 2015, 78, 245-254.
23. Huang M., Fredlund D.G., Fredlund M.D.: Comparison of measured and PTF predictions of SWCCs for loess soils in China. *Geotech Geol Eng* 2010, 28(2), 105-117.
24. Hwang S.I.: Effect of texture on the performance of soil particle-size distribution models. *Geoderma* 2004, 123(3), 363-371.
25. Hwang S.I., Choi S.I.: Use of a lognormal distribution model for estimating soil water retention curves from particle-size distribution data. *J Hydrol* 2006, 323(1), 325-334.
26. Hwang S.I., Lee K.P., Lee D.S., Powers S. E.: Models for estimating soil particle-size distributions. *Soil Sci Soc Am J* 2002, 66(4), 1143-1150.
27. Jiménez S., Ballester, J.: Formation and emission of submicron particles in pulverized olive residue (orujillo) combustion. *Aerosol Sci Technol* 2004, 38(7), 707-723.
28. Kalani A., Christofides P.D.: Simulation, estimation and control of size distribution in aerosol processes with simultaneous reaction, nucleation, condensation and coagulation. *Comput Chem Eng* 2002, 26(7), 1153-1169.
29. Kok J.F.: A scaling theory for the size distribution of emitted dust aerosols suggests climate models underestimate the size of the global dust cycle. *P Natl Acad Sci* 2011, 108(3), 1016-1021.



30. Kowalik W.: Określenie dynamiki znoszenia rozpylanej cieczy za pomocą równania Rosina-Rammlera. *Acta Sci Pol. Tech Agraria* 2012, 11(1-2), 3-11.
31. Leij F.J., Ghezzehei T.A., Or D.: Modeling the dynamics of the soil pore-size distribution. *Soil Tillage Res* 2002, 64(1), 61-78.
32. Lilliefors H.: On the Kolmogorov-Smirnov test for normality with mean and variance unknown. *J Am Stat Assoc* 1967, 62, 399-402.
33. Liu F., Xie X., Zhang J.: Experimental study on the probability distribution of wear particle size in hydraulic oil. *Lubr Eng* 2006, 5, 125-126+129.
34. Macías-García A., Cuerda-Correa E.M., Díaz-Díez M.A.: Application of the Rosin–Rammler and Gates–Gaudin–Schuhmann models to the particle size distribution analysis of agglomerated cork. *Mater Charact* 2004, 52(2), 159-164.
35. Nabizadeh E., Harchegani H.B.: Performance of Eight Mathematical Models in Describing Particle Size Distribution of Some Soils from Charmahal-va-Bakhtiari Province. *J Water Soil Sci* 2011, 15(57), 63-75.
36. Ostanin A.: *Metody optymalizacji z MATLAB*. NAKOM 2009.
37. Pacut A.: *Prawdopodobieństwo – Teoria – Modelowanie probabilistyczne w technice*. Wydawnictwa Naukowo-Techniczne 1985.
38. Peronius N., Sweeting T. J.: On the correlation of minimum porosity with particle size distribution. *Powder Technol* 1985, 42(2), 113-121.
39. Pieri L., Bittelli M., Pisa P.R.: Laser diffraction, transmission electron microscopy and image analysis to evaluate a bimodal Gaussian model for particle size distribution in soils. *Geoderma* 2006, 135, 118-132.
40. Pye K., Blott S.J.: Particle size analysis of sediments, soils and related particulate materials for forensic purposes using laser granulometry. *Forensic Sci Int* 2004, 144(1), 19-27.
41. Razali N.M., Wah Y.B.: Power comparisons of shapiro-wilk, kolmogorov-smirnov, lilliefors and anderson-darling tests. *J Stat Model Anal* 2011, 2(1), 21-33.
42. Schuck P.: Size-distribution analysis of macromolecules by sedimentation velocity ultracentrifugation and lamm equation modeling. *Biophys J* 2000, 78(3), 1606-1619.
43. Shangguan W., Dai Y., García-Gutiérrez C., Yuan H.: Particle-size distribution models for the conversion of Chinese data to FAO/USDA System. *Sci World J* 2014, 109310.
44. Shapiro S.S., Wilk M.B.: An analysis of variance test for normality (complete samples). *Biometrika* 1965, 52(3-4), 591-611.
45. Skaggs T.H., Arya L.M., Shouse P.J., Mohany B.P.: Estimating particle-size distribution from limited soil texture data. *Soil Sci Soc Am J* 2001, 65, 1038-1044.
46. Sobieski W., Lipiński S., Golembiewski J., Matyka M.: Geometric versus hydraulic tortuosity in granular beds. *Granul Matter*, submitted 2016.
47. Söderström T., Stoica P.: *System Identification*. Prentice Hall 1994.
48. Sohn H. Y., Moreland C.: The effect of particle size distribution on packing density. *Can J Chem Eng* 1968, 46(3), 162-167.
49. Sutherland R.A., Lee C.T.: Application of the log-hyperbolic distribution to Hawai'ian beach sands. *J Coastal Res* 1994, 251-262.
50. Taşdemir A., Taşdemir T.: A comparative study on PSD models for chromite ores comminuted by different devices. *Part Part Syst Char* 2009, 26(1-2), 69-79.
51. Tiryakioğlu M., Ökten G., Hudak D.: Statistics for estimating the population average of a Lifshitz–Slyozov–Wagner (LSW) distribution. *J Mater Sci* 2009, 44(21), 5754-5759.
52. Ulusoy U., Igathinathane C.: Particle size distribution modeling of milled coals by dynamic image analysis and mechanical sieving. *Fuel Process Technol* 2016, 143, 100-109.
53. Vidal D., Ridgway C., Pianet G., Schoelkopf J., Roy R., Bertrand F.: Effect of particle size distribution and packing compression on fluid permeability as predicted by lattice-Boltzmann simulations. *Comput Chem Eng* 2009, 33(1), 256-266.
54. Wang Y., Forssberg E.: Product size distribution in stirred media mills. *Miner Eng* 2000, 13(4), 459-465.
55. Watała C.: *Biostatystyka*.  $\alpha$ -medica press 2002.
56. Wyrwoll K.H., Smyth G.K.: On using the log-hyperbolic distribution to describe the textural characteristics of eolian sediments. *J Sediment Res* 1985, 55(4), 471-478.
57. Yalkowsky S.H., Bolton S.: Particle size and content uniformity. *Pharm Res* 1990, 7(9), 962-966.
58. Yazici B., Yolacan S.: A comparison of various tests of normality. *J Stat Comput Sim* 2007, 77(2), 175-183.
59. Yohannes B., Gonzalez M., Abebe A., Sprockel O., Nikfar F., Kang S., Cuitino A.M.: The role of fine particles on compaction and tensile strength of pharmaceutical powders. *Powder Technol* 2015, 274, 372-378.
60. Yu A.B.: Johnson's SB distribution function as applied in the mathematical representation of particle size distributions. Part 1: Theoretical background and numerical simulation. *Part Part Syst Char* 1994, 11(4), 291-298.

61. Yu A.B.: Johnson's SB Distribution Function as Applied in the Mathematical Representation of Particle Size Distributions. Part 2: Application of numerical results. Part Part Syst Char 1994, 11(5), 367-374.
62. Yu D., Xu M., Yao H., Liu X., Zhou K.: A new method for identifying the modes of particulate matter from pulverized coal combustion. Powder Technol 2008, 183(1), 105-114.

## 4. BADANIA STRUKTURY GEOMETRYCZNEJ ZŁÓŻ GRANULARNYCH TECHNIKAMI OBRAZOWANIA

### 4.1. Wstęp

Koncepcja wykorzystania technik obrazowania biomedycznego w celu wizualizacji złóż granularnych jest znana i wykorzystywana od wielu lat [8,11]. Najczęściej do tego celu wykorzystuje się metody tomograficzne (tj. obrazujące w warstwach), ze szczególnym wskazaniem na tomografię komputerową (ang. Computed Tomography, CT), czyli tę opartą na promieniowaniu rentgenowskim [5,10,15]. W przypadku obrazowania struktur o małych wymiarach cząstek stosuje się tak zwaną mikrotomografię ( $\mu$ CT) [7,16,23]. Znane są doniesienia o wykorzystaniu innych metod obrazowania, jak skaningowa mikroskopia elektronowa (ang. Scanning Electron Microscopy, SEM) [33], pozytonowa tomografia emisyjna (ang. Positron Emission Tomography, PET) czy tomografia emisyjna pojedynczych fotonów (ang. Single Photon Emission Computed Tomography, SPECT) [4], ale to (mikro)tomografia jest bez wątpienia techniką najbardziej popularną [26,31]. Wynika to przede wszystkim ze stosunkowo dobrej dostępności metody, także w aspekcie kosztów, jak też możliwości uzyskania zobrazowań wysokiej jakości, tj. o pożądanej rozdzielczości i niskim stopniu zaszumienia. Należy tu wspomnieć o fakcie, że główną zaletą zobrazowań tomograficznych metodą rezonansu magnetycznego (ang. Magnetic Resonance Imaging, MRI) w odniesieniu do tomografii rentgenowskiej jest unikanie ekspozycji na potencjalnie szkodliwe dla organizmu człowieka promieniowanie X, która to ekspozycja jest tym większa, im lepsza jest jakość uzyskiwanych obrazów. W przypadku obrazowania złóż granularnych ekspozycja obiektu badań na promieniowanie X nie ma oczywiście znaczenia, skoro nie jest nim człowiek, a gdy uwzględnimy fakt, że tomografia rentgenowska jest znacznie tańsza od obrazowania metodą rezonansu magnetycznego, to znajdujemy powód, dla którego nie ma uzasadnienia wykorzystywanie rezonansu magnetycznego do wizualizacji złóż granularnych.

W rozdziale opisana została metodyka pozyskiwania informacji o strukturze wewnętrznej złoza granularnego na podstawie wieloprzekrojowego badania CT. Podmiotem analizy są tomogramy pleksiglasowego cylindra wypełnionego szklanymi kulkami, natomiast informacją wyjściową są dane numeryczne na temat przestrzennego położenia tych kulek.

### 4.2. Materiał i metody

#### 4.2.1. Materiał badawczy

Zgodnie z opisem zawartym w Rozdziale 2, materiał badawczy stanowiły kulki szklane używane w młynach perelkowych o średnicach 4, 6 i 8 [mm]; we wspomnianym rozdziale dokładniej opisano właściwości wykorzystanych kulek. Do opisu metodyki badań i przetwarzania obrazu w niniejszym rozdziale wykorzystano kulki o średnicy 8 [mm], niemniej metody zostały sprawdzone również na podstawie zobrazowań cylindrów wypełnionych kulkami o średnicach 4 i 6 [mm].

Na Rys. 4.1 pokazano cylindry wykonane ze szkła akrylowego (pleksiglasu), wypełnione kulkami o wyżej wymienionych średnicach. Wypełnienie każdego z takich cylindrów można uznać za złoże granularne składające się z kulek o określonej średnicy. Jak wspomniano wcześniej, celem analizy obrazów tomograficznych jest pozyskanie informacji o geometrycznym położeniu środka każdej z kulek tworzących dane złoże. Informację tę można później wykorzystać na przykład do utworzenia wirtualnego złoza granularnego mającego swój dokładny odpowiednik w rzeczywistości, co jest w sposób oczywisty niezwykle cenne w aspekcie możliwości odniesienia parametrów złoza obliczonych analitycznie do swoich zmierzonych odpowiedników.

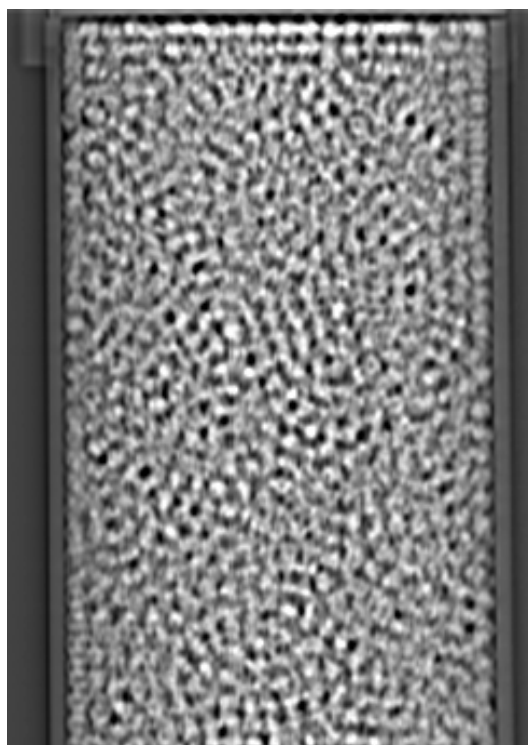


Rys. 4.1. Materiał badawczy – kulki szklane o średnicach 6 (a), 4 (b) i 8 (c) [mm] umieszczone w cylindrach pleksyglasowych o średnicy 150 [mm]

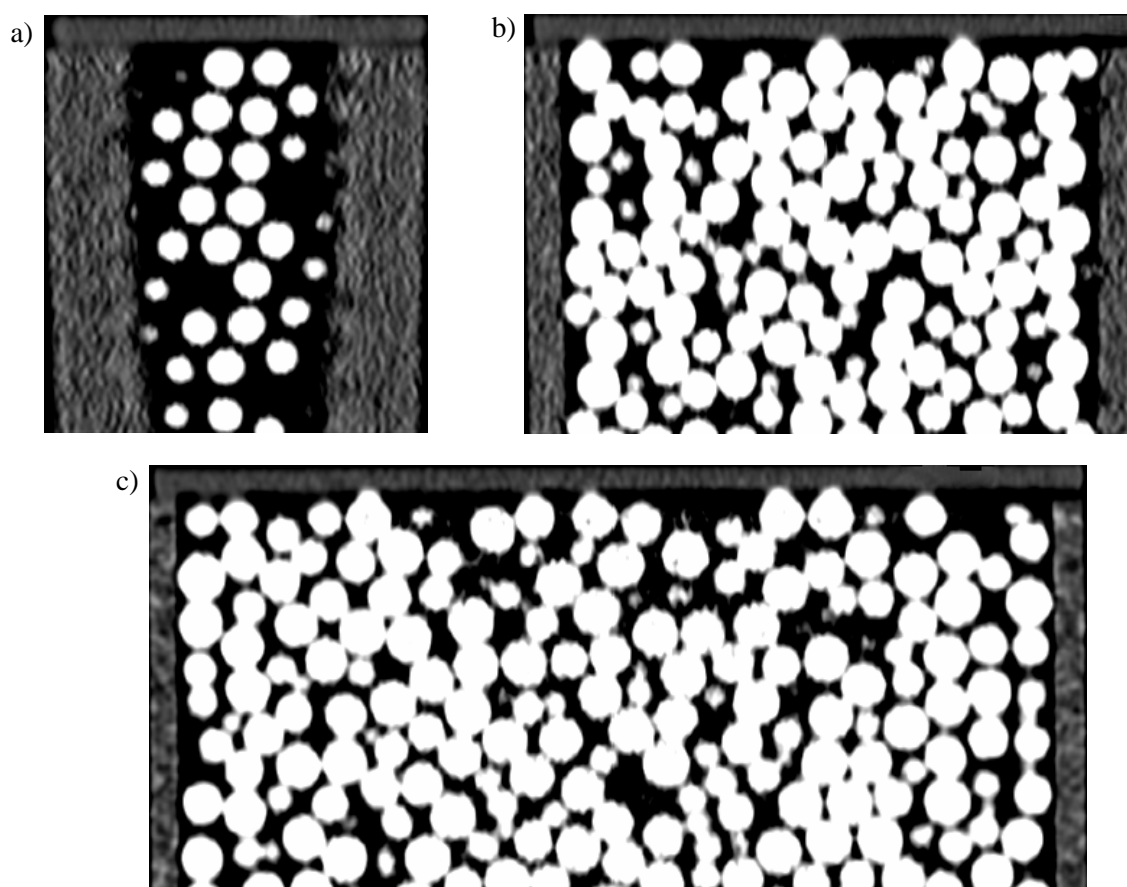
#### 4.2.2. Pomiary tomograficzne

Obrazy tomograficzne zostały pozyskane z wykorzystaniem skanera CT firmy Siemens (Siemens SOMATOM Emotion 2004).

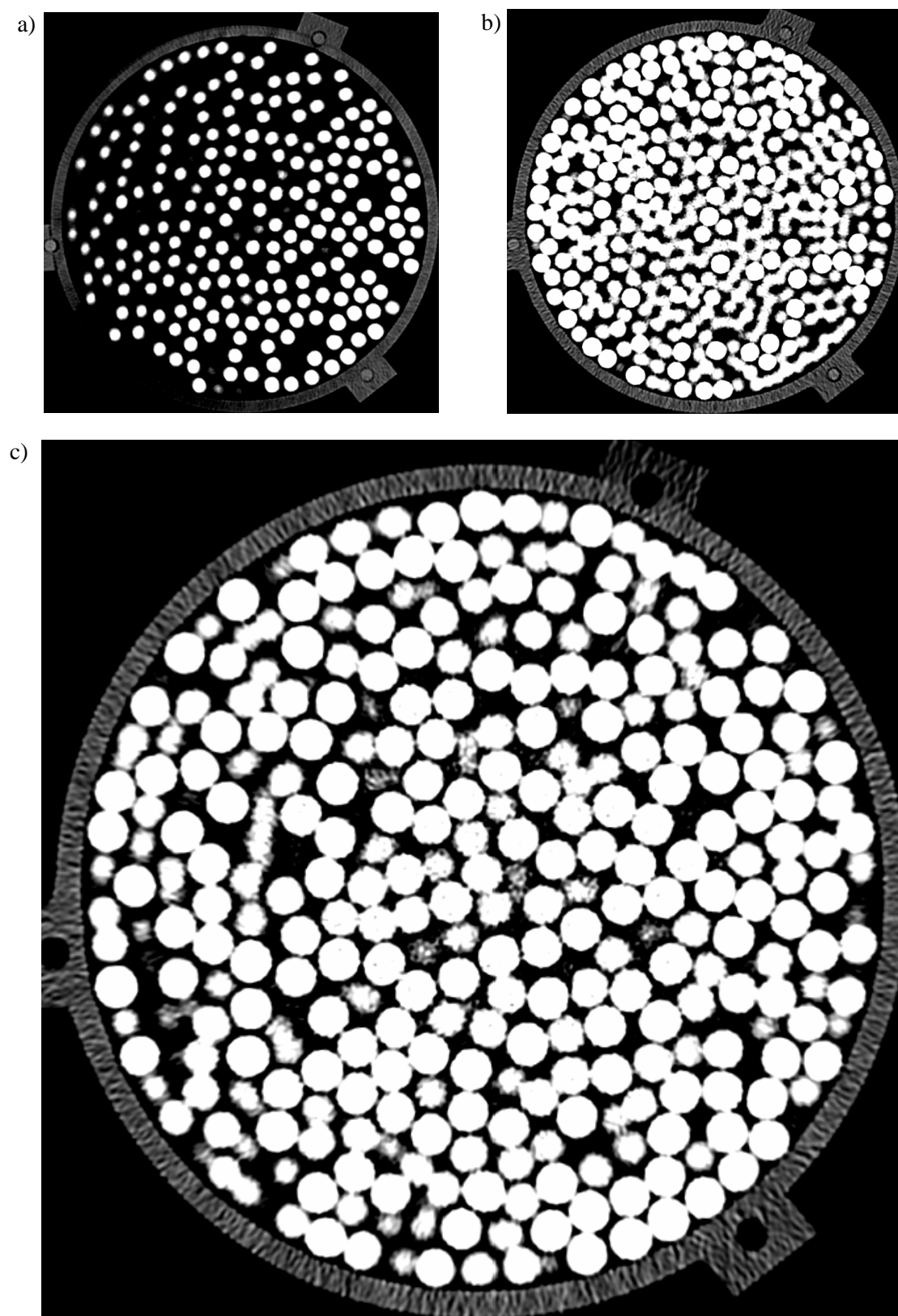
Na Rys. 4.2 i 4.3 pokazano kilka przykładowych skanów CT złożeń z kulek o średnicy 8 [mm] w przekroju pionowym. Na Rys. 4.2 widać przekrój całego cylindra płaszczyzną zawierającą oś symetrii cylindra, natomiast na Rys. 4.3 widoczny jest fragment tego samego złożeń w trzech różnych przekrojach. Rysunki te mają w tym miejscu jedynie znaczenie poglądowe, pokazujące możliwości obrazowania CT, bowiem zaprezentowana w dalszej części rozdziału metodyka opiera się na przekrojach poprzecznych złożeń, te (dokładniej – kilka przykładowych ze 131 przekrojów składających się na całość badania) pokazano na Rys. 4.4.



Rys. 4.2. Całościowy skan CT złoża z kulek o średnicy 8 [mm] w przekroju pionowym



Rys. 4.3. Przykładowe skany CT fragmentu złoża z kulek o średnicy 8 [mm] w przekroju pionowym



Rys. 4.4. Przykładowe skany CT złoża z kulek o średnicy 8 [mm] w przekroju poprzecznym

### 4.2.3. Przetwarzanie obrazu

#### 4.2.3.1. Binaryzacja

Zaproponowana metoda pozyskiwania informacji numerycznej o położeniu kulek tworzących złoż granularne opiera się na dwóch podstawowych operacjach morfologicznych: erozji i dylatacji. Podstawowe definicje operacji morfologicznych odnoszą się do obrazów binarnych, dlatego też przed przetwarzaniem morfologicznym, które jest kluczowym elementem opisaney metodyki, skany CT muszą zostać zbinaryzowane [6,32]. Można do tego celu wykorzystać jedną z wielu metod automatycznego progowania obrazu [24]. Charakter obrazów pokazanych na Rys. 4.4 sugeruje, że powinna być to jedna z prostych metod opartych na przetwarzaniu histogramu, jako że w obrazach tych klasy tła i obiektu są wyraźnie rozróżnialne gołym okiem na podstawie zakresu jasności. Przykładem takiej metody jest metoda Otsu [19,20], która jest jedną z najczęściej używanych metod binaryzacji obrazu [19,24]; jej implementacje można znaleźć w wielu środowiskach obliczeniowych, jak np. Matlab [32], co znacznie ułatwia jej wykorzystanie.

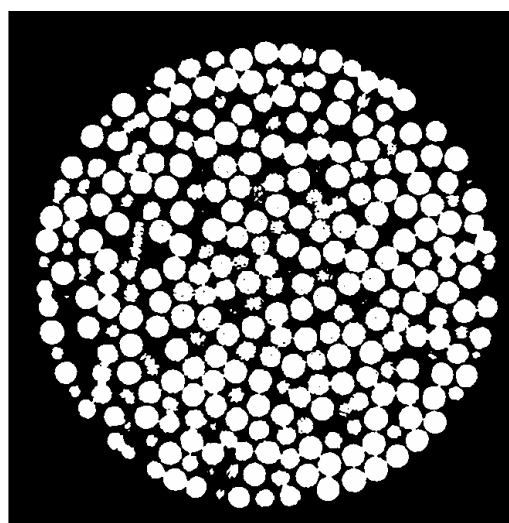
W niniejszym rozdziale zastosowano jednak inną metodę, czyli arbitralny wybór progu binaryzacji. Podejście to można uzasadnić na dwa sposoby. Pierwszym jest fakt, że wszystkie przekroje są do siebie podobne w aspekcie jasności klas tła i obiektu, zatem nieuzasadnionym z punktu widzenia zapotrzebowania algorytmu na moc obliczeniową jest obliczanie progu dla każdego z obrazów osobno. Drugim jest fakt, że w przypadku gdyby pojemnik (w tym przypadku pleksiglasowy cylinder) miał współczynnik pochłaniania promieni rentgenowskich na poziomie zbliżonym do substancji tworzącej złoż (w tym przypadku są nią szklane kulki), to metoda progowania automatycznego mogłaby błędnie zaliczyć piksele odpowiadające pojemnikowi do klasy obiektów, zamiast do klasy tła. Obie wyżej wymienione przesłanki wpłynęły na decyzję o tym, że wybór progu binaryzacji dokonany został arbitralnie, tj. na podstawie decyzji operatora.

W opisywanym przykładzie próg binaryzacji został ustalony przez operatora na poziomie  $0.9 \cdot 256 = 230.4$ . Wartość 256 wynika z liczby poziomów jasności wykorzystywanych skanów CT - jest to wartość klasyczna dla obrazów danych w skali odcieni szarości (ang. grayscale image). Bierze się to z faktu, że w przytłaczającej ilości przypadków informację o poziomie jasności poszczególnych pikseli w takich obrazach zakodowuje się wykorzystując osiem bitów (czyli bajt) informacji [19,32], co z kolei daje nam do dyspozycji  $2^8 = 256$  wartości.

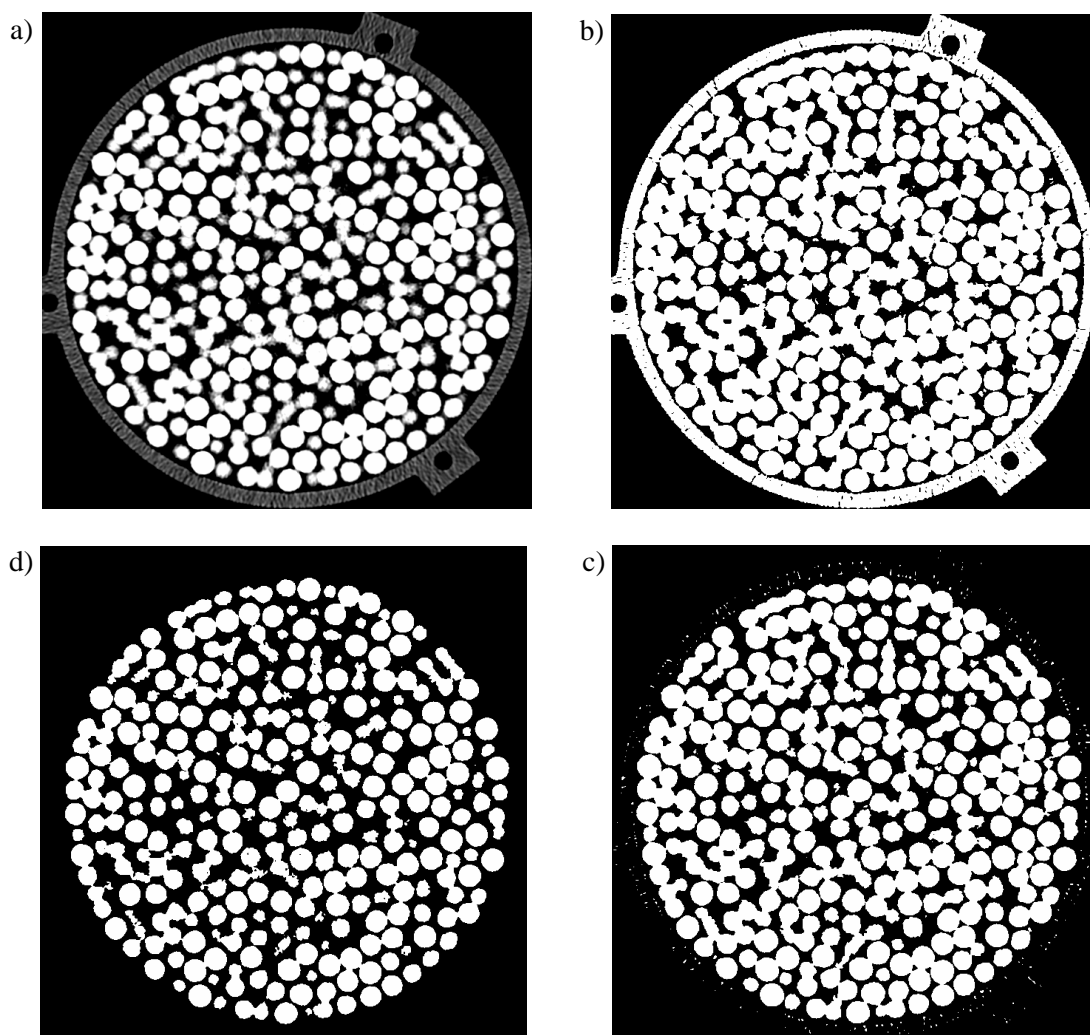
Na Rys. 4.5 pokazano skan CT z Rys. 4.4c) po binaryzacji. Jak widać, w efekcie tej operacji pozyskano obraz binarny, w którym „1” oznacza piksel tła (powietrze i pleksiglasowy cylinder), a „0” piksel obiektu (kulka). Na zbinaryzowanym obrazie niewidoczny jest już cylinder, w którym umieszczone były kulki, co świadczy o właściwym wyborze progu binaryzacji.

Na Rys. 4.6 pokazano przykładowe skutki błędnego wyboru progu binaryzacji. Na przykładach tych można zauważyć, że:

- w przypadku progu ewidentnie zbyt niskiego, tj. równemu  $0.1 \cdot 256$  (Rys. 4.6.b) niemal wszystkie piksele odpowiadające pleksiglasowemu cylindrowi zostały zaliczone do klasy obiektu;
- w przypadku progu bliższemu właściwemu, tj. równemu  $0.5 \cdot 256$  (Rys. 4.6.c), co prawda piksele odpowiadające pleksiglasowemu cylindrowi zostały niemal w całości zaliczone do klasy tła, co na dalszym etapie przetwarzania byłoby stosunkowo łatwe do wyeliminowania, ale na obrazie tym widać też, że szklane kulki zlewają się ze sobą brzegami, co dla progu na właściwym poziomie (Rys. 4.6.d) jest już zjawiskiem mniej zauważalnym i na poziomie możliwym do znacznie łatwiejszej eliminacji w dalszym przetwarzaniu obrazu.



Rys. 4.5. Przykładowy skan CT z Rys. 4.4.c po binaryzacji



Rys. 4.6. Ilustracja problemu niewłaściwego progu binaryzacji na przykładzie skanu CT (a) po binaryzacji z progami: b) 0.1 -256; c) 0.5 -256; d) i 0.9 -256



#### 4.2.3.2. Morfologiczne przetwarzanie obrazu

Do analizy obrazów tomograficznych zastosowano metody morfologicznego przetwarzania obrazu. Podstawową przesłanką dla takiego wyboru jest łatwość w ich implementacji przy stosunkowo niewielkim nakładzie obliczeniowym [29,30]. Zastosowanie operatorów morfologicznych znajduje szerokie zastosowanie w zadaniach ekstrakcji i segmentacji stosowanych do analizy obrazów cyfrowych [1,3,9,17,18,27], a ich wydajność obliczeniowa predestynuje je w szczególności do przetwarzania dużych zbiorów (sekwencji) obrazów [13,14,30], a z takim przypadkiem mamy do czynienia w wieloprzekrojowym zobrazowaniu struktury złoża granularnego. Dla przykładu, w przypadku opisanym w niniejszym rozdziale, na 6.8 [cm] wysokości złoża przypada 131 przekrojów.

Jak wspomniano wcześniej, dylatacja i erozja to dwie podstawowe operacje morfologiczne. Operacje te wykorzystują następujące dane wejściowe: przetwarzany obraz i element strukturalny, który jest macierzą definiującą kształt i rozmiar analizowanego w operacji morfologicznej sąsiedztwa przetwarzanego piksela. Poprzez dobór rozmiaru i konstrukcji elementu strukturalnego można wpływać na czułość operacji morfologicznych na określone kształty mogące pojawić się w przetwarzanym obrazie [6,25,29]. W odniesieniu do tomogramów złoża granularnego składającego się z kulek, w naturalny sposób nasuwa się więc wykorzystanie elementu strukturalnego w kształcie dysku. Zdefiniujmy więc wspomniane wcześniej dwie podstawowe operacje morfologiczne.

**Erozję** obrazu binarnego  $B$  elementem strukturalnym  $S$  definiuje się następująco [6,28]:

$$B \otimes S = \{x, y : S_{x,y} \subseteq B\}. \quad (4.1)$$

**Dylatację** obrazu binarnego  $B$  elementem strukturalnym  $S$  definiuje się następująco [6,28]:

$$B \oplus S = \{x, y : S_{x,y} \cap B \neq \emptyset\}. \quad (4.2)$$

Podstawowym efektem erozji jest zubożenie brzegów dużych obiektów zawartych w przetwarzanym obrazie i eliminacja drobnych szczegółów obrazu. Dylatacja działa odwrotnie, a zatem zwiększa ona powierzchnię obiektów każdej wielkości zawartych w obrazie.

Operacje otwarcia i zamknięcia są złożeniami erozji i dylatacji, z użyciem tego samego elementu strukturalnego. Otwarcie to dylatacja poprzedzona erozją, natomiast zamknięcie to erozja poprzedzona dylatacją. Stosowanie operacji otwarcia i zamknięcia eliminuje główne wady erozji i dylatacji, tj. zmiany pola powierzchni obiektów zawartych w przekształcanych obrazach, zachowując podstawowe cechy pierwszej operacji ze złożenia [6,12,32]. W zaproponowanej w tym rozdziale metodzie wykorzystujemy operację zarówno otwarcia, definiowaną jako [6,12]:

$$B \circ S = (B \otimes S) \oplus S, \quad (4.3)$$

jak i operację zamknięcia, definiowaną jako [6,12]:

$$B \bullet S = (B \oplus S) \otimes S. \quad (4.4)$$

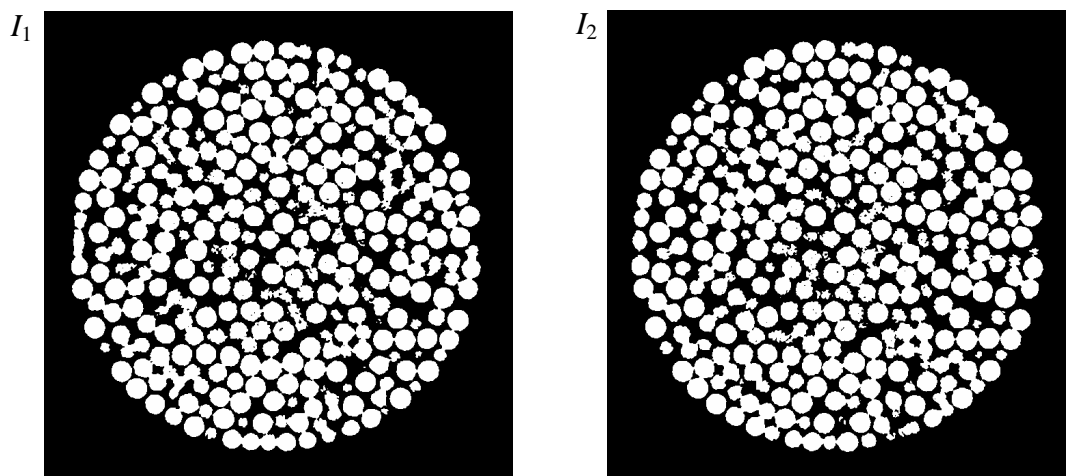
W wielu zastosowaniach praktycznych stosuje się te same operacje morfologiczne kilka ( $n$ ) razy z rzędu [1,12,14]. Wówczas oznacza się je następująco:  $B \otimes^{(n)} S$ ,  $B \oplus^{(n)} S$ ,  $B \circ^{(n)} S$  i  $B \bullet^{(n)} S$ , odpowiednio dla: erozji, dylatacji, otwarcia i zamknięcia.

### 4.3. Opis metody pozyskiwania numerycznej informacji o geometrycznym położeniu środków kulek tworzących złoż granularne

Przystępując do właściwego przetwarzania obrazu mamy do dyspozycji określoną liczbę skanów CT. W przykładzie danym w rozdziale jest to, jak już wspomiano, 131 obrazów. Są to obrazy już po binaryzacji, czyli czarno-białe (ang. black-and-white image), co w gruncie rzeczy sprowadza się do reprezentacji obrazu w formie binarnej macierzy. Obrazów czarno-białych nie należy mylić z obrazami w skali szarości, co może się zdarzyć na przykład w przypadku zastosowania skrótu myślowego w postaci analogii do fotografii określanej jako czarno-biała, operującej jednak na informacji danej w skali szarości, a nie w postaci binarnej, czyli zerojedynkowej.

#### 4.3.1. Opis procedury

Procedura pozyskiwania numerycznej informacji o geometrycznym położeniu środka kulek tworzących złoż granularne wykonywana jest w  $K-1$  krokach, gdzie  $K$  jest liczbą analizowanych przekrojów. W każdym kroku brane są pod uwagę obrazy  $I_1$  i  $I_2$  z dwóch sąsiadujących ze sobą przekrojów. Procedura zostanie zaprezentowana na przykładzie dwóch wybranych warstw, dokładniej będą to przekroje o numerach 60 i 61 (licząc od góry). Obrazy te pokazano na Rys. 4.7. W kolejnych krokach procedury wykorzystywane będą elementy strukturalne o konkretnie wskazanych rozmiarach (średnicach), zależnych od parametrów przetwarzanych obrazów. Sposób określenia rozmiaru elementów strukturalnych wskazano w podrozdziale 4.3.2.



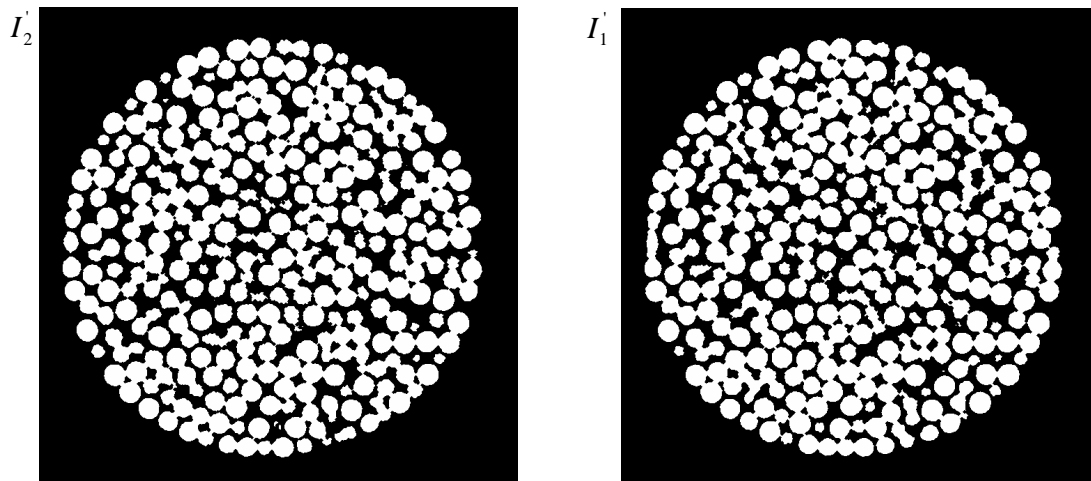
Rys. 4.7. Obrazy  $I_1$  i  $I_2$  na początku procedury pozyskiwania informacji (zbinaryzowane)

W pierwszym kroku oba obrazy poddane zostają operacji morfologicznego zamknięcia z elementem strukturalnym w postaci dysku o promieniu 2 pikseli:

$$I_1' = I_1 \bullet S_2^D, \quad (4.5)$$

$$I_2' = I_2 \bullet S_2^D. \quad (4.6)$$

Obrazy po tej operacji ( $I_1'$  i  $I_2'$ , pozyskane odpowiednio z  $I_1$  i  $I_2$ ) pokazano na Rys. 4.8. Operacja zamknięcia ma na celu filtrację obu obrazów, tj. „zamknięcie” najmniejszych otworów (zauważalnych na Rys. 4.7 jako pojedyncze czarne piksele w obszarze kulek) widocznych w obu obrazach. Jak widać na Rys. 4.8, cel ten został zrealizowany – obrazy zostały odszumione.



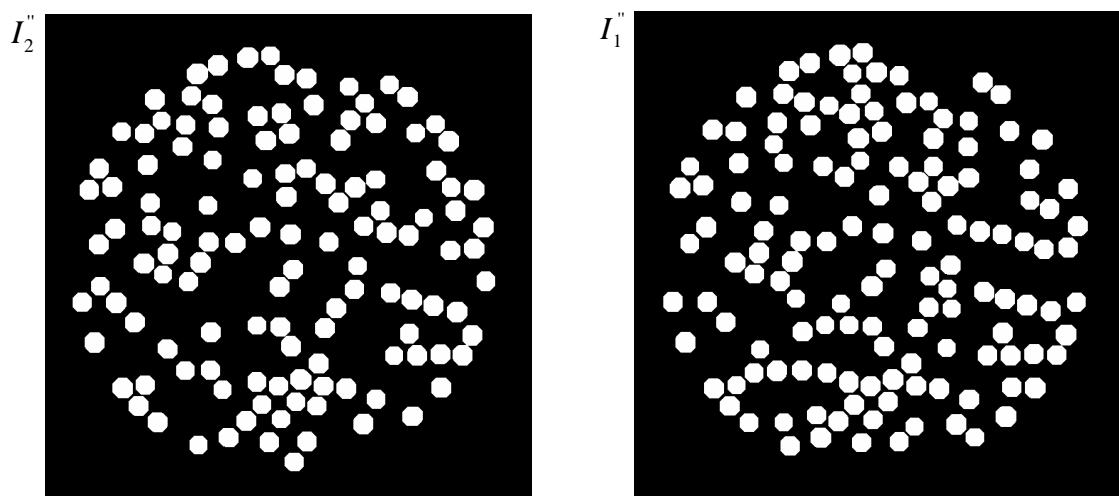
Rys. 4.8 Obrazy  $I'_1$  i  $I'_2$  uzyskane odpowiednio z obrazów  $I_1$  i  $I_2$  po operacji morfologicznego zamknięcia elementem strukturalnym w kształcie dysku i promieniu 2 pikseli

Drugim krokiem jest poddanie obrazów  $I'_1$  i  $I'_2$  operacji morfologicznego otwarcia z elementem strukturalnym w postaci dysku o promieniu 13 pikseli:

$$I''_1 = I'_1 \circ S_{13}^D, \quad (4.7)$$

$$I''_2 = I'_2 \circ S_{13}^D. \quad (4.8)$$

Obrazy po tej operacji ( $I''_1$  i  $I''_2$ , pozyskane odpowiednio z  $I'_1$  i  $I'_2$ ) pokazano na Rys. 4.9. Operacja otwarcia ma na celu wyeliminowanie z obrazów przekrojów kulek o małych średnicach, co wynika z faktu, że każda z kulek znajduje się na kilku obrazach, a celem jest znalezienie tego, na którym przekrój kulki ma największą powierzchnię. Jak wynika z Rys. 4.9 tu także cel został zrealizowany – na obu obrazach widoczne są już tylko kulki o dużych średnicach (tj. bliskich 8 [mm]).



Rys. 4.9 Obrazy  $I''_1$  i  $I''_2$  uzyskane odpowiednio z obrazów  $I'_1$  i  $I'_2$  po operacji morfologicznego otwarcia elementem strukturalnym w kształcie dysku i promieniu 13 pikseli

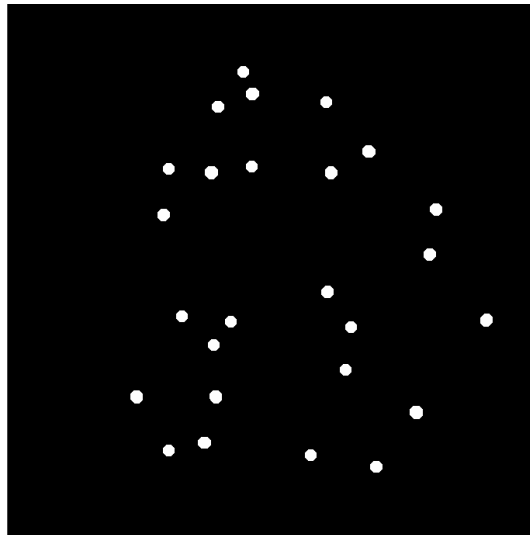
Trzeci krok wykorzystuje operator łączący operacje morfologiczną z arytmetyczną. Opiera się on na operacji morfologicznej erozji (z elementem strukturalnym w postaci dysku o promieniu 6 pikseli), której poddana jest różnica obrazów  $I_1''$  i  $I_2''$ :

$$I = \left[ \left( \frac{I_1'' - I_2''}{2} \right) \otimes S_6^D \right]. \quad (4.9)$$

Obraz  $I$  uzyskany z tej operacji pokazano na Rys. 4.10. Operacja ta ma na celu automatyczne porównanie ze sobą obrazów  $I_1''$  i  $I_2''$ , w taki sposób, by w obrazie wynikowym  $I$  reprezentowane (widoczne) były tylko te kulki, których powierzchnia na przekroju  $I_1$  jest większa niż na przekroju  $I_2$ , co przekłada się na fakt, że to ten przekrój odpowiada geometrycznemu położeniu ich środka w osi pionowej. Na Rys. 4.10 widoczne są już więc tylko te właśnie przekroje kulek.

Omawiana procedura, zgodnie z opisem na początku tego podrozdziału, jest iteracyjna, a zatem w kolejnym kroku obraz brany aktualnie jako  $I_2$  stanie się obrazem  $I_1$ , i to wtedy kulki usunięte w tym kroku, pozostaną w obrazie  $I$ , który wówczas będzie obrazem pozyskanym z przekroju bliższemu geometrycznemu położeniu ich środków.

Wykorzystana w kroku trzecim operacja erozji dodatkowo zubaża brzegi kulek pozostałych w obrazie. Stąd właśnie na Rys. 4.10. każda z kulek ma wyraźnie mniejszą powierzchnię niż na Rys. 4.9. Na tym etapie nie ma to już jednak żadnego wpływu na wyniki – średnice kulek są znane z góry, opisana procedura w ostatnim kroku nie bierze pod uwagę powierzchni przekroju, a geometryczne położenie środka każdej z kulek pozostaje niezmienione – brzegi są zubażane równomiernie od zewnątrz.



Rys. 4.10 Obraz  $I$  uzyskany z operacji morfologiczno-arytmetycznej wykonywanej w trzecim kroku procedury na obrazach  $I_1''$  i  $I_2''$

Ostatnim, czwartym krokiem procedury jest wyznaczenie położenia (współrzędnych) centroid okręgów widocznych na obrazie  $I$  i zaindeksowanie każdego z nich. Współrzędne centroid ( $x$  i  $y$ ) dla każdej z kulek obliczane są jako [19]:

$$x = \frac{1}{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N I(x_i, y_j)} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N x_i \cdot I(x_i, y_j), \quad (4.10)$$

$$y = \frac{1}{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N I(x_i, y_j)} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N y_j \cdot I(x_i, y_j), \quad (4.11)$$

gdzie:  $M$ ,  $N$  - wymiary obrazu,  $I(x_i, y_i)$  - wartość piksela o współrzędnych  $x_i$ ,  $y_i$  (ponieważ obraz  $I$  zawiera informację binarną, a zatem  $I(x_i, y_i)$  może przyjmować jedynie wartość 0 lub 1).

Po obliczeniu centroid dysponujemy dokładną numeryczną informacją o położeniu na płaszczyźnie środka każdej z kulek analizowanego w danej iteracji przekroju – co daje nam ich współrzędne  $x$  i  $y$ . Numer tej iteracji (tożsamy z numerem przekroju) wskazuje z kolei na położenie pionowe kulek (współrzędna  $z$ ). W ten sposób, po wykonaniu  $K-1$  iteracji, czyli analizie każdego przekroju, cel procedury zostaje zrealizowany. Na Rys. 4.11 pokazano przykładowy format pliku z zapisaną informacją na temat położenia każdej kulek w analizowanym złożu przykładowym, od lewej: indeks (numer porządkowy) kulki, jej współrzędne  $x$ ,  $y$  i  $z$  oraz jej średnica.

2.5800000e+02	1.6796696e+02	1.2415529e+02	7.0000000e+00	8.0000000e+00
2.5900000e+02	1.8725000e+02	1.0462500e+02	7.0000000e+00	8.0000000e+00
2.6000000e+02	9.2500000e+01	6.0500000e+01	7.5000000e+00	8.0000000e+00
2.6100000e+02	1.0071696e+02	2.9594714e+01	7.5000000e+00	8.0000000e+00

Rys. 4.11. Przykładowy fragment pliku zawierającego numeryczną informację o analizowanym złożu

### 4.3.2. Dobór średnic elementów strukturalnych

W ramach podsumowania opisu procedury przetwarzania obrazu należy wyjaśnić kluczowy jej element, którym jest dobór średnic elementów strukturalnych wykorzystywanych w każdej z operacji morfologicznego przetwarzania obrazu. Ich dobór zależy od kroku przetwarzania, zgodnie z opisem poniżej.

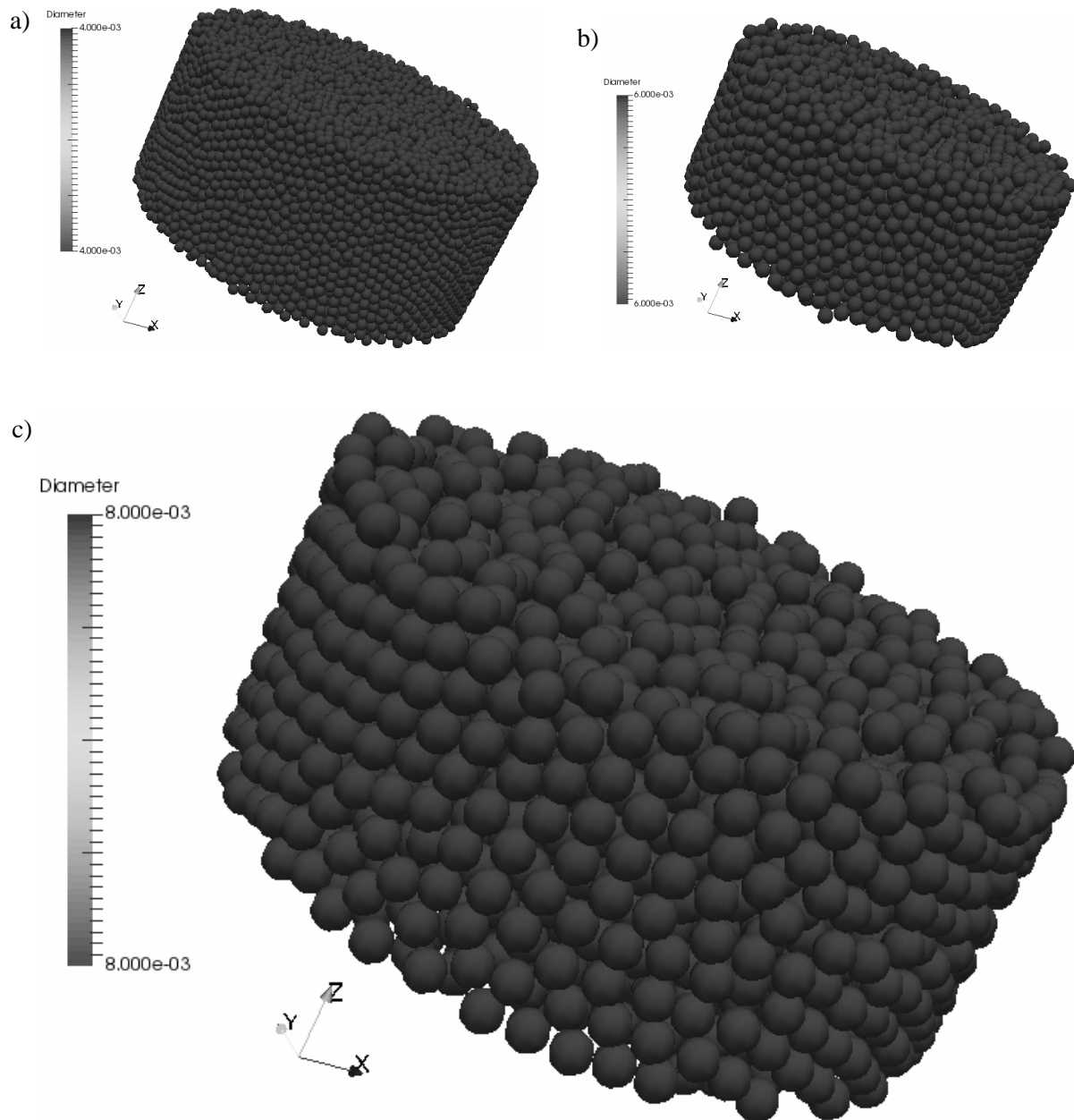
- W kroku pierwszym promień powinien mieć z zasady wartość 2 pikseli. W drodze wyjątku, w przypadku problemów z filtracją (co może wynikać ze złej jakości danych wejściowych) można promień ten powiększyć.
- W kroku drugim należy się odnieść do rozdzielczości przetwarzanych obrazów tomograficznych, jak też średnic kulek tworzących złoże. Jeżeli chodzi o rozdzielczość, to kluczowym elementem jest liczba  $n_{pmm}$  pikseli przypadających na milimetr złoża. Po dodaniu do tego informacji o średnicy  $d_k$  kulek tworzących złoże, możemy skorzystać z wzoru (4.12) na promień  $r_{elstr}$  elementu strukturalnego wykorzystywanego w tym kroku przetwarzania:

$$r_{elstr} = 0.4 \cdot d_k \cdot n_{pmm}. \quad (4.12)$$

- W kroku trzecim ponownie należy się odnieść do wartości liczby  $n_{pmm}$  pikseli przypadających na milimetr złoża i średnicy  $d_k$  kulek tworzących złoże:

$$r_{elstr} = 0.2 \cdot d_k \cdot n \quad (4.12)$$

W celach testowych, zgodnie z powyższymi zasadami zostały zmienione promienie dysków tworzących elementy strukturalne do celów analizy złożeń granularnych zbudowanych z kulek o średnicach 4 i 6 [mm]. Na Rys. 4.12 pokazano wirtualne złoże dla kulek o średnicach 4, 6 i 8 [mm] utworzone na podstawie danych z badania tomograficznego.



Rys. 4.12. Wirtualne złoże granularne złożone z kulek o średnicach: 4 mm (a), 6 mm (b) i 8 mm (c), zbudowane na podstawie informacji pozyskanej z analizy zobrazowania tomograficznego złożeń pokazanych na Rys. 4.1

## 4.4. Podsumowanie

Rozdział można podsumować następującymi wnioskami:

- Tomografia (bądź mikrotomografia) komputerowa, tj. wykorzystująca promieniowanie rentgenowskie, wydaje się być najbardziej przydatną metodą obrazowania struktury wewnętrznej złożeń granularnych, zarówno w aspekcie dostępności metody, jak też jakości pozyskiwanych obrazów.
- Właściwe wykorzystanie metod cyfrowego przetwarzania obrazu daje możliwość pozyskania dokładnej numerycznej informacji na temat struktury wewnętrznej złożeń granularnych.
- Zastosowanie metod morfologicznego przetwarzania obrazu w celu pozyskania informacji numerycznej o geometrycznym położeniu środka każdej z kulek tworzących dane złoże jest korzystne z punktu widzenia łatwości w ich implementacji oraz wydajności obliczeniowej.
- Pozyskane informacje można później wykorzystać na przykład do utworzenia wirtualnego złożeń granularnych mającego swój dokładny odpowiednik w rzeczywistości.
- Tak utworzone złoże wirtualne daje cenną możliwość odniesienia jego parametrów obliczonych analitycznie do swoich zmierzonych odpowiedników.
- W przypadku analizy złożeń o bardziej złożonej strukturze wewnętrznej (np. złożonego z kulek o różnej średnicy) pokazana metodyka powinna oczywiście być zmodyfikowana, ale zasadniczo może się ona opierać na tym samym fundamencie.
- W przypadku analizy złożeń zbudowanego z materiałów o różnym współczynniku pochłaniania promieniowania rentgenowskiego (problem ten można wyeliminować w przypadku złożeń sztucznych, natomiast w przypadku złożeń rzeczywistych nie mamy nań wpływu), rozwiązaniem może być wstępna segmentacja złożeń wykonana na etapie binaryzacji.

## Literatura

1. Batchelor B., Waltz F.: Interactive image processing for machine vision. Springer-Verlag 1993.
2. Benediktsson J.A., Pesaresi M., Amason K.: Classification and feature extraction for remote sensing images from urban areas based on morphological transformations. IEEE T Geosci Remote 2003, 41(9), 1940-1949.
3. Bleau A., Leon L.J.: Watershed-based segmentation and region merging. Comput Vis Image Und 2000, 77(3), 317-370.
4. Boutchko R., Rayz V.L., Vandehey N.T., O'Neil J.P., Budinger T.F., Nico P.S., Druhan J.L., Saloner D.A., Gullberg G.T., Moses W. W.: Imaging and modeling of flow in porous media using clinical nuclear emission tomography systems and computational fluid dynamics. J Appl Geophys 2012, 76, 74-81.
5. Breugem W.-P., van Dijk V., Delfos R.: Flows Through Real Porous Media: X-Ray Computed Tomography, Experiments, and Numerical Simulations. J Fluids Eng 2014, 136(4), 040902.
6. Dougherty E.R., Lotufo R.A.: Hands-on Morphological Image Processing. SPIE Press 2003.
7. Gommes C. J., Bons A. J., Blacher S., Dunsmuir J. H., Tsou A. H.: Practical methods for measuring the tortuosity of porous materials from binary or gray-tone tomographic reconstructions. AIChE J 2009, 55(8), 2000-2012.
8. Hainsworth J.M., Aylmore L.A.G.: The use of computer-assisted tomography to determine spatial distribution of soil water content, Aust J Soil Res 1983, 21(4), 435-443.
9. Hasan Y.Y., Karam L.J.: Morphological text extraction from images. IEEE T Image Process: a publication of the IEEE Signal Processing Society 1999, 9(11), 1978-1983.
10. Haussener S., Jerjen I., Wyss P., Steinfeld A.: Tomography-based determination of effective transport properties for reacting porous media. J Heat Transf 2012, 134(1), 012601.
11. Hsieh H. T., Brown G. O., Stone M. L., Lucero D. A.: Measurement of porous media component content and heterogeneity using gamma ray tomography. Water Resour Res 1998, 34(3), 365-372.
12. Iwanowski M.: Metody morfologiczne w przetwarzaniu obrazów cyfrowych. Akademicka Oficyna Wydawnicza Exit 2009.

13. Kalicka R., Lipiński S.: A Fast method of Separation of the Noisy Background from the Head-Cross Section in the Sequence of MRI Scans, *Biocybern Biomed Eng* 2010, 30(2), 15-27.
14. Kalicka R., Lipiński S., Browarczyk M.: Novel method of lung area extraction in chest perfusion computed tomography. *Biomed Tech* 2013, 58(1), 79-86.
15. Kantzas A.: Investigation of physical properties of porous rocks and fluid flow phenomena in porous media using computer assisted tomography. *In Situ* 1990, 14(1), 77-132.
16. Lindquist W. B., Venkatarangan A., Dunsmuir J., Wong T. F.: Pore and throat size distributions measured from synchrotron X-ray tomographic images of Fontainebleau sandstones. *J Geophys Res: Sol Ea* 2000, 105(B9), 21509-21527.
17. Lipiński S., Jezierska-Woźniak K., Habich A., Barczewska M., Wojtkiewicz J., Walczak P., Maksymowicz W.: Methodology for Assessing the Degree of Degeneration of the Porcine Intervertebral Discs Based on Magnetic Resonance Imaging, *IFMBE Proc* 2016, 53, 399-402.
18. Lipiński S., Lipiński A.: Zastosowanie morfologicznego przetwarzania obrazu do ekstrakcji informacji o wielkości kropli z użyciem papieru wodnoczulego. *Pomiary Automatyka Kontrola* 2011, 57(6), 630-633.
19. Malina W., Smiatcz M.: Metody cyfrowego przetwarzania obrazów. *Akademicka Oficyna Wydawnicza Exit* 2005.
20. Otsu N.: A threshold selection method from gray-level histograms. *IEEE Trans Sys Man Cyber* 1979, 9 (1): 62-66.
21. Prill T., Schladitz K., Jeulin D., Faessel M., Wieser, C.: Morphological segmentation of FIB-SEM data of highly porous media. *J Microsc* 2013, 250(2), 77-87.
22. Sankowski D., Mosorov V., Strzecha K.: Przetwarzanie i analiza obrazów w systemach przemysłowych. *Wydawnictwo Naukowe PWN* 2011.
23. Schlüter S., Sheppard A., Brown K., Wildenschild D.: Image processing of multiphase images obtained via X-ray microtomography: a review. *Water Resour Res* 2014, 50(4), 3615-3639.
24. Sezgin M., Sankur B.: Survey over image thresholding techniques and quantitative performance evaluation. *J Electron Imaging* 2004, 13(1), 146-165.
25. Shapiro L.G., Stockman G.: *Computer Vision*. Prentice Hall 2001.
26. Sheppard A., Latham S., Middleton J., Kingston A., Myers G., Varslot T., Fogden A., Sawkins T., Cruikshank R., Saadatfar M., Francois N., Arns C., Senden T.: Techniques in helical scanning, dynamic imaging and image segmentation for improved quantitative analysis with X-ray micro-CT. *Nucl Instrum Meth B* 2014, 324, 49-56.
27. Smith S.M.: Fast robust automated brain extraction. *Hum Brain Mapp* 2002, 17(3), 143-155.
28. Soille P.: *Morphological Image Analysis: Principles and Applications*. Springer-Verlag 2004.
29. Tadeusiewicz R., Korohoda P.: *Komputerowa analiza i przetwarzanie obrazów*, Wydawnictwo Fundacji Postępu Telekomunikacji 1997.
30. Tickle A.J., Smith J.S., Wu Q.H.: Development of morphological operators for field programmable gate arrays. *J Phys: Conf Ser* 2007, 76(1), 12-28.
31. Wildenschild D., Sheppard A. P.: X-ray imaging and analysis techniques for quantifying pore-scale structure and processes in subsurface porous medium systems. *Adv Water Resour* 2013, 51, 217-246.
32. Wróbel Z., Koproński R.: *Praktyka przetwarzania obrazów w programie Matlab*. Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT 2004.
33. Wu Y.S., van Vliet L.J., Frijlink H.W., van der Voort Maarschalk K.: The determination of relative path length as a measure for tortuosity in compacts using image analysis. *Eur J Pharm Sci* 2006, 28(5), 433-440.
34. Zana F., Klein J. C.: Segmentation of vessel-like patterns using mathematical morphology and curvature evaluation. *IEEE Trans Image Processing*, 2001, 10(7), 1010-1019.



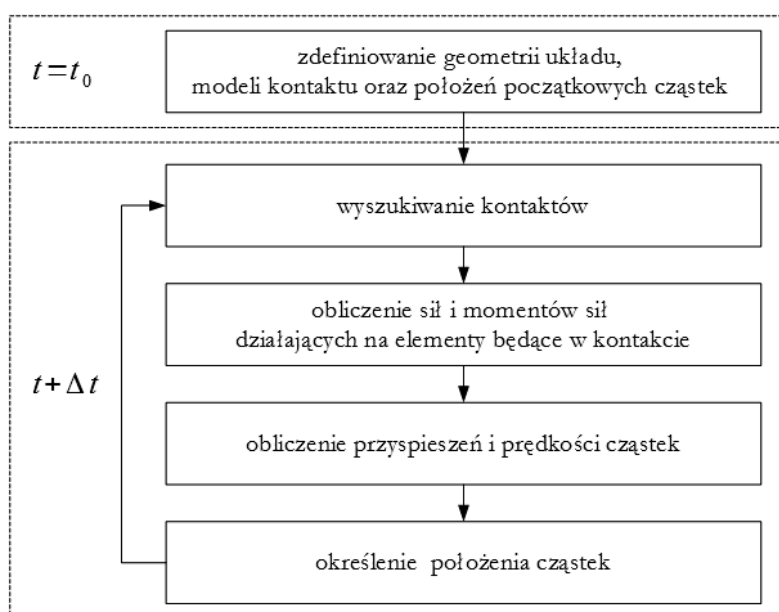
## 5. GENERACJA ZŁÓŻ WIRTUALNYCH METODĄ ELEMENTÓW DYSKRETYCH

### 5.1. Metoda Elementów Dyskretnych

Metoda Elementów Dyskretnych MED (ang. Discrete Element Method, DEM) jest metodą numeryczną umożliwiającą szczegółową analizę właściwości strukturalnych oraz mechanicznych materiałów rozdrobionych. W roku 1979 Cundall i Strack [5] zaproponowali tę technikę numeryczną do symulacji oddziaływań sztywnych bloków skalnych, a następnie do badania mechaniki gruntów dla obiektów o kształtach kolistych oraz sferycznych w układach dwu- i trójwymiarowych. Zapoczątkowała ona rozwój technik komputerowych o podejściu mikrostrukturalnym, stanowiących cenne narzędzie w badaniu właściwości materiałów sypkich. Podejście mikrostrukturalne wywodzi się z Dynamiki Molekularnej, powstałej w latach 50 XX wieku. Mikrostrukturalne podejście metody, uwzględniające budowę dyskretną materiałów oraz traktujące ośrodek jako nieciągły, losowy układ elementarnych ziaren pozwala na wyprowadzenie równań opisujących zachowanie układu na podstawie oddziaływań zachodzących pomiędzy pojedynczymi granulami. Metoda MED umożliwia spojrzenie w głąb materiału oraz zrozumienie fundamentalnych oddziaływań pomiędzy elementami ośrodka, determinujących zachowanie materiału w skali makro. Stanowi ona alternatywę dla metod opartych na koncepcji ciągłości ośrodka, znajdując zastosowanie w wielu dziedzinach badań oraz w analizie właściwości różnych materiałów [19,29,30,35].

#### 5.1.1. Cykl obliczeniowy Metody Elementów Dyskretnych

Modelowanie Metodą Elementów Dyskretnych złoża materiału porowatego wymaga realizacji szeregu działań, niezbędnych do opisu poszczególnych elementów ośrodka. Diagram ilustrujący wspomniane działania prezentuje Rysunek 5.1. Celem pierwszego etapu symulacji jest zdefiniowanie geometrii układu, modeli kontaktu oraz położenia początkowych cząstek. W drugim etapie następuje wyszukiwanie kontaktów pomiędzy cząsteczkami ośrodka oraz cząsteczkami i ścianami modelowej konstrukcji. Zastosowanie odpowiednich modeli kontaktu, określonych w pierwszym etapie symulacji oraz rozwiązanie równań konstytutywnych umożliwia obliczenie sił i momentów sił działających na cząstki oraz elementy konstrukcji w przedziale czasu ( $\Delta t$ ).



Rys. 5.1. Schemat cyklu obliczeniowego Metody Elementów Dyskretnych

Ich znajomość pozwala na wyprowadzenie różniczkowych równań ruchu, których całkowanie po czasie dostarcza informacji o przyspieszeniach i prędkościach cząstek. Całkowanie prędkości w kolejnym etapie symulacji umożliwia wyznaczenie nowych położeń cząstek, które stają się połoženiami początkowymi w kolejnym cyklu obliczeniowym.

### 5.1.2. Modele kontaktu

Wchodzące w skład ośrodka sypkiego cząstki mogą oddziaływać między sobą siłami różnego rodzaju. Na poziomie molekularnym, mogą to być siły jądrowe, van der Waalsa, siły oddziaływania elektrostatycznego lub magnetycznego. W skali mikroskopowej, zachowanie elementów złoža determinują głównie siły oddziaływania kontaktowego: siły tarcia oraz siły spójności (adhezji lub kohezji). Modelowanie rzeczywistych oddziaływań pomiędzy cząsteczkami ośrodka sypkiego staje się możliwe po zastosowaniu odpowiedniego modelu kontaktu oraz uwzględnieniu różnego rodzaju sił działających na cząstki.

W wielu procesach technologicznych, którym poddawane są materiały rozdrobnione, elementy ośrodka ulegają licznym zderzeniom. W zależności od względnej prędkości początkowej oraz właściwości materiałowych ciał pozostających w kontakcie w wyniku zderzenia, rozróżnia się cztery główne mechanizmy determinujące jego przebieg. Jeśli odkształcenie w punkcie kontaktu jest odwracalne i niezależne od prędkości przemieszczenia, zderzenie jest sprężyste. W przypadku gdy deformacja jest odwracalna, jednak odkształcenie wykazuje zależność od prędkości przemieszczenia, zderzenie jest lepko-sprężyste. Zderzenie, w konsekwencji którego pozostaje odkształcenie trwale, a deformacja ciała jest niezależna od prędkości zderzenia, nazywa się plastycznym. W zderzeniu lepko-plastycznym, deformacja jest nieodwracalna, jednak zależna od prędkości przemieszczenia. Jeśli w pierwszej fazie zderzenia ciało ulega odkształceniu sprężystemu, natomiast po przekroczeniu przez obciążenie granicy plastyczności materiału, odkształcenie staje się plastyczne, zderzenie jest sprężysto-plastyczne.

Charakter oddziaływań zachodzących pomiędzy cząsteczkami ośrodka sypkiego, zależny od ich właściwości materiałowych, determinuje wybór modelu kontaktu w symulacjach numerycznych procesów mechanicznych przebiegających z udziałem materiałów o naturze dyskretniej.

#### 5.1.2.1. Modele kontaktu w kierunku normalnym

Biorąc za kryterium podziału sposób podejścia do opisu kontaktu w kierunku normalnym zderzających się cząstek, metody numeryczne podzielić można na dwie grupy. Metody należące do pierwszej grupy korzystają z podejścia sztywnego kontaktu (ang. hard contact approach) [27], zakładającego brak odkształcenia zderzających się ciał w punkcie ich kontaktu oraz nie dostarczającego informacji na temat siły kontaktu. W związku z tym, iż w metodzie przyjmuje się czas zderzenia równy zeru, podejście twardego kontaktu znajduje zastosowanie w modelowaniu procesów, w których czas zderzenia jest bardzo krótki. Stosowanie metod numerycznych opartych na podejściu kontaktu twardego jest uzasadnione w przypadku małej liczby zderzeń. W przypadku układów bardziej złożonych, charakteryzujących się dużą liczbą zderzeń tworzących je cząstek, ograniczenia metody znacząco podnoszą nakład obliczeń. W podejściu kontaktu miękkiego (ang. soft contact approach), wykorzystywanym przez metody numeryczne należące do drugiej grupy, lokalna deformacja w punkcie kontaktu zderzających się ciał przedstawiana jest poprzez przenikanie się powierzchni kontaktowych. Wielkość odkształcenia ( $\delta_n$ ) determinowana jest sztywnością materiału w kierunku normalnym do powierzchni kontaktu ciał, charakteryzowaną przez współczynnik sprężystości ( $k_n$ ). Podejście kontaktu miękkiego umożliwia obliczenie siły działającej w punkcie kontaktu cząstek podczas zderzenia, zakładając, że jego czas jest różny od zera. Większa efektywność metod opartych na drugim podejściu, dająca możliwość wykonywania symulacji dla dużej liczby zderzających się cząstek sprawia, że podejście kontaktu miękkiego znajduje szerokie zastosowanie w metodach numerycznych opartych na Metodzie Elementów Dyskretnych.

Obserwowany od kilku dekad, intensywny rozwój metod numerycznych wykorzystywanych do modelowania zjawisk oraz procesów zachodzących w ośrodkach porowatych w wielu skalach, zaowocował wieloma modelami kontaktu, umożliwiającymi opis matematyczny oddziaływania cząstek w punkcie kontaktu [14,30,36]. Niniejsze opracowanie prezentuje najbardziej popularne modele kontaktu, wykorzystywane w symulacjach opartych na Metodzie Elementów Dyskretnych.

#### 5.1.2.1.1. Model sprężysty

Model sprężysty kontaktu opisuje kontakt ciał charakteryzujących się tym, że po ustaniu obciążenia materiał wraca do swojej pierwotnej postaci. Biorąc za kryterium podziału dostępnych modeli w kierunku normalnym charakter zależności siły sprężystości w obszarze kontaktu  $F_{sij}^n$  od odkształcenia w punkcie kontaktu  $\delta_n$ , wyróżnia się dwa rodzaje modeli: liniowe oraz nieliniowe. Ogólną postać zależności siły sprężystości od odkształcenia w kierunku normalnym wyrazić można następująco:

$$F_{sij}^n = k_n \delta_n^\eta, \quad (5.1)$$

gdzie  $\eta = 1$  w modelu liniowym oraz  $\eta \neq 1$  w modelu nieliniowym. W powyższym równaniu, stała materiałowa  $k_n$  jest współczynnikiem sprężystości w kierunku normalnym.

W modelu liniowym wartość siły kontaktu w kierunku normalnym jest wprost proporcjonalna do wielkości odkształcenia cząstki. Dzięki uproszczeniu procedury obliczeniowej, sprężysty model liniowy znalazł szerokie zastosowanie w badaniu kinetyki wypływu materiałów sypkich [9,10], jednak badania doświadczalne wykazały bardziej skomplikowaną zależność sił kontaktu w kierunku normalnym od odkształcenia i prędkości cząstki. Intensywny rozwój mechaniki kontaktu zaowocował wieloma modelami kontaktu w kierunku normalnym, opisującymi nieliniową zależność siły działającej na cząstkę w obszarze kontaktu od jej odkształcenia. Najbardziej popularnym nieliniowym modelem kontaktu dwóch sferycznych granул jest, zaproponowany przez Hertza [11], model sprężysty, oparty na prawie kontaktu Hertza [9]. W modelu tym, siłę kontaktu w kierunku normalnym wyraża równanie:

$$F_{sij}^n = k_n \delta_n^{\frac{3}{2}}, \quad (5.2)$$

gdzie współczynnik sprężystości w kierunku normalnym:

$$k_n = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R^*}. \quad (5.3)$$

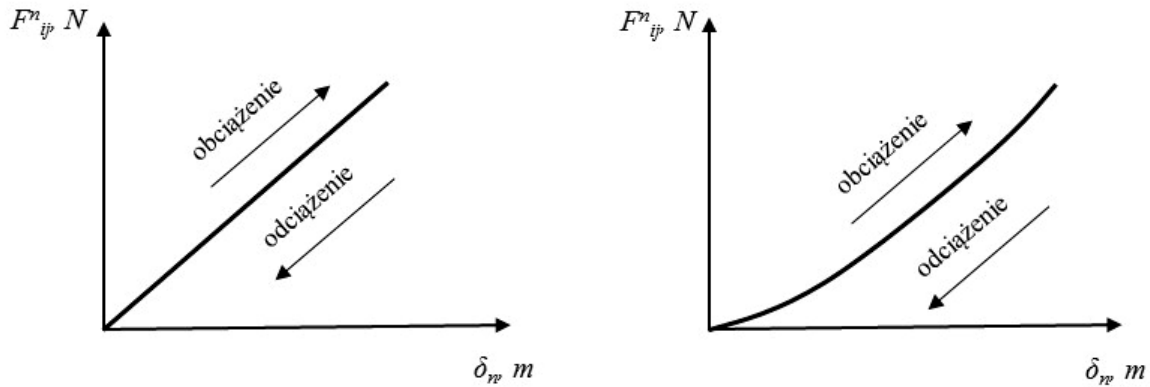
W równaniu (5.3),  $E^*$  jest efektywnym modulem Younga materiału, związanym z liczbą Poissona ( $\nu$ ) wyrażeniem:

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu_i^2}{E_i} + \frac{1-\nu_j^2}{E_j}, \quad (5.4)$$

zaś  $R^*$  jest promieniem zredukowanym cząstek będących w kontakcie:

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j}. \quad (5.5)$$

Rysunek 5.2 przedstawia zależność siły w obszarze kontaktu od odkształcenia dla liniowego oraz nieliniowego sprężystego modelu kontaktu podczas cyklu obciążanie-odciążanie.



Rys. 5.2. Zależność siły w obszarze kontaktu od odkształcenia dla: liniowego (z lewej) oraz nieliniowego sprężystego (z prawej) modelu kontaktu podczas cyklu obciążanie-odciążanie

#### 5.1.2.1.2. Model lepko-sprężysty

W rzeczywistości, odkształcenie ciał jest procesem częściowo nieodwracalnym, w którym część energii ulega rozproszeniu na skutek tłumienia wewnętrznego. Materiały, których odkształcenie zależy od siły działającej w punkcie kontaktu oraz od prędkości zderzenia ciał, nazywa się lepko-sprężystymi. W zależności od charakteru tej zależności, wyróżnia się modele lepko-sprężyste liniowe oraz nieliniowe.

W pierwszym przypadku, liniową zależność siły kontaktu w kierunku normalnym od odkształcenia wyraża równanie:

$$F_{ij}^n = F_{sij}^n + F_{ij}^n = k_n \delta_n + \gamma^n \delta_n. \quad (5.6)$$

W powyższym równaniu,  $\gamma^n$  jest współczynnikiem tłumienia, definiowanym następująco:

$$\gamma^n = \beta \sqrt{m^* k_n}, \quad (5.7)$$

gdzie masa zredukowana  $m^* = m_i m_j / (m_i + m_j)$ , zaś, będący funkcją współczynnika restytucji materiału  $e^n$ , parametr  $\beta$ :

$$\beta = -\ln(e^n) \sqrt{\frac{5}{(\ln e^n)^2 + \pi^2}}. \quad (5.8)$$

Modelowanie kontaktu pomiędzy dwoma ciałami przy pomocy liniowego modelu wymaga wprowadzenia niezależnego od prędkości zderzenia współczynnika restytucji  $e^n$  oraz czasu kontaktu ciał podczas zderzenia ( $t^n$ ):

$$e^n = \exp\left(-\frac{\gamma^n}{2m^*} t^n\right), \quad (5.9)$$

$$t^n = \pi \left( \frac{k_n}{m^*} - \left( \frac{\gamma^n}{2m^*} \right)^2 \right)^{-1/2}. \quad (5.10)$$

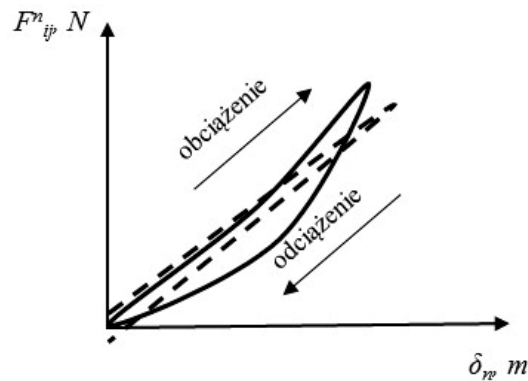
Ponieważ badania eksperymentalne wykazały zależność współczynnika restytucji od prędkości zderzenia ciał [23] oraz nieliniową zależność siły w obszarze kontaktu ciał od ich odkształcenia, bardziej odpowiednie do obliczenia siły działającej w kierunku normalnym w punkcie kontaktu dwóch ciał lepko-sprężystych jest następujące równanie:

$$F_{ij}^n = F_{sij}^n + F_{ij}^n = k_n \delta_n^{3/2} + \gamma^n \delta_n^\varepsilon \delta_n. \quad (5.11)$$

Parametr  $\varepsilon$  w powyższym równaniu przyjmuje odmienne wartości. W oparciu o dane eksperymentalne i numeryczne wartość parametru dla różnych materiałów wynosi 1/2 [16], 1/4 Falcon, Tsuji [8], 4/5 oraz 8/5 [21].

Rysunek 5.3 przedstawia zależność siły normalnej w obszarze kontaktu od odkształcenia dla liniowego oraz nieliniowego lepko-sprężystego modelu kontaktu podczas cyklu obciążenie-odciążenie

Uwzględnienie zjawiska tłumienia w obszarze kontaktu cząstek poprzez wprowadzenie odpowiedniego członu do równań 5.6 lub 5.11 stanowi powszechnie stosowaną metodę w symulacjach MED. Inną metodą pozwalającą na wprowadzenie tłumienia w ośrodku rozdrobnionym jest tłumienie globalne, przypisane całkowitej prędkości każdej z cząstek złoża. Współczynniki tłumienia globalnego są proporcjonalne do całkowitej prędkości granул, zarówno w ich ruchu translacyjnym, jak i rotacyjnym.



Rys. 5.3. Zależność siły normalnej w punkcie kontaktu od odkształcenia dla liniowego (---) i nieliniowego (—) lepko-sprężystego modelu kontaktu podczas cyklu obciążenie-odciążenie

### 5.1.2.1.3. Model sprężysto-plastyczny

Model sprężysto-plastyczny materiału daje możliwość matematycznego opisu zachowania ciał, które w pierwszej fazie obciążania zachowują się jak materiał sprężysty, zaś gdy obciążenie przekroczy tzw. granicę plastyczności, zachowanie ich staje się typowe dla materiału plastycznego. Po przekroczeniu wartości granicznej odkształcenia materiał płynie, a odkształcenie staje się nieodwracalne. Charakterystykę materiału sprężysto-plastycznego przedstawia Rysunek 5.4.

Na cykl obciążenie-odciążenie dla sprężysto-plastycznych ciał  $i$  i  $j$  pozostających w kontakcie, składają się następujące fazy:

- obciążenie sprężyste

$$F_{ij}^n = k_n \delta_n^{3/2} \quad \delta_n < \delta_{ny}, \quad (5.12)$$

- obciążenie plastyczne

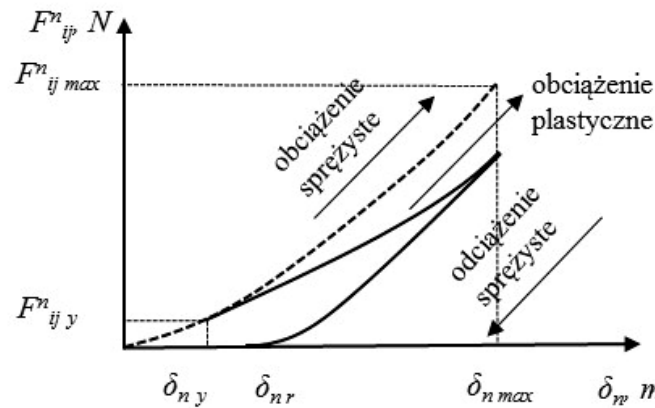
$$F_{ij}^n = k_n \delta_n^{3/2} + \pi p_y R^* (\delta_n - \delta_{ny}) \quad \delta_n \geq \delta_{ny}, \quad (5.13)$$

- odciążenie sprężyste

$$F_{ij}^n = k_n (\delta_n - \delta_{nr})^{3/2} \quad \delta_n \geq \delta_{nr}, \quad (5.14)$$

- deformacja trwała

$$F_{ij}^n = 0 \quad \delta_n < \delta_{nr}. \quad (5.15)$$



Rys. 5.4. Zależność siły normalnej w punkcie kontaktu od odkształcenia dla sprężysto-plastycznego modelu kontaktu podczas cyklu obciążanie-odciążanie

W pierwszej fazie obciążenia, gdy ciśnienie w obszarze kontaktu jest mniejsze od granicy plastyczności materiału  $p_y$ , kontakt jest sprężysty, a siłę normalną w punkcie kontaktu wyraża wzór (5.12). Po przekroczeniu granicy plastyczności, przy odkształceniu większym od  $\delta_{ny} = \left( \frac{\pi p_y}{2E^*} \right)^2 R^*$ , siła w punkcie kontaktu jest sumą siły sprężystości działającej na część obszaru kontaktu, dla której ciśnienie kontaktowe  $p_y$  nie przekracza granicy plastyczności oraz siły związanej z odkształceniem plastycznym w obszarze kontaktu objętym tym rodzajem odkształcenia. Przyjmuje się, że odciążenie materiału podczas trzeciego etapu cyklu, jest sprężyste, a zależność siły w obszarze kontaktu od odkształcenia ciała jest nieliniowe i opisane przez teorię Hertza [11]. W czwartym etapie cyklu, po ustaniu siły działającej w kontakcie ( $F_{ij}^n = 0$ ), powstaje odkształcenie trwałe  $\delta_{nr}$ . Powstające w wyniku deformacji plastycznej, odkształcenie resztkowe, związane jest z maksymalną siłą działającą w kontakcie ( $F_{ij}^n$ ) oraz z maksymalnym odkształceniem  $\delta_{nmax}^n$ , następującym równaniem:

$$\delta_{nr} = \delta_{n\max} - \left( \frac{3F_{ij\max}^n}{4E^{*1/2}} \right). \quad (5.16)$$

Współczynnik  $k_n' = \frac{4}{3}E^*\sqrt{R_{od}^*}$  w równaniu (5.14) jest współczynnikiem sprężystości dla etapu odciążenia. Zawarty w równaniu (5.13) promień równoważny zastąpiono promieniem równoważnym w etapie odciążenia, celem uwzględnienia spłaszczenia w obszarze kontaktu spowodowanego trwałą deformacją plastyczną. Zakłada się, że stosunek promieni równoważnych w etapie odciążenia oraz obciążenia różny jest stosunkowi maksymalnej siły sprężystości oraz aktualnej siły maksymalnej [26]:

$$R_{od}^* = R^* \frac{k_n \delta_{n\max}^{3/2}}{F_{ij\max}^n}. \quad (5.17)$$

### 5.1.2.2. Modele kontaktu w kierunku stycznym

Gdy dwie stykające się powierzchnie poruszają się względem siebie, następuje zjawisko poślizgu. Przy założeniu kontaktu bez tarcia powierzchniowego, do obliczenia obszaru kontaktu oraz ciśnienia w kontakcie zastosować można teorię Hertza [11], gdyż poślizg nie ma wpływu na ciśnienie w kontakcie.

Założenie braku tarcia w kontakcie stykających się ciał idealizuje rzeczywistość i jest nierealistyczne. W rzeczywistości, wzdłuż powierzchni styku ciał pozostających w kontakcie następuje poślizg, prowadzący do powstania siły stycznej skierowanej przeciwnie do kierunku ruchu. Zależność pomiędzy siłą styczną i normalną, działającymi w punkcie kontaktu, określa, sformułowane przez Coulomba, prawo tarcia suchego:

$$F_{ij}^t < \mu_s F_{ij}^n \quad \text{kontakt bez poślizgu,} \quad (5.18)$$

$$F_{ij}^t \geq \mu_s F_{ij}^n \quad \text{kontakt z poślizgiem,}$$

gdzie  $\mu_s$  jest współczynnikiem tarcia statycznego.

Zgodnie z nim, poślizg następuje w przypadku pojawienia się w punkcie kontaktu zderzających się sprężyste ciał, siły stycznej przewyższającej wartością siłę tarcia. W przeciwnym razie, gdy wartość graniczna siły stycznej nie jest osiągnięta, ciała nie poruszają się względem siebie w obszarze kontaktu. W tym przypadku, deformacja sprężysta ciał prowadzi do przemieszczenia się względem siebie punktów ciał nie leżących w obszarze ich kontaktu. Całkowite przemieszczenie w punkcie kontaktu w kierunku stycznym, można zatem przedstawić jako sumę przemieszczenia wynikającego z odkształcenia sprężystego  $\delta_{tel}$  oraz związanego z poślizgiem  $\delta_{tsl}$ :

$$s(t) = \delta_{tel}(t) + \delta_{tsl}(t). \quad (5.19)$$

Istnieją dwie metody obliczania siły stycznej w kontakcie. W pierwszej siłę styczną, będącą liniową funkcją odkształcenia, przedstawia wyrażenie:

$$F_{ij}^t = -k_t \delta_{tel}, \quad (5.20)$$

w którym współczynnik sprężystości w kierunku stycznym:

$$k_t = 8G^* \sqrt{R^* \delta_n}. \quad (5.21)$$

W równaniu (5.21),  $G^*$  jest efektywnym modułem ścinania materiału, związanym ze stałą Poissona  $\nu$ , następującą zależnością:

$$\frac{1}{G^*} = \frac{2-\nu_i}{G_i} + \frac{2-\nu_j}{G_j}. \quad (5.22)$$

Całkowanie po czasie względnej prędkości translacyjnej punktu kontaktu C ( $v_{C,t}$ ) od początku kontaktu ( $t_{C,0}$ ) daje możliwość obliczenia całkowitego przemieszczenia w kierunku stycznym:

$$s(t) = \int_{t_{C,0}}^t v_{C,t}(\tau) d\tau. \quad (5.23)$$

Jego znajomość pozwala na obliczenie z wyrażenia (5.19) przemieszczenia wynikającego z poślizgu:

$$\delta_{t,sl}(t) = s(t) - \delta_{t,el}(t). \quad (5.24)$$

Zastosowanie powyższego wyrażenia do obliczenia siły stycznej w punkcie kontaktu jest poprawne przy założeniu stałości współczynnika sprężystości w kierunku stycznym. W przypadku zmiennego współczynnika sprężystości, bardziej odpowiednim sposobem obliczenia siły stycznej w kontakcie dwóch ciał jest metoda nieinkrementalna [37]. Siłę w kontakcie, działającą w kierunku stycznym, wyraża wówczas wzór:

$$F_{ij}^t(t) = - \int_{t_{C,0}}^t k_t(\tau) \frac{d\delta_{t,el}(\tau)}{d\tau} d\tau. \quad (5.25)$$

Jeśli współczynnik sprężystości w kierunku stycznym jest stały podczas kontaktu, rozwiązaniem równania (5.25) jest wyrażenie (5.20).

Dla przyrostu czasu  $\Delta t$ , będącego przedziałem czasu między  $t_{m-1}$  i  $t_m$ , równanie (5.25) można wyrazić w formie inkrementalnej następująco:

$$F_{ij}^t(t_m) = F_{ij}^t(t_{m-1}) + \Delta F_{ij}^t(t_m), \quad (5.26)$$

gdzie

$$\Delta F_{ij}^t(t) = - \int_{t_{m-1}}^{t_m} k_t(\tau) \frac{d\delta_{t,el}(\tau)}{d\tau} d\tau \quad (5.27)$$

jest przyrostem siły stycznej w przedziale czasu  $\Delta t$ .

Znając wartość siły stycznej  $F_{ij}^t$  działającej w kontakcie w czasie  $t_m$ , odkształcenie sprężyste w punkcie kontaktu  $\delta_{t,el}$  wyrazić można następującym równaniem:



$$\delta_{t\,el}(t_m) = - \int_{t_{c,0}}^{t_m} \frac{1}{k_t(\tau)} \frac{dF_{ij}^t(\tau)}{d\tau} d\tau. \quad (5.28)$$

Zastosowanie względem równania (5.28) podejścia inkrementalnego daje możliwość wyrażenia odkształcenia sprężystego następująco:

$$\delta_{t\,el}(t_m) = \delta_{t\,el}(t_{m-1}) - \int_{t_{m-1}}^{t_m} \frac{1}{k_t(\tau)} \frac{dF_{ij}^t(\tau)}{d\tau} d\tau. \quad (5.29)$$

W Metodzie Elementów Dyskretnych, całkowite przemieszczenie w kierunku stycznym, przedstawione równaniem (5.23), oblicza się na ogół korzystając także z podejścia inkrementalnego:

$$s(t_m) = s(t_{m-1}) + \Delta s(t_m), \quad (5.30)$$

gdzie

$$\Delta s(t_m) = \int_{t_{m-1}}^{t_m} v_{c,t}(\tau) d\tau \approx v_{c,t}(t_m) \Delta t. \quad (5.31)$$

Jeśli w czasie  $t_m$  wartość siły stycznej działającej w kontakcie jest mniejsza od wartości siły tarcia i kontakt jest bez poślizgu, na podstawie równania (5.30), przemieszczenie w punkcie kontaktu w kierunku stycznym wynikające z odkształcenia sprężystego  $\delta_{t\,el}$  wyrazić można następująco:

$$\delta_{t\,el}(t_m) = \delta_{t\,el}(t_{m-1}) + \Delta \delta_{t\,el}(t_m). \quad (5.32)$$

W równaniu (5.32),  $\Delta \delta_{t\,el}(t_m) = \Delta s(t_m)$ .

### 5.1.3. Detekcja kontaktu

Na skutek przemieszczeń cząsteczek tworzących modelowe złoże, następuje zanik lub powstanie kontaktów między elementami układu. Wraz z postępowaniem symulacji, MED musi dokładnie sprawdzać i zliczać kontakty w kolejnych krokach czasowych. Dodatkowo musi klasyfikować zachodzące między sąsiadującymi granulami oddziaływania, w celu zastosowania odpowiedniego modelu kontaktu.

Istnieje wiele metod detekcji kontaktu cząstek, wykorzystywanych w metodach numerycznych [30]. W najprostszy sposób, identyfikację kontaktu umożliwia obliczenie odległości pomiędzy środkami cząstek tworzących ośrodki. Jeśli odległość ta jest mniejsza od sumy promieni cząstek, wówczas pozostają one w kontakcie. Przeprowadzenie analizy dla każdej pary cząstek wymaga powtórzenia działania  $N^2(N-1)$  razy, gdzie  $N$  jest liczbą cząstek w złożu. Stosowanie opisanego algorytmu ma sens przy walidacji nowych metod detekcji kontaktów lub dla układów złożonych z małej liczby elementów. Dla bardziej złożonych ośrodków, jego zastosowanie jest uzasadnione w przypadkach, w których czas symulacji oraz wymagana moc obliczeniowa nie są determinowane przez detekcję kontaktu.

Złożoność oraz liczebność rzeczywistych materiałów rozdrobionych niesie potrzebę poszukiwania alternatywnych i bardziej efektywnych metod identyfikacji kontaktu pomiędzy cząsteczkami ośrodka.

Jedną z nich jest technika rozkładu przestrzennego (ang. spatial decomposition) [30], w której obszar zajmowany przez cząsteczki podzielony jest na mniejsze kwadratowe lub sześciennie komórki, a kontakty sprawdzane są tylko dla par cząstek leżących w tej samej komórce lub w komórkach leżących w najbliższym sąsiedztwie cząstki odniesienia. Inną metodą jest algorytm wyszukiwania w siatce (ang. grid search algorithm) [30], ograniczający liczbę elementów w komórce do jednej. Identyfikacja kontaktu obejmuje wówczas pary cząstek znajdujących się w komórkach odległych od siebie nie więcej niż o jedną średnicę największej granuli w złożu. Zastosowanie tej metody detekcji kontaktu obniża złożoność obliczeniową algorytmu do rzędu  $O(NR_{\max}^d / R_{\min}^d)$ , gdzie  $R_{\min}$  i  $R_{\max}$  są promieniami najmniejszej i największej cząstki w ośrodku, zaś  $d$  jest liczbą wymiarów przestrzennych. Podzielenie przestrzeni na komórki o wymiarach równych średnicy największej cząstki, ograniczające obszar poszukiwania kontaktów do komórki zawierającej cząstkę odniesienia lub komórki bezpośrednio z nią sąsiadujące, zmniejsza złożoność obliczeniową algorytmu do rzędu  $O(N[(2R_{\max})^2 \rho]^2)$ , gdzie  $\rho$  jest gęstością cząstki.

Opisane powyżej techniki detekcji kontaktów znajdują swoje zastosowanie w ograniczonej liczbie przypadków. Główną wadą algorytmów jest możliwość ich stosowania dla ośrodków jednorodnych pod względem wielkości cząstek. Obecność elementów o różnych wymiarach znacząco obniża efektywność metod.

Różnorodność kształtów i wielkości cząstek tworzących ośrodki rozdrobnione oraz konieczność modelowania procesów i zjawisk zachodzących w układach rzeczywistych stały się przyczynkiem do opracowania algorytmów umożliwiających detekcję kontaktu również w ośrodkach niejednorodnych. Dostępne dziś metody wyszukiwania kontaktów uwzględniają różne wielkości oraz kształty cząstek: sferyczne, wieloboczne, elipsoidalne i nieregularne.

#### 5.1.4. Równania różniczkowe ruchu

Metoda Elementów Dyskretnych umożliwia określenie położenia i prędkości poszczególnych elementów układu podczas symulacji poprzez rozwiązanie różniczkowych równań ruchu dla każdej cząstki ośrodka. Różniczkowe równania ruchu sferycznych cząstek, wyprowadzone w oparciu o II zasadę dynamiki Newtona dla ruchu postępowego i obrotowego, przyjmują następującą postać:

$$m_i \frac{dV_i}{dt} = \sum_j (F_{ij}^n + F_{ij}^t) + m_i g, \quad (5.33)$$

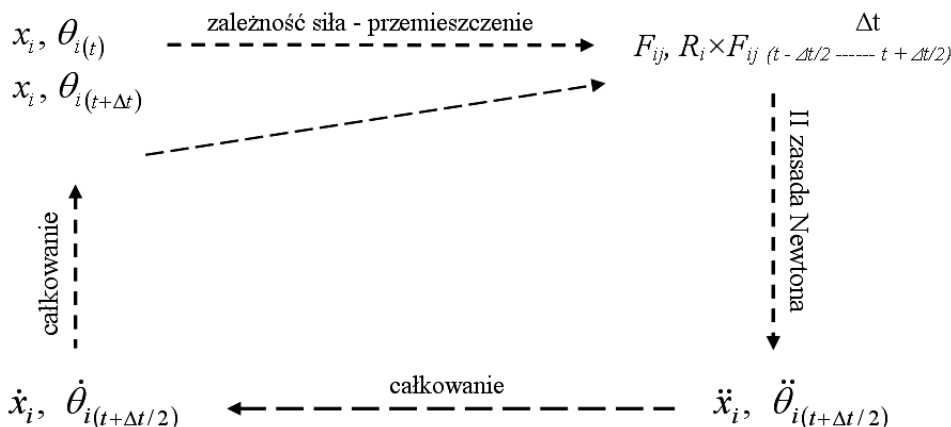
$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j (R_i \times F_{ij}^t) + \tau_{rij}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (5.34)$$

gdzie  $m_i$ ,  $R_i$ ,  $I_i$ ,  $V_i$  oraz  $\omega_i$  są odpowiednio masą, promieniem, momentem bezwładności, prędkością liniową oraz prędkością kątową cząstki  $i$ . Symbol  $g$  w równaniu (5.33) oznacza przyspieszenie grawitacyjne. Wartości sił działających w obszarze kontaktu cząstek  $i$  i  $j$  w kierunku normalnym i stycznym ( $F_{ij}^n$ ,  $F_{ij}^t$ ), determinuje wybór modelu matematycznego opisującego charakterystykę kontaktu. Symbol  $\tau_{rij}$  w równaniu (5.34) oznacza moment obrotowy cząstki, związany ze współczynnikiem tarcia tocznego  $\mu_r$  następującym równaniem:

$$\tau_{rij} = -\mu_r F_{ij}^n l_i \omega_i, \quad (5.35)$$

gdzie  $l_i$  jest odległością punktu kontaktu cząstek  $i$  oraz  $j$  od środka masy cząstki  $i$ .

Zastosowanie odpowiedniego schematu całkowania względem czasu umożliwia rozwiązanie powyższych różniczkowych równań ruchu oraz wyznaczenie położeń i prędkości cząstek w dowolnym momencie symulacji. W trakcie rozwiązywania równań konstytutywnych oraz równań ruchu przyjmuje się, iż dane uzyskane na podstawie wcześniejszych obliczeń są znane, a ich wartość pozostaje stała w przedziale czasu  $\Delta t$ . Wielokrotne powtórzenie cyklu obliczeniowego, przedstawionego na Rysunku 5.5, umożliwia opis ruchu elementów układu podczas całej symulacji.



Rys. 5.5. Schemat sposobu określenia położenia cząstki poddanej działaniu sił i momentów sił w przedziale czasu  $\Delta t$  (gdzie  $x_i$  i  $\theta_i$  są przemieszczeniami odpowiednio liniowymi i kątowymi)

Istnieje wiele schematów całkowania względem czasu (metoda Eulera, metoda Verleta, metoda skokowa i in.) [14,30], stosowanych w symulacjach MED, z których część została zapożyczona od dynamiki molekularnej. Jednak zastosowanie schematów całkowania nakłada na metodę MED pewne ograniczenia, związane z bardzo małym elementarnym krokiem czasowym ( $\Delta t$ ), koniecznym do zapewnienia stabilności symulacji. Elementarny krok czasowy stanowi jeden z najważniejszych parametrów symulacji a jego wybór stanowi kluczowe zagadnienie w modelowaniu Metodą Elementów Dyskretnych.

### 5.1.5. Elementarny krok czasowy

Wybór elementarnego kroku czasowego ( $\Delta t$ ) w symulacjach numerycznych jest niezwykle istotnym zadaniem wpływającym na poprawność wyników testu oraz prawidłowość przebiegu modelowania. Wartość elementarnego kroku czasowego powinna być na tyle mała, aby przemieszczenie cząsteczki następujące w czasie  $\Delta t$  miało wpływ jedynie na cząsteczki bezpośrednio z nią sąsiadujące. Elementarny krok czasowy stanowi część krytycznego kroku czasowego ( $\Delta t_c$ ), będącego czasem transmisji siły działającej na wybrany element układu do obiektów znajdujących się w jego najbliższym sąsiedztwie.

Wartość krytycznego kroku czasowego w symulacjach MED zależy od częstości drgań własnych układu ( $\omega_0$ ). Jako że częstość drgań własnych układu o jednym stopniu swobody związana jest ze współczynnikiem sprężystości ( $k$ ) oraz minimalną masą cząstki ( $m_{\min}$ ), wartość  $\Delta t_c$  obliczyć można z następującego wzoru [22]:

$$\Delta t_c = \frac{2}{\omega_0} = 2\sqrt{\frac{m}{k}}. \quad (5.36)$$

Wykonując serię symulacji dla ośrodków dwu- i trójwymiarowych o strukturach regularnych, O'Sullivan i Bray [31, 32] wykazali zależność  $\Delta t_c$  od struktury złoża oraz liczby koordynacyjnej. Według autorów, stabilność ośrodków dwuwymiarowych zapewnia  $\Delta t_c \leq 0.3 \sqrt{\frac{m}{k}}$ , natomiast dla układów trójwymiarowych  $\Delta t_c \leq 0.17 \sqrt{\frac{m}{k}}$ .

Siły działające pomiędzy granulami przenoszone są w ośrodku rozdrobionym poprzez falę Rayleigha, propagującą po powierzchni cząstek [31,32]. Czas propagacji fali od najmniejszego elementu ośrodka do obiektów znajdujących się w jego sąsiedztwie, wyrażony następującym równaniem [6]:

$$\Delta t_R = \frac{\pi R_{\min}}{\xi} \sqrt{\frac{\rho}{E}}, \quad (5.37)$$

nazywany jest krokiem czasowym Rayleigha i stanowi alternatywę dla krytycznego kroku czasowego.  $R_{\min}$  w powyższym wyrażeniu jest promieniem najmniejszej cząstki w układzie,  $\rho$  i  $E$  gęstością oraz modulem sprężystości cząstki, zaś  $\xi$  zależnym od stałej Poissona parametrem:  $\xi = 0.1631\nu + 0.8766$ .

Wybór wartości elementarnego kroku czasowego zależy od warunków testu numerycznego. Celem zapewnienia stabilności symulacjom MED, modelowanie procesów dynamicznych dla układów charakteryzujących się wysoką liczbą kontaktów, dla których średnia liczba koordynacyjna jest nie mniejsza niż 4, powinno być realizowane dla  $\Delta t = 0.2\Delta t_R$ . W przypadku ośrodków zawierających cząstki o mniejszej liczbie kontaktów, za odpowiedni elementarny krok czasowy uznano  $\Delta t = 0.4\Delta t_R$  [7].

### 5.1.6. Ograniczenia MED

Podejście mikrostrukturalne Metody Elementów Dyskretnych, czyniące metodę niezastąpionym narzędziem badań ośrodków sypkich, stanowi zarazem źródło jej ograniczeń i wad. Traktując złożę jako układ pojedynczych obiektów o charakterystycznych cechach geometrycznych i fizycznych oraz pozwalając na szczegółową obserwację poszczególnych elementów układu, metody dyskretne uniemożliwiają modelowanie procesów w ośrodkach o dowolnych rozmiarach. Wymagająca procesorów o dużej mocy obliczeniowej technika numeryczna może być wykorzystywana do modelowania złóż o ograniczonej liczebności.

Zniesienie wspomnianego powyżej ograniczenia umożliwia, w pewnych przypadkach, tworzenie ścian periodycznych [10,17]. Będąca w sąsiedztwie ściany cząstka przenika przez nią do momentu, w którym jej środek ciężkości znajdzie się poza wydzielonym przez modelowaną konstrukcją obszarem. Przekroczeniu granicy towarzyszy przeniesienie obiektu w sąsiedztwo naprzeciwległej ściany. Generowanie ścian periodycznych umożliwia modelowanie procesów w objętości reprezentatywnej, będącej częścią złożonego ośrodka.

Porównanie wyników modelowania tego samego procesu przy identycznych warunkach eksperymentu wykazało znaczne różnice wartości otrzymanych w kilku niezależnych ośrodkach badawczych [20]. Przyczyną rozbieżności wyników jest różnorodność modeli kontaktów, algorytmów detekcji sąsiadów oraz kodów MED. Wśród dostępnych obecnie programów opartych na metodzie MED rozróżnić należy dwie grupy. Do pierwszej należą programy komercyjne (np. EDEM firmy DEM Solutions, czy PFC3D firmy Itasca, Inc.), zaś drugą tworzą programy otwarte (YADE, ESyS, LAMMPS, OVAL, LIGGGHTS i in.).

W badaniach ośrodków sypkich, wykorzystujących techniki numeryczne, niezbędna jest doświadczalna weryfikacja metod. Porównywanie wyników eksperymentalnych z numerycznymi stanowi jeden ze sposobów doskonalenia MED, jednak ilość badań o tym charakterze jest wciąż niewystarczająca.

Zaproponowaną przez Cundalla i Stracka technikę numeryczną stosowano do modelowania obiektów kolistych w układach dwuwymiarowych. Konsekwencją trwającego rozwoju metody jest możliwość generowania granul o różnych kształtach także w przestrzeni trójwymiarowej. Niesferyczne kształty ziaren oraz dodatkowy ich wymiar nakładają na metodę nowe ograniczenia wydłużając czas symulacji. Znaczne ograniczenie czasu symulacji umożliwiają różne techniki, prezentowane w licznych publikacjach [15]. Znajdują się wśród nich technika zrównoleglenia obliczeń [4,9,18], wybór odpowiedniego schematu całkowania [14,30] oraz skalowanie gęstościowe [2,3,33,34]. Chung [3] wykazał, że kilkukrotne zwiększenie wartości gęstości materiału nie wpływa na rozkład naprężeń w złożu przyspieszając znacznie czas realizacji testu numerycznego. Modelując proces jednoosiowego ściskania złoża dla różnych modułów sprężystości materiału, Chung i Ooi [2] wykazali brak wpływu wzrostu wartości parametru na rozkład sił działających na konstrukcję przy jednoczesnym kilkukrotnym zmniejszeniu czasu symulacji.

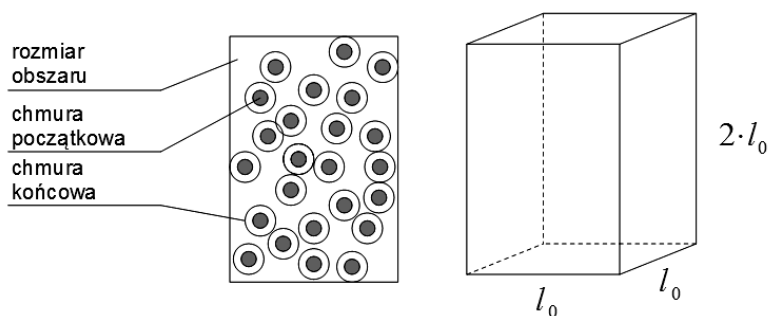
Stanowiąc doskonałe narzędzie badań materiałów sypkich pochodzenia mineralnego, Metoda Elementów Dyskretnych uniemożliwia modelowanie pewnych procesów mechanicznych w złożu materiałów rozdrobnionych pochodzenia biologicznego [2,5,35,36]. Z uwagi na ich specyficzne cechy, niezbędne staje się tworzenie modeli kontaktu uwzględniających charakterystyczne właściwości materiałów roślinnych.

Przedstawione w niniejszym podrozdziale ograniczenia i cechy MED świadczą o potrzebie dalszych prac umożliwiających jej doskonalenie oraz eliminowanie rozbieżności występujących w procesach rzeczywistych i modelowanych.

## 5.2. Kod YADE

### 5.2.1. Metody tworzenia chmur

W pakiecie YADE [38] istnieją dwie metody pozwalające na uzyskanie chmury cząstek o zadanym rozkładzie oraz konkretnej porowatości: Metoda Rosnących Cząstek oraz Metoda Ściskania.



Rys. 5.6. Idea działania Metody Rosnących Cząstek

W Metodzie Rosnących Cząstek (Rys 5.6) najpierw tworzona jest chmura niestykających się cząstek – o bardzo małych średnicach, ale o rozkładzie odpowiadającym dyskretnej krzywej skumulowanej – a następnie przeprowadzana jest symulacja Metodą Elementów Dyskretnych, podczas której cząstki zwiększają swoje rozmiary aż do uzyskania zadanej porowatości. Liczba kontaktów między cząstkami rośnie i po pewnym czasie ustala się na stałym (w przybliżeniu) poziomie. W trakcie symulacji uwzględniane są wszelkie siły wynikające z oddziaływania między cząstkami, w tym siły związane z tarcie. Przyspieszenie grawitacyjne nie jest uwzględniane, gdyż inaczej złoż nie byłoby homogeniczne. Istotne jest, że podczas symulacji zmniejszany jest stopniowo współczynnik tarcia, co pozwala na uzyskiwanie coraz mniejszych porowatości. Symulacja kończy się, gdy porowatość złoża osiąga porowatość docelową. Liczba frakcji użyta do zdefiniowania dyskretnej krzywej skumulowanej może być dowolna, jednak w praktyce warto

używać wartości nieparzystych. Przyjęcie parzystej liczby frakcji powoduje, że rozkład cząstek nie jest symetryczny względem wartości średniej. W najprostszej wersji metody, złoża generowane jest zawsze w przestrzeni o topologii prostopadłościennej.

W Metodzie Rosnących Cząstek objętość przestrzeni, w której generowana jest początkowa chmura cząstek musi być bardzo dokładnie określona. Inaczej po uzyskaniu odpowiedniej porowatości złoża, cząstki nie będą miały właściwych rozmiarów. Aby rozwiązać ten problem, początkową objętość chmury zdefiniowano następująco:

$$V = V_s + V_p = 2 \cdot l_c^3, \quad (5.38)$$

gdzie:  $V$  - całkowita objętość chmury cząstek [ $m^3$ ],  $V_s$  - sumaryczna objętość cząstek [ $m^3$ ],  $V_p$  - sumaryczna objętość przestrzeni porowych [ $m^3$ ],  $l_c$  - wymiar charakterystyczny [m].

Jeden z wymiarów jest podwojony ze względu na potrzeby wynikające z opisanej w Rozdziale 6 metody wyznaczania krętości geometrycznej.

Wymiar charakterystyczny, zależny od rozkładu cząstek, wyliczany jest z następującego równania

$$l_c = \sqrt[3]{\frac{V_s + V_p}{2}}, \quad (5.39)$$

przy czym

$$V_s = \sum_{i=1}^{n_{frac}} V_i^{sum} = \sum_{i=1}^{n_{frac}} n_i \cdot V_i = \sum_{i=1}^{n_{frac}} Y_i \cdot n_s \cdot V_i = \sum_{i=1}^{n_{frac}} Y_i \cdot n_s \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{d_i}{2}\right)^3 \quad (5.40)$$

oraz

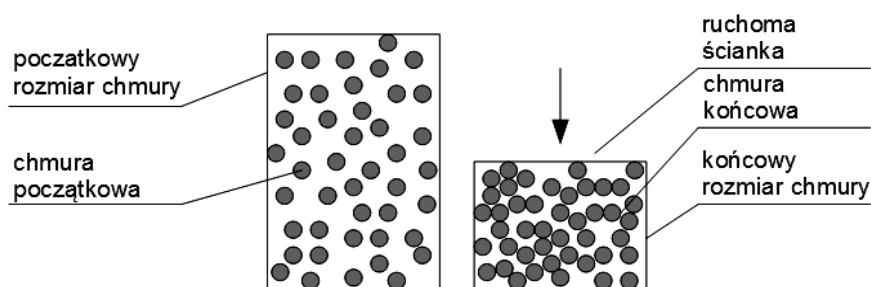
$$V_p = \frac{\phi}{1-\phi} V_s. \quad (5.41)$$

Znaczenie symboli jest następujące:  $n_{frac}$  - liczba frakcji w złożu wirtualnym [-],  $V_i^{sum}$  - sumaryczna objętość cząstek w i-tej frakcji [ $m^3$ ],  $n_i$  - liczba cząstek w i-tej frakcji [-],  $V_i$  - objętość pojedynczej cząstki w i-tej frakcji [ $m^3$ ],  $Y_i$  - udział cząstek i-tej frakcji [-] (o wartościach od 0 do 1),  $n_s$  - całkowita liczba cząstek w złożu [-],  $d_i$  - średnica cząstek i-tej frakcji [m],  $\phi$  - docelowa porowatość złoża [ $m^3 / m^3$ ].

Zaletą Metody Rosnących Cząstek jest krótki czas obliczeń (rzędu kilkudziesięciu sekund na typowym współczesnym komputerze) oraz generowanie chmur homogenicznych. Wadą, niedokładne odzwierciedlenie rozkładu wielkości cząstek w chmurze końcowej. Wynika to z faktu, że poszczególne cząstki „rosną” nieproporcjonalnie, zależnie od lokalnego układu sił.

W drugiej metodzie generowania chmur cząstek, Metodzie Ściskania (Rys. 5.7), najpierw tworzona jest chmura początkowa – o poprawnych rozmiarach cząstek, ale o za dużej porowatości – a następnie przeprowadzana jest symulacja Metodą Elementów Dyskretnych, podczas której górna ścianka prostopadłościanu obniża się. Symulacja trwa do czasu osiągnięcia porowatości docelowej. Tak jak poprzednio, podczas symulacji zmniejszana jest stopniowo wartość współczynników tarcia.

Opisany wyżej mechanizm, to standardowo dostępny w kodzie YADE, tzw. test trójosiowego ściskania (ang. tri-axial-test). Na potrzeby przykładu został on tylko nieznacznie zmodyfikowany.

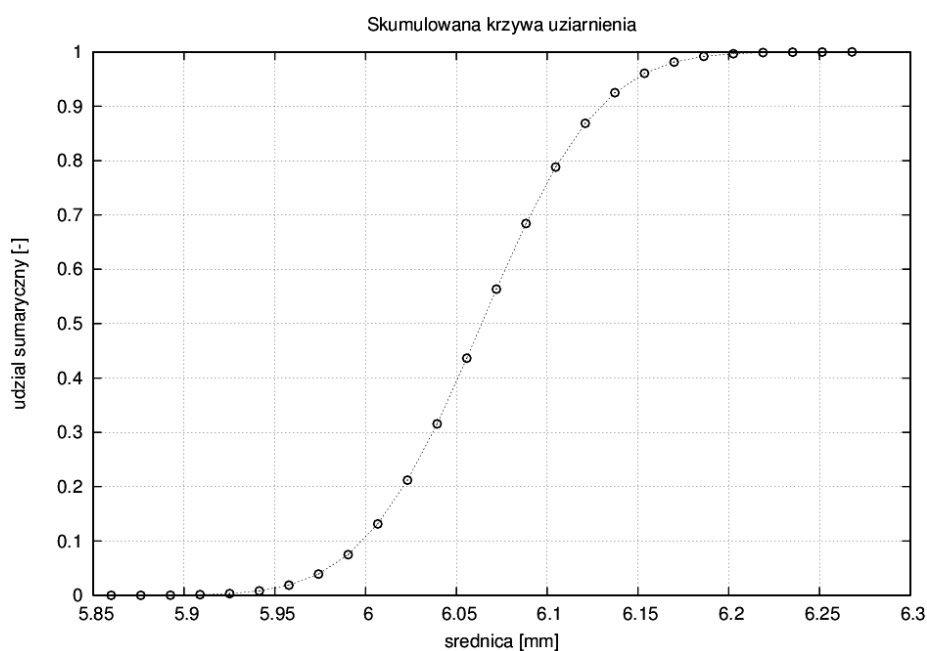


Rys. 5.7. Idea działania Metody Ściskania

Zaletą metody jest to, że rozmiary cząstek są od razu odpowiednie. Wadą jest długi czas obliczeń (rzędu godzin na typowym współczesnym komputerze) oraz to, że złoż nie jest homogeniczne w całej objętości.

### 5.2.2. Obliczenie wymiaru charakterystycznego

W bieżącym punkcie przedstawiony jest przykład generowania wirtualnego złoża cząstek sferycznych Metodą Rosnących Cząstek na podstawie krzywej skumulowanej uzyskanej z analizy danych pomiarowych. W opisie wykorzystano przykład odnoszący się do kulek 6 [mm], o średnicy  $d_{rep} = 6.072$  [mm] i porowatości  $\phi = 0.413$  [m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>]. Krzywą skumulowaną, w postaci dyskretnej, uzyskano w sposób przedstawiony w Rozdziale 3. Do ilustrowania opisywanych tu zagadnień wybrano jedną taką krzywą, o  $n_{frac} = 25$ .

Rys. 5.8. Skumulowana krzywa uziarnienia dla złoża kulek 6 [mm] i  $n_{frac} = 25$ 

Punktem wyjścia do wygenerowania w pakiecie YADE wirtualnej chmury cząstek Metodą Rosnących Cząstek jest plik tekstowy zawierający dwie kolumny liczb<sup>4</sup>. Pierwsza zawiera średnice

<sup>4</sup> Dane o rozkładzie można wprowadzić do kodu YADE również w inny sposób, np. bezpośrednio podając wartości w skrypcie Pythona. Przedstawiony tu opis dotyczy opracowanej metodologii, łączącej w wygodny sposób zagadnienia z Rozdziałów 3 oraz 5.

cząstek i-tej frakcji, druga ich udział skumulowany (są to kolumny oznaczone odpowiednio symbolami  $d_i$  oraz  $Y_i^{sum}$  w Tabeli 5.1). Wykres skumulowany dla analizowanego przypadku, stworzony na podstawie omawianego tu pliku tekstowego, widoczny jest na (Rys. 5.8).

Tabela 5.1. Wyniki obliczeń sumarycznej objętości cząstek złoza

lp	$d_i$	$Y_i^{sum}$	$Y_i$	$n_i$	$V_i$	$V_i^{sum}$
	[mm]	[-]	[-]	[-]	[m <sup>3</sup> ]	[m <sup>3</sup> ]
1	5.85984	0.000000E+00	0	0	1.0536E-07	0.0000E+00
2	5.87616	8.494574E-05	8.4946E-05	0	1.0624E-07	0.0000E+00
3	5.89248	3.580411E-04	2.7310E-04	1	1.0713E-07	1.0713E-07
4	5.90880	1.151220E-03	7.9318E-04	4	1.0802E-07	4.3207E-07
5	5.92512	3.232425E-03	2.0812E-03	10	1.0892E-07	1.0892E-06
6	5.94144	8.165865E-03	4.9334E-03	25	1.0982E-07	2.7455E-06
7	5.95776	1.873110E-02	1.0565E-02	53	1.1073E-07	5.8685E-06
8	5.97408	3.917223E-02	2.0441E-02	102	1.1164E-07	1.1387E-05
9	5.99040	7.490203E-02	3.5730E-02	179	1.1256E-07	2.0147E-05
10	6.00672	1.313252E-01	5.6423E-02	282	1.1348E-07	3.2001E-05
11	6.02304	2.118237E-01	8.0499E-02	402	1.1441E-07	4.5991E-05
12	6.03936	3.155820E-01	1.0376E-01	519	1.1534E-07	5.9860E-05
13	6.05568	4.364089E-01	1.2083E-01	604	1.1628E-07	7.0230E-05
14	6.07200	5.635278E-01	1.2712E-01	636	1.1722E-07	7.4551E-05
15	6.08832	6.843546E-01	1.2083E-01	604	1.1817E-07	7.1372E-05
16	6.10464	7.881129E-01	1.0376E-01	519	1.1912E-07	6.1822E-05
17	6.12096	8.686115E-01	8.0499E-02	402	1.2008E-07	4.8271E-05
18	6.13728	9.250346E-01	5.6423E-02	282	1.2104E-07	3.4133E-05
19	6.15360	9.607644E-01	3.5730E-02	179	1.2201E-07	2.1839E-05
20	6.16992	9.812056E-01	2.0441E-02	102	1.2298E-07	1.2544E-05
21	6.18624	9.917708E-01	1.0565E-02	53	1.2396E-07	6.5698E-06
22	6.20256	9.967042E-01	4.9334E-03	25	1.2494E-07	3.1236E-06
23	6.21888	9.987854E-01	2.0812E-03	10	1.2593E-07	1.2593E-06
24	6.23520	9.995786E-01	7.9318E-04	4	1.2693E-07	5.0770E-07
25	6.25152	9.998517E-01	2.7309E-04	1	1.2793E-07	1.2793E-07
26	6.26784	9.999367E-01	8.4950E-05	0	1.2893E-07	0.0000E+00
			<b>1.0</b>	<b>4998</b>		<b>0.0005859794</b>

Aby wyliczyć sumaryczną objętość cząstek złoza ( $V_s$ ), potrzebną do określenia wymiaru charakterystycznego ( $l_c$ ), należy wykonać następujące kroki:

- Przyjąć całkowitą liczbę cząstek w złożu ( $n_s$ ) – w przykładzie  $n_s = 5000$ .
- Obliczyć udziały poszczególnych frakcji ( $Y_i = Y_i^{sum} - Y_{i-1}^{sum}$ ).
- Obliczyć liczbę cząstek przypadającą na każdą z frakcji ( $n_i = Y_i \cdot n_s$ ). Ponieważ wynikami muszą być liczby całkowite, to – wskutek zaokrągleń – końcowa liczba cząstek może różnić się nieznacznie od wartości  $n_s$  (w przykładzie różnica ta wynosi 2). Nie ma to jednak większego znaczenia przy wyznaczaniu wymiaru charakterystycznego.
- Obliczyć objętość pojedynczej cząstki znajdującej się w i-tej frakcji ( $V_i = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{d_i}{2}\right)^3$ ).
- Obliczyć sumaryczną objętość wszystkich cząstek znajdujących się w i-tej frakcji złoza ( $V_i^{sum} = n_i \cdot V_i$ ).
- Obliczyć sumaryczną objętość cząstek w złożu.



Pewnego komentarza wymaga fakt, że liczba wierszy w Tabeli 5.1 (albo w pliku z danymi) wynosi 26, a nie 25 jak wynikałoby z przyjętej liczby frakcji. Wynika to ze sposobu definiowania dyskretnej krzywej skumulowanej w pakiecie YADE. Kod ten wymaga, aby pierwsza liczba funkcji wynosiła zero. Aby nie zerować liczby cząstek w pierwszej frakcji (która w ogólnym przypadku może być różna od zera), co zakłócałoby rozkład, zdecydowano się na dopisywanie zawsze jednego dodatkowego wiersza w pliku źródłowym.

Aby nie wykonywać obliczeń ręcznie, do obliczenia wymiaru charakterystycznego przygotowano specjalny program obliczeniowy w języku Fortran. Program ten wczytuje dane z pliku źródłowego, zawierającego średnice i udziały skumulowane poszczególnych frakcji, a następnie automatycznie przeprowadza wszystkie niezbędne obliczenia. Oprócz tego, program generuje skrypt Gnuplot służący do wizualizacji krzywej skumulowanej. Dla analizowanego tu przypadku, wymiar charakterystyczny  $l_c$  wyniósł 0.07926574 [m].

### 5.2.3. Przykład tworzenia chmur

Kod YADE, będący w rzeczywistości zbiorem bibliotek, działa w systemach operacyjnych Unix/Linux. Najwygodniej jest pracować w systemie Linux Ubuntu, gdyż przygotowano dla niego pakiety instalacyjne i kod ten, w wersji stabilnej, można zainstalować bezpośrednio z poziomu systemowego Menadżera Oprogramowania. Istnieje również możliwość zainstalowania wersji rozwojowej, ale nie jest to zalecane bez dobrej znajomości tego środowiska obliczeniowego.

Do korzystania z kodu YADE potrzebny jest interpreter języka Python [24]. W języku tym należy przygotować odpowiedni skrypt, a następnie uruchomić go w konsoli systemu operacyjnego poleceniem

```
yade nazwa_zadania.py
```

Struktura skryptów wykorzystujących bibliotekę YADE może być bardzo różna. Generalnie jednak typowy skrypt składa się z trzech zasadniczych części:

- Bloku preprocesora, w którym definiuje się obiekty należące do przestrzeni obliczeniowej.
- Głównej pętli obliczeniowej odpowiedzialnej za przeprowadzenie symulacji, rejestrację wybranych wyników (np. zmian porowatości), itp.
- Bloku postprocesora, służącego głównie do zapisu lub wizualizacji wyników.

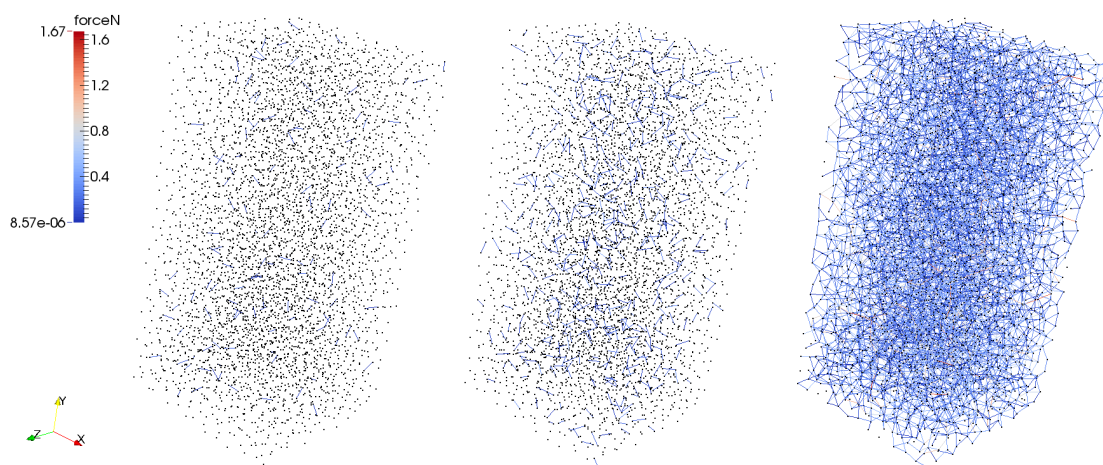
Skrypt Pythona, przygotowany do wygenerowania chmury cząstek dla omawianego tu przykładu, zawiera fragmenty odpowiedzialne za następujące zadania:

- Załadowanie odpowiednich bibliotek.
- Określenie nazwy zadania – tu: „p06\_25”.
- Określenie liczby sfer  $n_s$  oraz porowatości docelowej  $\phi$ .
- Wczytanie z pliku tekstowego „p06\_25.txt” (wygenerowanego wcześniej w programie Matlab lub SciLab na podstawie analizy wyników pomiarów średnic cząstek rzeczywistych – zobacz Rozdział 3) wartości elementów tablic  $d_i$  oraz  $Y_i^{sum}$ .
- Wywołanie zewnętrznego programu wyliczającego wymiar charakterystyczny (wynik obliczeń zapisywany jest w pliku tekstowym „p06\_25.l\_c”) na podstawie danych z pliku „p06\_25.txt”.
- Wczytanie wartości wymiaru charakterystycznego z pliku „p06\_25.l\_c”.
- Zdefiniowanie współrzędnych skrajnych wierzchołków prostopadłościanu, w którym generowana jest chmura początkowa (tu wykorzystywany jest wymiar  $l_c$ ).

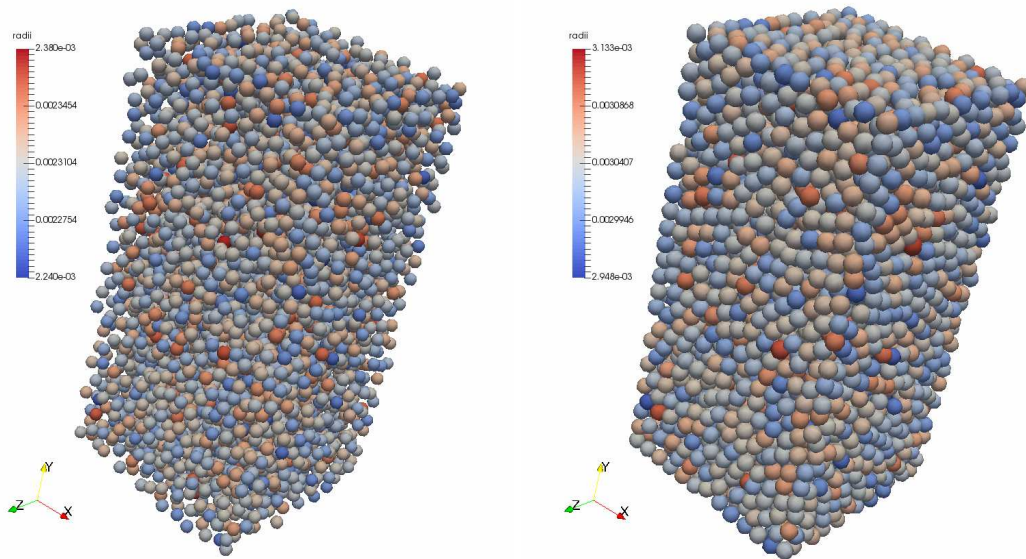
- Definiowanie parametrów materiałowych sfer oraz ścianek.
- Dodanie ścianek do przestrzeni obliczeniowej.
- Dodanie do przestrzeni obliczeniowej chmury początkowej (tu wykorzystywane są tablice zawierające wartości  $d_i$  oraz  $Y_i^{sum}$ ).
- Definiowanie obiektu „triax” odpowiedzialnego za analizę naprężeń i przemieszczeń w tzw. teście trójosiowego ściskania (tu definiuje się między innymi prędkość wzrostu cząstek).
- Definiowanie składników solwera (szczegółowo dostępne są w dokumentacji kodu [28] lub w materiałach dostępnych na stronie internetowej projektu [38]).
- Definiowanie składników głównej pętli obliczeniowej (tu znajduje się instrukcja stopniowego zmniejszania kąta tarcia oraz warunek zakończenia obliczeń po osiągnięciu porowatości docelowej).
- Zapis wybranych zmiennych do pliku tekstowego „p06.porosity” (do celów porównywania różnych symulacji).
- Zapis informacji o złożu do pliku „p06\_25.yade”.
- Wywołanie zewnętrznego programu konwertującego plik „p06\_25.yade” do postaci czytelnej dla programu PathFinder. Plik ten ma nazwę „p06\_25.in”. Oprócz tego tworzony jest zapis złoża w formie pliku VTK (plik „p06\_25.in.vtk”).

Należy uzupełnić, że w opisywanym tu przykładzie wykorzystano liniowy lepko-sprężysty model kontaktu, zastosowany przez Cundalla i Strack’a w pracy z 1979 roku [5]. Opis liniowych sprężystych modeli kontaktu w kierunkach normalnym i stycznym prezentują podrozdziały 5.1.2.1.1 i 5.1.2.1.2. Rozproszenie energii w układzie modelowano poprzez wprowadzenie tłumienia globalnego, wspomnianego w podrozdziale 5.1.2.2.

Na Rys. 5.9 widoczne są kontakty między cząstkami (w postaci linii łączących punkty reprezentujące środki sfer) dla trzech różnych etapów tworzenia się złoża. Rysunek po lewej przedstawia wczesny etap symulacji, w którym sfery są jeszcze małe i tylko niektóre z nich stykają się ze sobą. Rysunek środkowy zawiera większe sfery, przez co kontaktów jest więcej. Rysunek po prawej obrazuje sytuację z zaawansowanego stadium symulacji, w którym porowatość bliska już jest porowatości docelowej, a liczba kontaktów jest duża. Warto zwrócić uwagę, że w niektórych strefach siły te są wyraźnie większe, co oznacza duże naprężenia lokalne. Na Rys. 5.10 widoczna jest początkowa i końcowa chmura cząstek – zmiany wielkości cząstek są wyraźnie zauważalne.



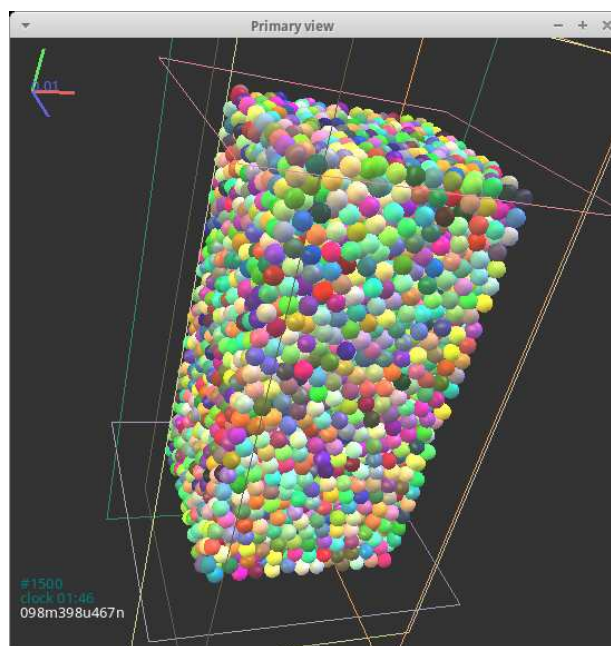
Rys. 5.9. Wizualizacja sił kontaktu między sferami dla wybranych kroków symulacji



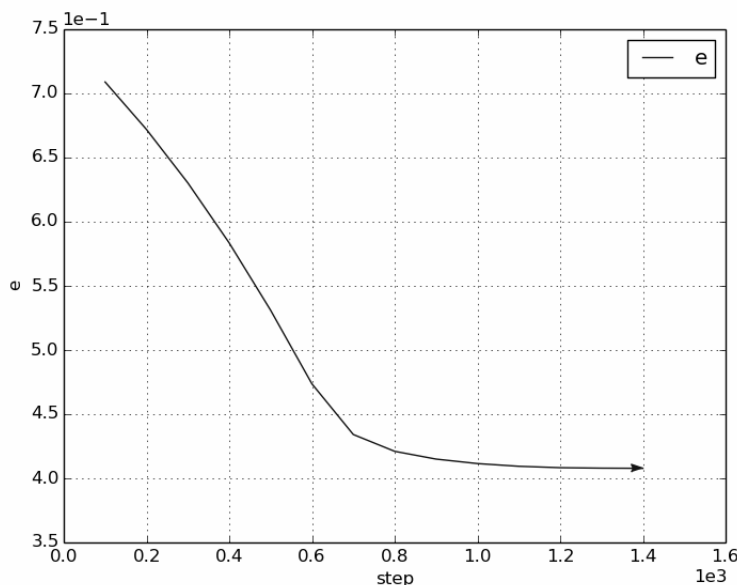
Rys. 5.10. Wizualizacja początkowej (z lewej) oraz końcowej chmury cząstek (z prawej)

Wizualizacja widoczna na Rys. 5.11 przedstawia złoż po zakończeniu obliczeń – jest to typowy rysunek generowany przez kod YADE. Na Rys. 5.12 przedstawiono wykres zmian porowatości złoża (składowe związane z jego tworzeniem zostały pominięte we wcześniejszym opisie skryptu). Zmiany te są początkowo duże, później jednak – w miarę zwiększania się liczby kontaktów między ciałami – maleją.

Obliczenia kończą się po osiągnięciu warunku końcowego, tzn., gdy bieżąca porowatość złoża jest mniejsza niż porowatość docelowa. Charakterystyczną cechą metody jest to, że końcowa porowatość złoża jest zawsze nieznacznie niższa od porowatości docelowej, przy czym różnica zależy od szybkości zmniejszania wartości kąta tarcia w głównej pętli obliczeniowej oraz od wartości parametru sterującego szybkością wzrostu cząstek.



Rys. 5.11. Wizualizacja wygenerowanej chmury



Rys. 5.12. Wykres zmian porowatości w czasie (tu oznaczonej symbolem  $e$ )

### 5.3. Podsumowanie

Wnioski końcowe podsumowujące zaprezentowane w Rozdziale treści są następujące:

- Metoda Elementów Dyskretnych może być z powodzeniem stosowana do generowania wirtualnych chmur cząstek sferycznych o zadanym rozkładzie wielkości cząstek oraz zadanej porowatości.
- Sposób korzystania z kodu YADE, polegający na tworzeniu skryptów w języku Python, umożliwia integrowanie wielu różnych etapów obliczeń i przygotowanie jednego programu odpowiedzialnego za wszystkie zadania jednostkowe. Podejście takie minimalizuje możliwość wystąpienia błędów wynikających z tzw. czynnika ludzkiego.
- Efektem działania przedstawionego w Rozdziale procesu obliczeniowego jest złożo wirtualne – reprezentujące konkretne złożo rzeczywiste – i zapisane numerycznie w postaci pliku zawierającego numer identyfikacyjny, współrzędne środków oraz średnice wszystkich sfer złoża. Dane te można wykorzystać na wiele sposobów, np. do analizy struktury przestrzennej złoża (Rozdział 6), do tworzenia micro-skalowych modeli ruchu płynów w przestrzeniach porowych – w oparciu o Metodę Gazu Sieciowego Boltzmana (Rozdział 9), Metodą Zanurzonego Brzegu (Rozdział 10) – lub też do innych celów.

### DODATEK – skrypt YADE do generowania chmury cząstek o zadanym rozkładzie

```

#-----
# Skrypt YADE - Wojciech Sobieski (C) 2016
#-----

# ładowanie bibliotek yade:
from yade.pack import *
from yade import utils
from yade import export
from yade import plot

# ładowanie innych bibliotek:
import sys
import os
import subprocess

```

```

file = 'p06_25_std_x_1'          # nazwa zadania
n_s = 5000                      # liczba sfer
e_target = 0.413                # porowatosc docelowa
mi = 5.0                        # kat tarcia (zmniejszany w czasie symulacji)

# odczyt dyskretnej krzywej skumulowanej uziarnienia z pliku:
n_band = sum(1 for line in open(file+'.txt'))
input = open(file+'.txt','r')
psdSizes = []
psdCumm = []
try:
    for line in input:
        psdSizes.append(float(line[0:16]))
        psdCumm.append(float(line[18:]))
finally:
    input.close()

# korekta pierwszego i ostatniego elementu tablicy:
psdCumm[0] = 0.0
psdCumm[n_band-1] = 1.0

# uruchomienie programu do obliczenia wymiaru charakterystycznego:
subprocess.call('./calc_l.out '+str(file)+' '+str(n_s)+'
'+str(e_target),shell=True)

# czytanie wartosci wymiaru charakterystycznego z pliku:
input = open(str(file)+'.l_c','r')
try:
    for line in input:
        l = float(line[0:])
finally:
    input.close()

# definicja wspolrzecznych naprzeciwleglych naroznikow prostopadloscianu
# (obszaru obliczeniowego w ktorym generowana jest chmura czastek):
mn = Vector3(0,0,0)
mx = Vector3(1,2*1,1)

# definicja materialu scian:
O.materials.append(FrictMat(young=5e6,poisson=0.5,frictionAngle=0,density=0,label='
walls'))
# dodanie scian do obszaru obliczeniowego:
O.bodies.append(aabbWalls([mn,mx],thickness=0,material='walls'))

# definicja materialu sfer:
O.materials.append(FrictMat(young=5e6,poisson=0.5,frictionAngle=radians(mi),density
=2600,label='spheres'))
# definicja i tworzenie chmury czastek:
sp = yade._packSpheres.SpherePack()
sp.makeCloud(mn,mx,psdSizes=psdSizes,psdCumm=psdCumm,num=n_s,distributeMass=1)
# dodanie chmury do obszaru obliczeniowego:
O.bodies.append([sphere(s[0],s[1],material='spheres') for s in sp])

# zapis poczatkowej chmury sfer do pliku VTK:
vtkExporter = export.VTKExporter(str(file)+'-init.vtk')
vtkExporter.exportSpheres(what=[('dist','b.state.pos.norm()')])

# tworzenie katalogu dla plikow VTK generowanych w trakcie symulacji:
os.mkdir(str(file))

# czyszczenie danych do wykresu:
plot.resetData()

#-----
# definiowanie skladnikow silnika solwera:

```

```

# "Boundary controller" dla trojosioowego sciskania za pomoaca 6-ciu scianek:
triax = TriaxialStressController(
    # maksymalny mnoznik wzrosu czastek (uzywany w poczatkowej fazie symulacji):
    finalMaxMultiplier = 1.0004,
    # mnoznik wzrosu czastek (uzywany w drugiej fazie symulacji):
    maxMultiplier = 1.004,
    # definicja kierunkow, dla ktorzych wyznaczane sa naprezenia (7 - wszystkie):
    stressMask = 7,
    # definicja sposobu zageszczania: rosniecie (True) lub sciskanie (False):
    internalCompaction = True,
    # stosunek naprezen do szybkoosci odkształcania na kierunku 1, 2 i 3:
    goal1 = 10000,goal2 = 10000,goal3 = 10000)

O.engines=[
    # zerowanie sil i momentow w calej przestrzeni obliczeniowej:
    ForceResetter(),
    # wyszukiwanie kontaktow na podstawie funkcji zaleznych od ksztaltow obiektow:
    InsertionSortCollider(
        [Bol_Sphere_Aabb(), # kontakty miedzy sferami
         Bol_Box_Aabb()]), # kontakty sfer ze sciankami
    # obliczanie sil i momentow wszystkich kontaktow:
    InteractionLoop(
        # tworzenie informacji o geometrii kazdego potencjalnego kontaktu:
        [Ig2_Sphere_Sphere_ScGeom(),Ig2_Box_Sphere_ScGeom()],
        # tworzenie informacji o fizyce kazdego potencjalnego kontaktu:
        [Ip2_FrictMat_FrictMat_FrictPhys()],
        # solver: wylicza sily i momenty na podstawie geometrii i fizyki kontaktow:
        [Law2_ScGeom_FrictPhys_CundallStrack()]),
    # wyznaczenie optymalnego kroku czasowego:
    GlobalStiffnessTimeStepper(
        active=1, # aktywacja silnika
        timeStepUpdateInterval=100, # interwal aktualizacji dt
        timestepSafetyCoefficient=0.8), # wspolczynnik bezpieczenstwa dt
    # dodanie wzczesniej zdefiniowanego TriaxialStressController:
    triax,
    # Calkowanie dynamicznych rownan ruchu
    # (tu zdefiniowany jest tylko wspolczynnik tlumienia; nie ma grawitacji):
    NewtonIntegrator(damping = 0.2,gravity=[0,0,0]),
    # zapamietanie danych do wykresu:
    PyRunner(command='letPlot()',iterPeriod=10),
    # rejestracja zmian do plikow VTK:
    VTKRecorder(fileName=str(file)+'/'+'cloud-',recorders=['all'],iterPeriod=10)
]
#-----

# definicja zmiennych i dodanie ich do tablic sluzacych do tworzenia wykresu:
def letPlot():
    plot.addData(step=0.iter,porosity=utils.porosity(1*(O.bodies[3].state.pos[1])*1)
    )
    plot.plots={'step':('porosity')}
    plot.plot()

# sprawdzanie warunku zakonczenia obliczen:
while triax.porosity > e_target:
    mi = 0.99*mi
    setContactFriction(radians(mi))
    print "\r Friction:",mi
    print "\r Porosity:",triax.porosity
    sys.stdout.flush()
    O.run(500,1)

# zapis koncowej chmury sfer do pliku VTK:
vtkExporter = export.VTKExporter(str(file)+'-final.vtk')
vtkExporter.exportSpheres(what=[('dist','b.state.pos.norm()')])

# zapis wybranych wielkosci do pliku tekstowego:
input = open(str(file)+'porosity','a')
input.write('\r'+str(file)+': porosity = '+str(triax.porosity)+' l = '+str(1)+'

```

```

fric = '+str(mi))
input.close()

# zapis danych do wizualizacji zmian porowatości w Gnuplocie:
plot.saveGnuplot(str(file))

# zapis danych o sferach (x, y, z, r) do pliku tekstowego:
export.text(str(file)+' .yade')

# uruchomienie zewnetrznego programu do konwersji formatu pliku
# (tu zamieniane sa kolumny oraz promien przeliczany jest na srednice):
subprocess.call('./convert.out '+str(file)+' '+str(n_s), shell=True)

# czyszczenie ekranu:
subprocess.call('clear', shell=True)

# wyswietlenie finalnych wartosci kata tarcia i porowatosci na ekranie:
print "\r -----"
print "\r Final friction:",mi
print "\r Final porosity:",triax.porosity
#-----

```

## Literatura

1. Cundall P.A., Strack O.D.: A discrete element model for granular assemblies, *Géotechnique* 1979, 29, 47-65.
2. Tijssens E., Ramon H., De Baerdemaeker J.: Discrete element modelling for process simulation in agriculture, *J Sound Vib* 2003, 266, 493-514.
3. Martin C.L., Bouvard D.: Isostatic compaction of bimodal powder mixtures and composites, *International J Mech Sci* 2004, 46, 908-927.
4. Schöpfer M.P.J., Abe S., Childs C., Walsh J.J.: The impact of porosity and crack density on the elasticity, strength and friction of cohesive granular materials: Insights from DEM modelling. *Int J Rock Mech Min Sci* 2009, 46, 250-261.
5. Wiącek J., Molenda M., Horabik J., Ooi J.Y.: Influence of grain shape and intergranular friction on material behavior in uniaxial compression: Experimental and DEM modeling. *Powder Technol* 2012, 217, 435-442.
6. Rojek J.: Modelowanie i symulacja komputerowa złożonych zagadnień mechaniki nieliniowej metodami elementów skończonych i dyskretnych. IPPT PAN 2007.
7. Kruggel-Emden H., Simsek E., Rickett S., Wirtz S., Scherer V.: Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method. *Powder Technol* 2007, 171, 157-173.
8. Witkowski M., Pecen J., Horabik J., Molenda M.: Rapeseed impact against a flat Surface: Physical testing and DEM simulation with two contact models. *Powder Technol* 2010, 198, 61-68.
9. Ji S., Shen H.H.: Contact Force Models for Granular Flows. Report No 04-02, 2004.
10. Campbell C.: Granular shear flows at the elastic limit. *J Fluid Mech* 2002, 465, 261-291.
11. Hertz H.: Über die Berührung fester elasticcher Körper. *J Rein Angew Math* 1882, 92, 156-171.
12. Johnson K.L.: Contact Mechanics. Cambridge University Press 2004.
13. O'Sullivan C.: Particulate Discrete Element Modelling: A Geomechanics Perspective. *Appl Geotech* 2011.
14. Kuwabara G., Kono K.: Restitution coefficient in a collision between 2 spheres, *Jpn J Appl Phys* 1987, 26, 1230-1233.
15. Falcon E., Laroche C., Fauve S., Coste C.: Behavior of once elastic ball bouncing repeatedly off the ground. *Eur Phys J B* 1998, 3, 45-57.
16. Mishra B. K., Murty C.V. R.: On the determination of contact parameters for realistic DEM simulations of ball mills. *Powder Technol* 2001, 115, 290-297.
17. Rathbone D., Marigo M., Dini D., van Wachem B.: An accurate force-displacement law for the modelling of elastic-plastic contacts in discrete element simulations. *Powder Technol* 2015, 282, 2-9.
18. Zabulionis D., Kačianauskas R., Markauskas D., Rojek J.: An investigation of nonlinear tangential contact behaviour of a spherical particle under varying loading. *Bull Pol Acad Sci, Tech Sci* 2012, 60(2), 265-278.
19. O'Sullivan C., Bray J.D.: Selecting a suitable time step for discrete element simulations that use the central difference time integration scheme. *Eng Comput* 2004, 21, 278-303.
20. Timoshenko S.P., Goodier J.N.: Theory of elasticity. McGraw-Hill 1934.
21. Thornton C., Randall C.W.: Applications of theoretical contact mechanics to solid particle system simulations. *Micromechanics of Granular Materials*, Elsevier 1988.

22. Derakhshani S.M., Schott D.L., Lodewijks G.: Dust Emission Modelling around a Stockpile by Using Computational Fluid Dynamics and Discrete Element Method. Proc 7th Int Conf Micromech Granul Media 2013, AIP Conf Proc 1542, 1055-1058.
23. EDEM Software, <http://www.dem-solutions.com/software/edem-software>
24. Gröger T., Katterfeld A.: Application of the Discrete Element Method in Materials Handling. Part 1: Basics and Calibration. Bulk Solids Handl 2007, 27, 17-23.
25. Landry J.W., Grest G.S., Silbert L.E., Plimpton S.J.: Confined granular packings: structure, stress, and forces. Phys Rev E 2003, 64, 041303.
26. Masson S., Martinez J.: Multiscale simulations of the mechanical behaviour of an ensiled granular material. Mech Cohes-Frict Mater 2000, 5, 425-442.
27. Kruggel-Emden H., Stepanek F., Munjiza A.: A study on adjusted contact force laws for accelerated large scale discrete element simulations. Particuology 2010, 8, 161-175.
28. Cleary P.C., Sawley M.L.: DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge. Appl Math Model 2002, 26(2), 89-111.
29. Ferrez, J.A., Liebling, T.M.: Parallel DEM Simulations of Granular Materials. High-Performance Computing and Networking, Springer-Verlag 2001.
30. Maknickas A., Kačėniauskas A., Kačėniauskas R., Balevičius R., Džiugys, A.: Parallel DEM Software for Simulation of Granular Media. Inform 2006, 17(2), 207-224.
31. Thornton C.: Numerical simulations of deviatoric shear deformation of granular media. Géotechnique 2000, 50, 43-53.
32. Thornton C., Antony, S.J.: Quasi-static shear deformation of a soft particle system. Powder Technol 2000, 109, 179-191.
33. Chung Y.C., Ooi J.Y.: Experimental measurement and discrete element modelling of a dense granular medium under loading. Proc McMat 2005 joint ASME/ASCE/SES Conf Mech Mater 2005, Baton Rouge, Louisiana, USA, 1-5.
34. Chung Y.C.: Discrete element modelling and experimental validation of a granular solid subject to different loading conditions. Dissertation, University of Edinburgh 2006.
35. Raji A.O., Favier J.F.: Model for the deformation in agricultural and food particulate materials under bulk compressive loading using discrete element method. II: Compression of oilseeds, J Food Eng 2004, 64, 373-380.
36. Wiąćek J., Molenda M.: Moisture-dependent physical properties of rapeseed- experimental and DEM modeling. Int Agrophys 2011, 25, 59-65.
37. Python [on-line]. URL: <https://www.python.org/> (dostęp 1 lutego 2016).
38. Šmilauer V., Catalano E., Chareyre B., Dorofeenko S., Duriez J., Gladky A., Kozicki J., Modenese C., Scholtès L., Sibille L., Stránský J., Thoeni K.: Yade Documentation [on-line]. Release 2016-02-09.git-6a7b733, February 10, 2016. URL: <https://yade-dem.org/doc/Yade.pdf> (dostęp 1 lutego 2016).
39. YADE [on-line]. URL: <https://yade-dem.org/doc/> (dostęp 1 lutego 2016).



## 6. WYZNACZANIE PARAMETRÓW CHARAKTERYZUJĄCYCH STRUKTURĘ PRZESTRZENNĄ ZŁÓŻ GRANULARNYCH

### 6.1. Wejściowy zbiór danych

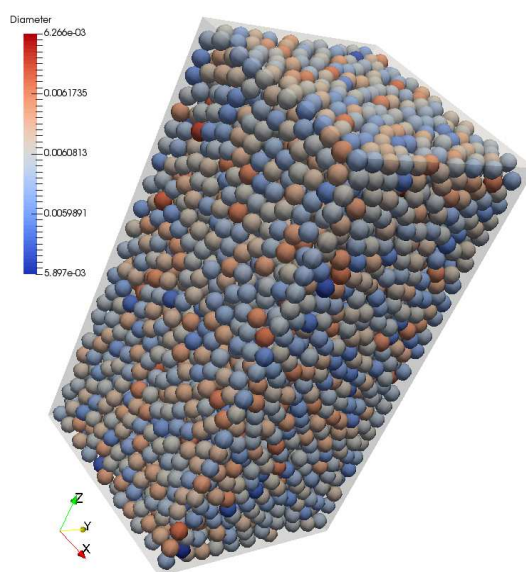
W przypadku złoża granularnego składającego się z konkretnej liczby cząstek o znanej średnicy reprezentatywnej istnieje możliwość łatwego zapisu geometrii w postaci numerycznej. Do opisu takiego złoża wystarczą cztery parametry: trzy współrzędne określające geometryczny środek sfery oraz jedna liczba określająca jej rozmiar. Dane takie można uzyskać generując dowolną metodą złoże wirtualne (Rozdział 5) lub też analizując złoże rzeczywiste (Rozdział 4). Liczba cząstek nie może być zbyt duża, ze względu na możliwości obliczeniowe komputerów, dlatego też korzystnie jest przyjąć do analizy jedynie reprezentatywny fragment lub próbkę złoża (wirtualnego bądź rzeczywistego).

Metodologia wykorzystana do obliczeń wymaga użycia parametru pozwalającego na identyfikację konkretnej sfery. W tym celu należy wprowadzić dodatkową liczbę całkowitą, różną dla każdej cząstki. Ostatecznie, wejściowy zbiór danych pozwalający na wyliczenie zbioru parametrów geometrycznych złoża (zbioru  $\Phi$ ) przyjmuje postać (porównaj z Rys. 4.11):

$$G = (n_i, x_i, y_i, z_i, d_i), \quad (6.1)$$

gdzie:  $n_i$  - numer identyfikacyjny i-tej sfery (od 1 do  $n_s$ , gdzie  $n_s$  jest całkowitą liczbą sfer w złożu) [-],  $x_i$  - współrzędna X środka i-tej sfery [m],  $y_i$  - współrzędna Y środka i-tej sfery [m],  $z_i$  - współrzędna Z środka i-tej sfery [m],  $d_i$  - średnica reprezentatywna i-tej cząstki [m].

Kolejność zapisu współrzędnych może być dowolna, przy czym – na potrzeby wyznaczania krętości geometrycznej – należy przyjąć jeden kierunek główny. W dalszej części przyjęto, że kierunek ten wyznacza oś Z. Chcąc obliczać krętość dla innych kierunków przestrzennych, wystarczy zamienić kolejność kolumn określających współrzędne. Aby przyspieszyć działanie algorytmów związanych z obliczaniem krętości geometrycznej, zbiór  $G$  należy jeszcze posortować według rosnących wartości współrzędnej kierunku głównego.



Rys. 6.1. Wizualizacja próbki złoża o nazwie „p06\_25” (tej samej, co na Rys. 5.11)

W dalszej części rozdziału wykorzystano przykład danych wejściowych (o nazwie  $G^{p06-25}$ ) pochodzący z modelu wykonanego Metodą Elementów Dyskretnych w pakiecie YADE [22].

Sposób generacji złoza opisano w Rozdziale 5. Symbol „p06” w nazwie oznacza, że przykład dotyczy granulatu nr 2, o średniej średnicy równej 6.072 [mm] i porowatości 0.413 (Rozdział 2). Drugi człon nazwy („25”) oznacza, że złoże wygenerowano dzieląc funkcję rozkładu rozmiarów cząstek na 25 frakcji (Rozdział 3).

## 6.2. Kod obliczeniowy PathFinder

Przedstawiona w dalszej części rozdziału analiza struktury przestrzennej złoza wykonana została za pomocą pakietu obliczeniowego o nazwie PathFinder [17,15,12]. Szczegóły dotyczące programu dostępne są w cytowanej dokumentacji lub na stronie internetowej [10] – tu omówione zostaną jedynie najważniejsze kwestie.

Pakiet PathFinder dostępny jest bezpłatnie<sup>5</sup> wraz z kodem źródłowym i może być użytkowany w systemach Windows lub Unix/Linux. Do pracy programu potrzebne jest dodatkowe oprogramowanie: kompilator gfortran [3] (do kompilacji kodu źródłowego), środowisko Gnuplot [5] (do podstawowej wizualizacji wyników oraz analizy procesu obliczeniowego) oraz program ParaView [9], MayaVI [7] lub inny, umożliwiający wczytywanie plików w formacie VTK [20] (do trójwymiarowej wizualizacji wyników). Wymienione programy również dostępne są bezpłatnie, na licencji GPL, zarówno dla systemów Windows jak i Unix/Linux.

Pakiet PathFinder składa się z trzech głównych elementów<sup>6</sup>:

- Kodu PathFinder, służącego do obliczania wartości elementów zbioru  $\Phi$ . W skład kodu wchodzi następujące pliki:
  - PathFinder.f90 – napisany w języku Fortran plik źródłowy głównej części kodu;
  - PathFinder.inc – napisany w języku Fortran plik źródłowy zawierający procedury służące do automatycznego tworzenia skryptów Gnuplota;
  - PathFinder.exe (Windows) lub PathFinder.out (Unix/Linux) – plik wykonywalny powstały po kompilacji kodu źródłowego;
  - PathFinder.sys – plik tekstowy zawierający informacje o systemie operacyjnym;
  - PathFinder.pdf – podręcznik użytkownika w języku angielskim [15];
  - licence.txt – plik tekstowy zawierający warunki licencji.
- Nakładki graficznej pathGUI, ułatwiającej pracę z kodem PathFinder:
  - pathGUI.exe (Windows) lub pathGUI (Unix/Linux) – plik wykonywalny;
  - pathGUI.s – plik zawierający informacje o położeniu programu ParaView oraz o używanym w systemach Unix/Linux języku skryptowym systemu operacyjnego.
  - pathGUI.tn – plik zawierający listę zadań.
- Zbioru programów pomocniczych, z których najważniejszy to Convert YADE. Programy te służą do konwersji plików generowanych przez pakiety PFC3D [11] oraz YADE [22] do formatu czytane przez kod PathFinder.

Aby skompilować kod źródłowy pakietu PathFinder należy w terminalu systemu operacyjnego, w katalogu zawierającym źródła, wydać następujące polecenie:

```
gfortran PathFinder.f90 -o PathFinder.exe
```

w systemach Windows, lub

```
gfortran PathFinder.f90 -o PathFinder.out
```

w systemach Unix/Linux.

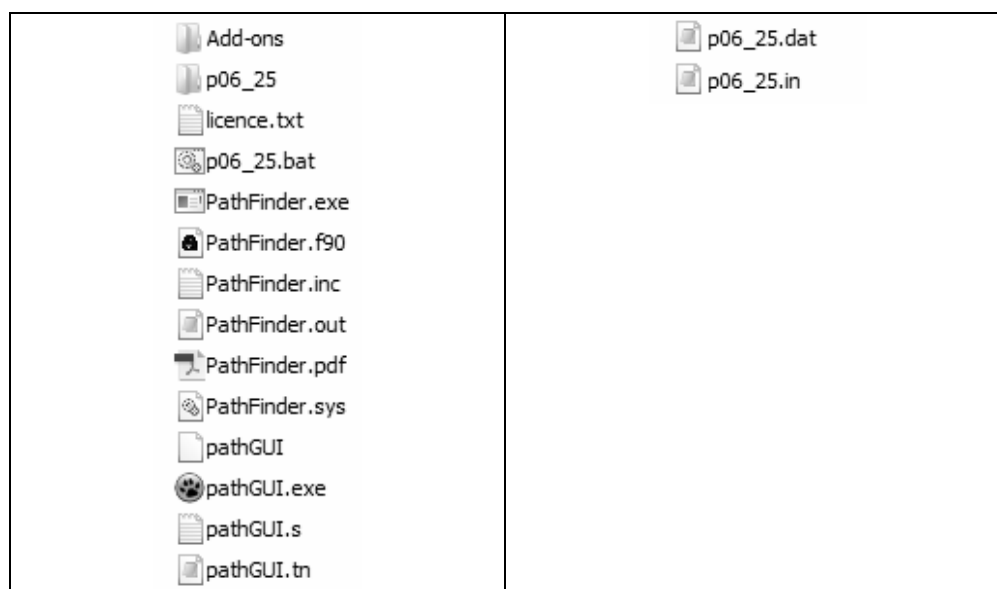
<sup>5</sup> Warunki korzystania z programu określone są w licencji.

<sup>6</sup> Wszystkie elementy projektu objęte są tą samą licencją.

Kompilator języka Fortran dostępny jest standardowo w wielu dystrybucjach systemów Unix/Linux. W systemach Windows należy zainstalować i skonfigurować kompilator języka (polecany jest tu dostępny na licencji GPL kompilator gfortran [3]) lub też skorzystać z gotowego środowiska programistycznego, np. stworzonego przez W. Sobieskiego programu Edi [14].

Definiując nowe zadanie ważne jest określenie tzw. nazwy zadania. Nazwa ta nie może zawierać spacji oraz znaków narodowych i powinna być zdefiniowana za pomocą małych liter (w przykładzie jest to „p06\_25”). Nazwa zadania wykorzystana jest do (Rys. 6.2):

- stworzenia katalogu zadania: nazwa\_zadania,
- stworzenia pliku zawierającego zbiór  $G$ : „nazwa\_zadania.in” (w katalogu nazwa\_zadania),
- stworzenia pliku konfiguracyjnego: „nazwa\_zadania.dat” (w katalogu nazwa\_zadania),
- stworzenia skryptu uruchamiającego obliczenia: „nazwa\_zadania.bat” (w systemach Windows) lub „nazwa\_zadania.sh” (w systemach Unix/Linux),
- tworzenia nazw różnych plików wynikowych.



Rys. 6.2. Znaczenie nazwy zadania w kodzie PathFinder: po lewej katalog główny kodu PathFinder, po prawej zawartość katalogu zadania (p06\_25)

Aby wykonać analizę w kodzie PathFinder, należy w katalogu nazwa\_zadania przygotować dwa pliki tekstowe: plik zawierający zbiór  $G$  (Rys. 6.3) oraz plik konfiguracyjny (Rys. 6.4). Znaczenie poszczególnych opcji zawartych w pliku konfiguracyjnym omówione jest dalej, przy okazji prezentowania nakładki graficznej pathGUI (Punkt 6.3). Oprócz tego należy przygotować, w katalogu głównym pakietu PathFinder, skrypt systemowy uruchamiający obliczenia. W odniesieniu do omawianego tu przykładu, skrypt taki w systemach Windows może mieć postać:

```
PathFinder.exe p06_25 5000
pause
```

zaś w systemach Unix/Linux:

```
xfce4-terminal -x './PathFinder.out p06_25 5000'
```

Należy zwrócić uwagę, że uruchomienie programu obliczeniowego wymaga podania dwóch parametrów wywołania: nazwy zadania oraz liczby sfer w złożu.

W przypadku dodawania nowego zadania przez wspomnianą wcześniej nakładkę graficzną pathGUI, skrypty uruchamiające obliczenia tworzone są automatycznie.

```

1 2.5866800000000000E-002 2.8657100000000000E-002 1.2331400000000000E-001 6.2657400000000000E-003
2 2.0436100000000000E-002 3.9806000000000000E-002 7.8695400000000000E-002 6.2507200000000000E-003
3 5.7781100000000000E-002 2.7597800000000000E-002 3.0566400000000000E-002 6.2426000000000000E-003
4 6.2055900000000000E-002 3.8205000000000000E-002 1.4520900000000000E-001 6.2381400000000000E-003
5 5.5731000000000000E-002 1.3889900000000000E-002 8.3777100000000000E-002 6.2336800000000000E-003
6 7.7348600000000000E-003 2.6522400000000000E-002 2.8388600000000000E-002 6.2292200000000000E-003
7 1.9546300000000000E-002 1.7081300000000000E-002 1.4490800000000000E-001 6.2272800000000000E-003
8 1.3633900000000000E-002 4.2151200000000000E-003 1.2736601000000000E-001 6.2256000000000000E-003
9 1.8756600000000000E-002 3.3966700000000000E-002 5.6302100000000000E-002 6.2239000000000000E-003
10 6.7858300000000000E-002 3.7177400000000000E-002 1.4320400000000000E-001 6.2222200000000000E-003
11 3.5791300000000000E-002 4.5075100000000000E-002 1.3030900000000000E-001 6.2205200000000000E-003
12 1.3400200000000000E-002 2.6773900000000000E-002 7.3498000000000000E-002 6.2188400000000000E-003
...

```

Rys. 6.3. Fragment pliku zawierającego elementy zbioru  $G^{p06\_25}$

```

Y      !lic - acceptance of the licence terms: Y (yes), N (no)
cub    !domain - domain geometry: cub (cuboids), cyl (cylinder)
al     !isp ISP location: 00, +-, 0-, --, -0, +-, 0+, ++, ff (file), fm (menu), al (SM), rg (RGM)
0.5    !isp_xshift - shift of the ISP from the axis centre in X direction
0.5    !isp_yshift - shift of the ISP from the axis centre in Y direct
0      !ns_rej - number of particles rejected from the top surface
2      !tr_cen - method for calculating the triangle center
1      !char_dim - characteristic dimension for the IL: 1 (l_ave), 2 (d_ave), 0 (ask for method)
2      !il_cor - correction method for the IL: 1 (constant value), 2 (function), 0 (ask for method)
0.5    !il_c_cor - correction coefficient for the constant method
8      !il_a_cor - function parameter a for the function method
1.3    !il_b_cor - function parameter b for the function method
Y      !cr_ar_cor - correction based on critical area of the triangle: Y (yes), N (no)
3      !cr_ar - critical area of the triangle
Y      !smooth - smoothing: Y (yes), N (no)
0.07   !omega_a - a coefficient in the smoothing algorithm
90     !omega_b - b coefficient in the smoothing algorithm
N      !draw_d - drawing particle diameters: Y (yes), N (no)
N      !draw_first - drawing the first tetrahedron:
N      !draw_current - drawing tetrahedrons during calculations or not: Y (yes), N (no)
N      !draw_area - drawing the areas of triangles: Y (yes), N (no)
N      !draw_perimeter - drawing the perimeters of triangles: Y (yes), N (no)
N      !draw_ch - drawing values of correction coefficient (for C_h or C_h_f): Y (yes), N (no)
N      !draw_if - drawing the quality indicator IF: Y (yes), N (no)
N      !draw_normal - drawing angle between normal and Z-axis: Y (yes), N (no)
N      !draw_final - drawing the final path: Y (yes), N (no)
N      !save_csv - save the CSV files: Y (yes), N (no)
Y      !save_dev - save files with path points deviation: Y (yes), N (no)

```

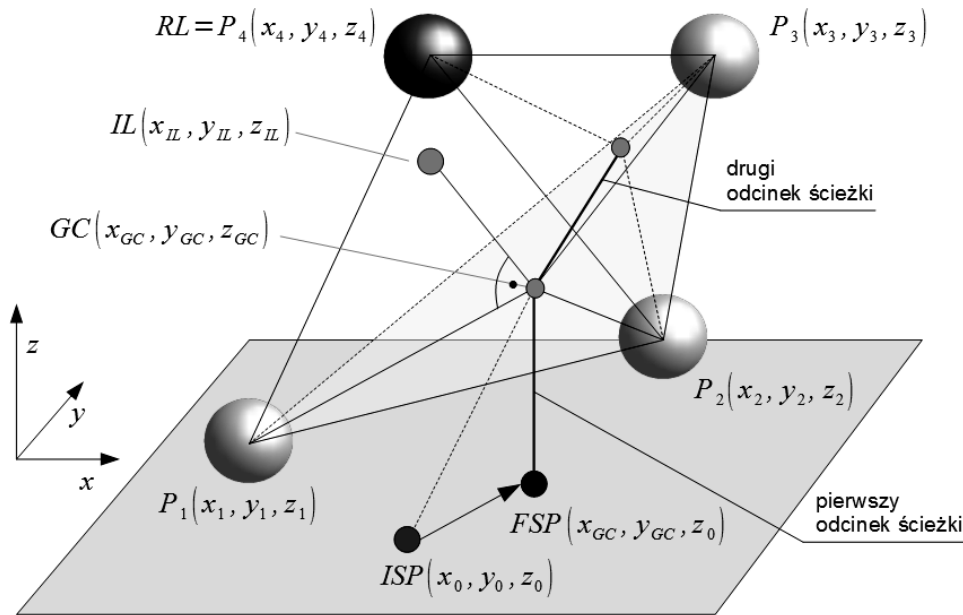
Rys. 6.4. Zawartość pliku konfiguracyjnego przygotowanego na potrzeby analizy zbioru  $G^{p06\_25}$

### 6.2.1. Metoda Śledzenia Ścieżki

Najważniejszą funkcją kodu PathFinder jest możliwość wyliczania krętości geometrycznej za pomocą tzw. Metody Śledzenia Ścieżki (ang. Path Tracking Method, PTM). Jest to iteracyjna metoda wyznaczania długości kanałów porowych w złożu granularnym, w wybranym kierunku przestrzennym, polegająca na analizowaniu lokalnej struktury ułożenia cząstek w oparciu o geometrię wektorową. Metoda PTM została opracowana w roku 2009 przez Wojciecha Sobieskiego - jednego z autorów monografii [17].

Należy uzupełnić, że zaproponowana przez autora nazwa metody może zasadniczo obejmować wszelkie algorytmy o podobnej naturze, tzn. takie, w których na podstawie geometrii wektorowej analizowany jest lokalny układ przestrzeni porowych. W literaturze udało się odszukać tylko jedną zbliżoną metodę, w której w taki właśnie sposób analizowany jest przestrzenny układ kanałków cylindrycznych [19]. Należy uzupełnić, że w literaturze – szczególnie tej dotyczącej analizy obrazów, np. [4,8,21] – znane są różne inne algorytmy śledzące, ale bazują one na geometrii rastrowej, a nie wektorowej.

W metodzie PTM, długość kanałów porowych wyznaczana jest między dwiema równoległymi płaszczyznami (o współrzędnych odpowiadających minimalnej i maksymalnej wartości zakresu osi kierunku głównego, czyli Z), jako suma odcinków jednostkowych, obliczanych na podstawie analizy tzw. struktur czworościennych.



Rys. 6.5. Schemat przedstawiający zasadę działania algorytmu Metody Śledzenia Ścieżki

Algorytm obliczania długości kanału porowego składa się z następujących kroków (Rys. 6.5):

- Wybór na dolnej powierzchni złoża współrzędnych tzw. Wstępnego Punktu Startowego (ang. Initial Starting Point, ISP).
- Wyszukanie w złożu trzech sfer ( $P_1$ ,  $P_2$  i  $P_3$ ) leżących najbliżej względem Wstępnego Punktu Startowego.
- Obliczenie współrzędnych środka ciężkości (ang. Gravity Centre, GC) zarysu przestrzeni porowej leżącej w płaszczyźnie trójkąta utworzonego przez sfery  $P_1$ ,  $P_2$  i  $P_3$  (jest to jednocześnie następny punkt ścieżki).
- Obliczenie współrzędnych tzw. Końcowego Punktu Startowego (ang. Final Starting Point, FSP), stanowiącego jednocześnie pierwszy punkt ścieżki.
- Wyznaczenie normalnej do płaszczyzny trójkąta utworzonego przez sfery  $P_1$ ,  $P_2$  i  $P_3$ .
- Oszacowanie współrzędnych tzw. Idealnej Lokalizacji (ang. Ideal Location, IL), czyli miejsca, w którym powinna znajdować się czwarta sfera tworząca strukturę czworościenną, przy założeniu, że jest to czworościan foremny o boku o długości równej tzw. wymiarowi charakterystycznemu.
- Korekta współrzędnych Idealnej Lokalizacji wynikająca z faktu, że sfery  $P_1$ ,  $P_2$  i  $P_3$  mogą być rozsunięte (w takim przypadku czwarta sfera powinna znaleźć się bliżej płaszczyzny trójkąta utworzonego przez sfery  $P_1$ ,  $P_2$  i  $P_3$ ).
- Wyszukanie w złożu sfery, której środek znajduje się najbliżej punktu IL – jest to tzw. Lokalizacja Rzeczywista (ang. Real Location, RL).
- Usunięcie z obliczeń sfery leżącej najniżej na kierunku głównym (na Rys. 6.5 jest to sfera  $P_1$ ) – pozostałe trzy sfery tworzą trójkąt stanowiący podstawę kolejnej struktury czworościennej.
- Powtarzanie algorytmu – od punktu c) – aż do momentu, w którym odległość między bieżącym punktem IL a górną powierzchnią złoża jest mniejsza niż odległość od IL do najbliższej Lokalizacji Rzeczywistej.
- Obliczenie współrzędnych ostatniego punktu ścieżki, leżącego na górnej powierzchni złoża, w taki sposób, aby ostatni odcinek był do niej prostopadły.
- Obliczenie długości ścieżki ( $L_p$ ) jako sumy długości odcinków łączących wszystkie punkty ścieżki.

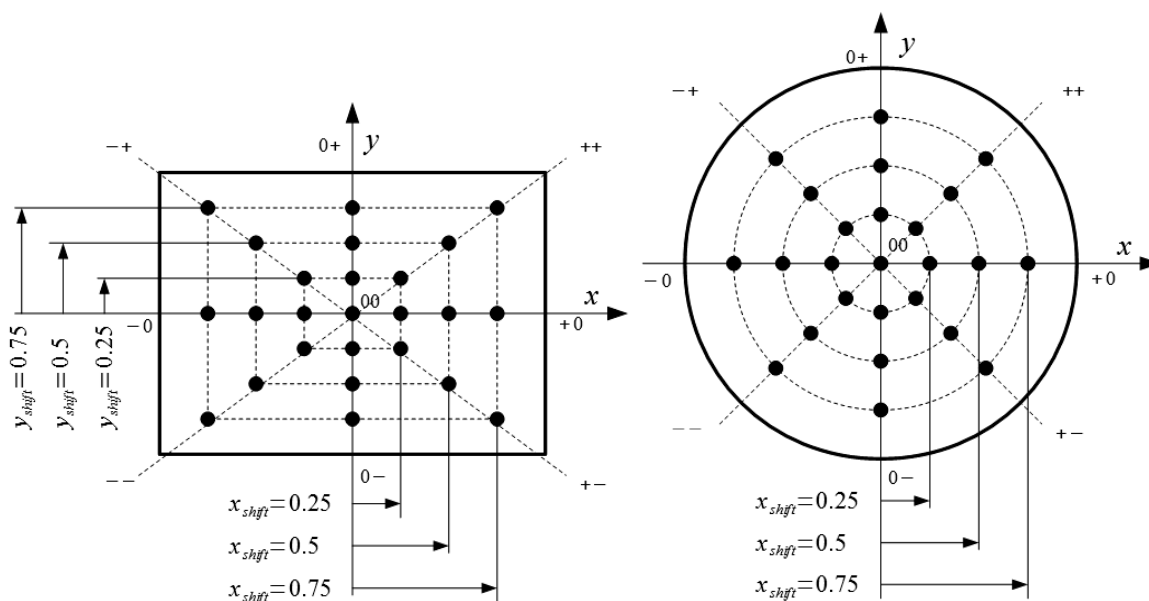
Należy uzupełnić, że Metoda Śledzenia Ścieżki została opracowana do analizy złóż rzeczywistych, przez co posiada pewne ograniczenia:

- wariancja rozkładu wielkości sfer nie może być zbyt duża,
- sfery nie mogą być ułożone regularnie w przestrzeni (np. w postaci siatki strukturalnej).

Badania związane z określeniem dokładnego obszaru możliwych zastosowań metody wciąż trwają, przez co nie są tu podane wartości graniczne porowatości czy wariancji. Wszelkie pojawiające się w trakcie badań problemy obliczeniowe są cały czas analizowane, a kod programu doskonalony, przez co obszary te systematycznie się powiększają.

### 6.2.2. Metoda Standardowa

W standardowym zastosowaniu metody PTM, na dolnej powierzchni złoża wybiera się 25 równomiernie rozlokowanych Wstępnych Punktów Startowych (Rys. 6.6). Każdy z punktów opisany jest symbolem składającym się z dwóch znaków: pierwszy dotyczy osi X, drugi zaś, osi Y. Oba znaki mogą mieć wartość: „-” (ujemna część osi), „+” (dodatnia część osi) lub „0” (punkt zerowy na osi). Kombinacje znaków mogą być następujące: +0, +-, 0-, —, -0, -+, 0+, ++, 00. Oprócz tego, do opisu położenia Wstępnych Punktów Startowych wykorzystano dwie dodatkowe zmienne ( $x_{shift}$  oraz  $y_{shift}$ ), pozwalające na regulowanie odległości Wstępnych Punktów Startowych od środka dolnej powierzchni złoża. W podejściu standardowym, zmienne te przyjmują wartości 0.25, 0.5 oraz 0.75, co umożliwi obliczenie 25 ścieżek. W przypadku złóż o topologii cylindrycznej zmienna  $y_{shift}$  nie jest brana pod uwagę. Szczegóły dotyczące zasad korzystania z Metody Standardowej omówione są w dalszej części rozdziału.

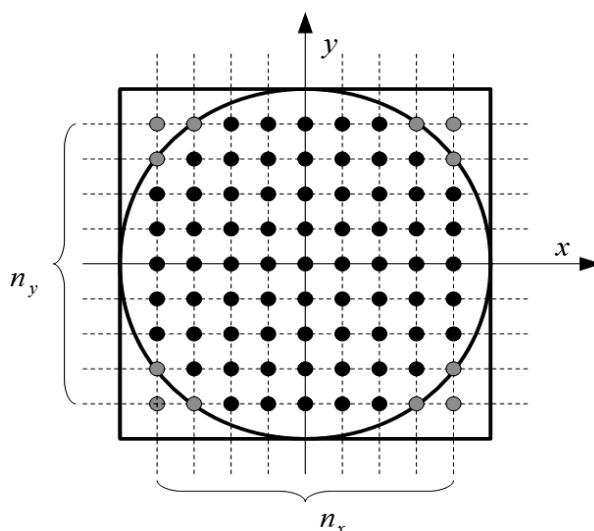


Rys. 6.6. Lokalizacja Wstępnych Punktów Startowych na dolnej powierzchni złoża o topologii prostopadłościennnej (z lewej) oraz cylindrycznej (z prawej)

W kodzie PathFinder po obliczeniu każdej ścieżki zapisywanych jest kilka plików. Posiadają one nazwy składające się z nazwy zadania oraz z symbolu ścieżki, której dotyczą. Dodatkowo, pliki zapisywane są w oddzielnych podkatalogach, o nazwach tworzonych na podstawie zmiennych  $x_{shift}$  i  $y_{shift}$ . Podkatalogi takie tworzone są w katalogu zadania (gdzie zapisuje się wyniki analiz poszczególnych ścieżek) oraz w podkatalogu Comparison (w którym zapisywane są dane zbiorcze). W Metodzie Standardowej występują trzy takie podkatalogi (shift\_25\_25, shift\_50\_50 oraz shift\_75\_75).

### 6.2.3. Metoda Regularnej Siatki

Metodę Śledzenia Ścieżki wykorzystać można również w celu wyznaczenia pola krętości dla całego złoża. W tym celu opracowano, w roku 2015, tzw. Metodę Regularnej Siatki. Polega ona na podziale obu zakresów osi X i Y na regularną siatkę o rozmiarach  $n_x \cdot n_y$  (Rys. 6.7). Współrzędne węzłów tej siatki stanowią kolejne Wstępne Punkty Startowe. W przypadku złoża o topologii cylindrycznej punkty leżące na brzegu złoża lub poza nim, nie są w obliczeniach brane pod uwagę (na rysunku punkty takie zaznaczone są kolorem szarym).



Rys. 6.7. Lokalizacja Wstępnych Punktów Startowych w Metodzie Regularnej Siatki

## 6.3. Konfiguracja zadania

Zbiór ustawień, niezbędnych do wykonania obliczeń w kodzie PathFinder, zdefiniować można ręcznie poprzez edycję wspomnianego już pliku konfiguracyjnego „nazwa\_zadania.dat” (jego zawartość dla omawianego w rozdziale przykładu pokazano wcześniej na Rys. 6.4). W ogólnym przypadku, aby nie tworzyć pliku konfiguracyjnego dla każdego nowego zadania od początku, plik taki można skopiować z innego zadania – należy wówczas pamiętać o zmianie jego nazwy.

Plik konfiguracyjny dla każdego zadania definiuje się tylko raz i później nie ulega on już zazwyczaj zmianom (w praktyce najczęściej zmienia się metodę definiowania punktów ISP). Każdy wpis w pliku konfiguracyjnym zawiera dwa elementy: wartość lub symbol opcji oraz, po znaku wykrzyknika, skrócony opis. Ponieważ, dla osób nie zaznajomionych z programem, opisy mogą wydać się mało zrozumiałe, podczas definiowania ustawień należy wspomóc się odpowiednią dokumentacją (np. Podręcznikiem Użytkownika [X]), lub też nakładką graficzną pathGUI. W dalszej części punktu, przy okazji opisu konfiguracji zadania „p06\_25”, przedstawiono dokładniej to właśnie narzędzie.

### 6.3.1. Nakładka pathGUI

Nakładka graficzna pathGUI jest elementem projektu PathFinder i służy głównie do tworzenia plików konfiguracyjnych. Oprócz tego umożliwia ona uruchamianie kodu PathFinder (za pośrednictwem skryptu powłoki systemowej), skryptów środowiska Gnuplot oraz programu ParaView, przeznaczonego do trójwymiarowej wizualizacji wyników.

Program pathGUI napisany został w wizualnym środowisku programistycznym Lazarus [6], opartym na języku Free Pascal [2], i może być użytkowany w systemach Windows lub Unix/Linux. W przypadku systemów Unix/Linux należy zadbać o to, aby program posiadał

prawo do wykonywania. W przypadku skopiowania skompilowanego programu prawo takie należy nadać ręcznie (np. w terminalu systemu za pomocą instrukcji `chmod`). W przypadku kompilacji kodu źródłowego, prawo do wykonywania nadawane jest przez system operacyjny automatycznie.

### 6.3.2. Obsługa zadań

Okno nakładki składa się z menu głównego, paska narzędziowego oraz pięciu zakładek<sup>7</sup>.



Rys. 6.8. Widok paska narzędziowego nakładki pathGUI

Znaczenie elementów paska narzędziowego jest następujące (Rys. 6.8):

1. Lista zadań – zawiera nazwy wszystkich zdefiniowanych zadań. Zadania te muszą znajdować się w tym samym katalogu (nazywanym dalej katalogiem głównym), w którym jest program PathFinder oraz nakładka pathGUI. Lista zadań przechowywana jest w pliku tekstowym o nazwie „pathGUI.tn” (plik ten w razie potrzeby można edytować ręcznie).
2. Klawisz dodawania zadania do listy. Po jego kliknięciu pojawią się dwa okna z pytaniami o nazwę zadania oraz o liczbę sfer w złożu. Po zatwierdzeniu obu pytań w katalogu głównym tworzony jest katalog zadania oraz skrypt powłoki służący do uruchamiania programu PathFinder. W katalogu zadania utworzony zostanie również plik konfiguracyjny zawierający domyślne ustawienia. Ponieważ program nie wykrywa kształtu złoża, użytkownik zostanie poinformowany o konieczności wyboru rodzaju domeny obliczeniowej (prostokątnościenna czy cylindryczna).
3. Klawisz usuwania zadania z listy. Po jego kliknięciu z listy zadań (pliku „pathGUI.tn”) zostanie usunięte zadanie, którego nazwa wyświetlana jest na liście zadań. Wszystkie pliki związane z wybranym zadaniem pozostaną bez zmian. Usunięte zadanie można znowu dodać do listy zadań w dowolnym czasie.
4. Klawisz zapisywania bieżącej konfiguracji zadania do pliku „nazwa\_zadania.dat”.
5. Klawisz uruchamiania zadania. Kliknięcie klawisza powoduje uruchomienie skryptu powłoki i rozpoczęcie działania programu PathFinder. W przypadku systemów Unix/Linux należy w menu nakładki wybrać pozycję „GUI Settings” i wpisać nazwę powłoki systemowej wraz z odpowiednimi argumentami wywołania (jeśli są potrzebne). Przykładowo, w przypadku systemu xUbuntu jest to polecenie „`xfce4-terminal -x`”. Instrukcja przechowywana jest w pliku „pathGUI.s”.
6. Klawisz wczytywania pliku konfiguracyjnego. Klawisz ten umożliwia skopiowanie ustawień z innego zadania.
7. Klawisz ustawień domyślnych. Należy pamiętać, że po jego użyciu należy sprawdzić, i w razie potrzeby zmienić, rodzaj domeny obliczeniowej.
8. Klawisz zapisywania bieżącej konfiguracji zadania do dowolnego pliku konfiguracyjnego. Po jego kliknięciu pojawi się standardowe dla danego systemu operacyjnego okno służące do zapisywania plików.
9. Lista skryptów Gnuplota. Pozwala ona na uruchomienie wybranego skryptu Gnuplota dla ostatnio obliczanej ścieżki. Skrypty uruchomią się automatycznie pod warunkiem, że pliki „\*.plt” zostały wcześniej skojarzone ze środowiskiem Gnuplot.

<sup>7</sup> Opisy dotyczą wersji 1.2.1.

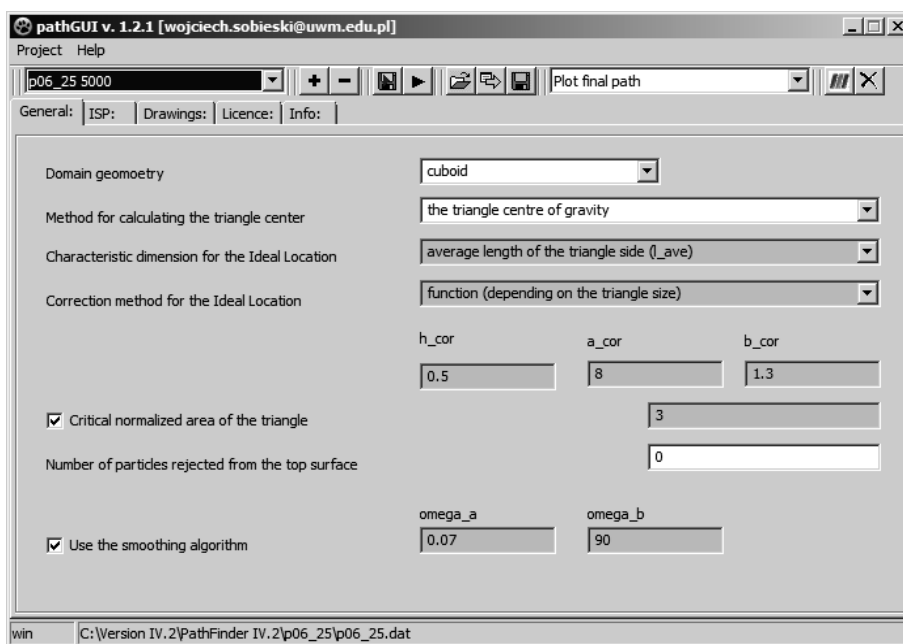


10. Klawisz uruchamiania środowiska ParaView. W systemach Windows poprawne działanie wymaga podania ścieżki dostępu do tego środowiska. Definiowanie ścieżki odbywa się poprzez polecenie „GUI Settings” w menu głównym. Ścieżka przechowywana jest w pliku „pathGUI.s”.
11. Klawisz wyjścia z programu.

### 6.3.3. Zakładki konfiguracyjne

Podstawowe ustawienia zadań definiuje się w nakładce pathGUI na zakładce o nazwie General (Rys. 6.9). Znaczenie poszczególnych pozycji jest następujące:

- Domain geometry – kształt obszaru obliczeniowego. Program PathFinder umożliwia analizę złóż o topologii prostopadłościennej lub cylindrycznej. W przypadku przykładu „p06\_25” złóż ma kształt prostopadłościenny (zobacz Rys. 6.1), co wynika ze sposobu jego generacji Metodą Elementów Dyskretnych w pakiecie YADE.
- Method for calculating the triangle center – metoda wyliczania współrzędnych reprezentujących środek trójkąta utworzonego przez sfery należące do podstawy struktury czworościennej. Możliwe są dwie opcje:
  - Punktem charakterystycznym jest geometryczny środek trójkąta.
  - Punktem charakterystycznym jest środek ciężkości zarysu przestrzeni porowej leżącej w płaszczyźnie trójkąta (opcja zalecana, dodana w roku 2014 [1]).
- Characteristic dimension for the Ideal Location – wymiar charakterystyczny potrzebny do oszacowania położenia opisanej wcześniej Idealnej Lokalizacji. Współrzędne wierzchołka struktury czworościennej wyliczane są przy założeniu, że analizowany czworościan jest czworościanem foremny o boku o długości równej wymiarowi charakterystycznemu. Dostępne są dwie opcje:
  - Wymiarem charakterystycznym jest średnia średnica cząstek (opcja o znaczeniu historycznym, niezalecana).
  - Wymiarem charakterystycznym jest średnia długość boku trójkąta tworzącego podstawę struktury czworościennej (zalecane).



Rys. 6.9. Widok okna nakładki pathGUI i zakładki General

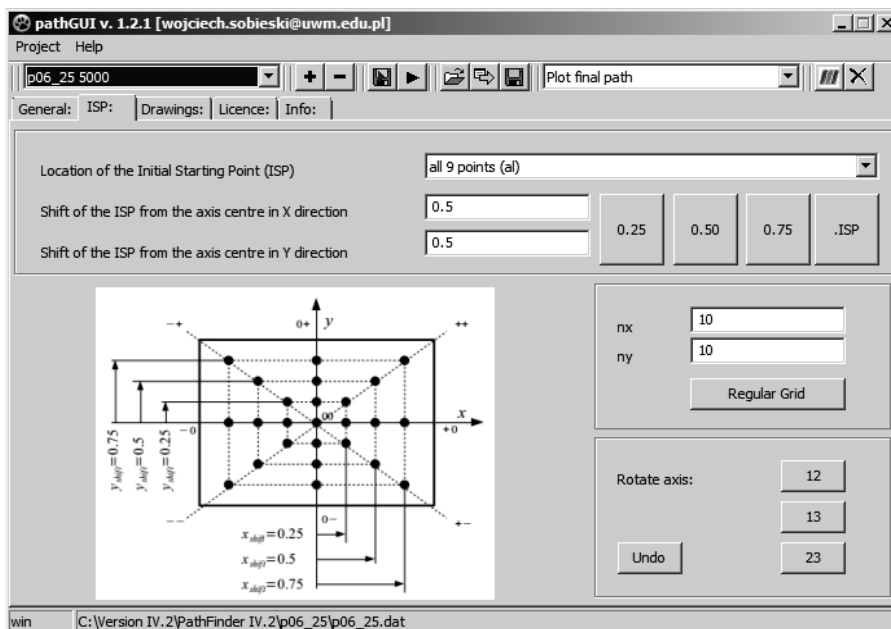
- Correction method for the Ideal Location – metoda korekcji odległości wierzchołka od powierzchni podstawy struktury czworościennej. Wcześniejsze badania wykazały [17], że jakość wyszukiwania (określana na podstawie specjalnego wskaźnika) jest lepsza, jeżeli Idealna Lokalizacja leży bliżej powierzchni podstawy struktury czworościennej, niż wynikałoby to z geometrii czworościanu foremnego. Dzieje się tak, ponieważ w złożach rzeczywistych cząstki nie tworzą w przestrzeni idealnej topologii romboidalnej: cząstki tworzące podstawę są często nieznacznie od siebie odsunięte, przez co czwarta cząstka może się pomiędzy nie częściowo „wsunąć”. Zmniejszenie odległości między płaszczyzną podstawy struktury czworościennej a Idealną Lokalizacją może odbywać się poprzez wartość stałą ( $h_{cor}$ ) lub poprzez funkcję zależną od odległości między sferami tworzącymi podstawę struktury czworościennej. Współczynniki funkcji ( $a_{cor}$  i  $b_{cor}$ ) zostały określone na podstawie wcześniejszych badań [17] i zasadniczo nie powinny być zmieniane.
- Critical normalized area of the triangle – krytyczna znormalizowana wartość powierzchni trójkąta. Wcześniejsze badania wykazały [17], że jeżeli, dla sfer o tych samych średnicach, pole trójkąta utworzonego przez środki nie stykających się sfer jest trzy razy większe niż pole utworzone przez środki sfer stykających się, to czwarta sfera może w całości zmieścić się w środku (pomiędzy sferami tworzącymi podstawę struktury czworościennej). W przypadku złóż o dużej porowatości lub dużej wariancji rozkładu wielkości cząstek, wartość tę powinno się zwiększyć.
- Number of particles rejected from the top surface – liczba elementów zbioru  $G$ , licząc od końca zbioru (a więc od sfer położonych najwyżej na kierunku głównym), które nie będą brane pod uwagę podczas obliczeń. Opcja ta może być wykorzystana w sytuacjach, w których górna powierzchnia złoża nie jest płaska (przez co jest tam więcej pustych przestrzeni niż w innych obszarach złoża) – w takich przypadkach wartość porowatości złoża jest przeszacowana.
- Use the smoothing algorithm – użycie algorytmu wygładzania. Zaznaczenie tej opcji powoduje wyliczenie dodatkowej wartości krętości, z użyciem funkcji zaokrąglającej miejsca połączeń poszczególnych odcinków ścieżki. Opcja ta ma znaczenie historyczne i obecnie nie jest zalecana (jej zaznaczenie nie wpływa w żaden sposób na pozostałe wyniki).

Druga zakładka nakładki pathGUI dotyczy sposobu wybierania Wstępnych Punktów Startowych. Obecnie dostępne są następujące możliwości (Rys. 6.10):

- Brak wyboru. W tej sytuacji użytkownik zostanie poproszony o dokonanie wyboru już po uruchomieniu programu PathFinder.
- Wybór dowolnej lokalizacji z 25 punktów Metody Standardowej na podstawie omówionej wcześniej symboliki znaków („-”, „+” oraz „0”). Po uruchomieniu obliczeń analizowana jest tylko jedna, wybrana ścieżka.
- Wybór wszystkich 9 lokalizacji Metody Standardowej dla bieżących wartości xshift i yshift. (jak na Rys. 6.10). Po uruchomieniu obliczeń ścieżki analizowane są w kolejności: „++”, „0+”, „-+”, „-0”, „--”, „0-”, „+-”, „+0” i „00”. Istotne jest, że dla każdego uruchomienia obliczane są wszystkie te lokalizacje, co oznacza, że ścieżka „00” analizowana jest wielokrotnie (powoduje to, że w niektórych plikach generowanych w podkatalogu Comparison wpisy dla ścieżki „00” się powtarzają i później należy je ręcznie usunąć).
- Wybór lokalizacji na podstawie współrzędnych. Współrzędne definiuje się w pliku tekstowym o nazwie „nazwa\_zadania.isp” umieszczonym w katalogu „nazwa\_zadania”.

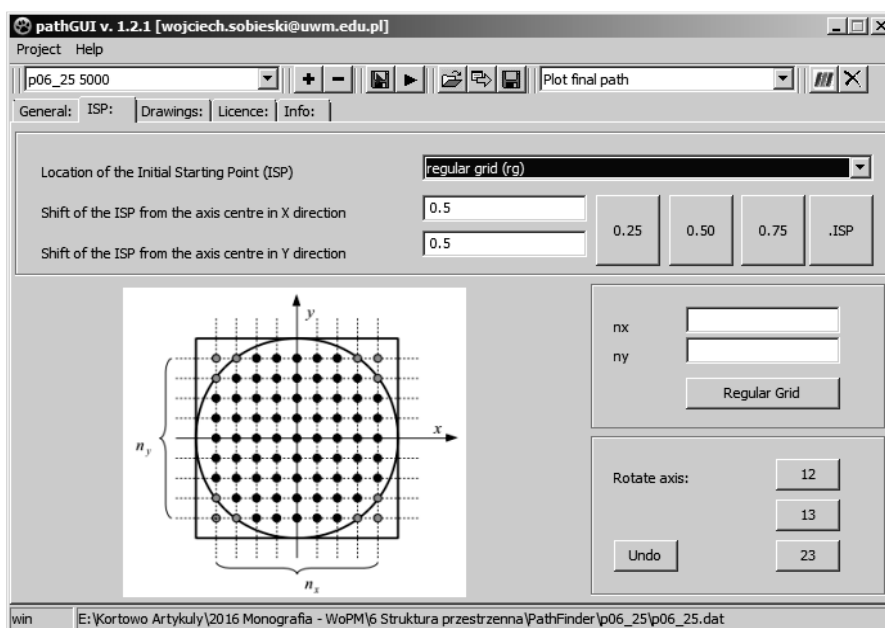
(plik ten należy przygotować ręcznie). Po uruchomieniu obliczeń analizowana jest tylko jedna, wybrana ścieżka.

- Wybór lokalizacji na podstawie regularnej siatki punktów ISP. Liczbę punktów siatki na kierunkach X i Y określa się w odpowiednich oknach. Po kliknięciu klawisza Regular Grid wartości te są zapisywane do pliku „nazwa\_zadania.rg” w katalogu „nazwa\_zadania”.



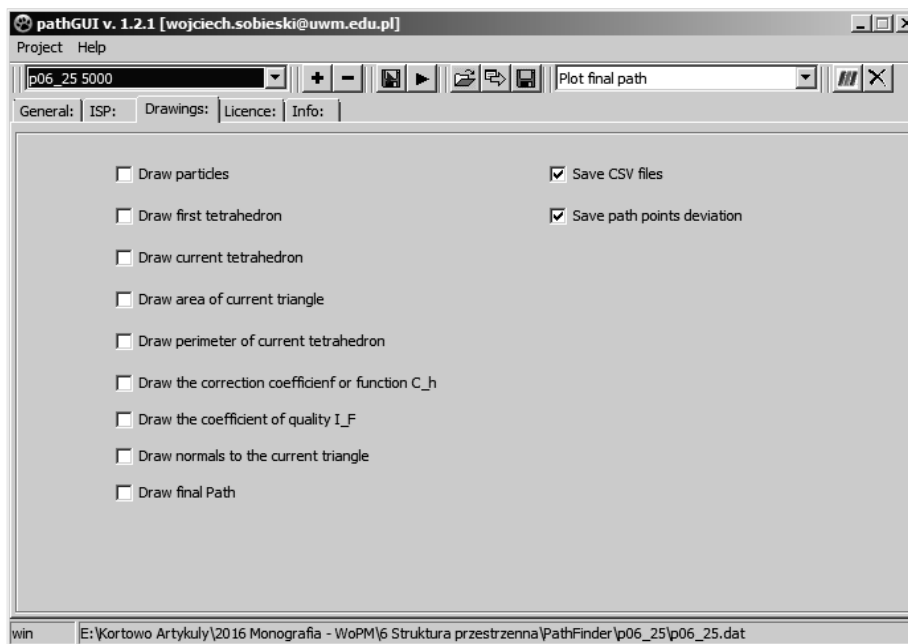
Rys. 6.10. Widok okna nakładki pathGUI i zakładki ISP (wybrana Metoda Standardowa)

Aby ułatwić wybieranie punktów ISP, na zakładce wyświetlany jest schemat punktów startowych dla wybranej konfiguracji. W przypadku Metody Standardowej widoczny jest schemat odpowiedni dla topologii prostopadłościowej (jak na Rys. 6.10) lub cylindrycznej, zaś dla Metody Regularnej Siatki, jeden schemat dla obu przypadków (Rys. 6.11).



Rys. 6.11. Widok okna nakładki pathGUI i zakładki ISP (wybrana Metoda Regularnej Siatki)

Na zakładce ISP dostępna jest jeszcze funkcja umożliwiająca zmianę położenia złoża względem przyjętego układu współrzędnych. Odbywa się to poprzez zamianę kolumn zawierających współrzędne środków sfer w pliku „nazwa\_zadania.in”. Numery widoczne na klawiszach wskazują, które kolumny zostaną zamienione. Opcja ta jest bardzo przydatna gdy chce się analizować ścieżki w innych kierunkach niż pierwotnie założony kierunek główny. Podczas zamiany kolumn tworzona jest kopia zapasowa poprzedniej wersji i można ją odzyskać za pomocą klawisza Undo.



Rys. 6.12. Widok okna nakładki pathGUI i zakładki Drawings

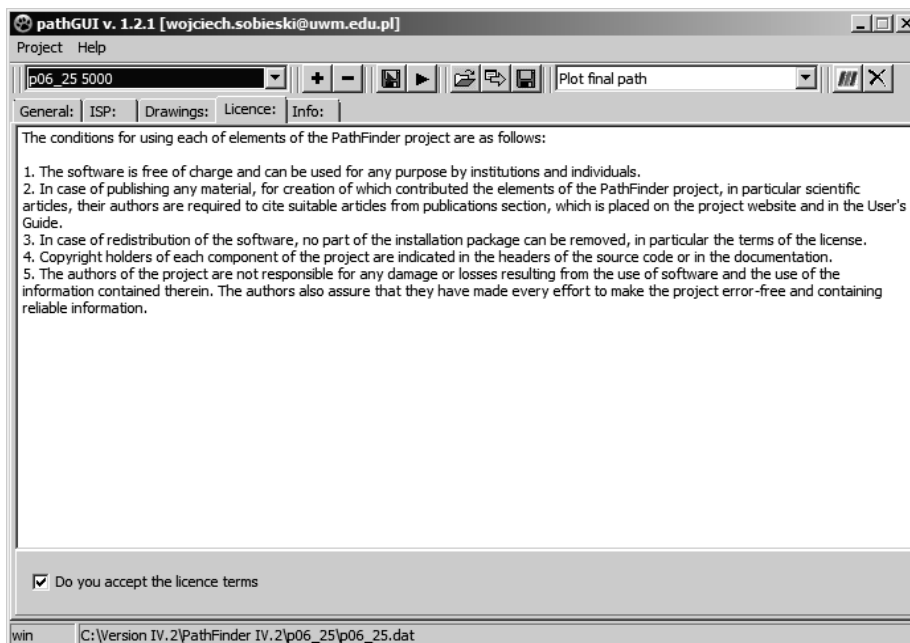
Na zakładce Drawings (Rys. 6.12) wybrać można wykresy, które mają być wizualizowane w trakcie obliczeń. Przy ustawieniach domyślnych wizualizacja wykresów jest wyłączona (poza końcowym rysunkiem ścieżki, czyli opcją „Draw final Path”), gdyż wymagają one ciągłego zamykania okien środowiska Gnuplot, co nie jest wygodne. Poza tym, wykresy te można przejrzeć później, uruchamiając odpowiednie skrypty „\*.plt” (ręcznie bądź za pomocą znajdującej się na pasku narzędziowym listy skryptów). Wyjątkiem jest rysunek przedstawiający bieżący schemat struktury czworościennej wraz z zaznaczonymi punktami charakterystycznymi, gdyż po zakończeniu obliczeń wizualizować można tylko ostatnią strukturę. Chcąc przeanalizować każdą strukturę po kolei należy włączyć opcję „Draw current tetrahedron”, ale należy pamiętać, że rysunków tych może być kilkadziesiąt lub kilkaset, zależnie od rozmiarów złoża, i każdy z nich będzie trzeba później ręcznie zamknąć. Z tego względu przydatna jest opcja „Draw first tetrahedron”, umożliwiająca wizualizację początku ścieżki: pierwszej struktury czworościennej wraz z punktami startowymi (wstępnym i końcowym). Rysunki struktur czworościennych nie są zapisywane na dysku, gdyż ich analiza wymaga zazwyczaj wykonywania obrotów i przeskalowań, co po zapisaniu do pliku graficznego nie jest już możliwe. Poza tym, zapisywanie pełnych danych o każdej strukturze zajmowałoby zbyt dużo miejsca na dysku.

Na zakładce Drawings znajduje się również opcja pozwalająca na generowanie plików w formacie CSV (domyślnie opcja ta nie jest zaznaczana). Po jej wybraniu zapisywane jest w tym formacie złoż oraz punkty tworzące poszczególne ścieżki.

Ostatnia opcja związana jest z zapisywaniem plików zawierających tzw. dewiacje punktów ścieżki. Dewiacja rozumiana jest tu jako odległość bieżącego punktu ścieżki od linii pionowej, wychodzącej z punktu ISP. Jeżeli nie ma potrzeby używania tej opcji należy ją wyłączyć, gdyż

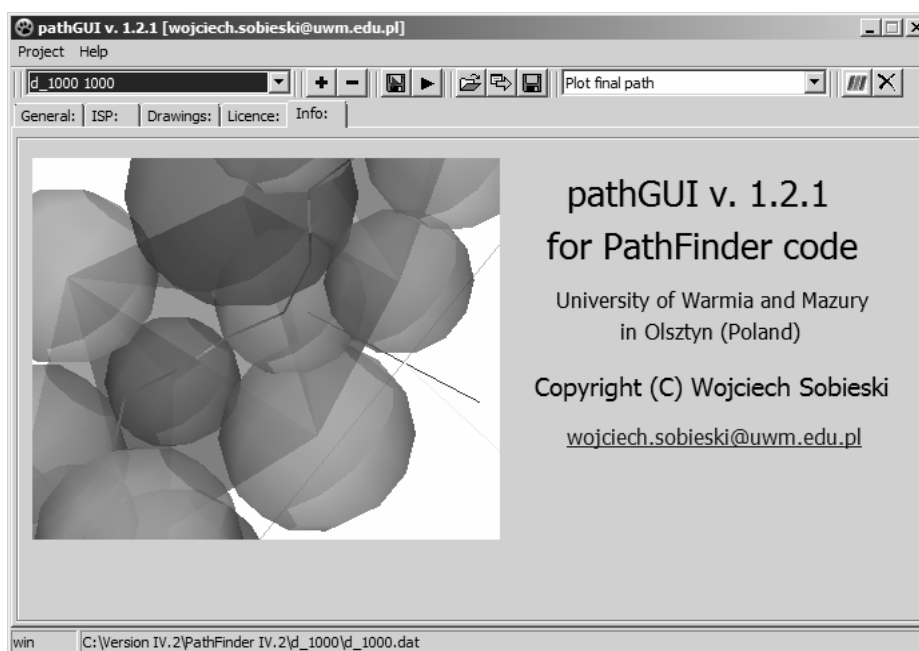
powoduje ona generowanie dużej liczby drobnych plików (szczególnie w Metodzie Regularnej Siatki).

Kolejną zakładką jest zakładka Licence (Rys. 6.13), na której widoczne są warunki korzystania z programu. Znajduje się tam również okienko, które trzeba zaznaczyć, aby legalnie korzystać w programie. Bez zaznaczenia tego okienka program nie będzie wykonywał obliczeń.



Rys. 6.13. Widok okna nakładki pathGUI i zakładki Licence

Ostatnia zakładka nakładki pathGUI ma charakter informacyjny. Znajduje się na niej kontakt do autora oraz afiliacja (Rys 6.14).



Rys. 6.14. Widok okna nakładki pathGUI i zakładki Info

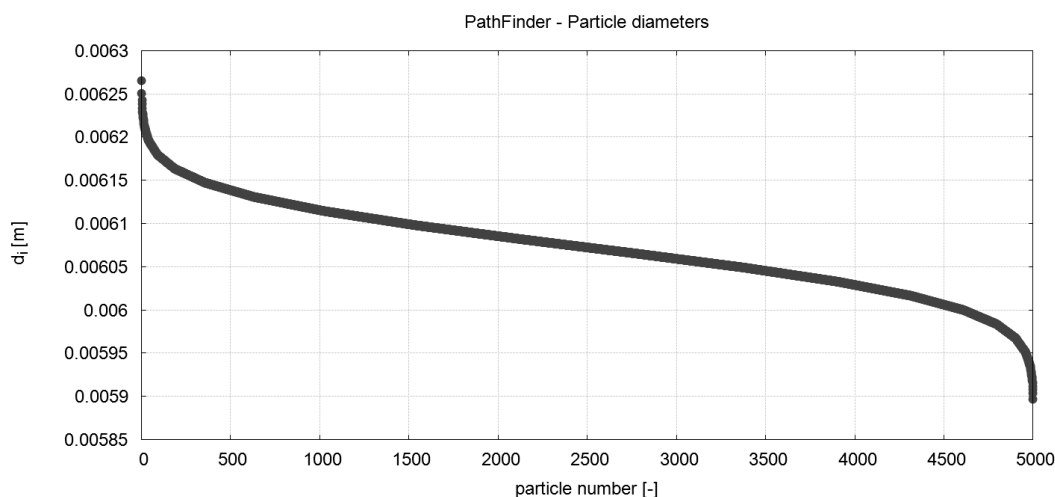
Kończąc opis nakładki pathGUI należy wspomnieć o menu głównym. Zawiera ono dwie grupy opcji: Project, w której tylko opcja „GUI Settings” nie jest powtórzeniem funkcji dostępnych z paska narzędziowego, oraz Help, w której znajdują się odwołania do Podręcznika Użytkownika w formacie PDF, strony autora oraz strony projektu PathFinder.

## 6.4. Wyniki obliczeń

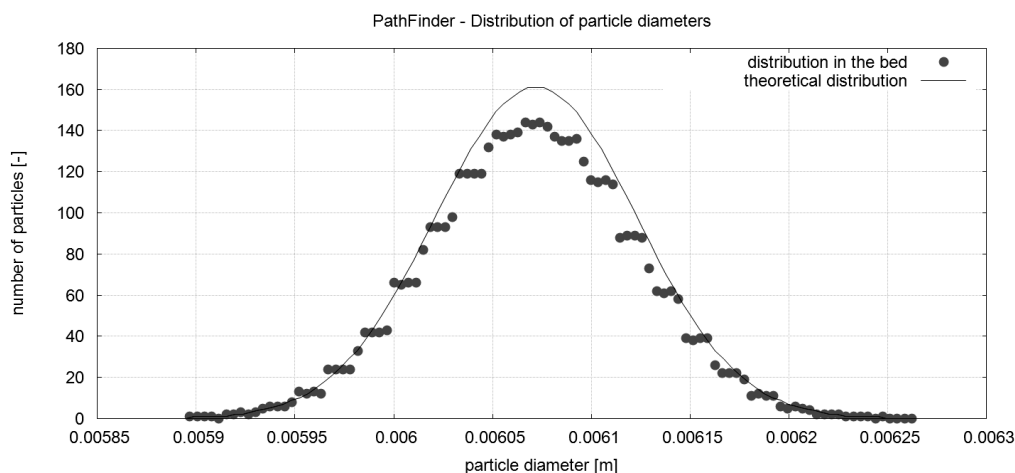
### 6.4.1. Analiza pojedynczej ścieżki

W bieżącym punkcie opisano wyniki analizy pojedynczej ścieżki wyliczonej dla centralnego punktu podstawy złoża (ISP = „00”). Część wyników dotyczy konkretnie tej ścieżki, część zaś całego złoża. Rysunki są zamieszczone i opisane zgodnie z kolejnością ich tworzenia w programie.

Na Rys. 6.15 i 6.16 widoczne są wyniki analizy rozkładu cząstek w złożu. Widać, że rozkład ten ma charakter rozkładu normalnego i jest zbliżony do rozkładu teoretycznego wyznaczonego na podstawie badań eksperymentalnych (zobacz Rozdział 3). Rozkład teoretyczny, widoczny na Rys. 6.16, został dodany ręcznie dla porównania (nie jest to oryginalny rysunek tworzony przez kod PathFinder). Różnice w obu rozkładach są wynikiem zastosowanej w kodzie YADE metody generacji złoża (tzw. Metody Rosnących Cząstek).



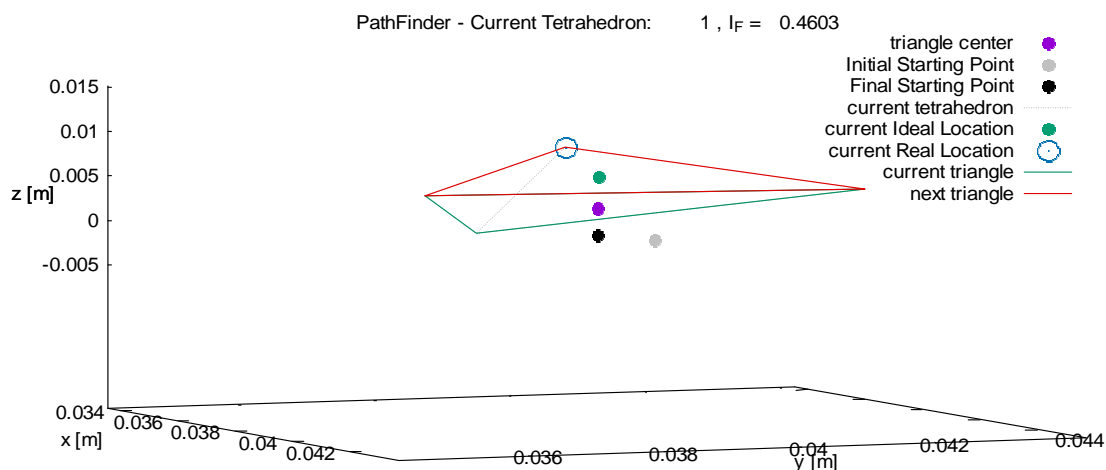
Rys. 6.15. Wyniki analizy rozmiarów cząstek



Rys. 6.16. Wyniki analizy rozmiarów cząstek – rozkład średnic

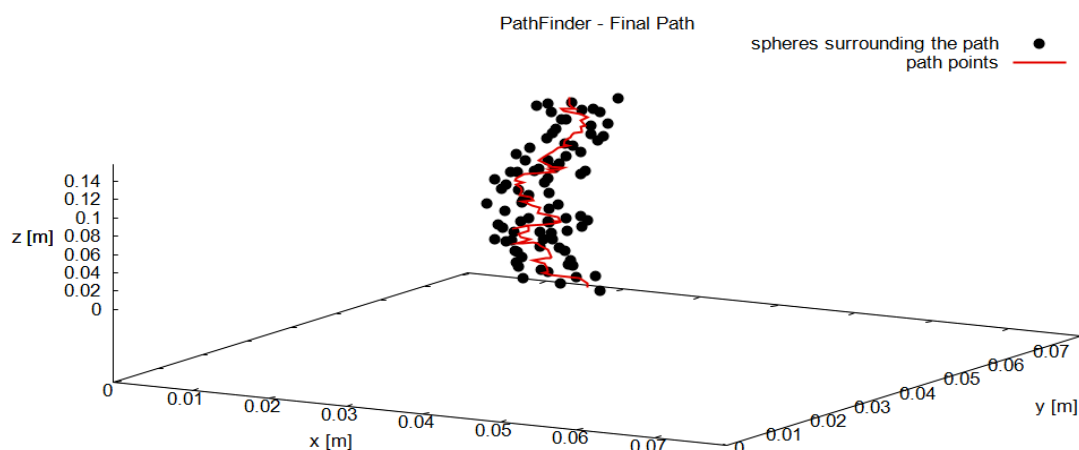
Na Rys. 6.17 przedstawiona jest wizualizacja pierwszej struktury czworościennej. Na rysunku zaobserwować można wszystkie charakterystyczne dla PTM punkty i powierzchnie.

Istotne jest, że rysunki tworzone przez środowisko Gnuplot nie zachowują oryginalnej skali wymiarów (uwaga ta dotyczy wszystkich wykresów funkcji dwóch zmiennych), co może być czasami dość mylące. Do dokładnej wizualizacji wyników, co jest pokazane dalej, należy wykorzystać inne metody.



Rys. 6.17. Widok pierwszej struktury czworościennej wraz z charakterystycznymi punktami

Na Rys. 6.18 widoczna jest (również nie w skali) ścieżka wyliczona w programie wraz ze wszystkimi sferami, które wykorzystane zostały do tworzenia kolejnych struktur czworościennych. Pierwszy punkt ścieżki to opisany wcześniej Finalny Punkt Startowy.



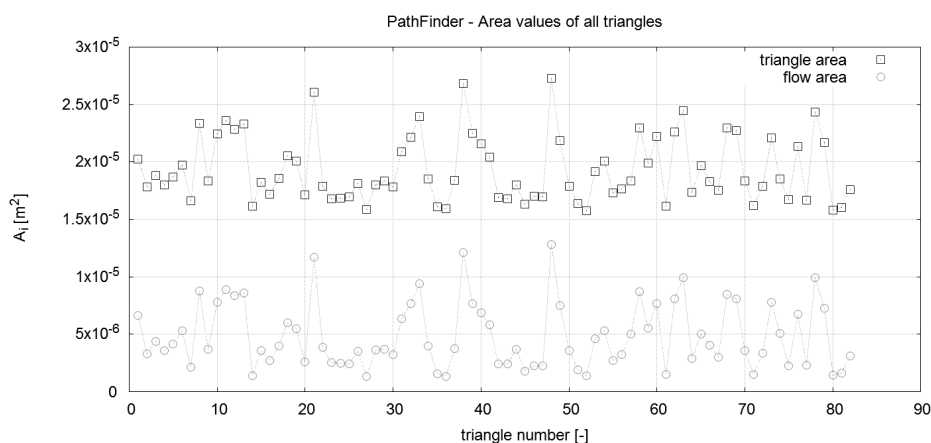
Rys. 6.18. Widok przebiegu ścieżki wraz ze wszystkimi sferami użytymi do tworzenia struktur czworościennych

Podczas analizowania poszczególnych struktur czworościennych wyliczane są różne wielkości dodatkowe – najważniejsze z nich to:

- Pole powierzchni trójkąta utworzonego przez połączenie środków sfer tworzących podstawę struktury czworościennej (Rys. 6.19). Wielkość ta jest potrzebna między innymi do wyznaczenia wartości funkcji korygującej położenie Idealnej Lokalizacji. Średnia wartość tej powierzchni wyniosła dla analizowanej ścieżki  $1.9329E-05$  [m<sup>2</sup>].
- Pole powierzchni zarysu przestrzeni porowej leżącej w płaszczyźnie podstawy struktury czworościennej (Rys. 6.19). Pole to jest potrzebne do wyznaczenia współrzędnych

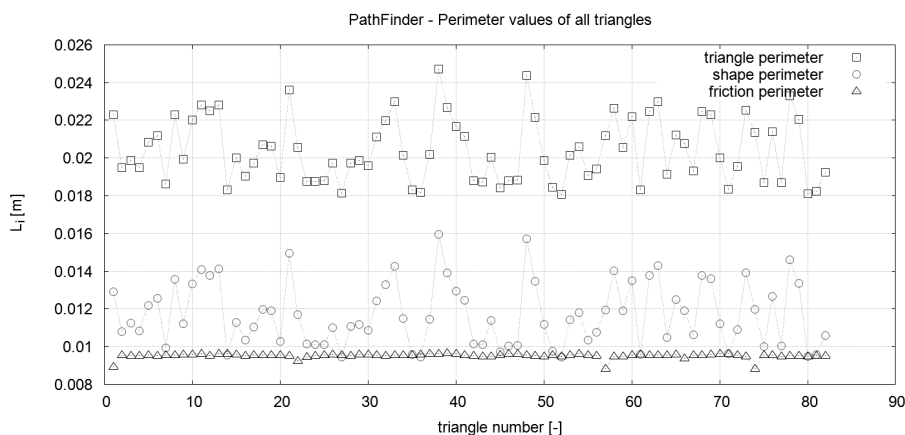
środku ciężkości zarysu przestrzeni porowej. Dla analizowanej ścieżki, średnia wartość tej powierzchni jest równa  $4.8545E-06$  [m<sup>2</sup>]. Z podanych tu liczb wynika, że pole zarysu przestrzeni porowej jest średnio 3.98 razy mniejsze od pola całego trójkąta.

- Długość obwodu trójkąta utworzonego przez połączenie środków sfer tworzących podstawę struktury czworościennej (Rys. 6.20). Wartość ta dla analizowanej ścieżki wynosi średnio  $2.0429E-02$  [m].
- Długość zarysu przestrzeni porowej leżącej w płaszczyźnie podstawy struktury czworościennej (Rys. 6.20). Zarys ten składa się zawsze z trzech odcinków prostych, leżących na bokach trójkąta podstawy, oraz trzech łuków okręgów, należących do powierzchni sfer tworzących podstawę. Średnia wartość tego parametru wynosi w przykładzie  $1.1711E-02$  [m]. Okazuje się, że w przykładzie obwód trójkąta jest średnio 1.74 razy krótszy niż obwód całego trójkąta.
- Sumaryczna długość linii (trzech łuków okręgów) leżących na granicy sfer i przestrzeni porowej (Rys. 6.20). Średnia wartość tego parametru wynosi  $9.5216E-03$  [m]. Stanowi to zatem średnio 81% długości zarysu przestrzeni porowej i 47% całego obwodu trójkąta podstawy.



Rys. 6.19. Wykres pól powierzchni obliczanych w płaszczyźnie podstawy struktury czworościennej

Przedstawione tu liczby odczytane zostały z pliku „p06\_25\_00.res” (ostatnia część nazwy wskazuje, dla jakiej ścieżki są to wyniki, tu dla ISP = „00”). Plik ten zawiera różne wyniki związane z kolejnymi strukturami czworościennymi i łatwo daje się otworzyć w popularnych arkuszach kalkulacyjnych.



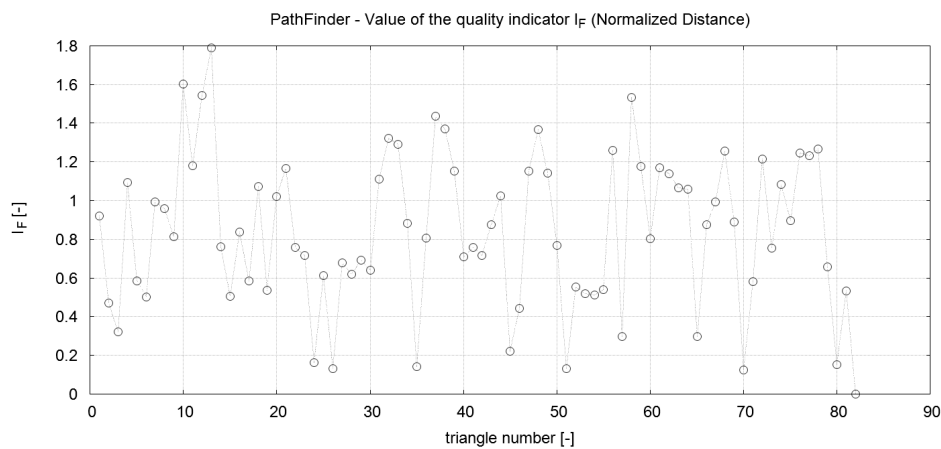
Rys. 6.20. Wykres obwodów obliczanych w płaszczyźnie podstawy struktury czworościennej



Aby określić skuteczność wyszukiwania kolejnych Realnych Lokalizacji zdefiniowano specjalny wskaźnik jakości (w wersji IV.3 definicja tego wskaźnika uległa niewielkiej zmianie: wcześniej zamiast  $d_4$  we wzorze wykorzystywano średnią średnicą sfer tworzących podstawę  $d_{ave}$ )

$$I_F = \frac{\sqrt{(x_{IL} - x_4)^2 + (y_{IL} - y_4)^2 + (z_{IL} - z_4)^2}}{0.5 \cdot d_4}, \quad (6.2)$$

gdzie:  $I_F$  - wskaźnik jakości wyszukiwania Realnych Lokalizacji [-],  $x_{IL}$ ,  $y_{IL}$ ,  $z_{IL}$  - współrzędne punktu odpowiadające Idealnej Lokalizacji [m],  $x_4$ ,  $y_4$ ,  $z_4$  - współrzędne środka sfery uznanej przez algorytm jako Realna Lokalizacja [m],  $d_4$  - średnica sfery uznanej przez algorytm jako Realna Lokalizacja [m].

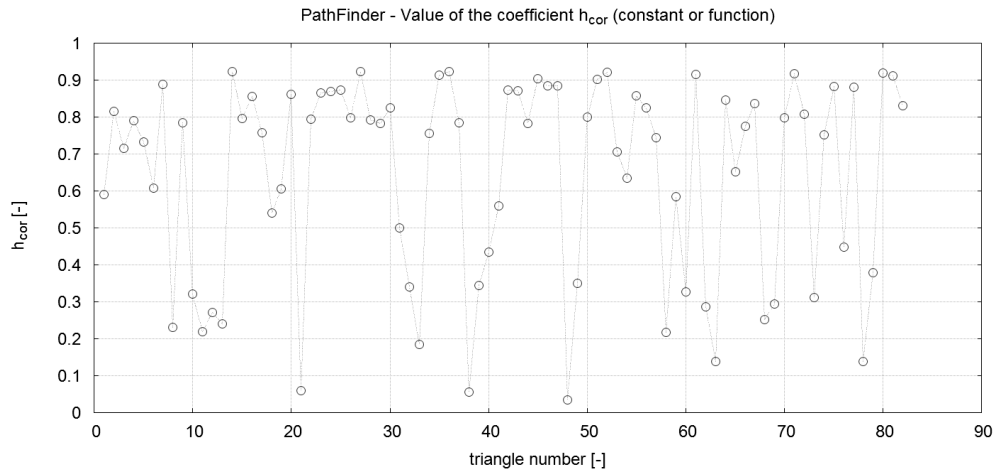


Rys. 6.21. Wykres wartości wskaźnika jakości wyszukiwania Realnych Lokalizacji

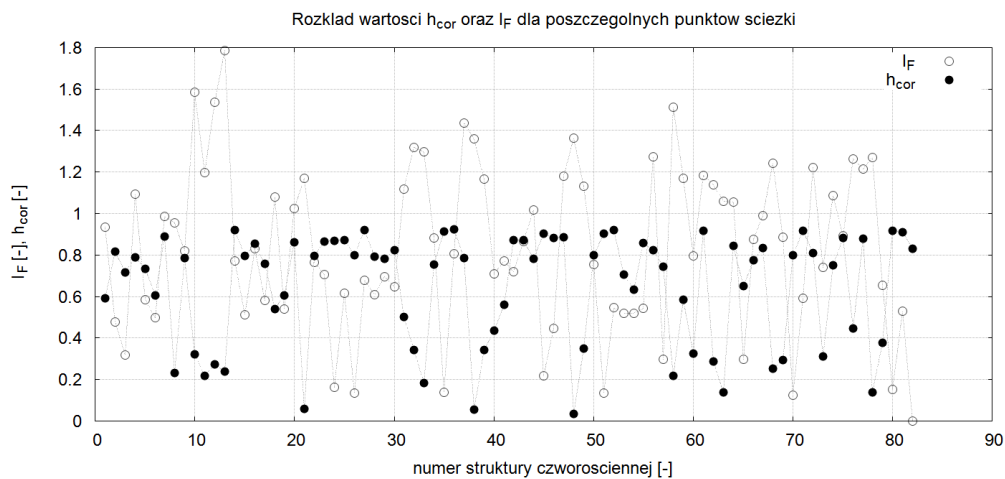
Jeżeli wartość wskaźnika jest mniejsza od jedności lub jej równa, oznacza to, że punkt IL znajduje się wewnątrz rzeczywistej sfery (odległość do środka sfery jest mniejsza niż jej promień) lub na jej powierzchni. W przeciwnym wypadku punkt IL znajduje się w przestrzeni porowej.

Wartości wskaźnika jakości dla analizowanej ścieżki przedstawiono na Rys. 6.21. Okazuje się, że w 51 przypadkach na 82 (co daje 62.2%), punkt IL znajduje się wewnątrz kolejnej sfery. Najlepszą i najgorszą jakością wyszukiwania odnotowano w strukturach nr 70 oraz 13, dla których wartości wskaźnika jakości wyniosły odpowiednio 0.126 oraz 1.786. Średnia wartość wskaźnika dla całej ścieżki wyniosła 0.84.

Na Rys. 6.22 przedstawiono wartości współczynnika korygującego odległość Idealnej Lokalizacji od powierzchni trójkątów tworzących podstawy kolejnych struktur czworościennych. Można wnioskować, że im bardziej bieżąca struktura czworościenna odbiega kształtem od czworościanu foremego, tym bardziej trzeba skorygować położenie Idealnej Lokalizacji – co przekłada się na pogorszenie wskaźnika jakości. Związek ten widoczny jest szczególnie na Rys. 6.23 (wykonanym dodatkowo), na którym najgorsze wartości wskaźnika wyszukiwania (największe) odpowiadają czworościanom, w których dokonano największej korekty położenia Idealnej Lokalizacji. Ponownie wyróżnia się tu, zauważona już wcześniej, struktura nr 13. Średnia wartość współczynnika korekcyjnego dla całej ścieżki wynosi 0.65.

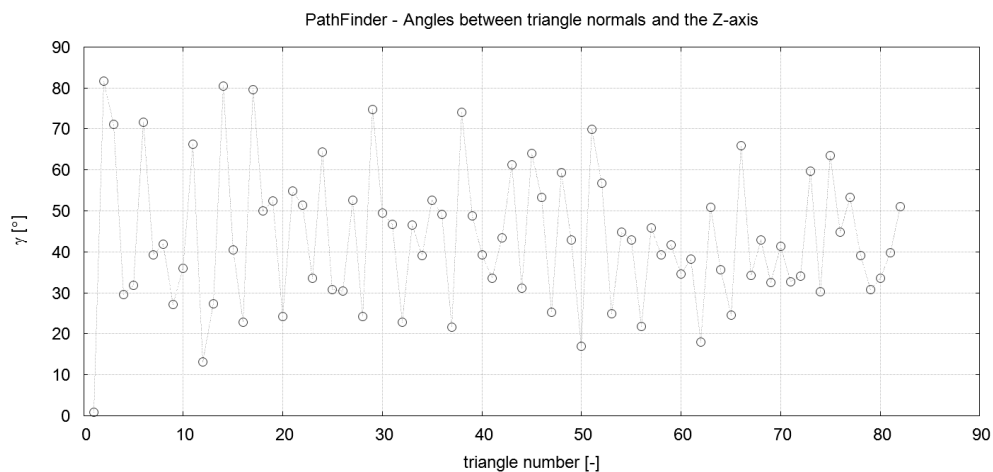


Rys. 6.22. Wykres wartości funkcji korygującej położenie Idealnej Lokalizacji



Rys. 6.23. Wizualizacja związków między wartością współczynnika korekcji a wskaźnikiem jakości wyszukiwania

Na Rysunku 6.24 umieszczone są wartości kątów, jakie tworzą się między kolejnymi odcinkami ścieżki a osią Z. Widać, że w niektórych przypadkach ścieżka wyraźnie zmienia kierunek – w skrajnych przypadkach na kierunek prawie prostopadły do kierunku wyznaczonego przez oś Z. Średnia wartość kąta dla analizowanej ścieżki wynosi 43.23 [°].



Rys. 6.24. Wykres wartości kątów utworzonych przez sąsiednie odcinki ścieżki

```

-----
| PathFinder code - Copyright (C) Wojciech Sobieski 2009-2016 |
-----

Final report (the bed):

domain geometry           : cuboids
X-axis range              [m] : -0.000143      0.079332
Y-axis range              [m] : -0.000124      0.079291
Z-axis range              [m] : -0.000097      0.158477
bed size in X-direction  [m] : 0.079475
bed size in Y-direction  [m] : 0.079415
bed size in Z-direction  [m] : 0.158574
number of particles      [-] : 5000
min. diameter            [m] : 0.005897
max. diameter            [m] : 0.006266
average diameter         [m] : 0.006072

Final report (settings):

location of the Initial Starting Point (ISP) : 00
number of particles rejected from the top surface : 0
method for calculating the triangle center : gc
characteristic dimension for the Ideal Location : l_ave
correction method for the Ideal Location (IL) : function
correction coefficient for the constant method : 0.5000
function parameter a for the function method : 8.0000
function parameter b for the function method : 1.3000
correction based on critical area of the triangle : Yes
critical normalized area of the triangle : 3.00
use the smoothing algorithm : Yes
function parameter a for the smoothing function : 0.0700
function parameter b for the smoothing function : 90.0000

Final report (results):

number of path points          [-] : 84
number of path rejected points [-] : 0
number of corrected triangles [-] : 0
bed height                    [m] : 0.158570
length of the path             [m] : 0.189968
length of the path after smoothing [m] : 0.183787
tortuosity                    [m/m] : 1.198012
tortuosity after smoothing     [m/m] : 1.159032
average angle between path sections [^\circ] : 142.084619
inner surface of the solid body [m^2] : 0.579236
specific surface of the porous body (K) [1/m] : 578.764248
specific surface of the porous body {C} [1/m] : 987.953544
volume of the bed              [m^3] : 0.001001
volume of the solid part       [m^3] : 0.000586
volume of the porous body     [m^3] : 0.000415
porosity                      [m^3/m^3] : 0.414179
packing coefficient            [m^3/m^3] : 0.585821

Ergun A                      [1/m^2] : 19649597.005455
Ergun 2*B                    [1/m] : 4752.450777
Kozeny-Carman (C_KC=1)      [1/m^2] : 6766473.535653
The time of calculations     [s] : 4.165227

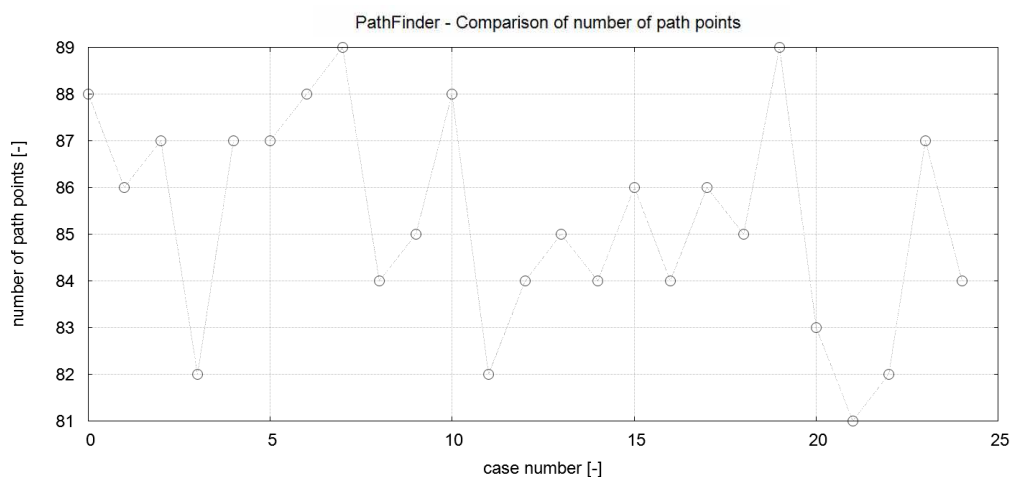
```

Rys. 6.25. Raport końcowy programu PathFinder

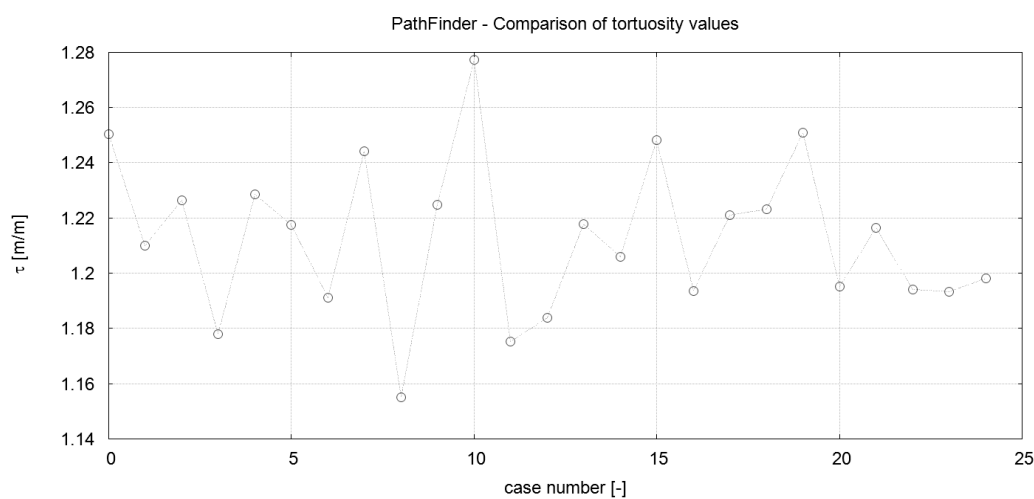
Każde uruchomienie programu kończy się raportem końcowym. Raport ten zawiera trzy grupy informacji. Pierwsza dotyczy wymiarów złoża oraz rozmiarów cząstek, druga ustawień zadania, trzecia zaś wyników obliczeń. Raport końcowy tworzony jest oddzielnie dla każdej ścieżki, za wyjątkiem Metody Regularnej Siatki (ze względu na oszczędność miejsca na dysku).

#### 6.4.2. Analiza standardowa

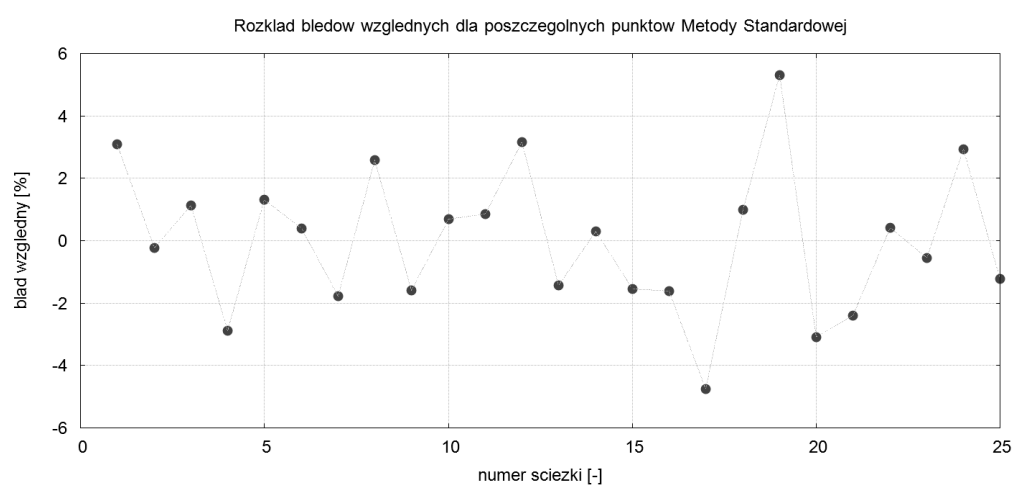
Zastosowanie Metody Standardowej pozwala na uzyskanie większej liczby informacji o złożu, w szczególności na wyliczenie bardziej reprezentatywnej dla całego złoża wartości krętości. Na Rys. 6.26 oraz 6.27 przedstawiono odpowiednio: liczbę punktów ścieżki oraz wartość krętości dla każdej z 25 analizowanych ścieżek (wartość średnia wyniosła 1.2128 [m/m]). Błąd względny między poszczególnymi wartościami krętości a jej wartością średnią nie przekraczał kilku procent (Rys. 6.28).



Rys. 6.26. Liczba punktów wyliczona dla poszczególnych ścieżek



Rys. 6.27. Wartość krętości wyliczona dla poszczególnych ścieżek



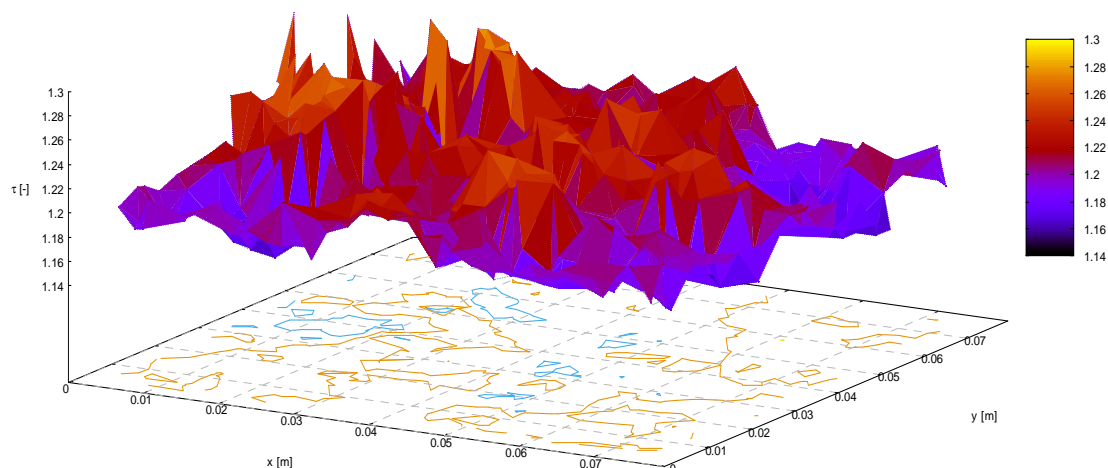
Rys. 6.28. Błąd względny krętości

Do wyliczenia wartości średnich posłużono się danymi zapisanymi w podkatalogu Comparison, w którym znajdują się między innymi pliki „Comparison.txt” oraz

„Comparison\_isp.txt”. Są to pliki tekstowe, jednak poszczególne kolumny rozdzielone są znakiem tabulacji, przez co łatwo można je otworzyć w popularnych arkuszach kalkulacyjnych.

### 6.4.3. Analiza pola krętości

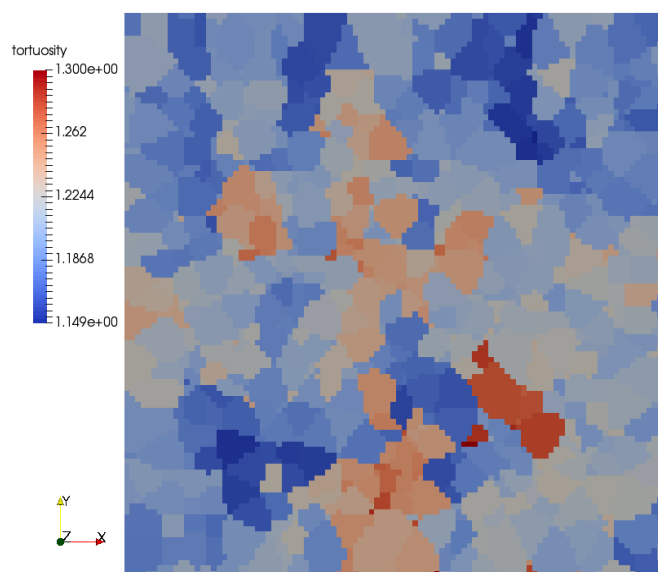
Prawie wszystkie wielkości charakteryzujące strukturę przestrzenną złoża przyjmują, dla tego samego przypadku obliczeniowego, zawsze te same wartości. Wyjątkiem jest krętość, którą wyliczyć można na kilka sposobów. Na Rys. 6.29 przedstawiono pole krętości, uzyskane Metodą Regularnej Siatki. Liczba punktów siatki na kierunkach X i Y była taka sama i wyniosła 100.



Rys. 6.29. Pole krętości wyznaczone na podstawie siatki o rozmiarach 100 x 100 punktów ISP

Średnia wartość krętości, wyliczona z 10000 wartości jednostkowych, wyniosła 1.2053 [m/m]. Przyjmując tę wartość jako wartość dokładną, procentowe błędy względne wyliczone dla krętości średniej z Metody Standardowej oraz krętości wyliczonej dla pojedynczej ścieżki wynoszą odpowiednio 0.62 i 0.60%. Wartości minimalne i maksymalne w polu krętości wyniosły 1.1492 oraz 1.2995. Daje to w odniesieniu do wartości średniej, błędy – odpowiednio – 4.65 i 7.82%.

Podczas obliczeń Metodą Regularnej Siatki tworzony jest dodatkowo plik VTK pozwalający na przedstawienie mapy krętości. Jak widać z Rys. 6.30, parametr ten nie jest stały w całej objętości złoża.



Rys. 6.30. Mapa krętości wyznaczone na podstawie siatki o rozmiarach 100 x 100 punktów ISP

## 6.5. Podsumowanie

W rozdziale zaprezentowano sposób wyznaczania elementów zbioru  $\Phi$ , charakteryzującego geometryczne właściwości granularnego ośrodka porowatego (zobacz Rozdział 1). Zbiór ten określony został na podstawie raportu końcowego generowanego przez program PathFinder oraz plików zawierających wyniki obliczeń. Zestawienie wartości elementów tego zbioru dla przykładu „p06\_25” przedstawiono w Tabeli 6.1. W Tabelach 6.2 oraz 6.3 przedstawiono analogiczne zestawienie dla zbiorów „p04\_25” oraz „p08\_25”.

Tabela 6.1. Wartości elementów zbioru  $\Phi$  wyliczone dla zadania „p\_06\_25”

Nazwa	Symbol	Wartość	Jednostka	Źródło
Średnia średnica cząstki	$d$	0.006072	[m]	raport
Objętość złoża	$V$	0.001003	[m <sup>3</sup> ]	raport
Sumaryczna objętość porów	$V_p$	0.000416	[m <sup>3</sup> ]	raport
Sumaryczna objętość cząstek stałych	$V_s$	0.000586	[m <sup>3</sup> ]	raport
Porowatość	$\phi$	0.415277	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	raport
Współczynnik upakowania	$\varepsilon$	0.584723	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	raport
Grubość warstwy, na której liczona jest krętość	$L_0$	0.158744	[m]	raport
Krętość średnia (gometryczna)	$\tau^g$	1.2083	[m/m]	średnia z RGM
Zewnętrzna powierzchnia cząstek	$S_s$	0.579197	[m <sup>2</sup> ]	raport
Powierzchnia specyficzna (wg Kozeny)	$S_{0,Kozeny}$	577.699217	[1/m]	raport
Powierzchnia specyficzna (wg Carmana)	$S_{0,Carman}$	987.987388	[1/m]	raport

Tabela 6.2. Wartości elementów zbioru  $\Phi$  wyliczone dla zadania „p\_04\_25”

Nazwa	Symbol	Wartość	Jednostka	Źródło
Średnia średnica cząstki	$d$	0.003929	[m]	raport
Objętość złoża	$V$	0.000270	[m <sup>3</sup> ]	raport
Sumaryczna objętość porów	$V_p$	0.000111	[m <sup>3</sup> ]	raport
Sumaryczna objętość cząstek stałych	$V_s$	0.000159	[m <sup>3</sup> ]	raport
Porowatość	$\phi$	0.411064	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	raport
Współczynnik upakowania	$\varepsilon$	0.588936	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	raport
Grubość warstwy, na której liczona jest krętość	$L_0$	0.102446	[m]	raport
Krętość średnia (gometryczna)	$\tau^g$	1.2109	[m/m]	średnia z RGM
Zewnętrzna powierzchnia cząstek	$S_s$	0.242491	[m <sup>2</sup> ]	raport
Powierzchnia specyficzna (wg Kozeny)	$S_{0,Kozeny}$	899.247403	[1/m]	raport
Powierzchnia specyficzna (wg Carmana)	$S_{0,Carman}$	1526.901520	[1/m]	raport

Tabela 6.3. Wartości elementów zbioru  $\Phi$  wyliczone dla zadania „p\_08\_25”

Nazwa	Symbol	Wartość	Jednostka	Źródło
Średnia średnica cząstki	$d$	0.007909	[m]	raport
Objętość złoza	$V$	0.002217	[m <sup>3</sup> ]	raport
Sumaryczna objętość porów	$V_p$	0.000921	[m <sup>3</sup> ]	raport
Sumaryczna objętość cząstek stałych	$V_s$	0.001296	[m <sup>3</sup> ]	raport
Porowatość	$\phi$	0.415443	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	raport
Współczynnik upakowania	$\varepsilon$	0.584557	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	raport
Grubość warstwy, na której liczona jest krętość	$L_0$	0.206743	[m]	raport
Krętość średnia (geometryczna)	$\tau^g$	1.2105	[m/m]	średnia z RGM
Zewnętrzna powierzchnia cząstek	$S_s$	0.982829	[m <sup>2</sup> ]	raport
Powierzchnia specyficzna (wg Kozeny)	$S_{0,Kozeny}$	443.281070	[1/m]	raport
Powierzchnia specyficzna (wg Carmana)	$S_{0,Carman}$	758.319158	[1/m]	raport

Materiał przedstawiony w rozdziale można podsumować następująco:

- Istnieje możliwość wyliczenia wielu różnych parametrów charakteryzujących strukturę przestrzenną złóż granularnych na podstawie danych wektorowych (współrzędnych środków sfer oraz ich średnic).
- Istnieje możliwość stworzenia jednego narzędzia obliczeniowego wspomagającego analizę struktury przestrzennej złóż granularnych.
- Sposób przygotowania danych do analizy (zbioru  $G$ ) nie ma znaczenia dla działania stworzonego oprogramowania.
- Większość parametrów wyznaczyć można z prostych zależności matematycznych. Wyjątkiem jest krętość, której wyznaczenie wymagało opracowanie specjalnego algorytmu.
- Metodę Śledzenia Ścieżki wykorzystać można na kilka sposobów: do analizy pojedynczej ścieżki, wielu ścieżek w wybranych obszarach złoza (np. Metodą Standardową), lub też do regularnej analizy całego złoza (Metodą Regularnej Siatki).
- Krętość nie jest parametrem stałym w przestrzeni, lecz zależy od lokalnej konfiguracji cząstek w poszczególnych obszarach złoza.
- Można wnioskować (ze względu na zakładane często w literaturze silne związki między krętością a porowatością), że skoro krętość zmienia się w różnych obszarach złoza, to prawdopodobnie różna jest również w nich i porowatość. Ponieważ w pracy [18] wykazano, że wrażliwość (liczona wg teorii z prac [13,16]) modelu Forchheimera na zmianę porowatości jest nieliniowa i niesymetryczna, to można przypuszczać, że i lokalne opory przepływu w różnych obszarach złoza są różne. Prowadzi to do konkluzji, że poprawne modelownie przepływów przez ośrodki porowate – a przynajmniej granularne – wymagać będzie posługiwania się nie wartościami skalarnymi porowatości, krętości itp., a polami tych parametrów.
- W dostępnej literaturze brak jest odpowiedników Metody Śledzenia Ścieżki dla złóż granularnych.

## Literatura

1. Dudda W., Sobieski W.: Modification of the PathFinder algorithm for calculating granular beds with various particle size distributions. Tech Sci 2014, 17(2), 135-148.
2. Free Pascal [on-line]. URL: <http://www.freepascal.org/> (dostęp 1 lutego 2016).
3. GCC, the GNU Compiler Collection [on-line]. URL: <https://gcc.gnu.org/> (dostęp 1 lutego 2016).

4. Gommes C.J., Bons A.J., Blacher S., Dunsmuir J.H., Tsou A.H.: Practical methods for measuring the tortuosity of porous materials from binary or gray-tone tomographic reconstructions. *AIChE J* 2009, 55 (8), 2000-2012.
5. Gnuplot homepage [on-line]. URL: <http://www.gnuplot.info/> (dostęp 1 lutego 2016).
6. Lazarus [on-line]. URL: <http://www.lazarus-ide.org/> (dostęp 1 lutego 2016).
7. MayaVi Project [on-line]. URL: <http://code.enthought.com/projects/mayavi/#Mayavi> (dostęp 1 lutego 2016).
8. Nakashima Y., Kamiya S.: Mathematica Programs for the Analysis of Three-Dimensional Pore Connectivity and Anisotropic Tortuosity of Porous Rocks using X-ray Computed Tomography Image Data. *J Nucl Sci Tech* 2007, 44(9), 1233-1247.
9. ParaView [on-line]. URL: <http://www.paraview.org/> (dostęp 1 lutego 2016).
10. PathFinder Home Page [on-line]. URL: <http://www.uwm.edu.pl/pathfinder/> (dostęp 1 lutego 2016).
11. PFC3D, Itasca Consulting Group [on-line]. URL: <http://www.itascacg.com/> (dostęp 1 lutego 2016).
12. Sobieski W., Dudda W., Lipiński S.: A new approach for obtaining the geometric properties of a granular porous bed based on DEM simulations. *Tech Sci* 2016 (w druku).
13. Sobieski W., Dudda W.: Sensitivity Analysis as a Tool for Estimating Numerical Modeling Results. *Dry Technol*, 2014, 32(2), 145-155.
14. Sobieski W.: Edi Projekt [on-line]. URL: <http://pracownicy.uwm.edu.pl/wojsob/> (dostęp 1 lutego 2016).
15. Sobieski W., Lipiński S.: PathFinder User's Guide. University of Warmia and Mazury in Olsztyn (Poland), 2013.
16. Sobieski W.: Numerical analysis of sensitivity of Eulerian Multiphase Model for a spouted bed grain dryer. *Dry Technol* 2008, 26(12), 1438-1456.
17. Sobieski W.: Obliczanie krętości w złożu porowatym składającym się z cząstek sferycznych o znanych rozmiarach i rozmieszczeniu w przestrzeni. Raport badawczy 1/2009, Winnipeg, Canada 2009.
18. Sobieski W., Zhang Q.: Sensitivity analysis of Kozeny-Karman and Ergun equations. *Tech Sci* 2014, 3, 235-248.
19. Starly B., Yildirim E, Sun W.: A tracer metric numerical model for predicting tortuosity factors in three-dimensional porous tissue scaffolds. *Comput Method Progr Biomed* 2007, 87(1), 21-27.
20. VTK - The Visualization Toolkit [on-line]. URL: <http://www.vtk.org/> (dostęp 1 lutego 2016).
21. Wu Y.S., van Vliet L.J., Frijlink H.W., van der Voort Maarschalk K.: The determination of relative path length as a measure for tortuosity in compacts using image analysis. *Eur J Pharm Sci* 2006, 28(5), 433-440.
22. YADE [on-line]. URL: <https://yade-dem.org/doc/> (dostęp 1 lutego 2016).



## 7. WYBRANE ASPEKTY MODELOWANIA PRZEPIŹYWÓW PŁYNÓW PRZEZ ZŁOŻA POROWATE

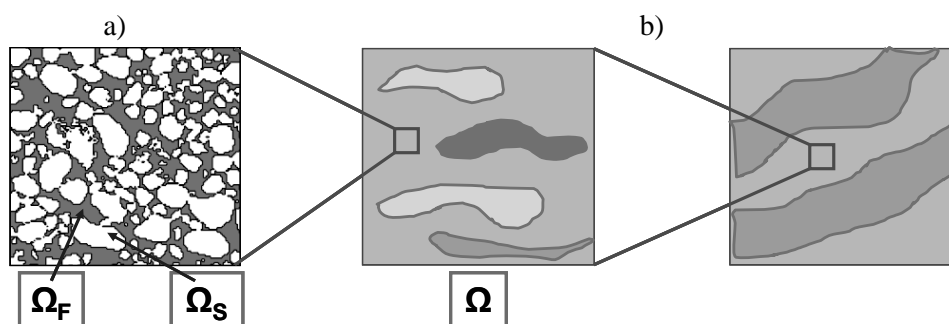
### 7.1. Ośrodkii porowate

Sposób postrzegania i opisu ośrodków porowatych zależy od skali przestrzennej i rozdzielczości w jakiej są reprezentowane. Zastosowanie konkretnych modeli powinno być adekwatne do skali, w jakiej rozpatrywane jest zjawisko. Definiowanie parametrów modeli opisujących przepływ w danej skali oraz ustalanie relacji międzyskalowych ma podstawowe znaczenie dla powodzenia procesu modelowania. Kontekstem tej prezentacji są zastosowania dotyczące modelowania procesów zachodzących w złożach podziemnych należące do obszaru inżynierii środowiska.

W ramach tej pracy określenie skali odnosi się wyłącznie do skali przestrzennej. Aby uniknąć nieporozumień w zakresie stosowanej terminologii, w niektórych przypadkach podawane są angielskie określenia.

Najdrobniejsza skala rozważana w tej pracy, określana jako skala porowa lub mikroskala, to skala pozwalająca wyodrębnić w strukturze próbki ośrodek porowatego o objętości  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  stałego szkieletu  $\Omega_S$  oraz dostępnej dla przepływu przestrzeni porowej  $\Omega_F$ ,  $\Omega = \Omega_S \cup \Omega_F \cup \Gamma$ , gdzie  $\Gamma = \Omega_F \cap \Omega_S$  oznacza granicę między stałym szkieletem i przestrzenią porową. Można przyjąć, że wielkość obszarów rozważanych w skali porowej nie przekracza  $1 \cdot 10^{-2}$  [m]; jednak to ograniczenie zależy od rodzaju ośrodkii porowatego, jego morfologii oraz rodzaju materiału. Stosunek objętości  $\Omega_F$  do objętości  $\Omega$  określa porowatość  $\phi$  [-] ośrodkii. W kontekście złóż granulanych stały szkielet stanowią ziarna (położenia i rozmiary poszczególnych cząstek są znane), a przepływ następuje poprzez puste 'kanaliki' pomiędzy ziarnami, Rys. 7.1 a).

Reprezentacja ośrodkii w rozdzielczości skali porowej nie jest adekwatna w modelowaniu przepływu i transportu w obszarach o rozmiarach wymaganych w zastosowaniach związanych z przepływami w złożach podziemnych. Na potrzeby modelowania obejmującego większe obszary stosuje się podejście skali makroskopowej, w którym układ faza stała  $\Omega_S$  - przestrzeń porowa  $\Omega_F$  zastępuje się obszarem  $\Omega$  potraktowanym jako *continuum*, [3,13]. Z perspektywy tej skali różnica pomiędzy przestrzenią porową  $\Omega_F$  i stałym szkieletem  $\Omega_S$  zaciera się, Rys. 7.1 b).



Rys. 7.1. Skala mikroskopowa (a): obszar dostępny dla przepływu  $\Omega_F$  (szary), nieprzepuszczalne ziarna  $\Omega_S$  (biały). Skala makroskopowa (b) - w zależności od rozdzielczości w jakiej widziany jest ośrodek, rozróżnia się niejednorodności o różnej skali przestrzennej. W obydwu przypadkach ośrodek jest interpretowany jako continuum

Podstawowym parametrem charakteryzującym ośrodek porowaty w skali makroskopowej jest *przepuszczalność*  $\kappa(\mathbf{x})$  [ $\text{m}^2$ ] przypisana każdemu punktowi obszaru  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$ . Przepuszczalność jest właściwością ośrodkii stanowiąc efektywną reprezentację cech geometrycznych struktury opisanej w mikroskali poprzez  $\Omega_F$  i  $\Omega_S$ .

Przepuszczalność ośrodka można wyznaczać na wiele sposobów: eksperymentalnie (Roz. 2), na podstawie zbioru wartości  $\Phi$  opisującego geometryczne własności złoża i wzorów (korelacji) określających  $\kappa$  (Roz. 2 oraz 8), lub obliczeniowo za pomocą technik skalowania wykorzystujących rozwiązania równań opisujących przepływ.

W zależności od rozmiarów rozważanych obiektów, dla potrzeb modelowania w obrębie skali makroskopowej wyróżnia się kategorie. W szczególności można określić skalę laboratoryjną (mezoskalę), odpowiadającą obszarom o rozmiarach rzędu  $1 \cdot 10^{-2} \div 1 \cdot 10^0$  metra, oraz skalę o większym przestrzennym zasięgu, wśród których wyróżnia się skalę makro - będącą skalą typowej komórki obliczeniowej stosowanej w modelach numerycznych ( $1 \cdot 10^0 \div 1 \cdot 10^2$  [m]), skalę lokalną - odpowiadającą zasięgiem rozmiarom złoża/zbiornika ( $1 \cdot 10^2 \div 1 \cdot 10^3$  [m]) oraz skalę regionalną - o zasięgu szeregu złóż ( $1 \cdot 10^3 \div 1 \cdot 10^6$  [m]) [16]. Podział jest umowny i związany z konkretnymi przypadkami.

W podejściu mikroskalowym ośrodki porowate charakteryzują się następującymi cechami:

- Ośrodek porowaty traktuje się jako układ o strukturze przestrzennej, w której można wyróżnić stały szkielet oraz puste przestrzenie. W kontekście złóż granularnych stały szkielet stanowią ziarna (położenia i rozmiary poszczególnych cząstek są znane), a przepływ następuje poprzez puste 'kanaliki' pomiędzy ziarnami.
- W rozdzielczości widzenia w tej skali możliwe jest analizowanie lokalnych zjawisk, zachodzących na poziomie poszczególnych kanalików.

W opisie ośrodków rozważanych z punktu widzenia skali makroskopowej nie uwzględnia się zróżnicowanej struktury porowej, natomiast:

- Ośrodek porowaty traktuje się jako *continuum*, opisane za pomocą parametrów, z których największe znaczenie dla przepływu ma przepuszczalność  $\kappa$ . Im mniejsza jest przepuszczalność, tym większy opór wywiera ośrodek. Opór ośrodka porowatego można opisywać prostymi prawami z wykorzystaniem globalnych współczynników (Roz. 2).
- W kontekście złóż granularnych z perspektywy skali makroskopowej nie rozróżnia się położenia i rozmiaru poszczególnych cząstek;
- Podczas przepływu płynu przez ośrodek porowaty analizuje się efekt globalny bez możliwości wnikania w lokalne zjawiska fizyczne powodujące ten efekt.

Jakościowa różnica w widzeniu ośrodków porowatych w skali mikro i w skali makroskopowej pociąga za sobą istotne różnice w metodach modelowania, opisie matematycznym oraz stosowanych metodach obliczeniowych.

## 7.2. Modele matematyczne przepływu

Zmiennymi charakteryzującymi przepływ w ośrodku porowatym jest ciśnienie  $p$  [Pa] oraz prędkość  $\mathbf{v}$  [m/s]. Rozważane są ośrodki i płyny nieściśliwe oraz zakłada się przepływ w stanie ustalonym.

### 7.2.1. Model mikroskalowy

W skali mikro zakłada się, że przepływ zachodzi tylko w przestrzeni porowej  $\Omega_F$ , a zależność ciśnienia  $p$  i prędkości  $\mathbf{v}$  jest opisana za pomocą układu równań Naviera-Stokesa: równania pędu

$$\rho \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{v}(\mathbf{x}) - \mu \nabla^2 \mathbf{v}(\mathbf{x}) = -\nabla p(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega_F \quad (7.1)$$

oraz równania ciągłości

$$\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega_F. \quad (7.2)$$

W równaniu (7.1)  $\rho$  to gęstość płynu [kg/m<sup>3</sup>], zaś  $\mu$  - kinematyczny współczynnik lepkości [Pa·s]. Dla uproszczenia pominięto siły objętościowe i grawitację. Ponadto  $\mathbf{x}$  oznacza punkt w przestrzeni,  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  w przypadku obszarów trójwymiarowych.

### 7.2.2. Model makroskopowy – prawo Darcy

Prawdopodobnie najczęściej wykorzystywaną zależnością stosowaną w odniesieniu do przepływów w ośrodkach porowatych w skali makroskopowej jest prawo Darcy wyrażające liniową zależność prędkości przepływu i spadku (gradientu) ciśnienia [3]. Prawo Darcy zostało wyznaczone eksperymentalnie, ale można je też wyprowadzić z równań Naviera-Stokesa (7.1) stosując metodę homogenizacji [4] przy założeniu małych prędkości przepływu.

Prawo Darcy stanowi makroskopowy odpowiednik równania pędu (7.1) i wyraża się:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = -\frac{\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x})}{\mu} \nabla p(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (7.3)$$

W połączeniu z równaniem ciągłości

$$\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (7.4)$$

prawo Darcy (7.3) opisuje przepływ w obszarze  $\Omega$ .

Podobnie jak w (7.1-7.2) zmienna  $\mathbf{v}$  [m/s] w (7.3-7.4) oznacza prędkość, w kontekście modeli makroskopowych określaną jako prędkość filtracji (strumień objętościowy),  $\boldsymbol{\kappa}$  [m<sup>2</sup>] reprezentuje przepuszczalność ośrodka.

W zastosowaniach hydrogeologicznych w miejsce ciśnienia  $p$  wprowadza się wysokość hydrauliczną  $h = z + \frac{p(x)}{\rho g}$  [m], gdzie  $z$  [m] oznacza współrzędną położenia względem pewnego arbitralnie przyjętego poziomu odniesienia [3]. Wówczas prawo Darcy (7.3) przyjmuje postać

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = -\mathbf{K}_f(\mathbf{x}) \nabla h(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (7.5)$$

gdzie  $\mathbf{K}_f$  [m/s] oznacza współczynnik filtracji,  $\mathbf{K}_f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}) \frac{\rho g}{\mu}$ . Współczynnik filtracji zależy od przepuszczalności ośrodka  $\boldsymbol{\kappa}$  oraz parametrów płynu  $\rho$  i  $\mu$ . W dalszym ciągu, dla uproszczenia zapisu, przyjmujemy lepkość  $\mu = 1$  i pomijamy symbol  $\mu$  w równaniach.

Połączenie równań (7.3) i (7.4) prowadzi do równania przepływu w stanie ustalonym

$$-\nabla \cdot (\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}) \nabla p(\mathbf{x})) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (7.6)$$

albo, jeśli występują składniki źródłowe  $s$ ,

$$-\nabla \cdot (\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}) \nabla p(\mathbf{x})) = s(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (7.6a)$$

W ośrodkach niejednorodnych przepuszczalność  $\boldsymbol{\kappa}$  zależy od położenia w  $\Omega$ ,  $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x})$ . Ponadto w ogólnym przypadku  $\boldsymbol{\kappa}$  jest tensorem wyrażającym anizotropowe cechy ośrodka.

W przypadku trójwymiarowym tensor jest reprezentowany za pomocą macierzy  $3 \times 3$ :

$$\mathbf{\kappa} = \begin{bmatrix} \kappa_{11} & \kappa_{12} & \kappa_{13} \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} & \kappa_{23} \\ \kappa_{31} & \kappa_{32} & \kappa_{33} \end{bmatrix}. \quad (7.7)$$

Dla jednoznacznego rozwiązania równania (7.6) niezbędne jest zdefiniowanie warunków brzegowych.

### 7.2.3. Skala makroskopowa – modele nieliniowe

Prawo Darcy jest spełnione tylko dla stosunkowo wolnych przepływów. Zakres jego stosowalności najczęściej odnosi się do liczby Reynoldsa  $\mathbf{Re}$  przyjmując jako górny zakres wartości  $\mathbf{Re} = 1 \div 10$  [3,10]. Liczba Reynoldsa  $\mathbf{Re} = \frac{\rho|\mathbf{v}|\delta}{\mu}$  [-], gdzie  $\delta$  - charakterystyczna długość w obszarze przepływu [m]. W ujęciu mikroskopowym  $\delta$  w szczególności może reprezentować średnicę ziarna. Przyczyną odstępstwa od liniowego modelu Darcy jest wzrastający w miarę zwiększania się prędkości udział sił bezwładnościowych w przepływie co wymaga stosowania do opisu modeli nieliniowych [3].

Naturalne przepływy występujące w zastosowaniach hydrogeologicznych zazwyczaj są poprawnie opisywane przez prawo Darcy. Sytuacje gdy należy uwzględnić występowanie większych prędkości to przepływy w sąsiedztwie studni (pompujących lub zasilających), modelowanie procesów remediacji lub szczelinowania hydraulicznego oraz badanie przepływów w złożach o dużej porowatości. Również należy mieć to na uwadze prowadząc eksperymenty w kolumnach dla szerokiego zakresu prędkości filtracji (Rozdział 2 tej monografii).

Historycznie najstarsze rozszerzenie w postaci równania Forchheimera uzupełnia prawo Darcy  $\mathbf{v} = -\mathbf{\kappa}\nabla p$  o składnik  $\beta|\mathbf{v}|\mathbf{v}$  [3]

$$\beta|\mathbf{v}|\mathbf{v} + \mathbf{v} = (1 + \beta|\mathbf{v}|)\mathbf{v} = -\mathbf{\kappa}\nabla p, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (7.8)$$

Model (7.8) wykorzystuje dwa parametry  $(\mathbf{\kappa}, \beta)$ , współczynnik  $\beta$  reprezentuje efekty bezwładnościowe. Przyjmuje się, że  $\mathbf{\kappa}$  oraz  $\beta$  zależą tylko od mikroskopowej struktury ośrodka porowatego. Interpretacja i wartości współczynnika  $\beta$  stanowią przedmiot dyskusji, patrz Tabela 2.6 w Roz. 2 i [10]. W szczególności eksperymenty wskazują na korelacje  $\beta$  z różnymi potęgami,  $\mathbf{\kappa}$  [9]. Model (7.8) może zostać dodatkowo rozszerzony poprzez dodanie korekty potęgowej  $\alpha$

$$(1 + \beta|\mathbf{v}|^\alpha)\mathbf{v} = -\mathbf{\kappa}\nabla p, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad 1 \leq \alpha \leq 3. \quad (7.9)$$

Konsekwencją anizotropowego charakteru ośrodka jest przyjęcie w równaniach (7.8) i (7.9) tensorowej postaci parametrów  $(\mathbf{\kappa}, \beta)$  [3]

$$\sum_{j=1}^3 \beta_{ij}|\mathbf{v}|^\alpha v_j + v_i = -\sum_{j=1}^3 \kappa_{ij} \frac{\partial p}{\partial x_j}, \quad i = 1, \dots, 3, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (7.10)$$

Równania (7.8)-(7.10) wyrażają w skali makroskopowej efekty wynikające z szybkich przepływów występujące w mikroskali. Przykłady wykorzystania modeli (7.9) i (7.10) znajdują się w pracy [18].

### 7.3. Numeryczne rozwiązywanie równań przepływu

Wyznaczenie pól ciśnienia  $p$  i prędkości  $\mathbf{v}$ , czyli rozwiązanie układu równań (7.1)-(7.2), lub równania (7.6), poza wąską klasą zagadnień wymaga zastosowania metod numerycznych. W ramach tego opracowania nie ma miejsca na szczegółowy opis metod, natomiast zostaną przedstawione krótkie opisy charakteryzujące istotne cechy tych metod.

Zasadnicza różnica w definicji zagadnień przepływu w skali mikroskopowej oraz skalach makroskalowych jest spowodowana 1) jakościowo innymi równaniami oraz 2) inną geometryczną strukturą obszarów, co przekłada się na metody obliczeniowe.

Równania Naviera-Stokesa (7.1)-(7.2) z uwagi na nieliniowy charakter oraz sprzężenie ciśnienia i prędkości, i co więcej, zazwyczaj bardzo złożoną geometrię  $\Omega_F$ , stanowią trudniejsze wyzwanie obliczeniowe. Zagadnienia *continuum* definiowane w większych skalach przestrzennych zazwyczaj odnoszą się do obszarów o mniej skomplikowanych kształtach. Co więcej, w przypadku spełnienia prawa Darcy (co się najczęściej zakłada) równania opisujące przepływ są liniowe i w związku z tym „łatwiejsze” do numerycznego rozwiązywania, zaś w równaniu (7.6) występuje tylko funkcja  $p(\mathbf{x})$ , co też wpływa na uproszczenie sytuacji.

Do wykonania obliczeń w mikroskali należy zdefiniować geometrię ośrodka porowatego. Powszechnie stosowane podejścia to wykorzystanie syntetycznie generowanych geometrii lub informacji o strukturze rzeczywistych ośrodków uzyskanych za pomocą technik mikroobrazowania (Rozdział 4).

Geometrię syntetyczną można generować na wiele sposobów, przykłady takich struktur pojawiły się w Rozdziale 5 (wykorzystywane są również w Rozdziałach 6, 8, 9 i 10). Geometrie syntetyczne umożliwiają systematyczne badanie wpływu wybranych parametrów strukturalnych na globalne właściwości ośrodków, przede wszystkim na ich przepuszczalność.

Źródłem realistycznych opisów struktur porowatych są dane (najczęściej) uzyskane za pomocą komputerowej mikrotomografii rentgenowskiej. Mikrotomografia komputerowa jest coraz powszechniej dostępną metodą niedestrukcyjnego badania struktury wewnętrznej materiałów [6,26]. W przypadku ośrodków porowatych jako wynik pomiaru mikrotomograficznego (uzupełnionego o procedury rekonstrukcji i segmentacji) otrzymuje się opis struktury badanej próbki w postaci trójwymiarowej macierzy  $n_{ijk}$  złożonej z wokseli – sześciennych jednostkowych objętości o wymiarach równych rozdzielczości pomiaru. Każdemu wokselowi macierzy  $n_{ijk}$  przypisana jest informacja, czy jest to element szkieletu stałego  $\Omega_S$ , czy element przestrzeni porowej  $\Omega_F$ . Na podstawie  $n_{ijk}$  generuje się reprezentację struktury rozważanej próbki w postaci wymaganej przez wykorzystywaną metodę obliczeniową.

Wśród metod obliczeniowego rozwiązywania równań Naviera Stokesa (7.1)-(7.2) stosowanych w odniesieniu do modelowania przepływów w ośrodkach porowatych w skali mikroskopowej można wyodrębnić metody *a priori* dyskretne (nie odwołujące się bezpośrednio do matematycznego zapisu równań (7.1)-(7.2)) oraz podejścia bazujące na dyskretyzacji równań (7.1)-(7.2) za pomocą metod numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych i dlatego określane mianem bezpośrednich numerycznych symulacji (ang. Direct Numerical Simulations, DNS).

#### 7.3.1. Metody dyskretne

Wśród metod dyskretnych najczęściej wykorzystywana jest Metoda Sieci Porowych (ang. Pore Network Method, PNM) oraz Metoda Gazu Sieciowego (Lattice Boltzmann Method, LBM). Wspólną cechą tych metod jest to, że prowadzą do otrzymania przybliżonych równań Naviera-Stokesa poprzez rozwiązanie całkiem innych zagadnień.

### 7.3.1.1. Metoda sieci porowych

Podstawą Metody Sieci Porowych (PNM) jest przekształcenie geometrii próbki na trójwymiarową sieć, której węzły odpowiadają porom połączonym za pomocą kanałów [2,14]. Przekroje kanałów odpowiadają najwęższymi przejściami (ang. throats) występującym na drodze między poszczególnymi porami.

W interpretacji sieci porowych zakłada się, że opór stawiany przez pory, ze względu na ich znacznie większe rozmiary w porównaniu do przekroju kanałów, jest zanedbywalny. Każdemu porowi  $i$  przypisuje się ciśnienie  $p_i$ . Przy założeniu przepływu nasyconego strumień objętościowy przez kanał łączący pory  $i$  oraz  $j$  definiuje się jako dyskretny analog prawa Darcy (7.3)

$$q_{ij} = g_{ij}(p_i - p_j), \quad (7.11)$$

z  $g_{ij}$  oznaczającym przepuszczalność hydrauliczną kanału, którą określa się na podstawie promienia kanału oraz lepkości płynącego gazu. W stanie ustalonym zakłada się, że w każdym porze  $i$  spełnione jest prawo zachowania masy  $\sum_{j \in N(i)} q_{ij} = 0$ ,  $N(i)$  oznacza wszystkie pory mające

bezpośrednie połączenie z porami  $i$ . Wymuszenie spełnienia prawa zachowania masy we wszystkich porach prowadzi do układu równań liniowych, w którym niewiadomymi są ciśnienia  $p_i$  w porach. Na podstawie rozwiązania tego układu i uwzględniając warunki brzegowe można wyznaczyć wartości strumieni  $q_{ij}$  we wszystkich kanałach.

Wady metody sieci porowych to trudności związane z transformacją struktury zapisanej w postaci macierzy  $n_{ijk}$  do postaci sieci oraz brak jednoznaczności takiej reprezentacji. Kolejne źródło niejednoznaczności jest związane z określaniem przepuszczalności  $g_{ij}$  kanałów łączących pory, co jest kluczowe dla określania charakterystyki reprezentowanego ośrodka. Dodatkowo wadą jest *a priori* założenie spełnienia prawa Darcy poprzez wzór (7.11).

Jednakże metoda sieci porowych posiada wiele zalet. Przede wszystkim (nieliniowe) zagadnienie różniczkowe cząstkowe (7.1)-(7.2) zostaje zastąpione zadaniem polegającym na rozwiązaniu układu równań liniowych. Dzięki temu w symulacjach łatwiej niż w innych metodach stosowanych do wyznaczania przepływu w skali mikro można uwzględniać obszary o dużych rozmiarach. Poprzez modyfikowanie przepuszczalności kanałów można symulować scenariusze ewolucji przestrzeni porowych w wyniku np. blokowania, wzrostu biofilmu, itp. Poprzez uwzględnianie w sieci kanałów o znacząco mniejszych przepustowościach można uwzględniać w jednym modelu obszary o bardzo zróżnicowanej strukturze przestrzennej [14].

### 7.3.1.2. Metoda gazu sieciowego

Metoda Gazu Sieciowego (LBM) opiera się na modelu kinetycznym gazu składającego się z fikcyjnych cząstek rozmieszczonych w dyskretnej siatce pokrywającej obszar przepływu. Ewolucja położenia cząstek następuje według reguł opisujących propagację i kolizje, a na tej podstawie wyznacza się wartości ciśnień i prędkości w komórkach siatki [22]. Można wykazać, że rozwiązania otrzymane tą metodą stanowią równocześnie rozwiązania równań Naviera-Stokesa.

Sformułowanie metody w oparciu o siatkę zbudowaną z sześciennych elementów oraz łatwa implementacja warunków brzegowych dobrze przystaje do wokselowej struktury danych mikrotomograficznych. Działanie w oparciu o dyskretne cząstki pozwala uwzględniać w modelu interakcje zachodzące na poziomie mikroskopowym.

Zaletą metody LB, zwłaszcza w kontekście dużych obszarów obliczeniowych, jest możliwość stosowania wydajnych metod równoległego obliczeń. Wadą metody jest konieczność stosowania małych kroków czasowych podczas symulowania szybkich przepływów. Więcej informacji o zastosowaniu metody LB w modelowaniu przepływów mikroskalowych znajduje się w Rozdziale 9.

### 7.3.2. Metody numerycznego rozwiązywania równań przepływu w mikroskali

Druga grupa metod stosowanych w modelowaniu przepływów w mikroskali wykorzystuje (standardowe) metody numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych. Najczęściej wykorzystywaną metodą jest Metoda Objętości Skończonych (patrz Rozdział 8). Inne stosowane metody numeryczne to Metoda Elementu Skończonego i Metoda Różnic Skończonych (nie omawiane w niniejszej monografii) oraz Metoda Zanurzonego Brzegu (opisana w Rozdziale 10). Należy podkreślić, że metody bezpośrednich symulacji numerycznych w odniesieniu do rzeczywistych geometrii porowych zaczęto stosować zaledwie kilka lat temu [18].

Efektywna implementacja numerycznego rozwiązywania równań Naviera-Stokesa stanowi skomplikowane zadanie, dlatego w obliczeniach powszechnie wykorzystuje się gotowe oprogramowanie. Wydaje się, że obecnie najczęściej stosowane oprogramowanie to OpenFoam [17] oraz ANSYS Fluent [1,25]. Obydwa programy wykorzystują Metodę Objętości Skończonych. Inny popularny pakiet Comsol [5] wykorzystuje sformułowanie Metody Elementów Skończonych [15].

Każda z wymienionych metod numerycznych jest konstruowana w oparciu o podział obszaru  $\Omega_F$  na komórki (elementy). Ponownie, można wyróżnić dwa nurty. Jeden z nich to wykorzystanie w obliczeniach niestrukturalnych siatek złożonych z elementów trójkątnych [19] lub czworościennych [15,21,27], w sposób gładki odwzorowujących powierzchnie porowe  $\Gamma$ . W drugim podejściu siatki obliczeniowe są generowane bezpośrednio na podstawie wokselowej struktury danych mikroobrazowych, zachowując sześcienny kształt komórek obliczeniowych. W tak skonstruowanych siatkach powierzchnie porów  $\Gamma$  mają ‘schodkowy’ kształt.

Porównanie wyników symulacji otrzymanych dla różnych rodzajów dyskretyzacji przynosi konstatację o braku wyraźnego wpływu rodzaju dyskretyzacji na wyniki [18,21,27]. Naturalność i stosunkowa prostota generowania siatek sześciociennych sprawia, że to podejście zyskuje coraz większe grono zwolenników. Inną zaletą takich siatek jest łatwość ich modyfikacji w przypadku modelowania procesów powodujących zwiększanie lub zmniejszanie przestrzeni dostępnej dla przepływu.

Pomimo znaczącego wzrostu dostępnych mocy obliczeniowych rozmiar zagadnień dyskretnych związany z dużą liczbą komórek obliczeniowych niezbędnych do opisanie geometrii przestrzeni porowej wciąż stanowi problem. Dlatego często w obliczeniach wykorzystuje się siatki o gorszej rozdzielczości niż rozdzielczość oryginalnych danych mikroobrazowych. Siatki powstają na bazie ‘zagregowanych wokseli’: sąsiadujące woksele zastępuje się jednym (decyzja, czy woxsel ‘zagregowany’ jest określany jako por czy jako element stałego szkieletu zależy od charakterystyki łączonych wokseli). Innym sposobem zmniejszenia rozmiaru zagadnienia jest konstruowanie siatek na podstawie wycinka danych  $n_{ijk}$ .

### 7.3.3. Metody obliczeniowe stosowane w skali makroskopowej

Zjawiska przepływu opisane z punktu widzenia skal makroskopowych generują zagadnienia, których numeryczne rozwiązywanie jest mniej złożone w porównaniu do zagadnień definiowanych w skali mikroskopowej. Odnosi się to zwłaszcza do przypadku gdy spełnione jest prawo Darcy, co oznacza, że przepływ jest opisany za pomocą liniowego równania (7.6).

Kształty obszarów obliczeniowych w modelach makroskalowych są mniej złożone w porównaniu z obszarami uwzględnianymi w skali porowej. Wciąż jednak rozmiary obszarów, w zastosowaniach inżynierskich osiągające skale rzędu kilometrów, mogą stanowić wyzwanie obliczeniowe. W podejściach makroskopowych nie ma potrzeby odwzorowywania za pomocą siatki dyskretyzacji struktury porowej, natomiast podział obszaru na elementy powinien uwzględniać występowanie niejednorodności w obszarze (fragmenty obszarów charakteryzujące się różną przepuszczalnością, jak na Rys. 7.1b), tak aby granice oddzielające fragmenty o różnych własnościach pokrywały się z krawędziami/ściankami komórek obliczeniowych.

Równanie przepływu (7.6) zależy tylko od ciśnienia  $p(\mathbf{x})$  i do jego rozwiązania stosuje się najczęściej takie metody numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych jak Metodę Różnic Skończonych, Metodę Elementów Skończonych [12] oraz Metodę Objętości Skończonych. Każda z tych metod ma inne cechy. To co je łączy to konieczność dokonania dyskretyzacji obszaru obliczeniowego (podziału na elementy/komórki obliczeniowe) oraz konieczność rozwiązania układu równań liniowych. Zwięzła i przejrzysta prezentacja podstawowych metod stosowanych do rozwiązywania równania przepływu (7.6) znajduje się w [3]. W szczególności ograniczeniem Metody Różnic Skończonych jest wymóg, aby komórki obliczeniowe miały kształt prostokątny lub prostopadłościenny. Metody elementu skończonego oraz objętości skończonych zezwalają w tym zakresie na większą swobodę, dopuszczając dyskretyzacje wykorzystujące elementy trójkątne, czworościenne, lub pryzmatyczne. Niekiedy różnica między metodami jest zatarta, np. Metoda Różnic Skończonych bazująca na schemacie Cell Centered jest szczególnym przypadkiem Metody Objętości Skończonych.

Po wyznaczeniu pola ciśnienia  $p(\mathbf{x})$ , prędkość  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  może zostać wyznaczona na podstawie prawa Darcy (7.3) lokalnie dla poszczególnych elementów. W przypadku metody elementu skończonego oraz niektórych sformułowań metody różnic skończonych jakość tak otrzymanej aproksymacji prędkości może nie być zadowalająca, w szczególności nie gwarantując spełnienia prawa zachowania (7.4) na poziomie pojedynczych komórek obliczeniowych. Ten problem nie dotyczy metody objętości skończonych, która wyprowadzona jest na podstawie praw zachowania spełnionych w poszczególnych komórkach, patrz również Roz. 8.

Jeszcze innym wariantem przybliżonego rozwiązywania równania przepływu jest wykorzystanie metod mieszanych [11] i rozwiązywanie zagadnienia przepływu sformułowanego w postaci układu równań, w którym niewiadomymi są równocześnie ciśnienie i prędkość:

$$\begin{cases} \frac{\mu}{\mathbf{k}^{-1}(\mathbf{x})} \mathbf{v}(\mathbf{x}) + \nabla p(\mathbf{x}) = 0 \\ \nabla \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{cases} \quad (7.12)$$

Aproksymacje pola prędkości uzyskane metodami mieszanymi gwarantują spełnienie prawa zachowania (7.4) na poziomie pojedynczych elementów, natomiast koszty obliczeń metodami mieszanymi są znacznie większe. Metody mieszane stosuje się w odniesieniu do metody elementu skończonego.

Opisana w Rozdziale 8 opcja Porous Zone programu ANSYS Fluent umożliwia modelowanie przepływu w ośrodku porowatym interpretowanym makroskopowo jako ośrodek ciągły. Z punktu widzenia modelu matematycznego jest to osiągnięte poprzez uwzględnienie w równaniach Naviera-Stokesa odpowiednich składników źródłowych. W zależności od zdefiniowania parametrów można modelować przepływy spełniające prawo Darcy jak i uwzględniać nieliniowe efekty inercyjne opisane równaniami (7.8) lub (7.9).

Uwzględnienie efektów nieliniowych komplikuje rozwiązywanie równania przepływu. Przekształcając równanie Forchheimera (7.8) do postaci

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = -\frac{\mathbf{k}}{1 + \beta|\mathbf{v}(\mathbf{x})|} \nabla p(\mathbf{x}) = -\mathbf{K}_{eff}(\mathbf{x}, \mathbf{v}(\mathbf{x})) \nabla p, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.13)$$

otrzymuje się (formalny) odpowiednik prawa Darcy, w którym efektywny współczynnik przepuszczalności  $\mathbf{K}_{eff}$  zależy zarówno od przepuszczalności wynikającej z geometrii ośrodka, jak i od efektów inercyjnych, zależących z kolei od prędkości  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ , która stanowi niewiadomą równania. Najprostsze podejście obliczeniowe polega na zastosowaniu do rozwiązania zmodyfikowanego równania przepływu



$$-\nabla \cdot (\mathbf{K}_{eff}(\mathbf{x}, v(x)) \nabla p(\mathbf{x})) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.14)$$

schematu iteracyjnego, wykorzystującego dowolne oprogramowanie przeznaczone do rozwiązywania liniowego równania przepływu [8]. Jako  $\mathbf{K}_{eff}^{(0)}$  przyjmuje się współczynnik przepuszczalności  $\mathbf{k}$ , stąd na podstawie rozwiązania (7.14) i zależności (7.13) wyznacza się początkowe pole prędkości  $\mathbf{v}$  (oznaczone jako  $\mathbf{v}^1$ ), co pozwala wyznaczyć kolejne przybliżenie efektywnej przepuszczalności  $\mathbf{K}_{eff}^{(1)}$  z (7.13). Iteracje są powtarzane aż do osiągnięcia zbieżności. Jest to podejście nieefektywne i zwłaszcza w przypadku dużych wartości parametru  $\beta$  trudno jest osiągnąć zbieżność [9], natomiast jego zaletą jest łatwość implementacji. Skuteczna i znacznie szybsza jest metoda Newtona zastosowana bezpośrednio do równania nieliniowego; szczegółowe schematy znajdują się w [9]. Ciekawym wnioskiem jest stwierdzenie, że efekty nieliniowe osłabiają wpływ niejednorodności obszaru na przepływ.

Nieliniowość równań stanowi znaczące utrudnienie i dlatego w wielu przypadkach stosuje się prawo Darcy zaniehbując ewentualne efekty nieliniowe. Dodatkową trudność stanowi problem określenia wartości parametru  $\beta$  oraz, ewentualnie,  $\alpha$  (równanie (7.9)). Poza korelacjami z Roz. 2 lub bezpośrednim eksperymentem (Roz. 2), parametry modelu nieliniowego można wyznaczać numerycznie stosując techniki skalowania.

## 7.4. Skalowanie

Modele przepływu przedstawione w poprzednich punktach opisują to samo zjawisko widziane w różnych rozdzielczościach. Konsekwencją zmiany perspektywy z mikroskali do skali makroskopowej jest zastąpienie obszaru  $\Omega_F$  obszarem  $\Omega$  i pojawienie się w modelu (7.3) parametru  $\mathbf{k}$  'streszczającego' wiedzę o mikroskopowej strukturze geometrycznej ośrodka za pomocą współczynnika przepuszczalności. Określenie relacji pomiędzy różnymi skalami przestrzennymi wykorzystanymi do opisu zjawiska przeprowadza się metodami *skalowania*. Skalowanie w kontekście ośrodków porowatych najczęściej łączy dwie skale: skalę o lepszej (drobniejszej) rozdzielczości, określaną jako *drobna* skala (ang. fine scale), oraz *dużą* skalę o niższej rozdzielczości (ang. coarse scale). Potrzeba skalowania wynika z ograniczeń wielkości modeli, możliwości percepcji oraz możliwości prowadzenia pomiarów fizycznych i doświadczalnego weryfikowania hipotez [13]. Zauważmy na przykład, że mierzalny eksperymentalnie parametr przepuszczalności (współczynnik filtracji) jest adekwatny w kontekście makroskali – natomiast nie istnieje jako pojęcie w skali mikro.

W przypadku obliczeń numerycznych miarą wielkości modeli jest liczba komórek dyskretyzacji obszaru, a ich górne granice są narzucone poprzez dostępne moce obliczeniowe oraz realistyczne czasy prowadzenia symulacji. Innym powodem skalowania jest konieczność pogodzenia rozdźwięku między rozmiarami obszarów podlegających modelowaniu a rozdzielczością dostępnych danych.

Relacje międzyskalowe występują zarówno podczas skalowania ze skali mikroskopowej do skali laboratoryjnej, jak i ze skali laboratoryjnej do skal większych.

### 7.4.1. Uśrednianie

Do przejścia do skali większej wykorzystuje się uśrednione wartości zmiennych modeli w drobnej skali. Średnia wartość  $F$  funkcji  $f$  w obszarze  $\Omega_V$  wyraża się wzorem:

$$F = \langle f \rangle_V = \frac{\sum_{i=1}^n f_i V_i}{V}. \quad (7.15)$$

Jeśli wartości uśrednianej funkcji  $f_i$  są wyznaczone numerycznie, to są powiązane z dyskretyzacją obszaru. Wtedy indeks  $i$  odnosi się do elementów dyskretyzacji,  $i = 1, \dots, n$ ,  $V_i$  oznacza objętość elementu  $i$ , a  $V$  objętość obszaru uśredniania  $\Omega_V$ .

Często przyjmuje się obszar uśredniania  $\Omega_V$  mniejszy od obszaru, w którym rozwiązywane jest równanie przepływu ( $\Omega_F$  lub  $\Omega$ ). Dzięki temu minimalizuje się wpływ warunków brzegowych przyjętych podczas rozwiązywania równania przepływu na wynik skalowania.

### 7.4.2. Skalowanie w obrębie skal makroskopowych

Skalowanie w obrębie skal makroskopowych ma na celu zastąpienie obszaru charakteryzowanego *niejednorodnym* rozkładem przepuszczalności  $\mathbf{k}(\mathbf{x})$  obszarem *jednorodnym* charakteryzowanym przez efektywną (zastępczą) przepuszczalność  $\mathbf{K}$ , Rys. 7.2b.

Ośrodek porowaty w obu skalach jest rozważany jako *continuum*; zakłada się, że w obu skalach obowiązuje prawo Darcy (7.3). Matematyczny opis przepływu w skali laboratoryjnej i regionalnej wykorzystuje takie same równania (7.6), różniące się wartościami i rozdzielczością parametrów. Z punktu widzenia komputerowych symulacji miarą rozdzielczości modeli są rozmiary komórek obliczeniowych. Jest to spowodowane wykorzystaniem metod numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych, konstruowanych w oparciu o dyskretyzację obszaru obliczeniowego, oraz stosowaniem stałych wartości parametrów w obrębie jednej komórki obliczeniowej.



Rys. 7.2. Skalowanie: a) ze skali mikroskopowej do skali makroskopowej, b) w obrębie dwóch skal makroskopowych o różnych rozdzielczościach

Zagadnieniu skalowania w obrębie skal makroskopowych, rozumianym jako wyznaczenie parametrów efektywnych, poświęcono wiele prac [7,20,24]. W najprostszym przypadku za wartość efektywną parametru  $\mathbf{K}$  można przyjąć średnią arytmetyczną  $\mu_a$  lub harmoniczną  $\mu_h$  z przepuszczalności komórek w drobnej skali należących do obszaru podlegającego skalowaniu. Zachodzi oszacowanie Wienera  $\mu_h \leq \mathbf{K} \leq \mu_a$  [20]. Słabością podejścia wykorzystującego takie średnie jest zaniedbanie przestrzennego charakteru rozkładu przepuszczalności w skali drobnej, mającego wpływ zarówno na wartość efektywną przepuszczalności (w zależności od występowania, bądź nie, ścieżek preferowanego przepływu) jak i występowanie efektów anizotropowych, powodowanych niejednorodnościami w drobnej skali. Takie cechy efektywnej przepuszczalności pozwalają uzyskać metody numerycznego skalowania. Elementy procesu skalowania pomiędzy dwoma skalami makroskopowymi to:

- Dane definiujące zagadnienie w drobnej skali obejmujące: (i) równanie przepływu (7.6), (ii) geometrię obszaru  $\Omega$ , oraz rozkład przepuszczalności, (iii) parametry płynu, (iv) warunki brzegowe.
- Model numeryczny, w tym (i) siatka obliczeniowa, oraz (ii) kod numeryczny.
- Wyniki symulacji – rozwiązanie równania przepływu w drobnej skali  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  i  $p(\mathbf{x})$ .
- Wyznaczenie uśrednionych wartości  $\mathbf{V}$  i  $\nabla P$  zgodnie z (7.15), a na tej podstawie wyznaczenie parametrów modelu w dużej skali; najczęściej zakłada się model Darcy  $\mathbf{V} = -\mathbf{K} \cdot \mu^{-1} \nabla P$  (7.3).

W symulacjach często przyjmuje się okresowe warunki brzegowe. Pozwala to odwołać się do teoretycznych wyników otrzymanych dla metody homogenizacji [4] oraz ograniczyć obszar, w którym rozwiązywane jest równanie w małej skali. Bez względu na przyjęte warunki brzegowe do wyznaczenia  $\mathbf{K}$  w pełnej tensorowej postaci, w przypadku trójwymiarowym reprezentowanej macierzą  $3 \times 3$  (7.7), zagadnienie w drobnej skali należy rozwiązać trzykrotnie, za każdym razem nakładając warunki brzegowe wymuszające przepływ w innym kierunku.

W przypadku przepływów szybszych opisywanych za pomocą prawa Forchheimera problem skalowania jest bardziej złożony z uwagi na zależność współczynnika przepuszczalności od prędkości (7.13), co jest szeroko omówione w [9].

### 7.4.3. Skalowanie z mikroskali do skali makroskopowej

Skalowanie z mikroskali do skali makroskopowej ma na celu wyznaczenie *jednorodnej* efektywnej przepuszczalności  $\mathbf{K}$ , charakteryzującej obszar opisany w mikroskali za pomocą geometrii reprezentującej przestrzeń porowe  $\Omega_F$ , Rys. 7.2a.

Procedura przebiega według podobnego schematu jak dla przypadku dwóch skal *continuum*:

- Dane do zdefiniowania zagadnienia w drobnej skali opisywanego za pomocą równań Naviera-Stokesa (7.1)-(7.2) obejmujące: (i) geometrię obszaru  $\Omega_F$ , (ii) parametry płynu, (iii) warunki brzegowe.
- Model numeryczny, w tym (i) siatka obliczeniowa, oraz (ii) kod numeryczny.
- Wyniki symulacji – rozwiązanie równań przepływu (7.1)-(7.2).
- Wyznaczenie uśrednionych wartości  $\mathbf{V}$  i  $\nabla P$ , a na tej podstawie wyznaczenie parametrów modelu w dużej skali, w szczególności wyznaczenie przepuszczalności efektywnej  $\mathbf{K}$  z zależności  $\mathbf{V} = -\mathbf{K} \cdot \mu^{-1} \nabla P$  (7.3).
- Wyznaczenie par  $\mathbf{V}$  i  $\nabla P$  dla sekwencji różnych prędkości przepływu (zadanych poprzez warunki brzegowe) pozwala wyznaczać modele przepływu obowiązujące w skali makro adekwatne dla badanego ośrodka porowatego.

Konkretne realizacje procedury skalowania mogą być różne, w szczególności różny może być sposób wyznaczania  $\nabla P$ . Analogicznie do przypadku skalowania parametrów ośrodków w skali *continuum*, aby uwzględnić tensorowy charakter skalowanych współczynników, niezbędne jest trzykrotne (3D) rozwiązanie zagadnienia, w każdym z nich zadając przepływ w kierunku liniowo niezależnym do pozostałych.

Poprzez symulacje oraz procedury skalowania możliwe jest nie tylko zastąpienie lub uzupełnienie pomiaru laboratoryjnego przepuszczalności eksperymentem obliczeniowym, ale co więcej uzyskanie dodatkowych informacji, na przykład lokalnych rozkładów pól ciśnienia  $p$  i prędkości  $\mathbf{v}$ , przebiegów linii prądu oraz wyznaczenie przepuszczalności w pełnej tensorowej postaci, co pozwala identyfikować cechy anizotropowe ośrodka.

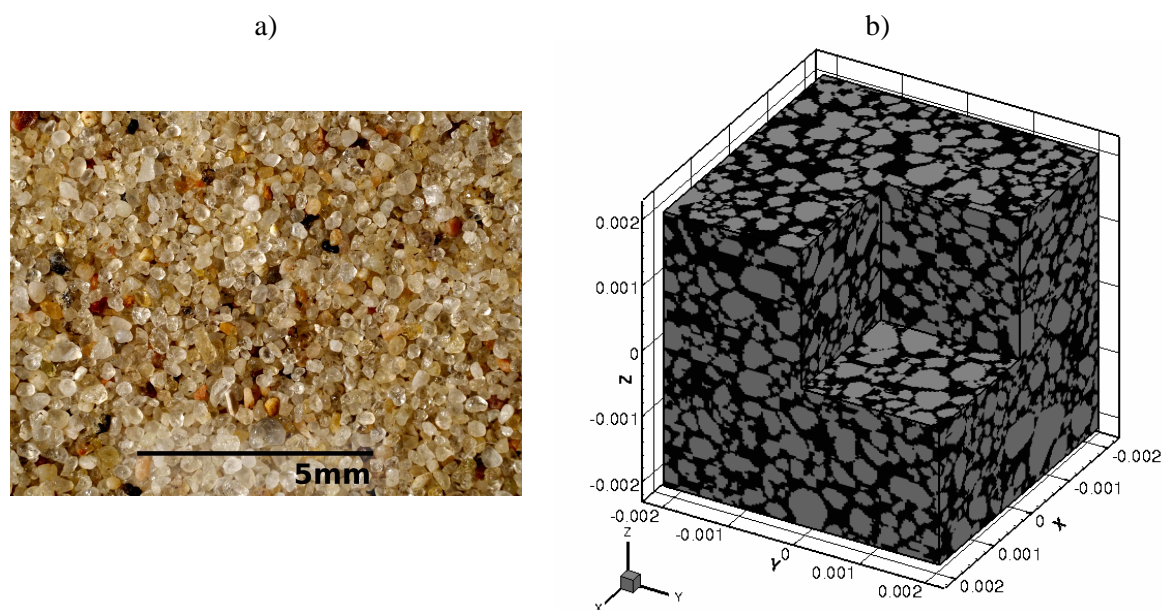
## 7.5. Skalowanie ze skali mikro do skali makro – przykład obliczeń

Jako podsumowanie zostaną przedstawione wyniki eksperymentu numerycznego, którego celem było wyznaczenie przepuszczalności próbki piasku wydmowego (Rys. 7.3a). Obliczenia były przeprowadzone według procedury opisanej w poprzednim punkcie, ze szczegółami realizacyjnymi jak w [18,24].

### 7.5.1. Dane mikroobrazowe

W wyniku pomiaru mikrotomograficznego przeprowadzonego w Instytucie Nafty i Gazu w Krakowie otrzymano binarny opis struktury próbki w postaci  $1100 \times 1008 \times 600$  wokseli w rozdzielczości  $7 \mu\text{m}$ . Dla potrzeb prezentowanego eksperymentu dane mikrotomograficzne

zostały przekształcone. W tym celu wyodrębniono z nich wycinek próbki o wymiarze  $600 \times 600 \times 600$  wokseli, który następnie dwukrotnie poddano redukcji danych. Redukcja polegała na zastępowaniu 8 sąsiadujących wokseli – jednym. Ostatecznie za dane do prowadzenia symulacji posłużyła próbka o wymiarach  $150 \times 150 \times 150$  wokseli o rozdzielczości  $28 \mu\text{m}$  (Rys. 7.3b). Porowatość próbki w tej rozdzielczości wynosiła 0.4497. Redukcja pozwala zmniejszyć rozmiar zadania, natomiast powoduje pogorszenie jakości rozwiązania. Eksperymenty wykazują, że redukcja rozdzielczości powoduje zwiększanie wyliczonej wartości przepuszczalności [24]. W przypadku omawianego eksperymentu celem było zilustrowanie głównych elementów procedury i dlatego sprawa dokładności nie była kluczowa.



Rys. 7.3. Piasek wydumowy (a) i jego reprezentacja uzyskana za pomocą mikrotomografii (b), widok fragmentu próbki wykorzystanego w symulacjach (po dwóch redukcjach, wielkość woksela  $28 \mu\text{m}$ )

### 7.5.2. Eksperyment obliczeniowy

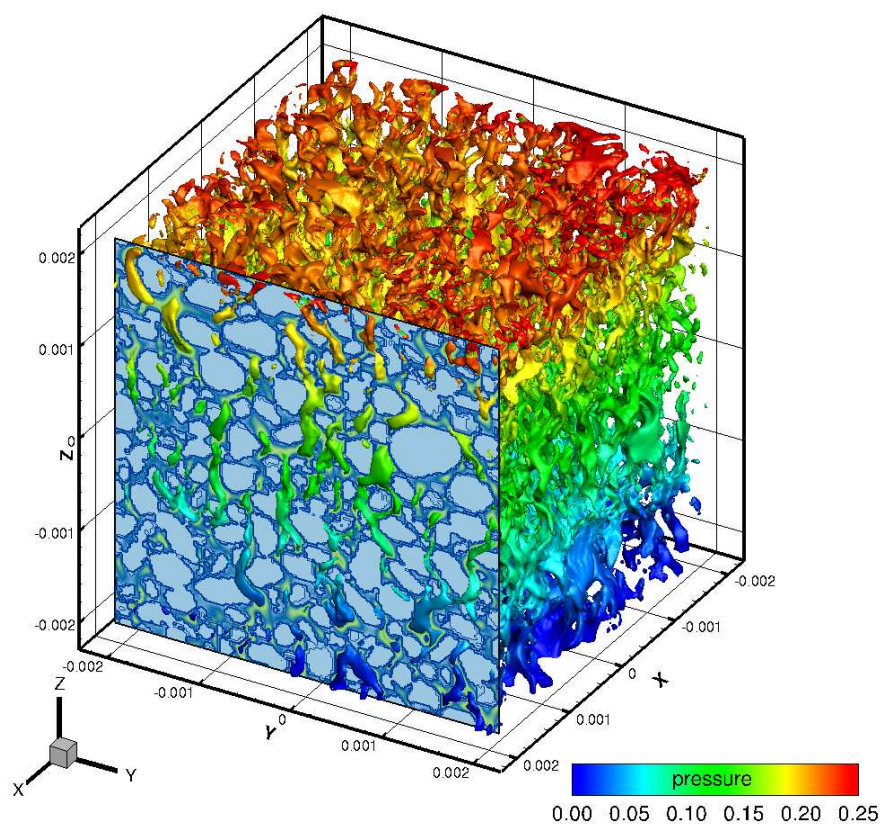
Na podstawie zredukowanych danych mikroobrazowych została wygenerowana siatka dyskretyzacji złożona z sześciennych komórek. Każdy woxsel należący do przestrzeni porowej był reprezentowany w siatce dyskretyzacji przez osiem sześciennych komórek obliczeniowych. Do generowania siatki wykorzystano własny program. Ogółem siatka zawierała 12142960 komórek.

Symulacje przepływu wykonano za pomocą komercyjnego pakietu obliczeniowego ANSYS Fluent [1] stanowiącego standard w obliczeniach z zakresu CFD. Oprogramowanie to cechuje się bardzo dobrą skalowalnością, co pozwala prowadzić wydajne obliczenia w trybie równoległym. Założono przepływ w stanie ustalonym, przyjmując jako płyn wodę i następujące charakteryzujące ją parametry: gęstość  $\rho = 998 \text{ [kg/m}^3\text{]}$  i lepkość  $\mu = 0.001003 \text{ [Pa}\cdot\text{s]}$ .

Zdefiniowano następujące warunki brzegowe. Na jednym z brzegów zewnętrznych zadawano prędkość wlotową  $v_{in}$ . Na brzegu przeciwległym nakładano warunek typu 'wypływ' (*pressure outlet*) [25]. Na pozostałych zewnętrznych brzegach oraz brzegach wewnętrznych  $\Gamma$  obowiązywał warunek  $\mathbf{v} = 0$  (*no-slip*).

Eksperyment obejmował wykonanie obliczeń dla sekwencji prędkości wlotowych  $\mathbf{v}^j$ ,  $j = 1, MAX$ , w zakresie od  $\mathbf{v}^1 = 1 \cdot 10^{-5} \text{ [m/s]}$  do  $\mathbf{v}^{MAX} = 1 \cdot 10^0 \text{ [m/s]}$  według schematu:

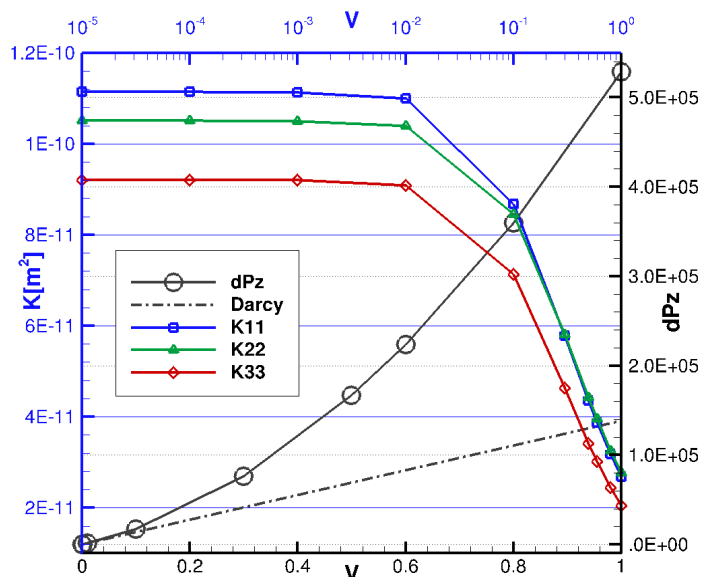
- Dla każdej prędkości  $\mathbf{v}^j$  wykonywano trzy symulacje, w każdej wymuszając główny kierunek przepływu oznaczany  $k$ ,  $k=1,2,3$ , zgodnie z kierunkami osi  $x$ ,  $y$  i  $z$ . Rys. 7.4 przedstawia wizualizację wyników symulacji przeprowadzonej dla  $\mathbf{v}^1$ .
- Uśredniając wyniki trzech symulacji  $k$ ,  $k=1,2,3$ , otrzymuje się trzy pary wektorów  $\mathbf{V}^{j,k}$ ,  $\nabla P^{j,k}$ . Metoda wyznaczania  $\nabla P$  została zainspirowana schematem centralnym różnic skończonych (CCFD) i jest opisana w [18,19,24].
- Wartość efektywnej przepuszczalności  $\mathbf{K}^j$  dla  $j$ -tej prędkości wlotowej otrzymuje się jako rozwiązanie układu równań liniowych  $\mathbf{V}^{j,k} = -\mathbf{K}^j \cdot \mu^{-1} \nabla P^{j,k}$ ,  $k=1,2,3$ . Jest to układ dziewięciu równań, w którym niewiadomymi jest 9 składowych macierzy  $\mathbf{K}^j$  (7.7). Dzięki temu dodatkowo można badać własności anizotropowe ośrodka.



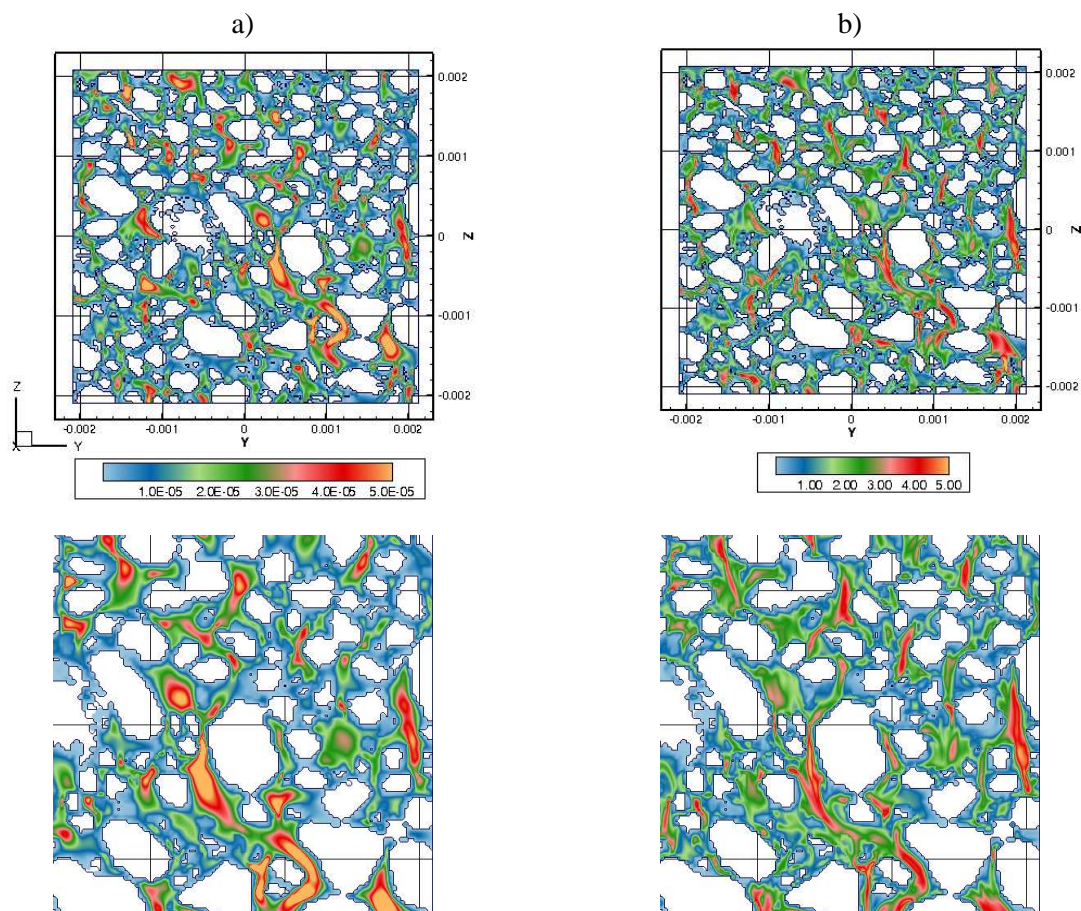
Rys. 7.4. Wizualizacja symulacji przepływu dla  $v_{in} = 1 \cdot 10^{-5}$  [m/s] w kierunku pionowym. Wykreślono izopowierzchnie prędkości równej  $2 \cdot 10^{-5}$  [m/s] i pokolorowano je barwami reprezentującymi ciśnienie

Ciąg wartości  $\mathbf{K}^j$ ,  $j=1, \dots, MAX$ , stanowi podstawę do wyznaczenia modelu zjawiska w skali makroskopowej.

Na Rys. 7.5 wykreślono trzy składowe diagonalne przepuszczalności  $\mathbf{K}^j$ ,  $j=1, \dots, MAX$ , oznaczone jako K11, K22, K33. Na tej podstawie można stwierdzić nieznaczną anizotropowość badanej próbki i, w szczególności, mniejszą przepuszczalność w kierunku pionowym (K33). Zależność wszystkich składowych  $\mathbf{K}^j$  od prędkości  $\mathbf{v}^j$  jest podobna, dlatego omawiamy je łącznie.



Rys. 7.5. Wyniki eksperymentu – wykreślono wartości składowych diagonalnych efektywnych współczynników przepuszczalności  $K_{11}$ ,  $K_{22}$ ,  $K_{33}$  w zależności od prędkości przepływu (lewa i górna skala logarytmiczna) oraz zależność spadku ciśnienia od prędkości przepływu dla przepływów w kierunku góra – dół (prawa i dolna skala liniowa). Linia przerywana określa zależność spadku ciśnienia i prędkości, gdyby prawo Darcy obowiązywało dla całego zakresu prędkości



Rys. 7.6. Wizualizacja pola prędkości  $|\mathbf{v}|$  w płaszczyźnie  $x = 0$  (przekrój przez całą próbkę oraz powiększenie) wyznaczonych dla prędkości wlotowych a)  $\mathbf{v}^1$  i b)  $\mathbf{v}^{MAX}$

Dla kilku początkowych prędkości  $\mathbf{v}^j$  wyznaczone wartości  $\mathbf{K}^j$  są takie same, co oznacza, że w tym zakresie prędkości obowiązuje liniowe prawo Darcy.  $\mathbf{K}^j$  obliczone dla tych prędkości można interpretować jako  $\boldsymbol{\kappa}$  – współczynnik przepuszczalności wyrażający wyłącznie cechy geometryczne ośrodka. Zauważmy, że dopiero przeprowadzenie kilku eksperymentów pozwala ocenić, czy założenie spełnienia prawa Darcy jest uzasadnione. W miarę zwiększania prędkości wlotowych, obserwuje się zmniejszanie  $\mathbf{K}^j$ . Dla  $\mathbf{v}^1 = 1 \cdot 10^{-2}$  [m/s], co odpowiada  $Re \approx 0.324$ , zaobserwowana różnica jest niewielka, natomiast począwszy od  $\mathbf{v} = 1 \cdot 10^{-1}$  [m/s] ( $Re \approx 3.24$ ) zmniejszenie efektywnej przepuszczalności staje się wyraźne wskazując na wzrastający udział efektów nieliniowych.

Dla wartości  $v_{in}$  przekraczających  $\mathbf{v}^{MAX} = 1 \cdot 10^0$  [m/s] nie uzyskano zbieżności w stacjonarnym trybie obliczeń.

Na tym samym wykresie, w odniesieniu do skali liniowej, zaznaczono spadki ciśnienia  $\nabla P^{j,3}$  obliczone w poszczególnych eksperymentach  $j = 1, MAX$  dla przypadku przepływów w kierunku pionowym. Linia przerywana pokazuje hipotetyczny przebieg zależności spadku ciśnienia gdyby prawo Darcy obowiązywało dla wszystkich prędkości. Różnica między liniami przerywaną i oznaczoną w legendzie jako  $dPz$  wyraża udział efektów inercyjnych.

Porównanie wizualizacji rozkładu pól prędkości  $|\mathbf{v}|$  uzyskanych w symulacjach dla prędkości wlotowych  $\mathbf{v}^1$  i  $\mathbf{v}^{MAX}$  wykazuje jakościową zmianę charakteru przepływu, Rys. 7.6. Możliwość wizualizowania procesów zachodzących wewnątrz struktury ośrodka porowatego stanowi dodatkową istotną korzyść prowadzenia symulacji mikroskalowych.

## 7.6. Podsumowanie

Procedurę obliczeniową wykorzystującą symulacje w mikroskali do oszacowania przepuszczalności można porównać do eksperymentu laboratoryjnego. Zalety metody obliczeniowej to między innymi możliwość uwzględnienia cech anizotropowych próbki, na co nie pozwala eksperyment wykorzystujący przepływ przez kolumnę. Cennych informacji dostarczają wizualizacje przebiegu przepływu wewnątrz badanych struktur. Modelowanie przepływów w mikroskali stanowią wstęp do rozważania bardziej złożonych procesów zachodzących w strukturach porowych i ich wpływu na makroskalowe własności ośrodków.

Porównania wartości numerycznie wyznaczonych parametrów i pomiarów eksperymentalnych pokazują, że obliczone wartości są zazwyczaj większe od wartości zmierzonych eksperymentalnie, różnica może osiągać rząd wielkości [27]. Ma to związek z rozdzielczością, w jakiej jest reprezentowana geometria ośrodka oraz ewentualnymi jej uproszczeniami (np. redukcją rozdzielczości). Zważywszy jednak na błędy pomiaru oraz, w przypadku materiałów o małej porowatości, na trudność i czasochłonność prowadzenia pomiarów laboratoryjnych, metoda obliczeniowa stanowi alternatywę lub cenne uzupełnienie pomiaru.

*Podziękowanie:* Obliczenia przedstawione w pracy zostały wykonane z wykorzystaniem Infrastruktury PL-Grid.

## Literatura

1. ANSYS, Inc. ANSYS FLUENT User's Guide, Rel. 15.0, 2014.
2. Al-Raoush R.I., Willson C.S.: Extraction of physically realistic pore network properties from three-dimensional synchrotron X-ray microtomography images of unconsolidated porous media systems, *Journal of Hydrology*, 300 (2005), 44-64.
3. Bear J., Cheng A.: *Modeling groundwater flow and contaminant transport*, Springer, 2010.
4. Bensoussan A., Lions J.-L., Papanicolau G.: *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1978.
5. Comsol, Multiphysics Simulation Software, <https://www.comsol.com/>

6. Dohnalik M., Jarzyna J.: Determination of reservoir properties through the use of computed X-ray microtomography – eolian sandstone examples, *Geology, Geophysics & Environment* 41, 3 (2015), 233-248.
7. Durlofsky L.J.: Upscaling and gridding of fine scale geological models for flow simulation. Proceedings of the 8th International Forum on Reservoir Simulation, Stresa, Italy, June 20-25 (2005).
8. Fourar M., Lenormand R., Karimi-Fard M.: Inertia effects in high-rate flow through heterogeneous porous media, *Transport in Porous Media* 60 (2005), 353-370.
9. Garibotti C., Peszyńska M.: Upscaling non-Darcy flow. *Transport in Porous Media* 80 (2009), 401-430.
10. Huang H., Ayoub J.: Applicability of the Forchheimer equation for non-Darcy flow in porous media, *SPJ Journal*, 112-122, (March 2006).
11. Kaaschieter E.F., Huijben A.J.M., Mixeded-hybrid finite elements and streamline computations for potential flow problems, *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 8 (1992), 221-246.
12. Lucquin B., Pironneau O.: Introduction to scientific computing, Wiley 1998.
13. Malecki J.J., Nawalany M., Witczak S., Gruszczyński T.: Wyznaczanie parametrów migracji zanieczyszczeń w ośrodku porowatym dla potrzeb badań hydrogeologicznych i ochrony środowiska. Poradnik metodyczny. Uniwersytet Warszawski Wydział Geologii. 2006.
14. Mehmani A., Prodanović M.: The effect of microporosity on transport properties in porous media, *Advances in Water Resources* 63 (2014), 104-119.
15. Narsillio G.A., Buzzi O., Fityus S., Yun T.S., Smith D.W.: Upscaling of Navier-Stokes equations in porous media: theoretical, numerical and experimental approach, *Computers and Geotechnics* 36 (2009), 1200-1206.
16. Nawalany M., Sinicyn G.: Scale problems in assessment of hydrogeological parameters of groundwater flow models, *Geologos* 21, 3 (2015), 179-185.
17. Open Foam, open source CFD software, <http://www.openfoam.com/>.
18. Peszynska M., Trykozko A.: Pore-to-core simulations of flow with large velocities using continuum models and imaging data, *Computational Geosciences*, Vol. 17, nr 4, (2013), 623-645.
19. Peszynska M., Trykozko A.: Convergence and stability in upscaling of flow with inertia from porescale to mesoscale, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, Vol. 9, Nr 2, (2011), 215-229
20. Renard Ph., de Marsilly G.: Calculating equivalent permeability: a review, *Advances in Water Resources*, (20), 1997, 253-278.
21. Siena M., Hyman J.D., Riva M., Gaudagnini A., Winter C.L., Smolarkiewicz P.K., Gouze P., Sadhukhan S., Inzoli F., Guédon G., Colombo E.: Direct numerical simulations of fully saturated flow in natural porous media at the pore scale: a comparison of three computational systems, *Computational Geosciences*, 19 (2015), 423-437.
22. Succi S., Sbragaglia M., Ubertini S.: Lattice Boltzmann Method, *Scholarpedia* 5, 5(2010), pp 9507.
23. Trykozko A., Peszynska M., Dohnalik M.: Modeling non-Darcy flows in realistic pore-scale proppant geometries, *Computers and Geotechnics*, 71 (2016), 352-360.
24. Trykozko A., Zijl W., Bossavit A.: Nodal and mixed finite elements for the numerical homogenization of 3D permeability, *Computational Geosciences* 5 (2001), 61-84.
25. Tu J., Yeoh G.H., Liu C.: *Computational Fluid Dynamics. A practical Approach*. Butterworth-Heinemann, 2008.
26. Wildenschild D., Sheppard A.P.: X-ray imaging and analysis techniques for quantifying pore-scale structure and processes in subsurface porous medium systems. *Advances in Water Resources* 51 (2013) 217-246.
27. Yang X., Scheibe T.D., Richmond M.C., Perkins W.A., Vogt S.J., Codd S.L., Seymour J.D., McKinley M.I.: Direct numerical simulations of pore-scale flow in a bead pack: comparison with magnetic resonance imaging observations, *Advances in Water Resources* 54 (2013), 228-241.

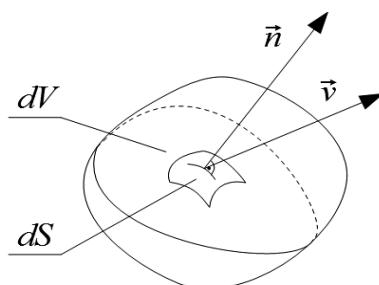


## 8. MODELOWANIE PRZEPLYWU PŁYNÓW PRZEZ OŚRODEK POROWATY METODĄ OBJĘTOŚCI SKOŃCZONYCH

### 8.1. Podstawy Metody Objętości Skończonych

#### 8.1.1. Objętość skończona

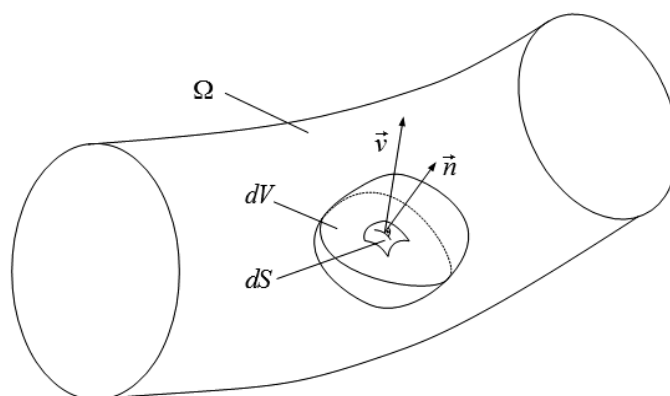
Objętość skończona<sup>8</sup> (zwana również objętością kontrolną (ang. Control Volume, CV) jest to elementarna objętość  $V$  otoczona zamkniętą powierzchnią  $S$  (Rys. 8.1), dla której budowane są globalne równania zachowawcze płynu (bilansowe, transportu), np. równanie bilansu masy, pędu czy energii.



Rys. 8.1. Schemat objętości skończonej

#### 8.1.2. Domena obliczeniowa

Domena obliczeniowa (Rys. 8.2) jest to przestrzeń wypełniona płynem ( $\Omega$ ), opisana za pomocą skończonej liczby objętości skończonych (komórek siatki obliczeniowej). Siatka domeny obliczeniowej może być strukturalna (o wyraźnie zdefiniowanych wierszach, kolumnach i warstwach) lub niestructuralna (o dowolnym kształcie i ułożeniu komórek). O obu tych rodzajach siatek była już mowa w Rozdziale 7.



Rys. 8.2. Domena obliczeniowa

Istotne jest, aby rozmiary objętości skończonych były – w stosunku do rozmiarów domeny – na tyle małe, aby umożliwiły stworzenie dobrej jakościowo reprezentacji przestrzeni przepływowej, i jednocześnie na tyle duże, aby można było traktować materię zawartą wewnątrz objętości jako ośrodek ciągły, a nie jako zbiór atomów czy cząsteczek.

<sup>8</sup> Przedstawione w rozdziale wprowadzenie dotyczące Metody Objętości Skończonych zawiera zmodyfikowane fragmenty artykułów [12] oraz [13]. Należy podkreślić, że za autorski można tu uznać jedynie sposób prezentacji treści, gdyż wszystkie koncepcje i idee, na których opierają się podane wywody, powstały w XVIII i XIX wieku.

### 8.1.3. Strumień

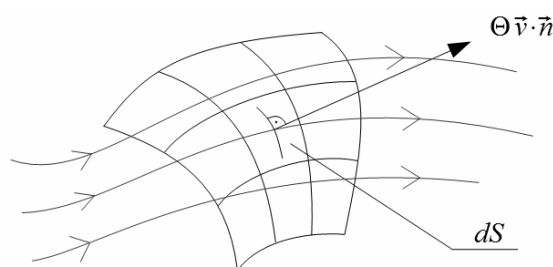
Strumień jest to wielkość wektorowa definiowana jako iloczyn dowolnej ekstensywnej wielkości fizycznej, np. masy, pędu czy energii, oraz prędkości przepływu w kierunku prostopadłym do powierzchni (Rys. 8.3)

$$\vec{\mathfrak{S}} = \Theta \vec{v} \cdot \vec{n} \quad (8.1)$$

lub

$$\vec{\mathfrak{S}} = \Theta \vec{v}_n, \quad (8.2)$$

gdzie:  $\vec{\mathfrak{S}}$  - strumień wielkości ekstensywnej  $\Theta$ ,  $\vec{v}$  - prędkość [m/s],  $\vec{v}_n$  - składowa normalna wektora prędkości [m/s],  $\vec{n}$  - wektor normalny do powierzchni.



Rys. 8.3. Wizualizacja pojęcia strumienia

W Obliczeniowej Mechanice Płynów (ang. Computational Fluid Dynamics, CFD) definiuje się wiele różnego rodzaju strumieni, jednak do budowy podstawowych równań zachowawczych używa się zazwyczaj tylko strumieni masy ( $\Theta = \rho$ ), pędu ( $\Theta = \rho \vec{v}$ ) oraz energii ( $\Theta = \rho e$ ).

### 8.1.4. Bilans objętościowy i powierzchniowy

Najbardziej charakterystyczną cechą Metody Objętości Skończonych jest analiza zmian wybranych wielkości ekstensywnych w czasie, na podstawie dwóch rodzajów bilansów: powierzchniowych oraz objętościowych.

Bilans powierzchniowy<sup>9</sup> jest to bilans opisujący zmianę wartości dowolnej wielkości ekstensywnej w czasie, na drodze wymiany strumieni tej wielkości między objętością skończoną a jej otoczeniem

$$\left. \frac{\partial \Theta}{\partial t} \right|_s = \int_s (\Theta \vec{v} \cdot \vec{n}) dS. \quad (8.3)$$

Bilans objętościowy jest to bilans opisujący zmianę wartości dowolnej wielkości ekstensywnej w czasie, na skutek działania źródeł tej wielkości, istniejących wewnątrz objętości skończonej

$$\left. \frac{\partial \Theta}{\partial t} \right|_v = \int_v (\Theta) dV. \quad (8.4)$$

<sup>9</sup> Ideę bilansu powierzchniowego i objętościowego łatwo jest zrozumieć na przykładzie pokoju, w którym panuje przeciąg (wymiana ciepła z otoczeniem poprzez strumień), a dodatkowo włączony jest grzejnik (generacja ciepła poprzez istnienie źródła).

### 8.1.5. Równanie bilansu masy

Masę zawartą w pojedynczej objętości skończonej zapisać można jako iloczyn średniej gęstości oraz objętości

$$m = \bar{\rho}V, \quad (8.5)$$

gdzie:  $m$  - masa [kg],  $\bar{\rho}$  - średnia gęstość płynu charakterystyczna dla bilansowanej objętości kontrolnej [kg/m<sup>3</sup>],  $V$  - objętość komórki kontrolnej [m<sup>3</sup>].

W przypadku płynu ściśliwego, stanowiącego przypadek najbardziej ogólny, masa wyrazi się wzorem

$$m = \int_V \rho dV, \quad (8.6)$$

gdzie  $\rho$  jest lokalną wartością gęstości [kg/m<sup>3</sup>], określoną w każdym punkcie objętości skończonej.

Należy zwrócić uwagę, że wynikiem całki z gęstości lokalnej jest gęstość średnia, a całki z elementarnej objętości, objętość całkowita. W ten sposób zgadzają się wszystkie jednostki.

Celem równań bilansowych jest opis zmian w czasie poszczególnych wielkości ekstensywnych. W przypadku równania bilansu masy, zmiana masy w czasie zależy od lokalnych wahań gęstości wewnątrz objętości kontrolnej. Matematycznie można to zapisać jako

$$\frac{d}{dt} m = \frac{d}{dt} \int_V \rho dV = \delta_m \quad (8.7)$$

lub

$$\frac{d}{dt} m = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = \delta_m. \quad (8.8)$$

Wynik całkowania może być równy zeru ( $\delta_m = 0$ ), w przypadku płynów nieściśliwych, lub też różny od zera ( $\delta_m \neq 0$ ), w przypadku płynów ściśliwych. Ponieważ nawet płyny uważane za nieściśliwe, czyli ciecze, przy odpowiednio dużych ciśnieniach również podlegają kompresji, to przypadkiem najbardziej ogólnym jest ten, w którym dopuszcza się zmianę gęstości, a więc i masy, w czasie. Jeżeli tak się stanie, to masa zawarta w objętości ulegnie „skurczeniu”, co z kolei spowoduje powstanie pewnego „luzu”. Aby nie wystąpiła nieciągłość w przepływie, a także aby spełnione zostało matematycznie równanie (8.8), „luz” ten musi zostać uzupełniony masą z zewnątrz. Oznacza to, że do objętości kontrolnej musi wpłynąć w rozpatrywanym czasie pewien wypadkowy strumień masy, równy różnicy pomiędzy całkowitym strumieniem wpływającym do objętości przez powierzchnię, a strumieniem z niej wypływającym. Innymi słowy należy sprawdzić, jaka jest – dla danej chwili czasowej – różnica między masą, która wpłynęła do komórki kontrolnej, a masą która z niej wypłynęła za pośrednictwem strumieni. Matematycznie sformułowanie to można zapisać następująco

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_S (\rho \vec{v} \cdot \vec{n}) dS, \quad (8.9)$$

gdzie  $\rho \vec{v} \cdot \vec{n}$  jest elementarnym strumieniem masy, przepływającym przez powierzchnię na kierunku do niej prostopadłym. Znak minus wynika z ogólnego założenia, przyjmowanego

między innymi w mechanice płynów, że rozważania prowadzi się zawsze dla wzrastającej wartości czynnika sprawczego. W tym przypadku czynnikiem sprawczym jest ciśnienie, którego wzrost spowoduje kompresję masy, a w konsekwencji konieczność uzupełnienia jej z zewnątrz. Oznacza to, że wypadkowa strumieni wypływających (dodatnich, bo płynących zgodnie z kierunkiem wektora normalnego) oraz wpływających (ujemnych, bo płynących przeciwnie do kierunku wektora normalnego) będzie ujemna.

Aby prowadzić dalsze rozważania, należy ujednoczyć rodzaj całek występujących w równaniu bilansowym. Należy skorzystać tu z twierdzenia Greena-Gaussa-Ostrogradzkiego, wówczas

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_V \operatorname{div}(\rho \vec{v}) dV \quad (8.10)$$

lub

$$\int_V \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) \right] dV = 0. \quad (8.11)$$

Równanie spełnione będzie tylko wówczas, gdy wyrażenie podcałkowe jest równe zero, zatem

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0. \quad (8.12)$$

Powyższe równanie stanowi finalną wersję równania bilansu masy, obowiązującą dla pojedynczej objętości skończonej i przepływu płynu jednoskładnikowego.

### 8.1.6. Równanie bilansu pędu

Równanie bilansu pędu wyprowadza się korzystając z II Zasady Dynamiki Newtona, wg której

$$\frac{d}{dt} \vec{p} = \vec{F}, \quad (8.13)$$

gdzie:  $\vec{p}$  - pęd [(kg m)/s],  $t$  - czas [s],  $\vec{F}$  - siła [N].

Ponieważ  $\vec{p} = m\vec{v}$ , a  $m = \int_V \rho dV$ , to

$$\frac{d}{dt} \int_V (\rho \vec{v}) dV = \vec{F}. \quad (8.14)$$

Wzór ten należy rozumieć tak, że żeby nastąpiła zmiana pędu, musi zadziałać siła. W ogólnym przypadku wyróżnić można dwa rodzaje takich sił: siły masowe, związane z masą zawartą w objętości, oraz siły powierzchniowe, związane z oddziaływaniem otoczenia na powierzchnię:

$$\vec{F} = \vec{F}_S + \vec{F}_V, \quad (8.15)$$

gdzie:  $\vec{F}_S$  - siły powierzchniowe [N],  $\vec{F}_V$  - siły masowe [N].

Wobec powyższego poprzednie równanie można zapisać następująco

$$\frac{d}{dt} \int_V (\rho \vec{v}) dV = \vec{F}_S + \vec{F}_V. \quad (8.16)$$

Sily powierzchniowe działają tylko na powierzchni objętości kontrolnej, w związku z czym muszą być wyliczane z całki powierzchniowej. Wypadkową sil powierzchniowych można zapisać korzystając z jednostkowej sily powierzchniowej

$$\vec{F}_S = \int_S (\vec{f}_s \cdot \vec{n}) dS \quad (8.17)$$

lub całkowitego tensora naprężeń

$$\vec{F}_S = \int_S (\vec{T} \cdot \vec{n}) dS, \quad (8.18)$$

gdzie:  $\vec{f}_s$  - wypadkowa, jednostkowa sily powierzchniowa [N/m<sup>2</sup>],  $\vec{T}$  - całkowity tensor naprężeń [Pa].

W ogólnym przypadku całkowity tensor naprężeń posiada dwie składowe:

- normalną – wynikającą z działania na powierzchni objętości kontrolnej sil ciśnieniowych, naporu hydrostatycznego i hydrodynamicznego;
- styczną – wynikającą z istnienia na powierzchni objętości kontrolnej tarcia wewnętrznego lub tarcia płynu o ściany sztywne.

Sily masowe, tak jak wskazuje ich nazwa, oddziałują na każdą cząstkę materii i z tego powodu muszą być wyliczane z bilansu objętościowego

$$\vec{F}_V = \int_V (\rho \vec{f}_v) dV, \quad (8.19)$$

gdzie:  $\vec{f}_v$  - wypadkowa, jednostkowa sily masowa [N/kg].

Sily masowe dzielą się w ogólności na:

- zewnętrzne – generowane przez czynniki znajdujące się poza objętością kontrolną (przykładem może być sily ciężkości, sily oddziaływań elektromagnetycznych);
- wewnętrzne – wynikające z bezwładności masy zawartej w objętości kontrolnej (przykładem jest tu sily d'Alemberta).

Po uwzględnieniu wzorów (8.18) i (8.19), formuła (8.16) przyjmie postać

$$\frac{d}{dt} \int_V (\rho \vec{v}) dV = \int_S (\vec{T} \cdot \vec{n}) dS + \int_V (\rho \vec{f}_v) dV. \quad (8.20)$$

Dalsze działania wymagają pozbycia się symbolu różniczki zupełnej, stojącego przed pierwszym członem równania. Można to zrobić stosując tzw. Twierdzenie Transportu Reynoldsa. Po jego zastosowaniu równanie przyjmie postać

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) dV + \int_S (\rho \vec{v} \cdot \vec{n}) dS = \int_S (\vec{T} \cdot \vec{n}) dS + \int_V (\rho \vec{f}_v) dV. \quad (8.21)$$

Po ujednoczeniu członów równania za pomocą twierdzenia Greena-Gaussa-Ostrogradzkiego

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) dV + \int_V \operatorname{div}(\rho \vec{v} \vec{v}) dV = \int_V \operatorname{div}(\vec{T}) dV + \int_V (\rho \vec{f}_V) dV \quad (8.22)$$

oraz opuszczeniu symboli całek, uzyska się podstawową wersję równania bilansu pędu:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \vec{v}) = \operatorname{div}(\vec{T}) + \rho \vec{f}_V. \quad (8.23)$$

Wspomniano wcześniej, że całkowity tensor naprężeń posiada dwie składowe, co można zapisać matematycznie jako

$$\vec{T} = -p\vec{I} + \vec{\tau}, \quad (8.24)$$

gdzie:  $-p\vec{I}$  - całkowity tensor naprężeń normalnych [Pa],  $p$  - ciśnienie [Pa],  $\vec{I}$  - tensor jednostkowy [-],  $\vec{\tau}$  - całkowity tensor naprężeń stycznych [Pa].

Znak minus, występujący przed tensorem naprężeń normalnych, wynika z faktu, że ciśnienie działające na powierzchnię objętości skończonej generuje siłę powierzchniową skierowaną przeciwnie do wektora normalnego tej powierzchni.

Całkowity tensor naprężeń stycznych może posiadać wiele składowych. Najczęściej uwzględnia się w nim tensor molekularnych naprężeń lepkich ( $\vec{\tau}^m$ ) oraz tensor naprężeń turbulentnych ( $\vec{\tau}^t$ ), wówczas równanie bilansu pędu otrzyma formę

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \vec{v}) = \operatorname{div}(-p\vec{I} + \vec{\tau}^m + \vec{\tau}^t) + \rho \vec{s}_p, \quad (8.25)$$

przy czym człon  $\rho \vec{f}_V$  zastąpiono bardziej ogólnym symbolem źródła  $\rho \vec{s}_p$ .

### 8.1.7. Równanie bilansu energii

Ostatnim najczęściej wykorzystywanym równaniem bilansowym jest równanie energii. Zazwyczaj w analizach uwzględnia się jedynie energię kinetyczną

$$E_k = \frac{m\vec{v}^2}{2} = \int_V \left( \frac{\rho \vec{v}^2}{2} \right) dV \quad (8.26)$$

oraz energię wewnętrzną

$$U = mu = \int_V (\rho u) dV, \quad (8.27)$$

gdzie:  $\frac{\rho \vec{v}^2}{2}$  - gęstość energii kinetycznej [J/m<sup>3</sup>],  $\rho u$  - gęstość energii wewnętrznej [J/m<sup>3</sup>].

Sumę obu tych energii nazywa się energią całkowitą

$$E = \int_V \left( \frac{\rho \bar{v}^2}{2} + \rho u \right) dV \quad (8.28)$$

lub

$$E = \int_V (\rho e) dV, \quad (8.29)$$

gdzie:  $\rho e$  - gęstość energii całkowitej [J/m<sup>3</sup>],  $e$  - energia całkowita właściwa (jednostkowa) [J/kg].

Zgodnie z II Zasadą Termodynamiki, zmiana energii układu termodynamicznego może odbyć się poprzez wymianę z otoczeniem ciepła oraz pracy. W przypadku objętości skończonej oba te czynniki mogą mieć charakter powierzchniowy lub objętościowy. Zmianę energii w czasie można zatem zapisać następująco

$$\frac{dE}{dt} = L_S + L_V + Q_S + Q_V \quad (8.30)$$

lub

$$\frac{d}{dt} \int_V (\rho e) dV = L_S + L_V + Q_S + Q_V, \quad (8.31)$$

gdzie:  $L_S$  - praca sił powierzchniowych [J],  $L_V$  - praca sił objętościowych [J],  $Q_S$  - ciepło wymieniane przez objętość skończoną z otoczeniem [J],  $Q_V$  - ciepło źródeł działających wewnątrz objętości skończonej [J].

Zgodnie z podstawową definicją pracy, jest ona iloczynem siły ([N]) i przemieszczenia ([m]). Wobec powyższego, pracę sił powierzchniowych przypadającą na jednostkę czasu ([1/s]) można wyrazić następująco

$$L_S = \vec{F}_S \vec{v} = \int_S (\vec{T} \vec{v} \cdot \vec{n}) dS. \quad (8.32)$$

Analogicznie można zapisać pracę sił masowych

$$L_V = \vec{F}_V \vec{v} = \int_V (\rho \vec{f}_V \vec{v}) dV. \quad (8.33)$$

Ilość ciepła przepływającego przez powierzchnię objętości skończonej zależy od intensywności strumienia ciepła (który to jest wektorem), a zatem

$$Q_S = \int_S (\vec{q}_S \cdot \vec{n}) dS. \quad (8.34)$$

Z kolei, ilość ciepła generowanego (albo odbieranego) wewnątrz objętości skończonej zależy od intensywności źródeł ciepła (będących wielkościami skalarnymi)

$$Q_V = \int_V (\rho q_V) dV. \quad (8.35)$$

Wracając do wzoru (8.30), zmiana energii zachodząca w jednostce czasu w objętości skończonej, wyrazi się równaniem

$$\frac{d}{dt} \int_V (\rho e) dV = \int_S (\vec{T}\vec{v} \cdot \vec{n}) dS + \int_V (\rho \vec{f}_V \cdot \vec{v}) dV + \int_S (\vec{q}_S \cdot \vec{n}) dS + \int_V (\rho q_V) dV. \quad (8.36)$$

Aby pozbyć się symbolu różniczki zupełnej stojącego przed całką znajdującą się po lewej stronie znaku równości, należy skorzystać z Twierdzenia Transportu Reynoldsa, wówczas

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho e) dV + \int_S (\rho e \vec{v} \cdot \vec{n}) dS = \int_S (\vec{T}\vec{v} \cdot \vec{n}) dS + \int_V (\rho \vec{f}_V \cdot \vec{v}) dV + \int_S (\vec{q}_S \cdot \vec{n}) dS + \int_V (\rho q_V) dV. \quad (8.37)$$

Stosując trzykrotnie Twierdzenie Greena-Gaussa-Ostrogradzkiego można ujednocnić rodzaj całki w całym równaniu (przechodząc na całki objętościowe)

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho e) dV + \int_V \operatorname{div}(\rho e \vec{v}) dV = \int_V \operatorname{div}(\vec{T}\vec{v}) dV + \int_V (\rho \vec{f}_V \cdot \vec{v}) dV + \int_V (\vec{q}_S) dV + \int_V (\rho q_V) dV. \quad (8.38)$$

Po opuszczeniu symbolu całek

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \operatorname{div}(\rho e \vec{v}) = \operatorname{div}(\vec{T}\vec{v}) + \rho \vec{f}_V \cdot \vec{v} + \vec{q}_S + \rho q_V. \quad (8.39)$$

Rozpisując składowe tensora naprężeń oraz stosując odpowiednie grupowanie członów, równanie przyjmie postać

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \operatorname{div}(\rho e \vec{v}) = \operatorname{div} \left[ (-p\vec{I} + \vec{\tau}^m + \vec{\tau}^t) \vec{v} + \vec{q}_S \right] + \rho (\vec{f}_V \cdot \vec{v} + q_V). \quad (8.40)$$

Ostatnie dwa elementy równania działają wewnątrz objętości skończonej i mają charakter źródeł, dlatego przeważnie zapisuje się razem

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \operatorname{div}(\rho e \vec{v}) = \operatorname{div} \left[ (-p\vec{I} + \vec{\tau}^m + \vec{\tau}^t) \vec{v} + \vec{q}_S^m + \vec{q}_S^t \right] + \rho s_e, \quad (8.41)$$

gdzie  $s_e = \vec{f}_V \cdot \vec{v} + q_V$ . We wzorze uwzględniono również, że w ogólnym przypadku człon opisujący przepływ ciepła posiada dwie składowe: strumień molekularny ( $\vec{q}_S^m$ ) oraz turbulentny ( $\vec{q}_S^t$ ). Warto wspomnieć, że w ogólnym przypadku wystąpić mogą jeszcze inne czynniki, które spowodują transfer energii termicznej (np. dyfuzja składnika mieszaniny). Wszystkie człony równania bilansu energii mają wymiar [J/(m<sup>3</sup>·s)] (operator *div* daje jednostkę [1/m]).



### 8.1.8. Podstawowy układ równań bilansowych

Wyprowadzone w poprzednich punktach równania tworzą podstawowy układ równań bilansowych masy, pędu i energii (zwanymi niekiedy równaniami transportu) przepływu jednoskładnikowego, obowiązujący dla pojedynczej objętości skończonej

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0, \quad (8.42)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \vec{v}) = \operatorname{div}(-p \vec{I} + \vec{\tau}^m + \vec{\tau}^t) + \rho \vec{s}_p, \quad (8.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \operatorname{div}(\rho e \vec{v}) = \operatorname{div}\left[(-p \vec{I} + \vec{\tau}^m + \vec{\tau}^t) \vec{v} + \vec{q}_s^m + \vec{q}_s^t\right] + \rho s_e. \quad (8.44)$$

Aby przedstawić pewne właściwości układu, warto go zapisać w formie wektorowej (przeniesiono tu jeszcze ciśnienie na lewą stronę równania)

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{v} \\ \rho e \end{pmatrix} + \operatorname{div} \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} + p \vec{I} \\ \rho e \vec{v} + p \vec{I} \vec{v} \end{pmatrix} = \operatorname{div} \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{\tau}^m + \vec{\tau}^t \\ (\vec{\tau}^m + \vec{\tau}^t) \vec{v} + \vec{q}_s^m + \vec{q}_s^t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \rho \vec{s}_p \\ \rho s_e \end{pmatrix}. \quad (8.45)$$

Pierwszy człon równania to człon czasowy, opisujący możliwość występowania niestacjonarności w przepływie. Dla przepływów stacjonarnych (tj. nie zmieniających się w czasie) oraz dla przepływów płynów nieściśliwych, ten fragment równania ma wartość zerową.

Drugi człon równania to człon konwekcyjny i opisuje możliwość wymiany bilansowanej wielkości z otoczeniem objętości skończonej. Składniki tego członu mają charakter odwracalny, co oznacza, że mogą ulegać konwersji. Przykładem może być ciśnienie: płyn po kompresji może oddać później energię ciśnienia podczas ekspansji.

Człon trzeci równania to człon dyssypacyjny, opisujący zjawiska nieodwracalne. Należą do nich wszelkie zjawiska związane z lepkością, turbulencją, dyfuzją termiczną (lub dyfuzją składnika w przepływach wielofazowych), radiacją itp.

Ostatni człon równania to człon źródłowy, opisujący możliwość zmiany wielkości bilansowanej wewnątrz objętości skończonej.

### 8.1.9. Domknięcia

Opisany w poprzednim punkcie układ równań bilansowych posiada następujący zbiór zmiennych

$$\{\rho, \vec{v}, p, \vec{\tau}(\vec{\tau}^m, \vec{\tau}^t, \dots), \vec{s}_p, e, \vec{q}_s(\vec{q}_s^m, \vec{q}_s^t, \dots), s_e\}. \quad (8.46)$$

Ponieważ zmiennych tych jest znacznie więcej niż równań, układ ten musi zostać uzupełniony dodatkowymi zależnościami, tzw. domknięciami.

Domknięcie jest to model matematyczny opisujący jednostkowe zjawisko lub proces, uzupełniający podstawowy układ równań bilansowych. Przykładami domknięć mogą być wzory na tensor naprężeń lepkich, tensor naprężeń turbulentnych, strumień ciepła, siły masowe itp.

### 8.1.10. Klasy równań

Równania Mechaniki Płynów można podzielić na cztery podstawowe grupy:

- równania bilansowe (lub transportu) – opisują one zmiany pewnej wielkości ekstensywnej na poziomie makrostruktury (w obszarze pojedynczej komórki kontrolnej). Przykładami są równania bilansu masy, pędu, energii, entropii itp.
- równania ewolucji – opisują one zmiany pewnej wielkości na poziomie mikrostruktury (w obszarze pojedynczej komórki kontrolnej) i mają taką samą strukturę jak główne równania bilansowe. Przykładami mogą być równania ewolucji energii turbulencji, stopnia jej dyssypacji, wirowości czy intermitencji.
- równanie kinematyki – opisuje prędkość deformacji elementu płynu.
- równania konstytutywne – opisują właściwości płynu. Generalnie rozróżnia się cztery rodzaje równań konstytutywnych:
  - równania stanu;
  - domknięcia na tensory naprężeń lepkich, turbulentnych i innych;
  - domknięcia na przepływ ciepła;
  - domknięcia na źródła masy, pędu i energii.

## 8.2. Model Ośrodka Porowatego

### 8.2.1. Koncepcja

Najprostszym sposobem uwzględnienia wpływu przeszkody, jaką jest ośrodek porowaty, na zachowanie przepływającego przez niego płynu, jest wprowadzenie do równań bilansowych dodatkowego czynnika (domknięcia), powodującego makroskopowe zwiększenie oporów ruchu (patrz Punkt 7.3.3). Opory te hamują pęd płynu, a dodatkowo działają w całej objętości ośrodka porowatego. Widać więc, że wg tej koncepcji należy w jakiś sposób zmodyfikować człon źródłowy równania bilansu pędu.

Źródło oporu opisać można dowolnym równaniem, np. wspomnianym w poprzednich rozdziałach równaniem Forchheimera. Równanie to w przestrzeni trójwymiarowej zapisać można następująco [6]

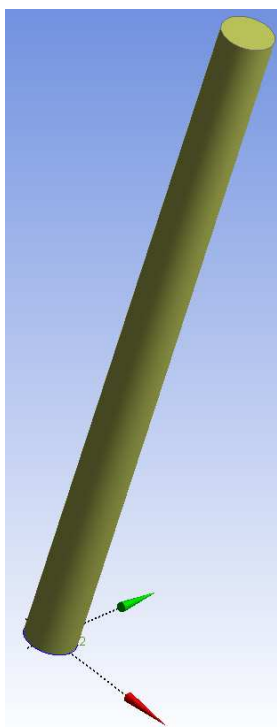
$$s_i = \sum_{j=3}^3 D_{ij} \cdot \mu \cdot v_j + \sum_{j=3}^3 C_{ij} \cdot \frac{\rho \cdot |v_j| \cdot v_j}{2}. \quad (8.47)$$

Oznaczenia występujące we wzorze są zgodne z oznaczeniami stosowanymi w dokumentacji pakietu ANSYS Fluent [6], użytego dalej do przeprowadzenia przykładowej symulacji. Symbol  $s_i$  oznacza źródło sił dla  $i$ -tego kierunku przestrzeni (X, Y oraz Z w przypadku 3D),  $\mu$  - współczynnik lepkości dynamicznej płynu [kg/(m·s)],  $v_j$  - składową prędkości na  $j$ -tym kierunku przestrzeni [m/s],  $|v|$  - bezwzględną wartość prędkości [m/s].  $D_{ij}$  oraz  $C_{ij}$  są wielkościami występującymi w modelu jako macierze diagonalne, w których na przekątnej umieszczone są wartości równe odpowiednio odwrotności współczynnika przepuszczalności  $\frac{1}{\kappa}$  oraz podwójnej wartości współczynnika Forchheimera  $\beta$ . Pozostałe elementy macierzy są zerowe. Warto uzupełnić, że w ogólnym przypadku macierze  $D_{ij}$  oraz  $C_{ij}$  mogą być bardziej rozbudowane, uwzględniając zmiany współczynników  $\kappa$  i  $\beta$  zarówno w przestrzeni jak i w czasie.

Opisana tu koncepcja nosi w literaturze nazwę Modelu Ośrodka Porowatego (ang. Porous Media Model) i przeznaczona jest do makroskopowego modelowania przepływów płynów przez ośrodki porowate w ujęciu Eulera.

### 8.2.2. Model symulacyjny

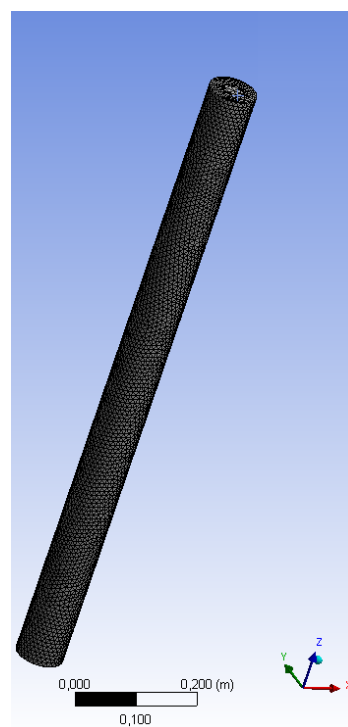
W tej części rozdziału przedstawiono opis tworzenia makroskalowego modelu symulacyjnego stanowiącego wirtualny odpowiednik eksperymentu z Rozdziału 2. Jako przykład obliczeniowy wybrano granulat 6 [mm]. Model wykonano w pakiecie ANSYS Fluent v. 14.5. Definicja zagadnienia, wymaga wykonania trzech głównych kroków – są to: a) określenie geometrii zagadnienia, b) generacja siatki i definicja typów brzegów, c) definicja warunków brzegowych i początkowych, definicja modelu fizycznego oraz konfiguracja warunków rozwiązania.



Rys. 8.4. Geometria modelu



Rys. 8.5. Nazwy brzegów



Rys. 8.6. Siatka modelu

Aby wykonać wirtualny model kolumny porowatej z Rysunku 2.8, należy uruchomić – w środowisku Workbench pakietu ANSYS [1] – moduł DesignModeler [4] i wykonać następujące kroki:

- Na płaszczyźnie XY narysować okrąg o promieniu 40 [mm]. Środek okręgu powinien znajdować się w środku układu osi.
- Używając narzędzia „Extrude”, wykonać wyciągnięcie w kierunku osi Z na długości 1100 [mm] (100 [mm] odcinek dolotowy, trzy odcinki po 300 [mm] między króćcami oraz odcinek wylotowy o długości 100 [mm]). W opcjach narzędzia należy zaznaczyć „Add Frozen” w pozycji „Operation”.
- Po stworzeniu bryły należy wybrać ją w drzewie obiektów i w pozycji „Fluid/Solid” wybrać opcję „Fluid”. Widok bryły widoczny jest na Rys. 8.4.

W celu przygotowania siatki należy uruchomić moduł Meshing [2] i przeprowadzić następujące operacje:

- Zaznaczyć dolną, leżącą na płaszczyźnie XY, dennicę walca i za pomocą opcji „Create Named Selection”, dostępnej po kliknięciu prawego przycisku myszy, nadać jej nazwę „velocity\_inlet” (Rys. 8.5).
- Zaznaczyć analogicznie górną dennicę walca i nadać jej nazwę „pressure\_outlet”.
- W taki sam sposób nazwać powierzchnię cylindryczną kolumny jako „wall”.

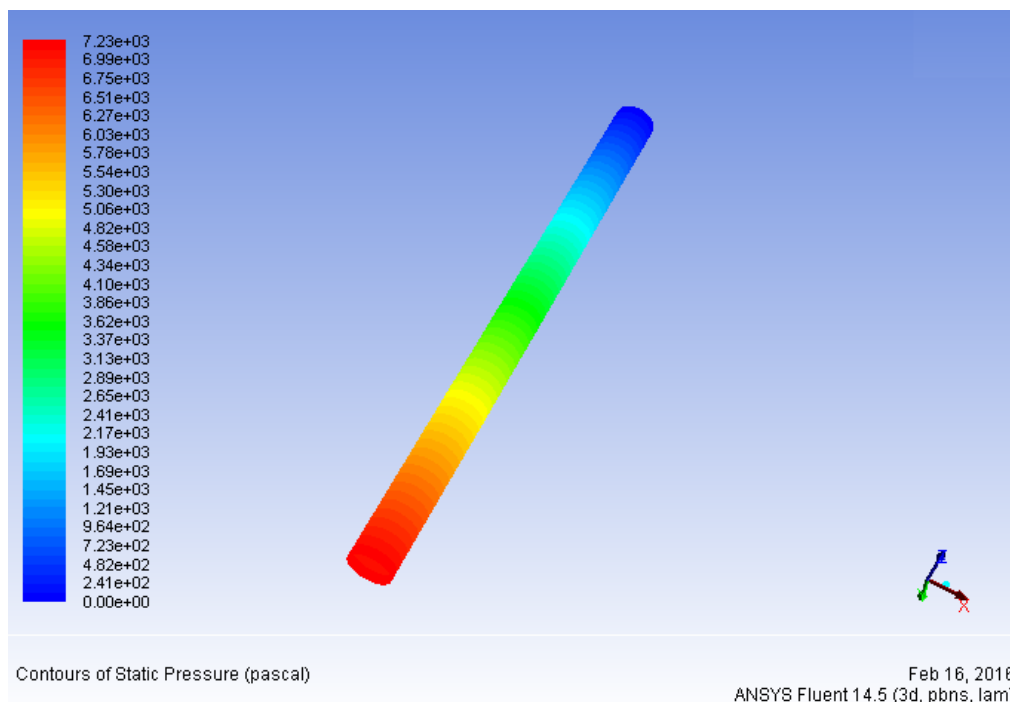
- Na drzewie obiektów wybrać pozycję „Mesh”, a następnie zdefiniować parametry tworzonej siatki, np.:
  - Wartość „Relevance” ustawić na 100.
  - W opcji „Relevance Center” wybrać „Fine”.
  - W opcji „Smoothing” wybrać „High”;
  - W opcji „Use Automatic Inflation” wybrać „All Faces in Chosen Named Selection”. Jako „Named Selection” wybrać „wall”.
  - Wygenerować siatkę (Rys. 8.6).

Kolejne kroki definiowania modelu wykonuje się w module Fluent [3]. Są one następujące:

- W menu „Mesh” wybrać po kolei: „Check”, „Smooth” oraz „Swap”.
- W sekcji „General” zaznaczyć opcję „Gravity” i wpisać na kierunku osi Z wartość siły masowej (9.81). Zakłada się tu, że przepływ płynu odbywa się zgodnie ze zwrotem osi Z.
- W sekcji „Materials” stworzyć nowy czynnik o nazwie „water” i wpisać jej parametry dla zadanej temperatury (w przykładzie są to 32 [°C]):
  - Density: 995.09 [kg/m<sup>3</sup>].
  - Viscosity 0.000765 [kg/(m·s)].
- W sekcji „Cell Zone Conditions” wybrać strefę porowatą, a następnie:
  - Zmienić typ materiału z „air” (jest to domyślny rodzaj medium) na „water” (po tej operacji można skasować w sekcji „Materials” czynnik o nazwie „air”).
  - Zaznaczyć opcję „Porous Zone”, a następnie na zakładce „Porous Zone” ustawić:
    - W oknach X, Y i Z pozycji „Direction-1 Vector” wpisać odpowiednio: 0, 0 oraz 1.
    - W oknach X, Y i Z pozycji „Direction-2 Vector” wpisać odpowiednio: 1, 1 oraz 0.
    - W ramce „Viscous Resistance” wpisać we wszystkich trzech oknach wartość współczynnika  $\frac{1}{\kappa}$  (0.3914e+08 dla granulatu 6 [mm]).
    - Zaznaczyć opcję „Alternative Formulation” i we wszystkich trzech oknach wpisać podwojoną wartość współczynnika  $\beta$  (0,1092e+0,5 dla granulatu 6 [mm]).
    - W opcji „Porosity” wpisać porowatość (0.413 dla granulatu 6 [mm]).
- W sekcji „Boundary Conditions”:
  - Na wlocie wpisać pożądaną wartość prędkości filtracji (np. pierwszą prędkość filtracji używaną podczas eksperymentów, czyli 0.002582 [m/s]).
  - Ciśnienie na wylocie ustawić na „0” (jest to ciśnienie definiowane względem ciśnienia odniesienia, tu ciśnienia atmosferycznego – to z kolei określa się w sekcji „Operating Conditions”).
- W sekcji „Monitors”, dla pozycji „Residuals”, zmniejszyć o dwa rzędy wielkości kryterium zbieżności dla wszystkich wyliczanych parametrów.

Aby rozpocząć obliczenia należy wykonać jeszcze inicjalizację. W tym celu w sekcji „Solution Initialization” należy wybrać „Standard Initialization”, a następnie „velocity\_inlet” w oknie „Compute from”. Po potwierdzeniu inicjalizacji klawiszem „Initialize” można przejść do sekcji „Run Calculation”, wpisać liczbę iteracji (np. 500) i rozpocząć obliczenia klawiszem „Calculate”.

Uzyskany w obliczeniach rozkład ciśnień widoczny jest na Rys. 8.7. Tak samo jak w eksperymencie, ciśnienie stopniowo maleje wzdłuż osi Z, osiągając w najwyższym punkcie kolumny wartość zero (czyli ciśnienie atmosferyczne).



Rys. 8.7. Rozkład ciśnienia statycznego wzdłuż kolumny

Po wykonaniu obliczeń należy sprawdzić, jakie ciśnienia panują na wysokościach odpowiadających poszczególnym króćcom pomiarowym. W tym celu należy z menu „Surface” wybrać pozycję „Point...”, a następnie zdefiniować i nazwać cztery charakterystyczne lokalizacje dla współrzędnej Z: 0.1 [m] (króciec nr 4), 0.4 [m] (króciec nr 3), 0.7 [m] (króciec nr 2) oraz 1.0 [m] (króciec nr 1).

Aby zapisać wartości ciśnień w poszczególnych lokalizacjach (nazwanych tu P1, P2, P3 i P4) należy w sekcji „Plots” wybrać pozycję „XYPlot”, a następnie:

- W oknach „Plot Direction” wpisać odpowiednio 0, 0 oraz 1.
- W oknie „Surfaces” zaznaczyć nazwy 4 zdefiniowanych wcześniej lokalizacji punktów.
- Zaznaczyć opcję „Write to File” i zapisać plik.

Aby odnieść się do eksperymentu, należy obliczyć – na podstawie zapisanego pliku – różnice ciśnień między punktami P4 oraz P1. W przykładzie na Rys. 8.8 różnica ta wynosi 724.96 [Pa].

```
(title "Static Pressure")
(labels "Position" "Static Pressure")

((xy/key/label "p1")
0.97 33.8312
)
((xy/key/label "p2")
0.67 275.483
)
((xy/key/label "p3")
0.37 517.135
)
((xy/key/label "p4")
0.07 758.79
)
```

Rys. 8.8. Przykład raportu zawierającego wartości ciśnień w charakterystycznych punktach kolumny

### 8.2.3. Wyniki

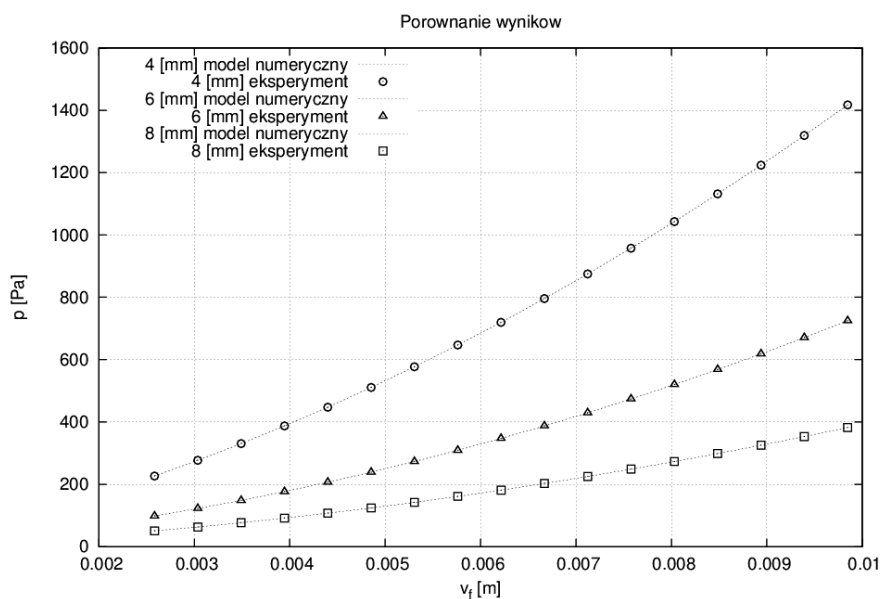
W Tabeli 8.1 oraz na Rys. 8.9 przedstawiono porównanie wyników eksperymentów z wynikami symulacji dla wszystkich trzech analizowanych granulatów. Każda z pozycji zawiera 17 charakterystycznych punktów, odpowiadających poszczególnym wartościom prędkości filtracji.

Tabela 8.1. Zestawienie wyników uzyskanych w modelu numerycznym

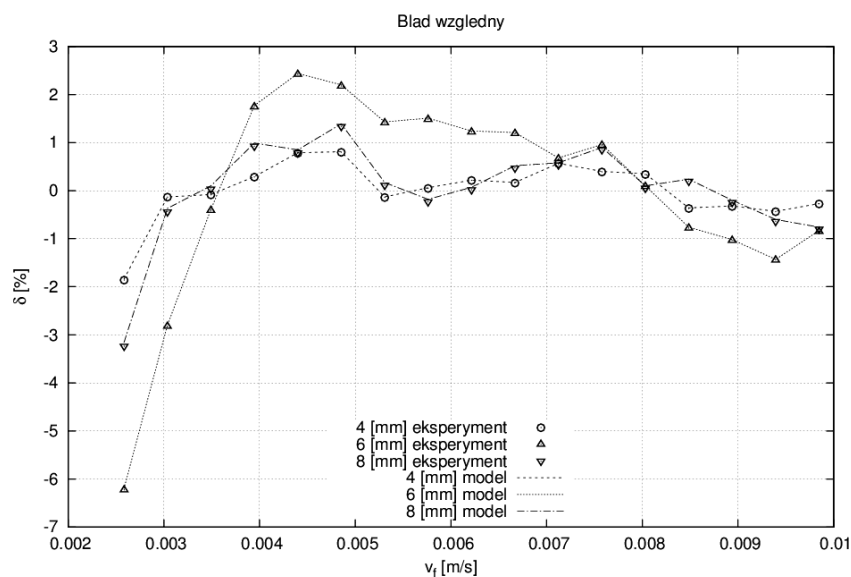
$v_f$	Granulat 4 [mm]			Granulat 6 [mm]			Granulat 8 [mm]		
	$dp_{4-1}^{exp}$	$dp_{4-1}^{num}$	$\delta$	$dp_{4-1}^{exp}$	$dp_{4-1}^{num}$	$\delta$	$dp_{4-1}^{exp}$	$dp_{4-1}^{num}$	$\delta$
[m/s]	[Pa]	[Pa]	[%]	[Pa]	[Pa]	[%]	[Pa]	[Pa]	[%]
0.00258270	230.73	226.48	-1.84	105.04	98.52	-6.20	52.28	50.63	-3.16
0.00303671	277.28	276.93	-0.13	126.11	122.57	-2.80	63.41	63.18	-0.37
0.00349071	330.86	330.61	-0.08	149.22	148.64	-0.39	76.74	76.82	0.10
0.00394472	386.35	387.47	0.29	173.65	176.72	1.77	90.65	91.55	0.99
0.00439873	444.03	447.53	0.79	201.89	206.81	2.44	106.47	107.37	0.85
0.00485274	506.69	510.79	0.81	233.78	238.92	2.20	122.58	124.29	1.39
0.00530675	577.99	577.23	-0.13	269.18	273.04	1.43	142.05	142.29	0.17
0.00576076	646.50	646.86	0.06	304.59	309.18	1.51	161.68	161.39	-0.18
0.00621476	718.09	719.68	0.22	343.06	347.32	1.24	181.45	181.58	0.07
0.00666877	794.37	795.70	0.17	382.86	387.48	1.21	201.81	202.86	0.52
0.00712278	869.91	874.90	0.57	426.75	429.65	0.68	223.92	225.23	0.58
0.00757679	953.50	957.31	0.40	469.32	473.84	0.96	246.47	248.69	0.90
0.00803080	1039.29	1042.89	0.35	519.50	520.03	0.10	272.98	273.24	0.10
0.00848481	1135.77	1131.67	-0.36	572.60	568.25	-0.76	298.17	298.89	0.24
0.00893881	1227.56	1223.64	-0.32	624.83	618.47	-1.02	326.29	325.62	-0.20
0.00939282	1324.48	1318.81	-0.43	680.42	670.71	-1.43	355.58	353.45	-0.60
0.00984683	1420.96	1417.17	-0.27	731.04	724.96	-0.83	385.3	382.37	-0.76

Na Rys. 8.10 przedstawiono porównanie błędów uzyskanych na etapie eksperymentu oraz modelu numerycznego. Zgodnie z oczekiwaniami wartości błędów są praktycznie takie same.

W podanym tu przykładzie nie widać przewagi modelowania numerycznego nad podejściem analitycznym, co wynika z prostoty przykładu. Gdyby jednak układ przepływowy był bardziej rozbudowany – o skomplikowanej geometrii i różnie rozlokowanych strefach porowatych – podejścia analitycznego nie dało by się już zastosować.



Rys. 8.9. Porównanie wyników symulacji z eksperymentem



Rys. 8.10. Porównanie błędów

### 8.3. Możliwości zastosowań zbioru $\Phi$

Jak pokazano w poprzednim punkcie, opracowanie modelu symulacyjnego wysoce zgodnego z eksperymentem nie jest większym problemem, o ile – oczywiście – znane są współczynniki równania Forcheimera. W pracy pokazano, że najkorzystniej jest je określić na podstawie eksperymentu testowego i rozwiązania zagadnienia odwrotnego. Znając parametry materiałowe danego ośrodka granularnego można modelować inne układy, o znacznie bardziej skomplikowanej geometrii. Podejście takie zwane jest „strategią odchyień od modelu bazowego” [11]. Strategia ta wymaga istnienia modelu bazowego, tzn. takiego, który jest zgodny z eksperymentem na żądanym poziomie jakościowym i ilościowym. Mając model bazowy i zmieniając w niewielkim zakresie różne jego elementy (geometrię, parametry, zakresy itp.) można przewidywać zachowanie się zmodyfikowanego układu. Wadą omawianego podejścia jest to, że ewentualnie występujące zjawiska o charakterze bifurkacyjnym mogą nie zostać w modelu symulacyjnym wykryte.

W Tabelach 8.2-8.4 zestawiono wartości członu liniowego  $A(\Phi)$  wyliczone na podstawie równań z Tabeli 2.4. Do obliczeń wybrano tylko te formuły, dla których wiadome są wszystkie składowe. Jak widać, wyniki obliczeń odbiegają znacząco od wartości wyznaczonych eksperymentalnie.

Tabela 8.2 Wyniki obliczeń członu liniowego dla granulatu 4 [mm] wg formuł z Tabeli 2.5

Lp.	Formuła	$K$	$\kappa$	$\frac{1}{\kappa}$	$\delta$	$\frac{1}{\kappa^{\text{exp}}} / \frac{1}{\kappa}$
		[m/dzień]	[m <sup>2</sup> ]	[1/m <sup>2</sup> ]	[-]	[%]
1	Hazen (1892)	25561.44	2.29E-008	43644022.77	56.13	2.28
2	Slitcher (1898)	8984.09	8.05E-009	124175565.82	-24.82	0.80
3	Terzaghi (1925)	15749.72	1.41E-008	70833263.39	28.80	1.40
4	Kozeny-Carman (1937)	27446.64	2.46E-008	40646298.91	59.14	2.45
5	Breyer (1966)	27931.00	2.50E-008	39941437.86	59.85	2.49
6	USBR (1992)	1571.67	1.41E-009	709818925.19	-613.51	0.14

Tabela 8.3 Wyniki obliczeń członu liniowego dla granulatu 6 [mm] wg formuł z Tabeli 2.5

Lp.	Formuła	$K$	$\kappa$	$\frac{1}{\kappa}$	$\delta$	$\frac{1}{\kappa^{\text{exp}}} / \frac{1}{\kappa}$
		[m/dzień]	[m <sup>2</sup> ]	[1/m <sup>2</sup> ]	[-]	[%]
1	Hazen (1892)	65084.79	5.60E-008	17867537.62	54.35	2.19
2	Slitcher (1898)	23433.42	2.02E-008	49625927.20	-26.79	0.79
3	Terzaghi (1925)	41143.5	3.54E-008	28264610.57	27.79	1.38
4	Kozeny-Carman (1937)	72754.5	6.26E-008	15983960.03	59.16	2.45
5	Breyer (1966)	69431.58	5.97E-008	16748934.64	57.21	2.34
6	USBR (1992)	4450.91	3.83E-009	261273637.39	-567.54	0.15

Tabela 8.4 Wyniki obliczeń członu liniowego dla granulatu 8 [mm] wg formuł z Tabeli 2.5

Lp.	Formuła	$K$	$\kappa$	$\frac{1}{\kappa}$	$\delta$	$\frac{1}{\kappa^{\text{exp}}} / \frac{1}{\kappa}$
		[m/dzień]	[m <sup>2</sup> ]	[1/m <sup>2</sup> ]	[-]	[%]
1	Hazen (1892)	103131.64	9.44E-008	10596524.91	42.27	1.73
2	Slitcher (1898)	36835.37	3.37E-008	29668141.95	-61.63	0.62
3	Terzaghi (1925)	64642.09	5.92E-008	16905966.11	7.90	1.09
4	Kozeny-Carman (1937)	113747.01	1.04E-007	9607610.76	47.66	1.91
5	Breyer (1966)	110896.09	1.01E-007	9854603.21	46.31	1.86
6	USBR (1992)	7697.68	7.04E-009	141969593.58	-673.45	0.13

Zasadniczą wadą zastosowanych tu wzorów stanowi słabe (albo żadne) odniesienie do fizyki zjawisk – szczególnie bazowanie na małej liczbie parametrów opisujących złożę [10]. Są to głównie wzory empiryczne, wyskalowane dla bardzo konkretnych sytuacji i – jak widać – nie mające charakteru uniwersalnego. Ponadto, jak m.in. wykazano w pracy [8], złoża o tych samych porowatościach mogą różnić się znacznie innymi parametrami charakteryzującymi ich strukturę wewnętrzną: krętością, powierzchnią wewnętrzną czy też powierzchnią specyficzną.

Ważnym równaniem uwzględniającym więcej czynników niż tylko porowatość, a do tego wyprowadzonym na podstawie analiz teoretycznych, jest oryginalne<sup>10</sup> równanie Kozeny-Carmana [7,5] (znaczenie poszczególnych symboli podane było w Rozdziale 2)

$$\frac{dp}{dx} = C_{KC} \cdot \tau_f \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f) \quad (8.48)$$

lub

$$\frac{dp}{dx} = A(\Phi) \cdot (\mu \cdot \bar{v}_f). \quad (8.49)$$

Szeroka dyskusja na temat tego równania, jego pochodzenia oraz znaczenia poszczególnych członów przeprowadzona była w pracy [9]. Szczególną uwagę zwrócono tam na problem zapisu podstawowej formy tego równania.

Tabela 8.5 Porównanie wyników obliczeń członu  $A(\Phi)$  z równania (8.49)

Granulat	$\phi$	$\tau_{10000}^g$	$S_{0,Carman}$	$\frac{1}{\kappa_{KC}}$	$\frac{1}{\kappa_{exp}}$	$\delta$	$\frac{1}{\kappa^{\text{exp}}} / \frac{1}{\kappa}$
[mm]	[m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	[m/m]	[1/m]	[1/m <sup>2</sup> ]	[1/m <sup>2</sup> ]	[-]	[-]
4	0.4111	1.2109	1526.90	85357342.44	99482800	14.20	1.17
6	0.4153	1.2083	987.99	34019934.19	39140000	13.08	1.15
8	0.4154	1.2105	758.32	20078551.24	18355400	-9.39	0.91

<sup>10</sup> W Tabeli 2.5 również znajduje się równanie Kozeny-Carmana, ale nie jest to wersja pierwotna tego równania.



W Tabeli 8.5 zestawiono wyniki obliczeń wartości członu  $A(\Phi)$  równania Kozeny-Carmana, przyjmując standardową wartość stałej modelu (równą 5.0) oraz wartości wyliczone w Rozdziale 6 (Tabele 6.1, 6.2 i 6.3). Okazuje się, że taki sposób obliczania daje najlepszy wynik ze wszystkich testowanych formuł. Błąd jest najmniejszy, a do tego sytuuje się na podobnym poziomie niezależnie od rozmiarów kulek.

Zakładając słuszność prawa Kozeny-Carmana, dalszą kalibrację modelu przeprowadzić można za trzy podstawowe sposoby:

- poprzez zmianę wartości stałej modelu:

$$A(\Phi) = \frac{1}{K^{\text{exp}}} = C_{KC} \cdot \tau_f \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot C, \quad (8.50)$$

gdzie  $C = 1.17$ ,  $C = 1.15$  oraz  $C = 0.91$  [-], odpowiednio dla granulatu 5, 6 i 8 [mm];

- poprzez wprowadzenie dodatkowej funkcji:

$$A(\Phi) = \frac{1}{K^{\text{exp}}} = C_{KC} \cdot \tau_f \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \cdot f(x), \quad (8.51)$$

gdzie nieznaną (zależną np. od sposobu usypywania złoża, wariacji rozmiarów cząstek, struktury powierzchni cząstek itp.) funkcja  $f(x)$  dla poszczególnych granulatów ma wartości 1.17, 1.15 oraz 0.91 [-];

- poprzez modyfikację czynnika krętości (pozostałe wielkości we wzorze są niezmiennie)

$$A(\Phi) = \frac{1}{K^{\text{exp}}} = C_{KC} \cdot \tau_f' \cdot S_0^2 \cdot \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3}, \quad (8.52)$$

przy czym

$$\tau_f' = (C_\tau \cdot \tau)^2, \quad (8.53)$$

gdzie  $C_\tau = \sqrt{1.17}$ ,  $C_\tau = \sqrt{1.15}$  oraz  $C_\tau = -\sqrt{0.954}$  [-], odpowiednio dla granulatu 5, 6 i 8 [mm].

Warto zwrócić uwagę, że zwiększenie wartości krętości geometrycznej o około 7-8% powoduje zgodność wyników, dla granulatów 4 i 6 [mm], z błędem względnym poniżej 0.5 %. Dla granulatu 8 [mm] krętość należałoby zmniejszyć o niecałe 5%, aby uzyskać podobnego rzędu błąd względny. Odchyłki te są mniejsze niż procentowe odchyłki minimalnej i maksymalnej krętości, wyliczone dla poszczególnych granulatów z Metody Regularnej Siatki.

Dalsze rozważania dotyczące możliwości kalibracji równania Kozeny-Carmana, lub też możliwości stosowania innych równań o podobnym charakterze, nie będą tu omawiane. Celem Rozdziału nie jest rozwiązanie problemu naukowego – który jest bardzo skomplikowany i być może wiele jeszcze czasu upłynie zanim uda się naukowcom opracować kompletną teorię przepływów płynów przez ośrodki porowate (być może nie nastąpi to nigdy) – ale wskazanie możliwych kierunków działań, zmierzających do tego celu.

## 8.4. Podsumowanie

Analiza przedstawionych w rozdziale wyników pozwala sformułować następujące spostrzeżenia oraz wnioski końcowe:

- Model Ośrodka Porowatego może poprawnie opisywać makroskalowy wpływ istnienia przeszkody, jaką jest ośrodek porowaty, na opory przepływającego przez niego płynu.
- Kluczową słabością podejścia makroskalowego jest brak wiarygodnej metody pozwalającej na wyliczenie odpowiednich współczynników w równaniach opisujących źródło pędu. Formuły obliczeniowe dają zbyt duży rozrzut wartości, aby można było na ich podstawie przewidywać zachowanie układów rzeczywistych.
- Najlepszą jakość przewidywania członu  $A(\Phi)$  uzyskano za pomocą oryginalnego modelu Kozeny-Carmana, co oznacza, że podejście bazujące na zbiorze  $\Phi$ , a nie tylko na porowatości, jest najbardziej skuteczne.
- Różnice w wartościach uzyskanych z eksperymentu oraz ze wzorów dostępnych w literaturze mogą wynikać z następujących przyczyn:
  - Wzory literaturowe wyznaczono głównie dla przepływu grawitacyjnego, podczas gdy w eksperymencie ruch płynu był wymuszony.
  - Wzory literaturowe są mocno uproszczone i opierają się głównie na najbardziej podstawowych wielkościach, taki jak porowatość czy średnica reprezentatywna.
  - Średnice cząstek w przykładzie przekraczają podawany w literaturze zakres stosowalności prawa Kozeny-Carmana.
- Wydaje się, że dalsze badania powinny obejmować następujące kierunki:
  - Uwzględnienie w modelu teoretycznym wpływu zróżnicowania wielkości cząstek, np. poprzez uwzględnienie wariancji albo innych parametrów rozkładu.
  - Uwzględnienie w modelu teoretycznym faktu, że parametry złoża nie są stałe w przestrzeni, co wykazała np. przeprowadzona w Rozdziale 6 analiza pola krętości.
  - Wprowadzenie nowych parametrów opisujących strukturę przestrzeni porów, np. odpowiednio zdefiniowanych liczb fraktalnych.

## Literatura

1. ANSYS Inc. ANSYS Fluent in ANSYS Workbench User's Guide. Release 15. November 2013.
2. ANSYS Inc. ANSYS Fluent Meshing User's Guide. Release 15. November 2013.
3. ANSYS Inc. ANSYS FLUENT User's Guide. Release 14.5. November 2012.
4. ANSYS Inc. DesignModeler User's Guide. Release 15. November 2013.
5. Carman P.C.: Fluid Flow through a Granular Bed. Trans I Chem Eng 1997, Jubilee Supplement, 75, 32-48.
6. Fluent Inc. 2006. Fluent 6.3 User's Guide, Chapter 7.19: Porous Media Conditions.
7. Kozeny J.: Über kapillare Leitung des Wassers im Boden. Akad Wiss Wien 1927, 136(2a), 271-306.
8. Sobieski W., Dudda W., Lipiński S.: A new approach for obtaining the geometric properties of a granular porous bed based on DEM simulations. Tech Sci 2016 (w druku).
9. Sobieski W.: Jakość wiedzy bazowej w badaniach naukowych. Badania naukowe Katedry Mechaniki i Podstaw Konstrukcji Maszyn 2014, 29-47.
10. Sobieski W., Lipiński S.: The porosity-tortuosity correlations for granular beds. Tech Sci 2016 (złożone).
11. Sobieski W.: Podstawowe zasady i etapy modelowania komputerowego w mechanice płynów. Elementy Inżynierii Systemów Rolnictwa 2008, 111-129.
12. Sobieski W.: The basic closures of fluid mechanics in form characteristic for the Finite Volume Method. Tech Sci 2013, 16(2), 93-107.
13. Sobieski W.: The basic equations of fluid mechanics in form characteristic of the Finite Volume Method. Tech Sci 2011, 14(2), 299-313.

## 9. MODELOWANIE PRZEPŁYWU PŁYNÓW PRZEZ OŚRODEK POROWATY METODĄ GAZU SIECIOWEGO BOLTZMANNNA

Do badania własności hydrodynamicznych i strukturalnych ośrodków porowatych można wykorzystać metody doświadczalne, np. techniki obrazowania (MRI, CT) czy metody badania pól prędkości z użyciem cząsteczek unoszonych w płynie i obrazowania z użyciem technik laserowych (PIV). Są to jednak metody bardzo ograniczone, np. wielkością i rodzajem próbki oraz zakresem prędkości dla których działają poprawnie. Dlatego, w ostatnich latach bardzo popularne stały się metody komputerowe i badania rozwiązań numerycznych równań hydrodynamiki. Metody komputerowe pozwalają m. in. na symulację zjawisk transportu płynów przez ośrodki porowate. W takich symulacjach ośrodek reprezentowany jest, zgodnie z informacjami podanymi w Rozdziale 7, albo w postaci makroskopowej siły oporu, albo bezpośrednio jako fizyczne przeszkody w obszarze ośrodka porowatego (ang. pore-scale flow) [1,2].

Rozdział ten poświęcony jest symulacji przepływu w obszarze między przeszkodami czyli bezpośrednio w porach ośrodka. W takim podejściu, istotnym problemem są ograniczenia standardowych metod numerycznych, które do dyskretyzacji równań różniczkowych wymagają tworzenia siatek obliczeniowych. Jest to proces żmudny i skomplikowany zarówno numerycznie jak i technicznie. Wymaga on niekiedy wielu iteracji, nawet dla pojedynczego układu, dodatkowo zwykle jest on angażujący dla człowieka (nie jest w pełni automatyczny). Dodatkowo wynikowe siatki zajmują bardzo dużo pamięci, liczonej nawet w dziesiątkach gigabajtów. Jest to problem dotyczący szczególnie standardowych najbardziej popularnych metod numerycznego rozwiązania równań Naviera-Stokesa – Metody Objętości Skończonych czy Metody Elementów Skończonych.

Metodą numeryczną, która nie wymaga tworzenia siatki obliczeniowej z użyciem specjalistycznych algorytmów, a działa nawet w bardzo skomplikowanej geometrii jest wspomniana już wcześniej Metoda Gazu Sieciowego Boltzmannna (znana w literaturze jako LBM – The Lattice Boltzmann Method). Historycznie została ona wprowadzona jako naturalne rozwinięcie metody gazu sieciowego, gdzie zmienne o wartościach logicznych zastąpione zostały ciągłymi wartościami [3]. W roku 1997 pokazano, że model dyskretny można wyprowadzić wprost z równań transportu Boltzmannna [4]. Od tego czasu nastąpił rozkwit zastosowań tego modelu, szczególnie w transporcie przez ośrodki o budowie granulowanej i porowatej [5,6].

W tym rozdziale przedstawiono metodę LBM oraz jej przykładowe zastosowanie w ośrodku o budowie porowatej. Wykorzystano do tego celu specjalną bibliotekę numeryczną o otwartym kodzie (Palabos). Zagadnieniem szczegółowym, które tu podjęto jest znalezienie pola prędkości wolnego, stacjonarnego przepływu cieczy jednofazowej w ośrodku porowatym o losowo rozłożonych, pokrywających się ziarnach. Dodatkowo opisano sposób na wyznaczenie krętości hydrodynamicznej dla ośrodka porowatego liczonej wprost z obliczonego pola prędkości. Przedstawiono również rozwiązanie problemu transportu w układzie kul upakowanych w pojemniku.

### 9.1. Równania Naviera-Stokesa

Równania Naviera-Stokesa są ogólnymi równaniami opisującymi dynamikę płynów w różnych układach fizycznych. Dla cieczy nieściśliwej, lepkiej, Newtonowskiej i jednofazowej przyjmują one postać:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -(\vec{u} \nabla) \vec{u} - \nabla \varphi + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{u}, \quad (9.1)$$

$$D = \nabla \bar{u} = 0, \quad (9.2)$$

gdzie  $\bar{u}$ , to pole prędkości,  $\varphi$  – skalarnie pole ciśnienia,  $Re$  to liczba Reynoldsa. Liczbę  $Re$  definiuje się jako  $Re = u_0 L / \nu$ , gdzie  $u_0$  to prędkość charakterystyczna,  $L$  to wymiar charakterystyczny (np. wymiar liniowy przeszkody), a  $\nu$  to współczynnik lepkości kinematycznej przepływającego płynu. Drugie równanie, dywergencja pola wektorowego prędkości jest równaniem zachowania masy dla uproszczonego przypadku cieczy nieściśliwej.

W układach porowatych wyliczenie liczby Reynoldsa nie jest proste, istnieje bowiem kilka możliwości wyznaczenia wielkości charakterystycznej  $L$ . Za taką wziąć można np. rozmiar ziarna w układach granulowanych, czy średni rozmiar kanału w układach porowatych o budowie złożonej. Jednakże zarówno rozmiar ziarna (które w strukturach upakowanych mogą mieć różny rozkład średnic, jak i różny kształt) jak i średni rozmiar kanału nie jest dobrze zdefiniowany (można go wyliczyć na różne sposoby). Jednym ze sposobów ominięcia tego problemu jest użycie pierwiastka z przepuszczalności ośrodka (ang. permeability), która ma wymiar długości do kwadratu (szczegóły oraz szerszą dyskusję problemu definicji skali długości w ośrodku porowatym można znaleźć m.in. w [21]).

Przy liczeniu  $Re$  należy również uwzględnić fakt, że nie da się odgadnąć na początku prędkości charakterystycznej  $u_0$  (np. prędkości Darcy'ego [21]). Prędkość ta jest wynikiem pomiaru oraz założonych warunków brzegowych oraz układu szczelin/ziaren ośrodka, który wywiera opór na przepływający płyn. Dlatego utrzymanie  $u_0$  na stałym poziomie wymaga przeprowadzenia pomiarów z tzw. sprzężeniem zwrotnym, gdzie siły zewnętrzne dobieramy do wymaganej wartości charakterystycznej.

## 9.2. Metoda Gazu Sietowego Boltzmanna

W odróżnieniu od standardowych metod komputerowej dynamiki płynów, gdzie do opisu układu używa się zmiennych pierwotnych w postaci pól prędkości i ciśnienia, w Metodzie Gazu Sietowego Boltzmanna wykorzystuje się statystyczny opis płynu z użyciem funkcji rozkładu  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ . Funkcja ta opisuje prawdopodobieństwo, że cząsteczki płynu znajdują się w danym punkcie przestrzeni fazowej pędów i położenia. Innymi słowy funkcja określa liczbowo, jaka frakcja cząsteczek porusza się w danym kierunku i danym czasie w danym punkcie przestrzeni. Znajomość funkcji rozkładu jak i zasad jej ewolucji w czasie i przestrzeni stanowi kompletny opis stanu układu [7].

Ewolucja czasowa funkcji rozkładu jest zadana przez równanie transportu Boltzmanna:

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) \cdot f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = (\partial_t f)_{\text{coll}}, \quad (9.3)$$

gdzie:  $\mathbf{v}$  jest prędkością w punkcie  $\mathbf{r}$  w przestrzeni, a wyraz po prawej stronie opisuje kolizje międzycząsteczkowe (w sensie statystycznego dochodzenia do stanu równowagi). Najbardziej standardowym modelem dla kolizji jest przybliżenie BGK od nazwisk autorów (Bhatnagar, P.L., Gross, E.P., Krook, M.) [8], gdzie dochodzenie do funkcji równowagowej zachodzi liniowo w czasie, tzn.

$$(\partial_t f)_{\text{coll}} \approx -\frac{(f - f^{eq})}{\tau}, \quad (9.4)$$

gdzie:  $f^{eq}$  jest funkcją rozkładu w stanie równowagi,  $\tau$  jest czasem relaksacji. Dla zadanej prędkości i ciśnienia  $f^{eq}$  może być wyznaczona np. z rozkładu Maxwella-Boltzmanna:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi k_b T)^{d/2}} \exp\left[-\frac{\mathbf{v}^2}{2k_b T}\right], \quad (9.5)$$

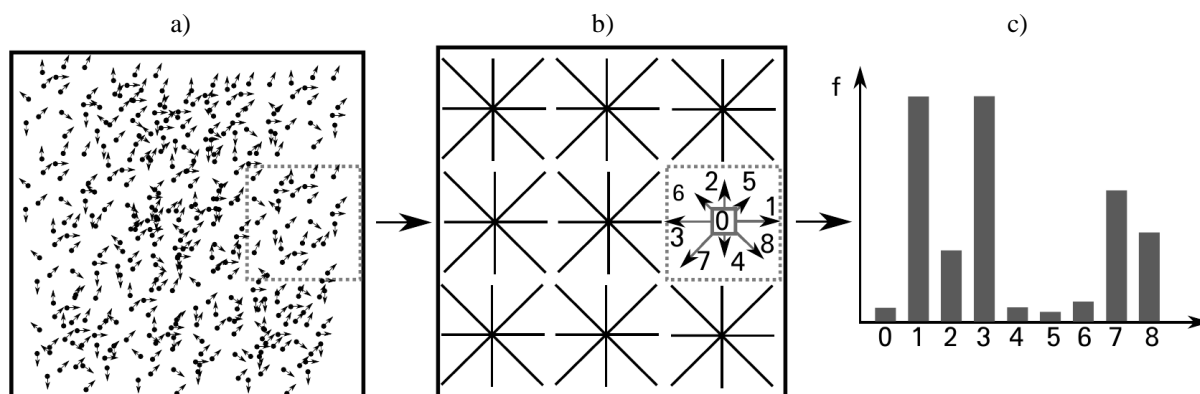
gdzie:  $\rho$  to gęstość,  $k_b$  to stała Boltzmann,  $T$  to temperatura,  $d$  jest wymiarem przestrzeni, a  $\mathbf{v}$  prędkością cząsteczki.

Przedstawiony tu model liniowy w przybliżeniu BGK jest w literaturze nazywany często SRT (ang. single-relaxation time) z powodu uwzględnienia tylko jednego poziomu relaksacji. Ze względu na swoje problemy z dokładnością, m.in. przepuszczalnością wąskich szczelin [9], często rozszerza się postać tego członu do uwzględnienia podwójnego czasu relaksacji DRT (ang. double-relaxation time) lub wielu czasów relaksacji MRT (ang. multi-relaxation time). Równania przybierają wtedy bardziej skomplikowaną postać z wektorem współczynników zamiast pojedynczego czasu relaksacji oraz specjalną macierzą przenoszącą funkcję rozkładu z przestrzeni pędów i położeń do bazy rozpiętej m. in. na wektorach prędkości, pędu itd. [10]. Należy pamiętać, że w przypadku obliczeń wysokich prędkości lub precyzyjnych pomiarów niskich przepuszczalności w wąskich kanałach użycie kolizji MRT może okazać się bardzo istotne. W obliczeniach założono jednak, że czas relaksacji  $\tau$  w przybliżeniu BGK jest równy 1 (lepkość 1/6), co eliminuje problemy z anizotropią modelu i uzasadnia użycie pojedynczej relaksacji nawet w symulacjach transportu w skomplikowanych geometriach [9].

### 9.2.1. Model dyskretny

W celu rozwiązania równania transportu funkcji rozkładu opisuje się ją zwykle na siatce regularnej w  $D$  wymiarach, gdzie w każdym węźle znajduje się wartość  $Q$  wymiarowej funkcji rozkładu dla  $Q$  kierunków prędkości. W ten sposób symbolicznie zapisać można różne modele LBM, np. D2Q5 (model dyfuzji na sieci 2 wymiarowej o 5 dozwolonych kierunkach prędkości), D2Q9 (najbardziej znany i powszechny model hydrodynamiczny na sieci dwuwymiarowej, patrz Rys. 1) czy D3Q15, D3Q27 (modele trójwymiarowe).

W modelu LBM stan układu (płyn złożony z cząsteczek) zapisany jest w postaci funkcji rozkładu, która może być przedstawiona w postaci dyskretnej na sieci kwadratowej. Na Rysunku 9.1 zobrazowano taką funkcję dla modelu z 9 kierunkami wektorów prędkości w przestrzeni dwuwymiarowej (D2Q9). Rysunek 9.1.a przedstawia schemat układu cząsteczek płynu z zaznaczonymi chwilowymi wektorami prędkości. Rysunek 9.1.b ukazuje dyskretną postać funkcji rozkładu z zaznaczonymi wektorami prędkości oraz wyróżnioną komórkę, w której wektory prędkości zostały ponumerowane. Natomiast Rysunek 9.1.c obrazuje wartości funkcji rozkładu z zaznaczonej komórki sieci dyskretnej w formie histogramu wartości dla poszczególnych wektorów sieci.



Rys. 9.1. Model LBM – zapis stanu układu (cząstek płynu) w postaci funkcji rozkładu o charakterze dyskretnym

W modelu dyskretnym ewolucja funkcji rozkładu w czasie przybiera postać:

$$\underbrace{f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{x}, t)}_{\text{Transport}} = - \underbrace{\frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t))}_{\text{Collision}}, \quad (9.6)$$

gdzie:  $\mathbf{c}_i$  to wektory sieci ze zbioru zależnego od wybranego modelu,  $t$  jest czasem dyskretnym,  $\tau$  jest czasem relaksacji BGK. Zbiór wektorów  $\mathbf{c}$  w powyższym równaniu zależy od rodzaju użytej siatki, ilości wektorów  $Q$  oraz jej wymiaru  $D$ . Dla modelu D2Q9 z Rys. 9.1 będzie to:

$$\mathbf{c}_i = \{ (0,0), (1,0), (0,1), (-1,0), (0,-1), (1,1), (-1,1), (-1,-1), (1,-1) \}.$$

Zestawy wektorów dla różnych wariantów modelu można znaleźć w literaturze dotyczącej metody LBM, np. [4,12].

Funkcję rozkładu w stanie równowagi w równaniu transportu wyznacza się z rozwinięcia rozkładu Maxwella-Boltzmann w szereg:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[ 1 + \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i}{c_s^2} + \frac{\mathbf{u}\mathbf{u} \cdot (\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i) - c_s^2 \mathbf{I}}{2c_s^4} \right] \quad (9.7)$$

gdzie  $c_s$  jest prędkością dźwięku na sieci,  $w_i$  są współczynnikami wagowymi, a  $\mathbf{I}$  jest macierzą jednostkową [12].

### 9.2.2. Wartości makroskopowe

W dyskretnym modelu LBM gęstość i prędkość makroskopową liczy się bezpośrednio z funkcji rozkładu. Gęstość jest sumą wartości funkcji rozkładu we wszystkich kierunkach, np. dla modelu  $Q=9$  będzie to:

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i \quad (9.8)$$

W przypadku pędu ( $i$  prędkości) kolejne wartości sumowane są z jednoczesnym mnożeniem przez wektory sieci:

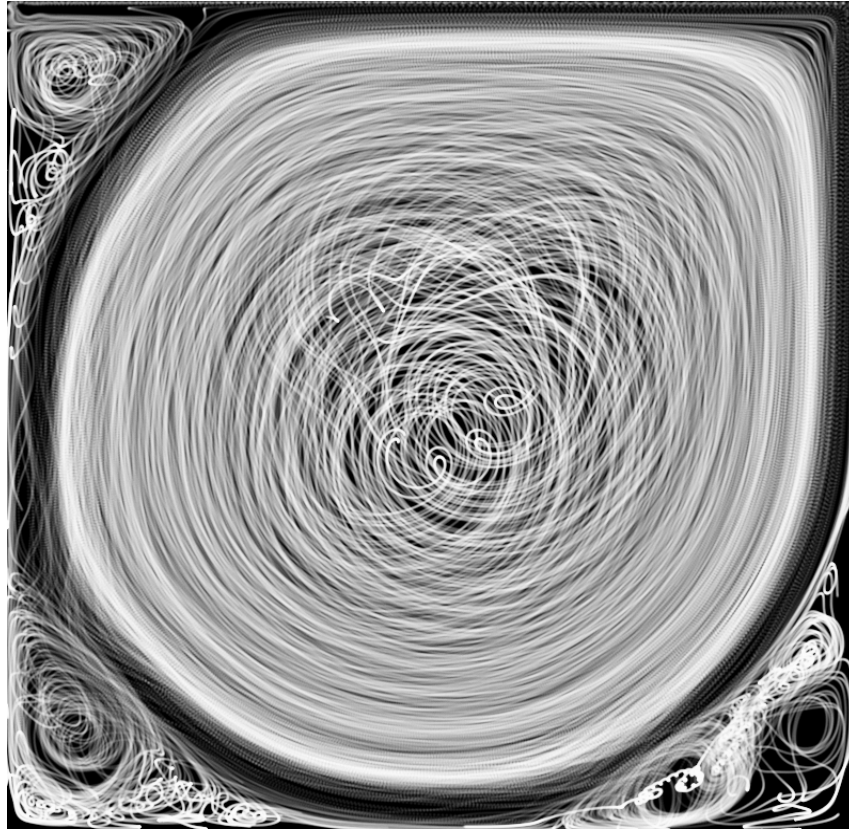
$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^8 f_i \mathbf{c}_i \quad (9.9)$$

W podobny sposób wyznaczać można inne wielkości hydrodynamiczne np. tensor naprężeń [11,16].

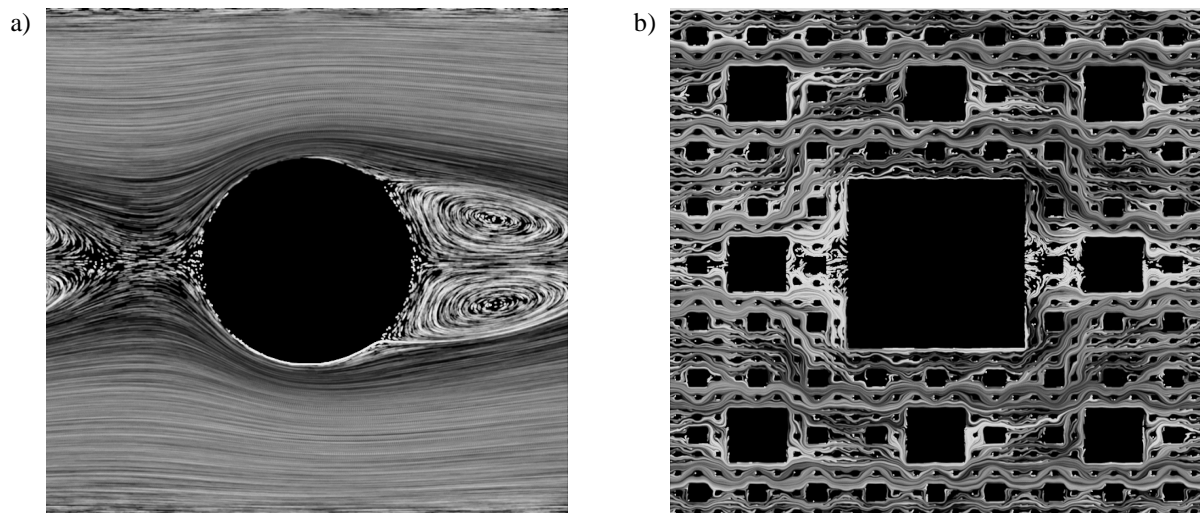
### 9.2.3 Algorytm LBM

Istotną cechą metody LBM jest względna prostota jej podstawowej implementacji [12]. Na stronie internetowej jednego z autorów można znaleźć kody w języku C, które realizują proste symulacje: przepływ z siłą zewnętrzną, przeszkodą oraz periodycznymi warunkami brzegowymi [13].

Po niewielkich modyfikacjach można też rozwiązać przypadek zamkniętej komory z poruszającą się pokrywą (ang. driven-cavity flow), przepływy dla różnych liczb Reynoldsa oraz w skomplikowanej, fraktalnej geometrii (Rys. 9.2 i 9.3).



Rys. 9.2. Przepływ w komorze (driven-cavity flow) dla bardzo wysokiej liczby Reynoldsa ( $Re > 10000$ ). Wizualizacja wykonana metodą śledzenia i rozsmarowywania cząstek znaczonej (bezmasy) w polu prędkości. Rysunek wykonany z użyciem kodu opartego o źródła LBM-MRT ze strony [13]. Wizualizacja z użyciem linii prądu. Chaotyczny charakter linii w centrum największego z wirów wskazuje na to, że rysunek został wykonany w trakcie dochodzenia do rozwiązania stacjonarnego, gdzie stan układu ciągle się zmieniał



Rys. 9.3. Optyw pojedynczej przeszkody o kształcie koła w rurze z warunkami okresowymi w osi  $x$  (a). Użyty kod z przybliżeniem BGK [13]. Przepływ przez układ przeszkód ułożonych w geometrii fraktala typu Sierpińskiego o 3 pokoleniach przeszkód (b). Warunki brzegowe bez poślizgu (przeszkody oraz górna i dolna pokrywa), oraz okresowe (lewa i prawa ściana). Użyty kod z przybliżeniem BGK [13]

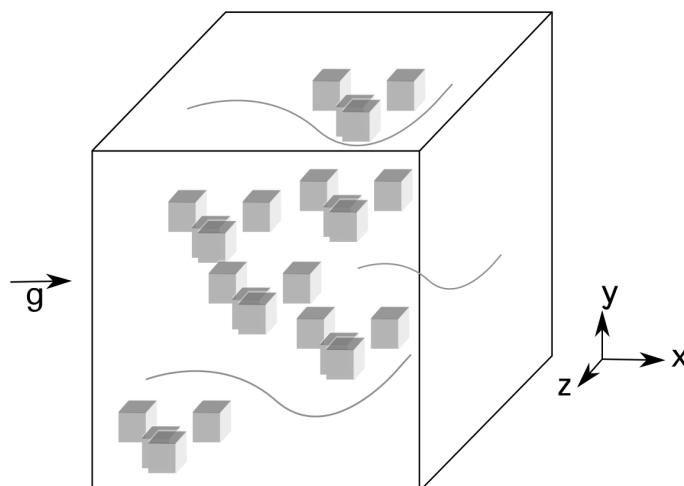
Tęgo typu kody były używane m.in. w badaniach do rozprawy doktorskiej jednego z autorów i mogą służyć jako punkt startowy do pracy z metodą LBM.

### 9.3. Biblioteka Palabos

Mimo prostej implementacji w wersji podstawowej, model LBM zaczyna się komplikować, w symulacjach dużych układów, o geometriach pochodzących z różnych źródeł (np. z generowanych numerycznie struktur, z pomiarów tomografii a nawet z losowo umieszczonych przeszkód). Implementacja na różnych siatkach, z różnym modelem kolizji, w wersji równoległej – wszystkie te rozszerzenia mogą kosztować dużo czasu i wysiłku przy programowaniu. Dlatego w pracy nad fizyką ośrodków porowatych oprócz używania własnych kodów często wspomagano się ogólnodostępnym, otwartym oprogramowaniem, które posiada zaimplementowane podstawowe funkcje. Przykładem są biblioteki Sailfish [17,22] i Palabos [18,23]. Tę drugą przedstawimy na konkretnym przypadku przepływu przez układ losowo rozmieszczonych przeszkód.

#### 9.3.1. Studium przypadku

W dalszej części rozdziału omówiono przykład wykorzystania biblioteki Palabos. Została tu przedstawiona symulacja transportu przez układ sześciennych przeszkód losowo rozmieszczonych w prostopadłościanie o bokach  $N_x \times N_y \times N_z$  (Rys. 9.4). Dołączony kod skryptu biblioteki umożliwia symulację szerokiej klasy przypadków trójwymiarowych. Użytkownik może wprowadzać różne konfiguracje przeszkód (reprezentujące np. ośrodek porowaty) w postaci plików tekstowych o odpowiedniej strukturze.



Rys. 9.4. Schemat układu do symulacji skryptem biblioteki Palabos. Sześciiany wewnątrz układu reprezentują przeszkody rozmieszczone losowo. Transport płynu odbywa się w przestrzeni porów

Założono sztywne warunki brzegowe na ściankach xz, xy oraz periodyczne na wlocie i wylocie (ściany zy). Celem jest wyliczenie powolnego przepływu (obszar Darcy-ego), wymuszonego zewnętrzną siłą (grawitacją). W dalszej części omówiono konstrukcję skryptu Palabos-a, który zawiera definicję geometrii, warunków brzegowych oraz innych parametrów symulacji.

#### 9.3.2. Typy zmiennych w Palabos

Biblioteka Palabos jest kompatybilna z architekturą 64 bitową. Korzysta ona ze specjalnego typu zmiennych. Zmienne całkowite ze znakiem (**int**) oraz nieujemne (**unsigned int**) zastąpione zostały kolejno specjalnymi typami **plint** i **pluint**. Typy te na maszynach 32 bitowych reprezentują liczby 32 bitowe, a na 64 bitowych liczby 64 bitowe.

Dodatkowo wykorzystano zmodyfikowany bufor strumienia wyjścia. Biblioteka wykorzystuje algorytmy równoległe oparte na technologii MPI, w którym, po użyciu obiektu **cout**,



każdy wątek z osobna wypisuje komunikaty w terminalu. W celu uniknięcia wielokrotnego wypisywania tych samych informacji stworzony został zrównoleglony obiekt **pcout**. Analogicznie zapis do pliku wykonuje się poprzez zastąpienie obiektu typu **ofstream** przez obiekt typu **plb\_ofstream**.

Twórcy biblioteki zalecają również przypisanie alternatywnej nazwy określającej rozmiar liczb zmiennoprzecinkowych. Standardowo stosowanym oznaczeniem jest duża litera **T**, a najczęściej spotykanym zapisem jest:

```
typedef double T;
```

Konwencja ta umożliwia proste przejście z obliczeń podwójnej precyzji na pojedynczą i odwrotnie.

### 9.3.3. Kompilacja programu z Palabos

Do skompilowania programu wykorzystującego bibliotekę Palabos wymagany jest kompilator g++<sup>11</sup>. Kod biblioteki można pobrać z jej strony domowej [18]. Pobrane archiwum wystarczy rozpakować. Biblioteka nie wymaga bezpośredniej kompilacji ani instalacji. Zamiast tego kompilowana jest razem z docelową aplikacją, co znacznie ułatwia rozwijanie kodu źródłowego, a także korzystanie w środowiskach bez uprawnień administratora (np. pracownie studenckie itp.). W celu uzyskania dostępu do biblioteki należy dołączyć pliki nagłówkowe<sup>12</sup>:

```
#include "palabos3D.h"  
#include "palabos3D.hh"
```

Należy również przygotować odpowiedni plik reguł Makefile. Wzór takiego pliku znaleźć można w przykładach załączonych do biblioteki. Plik Makefile dostępny jest również w przykładzie dołączonym do niniejszej monografii [19].

### 9.3.4. Wybór modelu

Pierwszą czynnością, jaką należy wykonać, jest określenie modelu, jaki będzie wykorzystywany do przeprowadzenia symulacji. Biblioteka Palabos ma zaimplementowane różne siatki obliczeniowe i modele przepływu<sup>13</sup>. Ich wybór odbywa się poprzez zdefiniowanie odpowiedniej flagi (deskryptora):

```
#define DESCRIPTOR DdQqDescriptor
```

gdzie *d* i *q* oznaczają kolejno: liczbę wymiarów modelu oraz ilość sąsiadów, do których rozchodzi się informacja. Dla modeli z siłą zewnętrzną należy do nazwy deskryptora dodać przedrostek *Forced*. W omawianym przykładzie wybrany został model trójwymiarowy z 27 wartościami w każdym węźle, a ruch płynu wymuszony jest siłą grawitacji, więc deskryptor zdefiniowany jest następująco:

```
#define DESCRIPTOR ForcedD3Q27Descriptor
```

<sup>11</sup> Podane informacje dotyczą użycia biblioteki z wykorzystaniem języka C++ pod Linuxem. Palabos jest kompatybilny również z innymi systemami operacyjnymi (m. in. Windows, OS X) oraz umożliwia korzystanie z gotowych interfejsów (Python, Java). Dokładny opis jak korzystać z biblioteki w wyżej wymienionych przypadkach znaleźć można w podręczniku użytkownika (<http://www.palabos.org/documentation/userguide/index.html>)

<sup>12</sup> Podany kod odnosi się do przypadku trójwymiarowego. Dla symulacji dwuwymiarowych należy zawsze zamieniać 3D na 2D.

<sup>13</sup> Pełna lista znajduje się na stronie: <http://www.palabos.org/documentation/userguide/implemented-models.html>

### 9.3.5. Tablice zmiennych

Zaletą omawianej biblioteki są wbudowane typy zmiennych do przechowywania dużych zbiorów danych, m.in. siatki obliczeniowej. Typ *MultiBlock3D*<sup>14</sup> reprezentuje standardowe tablice, jednak został tak zaprojektowany, aby usprawnić pracę programu, m.in. poprzez wykonywanie obliczeń równoległych. Dodatkowo zoptymalizowane jest też wykorzystanie pamięci. Ze względu na typ przechowywanych danych dzieli się je na trzy rodzaje: *MultiBlockLattice3D* służące do przechowywania zmiennych symulacji oraz *MultiScalarField3D* i *MultiTensorField3D*, w których umieszcza się tablice odpowiednio skalarów i tensorów<sup>15</sup>.

Definiując siatkę obliczeniową jako obiekt *MultiBlockLattice3D* należy podać jej wymiary, typ przechowywanych zmiennych oraz opisać ją odpowiednim deskryptorem. Jest to również miejsce, w którym trzeba zdecydować, jaki rodzaj kolizji będzie rozpatrywany w każdym węźle. Ponownie mamy możliwość skorzystania z wielu zaimplementowanych schematów i tak siatkę o wymiarach  $N_x \times N_y \times N_z$ , wykorzystującą przybliżenie BGK (patrz sekcja 9.2.1) definiujemy następująco:

```
MultiBlockLattice3D<T, DESCRIPTOR> lat(Nx, Ny, Nz, new
BGKdynamics<T, DESCRIPTOR>(omega));
```

gdzie omega jest parametrem relaksacji ( $1/\tau$ ). Ponieważ w omawianym przykładzie wykorzystuje się zewnętrzną siłę wymuszającą, zastosowano inny schemat kolizji:

```
MultiBlockLattice3D<T, DESCRIPTOR> lat(Nx, Ny, Nz, new
GuoExternalForceBGKdynamics<T, DESCRIPTOR>(omega));
```

### 9.3.6. Definiowanie przeszkód

Wspomniano już, że metoda LBM opiera się na sieci regularnej i Palabos również wykorzystuje to rozwiązanie. Siatka obliczeniowa składa się z węzłów płynu (w których rozwiązywane są równania transportu) i z przeszkód. Oznaczenie węzła jako przeszkody polega na nałożeniu na niego warunku odbijającego. Geometria układu jest ustalana przez zdefiniowanie warunków brzegowych dla każdego węzła.

W podanym przykładzie układ przeszkód wczytuje się z pliku, co znacząco ułatwia przygotowanie własnych siatek obliczeniowych. W następnej sekcji opisano, w jaki sposób przypisać węzłom siatki warunki odbijające na podstawie danych z zewnętrznego pliku tekstowego.

### 9.3.7. Warunki brzegowe z pliku

W bibliotece Palabos istnieje kilka typów warunków brzegowych. Od prostoliniowych przez ogólne, schodkowe warunki brzegowe (stosujące węzły odbijające), po brzegi krzywoliniowe. W dalszej części omawiono warunek odbijający (ang. bounce-back) i periodyczny. W Palabosie przyjęto, że periodycznie połączone mogą zostać jedynie przeciwne, zewnętrzne brzegi układu. Stąd węzły płynu, będące w kontakcie z zewnętrzną ścianą, mogą być periodyczne tylko jeśli odpowiedni węzeł na przeciwnym brzegu również zawiera płyn. Domyślnie wszystkie bloki definiowane są jako nieperiodyczne, a na ich zewnętrzne węzły nałożony jest warunek odbijający. Włączenie periodyczności wszystkich ścian wymaga wywołania komendy:

```
lat.periodicity.toggleAll(true);
```

<sup>14</sup> Analogicznym typem dla przypadków dwuwymiarowych jest Block2D.

<sup>15</sup> Więcej informacji nt. blokowych typów zmiennych w Palabosie znaleźć można na stronie: <http://www.palabos.org/documentation/userguide/data-types.html>. Natomiast w zrozumieniu działania obiektów MultiBlock3D pomoże przykład: <http://www.palabos.org/documentation/tutorial/multi-block.html>.

W omawianym przykładzie układ jest periodyczny wzdłuż osi x (w Palabos jest to kierunek 0), co również bardzo prosto zdefiniować:

```
lat.periodicity.toggleAll(0, true);
```

Dla poprawnego działania biblioteki, periodyczność powinna zostać zdefiniowana zaraz po zadeklarowaniu siatki.

Na wszystkie zewnętrzne brzegi siatki, które nie są periodyczne, automatycznie nakładany jest standardowy warunek odbijający. Oznacza to, że przed wykonaniem kroku relaksacji za wszystkie nieokreślone wartości w węźle podstawiane są wartości z przeciwnych kierunków tego samego węzła z poprzedniego kroku symulacji. Warunek odbijający może zostać zdefiniowany w dowolnym miejscu układu poprzez jawne przypisanie wybranym komórkom obiektu typu `BounceBack<T, Descriptor>`. Spowoduje to zastąpienie kroku kolizji w tych węzłach procedurą odbijania. Węzły odbijające mogą zostać wyznaczone algorytmicznie, jednak w przypadku układów o bardzo skomplikowanej geometrii efektywniejszą metodą jest wykorzystanie logicznej (boolowskiej) maski z zewnętrznego źródła. Maską taką zawiera wartości 0 w przestrzeni między przeszkodami oraz wartość 1 w miejscu gdzie znajdują się przeszkody. W tym celu należy przygotować plik tekstowy, który przypisuje komórkom siatki odpowiednie wartości.<sup>16</sup> Dane mogą zostać oddzielone spacjami, tabulacją lub znakiem końca linii, a ich układ musi odpowiadać przygotowanej wcześniej siatce obliczeniowej. Należy pamiętać, że w Palabosie inkrementacja przebiega najpierw po osi Z, później Y i w końcu X. Dane z plików wystarczy wczytać do pola skalarnego:

```
MultiScalarField3D<bool> flags(Nx, Ny, Nz);
  plb_ifstream file( geo );
  file >> flags;
```

gdzie `geo` jest tablicą znaków (`char[]`) przechowującą nazwę pliku wejściowego. Na tym etapie biblioteka nie weryfikuje poprawności danych, dlatego bardzo ważne jest, aby wymiary pola skalarnego zgadzały się z rozmiarem przygotowanego układu. W końcu, na podstawie otrzymanego pola skalarnego, można oznaczyć odpowiednie węzły siatki jako odbijające:

```
defineDynamics(lat, flags, new BounceBack<T, DESCRIPTOR>, true);
```

### 9.3.8. Siły i stan początkowy

Przed przystąpieniem do symulacji należy określić siłę zewnętrzną oraz stan początkowy układu. Siłę definiuje się poprzez przypisanie do każdego węzła sieci wektora reprezentującego wartość numeryczną składowych siły:

```
setExternalVector(lat, lat.getBoundingBox(),
  DESCRIPTOR<T>::ExternalField::forceBeginsAt, Array<T, 3>(force, 0., 0.));
```

gdzie `Array<T, 3>` jest tablicą trzech zmiennych typu T, określającą postać wektora siły zewnętrznej.

Dla przypadków, których rozwiązanie nie zależy od stanu początkowego (takich jak omawiany przykład), uzasadnionym jest również ustalenie początkowej gęstości oraz prędkości w poszczególnych węzłach. Służy do tego funkcja `initializeAtEquilibrium()`, gdzie wartości gęstości i prędkości są podane wprost dla całego obszaru symulacji:

```
initializeAtEquilibrium(lat, lat.getBoundingBox(), 1.0, Array<T, 3>(0, 0, 0));
```

<sup>16</sup> Informacje o innych rozwiązaniach można znaleźć na stronie:

<http://www.palabos.org/documentation/userguide/input-output.html>

Kiedy wszystkie wartości zostaną ustalone należy zainicjować siatkę:

```
lat.initialize();
```

### 9.3.9. Symulacja

Po wykonaniu kroków opisanych w poprzednich podrozdziałach układ jest przygotowany do przeprowadzenia symulacji. Zwraca się uwagę, że ewolucja czasowa układu składa się z dwóch, kolejno powtarzających się kroków: transportu i kolizji. W Palabosie za wykonanie obu odpowiada metoda<sup>17</sup>: `lattice.collideAndStream()`. Wywołanie tej metody spowoduje wykonanie dokładnie jednego kroku symulacji, a więc rozpatrzenie kolizji w każdym węźle sieci i przekazanie informacji do sąsiadów.

W załączonym przykładzie ilość kroków symulacji kontrolowana jest bezpośrednio przez użytkownika. Dla uzyskania wiarygodnych wyników warto rozważyć zastosowanie kryterium stopu uwzględniającego lokalne lub globalne zmiany rozwiązań w kolejnych iteracjach. Na przykład dla przepływu laminarnego można sprawdzać zbieżność pól prędkości w kolejnych krokach czasowych. Zachęca się czytelnika do próby implementacji tego rozwiązania w ramach ćwiczenia.

### 9.3.10. Skrypt do symulacji

Poniżej przedstawiono pełny przykład programu w języku C++ używającego biblioteki Palabos do symulacji przepływu w przestrzeni porowej (między przeszkodami) ośrodka porowatego. Do jego kompilacji potrzebny jest dodatkowy plik definiujący w jaki sposób jest on kompilowany i łączony z biblioteką (Makefile). Plik taki znajduje się w udostępnionym pakiecie z kodem i tu nie będziemy go omawiać [19]. Aby wykonać obliczenia należy wykonać rozkaz „make” w katalogu z plikiem „porousflow.cpp” i następnie uruchomić program z konsoli, np.:

```
./porousflow
```

Przeszkody dostarczane są w postaci pliku tekstowego (ścieżka zapisana w kodzie programu) o  $N_x \times N_y \times N_z$  wartościach 0 lub 1, gdzie 0 oznacza obszar dostępny dla płynu, a 1 oznacza przeszkodę typu no-slip (bez poślizgu). Po uruchomieniu programu obliczenia prowadzone są aż do osiągnięcia wskazanej liczby iteracji. Na końcu utworzony zostanie plik VTK zawierający pole prędkości przepływu.

```
----- początek skryptu porousflow.cpp
01. #include "palabos3D.h"
02. #ifndef PLB_PRECOMPILED
03. #include "palabos3D.hh"
04. #endif
05. using namespace plb;
06. using namespace plb::descriptors;
07. typedef double T; // typ podstawowy
08. #define DESCRIPTOR ForcedD3Q27Descriptor
09. plint NX, NY, NZ; // rozdzielczość
10.
11. void bnd(MultiBlockLattice3D<T,DESCRIPTOR> &lat, char geo[], T force)
12. {
13.     lat.periodicity().toggle(0, true); // periodyczność sieci
14.
```

<sup>17</sup> Krok transportu i kolizji może również zostać wywołany osobno poprzez funkcje odpowiednio: `lattice.stream()` i `lattice.collide()`. Istnieją również możliwości wyłączenia niektórych automatycznych funkcji Palabos np. do debugowania. Więcej na ten temat na stronie: <http://www.palabos.org/documentation/userguide/simulation-control.html>

```

15. // warunek na przeszkodach
16. MultiScalarField3D<bool> flags(NX, NY, NZ);
17. plb_ifstream file( geo );
18. file >> flags;
19. defineDynamics(lat, flags, new BounceBack<T,DESCRIPTOR>, true);
20.
21. // grawitacja
22. setExternalVector(lat, lat.getBoundingBox(),
23. DESCRIPTOR<T>::ExternalField::forceBeginsAt,Array<T,3>(force,0.,0.));
24.
25. // inicjalizacja
26. initializeAtEquilibrium(lat,lat.getBoundingBox(),1.,Array<T,3>(0,0,0));
27. lat.initialize();
28. }
29.
30. int main(int argc, char* argv[])
31. {
32.     NX = NY = NZ = 64; // rozmiar układu
33.     plint steps = 100; // ilość kroków symulacji
34.     T force = 0.0001; // grawitacja (jednostki sieci)
35.     char geo[] = "porous3D-64-0.65-8.dat"; // plik z przeszkodami
36.
37.     // sieć obliczeniowa
38.     MultiBlockLattice3D<T,DESCRIPTOR> lat( NX, NY, NZ, new
39.         GuoExternalForceBGKdynamics<T,DESCRIPTOR>(1.0) );
40.
41.     bnd (lat, geo, force);
42.
43.     for (plint i=0; i < steps; ++i) // symulacja LBM
44.         lat.collideAndStream();
45.
46.     VtkImageOutput3D<T> vtkOut("wyniki", 1.); // wyniki, dx=dt=1
47.     vtkOut.writeData<3,float>(*computeVelocity( lat ), "velocity", 1.);
48. }

```

----- koniec skryptu *porousflow.cpp*

### 9.3.11. Wyniki

W skrypcie użyto metod biblioteki Palabos, które umożliwiają bezpośredni zapis rezultatów do plików typu VTK (VTI). Są to metody obiektu klasy VtkImageOutput3D, które pozwalają na zapis różnego typu danych w celu dalszej obróbki, np. w programie Paraview [20]. W tym celu:

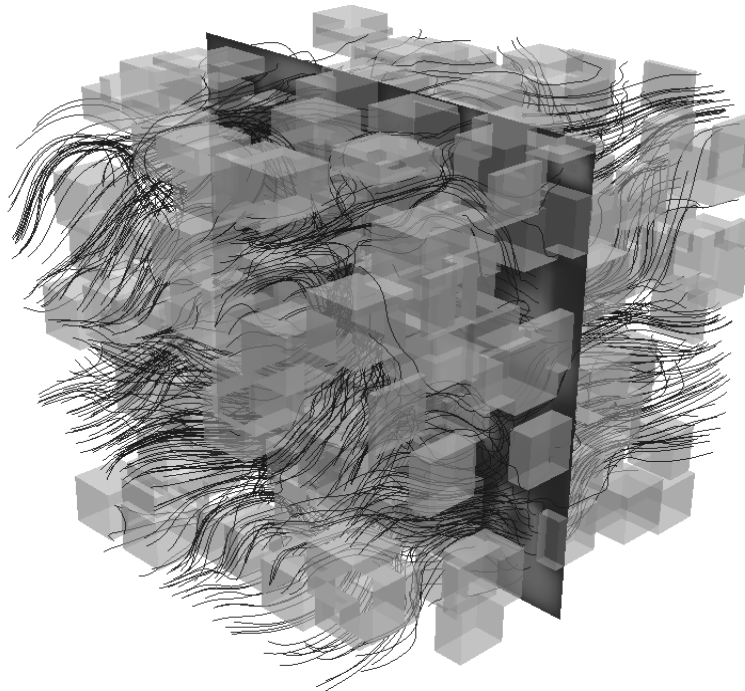
- 1) uruchom Paraview,
- 2) wczytaj wynikowy plik "wyniki.vti",
- 3) kliknij "apply",
- 4) wybierz np. "Glyph",
- 5) ustaw "Scale factor" na 5000,
- 6) kliknij "apply".

W rezultacie otrzyma się wizualizację pola wektorowego w postaci strzałek zorientowanych wzdłuż linii prądu przepływu w przestrzeni porów. Przykładowe pole prędkości uzyskane z omawianego skryptu wraz z wizualizacją (trochę bardziej skomplikowaną niż wyżej wymieniona) wykonaną w Paraview znajduje się na Rys. 9.5.

W przypadku samodzielnie przeprowadzanej analizy pola prędkości (np. rysować wykresy, przekroje lub liczyć przepuszczalność) należy użyć specjalistycznych narzędzi w programie Paraview, np. PlotOverLine. Można również, bezpośrednio z poziomu skryptu Palabosa, odczytać dane lokalnie z poszczególnych węzłów sieci i np. zapisać do oddzielnych plików. Odpowiada za to metoda:

```
lat.get(i,j,k).computeVelocity(velocity);
```

gdzie *velocity* jest tablicą, gdzie zapisana zostanie prędkość z węzła  $i,j,k$ .



Rys. 9.5. Przepływ płynu przez układ upakowanych ziaren. Wykonany skryptem przedstawionym w tym rozdziale dla danych z pliku porous3D-64-0.65-8.dat. Wizualizacja przedstawia przekrój pokolorowany lokalnymi wartościami pola prędkości (czerwony – wysoka prędkość, niebieski – niska prędkość), czarne krzywe reprezentują linie prądu w przepływie, przezroczyste sześciany to przeszkody (obszar niedostępny dla płynu). Wizualizacji przeszkód została wykonana z użyciem narzędzi „calculator” (do policzenia wartości bezwzględnej z pola prędkości) oraz „threshold” do wybrania wartości bardzo bliskich zeru

### 9.3.12. Krętość

Z wyznaczonych pól prędkości można wyliczyć różne wielkości, np. przepuszczalność lub krętość. W tym celu korzysta się ze wzoru, w którym krętość zdefiniowana jest jako stosunek średniej prędkości do średniej prędkości w kierunku makroskopowego przepływu [14]:

$$T = \langle U \rangle / \langle U_x \rangle.$$

Równanie to zapisać można jako funkcję w skrypcie Palabos:

```

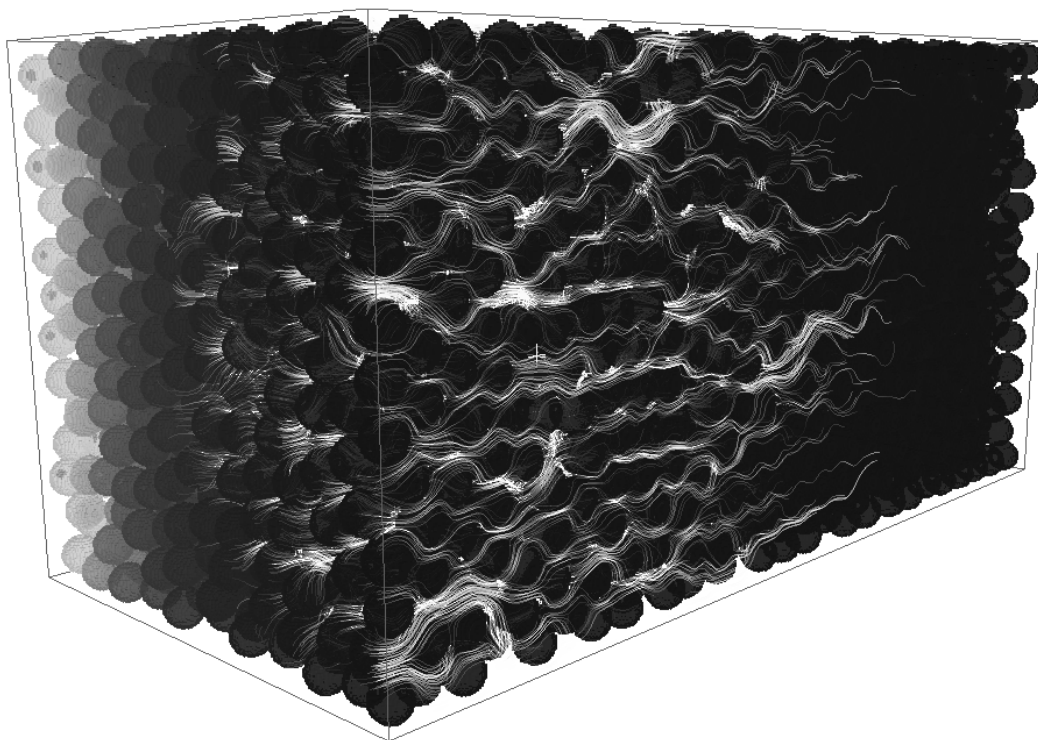
----- funkcja obliczając krętość
01. T Tortuosity(MultiBlockLattice3D<T,DESCRIPTOR> &lat)
02. {
03.   plint xComponent = 0;
04.   Box3D pm(0,NX-1,0,NY-1,0,NZ-1);
05.   T absvelsum = computeSum(*computeVelocityNorm(lat, pm) );
06.   T xvelsum = computeSum(*computeVelocityComponent(lat,pm,xComponent));
07.
08.   T t = absvelsum / xvelsum;
09.   return t;
10. }
----- koniec funkcji obliczającej krętość

```

Dla przypadku z tego rozdziału (układ z Rys. 9.4) krętość wyliczona tą funkcją wyniosła  $T=1.21$ . Czytelnikom pozostawiono implementację w funkcji do liczenia krętości w swoim skrypcie, co potraktować można jako ćwiczenie.

#### 9.4. Złoże rzeczywiste

W celu wyznaczenia pól z przepływów i własności transportu w złożach rzeczywistych (np. granularnych) należy zaimportować dane złoża do skryptu. W ramach badań nad porównaniem krętości geometrycznej do hydraulicznej, które prowadzi się wspólnie z W. Sobieskim i S. Lipińskim z UWM [15] wykonano import złoża zbudowanego z ziaren kulistych o zbliżonej średnicy. Układ został zdigitalizowany do postaci mapy przeszkód dla skryptu Palabosa. Każda komórka sieci, której część wspólna (przecięcie) z dowolną kulą ze zbioru kul upakowanych w pudełku była większa niż  $\frac{1}{2}$  objętości pojedynczej komórki, została oznaczona jako przeszkoda. W ten sposób powstała reprezentacja dyskretna w postaci siatki, która mogła zostać zaimportowana przez skrypt Palabos. Przykład digitalizacji oraz przykładowe wyniki symulacji zostały przedstawione na Rys. 9.6.



Rys. 9.6: Symulacja komputerowa przepływu (linie prądu) wykonana metodą LBM z użyciem narzędzi opartych o skrypty przedstawione w tym rozdziale. Złoże granulowane zostało przygotowane Metodą Elementów Dyskretnych (Discrete Element Method, DEM) na potrzeby badań nad porównaniem metody geometrycznej i hydraulicznej liczenia krętości [14]

Wartości numeryczne i porównanie obliczeń na złożach granularnych z użyciem różnych algorytmów są aktualnie przygotowywane do publikacji [15].

#### Literatura

1. Liang W., Lian-Ping W., Zhaoli G., Jianchun Mi.: Volume-averaged macroscopic equation for fluid flow in moving porous media. *Int J Heat Mass Transf* 2015, 82, 357-368.
2. Zhang D., Zhang R., Chen S., Soll W.E.: Pore scale study of flow in porous media: Scale dependency, REV, and statistical REV. *Geophys Res Lett* 2000, 27(8), 1195-1198.
3. McNamara G.R., Zanetti G.: Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata. *Phys Rev Lett* 1988, 61(20), 2332-2335.

4. He X., Luo L.-S.: Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E* 1997, 56(6), 6811-6817.
5. Edo S.B., Maddalena V.: Lattice-Boltzmann studies of fluid flow in porous media with realistic rock geometries. *Comput Math Appl* 2010, 59(7), 2305-2314.
6. Muhammed E.K., Ahmet H.A., Eyad M.: Laboratory validation of lattice Boltzmann method for modeling pore-scale flow in granular materials. *Comput Geotech* 2006, 33(8), 381-395.
7. Huang K.: *Podstawy fizyki statystycznej*. PWN 2015.
8. Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.: A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Phys Rev* 1954, 94(3), 511-525.
9. Chongxun P., Li-Shi L., Cass T.M.: An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation. *Comput Fluids* 2006, 35(8-9), 898-909.
10. d'Humières D., Ginzburg I., Krafczyk M., Lallemand P., Luo L.-S.: Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three-dimensions. *Philos Trans Royal Soc London A* 2002, 360(1792), 437-451.
11. Matyka M., Koza Z., Mirosław L.: Wall Orientation and Shear Stress in the Lattice Boltzmann Model. *Comput Fluids* 2013, 73, 115-123.
12. Sukop M.C., Thorne D.T.: *Lattice Boltzmann Modeling An Introduction for Geoscientists and Engineers*. Springer 2006.
13. Internet: <http://panoramix.ift.uni.wroc.pl/~maq/eng/> (2016).
14. Duda A., Koza Z., Matyka M.: Hydraulic tortuosity in arbitrary porous media flow. *Phys Rev E* 2011 84, 036319.
15. Sobieski W., Lipiński S., Golembiewski J., Matyka M.: Numerical compliance of geometric and hydraulic tortuosity in granular beds (praca w przygotowaniu).
16. Matyka M., Koza Z., Mirosław L.: Wall Orientation and Shear Stress in the Lattice Boltzmann Model. *Comput Fluids* 2013, 73, 115-123.
17. Internet: <http://sailfish.us.edu.pl/>
18. Internet: <http://palabos.org>
19. Internet: <http://www.ift.uni.wroc.pl/~maq/codes/porousflow3d.zip>
20. Internet: <http://paraview.org>
21. Goharzadeh A., Khalili A., Jørgensen B.B.: Transition layer thickness at a fluid-porous interface. *Phys Fluids* 2005, 17, 057102.
22. Matyka M., Koza Z., Mirosław L.: Wall Orientation and Shear Stress in the Lattice Boltzmann Model. *Comput Fluids* 2013, 73, 115-123.
23. Duda A., Koza Z., Matyka M.: Hydraulic tortuosity in arbitrary porous media flow. *Phys Rev E* 2011, 84, 036319.



## 10. MODELOWANIE PRZEPŁYWU PŁYNÓW PRZEZ OŚRODEK POROWATY METODĄ ZANURZONEGO BRZEGU

### 10.1. Wprowadzenie

Omówiona w Rozdziale 8 Metoda Objętości Kontrolnej jest jedną z najbardziej popularnych metod dyskretyzacji równań przepływu, stosowana jest zarówno w wielu pakietach komercyjnych (np. ANSYS Fluent) i otwartych (np. OpenFoam). W niniejszym rozdziale przedstawione zostaną przykłady wykorzystania tej metody do obliczeń przepływu w podejściu mikroskalowym, tzn. geometria złoża granularnego zostanie ujęta w sposób bezpośredni, zaś równania przepływu zostaną rozwiązane w skali pojedynczych ziaren. W takim podejściu nie jest konieczne włączanie do modelu dodatkowych czynników (domknięć), przynajmniej w zakresie przepływów laminarnych (dla przepływów turbulentnych model turbulencji może być niezbędny). Z jednej strony to duża zaleta – otrzymane rozwiązanie jest zależne tylko od geometrii złoża i od praw podstawowych (zachowania masy, energii i pędu) oraz relacji konstytutywnych dla płynów newtonowskich wiążących naprężenia lepkościowe z prędkością deformacji. Z drugiej strony, precyzja konieczna do poprawnego wykorzystania takiego ujęcia ogranicza obszar obliczeniowy do niewielkich fragmentów złoża i wymaga stosowania bardzo gęstych siatek obliczeniowych.

W tradycyjnym podejściu do modelowania przepływu Metodą Objętości Kontrolnej jednym z pierwszych kroków jest wygenerowanie siatki obliczeniowej pokrywającej analizowany obszar. Zależnie od geometrii obszaru jest to zagadnienie mniej lub bardziej złożone. W przypadku bardzo skomplikowanych geometrii wygenerowania siatki o dobrej jakości (z elementami o małej skośności) jest wysoce nietrywialne i bywa, że w niektórych zagadnieniach generowanie siatki trwa dłużej, niż same obliczenia przepływu (szczególnie w przypadku siatek blokowo-strukturalnych). Metoda Objętości Kontrolnej doskonale nadaje się do wykorzystania na siatkach niestukturalnych, jednak w porównaniu z siatkami strukturalnymi jest w takiej wersji znacznie trudniejsza w implementacji, obliczenia są mniej efektywne i trudniej się je zrównoległa. Siatki strukturalne nie posiadają tych wad – sformułowanie metody jest łatwiejsze, a dane nt. położenia komórek w naturalny sposób wynikają z budowy siatki. Głównym problemem jest dopasowanie siatek strukturalnych do złożonych geometrii, w części ułatwiają to siatki blokowo-strukturalne, ale nie zawsze są one dobrym rozwiązaniem np. dla geometrii tak złożonych, jak struktura złoża granularnego.

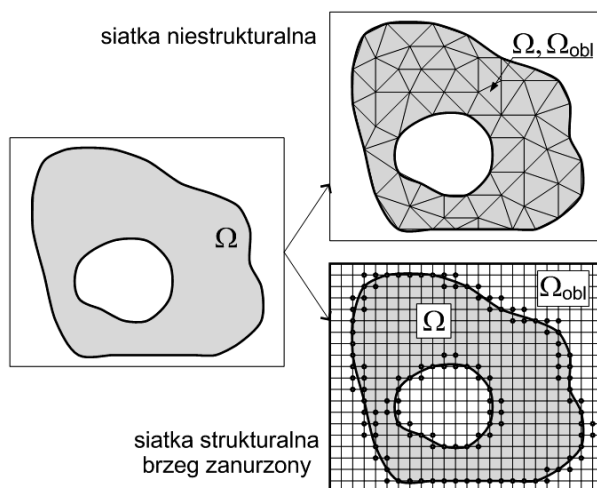
Ponieważ tworzenie solverów równań przepływu dla siatek regularnych jest znacznie łatwiejsze, nie dziwi zatem, że od początku rozwoju metod CFD próbowano wykorzystać te siatki do obliczeń w złożonych geometriach. Metoda Zanurzonego Brzegu jest jedną z takich prób.

Podstawową koncepcję Metody Zanurzonego Brzegu (ang. Immersed Boundary Method, IB<sup>18</sup>) [7,12,13,14] można opisać następująco. Domenę przepływu  $\Omega$ , czyli obszar, w którym analizuje się dany przepływ, zanurza się w regularnej domenie obliczeniowej  $\Omega_{obl}$  (zwykle o kształcie prostokąta), którą następnie dyskretyzuje się siatką strukturalną kartezjańską (patrz Rys. 10.1). Brzegi domeny przepływu stają się elementami wewnętrznymi domeny obliczeniowej i w dalszej części nazywane będą *zanurzonymi brzegami* (ang. immersed boundaries), stąd nazwa metody. Równania przepływu rozwiązuje się tym samym na regularnej siatce w regularnej domenie obliczeniowej, co znacząco upraszcza konstrukcję solvera. Wprowadza się natomiast modyfikację równań przepływu przez uwzględnienie dodatkowej siły objętościowej, której celem jest wymuszenie odpowiedniego zachowania się przepływu na zanurzonych brzegach. W szczególności, przy nieruchomych ścianach domeny przepływu i warunku braku

---

<sup>18</sup> Ponieważ proponowana nazwa polska metody nie jest ugruntowana w literaturze, w dalszej części używany będzie skrót od nazwy angielskiej.

poślizgu (*no-slip*) dodatkowa siła powinna przyjąć taką wartość by prędkość na zanurzonych brzegach była równa zero. Zależnie od sposobu ujęcia tej siły otrzymuje się wiele różnych wariantów metody. Jeżeli dodatkowa siła wchodzi w sformułowanie równań przepływu jeszcze przed dyskretyzacją, mówi się o *Metodzie Ciągłego Wymuszenia*. Jeżeli wymuszenie pojawia się dopiero na etapie dyskretyzacji równań i numerycznej metody ich rozwiązywania – mówi się o *wymuszeniu dyskretnym*. Ze względu na ograniczoność miejsca ograniczono się tutaj do tej ostatniej wersji w ujęciu tzw. wymuszenia bezpośredniego (ang. *direct forcing*).



Rys. 10.1. Porównanie klasycznego podejścia do Metody Objętości Kontrolnych z Metodą Zanurzonego Brzegu. Domena przepływu  $\Omega$  oznaczona jest kolorem szarym, brzegi zanurzone i brzegi domeny obliczeniowej oznaczone pogrubioną linią

Warto zaznaczyć, że koncepcja IB nie jest ograniczona do metody objętości kontrolnej i z powodzeniem może być wykorzystywana także w innych podejściach do modelowania przepływu, np. w Modelu Gazu sieciowego Boltzmanna (patrz Rozdział 9).

Plan tego rozdziału jest następujący. W pierwszej części zostanie przedstawiony ogólny schemat rozwiązywania równań przepływu (równań Naviera-Stokesa dla płynu nieściśliwego) metodą projekcji na siatce strukturalnej. W drugiej części zostaną omówione niezbędne modyfikacje tego schematu przy obecności nieruchomych zanurzonych brzegów (wariant metody bezpośredniego wymuszenia). W trzeciej części przedstawiony jest przykład wykorzystania omówionej metody do obliczeń przepływu przez złożę pierścieni, zaś w czwartej omówiono przepływ przez złożę kulek (oznaczone jako p06\_25 w Rozdziale 6). Pokazano tam przykładowe wyniki obliczeń pola przepływu, ciśnienia, globalnego spadku ciśnienia w złożu oraz dwie metody wyznaczania krętości hydraulicznej.

## 10.2. Rozwiązywanie równań przepływu na siatce strukturalnej

Równanie przepływu jako równanie Naviera-Stokesa dla płynu nieściśliwego ( $\text{div}(\vec{v}) = 0$ ) przy stałej gęstości  $\rho$ , lepkości  $\mu$  i braku sił objętościowych może być zapisane następująco<sup>19</sup> (nie uwzględnia się tutaj zanurzonych brzegów):

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad}(\vec{v}) = -\frac{\text{grad}(p)}{\rho} + \nu \text{div}[\text{grad}(\vec{v})], \quad (10.1)$$

gdzie  $\nu = \mu / \rho$  - lepkość kinematyczna. Równanie to można zapisać w symbolicznej postaci:

<sup>19</sup> Jest to tzw. postać niezachowawcza w przeciwieństwie do postaci zachowawczej przedstawionej w (8.23).

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = - \underbrace{\frac{\text{grad}(p)}{\rho}}_{RHS} - \mathbf{A} + \mathbf{D}, \quad (10.2)$$

przy czym  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{D}$  symbolizują tu odpowiednio człon adwekcyjny i dyfuzyjny (lepkościowy), zaś RHS reprezentuje całą prawą stronę równania (10.2).

Rozwiązanie równania (10.2) metodą projekcji [2,15] polega na rozbiciu każdego kroku czasowego na trzy etapy: 1) etap predykcji – pomija się człon ciśnieniowy i wyznacza tzw. prędkość prowizoryczną  $\vec{v}^*$ , 2) wyznaczenie ciśnienia – rozwiązanie równania Poissona dla ciśnienia, w którym człon źródłowy zależy od dywergencji pola prędkości prowizorycznej (kiedy równanie ciągłości  $\text{div}(\vec{v}) = 0$  nie jest spełnione, człon ten jest niezerowy), 3) korekcja prędkości prowizorycznej – wyznaczenie pola prędkości w następnym kroku czasowym, gdy ciśnienie jest już znane i człon ciśnieniowy może być poprawnie uwzględniony.

W przypadku dyskretyzacji jawnej w czasie pierwszego rzędu (schemat Eulera) metoda projekcji może być formalnie zapisana jako:

$$1) \vec{v}^* = \vec{v}^n + \Delta t(-\mathbf{A}_d + \mathbf{D}_d),$$

gdzie  $\vec{v}^n$  - prędkość przepływu w danym kroku czasowym,  $\Delta t$  - krok czasowy. Indeks  $d$  oznacza tu dyskretne wersje członu adwekcyjnego i dyfuzyjnego. Zwykle człon adwekcyjny dyskretyzuje się schematem typu „pod prąd” (ang. upwind), zaś człon dyfuzyjny schematem centralnym różnic skończonych drugiego rzędu [6,15]. Równanie dla prędkości prowizorycznej przyjmuje tu postać klasycznego równania adwekcji-dyfuzji, bardzo łatwego do rozwiązania w postaci jawnej<sup>20</sup>. Warunki brzegowe dla prędkości na ścianach domeny przepływu uwzględnia się właśnie w tym równaniu.

$$2) \text{div}[\text{grad}(p)] = \frac{\rho}{\Delta t} \text{div}(\vec{v}^*),$$

przy czym operator Poissona po lewej stronie równania dyskretyzuje się zazwyczaj schematem centralnych różnic skończonych drugiego rzędu.

$$3) \vec{v}^{n+1} = \vec{v}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \text{grad}(p),$$

gdzie wielkości po prawej stronie wyznaczone są w dwóch poprzednich etapach, zaś  $\vec{v}^{n+1}$  odpowiada prędkości przepływu w następnym kroku czasowym.

Jeśli potraktuje się powyższą procedurę jako operator  $\mathbf{P}$  przekształcający pole prędkości  $\vec{v}^n$  w pole  $\vec{v}^{n+1}$ , czyli  $\vec{v}^{n+1} = \mathbf{P}(\vec{v}^n)$ , to można łatwo podnieść rząd dokładności metody w czasie stosując następujący schemat (metoda Heuna):

$$1) \vec{v}^{\text{int}} = \mathbf{P}(\vec{v}^n)$$

$$2) \vec{v}^{n+1} = \frac{1}{2} [\mathbf{P}(\vec{v}^{\text{int}}) + \vec{v}^n]$$

co odpowiada dwóm kolejnym krokom schematu Eulera, a następnie uśrednieniu wyników z początku pierwszego i końca drugiego kroku. Uzyskuje się w ten sposób schemat drugiego rzędu w czasie.

Kod własny Drifter oparty na powyższym schemacie i wykorzystany w omówionych w dalszej części symulacjach przepływu rozwijano początkowo z myślą o prostych, regularnych domenach obliczeniowych i siatkach strukturalnych kartezjańskich (przykładowe wykorzystanie go do obliczeń przepływów dwufazowych opisano w [9]). Człony adwekcyjne zdyskretyzowano

<sup>20</sup> Oczywiście przy spełnieniu warunku stabilności schematu, czyli przyjęciu odpowiednio niskiej wartości kroku czasowego

schematem „pod prąd” II rzędu, czony dyfuzyjne schematem centralnym, także II rzędu. Równanie Poissona rozwiązywane jest z wykorzystaniem metody gradientów sprzężonych z poprawianiem uwarunkowania macierzy metodą niecałkowitego rozkładu LU (Cholesky’ego). Obecnie kod nie jest przystosowany do obliczeń równoległych.

### 10.3. Wpływ zanurzonych brzegów na przepływ

Jak już wspomniano, wpływ zanurzonych brzegów uwzględniany jest przez modyfikację równania przepływu. W metodzie wymuszenia dyskretnego wprowadza się dodatkową siłę  $\vec{f}_{IB}$  do dyskretnego równania (10.2):

$$\frac{\vec{v}^{n+1} - \vec{v}^n}{\Delta t} = RHS + \vec{f}_{IB}. \quad (10.3)$$

Siła ta dobierana jest tak, by prędkość przepływu na zanurzonych brzegach (w węzłach siatki sąsiadujących z brzegami) w kolejnym kroku czasowym stała się równa prędkości danego brzegu  $\vec{v}_B$ . Oznacza to, że siła  $\vec{f}_{IB}$  powinna przyjąć wartość:

$$\vec{f}_{IB} = \frac{\vec{v}_B - \vec{v}^n}{\Delta t} - RHS. \quad (10.4)$$

Porównując równania (10.3) i (10.4) łatwo zauważyć, że sprowadzają się one do wymuszenia poprawnej wartości prędkości przepływu na zanurzonego brzegu ( $\vec{v}^{n+1} = \vec{v}_B$ ). W rezultacie akurat w tym sformułowaniu włączanie nowych sił do równań przepływu jest zbędne [7,13] i wartości tych sił nie muszą być jawnie wyliczane. Szczególnie w przypadku nieruchomych brzegów i braku poślizgu implementacja metody jest bardzo prosta i sprowadza się do *wytlumienia* przepływu na zanurzonych brzegach ( $\vec{v}^{n+1} = \vec{v}_B = \mathbf{0}$ ).

W rzeczywistości implementację metody komplikuje fakt, że w ogólnym przypadku zanurzone brzegi nie pokrywają się z liniami siatki obliczeniowej. W wielu wariantach metody stosuje się interpolację, by odpowiednio wyliczyć wartość prędkości przepływu w węzle (komórce) siatki sąsiadującym z zanurzonym brzegiem bazując na wartościach prędkości w głębi domeny i zadanych wartości brzegowych [7]. Tutaj opisany zostanie uproszczony schemat oparty na idei funkcji tłumiącej  $b$  przedstawiony w [11] i podobny do metod z prac [1,5]. Funkcja  $b$  przyjmuje wartość równą 1 z dala od brzegów zanurzonych i 0 wewnątrz ciał stałych, zaś w wąskiej strefie przejściowej w pobliżu brzegu przyjmuje wartości pośrednie (co łagodzi pewne trudności numeryczne związane z nieciągłością funkcji w razie braku takiej strefy przejściowej).

Zmodyfikowany algorytm metody projekcji  $P(\vec{v}^n)$  uwzględniający zanurzone brzegi można opisać następująco:

$$1) \vec{v}^* = \vec{v}^n + \Delta t(-\mathbf{A}_d + \mathbf{D}_d),$$

$$\vec{v}^{**} = b \cdot \vec{v}^*,$$

czyli wyznacza się prędkość prowizoryczną wg klasycznego schematu, a następnie wytlumia przepływ na zanurzonych brzegach

$$2) \operatorname{div}[\operatorname{grad}(p)] = \frac{\rho}{\Delta t} \operatorname{div}(\vec{v}^{**}),$$

$$3) \bar{v}^{n+1,c} = \bar{v}^{**} - \frac{\Delta t}{\rho} \text{grad}(p),$$

$$\bar{v}^{n+1} = b \cdot \bar{v}^{n+1,c}.$$

Ostatnia formuła zapewnia zerowanie się prędkości przepływu na koniec kroku czasowego na zanurzonych brzegach (i wewnątrz ciał stałych), gdyż skorygowane pole prędkości  $\bar{v}^{n+1,c}$  w ogólności jest tam niezerowe<sup>21</sup>.

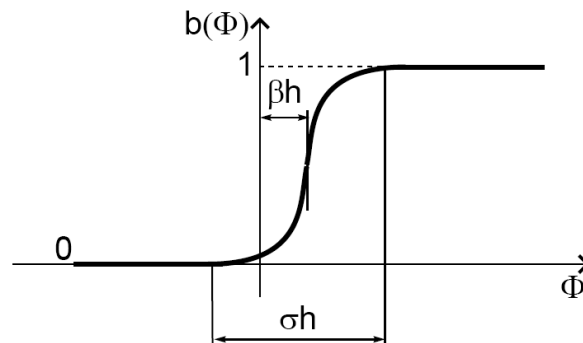
Rzucają się w oczy dwie cechy metody: a) uwzględnianie zanurzonych brzegów i obliczenia przepływów nawet w skomplikowanych geometriach wymaga tylko niewielkiej modyfikacji klasycznych solverów dla siatek strukturalnych, b) zmienne opisujące przepływ wyznaczone są w całej domenie obliczeniowej, nie tylko w domenie przepływu  $\Omega$ . O ile pierwsza cecha jest dużą zaletą metody, o tyle druga wiąże się z nadmiarowością nakładu obliczeniowego, czasami dość znaczną, gdy domena przepływu stanowi tylko niewielką część domeny obliczeniowej. W kontekście modelowania przepływów przez ośrodki porowate przypadek taki pojawia się dla złóż o niskiej porowatości ( $\phi < 0,5$ ).

Funkcję tłumiącą przyjęto w następującej postaci:

$$b(\Phi) = \begin{cases} 1 & \text{dla } \Phi > \Phi_{out} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi(\Phi - \beta h)}{\sigma h}\right) & \text{dla } \Phi_{in} < \Phi < \Phi_{out}, \\ 0 & \text{dla } \Phi < \Phi_{in} \end{cases} \quad (10.5)$$

gdzie  $\Phi$  jest tzw. funkcją dystansu ze znakiem, zdefiniowaną w każdym punkcie domeny obliczeniowej jako odległość danego punktu od zanurzonego brzegu ze znakiem dodatnim wewnątrz domeny przepływu, zaś ze znakiem ujemnym wewnątrz ciał stałych. Parametry  $\sigma$ ,  $\beta$  funkcji tłumiącej odnoszą się odpowiednio do szerokości strefy przejściowej wygładzenia wyrażonej jako część kroku siatki  $h$  i wielkości przesunięcia środka symetrii funkcji tłumiącej względem 0 (patrz Rys. 10.2). Wartości  $\Phi_{in}$  i  $\Phi_{out}$  odpowiadające wartości funkcji dystansu w skrajnych punktach strefy przejściowej wyznacza się jako:

$$\Phi_{out} = \left(\frac{\sigma}{2} + \beta\right)h, \quad \Phi_{in} = \left(\frac{\sigma}{2} - \beta\right)h. \quad (10.6)$$

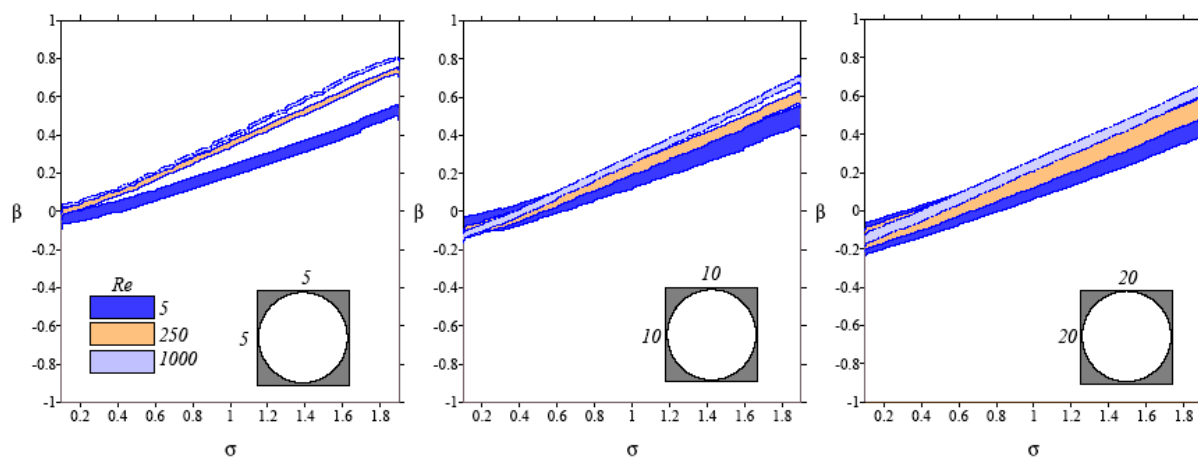


Rys. 10.2. Funkcja tłumiąca  $b$  i jej parametry

<sup>21</sup> Wynika to z tego, że ciśnienie, wyznaczone z równania Poissona w całej domenie obliczeniowej nawet wewnątrz ciał stałych, w ogólnym przypadku ma tam niezerowy gradient.

Szerokość strefy przejściowej nie może być zbyt duża, gdyż oznaczałoby to nadmierne rozciągnięcie strefy oddziaływania zanurzonego brzegu na wnętrze domeny przepływu; nie może być także zbyt mała – zmniejsza się wtedy gładkość odwzorowania brzegu na dyskretnej siatce.

Aby zbadać wrażliwość wyników obliczeń na wartości parametrów funkcji tłumiącej, przeprowadzono symulację laminarnego przepływu w kanale kołowym (przepływ Poiseuille'a), przy czym brzeg kanału zamodelowano jako brzeg zanurzony w domenie prostokątnej. Ponieważ dla tego przypadku istnieje analityczne rozwiązanie równań przepływu, możliwe jest wyznaczenie błędu obliczonego spadku ciśnienia w funkcji parametrów  $\sigma$ ,  $\beta$  oraz gęstości siatki obliczeniowej i liczby Reynoldsa  $Re = \rho v D / \mu$ . Na Rys. 10.3. przedstawiono zakresy wartości  $\sigma$  i  $\beta$ , dla których błąd spadku ciśnienia jest mniejszy, niż 3%, przy liczbie komórek siatki na przekroju kanału równej odpowiednio 5x5, 10x10, 20x20 oraz trzech wartości liczby Reynoldsa: 5, 250 i 1000. Uzyskane wyniki jasno wskazują, że przy wzroście liczby Reynoldsa wrażliwość na postać funkcji tłumiącej wzrasta – pas wyznaczający dopuszczalne wartości parametrów funkcji  $b$  się zęża, natomiast wraz ze wzrostem gęstości siatki wrażliwość ta maleje. Widać także, że parametr  $\sigma$  powinien być wyraźnie mniejszy od 1, w przeciwnym razie przy rzadszych siatkach, można spodziewać się znacznego błędu przy zmiennych prędkościach przepływu niezależnie od obranej wartości  $\beta$ . Do dalszych obliczeń przyjęto kompromisową wartość  $\sigma = 0.3$  i odpowiadającą jej wartość  $\beta = -0.1$  dla rozdzielczości powyżej 10x10 komórek. Należy zwrócić uwagę, że są to relatywnie niskie wartości i oznaczają strefę przejściową o szerokości ponad trzykrotnie mniejszej, niż krok siatki. Ponadto, przy zagęszczaniu siatki obliczeniowej dokładność odwzorowania zanurzonego brzegu się zwiększa i konkretne wartości parametrów funkcji tłumiącej nie mają istotnego znaczenia (o ile wyrażone są jako ustalona część kroku siatki).



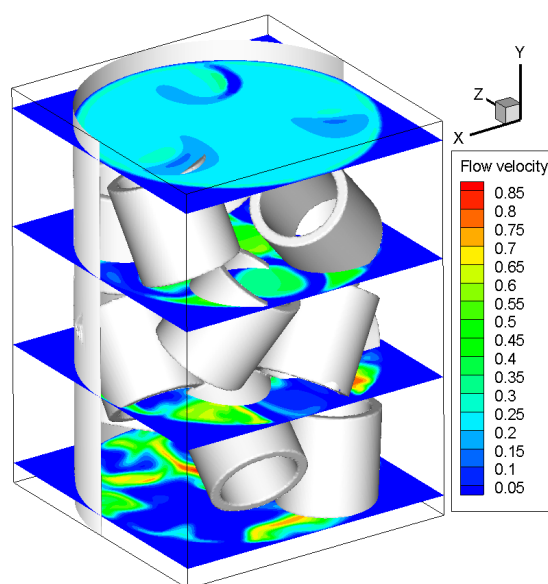
Rys. 10.3. Przypadek testowy przepływu w kanale kołowym. Obszary wyznaczające zakres parametrów funkcji tłumiącej, dla którego błąd wyznaczonego spadku ciśnienia jest mniejszy, niż 3%

#### 10.4. Symulacja przepływu przez złożę pierścieni

Jako przykład zastosowania metody opisanej w Punkcie 10.3 zostaną tu przedstawione wyniki obliczeń przepływu przez złożę pierścieni Raschiga (wydrążonych walców) wewnątrz cylindrycznej kolumny [11].

W pierwszym etapie niezbędne było uzyskanie geometrii złoża losowo upakowanych pierścieni. Posłużono się w tym celu metodą opisaną w [10]. Główną ideą tej metody jest symulacja procesu usypywania złoża w cylindrycznej kolumnie – elementy dodawane są kolejno, opadają pod wpływem siły ciężkości, a w chwili kontaktu ze złożem poruszają się, aż do osiągnięcia równowagi mechanicznej. Uwzględnione są przy tym siły i momenty reakcji

wynikające z bezpośredniego kontaktu danych pierścieni lub styku ze ścianą kolumny. W momencie osiągnięcia równowagi pierścień włączany jest w strukturę złoża i pozostaje w spoczynku aż do końca symulacji. Założenie to pozwala na analizę ruchu tylko jednego pierścienia naraz, co znacznie ułatwia implementację i przyspiesza obliczenia. Aby zwiększyć gęstość upakowania elementów, w jednym z etapów symulacji do siły ciężkości i sił reakcji dołącza się siłę działającą w kierunku od osi do ścian kolumny. Pozwala to na uzyskanie struktur znacznie bliższych realnym złożom w porównaniu z innymi algorytmami sekwencyjnego upakowania.



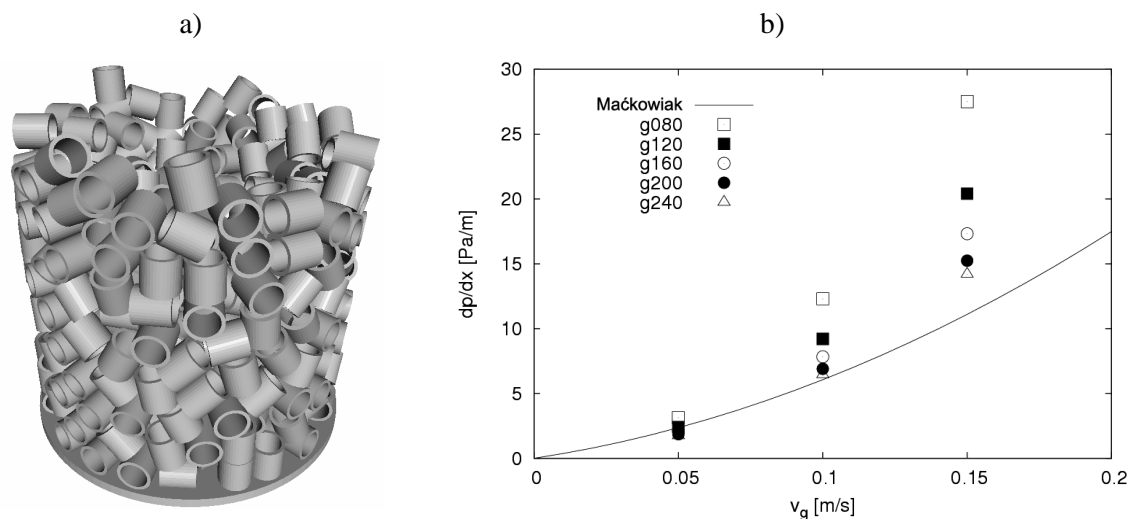
Rys.10.4. Przepływ płynu przez złożo pierścieni – geometria złoża otrzymanego Metodą Elementów Dyskretnych oraz prędkość przepływu w kilku przekrojach domeny obliczeniowej

Na Rys. 10.4 pokazano przykładowe wyniki obliczeń Metodą Zanurzonego Brzegu przepływu płynu przez złożoną geometrię złoża pierścieni. Domena obliczeniowa jest tutaj prostopadłością obejmującą w całości kolumnę i tym samym wszystkie pierścienie w jej wnętrzu (dla większej przejrzystości rysunku ukazana jest tylko tylna część ściany kolumny). Można dostrzec całkowite wytłumienie przepływu na zewnątrz kolumny oraz w pobliżu (i wewnątrz) ścianek pierścieni, warto jednak jeszcze raz podkreślić, że wszystkie zmienne stanu przepływu są w tych miejscach wyznaczane. Nadmiarowość nakładu obliczeniowego jest szczególnie widoczna przy porównaniu objętości kolumny i objętości opisanego na niej prostopadłością (różnica ok. 25%). Jest to cena, jaką ponosi się za możliwość użycia regularnych siatek strukturalnych.

Spadek ciśnienia przy przepływie przez złożo należy do jednych z jego najważniejszych charakterystyk, istotnych z praktycznego punktu widzenia (np. przy projektowaniu reaktorów wykorzystujących złoża stałe do zwiększenia efektywności reakcji), ale też łatwych do zmierzenia i dostarczających danych do walidacji obliczeń numerycznych. Symulacja z niewielką próbką złoża stałego, w rodzaju tej z Rys. 10.4, nie wydaje się jednak adekwatna do porównań z eksperymentem. Ze względu na losowe upakowanie elementów wiarygodnych statystycznie wyników można spodziewać się dla złożów zawierających co najmniej kilkaset elementów i kilkanaście warstw złoża.

Na Rys. 10.5a przedstawiono przykładowe złożo, którego fragment użyto do obliczeń gradientu ciśnienia przepływu gazu dla kilku różnych prędkości  $v_g$  na wlocie do kolumny oraz siatek obliczeniowych o coraz to większej gęstości poczynając od siatki o 80x80 komórek na przekroju domeny obliczeniowej (oznaczonej jako g080), kończąc zaś na siatce o 240x240

węzłach w tym samym przekroju (oznaczonej jako g240). Liczba komórek siatki w kierunku przepływu jest nieco większa, niż w kierunku poprzecznym ze względu na wprowadzenie tzw. stref buforowych przed i za złożem (ich celem jest zmniejszenie wpływu warunków brzegowych na wlocie i wylocie z domeny obliczeniowej na przepływ wewnątrz złoża). Oznacza to, że całkowita liczba komórek siatki w przypadku g240 sięga ok. 14 milionów.



Rys. 10.5. Złoże wykorzystane do obliczeń gradientu ciśnienia (a), jako reprezentacyjna objętość złożów tego rodzaju oraz gradient ciśnienia w złożu w funkcji prędkości przepływu na wlocie oraz gęstości siatki obliczeniowej (b)

Symulacje metodą IB wykazały, że uśrednione ciśnienie zmienia się wewnątrz złoża niemal liniowo wzdłuż osi kolumny, co pozwoliło na jednoznaczne wyznaczenie gradientu ciśnienia i porównania z formułą empiryczną zaproponowaną przez Maćkowiaka [8]:

$$\frac{dp}{dx} = \psi_0 (1 - \phi_p) \frac{1 - \phi}{\phi^3} \frac{\rho_v v_g^2}{d_p K}, \quad (10.7)$$

gdzie:  $\phi_p$  - współczynnik perforacji ścianek pierścienia (równy 0 dla pierścieni Raschiga),  $\rho_v$  - gęstość gazu. Pozostałe współczynniki wyznacza się z następujących zależności:

$$\psi_0 = \frac{725.6}{Re_v} + 3.203, \quad Re_v = \frac{v_g d_p \rho_v}{(1 - \phi) \mu}, \quad d_p = 6 \frac{1 - \phi}{S_{0, Kozeny}}, \quad \frac{1}{K} = 1 + \frac{2}{3} \frac{1}{1 - \phi} \frac{d_p}{d_s}, \quad (10.8)$$

przy czym  $d_p$  jest tutaj efektywną średnicą pierścienia,  $d_s$  średnicą kolumny, porowatość  $\phi$  dla wygenerowanego złoża miała wartość 0.79, zaś powierzchnia właściwa  $S_{0, Kozeny} = 192 \text{ [m}^2/\text{m}^3]$ . Współczynnik  $K$  uwzględnia tzw. efekt ściany, czyli charakterystyczne uporządkowanie pierścieni w pobliżu ścian cylindrycznej kolumny, szczególnie istotne, gdy stosunek średnicy kolumny do rozmiaru pierścienia jest niewielki.

Uzyskane wyniki cechują się dość dobrą zbieżnością – zmiana wartości spadku ciśnienia przy przejściu z siatki rzadszej na gęstsza jest coraz mniejsza, przy czym różnice między rozwiązaniem na siatce g080 i g0240 są tym mniejsze, im mniejsza jest prędkość wlotowa przepływu (różnice względne są jednak stałe i sięgają nawet 100%). Jak widać na rys. 10.5b zgodność z formułą empiryczną Maćkowiaka jest zadowalająca w rozważanym zakresie prędkości, szczególnie dla  $v_g \leq 0.1 \text{ [m/s]}$ .



Trzeba jeszcze raz podkreślić, że obliczenia tego rodzaju nie tylko dostarczają parametrów makroskopowych (w rodzaju spadku ciśnienia w złożu przy danych charakterystykach przepływu i geometrii wypełnienia kolumny), ale również mikroskopowych – rozkładów prędkości przepływu i ciśnienia w każdym punkcie wewnątrz złoża [11]. Tak szczegółowe dane mogą być wykorzystane do konstruowania i walidacji modeli gruboskalowych nie wymagających aż tak gęstych siatek obliczeniowych i pozwalających na analizę złóż w skalach przemysłowych (patrz Rozdz. 8.2).

## 10.5. Symulacja przepływu przez złożę ziaren kulistych

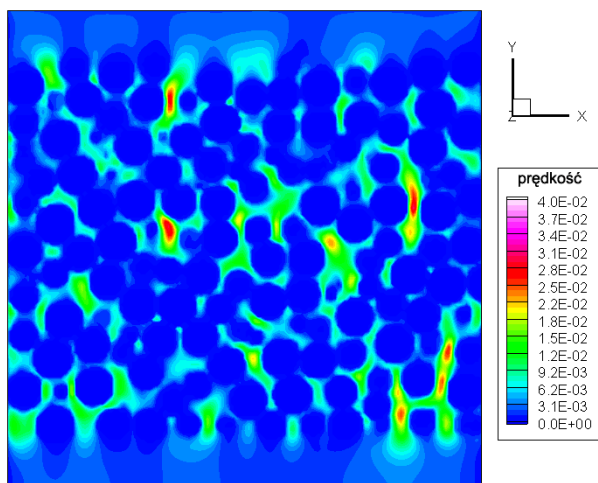
Ponieważ metoda IB nie narzuca żadnych ograniczeń na kształt ziaren tworzących złożę, wykonano szereg symulacji przepływu gazu przez fragment złoża składającego się z ziaren kulistych o średniej średnicy 6 [mm] wygenerowane z wykorzystaniem metody DEM i oznaczone jako p06\_25 (patrz Rozdz. 6). W porównaniu ze złożem pierścieni, złożę to cechuje się znacznie mniejszą porowatością (ok. 0.4) i węższymi kanałami porowymi, stawia więc ostrzejsze wymagania na gęstość siatki obliczeniowej.

W tym przypadku ziarna wypełniały cały przekrój sześcienniej domeny obliczeniowej. Wymiar domeny w kierunku przepływu został określony przez kilkanaście warstw ziaren ze złoża p06\_25 (w sumie wycięty fragment złoża zawierał ok. 1000 ziaren) oraz dwie puste strefy buforowe na wlocie i wylocie z domeny, każda o długości równej średnicy ziarna. Przepływ gazu wymuszany był na górnej ścianie domeny obliczeniowej z jednorodnym profilem prędkości (dla dwóch różnych wartości -  $v_g = 0.002$  [m/s] oraz  $v_g = 0.01$  [m/s]). Na wylocie przyjęto warunek stałego ciśnienia ( $p = 0$ ). Parametry fizyczne gazu:  $\rho = 1.15$  [kg/m<sup>3</sup>],  $\mu = 1.85 \cdot 10^{-5}$  [kg/(m·s)]. Obliczenia prowadzono aż do osiągnięcia stanu ustalonego. Ze względu na wysoką złożoność geometrii złoża i znaczny udział zanurzonych brzegów w objętości domeny obliczeniowej zbadano różnicę między strumieniem masy na wlocie i wylocie domeny – nie przekraczała ona 0.5%, co wskazuje na spełnienie równania ciągłości (zachowania masy) z zadowalającą dokładnością.

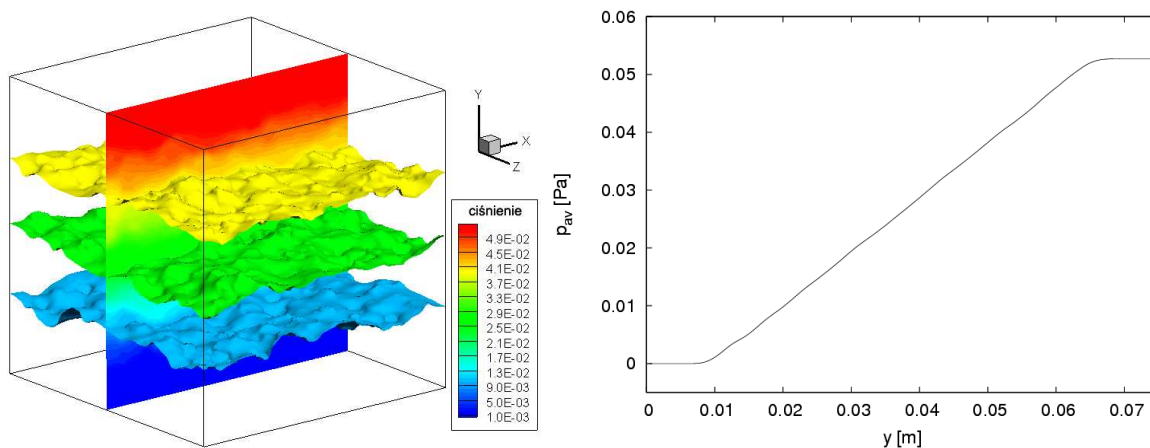
Rys. 10.6 przedstawia rozkład modułu prędkości przepływu w jednym z przekrojów domeny obliczeniowej, równoległym do kierunku prędkości wlotowej (przypadek  $v_g = 0.002$  [m/s]). Warto zwrócić uwagę na zerowanie się prędkości przepływu w przekrojach ziaren (odznaczających się najciemniejszym kolorem) oraz na miejsca, w których moduł prędkości przekracza ponad o rząd wielkości prędkość wlotową.

W większości kanałów porowych prędkość przepływu jest kilka razy większa od prędkości wlotowej, co w naturalny sposób wynika z mniejszej powierzchni pokrywanej przez kanały porowe w przekrojach prostopadłych do kierunku średniego przepływu w porównaniu do powierzchni wlotowej.

Złożony charakter rozkładu prędkości wskazuje, że naprężenia lepkościowe w gazie wprowadzające straty energii i tym samym spadek ciśnienia mogą zmieniać się lokalnie w szerokim zakresie. Jak wskazują izopowierzchnie ciśnienia na Rys. 10.7 rozkład ciśnienia odzwierciedla w dużym stopniu losową strukturę złoża, jednak w kierunku równoległym do kierunku prędkości wlotowej można dostrzec wyraźny trend spadkowy. Uśrednienie ciśnienia po całym przekroju prostopadłym do kierunku przepływu wygładza lokalne fluktuacje i otrzymuje się gładką krzywą pozwalającą przypisać reprezentatywną wartość ciśnienia na danej wysokości w złożu. Poziome odcinki na tej krzywej dotyczą stref buforowych, w których spadek ciśnienia, w porównaniu z gęsto wypełnioną przestrzenią złoża, jest znikomy i niewidoczny przy założonej skali (wartość 0 na lewym krańcu wynika z nałożonego warunku brzegowego).



Rys. 10.6. Rozkład prędkości w jednym z przekrojów złoza równoległym do kierunku prędkości wlotowej



Rys.10.7. Rozkład ciśnienia w domenie obliczeniowej. Po lewej rozkład ciśnienia na płaszczyźnie równoległej do kierunku prędkości wlotowej oraz izopowierzchnie odpowiadające trzem różnym wartościom ciśnienia. Po prawej rozkład średniego ciśnienia wzdłuż centralnej osi domeny

Uzyskane wyniki dają jednoznaczną wartość gradientu ciśnienia wewnątrz złoza granularnego (rozkład średniego ciśnienia jest niemal liniowy), które można porównać z wartościami obliczonymi z formuł empirycznych np. równania Erguna [4] (por. Rozdz. 2.1). Odpowiednie wartości dla różnych gęstości siatek obliczeniowych zestawiono w Tabeli 10.1. Symbole g160, g200 i g240 oznaczają tam odpowiednio siatki o 160x160x160, 200x200x200 i 240x240x240 komórkach.

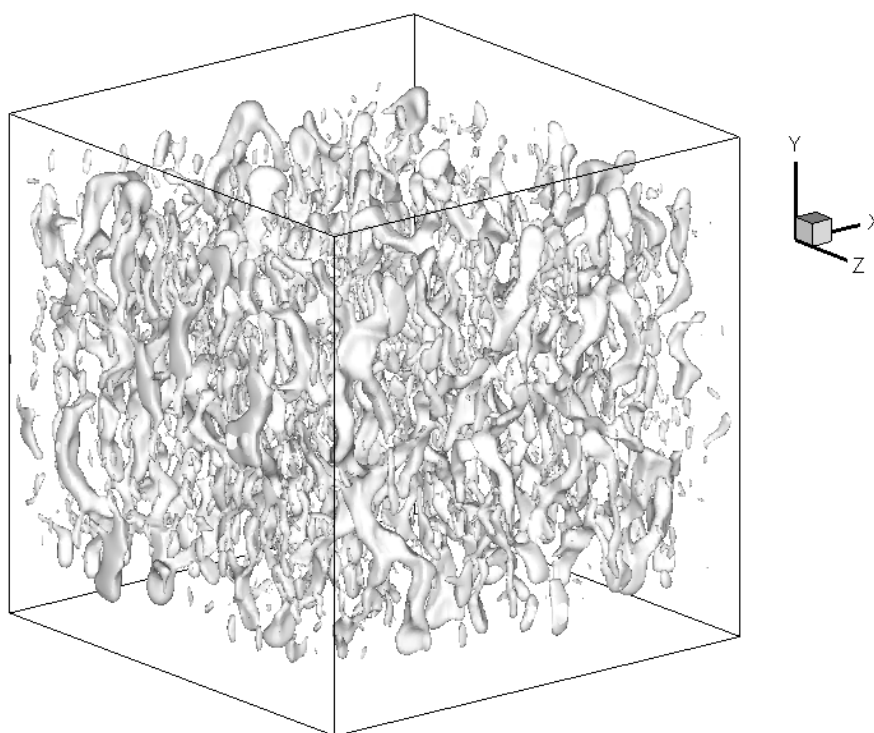
Tabela 10.1. Obliczone spadki ciśnienia przy przepływie gazu przez złoże p06\_25 dla dwóch różnych prędkości wlotowych

		Gradient ciśnienia $\frac{dp}{dx}$ [Pa/m]	
Prędkość wlotowa $v_g$	[m/s]	0.002	0.01
Siatka	g160	0.932	5.001
	g200	0.997	5.308
	g240	1.034	5.457
Ergun [4]		0.85	4.5

Podobnie jak w przypadku analogicznej analizy przepływu przez złożę pierścieni można tutaj dostrzec zbieżność obliczeń numerycznych – zmiana wyznaczonego gradientu ciśnienia zmniejsza się przy zagęszczaniu siatki. Chociaż widoczna jest rozbieżność między wartościami uzyskanymi metodą IB i z formuły Erguna (różnica ponad 20%), należy pamiętać o ograniczonej dokładności formuł empirycznych tego rodzaju i trudno *a priori* wyrokować, które z tych wyników są bardziej wiarygodne.

Przeprowadzone symulacje przepływu przez złożę granularne dostarczają pełnej informacji nt. prędkości przepływu, dają tym samym możliwość wyznaczenia istotnego parametru geometrycznego złoża – krętości hydraulicznej. W porównaniu z czysto geometryczną metodą przedstawioną w Rozdz. 6.2.1 (*Metodą Śledzenia Ścieżki*), wykorzystanie fizycznie ugruntowanego pola prędkości daje pełniejszy obraz lokalnych struktur w złożu granularnym i ich wpływu na charakterystyki przepływu. Wydaje się, że dla statystycznie jednorodnego rozkładu rozmiarów i orientacji ziaren w złożu obie metody powinny dawać podobne wyniki, jednak dla ośrodków silnie niejednorodnych można oczekiwać znacznych rozbieżności<sup>22</sup>.

Rozkład prędkości wewnątrz złoża, pokazany na Rys. 10.6, daje pojęcie nt. złożoności struktur przepływu w złożu ziaren kulistych, jednak znacznie lepiej oddaje tę złożoność rozkład trójwymiarowy np. izopowierzchnia modułu prędkości (Rys. 10.8). Rozkład ten, po pierwsze, pozwala dostrzec ciągłość i zniekształcenie niektórych kanałów porowych, po drugie, wskazuje na istnienie silnie zlokalizowanych obszarów o prędkości kilkukrotnie większej od prędkości wlotowej.



Rys. 10.8. Izopowierzchnia modułu prędkości przepływu ( $v = 0.01$ [m/s])

Złożoność struktur przepływu z Rys. 10.8, kontrastująca silnie z regularnością podobnych struktur w przepływie laminarnym w nieobecności złoża, nasuwa pomysł powiązania krętości złoża bezpośrednio z polem prędkości. Istotnie, w literaturze (patrz np. [3]) zaproponowano prostą metodę wiążącą krętość hydrauliczną ze stosunkiem średniego modułu  $\langle v \rangle$  prędkości w

<sup>22</sup> Aspekt ten wart jest bardziej szczegółowych badań, szczególnie ze względu na ogromną różnicę w nakładach obliczeniowych obu metod.

kanalach porowych do średniej składowej równoległej do kierunku prędkości wlotowej  $\langle v_y \rangle$  (dokładnie takie same podejście zastosowano w obliczeniach krętości, opisanych w Rozdziale 9):

$$T = \frac{\langle v \rangle}{\langle v_y \rangle} = \frac{\int v(\mathbf{r}) dV}{\int v_y(\mathbf{r}) dV}. \quad (10.9)$$

Całkowanie jest tutaj przeprowadzane po objętości kanałów porowych, ponieważ jednak wewnątrz ziaren obie średnie są równe 0, może ono objąć całą objętość domeny. Metoda ta będzie w dalszej części nazywana *Metodą Prędkości Średnich*.

Bardziej naturalna metoda, wynikająca bezpośrednio z definicji krętości, polega na śledzeniu bezmasowych cząstek unoszonych przez przepływ wewnątrz złoża, a następnie porównaniu pokonanej przez nich drogi z drogą cząstek swobodnych (przy braku złoża), patrz równanie (10.2). Metoda ta będzie dalej nazywana *Metodą Śledzenia Cząstek*. Implementacja tej metody wprowadza kilka komplikacji: po pierwsze, całkowanie równania ruchu cząstek wymaga znajomości prędkości przepływu w każdym punkcie przestrzeni w domenie obliczeniowej (nie tylko w węzłach siatki), po drugie, nie można zagwarantować, że cząstka umieszczona na wlocie do domeny przebędzie całą drogę przez złoże, aż do wylotu. Pierwszą trudność można rozwiązać stosując interpolację prędkości z sąsiadujących węzłów (tutaj użyto interpolacji trójliniowej). Drugą z tych trudności wymaga szerszego komentarza.

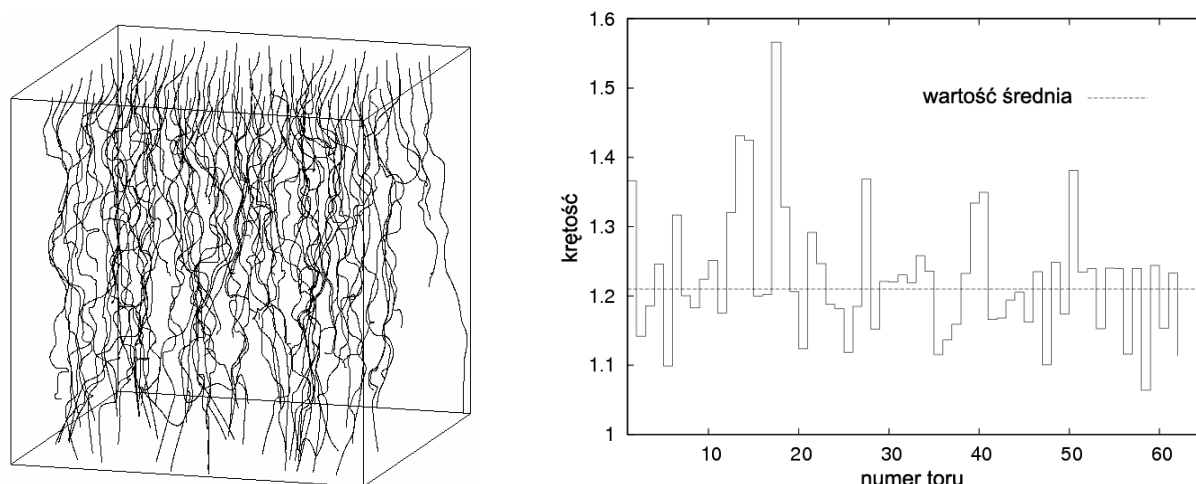
Nawet zakładając, że otrzymane w symulacji pole prędkości  $\vec{v}$  spełnia w pełni warunek nieściśliwości (zerowej dywergencji,  $\text{div}(\vec{v}) = 0$ ), dokładne wyznaczenie toru bezmasowej cząstki (linii prądu) z równania:

$$\frac{d\vec{r}_p}{dt} = \vec{v}(\vec{r}_p), \quad (10.10)$$

gdzie  $\vec{r}_p$  jest wektorem położenia cząstki, nie jest trywialne i wymaga użycia adekwatnych metod numerycznych. Tutaj wykorzystano metodę Rungego-Kutty czwartego rzędu oraz bardzo niską wartość kroku czasowego ( $\Delta t = 10^{-4}$  [s]), jednak nie można wykluczyć, że w jednym z etapów śledzenia cząstki może ona zboczyć z właściwej linii prądu i trafić w obszar ciała stałego lub punkt stagnacji przepływu ( $v \approx 0$ ). W rzeczywistości obliczone pole nie spełnia idealnie warunku nieściśliwości. Równanie Poissona, z którego wyznacza się ciśnienie mające zapewnić spełnienie tego warunku, rozwiązywane jest iteracyjnie i wynik obarczony jest nieodłącznym błędem zależnym od ustalonego poziomu zbieżności procesu iteracyjnego. Tym samym śledzenie cząstek nawet idealnym schematem może zakończyć się w rzeczywistych (lub wirtualnych) miejscach stagnacji lub upustów przepływu. Cząstki, które przebyły tylko fragment drogi wewnątrz złoża (czasami bardzo krótki, mniejszy, niż średnica ziarna), trudno jest wykorzystać do wiarygodnej oceny parametru krętości charakteryzującego całe złoże granularne. W procesie śledzenia cząstek wszystkie te błędy – braku zerowej dywergencji pola prędkości, błąd interpolacji, błąd metody całkowania równania (10.10) – wpływają na jakość rozwiązania i dokładność oszacowania krętości.

Porównania obu metod dokonano wykorzystując pole prędkości otrzymane dla przypadku  $v_g = 0.002$  [m/s]. Cząstki rozmieszczono w pobliżu płaszczyzny wlotowej w regularnych odstępach równych ok. 0.1 szerokości domeny obliczeniowej. Z całkowitej liczby 100 cząstek tylko 79 z nich osiągnęło poziom połowy wysokości złoża i tylko te cząstki zostały użyte do obliczenia krętości średniej (Rys. 10.9). Uzyskana wartość – 1.22 – bardzo dobrze zgadza się

z wynikiem wyznaczonym Metodą Śledzenia Ścieżki oraz metodą LMB (gdzie uzyskano wartość 1.21 - Rozd. 9.3.12), chociaż porównując indywidualne wartości krętości dla poszczególnych cząstek i lokalne krętości w Metodzie Śledzenia Ścieżki widać, że zakres zmian krętości w obecnej metodzie jest wyraźnie większy – istnieją ścieżki o  $\tau = 1.57$  lub  $\tau = 1.06$  (por. z Rys. 6.27, gdzie zakres zmian to 1.15-1.28). Co ciekawe, krętość obliczona metodą uśrednienia prędkości to 1.29 (Tabela 10.2), co może wynikać z tego, że w tym przypadku brana jest pod uwagę struktura pełnego pola prędkości w złożu.



Rys. 10.9. Wyznaczanie krętości Metodą Śledzenia Cząstek. Po lewej – przykładowe tory cząstek, po prawej – wartości krętości obliczone dla torów o długości większej, niż pół wysokości złoża (wraz z wartością średnią 1.22)

Tabela 10.2. Obliczone wartości krętości złoża p06\_25

	Metoda Śledzenia Cząstek	Metoda Prędkości Średnich
Krętość hydrauliczna	1.22	1.29

## 10.6. Podsumowanie

Analiza przedstawionych w rozdziale wyników pozwala sformułować następujące wnioski końcowe:

- Metoda Zanurzonego Brzegu (IB) pozwala na łatwe przystosowanie klasycznego solvera przepływu dla siatek strukturalnych i prostych domen obliczeniowych do symulacji przepływów przez złoża granularne;
- Metoda wymaga pokrycia siatką całej domeny obliczeniowej, a nie tylko domeny przepływu; może to się wiązać z nadmiarowością nakładu obliczeniowego;
- Metoda pozwala na mikroskopową analizę charakterystyk przepływu – m.in. pola prędkości i pola ciśnienia – w zależności od charakterystyk ziaren (ich kształtu, wymiarów) i charakterystyk złoża (porowatości, rozkładu orientacji ziaren itp.);
- Analiza taka wymaga zazwyczaj bardzo gęstych siatek obliczeniowych, szczególnie przy małej szerokości kanałów porowych;
- Wyznaczone makroskopowe charakterystyki przepływu – w szczególności spadki ciśnienia – dość dobrze zgadzają się z formułami empirycznymi;

- Znajomość pełnego pola prędkości pozwala na wyznaczenie krętości złoża bezpośrednio z pola prędkości lub Metodą Śledzenia Cząstek (całkowania równań ruchu cząstek bezmasowych – adwekcja w polu prędkości przepływu).

## Literatura

1. Al-Rawahi N., Tryggvason G.: Numerical simulation of dendritic solidification with convection: two-dimensional geometry. *J Comput Phys* 2002, 180, 471-496.
2. Chorin A.J.: Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math Comput* 1968, 22(104), 745-762.
3. Duda A., Koza Z., Matyka M.: Hydraulic tortuosity in arbitrary porous media flow. *Phys Rev E* 2011, 184, 036319.
4. Ergun S.: Fluid flow through packed columns. *Chem Eng Prog* 1952, 48(2), 89-94.
5. Fadlun E. A., Verzicco R., Orlandi P., Mohd-Yusof J.: Combined immersed boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations. *J Comput Phys* 2000, 161, 35-60.
6. Ferziger J. H., Peric M.: *Computational methods for fluid dynamics*. Springer-Verlag 2000.
7. Iaccarino G., Verzicco R.: Immersed boundary technique for turbulent flow simulations. *Appl Mech Rev* 2003, 56(3), 331-347.
8. Maćkowiak J.: *Fluid dynamics of packed columns*. Springer-Verlag 2012.
9. Marek M., Aniszewski W., Bogusławski A.: Simplified Volume of Fluid Method (SVOF) for two-phase flows. *TASK Quarterly* 2008, 12(3-4), 255-265.
10. Marek M.: Numerical generation of a fixed bed structure. *Chem Proc Eng* 2013, 34(3), 347-359.
11. Marek M.: CFD modelling of gas flow through a fixed bed of Raschig rings. *J Phys: Conf Ser* 2014, 530, 012016.
12. Mittal R., Iaccarino G.: Immersed boundary methods. *Ann Rev Fluid Mech* 2005, 37, 239-261.
13. Mohd-Yosuf J.: Combined immersed-boundary/B-spline methods for simulations of flow in complex geometries. *Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research* 1997, 317-328.
14. Peskin, C.S.: Flow patterns around heart valves: a numerical method. *J Comput Phys* 1972, 10, 252-271.
15. Tryggvason G., Scardovelli R., Zaleski S.: *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press 2011.

„... oceniana monografia została przygotowana w tak doskonały sposób, iż nie tylko stanie się cenną pozycją literaturową dla ekspertów zajmujących się poruszaną tematyką naukową, ale będzie również swoistym kompendium technik i analiz badawczych przydatnym młodemu naukowcom rozpoczynającym działalność poznawczą i rozwojową w zakresie mechaniki płynów. Treści zawarte w pracy zostały podzielone na poszczególne rozdziały w taki sposób, że monografię czyta się niezwykle przyjemnie.”

*Piotr Srokosz*

„... recenzowana monografia stanowi oryginalny i znaczący wkład w stan wiedzy na temat przepływu w ośrodkach porowatych. Jej najważniejszymi zaletami są według mnie: a) spójna koncepcja, w której różne metody naukowe (eksperymentalne, numeryczne, analityczne) uzupełniają się wzajemnie i tworzą logiczny ciąg badań charakteryzujących ośrodki porowate; b) wykorzystanie nowoczesnych technik badawczych: analiza obrazu, metoda elementów dyskretnych, różne metody rozwiązania numerycznego równań przepływu; c) przejrzystość prezentacji i przystępny język; d) szczegółowe {...} opisy poszczególnych metod; e) wykorzystanie bezpłatnego oprogramowania komputerowego, częściowo również stworzonego przez autorów monografii.”

*Adam Szymkiewicz*

ISBN 978-83-60493-04-5

