

Streszczenie pracy doktorskiej

Przedstawiona praca dotyczy zagadnień ko-symulacji multifizycznych modeli CFD w celu kalibracji modelu mikrokalorymetru NCM-9924 oraz łączenia wielofazowych modeli bilansu populacji utleniania kłaczków osadów ściekowych w reaktorze zbiornikowym z mieszadłem. Ko-symulacja z modelami opisanymi FEM (z ang. Finite Element Method) lub FVM (z ang. Finite Volume Method) jest niezwykle rzadka, ze względu na złożoność i skomplikowania modeli CFD opisanych różnym typem PDE (równań różniczkowych czastkowych) i ciągle rozwijanych narzędzi „software” odnośnie pracy z tymi modelami w trybie ko-symulacji, które mają swoje ograniczenia. Często modele te wymagają uproszczeń, jednak w numerycznej mechanice płynów modelowane zjawiska uproszczone są źródłem niepewności. Wymaga to niwelowania uproszczeń, co zwiększa znacznie zasoby i czas wykonywania obliczeń w tego typu symulacjach. Obecne narzędzia „software” do ko-symulacji multifizycznych modeli CFD, takie jak Simplorer, posiadają swoje ograniczenia i niedopracowania.

W pracy skalibrowano multifizyczny model CFD mikrokalorymetru NCM-9924 za pomocą parametru wrażliwego jaki stanowiła grubość membrany w oparciu o eksperymentalne dane pomiarowe, przy użyciu wymuszeń skokowych. Walidację modelu przeprowadzono dla kalorymetru z kroplą wody destylowanej i kroplą glikolu, gdzie dane te wykazały dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi. W oparciu o symulacje CFD przy użyciu ANSYS Fluent było również możliwa analiza czułości mikrokalorymetru. Kropla cieczy na membranie również wpłynęła na dynamiczne właściwości ustawień mikrokalorymetru w początkowych krokach czasowych, gdzie informacje te mają kluczowe znaczenie w analizie termicznych szybkiej reakcji biochemicznych. Każdorazowe mocowanie puszki aluminiowej generowało inną grubość warstwy pasty silikonowej, niedostępnej pomiarowo, wpływając na wynik pomiaru eksperymentalnego. W tym przypadku model ten został rozszerzony i poddany kalibracji za pomocą parametru niepewnego, jaki stanowiła grubość warstwy silikonowej dla sygnału sinus z użyciem ko-symulacji. Tego typu kalibracja umożliwiła szerszy zakres działania modelu z użyciem parametru niepewnego. Ko-symulacja pozwalała na wyznaczenie odpowiedniej grubości niepewnego parametru, jakim jest grubość warstwy silikonowej, której nie można zmierzyć eksperymentalnie. Możliwość łączenia modeli CFD o wysokim koszcie obliczeniowym i czasie z Simplorerem pozwala na modelowaniu zjawisk niedostępnych pomiarowo w czasie rzeczywistym, wspomagając pracę

eksperymentatora. Drugim multifizycznym modelem CFD w którym wykorzystano ko-symulację to reaktor zbiornikowy z mieszadłem, w którym wykorzystano ko-symulację do wielofazowego łączenia multifizycznych modeli bilansu populacji fazy stałej i gazowej. Pozwalało to zbadanie wpływu interakcji obydwóch faz, gdzie zjawiska te są w literaturze upraszczane, a również mają wpływ na hydrodynamikę zjawisk multifizycznych lub wydajność zachodzącego procesu.

Zaprezentowana w pracy nowatorska metoda ko-symulacji multifizycznych modeli CFD pozwala na efektywny sposób kalibracji modeli multifizycznych, łączenia modeli bilansu populacji, poszerzenia multifizyki zjawisk w układach wielofazowych przyczyniając się do minimalizacji zakresu badań laboratoryjnych niezbędnych dla projektowania procesowego. Zrealizowana praca pozwala na potwierdzenie tezy o możliwościach ko-symulacji modeli o parametrach rozłożonych przy użyciu skomplikowanego oprogramowania realizującego proces ko-symulacji w zakresie warunków granicznych oprogramowania. Analiza i projektowanie złożonych systemów sterowania wymaga wykorzystania zarówno ko-symulacji jak i wydajnych środowisk oprogramowania do symulacji komputerowej. Rozważane kierunki obejmują poszukiwania zarówno testowania jak i integracji nowych struktur modeli ko-symulacji przy użyciu środowisk symulacyjnych dla modeli o parametrach rozłożonych rozbudowywanych o nowe zjawiska multifizyczne.