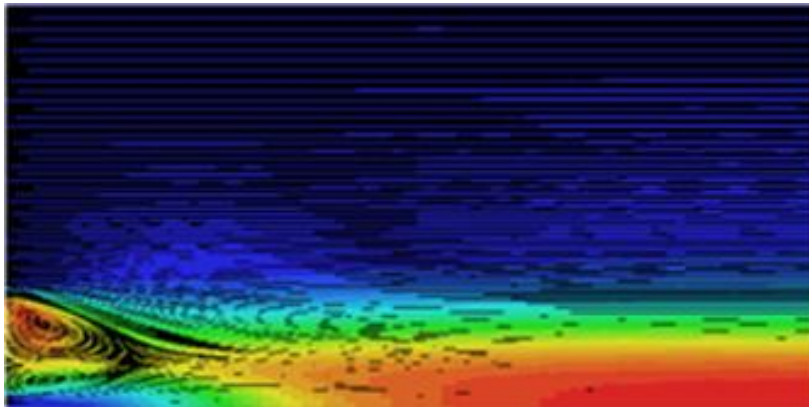


**ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΠΑΤΡΑΣ
ΣΧΟΛΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΙΑΣ**

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΥΡΒΩΔΟΥΣ ΡΟΗΣ ΣΕ
ΤΥΧΑΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΚΑΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ
ΡΟΪΚΩΝ ΓΡΑΜΜΩΝ**



ΣΠΟΥΔΑΣΤΗΣ: ΛΙΕΡΟΣ ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ

**ΕΠΙΒΛΕΠΟΝΤΕΣ ΚΑΘΗΓΗΤΕΣ: ΑΛΕΞΑΝΔΡΟΣ ΚΑΛΑΡΑΚΗΣ
ΙΩΑΝΝΗΣ ΓΙΑΝΝΑΚΗΣ**

ΠΑΤΡΑ 2010

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Το παρόν τεύχος αποτελεί την Πτυχιακή Εργασία, που εκπονήθηκε στο Τμήμα Μηχανολογίας του Τεχνολογικού Εκπαιδευτικού Ιδρύματος Πάτρας και αντικείμενό της αποτελεί η μελέτη της διαδικασίας της καύσης, που πραγματοποιείται σ' ένα καυστήρα με καύσιμο το μεθάνιο παρουσία αέρα.

Κύριος στόχος μας ήταν η σχεδίαση των ροϊκών γραμμών επιλύοντας τον υπολογιστικό κώδικα για το συγκεκριμένο πρόβλημα. Επιπλέον, η μελέτη προχώρησε σε περαιτέρω διερεύνηση της διαδικασίας της καύσης με τη προσομοίωση της ροής στο υπολογιστικό πακέτο Fluent, με σκοπό την βελτίωση των συνθηκών καύσης και κατ' επέκταση των αποτελεσμάτων της.

Ευχαριστώ θερμά τους επιβλέποντες καθηγητές μου, κ. Αλέξανδρο Καλαράκη και κ. Ιωάννη Γιαννάκη για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγηση που μου προσέφεραν για την πραγματοποίηση της Εργασίας, καθώς επίσης και τον κ. Κωνσταντίνο Μαυρίδη για τις καθοδηγήσεις του.

Λιερός Ευάγγελος
Νοέμβριος 2010

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η μελέτη της διαδικασίας της καύσης είναι σημαντική, ώστε να προβούμε σε τεχνικές για να βελτιώσουμε τις συνθήκες που αυτή πραγματοποιείται, με σκοπό να έχουμε πιο επιθυμητά αποτελέσματα καθώς και να μειώσουμε την κατανάλωση του καυσίμου και των ρύπων.

Η παρούσα πτυχιακή εργασία χωρίζεται σε πέντε κεφάλαια και αντικείμενό της ήταν η προσομοίωση ενός προβλήματος μη προαναμεμειγμένης καύσης σε καυστήρα με αντιδρώντα στοιχεία αέρα-μεθάνιο, αρχικά επιλύοντας έναν υπολογιστικό κώδικα σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran. Στη συνέχεια, μελετήθηκε το πεδίο ροής του καυστήρα με το σχεδιασμό των ροϊκών γραμμών μέσω κώδικα παρεμβολής που αναπτύχθηκε στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας. Επιπροσθέτως, έγινε προσομοίωση του συγκεκριμένου προβλήματος στο υπολογιστικό πακέτο Fluent, ώστε να μελετήσουμε τη διαδικασία της καύσης. Επιπλέον, η μελέτη προχώρησε στη βελτίωση των συνθηκών καύσης, πραγματοποιώντας δοκιμές στο υπολογιστικό πρόγραμμα και στην παρούσα εργασία αναλύονται τρεις από αυτές τις περιπτώσεις που παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον για τα αποτελέσματά τους.

Στο πρώτο κεφάλαιο (Ρευστομηχανική), έγινε ανάλυση της υπολογιστικής ρευστομηχανικής και πιο συγκεκριμένα, για τη σημασία της, το σκοπό της, τα πλεονεκτήματα-μειονεκτήματα που έχει, τις διέπουσες εξισώσεις της ρευστομηχανικής καθώς και για την ακρίβεια, αστάθεια και οικονομία της μεθόδου που χρησιμοποιείται. Στη συνέχεια του πρώτου κεφαλαίου γίνεται ανάλυση του υπολογιστικού πακέτου Fluent, τονίζοντας κυρίως τις περιπτώσεις που έχουμε τυρβώδεις ροές όπως στην περίπτωσή μας, τα διάφορα μοντέλα τύρβης που υπάρχουν και τη δημιουργία του υπολογιστικού πλέγματος. Ενώ στο τέλος του κεφαλαίου, γίνεται αναφορά στη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών και στοιχείων που χρησιμοποιούνται στην υπολογιστική ρευστομηχανική.

Στο δεύτερο κεφάλαιο (Τύρβη και Καύση), γίνεται μία εκτενέστερη ανάλυση στις περιπτώσεις που έχουμε καύση, στο σκοπό και στις εφαρμογές της μοντελοποίησής της, στη ταξινόμηση των προβλημάτων ανάλογα με την περίπτωση που εξετάζεται, στη δομή της φλόγας και στους παράγοντες που επηρεάζουν τη σταθεροποίησή της. Στο κεφάλαιο γίνεται επίσης αναφορά στις φλόγες διάχυσης και στη μοντελοποίηση της τυρβώδους καύσης όπως στην περίπτωση που εξετάζουμε.

Στο τρίτο κεφάλαιο (Σχεδιασμός ροϊκών γραμμών), γίνεται αναφορά στον υπολογιστικό κώδικα που χρησιμοποιήθηκε αλλά και στις μεθόδους παρεμβολής, με έμφαση στη διγραμμική παρεμβολή, σύμφωνα με την οποία φτιάξαμε τον υπολογιστικό κώδικα, με σκοπό το σχεδιασμό των ροϊκών γραμμών που ακολουθούν στο τέλος του κεφαλαίου.

Στο τέταρτο κεφάλαιο (Επίλυση προβλήματος), έγινε η προσομοίωση του προβλήματος καύσης που εξετάζουμε στο υπολογιστικό πακέτο Fluent, ώστε να γίνει εκτενέστερη μελέτη του προβλήματος. Στο κεφάλαιο αυτό δείχνονται οι ροϊκές γραμμές μαζί με κάποια σημαντικά στοιχεία αλλά και κάποιες κατανομές, που μας αποκαλύπτουν ενδιαφέρουσες πληροφορίες για τη διαδικασία της καύσης, ενώ το κεφάλαιο κλείνει με την παρουσίαση τριών προτάσεων και την ανάλυση των αποτελεσμάτων τους, που έγιναν με στόχο την βελτίωση των συνθηκών καύσης και άρα τον αποτελεσμάτων της.

Στο πέμπτο και τελευταίο κεφάλαιο (Συμπεράσματα και προτάσεις), αναλύονται τα συμπεράσματα που εξάγουμε από τα αποτελέσματα που πήραμε και στο τέλος γίνονται μερικές προτάσεις για πιθανές μελλοντικές πτυχιακές που παρουσιάζουν αρκετό ενδιαφέρον.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ	i
ΠΕΡΙΛΗΨΗ	iii
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	v

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1^ο: ΡΕΥΣΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ

1.1 Υπολογιστική Ρευστομηχανική	1
1.1.1 Εισαγωγή.....	1
1.1.2 Αντικείμενο της υπολογιστικής ρευστομηχανικής.....	2
1.1.3. Βασικές θεωρήσεις και απαιτούμενα βήματα για την ανάπτυξη αριθμητικού αλγορίθμου	3
1.1.4 Δημιουργία πλέγματος στην υπολογιστική ρευστομηχανική.....	5
1.1.5 Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα θεωρητικού υπολογισμού	6
1.1.6 Μαθηματική δομή των υπολογιστικών κωδίκων	6
1.1.7 Διέπουσες εξισώσεις της ρευστοδυναμικής	8
1.1.8 Εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών	9
1.1.9 Όρος πηγής.....	11
1.1.10 Ακρίβεια μεθόδου	11
1.1.11 Υποχαλάρωση	12
1.1.12 Αστάθεια-Ακρίβεια-Οικονομία	12
1.2 Υπολογιστικό πακέτο FLUENT	13
1.2.1 Εισαγωγή.....	13
1.2.2 Τυρβώδεις ροές	15
1.2.3 Μοντέλα τύρβης.....	18
1.2.4 Αντιδρώντα συστήματα	27
1.2.5 Εξίσωση μεταφοράς ειδών.....	28
1.2.6 Μοντέλο κλάσματος μίγματος/PDF	31
1.2.7 Συνοριακές συνθήκες.....	38
1.2.8 Η επαναληπτική διαδικασία της λύσης.....	42
1.2.9 Υπολογιστικό πλέγμα.....	43
1.2.10 Συστήματα συντεταγμένων.....	44
1.3 Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών.....	45
1.3.1 Εισαγωγή.....	45
1.3.2 Χρήση πεπερασμένων διαφορών	46
1.4 Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων.....	50
1.4.1 Εισαγωγή.....	50
1.4.2 Χρήση πεπερασμένων στοιχείων.....	51

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2°: ΤΥΡΒΗ ΚΑΙ ΚΑΥΣΗ

2.1 Καύση.....	52
2.2 Τύρβη	52
2.3 Τυρβώδης καύση.....	53
2.4 Μοντελοποίηση της καύσης.....	54
2.4.1 Σκοπός τη μοντελοποίησης της καύσης	54
2.4.2 Εφαρμογές της μοντελοποίησης της καύσης.....	54
2.5 Ταξινόμηση των προβλημάτων καύσης.....	54
2.6 Εξισώσεις που διέπουν τις διεργασίες καύσης	56
2.7 Προσομοίωση τυρβώδων ροών με καύση	57
2.8 Η διαδικασία της καύσης και η δομή της φλόγας.....	58
2.9 Χημικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται	58
2.10 Φλόγες διάχυσης	59
2.11 Μοντελοποίηση της τυρβώδους καύσης στις φλόγες διάχυσης μέσω χρήσης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας.....	63
2.11.1 Συνάρτηση Πυκνότητας Πιθανότητας (ΣΠΠ – PDF).....	63
2.11.2 Συνάρτηση β-ΣΠΠ (β-PDF).....	63
2.12 Σταθεροποίηση φλόγας.....	64
2.12.1 Τρόποι σταθεροποίησης της φλόγας	64
2.12.2 Παράγοντες επίδρασης για τη σταθεροποίηση της φλόγας.....	67

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3°: ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΡΟΪΚΩΝ ΓΡΑΜΜΩΝ

3.1 Κώδικας επίλυσης	68
3.2 Παρεμβολή	69
3.2.1 Εισαγωγή.....	69
3.2.2 Γραμμική παρεμβολή.....	70
3.2.3 Διγραμμική παρεμβολή.....	71
3.3 Σχεδιασμός ροϊκών γραμμών	76

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4°: ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

4.1 Διαδικασία επίλυσης	79
4.1.1 Σχεδιασμός υπολογιστικού πλέγματος	79
4.1.2 Διαδικασία επίλυσης στο υπολογιστικό πρόγραμμα FLUENT.....	81
4.2 Επίλυση αρχικού προβλήματος.....	81
4.2.1 Επίλυση και αποτελέσματα.....	81
4.2.2 Ανάλυση των αποτελεσμάτων του αρχικού προβλήματος.....	89
4.3 Επίλυση προβλήματος για τη βελτίωση των αποτελεσμάτων.....	90
4.3.1 Πρώτη πρόταση και τα αποτελέσματα	90
4.3.2 Ανάλυση των αποτελεσμάτων της πρώτης πρότασης	98
4.3.3 Δεύτερη πρόταση και τα αποτελέσματα	98
4.3.4 Ανάλυση των αποτελεσμάτων της δεύτερης πρότασης.....	106
4.3.5 Τρίτη πρόταση και τα αποτελέσματα	106
4.3.6 Ανάλυση των αποτελεσμάτων της τρίτης πρότασης	114

4.4 Ανασκόπηση των αποτελεσμάτων.....	114
---------------------------------------	-----

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5°: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

5.1 Συμπεράσματα.....	116
5.2 Προτάσεις.....	117

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	B-1
--------------------------	------------

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	Π-1
-----------------------	------------

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1°

ΡΕΥΣΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ

1.1 ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΡΕΥΣΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ

1.1.1 Εισαγωγή

Για την επίλυση κάθε ροϊκού προβλήματος, στη μεταφορά θερμότητας και στη ρευστομηχανική, χρησιμοποιούνται κυρίως δύο μέθοδοι, οι οποίες είναι η πειραματική έρευνα και η προσομοίωση με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή (ο οποίος ονομάζεται θεωρητικός υπολογισμός).

Τις τελευταίες δεκαετίες, η ανάγκη για όσο το δυνατόν πληρέστερη γνώση και αντίληψη της κίνησης των ρευστών, η συνεχής αύξηση της ταχύτητας επεξεργασίας και της χωρητικότητας των υπολογιστών, η βελτίωση των μεθόδων επίλυσης αλλά και το χαμηλό κόστος σχεδιασμού, η ταχύτητα εκτέλεσης, η πληθώρα πληροφοριών καθώς και δυνατοτήτων προσομοίωσης για οποιεσδήποτε συνθήκες, οδήγησαν την υπολογιστική ρευστομηχανική (Computational Fluid Dynamic – C.F.D.) να γίνει ένα αναπόσπαστο τμήμα του σχεδιασμού και του πειράματος.

Πλέον είναι απαραίτητο εργαλείο όχι μόνο ανάλυσης αλλά και σχεδιασμού σε διάφορα πεδία που εφαρμόζεται. Τα τελευταία χρόνια η επίδραση της υπολογιστικής ρευστομηχανικής έχει αναγνωριστεί σε πληθώρα τεχνικών εφαρμογών. Πέρα από τις εφαρμογές όπως αεροσκάφη, αέρια και υδροστρόβιλοι, πλοία και εγκαταστάσεις σωληνώσεων των οποίων η βασική λειτουργικότητα καθορίζεται από τα φαινόμενα ροής, η υπολογιστική ρευστομηχανική παίζει σημαντικό ρόλο σε μεγάλο εύρος τεχνικών σχεδίων. Η αυτοκινητοβιομηχανία ήταν από τους πρώτους τομείς, που αναγνώρισε τη σημασία της αεροδυναμικής στο σχεδιασμό των αυτοκινήτων. Βελτιωμένη ευστάθεια, μειωμένη κατανάλωση καυσίμων και μικρότεροι αεροδυναμικοί θόρυβοι (αεροακουστική), ήταν ορισμένα από τα οφέλη που προέκυψαν από το σχεδιασμό οχημάτων που βασίστηκε στη μηχανική των ρευστών. Σύντομα και σε άλλους βιομηχανικούς τομείς διαπιστώθηκε ότι ο σχεδιασμός ή η βελτιστοποίηση διεργασιών, που βασίζονται σε εμπειρικούς ή ημι-εμπειρικούς κανόνες εξάντλησε τα επιστημονικά του όρια. Σήμερα, λέβητες, καυστήρες, διαχωριστές, ηλεκτροστατικά φίλτρα, καπνοδόχοι, κτήρια και πολλές άλλες εφαρμογές σχεδιάζονται με βάση θεωρήσεις της μηχανικής των ρευστών.

Η υπολογιστική ρευστομηχανική έχει πάρα πολλές ακόμα εφαρμογές, όπως τη μελέτη θερμοκρασίας του νερού και τα ρεύματα σε λίμνες, καταπόνηση κρεμαστής γέφυρας, ιζηματικές προσχώσεις σε ποτάμι, ροή σε λεκάνες, μεταφορά καυσαερίων σε αστικές περιοχές, καταπόνηση εξέδρας άντλησης πετρελαίου, προσχώσεις ιζήματος σε φράγμα, εφαρμογή στην κατασκευή οικοδομών όπως για τον αερισμό, την ποιότητα του αέρα, την εξάπλωση φωτιάς και καπνού, την άνεση των χρηστών, την πολυζωνική (από δωμάτιο σε δωμάτιο) κίνηση του αέρα κ.α.

1.1.2. Αντικείμενο της υπολογιστικής ρευστομηχανικής

Όπως είναι γνωστό οι εξισώσεις Navier-Stokes στη γενική τους μορφή δεν έχουν αναλυτική λύση, συγκεκριμένα μόνο κάποιες πολύ ειδικές περιπτώσεις τους επιδέχονται αναλυτική λύση. Έτσι για την επίλυσή τους έχουν αναπτυχθεί προσεγγιστικοί αριθμητικοί μέθοδοι που στηρίζονται σε αλγόριθμους αριθμητικής ανάλυσης. Οι διάφορες τεχνικές και αλγορίθμοι, που χρησιμοποιούνται για την επίλυση των παραπάνω εξισώσεων αποτελούν στοιχεία υπολογιστικής ρευστοδυναμικής

Η υπολογιστική ρευστομηχανική (CFD) έχει ως αντικείμενο την ανάλυση συστημάτων, που περιλαμβάνουν ροή ρευστού/ρευστών και μεταφορά θερμότητας με ή χωρίς χημικές αντιδράσεις, με τη βοήθεια του ηλεκτρονικού υπολογιστή. Για να φτιαχτεί μια προσεγγιστική λύση αριθμητικά θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί μια μέθοδος διακριτοποίησης, η οποία προσεγγίζει τις διαφορικές εξισώσεις με ένα σύστημα γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων το οποίο μπορεί να επιλυθεί σε υπολογιστή. Οι προσεγγίσεις αυτές εφαρμόζονται σε μικρές περιοχές στο εξεταζόμενο πεδίο ή στο χρόνο γι' αυτό η αριθμητική λύση δίνει αποτελέσματα σε διακριτά σημεία στο χώρο και το χρόνο. Η ακρίβεια της αριθμητικής λύσης εξαρτάται από την ποιότητα της διακριτοποίησης που χρησιμοποιείται. Μια πρώτη κατάταξη των κωδικών υπολογιστικής ρευστοδυναμικής γίνεται με το είδος των διαφορικών εξισώσεων που επιλύουν α) ελλειπτικές, β) παραβολικές και γ) υπερβολικές. Με αντίστοιχο τρόπο και ανάλογα με το είδος των εξισώσεων που τα περιγράφει χαρακτηρίζονται και τα πεδία ροής. Η φυσική ερμηνεία της παραπάνω κατηγοριοποίησης είναι η εξής: στα πεδία ελλειπτικού τύπου η πληροφορία κινείται προς όλες τις διευθύνσεις και έτσι ελλειπτικά πεδία έχουν σχέση με ανακυκλοφορίες. Στα παραβολικά πεδία η πληροφορία κινείται προς μόνο μία κατεύθυνση. Είναι με λίγα λόγια πεδία στα οποία υπάρχει κύρια κατεύθυνση ροής. Επίσης λέγονται πεδία οριακού στρώματος, διότι το οριακό στρώμα είναι χαρακτηριστικό παραβολικό πεδίο. Ακόμη, στα υπερβολικά πεδία η πληροφορία κινείται πάνω σε μια χαρακτηριστική γραμμή και είναι πεδία που έχουν να κάνουν με υπερηχητική ροή. Τα πεδία αυτά διαφέρουν και σε ό,τι αφορά τις μεθόδους επίλυσης. Τα ελλειπτικά πεδία είναι κλειστά πεδία. Η

επίλυσή τους εξαρτάται από τις οριακές συνθήκες και το πεδίο πρέπει να επιλύεται ολόκληρο σε κάθε επανάληψη. Τα παραβολικά πεδία είναι ανοιχτά πεδία και η επίλυσή τους εξαρτάται από τις αρχικές συνθήκες, μπορούν να επιλυθούν με ένα σχήμα βηματικό. Έτσι, η αντιμετώπισή τους είναι πιο εύκολη από τα ελλειπτικά και η επίλυσή τους αρκετά πιο γρήγορη. Τέλος, οι κώδικες που επιλύουν παραβολικά μόνο προβλήματα είναι περιορισμένοι σε αυτά και από την άλλη οι κώδικες που επιλύουν ελλειπτικά προβλήματα μπορούν χωρίς πρόβλημα να χρησιμοποιηθούν και για την επίλυση παραβολικών πεδίων.

1.1.3. Βασικές θεωρήσεις και απαιτούμενα βήματα για την ανάπτυξη αριθμητικού αλγορίθμου

Για την επίλυση κάθε ροϊκού πεδίου είναι πλέον δυνατή η χρησιμοποίηση υπολογιστικών πακέτων, τα οποία έπειτα από προσαρμογή του εξεταζόμενου προβλήματος δίνουν αριθμητική λύση, που πλησιάζει πολύ την πραγματική. Κάθε πρόγραμμα υπολογιστικής ρευστομηχανικής για να πετύχει ένα όσο το δυνατόν περισσότερο ρεαλιστικό αποτέλεσμα, θα πρέπει να ικανοποιεί μερικά γενικά χαρακτηριστικά.

Στη συνέχεια, ακολουθούν συνοπτικά οι κύριες θεωρήσεις, αλλά και τα βασικά βήματα για την ανάπτυξη καθώς και την εφαρμογή της αριθμητικής προσομοίωσης ενός προβλήματος ρευστομηχανικής.

α) Κατανόηση του προβλήματος:

- Κατανόηση του προβλήματος καθώς και του μελετητικού ή ερευνητικού προγράμματος.
- Καθορισμός των στόχων και των αποτελεσμάτων της έρευνας που θέλουμε να δούμε.
- Πλεονεκτήματα ανάπτυξης και χρήσης αριθμητικών προσομοιώσεων.
- Γνώση και σχεδιασμός των ορίων της προσομοίωσης.

β) Προσομοίωση του προβλήματος:

- Καθορισμός των ανεξάρτητων και εξαρτημένων μεταβλητών του προβλήματος.
- Καθορισμός του είδους της προσομοίωσης και των σχετικών αριθμητικών προσεγγίσεων.
- Καθορισμός των βασικών εξισώσεων, των αρχικών συνθηκών ροής και των οριακών συνθηκών.
- Επιλογή των παραδοχών που ισχύουν στο εξεταζόμενο πρόβλημα.
- Ανάπτυξη των επιμέρους προγραμμάτων για την ολοκλήρωση του προβλήματος.

γ) Επίλυση του προβλήματος:

- Επιλογή κατάλληλου για τεχνική επίλυση διαθέσιμου λογισμικού.

- Χρήση κατάλληλων υπολογιστικών συστημάτων.
- Η δημιουργία ενός πεπερασμένου πίνακα από σημεία (κόμβους) του ροϊκού πεδίου, που απαρτίζουν το υπολογιστικό πλέγμα.
- Η μετατροπή των μερικών διαφορικών εξισώσεων σε ένα σύστημα όμοιων αλγεβρικών εξισώσεων πεπερασμένων διαφορών, οι οποίες συσχετίζουν τις τιμές των εκάστοτε μεταβλητών στους κόμβους του πεδίου με τις τιμές στους γειτονικούς κόμβους.
- Η μετατροπή των εξισώσεων σε κατάλληλη μορφή για την επίλυση τους από κάποια αξιόπιστη επαναληπτική τεχνική.
- Επαλήθευση των αποτελεσμάτων των υπολογισμών με ακριβείς αναλυτικές λύσεις, εφόσον αυτές υπάρχουν ή άλλες αριθμητικές τεχνικές ή πειραματικά αποτελέσματα ή οπτικά αποτελέσματα ή μετρήσεις του πεδίου.
- Παρουσίαση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων, ερμηνεία αυτών και προτάσεις για περαιτέρω μελέτη.
- Λήψη δεδομένων και έλεγχος της αξιοπιστίας του αριθμητικού προσομοιωτή.
- Χρήση του λογισμικού που αναπτύχθηκε για ανάλυση, σχεδιασμό και λήψη αποφάσεων για περαιτέρω επιστημονική δράση.

Επίσης, οι όροι που ακολουθούν αυξάνουν την αξιοπιστία της υπολογιστικής λύσης:

- Γενικότητα εφαρμογής: Προσπάθεια δημιουργίας υπολογιστικού κώδικα με πεδίο εφαρμογής σε όσο το δυνατόν περισσότερες ροϊκές περιπτώσεις με τις λιγότερες δυνατές αλλαγές.
- Ακρίβεια λύσης: Οι αλγεβρικές εξισώσεις αποτελούν προσεγγίσεις των μερικών διαφορικών εξισώσεων. Η διαφορά μεταξύ αριθμητικών λύσεων των πρώτων και αναλυτικών λύσεων των δεύτερων, δηλαδή το υπολογιστικό λάθος (truncation error), πρέπει να είναι όσο το δυνατό μικρότερο.
- Σύγκλιση: Ιδιότητα μιας επαναληπτικής μεθόδου επίλυσης ενός συστήματος όμοιων αλγεβρικών εξισώσεων που οδηγεί στην ομαλή επίλυση τους. Μία αξιόπιστη μέθοδος συγκλίνει κάτω από οποιεσδήποτε συνθήκες.
- Οικονομία λύσης: Βασική ανάγκη μιας μεθόδου είναι το να είναι γρήγορη και οικονομική. Αυτή η ανάγκη για «υπολογιστική οικονομία» παίζει πολύ μεγάλο ρόλο στη δημιουργία κάθε υπολογιστικής μεθόδου.

1.1.4. Δημιουργία πλέγματος στην υπολογιστική ρευστομηχανική

Για την επίλυση ενός προβλήματος διαφορικών εξισώσεων θα πρέπει μεταξύ άλλων να καθοριστεί η γεωμετρία στην οποία αναζητείται η λύση του, καθώς και οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες. Για να ληφθεί μια προσεγγιστική αριθμητική λύση σε ένα τέτοιου είδους πρόβλημα, θα πρέπει να καθοριστούν μικρά διαμερίσματα στο χώρο στα οποία να εφαρμόζονται οι διακριτοποιημένες διαφορικές εξισώσεις. Δηλαδή απαιτείται η δημιουργία πλέγματος, στο οποίο να δίνονται με σαφήνεια οι παραπάνω πληροφορίες, ο τοπολογικός και ποιοτικός καθορισμός των γεωμετρικών ορίων, που εκτός από την γεωμετρία, περιγραφούν και την συμπεριφορά του περικλείοντος ρευστού άρα και των μαθηματικών σχέσεων περιγραφής αυτών.

Οι κώδικες υπολογιστικής ρευστομηχανικής είναι δομημένοι πάνω σε αριθμητικά σχήματα τα οποία είναι σε θέση να χειριστούν προβλήματα ροής ρευστών. Όλοι οι κώδικες απαρτίζονται από τρία κύρια μέρη, συγκεκριμένα από τον προεπεξεργαστή, το κύριο πρόγραμμα που επιλύει τη ροή και τέλος έναν επεξεργαστή αποτελεσμάτων.

Ο προεπεξεργαστής δέχεται σαν είσοδο πληροφορίες που αφορούν: πρώτον, τη γεωμετρία του πεδίου που θα επιλυθεί, δεύτερον, το πλέγμα με το οποίο θα διακριτοποιηθεί το πεδίο, τρίτον, τα φυσικά και χημικά φαινόμενα που θα προσομοιωθούν, τέταρτον, τις ιδιότητες του ρευστού και τέλος, τις οριακές συνθήκες. Σε ότι αφορά τη γεωμετρία το πεδίο μπορεί να είναι δισδιάστατο ή τρισδιάστατο. Από την άλλη το πλέγμα αυτό μπορεί να είναι δομημένο (structured), δομημένο κατά ομάδες (block structured) ή μη-δομημένο (unstructured). Το σημείο αποθήκευσης της πληροφορίας μπορεί να είναι ομοιόθετα (collocated) ή μετατοπισμένα (staggered). Σε ότι αφορά το σύστημα συντεταγμένων αυτό μπορεί να είναι καρτεσιανό (επίσης σφαιρικό ή κυλινδρικό) ή καμπυλόγραμμο (ορθογωνικό ή μη ορθογωνικό).

Στο κυρίως πρόγραμμα: Πρώτα οι μεταβλητές προσεγγίζονται με κάποιες απλές συναρτήσεις, έπειτα οι μερικές διαφορικές εξισώσεις διακριτοποιούνται και μετατρέπονται σε σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων και τέλος επιλύεται το σύστημα των αλγεβρικών εξισώσεων. Το μαθηματικό μοντέλο που επιλύεται μπορεί να είναι για ιξώδη ή μη-ιξώδη, συμπιεστή ή ασυμπίεστη, στρωτή ή τυρβώδη, μόνιμη ή μη-μόνιμη ροή. Υπάρχουν κυρίως τέσσερις μέθοδοι διακριτοποίησης των διαφορικών εξισώσεων: 1) η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών (FD), 2) η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (FE), 3) η φασματική μέθοδος και 4) η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων (FV). Υπάρχουν πολλά σχήματα προσέγγισης των μεταβλητών τα οποία διαφέρουν μεταξύ τους ως προς την ακρίβεια, την ευστάθεια στους υπολογισμούς, αλλά και το υπολογιστικό κόστος. Υπάρχουν επίσης διάφοροι αλγόριθμοι που επιτρέπουν τη σύζευξη των διαφορικών εξισώσεων σε μια ομάδα εξισώσεων.

1.1.5. Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα θεωρητικού υπολογισμού

Τα πλεονεκτήματα του θεωρητικού υπολογισμού από την αντίστοιχη πειραματική έρευνα είναι:

- Το χαμηλό κόστος, το πιο σπουδαίο πλεονέκτημα μιας υπολογιστικής πρόβλεψης. Στις περισσότερες εφαρμογές, το κόστος κατασκευής καθώς και τρεξίματος ενός υπολογιστικού προγράμματος είναι πολλές τάξεις χαμηλότερο από το κόστος μιας αντίστοιχης πειραματικής διερεύνησης.
- Η ταχύτητα κατασκευής και εκτέλεσης μιας υπολογιστικής διερεύνησης σε σύγκριση με την αντίστοιχη πειραματική διερεύνηση.
- Οι ολοκληρωμένες πληροφορίες που μπορούμε να εξάγουμε για ολόκληρη την εξεταζόμενη επιφάνεια λύσης που μας ενδιαφέρει. Αντιθέτως στο πείραμα, υπάρχουν ελάχιστες απρόσιτες περιοχές υπολογισμού και επίσης δεν υπάρχει διαταραχή ροής από τα όργανα λήψης μέτρησης.
- Η δυνατότητα εύκολης προσομοίωσης σε ένα θεωρητικό υπολογισμό των πραγματικών συνθηκών. Ένα υπολογιστικό πρόγραμμα δεν είναι δύσκολο να εξομοιώνει μικρές ή μεγάλες διαστάσεις, να χειρίζεται χαμηλές ή υψηλές θερμοκρασίες, τοξικές ή εύφλεκτες ουσίες ή να ακολουθεί πολύ γρήγορες ή πολύ αργές διαδικασίες.

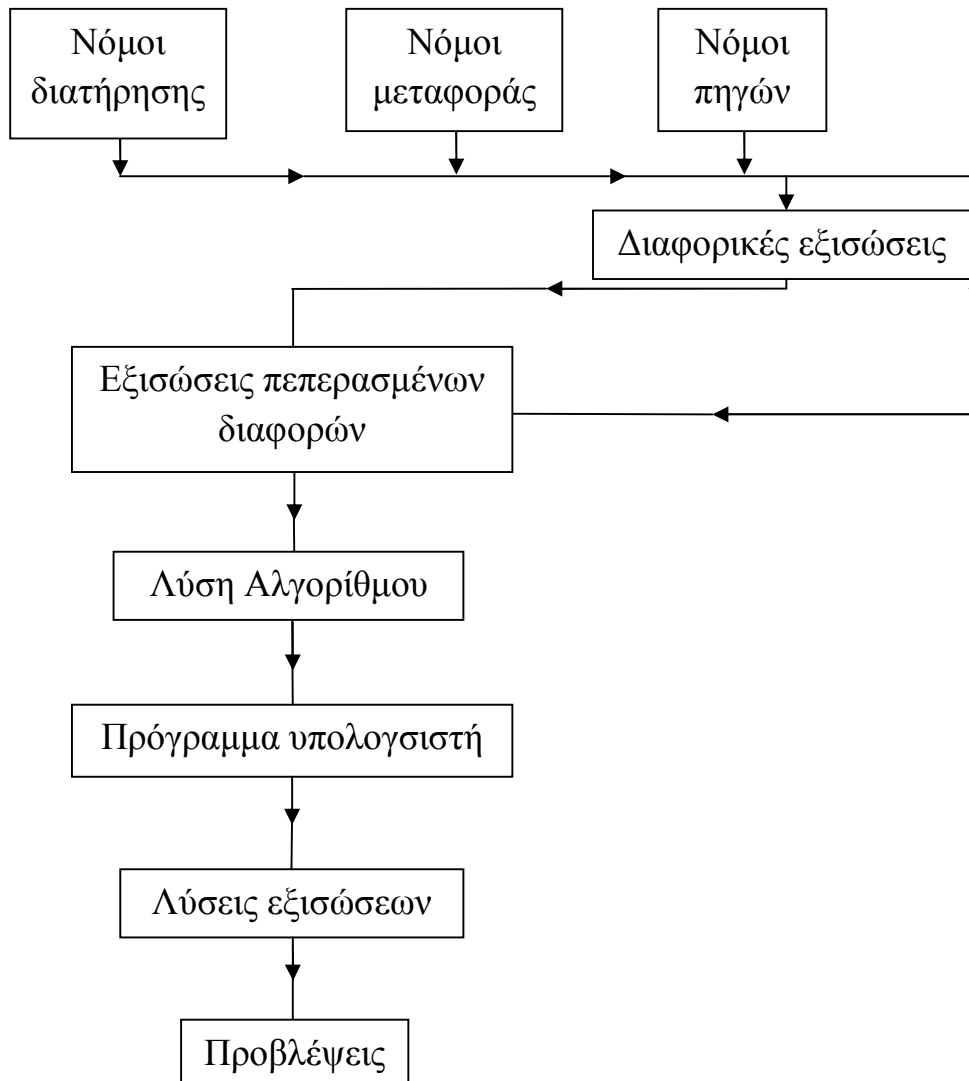
Παρά τα παραπάνω πλεονεκτήματα του θεωρητικού υπολογισμού, είναι χρήσιμο να συνεκτιμώνται βέβαια και τα μειονεκτήματα και οι περιορισμοί του θεωρητικού υπολογισμού.

Ο υπολογισμός με τη χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή επιλύει τις συνέπειες ενός μαθηματικού μοντέλου. Η πειραματική διερεύνηση, από την άλλη, παρατηρεί την πραγματικότητα. Τα όρια ισχύος ενός μαθηματικού μοντέλου μειώνουν τη χρησιμότητα του θεωρητικού υπολογισμού. Το τελικό αποτέλεσμα που εξάγουμε από τον θεωρητικό υπολογισμό εξαρτάται από το μαθηματικό μοντέλο καθώς και από τη χρησιμοποιούμενη αριθμητική μέθοδο.

Μια σωστή πρόβλεψη θα πρέπει να είναι ένας συνετός συνδυασμός θεωρητικού υπολογισμού και πειράματος. Το ποσοστό συμμετοχής των δύο παραγόντων εξαρτάται από τη φύση του προβλήματος που έχουμε για επίλυση, από τους στόχους της πρόβλεψης και από τους οικονομικούς και άλλους περιορισμούς της κατάστασης.

1.1.6. Μαθηματική δομή των υπολογιστικών κωδίκων

Η δομή της μαθηματική διατύπωσης των υπολογιστικών κωδίκων θα μπορούσε να δειχθεί συνοπτικά με το παρακάτω διάγραμμα ροής που ακολουθεί:



Σχήμα 1.1.1: Διάγραμμα Ροής

Όπως παρατηρούμε στο διάγραμμα ροής, οι υπολογιστικοί κώδικες βασίζονται στους νόμους της φύσης, της διατήρησης (ορμής, μάζας και ενέργειας) της μεταφοράς και των πηγών. Οι νόμοι μετασχηματίζονται ευθέως σε μορφή πεπερασμένων διαφορών, κάνοντας χρήση της ανάλυσης της μεθόδου του όγκου-ελέγχου. Τείνοντας τον αριθμό των κόμβων του πλέγματος στο άπειρο, η προσέγγιση των σχηματιζόμενων εξισώσεων πεπερασμένων διαφορών μπορεί να αντικαταστήσει αυτή των διαφορικών εξισώσεων.

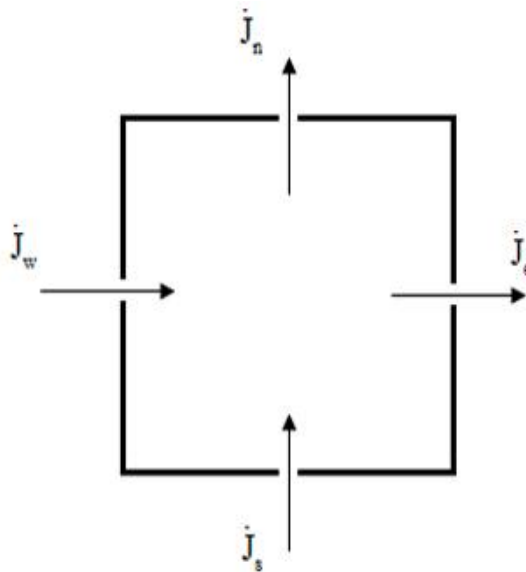
Με σκοπό να είναι εφικτή η πρόβλεψη μέσω του ηλεκτρονικού υπολογιστή και να επιλυθούν οι εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών, είναι αναγκαία η δημιουργία ενός αλγορίθμου επίλυσης, ο οποίος να υποστηρίζεται από το πρόγραμμα του υπολογιστή, να εκμεταλλεύεται την ταχύτητά του και να αποδίδει τη φυσική πραγματικότητα.

1.1.7. Διέπουσες εξισώσεις της ρευστοδυναμικής

Προκειμένου να γίνει κατανοητό πως μπορούν να συνδυασθούν οι νόμοι της φύσης σε μια διαφορική εξίσωση, δείχνεται, για παράδειγμα, η μεταφορά της ορμής. Σύμφωνα με το δεύτερο νόμο του Newton για την περίπτωση της μόνιμης ροής, το άθροισμα της παροχής ορμής (\mathfrak{J}_i) στη διεύθυνση i θα πρέπει να ισούται με την καθαρή δύναμη στην ίδια κατεύθυνση (S_i).

Ή μαθηματικώς:

$$\mathfrak{J}_{i,w} - \mathfrak{J}_{i,e} + \mathfrak{J}_{i,s} - \mathfrak{J}_{i,n} = -S_i \quad (1.1.1)$$



Σχήμα 1.1.2: Ροές \mathfrak{J}

Η μαθηματική έκφραση περιέχει ροές \mathfrak{J} , που δείχνουν τη μεταφορά της ορμής και με μεταφορά και διάχυση (επενέργεια ιξώδους). Έχουν σαν αιτία τους νόμους μεταφοράς (νόμος ιξώδους του Newton). Με βάση τον νόμο μεταφοράς, σ' ένα νευτωνικό τυρβώδες ρευστό, η συνολική ροή είναι ίση με:

$$\mathfrak{J}_x = \rho U_i U_i - \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i} \right) + \text{επιπρόσθετοι όροι} \quad (1.1.2)$$

Όπου μ_t , το τυρβώδες ιξώδες.

Στη σχέση (1.1.2) υπάρχουν όπως παρατηρούμε κάποιοι επιπρόσθετοι όροι (ή αλλιώς πηγές) που συνεισφέρουν στη μεταφορά της ορμής, οι οποίοι προκύπτουν από τους «νόμους της πηγής» και περιγράφουν τη συνεισφορά που οφείλεται στην πίεση, στις ανωστικές δυνάμεις κλπ.

Νόμος πηγών:

$$S_i = \frac{\partial p}{\partial x_i} + S'_i \quad (1.1.3)$$

Αν αντικαταστήσουμε στη μαθηματική έκφραση του δευτέρου νόμου του Newton τους νόμους μεταφοράς και πηγών, λαμβάνουμε τη διαφορική εξίσωση για την ορμή στη i -διεύθυνση:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_i U_j) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu_t \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_t \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial p}{\partial x_i} + S'_i \quad (1.1.4)$$

Οι διαφορικές εξισώσεις για την ορμή στις άλλες διευθύνσεις, όπως και για άλλες διατηρούμενες ιδιότητες, λαμβάνονται με παρόμοιο τρόπο.

Το σημαντικό των εξισώσεων μεταφοράς στη διατήρηση των διαφόρων ιδιοτήτων (εκτός της μάζας), είναι το ότι μπορούν να εκφραστούν με έναν γενικό τύπο, ο οποίος για δισδιάστατα προβλήματα σταθερής κατάστασης (μόνιμης ροής), για κυλινδρικές συντεταγμένες είναι ο εξής:

$$\frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho r U_i \Phi) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho r U_j \Phi) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(r \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) \right] - S_\Phi = 0 \quad (1.1.5)$$

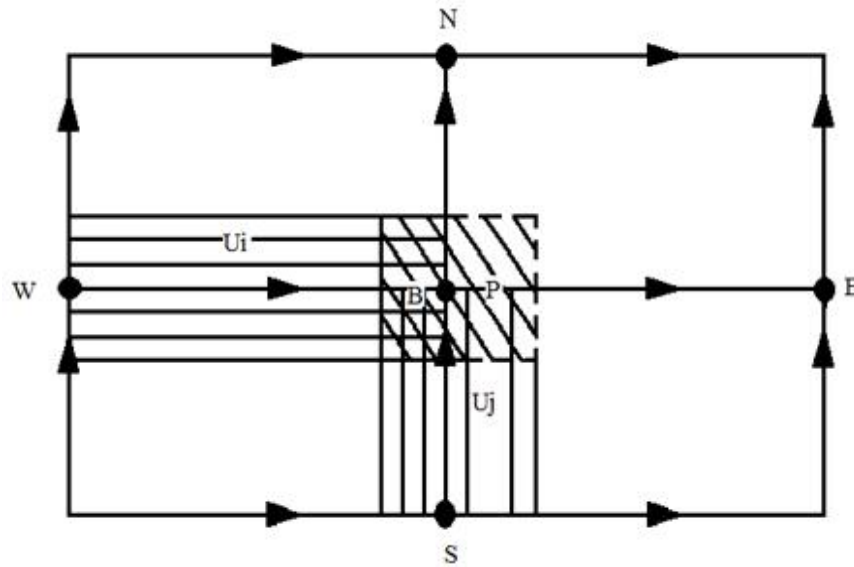
Όπου j , ο δείκτης των κάθετων διευθύνσεων.

Το $\Phi = U_i, U_j, k, \varepsilon, T, m_j$, κ.τ.λ., το $\Gamma = \mu_t, \Gamma_k, \Gamma_\varepsilon, \Gamma_\tau$, κ.τ.λ. Το S_Φ εκπροσωπεί τις πηγές σε σχέση με τη μεταφορά της μεταβλητής Φ . Στην περίπτωση που έχουμε $r=1$ και $\partial r = \partial x_j$ πηγαίνουμε σε δισδιάστατη επίπεδη ροή.

1.1.8 Εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών

Για την παραγωγή των εξισώσεων πεπερασμένων διαφορών από τις διαφορικές εξισώσεις πρέπει να δημιουργηθεί το κατάλληλο πλέγμα και οι θέσεις αποθήκευσης των μεταβλητών και σε αυτό το σημείο θα αναφερθούμε στον τομέα αυτό.

Το χρησιμοποιούμενο πλέγμα στο επίπεδο $r-x_i$ είναι κανονικό ορθογώνιο, με τυχαίες αποστάσεις των κόμβων $\Delta x_{PW} \neq \Delta x_{EP}$ και δείχνεται με τις συνεχείς γραμμές:



Σχήμα 1.1.3: Πλέγμα



Σχήμα 1.1.4: Κυψελίδες

Τυπικά συμπλέγματα U_i, U_j και βαθμωτών κυψελίδων (ή όγκου ελέγχου) δείχνονται με τις διακεκομμένες γραμμές. Κάθε μία κυψελίδα περιβάλλει το σημείο τοποθέτησης της σχετικής μεταβλητής. Οι μεταβλητές αποθηκεύονται σε διαφορετικές θέσεις του πλέγματος. Πιο συγκεκριμένα, η πίεση και τα βαθμωτά αποθηκεύονται στους κόμβους του πλέγματος, ενώ από την άλλη οι ταχύτητες αποθηκεύονται στα όρια των κυψελίδων των βαθμωτών. Αυτό το σύστημα αποθήκευσης, είναι γνωστό ως μετατοπισμένο “staggered” πλέγμα και έχει το πλεονέκτημα ότι οι μεταβλητές U_i, U_j, P αποθηκεύονται, έτσι ώστε οι κλίσεις πίεσης που οδηγούν τις ταχύτητες U_i, U_j να είναι εύκολο να εκτιμηθούν και επιπλέον οι ταχύτητες αποθηκεύονται εκεί που χρειάζεται για τον υπολογισμό της μεταφερόμενης ροής. Στις (•) θέσεις αποθηκεύονται οι βαθμωτές μεταβλητές P, k, ϵ, T, m_j , στις (\rightarrow) θέσεις η U_i ταχύτητα και στις (\uparrow) θέσεις η U_j ταχύτητα.

Η προσέγγιση με τη μέθοδο του όγκου ελέγχου (ή αλλιώς κυψελίδας) είναι παρόμοια με την ολοκληρωτική μέθοδο, αλλά έχει σχέση περισσότερο με τη φυσική. Η τιμή κάποιας ιδιότητας Φ που αναφέρεται στο σημείο του κόμβου

αναφέρεται στη μέση τιμή του όγκου ελέγχου. Ο νόμος διατήρησης για τη μεταφορά κάποιας εκτατικής ιδιότητας Φ (μάζας, ορμής, ενέργειας κλπ), μπορεί να οριστεί: [(Η μεταβολή του Φ στη κυψελίδα) = (με τον καθαρό ρυθμό εισαγωγής του Φ στην κυψελίδα με μεταφορά) + (τον καθαρό ρυθμό εισαγωγής του Φ στην κυψελίδα με διάχυση) + (το ρυθμό παραγωγής του Φ μέσα στην κυψελίδα)]. Η αντίστοιχα η μαθηματική έκφραση είναι:

$$\frac{\Delta(\rho\Phi)}{\Delta t} dU_j + \mathcal{Q}_w - \mathcal{Q}_e + \mathcal{Q}_s - \mathcal{Q}_n + \int_{U_j} S_\phi dU_j = 0 \quad (1.1.6)$$

Τα w, e, s, n είναι τα όρια των κυψελίδων. Τα Q_i η συνολική ροή λόγω μεταφοράς και διάχυσης, σαν άθροισμα γύρω από τα όρια των κυψελίδων, δίνοντας φυσική αντίληψη και τονίζοντας τη διατήρηση. Ο όρος S_ϕ παριστάνει την παραγωγή στη μονάδα του όγκου στην κυψελίδα και $\Phi = U_i, U_j, T, m_j, k, \epsilon$ ($\Phi=1$ για τη μάζα). $\Delta(\rho\Phi)/\Delta t=0$, για μόνιμη ροή (ή αλλιώς σταθερής κατάστασης).

1.1.9 Όρος πηγής

Η συνολική παραγωγή στον όγκο ελέγχου δεν μπορεί να εκφραστεί ακριβώς χωρίς να ξέρουμε την ακριβή έκφραση του όρου πηγής S_ϕ . Παρ' όλα αυτά, μια γραμμικοποιημένη μορφή είναι η εξής:

$$-\int_{U_j} S_\phi dU_j = b\Phi_p + c \quad (1.1.7)$$

Όπου b και c προκύπτουν από την ολοκλήρωση και τη γραμμικοποίηση του όρου πηγής S_ϕ και αποτελούν γενικώς συναρτήσεις του Φ . Αυτός ο τρόπος προσέγγισης δίνει πλεονεκτήματα και ευκολία στη χρήση στο υπολογιστικό πρόγραμμα, στις διάφορες ροϊκές καταστάσεις.

1.1.10 Ακρίβεια μεθόδου

1.1.10.1 Γενικά

Η ακρίβεια της διαδικασίας επίλυσης, γενικά, είναι συνάρτηση της σύγκλισης και του αριθμού των συνολικών κόμβων του πλέγματος. Για κάθε μία διαμόρφωση της ροής, αναζητείται λύση που να είναι ανεξάρτητη του πλέγματος, δηλαδή να μην παρατηρείται καμία μεταβολή της τελικής λύσης και

αυτό επιτυγχάνεται με αύξηση του αριθμού των γραμμών του πλέγματος (αυτός ο έλεγχος έγινε και στην περίπτωση που εξετάζουμε).

1.1.10.2 Κριτήριο σύγκλισης

Οι τιμές των πεδίων της ταχύτητας και πίεσης, αποτελούν το κριτήριο για τη σύγκλιση της επαναληπτικής διαδικασίας. Θα πρέπει να ισχύει το παρακάτω κριτήριο σύγκλισης:

$$\sum_i \sum_j |\Phi_{i,j}^n - \Phi_{i,j}^{n-1}| \leq R_{\max} \quad (1.1.8)$$

Όπου $n, n-1$, οι δείκτες της εκάστοτε επανάληψης και R_{\max} το μέγιστο υπόλοιπο κάτω από το οποίο θεωρούμε ότι η διαδικασία έχει συγκλίνει. Η μεταβλητή που καθορίζει την τιμή αυτή επιλέγεται από τον χρήστη και συνήθως έχει την τιμή $R_{\max} = 5 \times 10^{-4}$. Οι $\Phi_{i,j}$, είναι οι μεταβλητές των ταχυτήτων U_i, U_j και της πίεσης P .

1.1.11 Υποχαλάρωση

Για να επιτύχουμε σύγκλιση της επαναληπτικής διαδικασίας κατά την επίλυση της πίεσης είναι απαραίτητη η εφαρμογή των συντελεστών υποχαλάρωσης. Αν UR_{Φ} είναι ο συντελεστής υποχαλάρωσης της μεταβλητής Φ , τότε για τον υπολογισμό της μεταβλητής αυτής σε κάποιο τυχαίο βήμα της διαδικασίας, έστω n , κρατάμε ένα μέρος της τιμής της μεταβλητής από το προηγούμενο βήμα, έστω $n-1$, σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο:

$$\Phi^{*n} = (1 - UR_{\Phi})\Phi^{n-1} + UR_{\Phi}\Phi^n \quad (1.1.9)$$

Οι συντελεστές υποχαλάρωσης, χρησιμοποιούνται για τις μεταβλητές των ταχυτήτων, της πίεσης, της κινητικής ενέργειας της τύρβης κλπ. και καθορίζονται από τον χρήστη.

1.1.12 Αστάθεια-Ακρίβεια-Οικονομία

Σε πολλές σύνθετες ροές, ενδέχεται να παρουσιασθούν αριθμητικές αστάθειες και τότε απαιτούνται προσθετικές τεχνικές, προκειμένου να επιτευχθεί σύγκλιση. Στις απλές ροές υπάρχουν τρεις βασικές αιτίες που προκαλούν αστάθεια. Ο λανθασμένος καθορισμός του αρχικού πεδίου ή με

χρήση συντελεστών υποχαλάρωσης. Μια δεύτερη αιτία στην παραγωγή εστιών αστάθειας είναι η επιλογή ακατάλληλων συντελεστών υποχαλάρωσης. Για να το διορθώσουμε αυτό, επαναρυθμίζονται οι συντελεστές υποχαλάρωσης. Ένας τρίτος λόγος είναι η ελλιπής επίλυση των εξισώσεων πεπερασμένων διαφορών κατά τη διάρκεια της επανάληψης.

Η ακρίβεια εξαρτάται πρώτον από το βαθμό στον οποίο η λύση ικανοποιεί τις εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών. Ο βαθμός αυτός αντικατοπτρίζεται από την τάση των υπολειπόμενων πηγών. Δεύτερον, από το βαθμό στον οποίο οι εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών ικανοποιούν τις μερικές διαφορικές εξισώσεις. Γενικά χρησιμοποιούνται μικρότερα μεγέθη πλεγμάτων προς επίτευξη λύσης ανεξάρτητης του πλέγματος. Τρίτον και οι εφαρμοζόμενες συνθήκες στα όρια και οι θέσεις των ορίων ενδέχεται να επηρεάζουν την ακρίβεια της λύσης. Βελτίωση μπορεί να επιτευχθεί με ρύθμιση των συνθηκών και των θέσεων εφαρμογής. Και τέταρτον, μια πλήρης συγκεκριμένη, ανεξάρτητη πλέγματος λύση, βασιζόμενη σε ικανοποιητικές οριακές συνθήκες και θέσεις εφαρμογής, εξαρτάται από την επάρκεια του τυρβώδους μοντέλου στο πόσο καλά οι προβλέψεις αντανακλούν την πραγματικότητα σε σύγκριση με τις πειραματικές μετρήσεις.

Πράγματι, σε πολύπλοκες ροές η ανεπάρκεια του τυρβώδους μοντέλου ενδέχεται να αποτελεί αιτία διαφόρων ασταθειών. Είναι σημαντικό να διακρίνουμε μεταξύ υπολογιστικών λαθών και αστάθειας (που μπορούν να εξαλειφθούν) καθώς και εκείνων των σφαλμάτων που οφείλονται στη φυσική μοντελοποίηση.

Οι απαιτήσεις οικονομίας, υπολογιστικού χρόνου και αποθήκευσης είναι δυνατόν να ελαχιστοποιηθούν με ορισμένες τεχνικές, πρώτον με ακριβή προσδιορισμό των αρχικών πεδίων (πχ. ξεκινώντας από σωστό προηγούμενο υπολογισμό, ο υπολογιστικός χρόνος μειώνεται σημαντικά), δεύτερον με βέλτιστη διεύθυνση του πλέγματος, όπως συγκέντρωση κόμβων πλέγματος σε περιοχές με απότομες κλίσεις και μείωσης σε περιοχές, όπου οι κλίσεις είναι επίσης χρήσιμες για την οικονομία του πλέγματος, τρίτον με εύρεση μέσω πειράματος και δοκιμής των συντελεστών υποχαλάρωσης, βελτιώνοντας τον παράγοντα σύγκλισης και τέταρτον με βάση πιο ρεαλιστικό κριτήριο σύγκλισης.

1.2 ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΠΑΚΕΤΟ FLUENT

1.2.1 Εισαγωγή

Το FLUENT είναι ένα υπολογιστικό πρόγραμμα για τη μοντελοποίηση ροών, φαινομένων μεταφοράς θερμότητας καθώς και χημικών αντιδράσεων. Το FLUENT μας δίνει τη δυνατότητα να προσομοιώσουμε στον υπολογιστή τα

πρακτικά σχεδιαστικά μας προβλήματα για να τα αναλύσουμε και να τα λύσουμε. Το πακέτο αυτό, ενσωματώνει σύγχρονες τεχνικές μοντελοποίησης και ένα ευρύ πεδίο φυσικών μοντέλων για την προσομοίωση πολυάριθμων τύπων ροικών προβλημάτων.

Το FLUENT μπορεί να μοντελοποιήσει φυσικά φαινόμενα όπως για παράδειγμα:

- 2D/3D γεωμετρίες σε καρτεσιανό, κυλινδρικό, ή άλλο σύστημα
- σταθερή ή μεταβατική κατάσταση
- ασυμπίεστη ή συμπιεστή ροή
- στρωτή ή τυρβώδη ροή
- μεταφορά θερμότητας με αγωγή, ακτινοβολία ή συναγωγή
- ανάμιξη χημικών ουσιών
- αντίδραση χημικών ουσιών
- στρωτή ροή μη νευτωνικών ρευστών
- ροή μέσα από πορώδη υλικά

Η σωστή μοντελοποίηση είναι μια διαδικασία δύσκολη και χρειάζεται ιδιαίτερη προσοχή ώστε εξαιτίας της απλοποίησης να μην παραλείψουμε βασικές παραμέτρους του προβλήματος. Είναι απαραίτητη, δηλαδή, ιδιαίτερα η κριτική ικανότητα του χρήστη και η οργάνωση του προβλήματος σε ενότητες.

Η μοντελοποίηση στο FLUENT χωρίζεται στα παρακάτω βήματα:

1. Καθορισμός των στόχων της μοντελοποίησης, ανάλογα με τα αποτελέσματα και την ακρίβεια που απαιτείται
2. Επιλογή του υπολογιστικού μοντέλου απομονώνοντας το κομμάτι εκείνο του συστήματος που μας ενδιαφέρει και αποφασίζοντας αν θα είναι δισδιάστατο ή τρισδιάστατο καθώς και τις οριακές συνθήκες του
3. Σχεδιασμός του πλέγματος ανάλογα με την ακρίβεια που απαιτείται σε κάθε περιοχή και το σύστημα συντεταγμένων που μας εξυπηρετεί
4. Επιλογή του φυσικού μοντέλου ανάλογα με το αν η ροή είναι τυρβώδης, σταθερή, ασυμπίεστη ή όχι κλπ.
5. Καθορισμός της διαδικασίας λύσης επιταχύνοντας τη σύγκλιση, καθώς μας ενδιαφέρει μικρός υπολογιστικός χρόνος και χρησιμοποίηση μικρής υπολογιστικής ισχύος

Το πλέγμα μπορεί να κατασκευαστεί στο ίδιο το FLUENT με τη βοήθεια του προγράμματος GAMBIT που διαθέτει ή να εισαχθεί σε αυτό από κάποιο άλλο σχεδιαστικό πρόγραμμα CAD. Τα σημεία που πρέπει να προσέξουμε κατά την πλεγματοποίηση θα αναφερθούν παρακάτω.

Για να καθοριστεί το μοντέλο πρέπει να προσδιοριστεί τι ροή έχουμε, αν είναι στρωτή ή τυρβώδης και ποιο μοντέλο της τύρβης θα χρησιμοποιηθεί. Επιπλέον θα πρέπει να προσδιορίσουμε αν παρουσιάζονται πολλές φάσεις και ποιο μοντέλο θα χρησιμοποιηθεί σ' αυτή την περίπτωση. Ακόμη, είναι απαραίτητο να επιλέξουμε αν θα λυθεί η εξίσωση της ενέργειας και αν θα ληφθεί υπ' όψιν η ακτινοβολία.

Ενώ επίσης, σημαντικό στοιχείο αποτελεί ο καθορισμός της συμπεριφοράς των χημικών στοιχείων του προβλήματος, το πώς δηλαδή μεταφέρονται, όπως για παράδειγμα αν αντιδρούν μεταξύ τους, ή σε περίπτωση καύσης, αν η καύση γίνεται με προαναμεμιγμένο ή όχι μίγμα. Τις ιδιότητες του μίγματος και τη σύστασή του μπορούμε να την καθορίσουμε εμείς ή να εισάγουμε ένα PDF αρχείο που να περιέχει ό,τι πληροφορίες χρειαζόμαστε, από τη σύστασή του μέχρι τα βήματα των αντιδράσεων καύσης, όπως κάναμε στην περίπτωση μας. Στην περίπτωση της καύσης υπάρχει η δυνατότητα αν θέλουμε να υπολογίσουμε τα παραγόμενα οξειδία του αζώτου. Τέλος, μπορούμε να λάβουμε υπόψιν μας τυχόν αλλαγή φάσης, τήξη ή στερεοποίηση.

1.2.2 Τυρβώδεις ροές

Αποτελεί γεγονός, ότι υπάρχει μεγάλη δυσκολία στη σαφή απόδοση ορισμού για τον όρο τύρβη στα πλαίσια της Μηχανικής των Ρευστών. Το βασικό χαρακτηριστικό της τυρβώδους ροής είναι οι άτακτες (ακανόνιστες) χρονικές διακυμάνσεις των μεγεθών ροής. Ακόμη και αν το υπό μελέτη πρόβλημα έχει μόνιμο χαρακτήρα, η τυρβώδης ροή είναι μη μόνιμη.

Οι διακυμάνσεις των ταχυτήτων στο τυρβώδες πεδίο ροής, δημιουργούν χωρικές δομές, που ονομάζονται μικροδίνες και χαρακτηρίζονται από συνεχή κατανομή του μεγέθους τους και το ευρύ φάσμα των συχνοτήτων τους. Αν κάποια ροή έχει συγκεκριμένες διακυμάνσεις κλίμακας μεγέθους και συχνότητας, τότε αυτή δε θεωρείται τυρβώδης. Για τύρβη και τυρβώδεις ροές θα αναφερθούμε αναλυτικότερα παρακάτω.

Οι εξισώσεις διατήρησης που χρησιμοποιούνται στο FLUENT για τις τυρβώδεις ροές προέρχονται από τις εξισώσεις της στρωτής ροής με τη διαφορά ότι χρησιμοποιούνται τιμές που προκύπτουν με τη διαδικασία υπολογισμού μέσης τιμής του Reynolds. Η διαδικασία αυτή για ένα βαθμωτό μέγεθος έστω ϕ φαίνεται παρακάτω. Η εξίσωση διατήρησης του ϕ είναι:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i\phi) = D_\phi + S_\phi \quad (1.2.1)$$

Όπου D_ϕ , είναι ο όρος διάχυσης και S_ϕ , είναι ο όρος πηγής.

Η τιμή ϕ στην τυρβώδη ροή αποτελείται από μια μέση τιμή και μια διακύμανση (ή αλλιώς μία τυρβώδη διαταραχή):

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (1.2.2)$$

όπου το $\bar{\phi}$, η χρονική μέση τιμή ορίζεται ως:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt \quad (1.2.3)$$

και Δt είναι μια κλίμακα χρόνου πολύ μεγαλύτερη από τη μέγιστη χρονική κλίμακα των διακυμάνσεων της τύρβης. Οι τυρβώδεις διακυμάνσεις θεωρούνται τυχαίες έτσι ώστε η μέση τιμή τους να είναι μηδέν.

Αντικαθιστώντας στη γενική εξίσωση της διατήρησης το αντίστοιχο ϕ και ολοκληρώνοντας σε αρκετά μεγάλη κλίμακα χρόνου προκύπτει, υποθέτοντας ότι οι διακυμάνσεις της πυκνότητας είναι αμελητέες:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho\phi}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho u_i \phi}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho u_i' \phi'}) + \overline{D_\phi} + \overline{S_\phi} \quad (1.2.4)$$

Οι όροι στην εξίσωση (1.2.4) μοιάζουν αρκετά με τους όρους της αντίστοιχης εξίσωσης της στρωτής ροής εκτός από το γεγονός ότι κάθε ποσότητα τώρα αποτελεί μέση χρονική τιμή και ότι εμφανίζεται ένα νέο μέγεθος που περιλαμβάνει τη συσχέτιση $\overline{u_i' \phi'}$. Φυσικά, αυτή η συσχέτιση πολλαπλασιαζόμενη με την πυκνότητα αντιπροσωπεύει τη μεταφορά ή διάχυση του ϕ εξαιτίας των τυρβωδών διακυμάνσεων.

Οι συσχετίσεις εμφανίζονται σαν $\overline{u_i' m_i'}$ και $\overline{u_i' h'}$ στη διατήρηση των ειδών και στην εξίσωση της ενθαλπίας αντίστοιχα και μοντελοποιούνται χρησιμοποιώντας την παρακάτω αναλογία:

$$\overline{\rho u_i' m_i'} = -\frac{\mu_t}{\sigma_m} \frac{\partial m_i'}{\partial x_i} \quad (1.2.5)$$

$$\overline{\rho u_i' h'} = -\frac{\mu_t}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (1.2.6)$$

Στις παραπάνω σχέσεις, το σ_m και σ_h είναι ο τυρβώδης αριθμός Schmidt και Prandtl αντίστοιχα. Οι τιμές τους καθορίζονται εμπειρικά και είναι κοντά στη μονάδα και οι αριθμοί αυτοί υπολογίζονται ως εξής:

$$\sigma_m = \frac{\nu}{D} \quad (1.2.7)$$

και

$$\sigma_h = \frac{\mu C_p}{k} \quad (1.2.8)$$

Όπου: v = κινηματικό ιξώδες
 D = συντελεστής διάχυσης
 μ = δυναμικό ιξώδες
 k = συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας
 C_p = ισοβαρής θερμοχωρητικότητα

Η εξίσωση της ενθαλπίας (h) στις τυρβώδεις ροές είναι η ακόλουθη:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j h_j J_j + \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + S_h & \end{aligned} \quad (1.2.9)$$

όπου T είναι η θερμοκρασία, τ_{ij} είναι ο τανυστής τάσεων ιξώδους, J_j είναι η ροή των ειδών j , και το k είναι η θερμική αγωγιμότητα μιγμάτων. S_h είναι ένας όρος πηγής που περιλαμβάνει τις πηγές ενθαλπίας λόγω χημικών αντιδράσεων, ακτινοβολίας, και ανταλλαγής θερμότητας με τη διακριτή δεύτερη φάση. Ο όρος $\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}$ πρέπει να ενεργοποιηθεί όταν οι τάσεις, λόγω ιξώδους, είναι μεγάλες και σε συμπιεστές ροές. Υποθέτουμε ότι η διάχυση λόγω πίεσης ή άλλων εξωτερικών δυνάμεων είναι αμελητέα.

Σημαντικός παράγοντας στις τυρβώδεις ροές είναι ο καθορισμός του μοντέλου που θα χρησιμοποιηθεί. Στις τυρβώδεις ροές η ταχύτητα u_i σε ένα σημείο αποτελεί άθροισμα μίας μέσης τιμής και μιας διακύμανσης:

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (1.2.10)$$

Αντικαθιστώντας αυτή την έκφραση στις στιγμιαίες εξισώσεις ορμής έχουμε την εξίσωση:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial x_i} \\ + \rho g_i + F_i + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\overline{\rho u_i' u_j'}) & \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

Η εξίσωση 1.2.11 έχει την ίδια μορφή με τη βασική εξίσωση ορμής, όμως τώρα η ταχύτητα αναφέρεται στη μέση τιμή. Το αποτέλεσμα της τύρβης ενσωματώνεται στους όρους $-\overline{u_i' u_j'}$ που ονομάζονται τάσεις Reynolds και αποτελούν επιπρόσθετους αγνώστους.

Για να κλείσουμε το ανοικτό σύστημα των εξισώσεων χρησιμοποιούνται διάφορα μοντέλα τύρβης όπως:

- το k-ε μοντέλο
- το RNG k-ε μοντέλο
- το μοντέλο τάσεων του Reynolds

Η διαδικασία της επιλογής μοντέλου τύρβης για κάποιο πρόβλημα γίνεται πολύ πιο εύκολη όταν είναι απολύτως κατανοητά τα σημαντικότερα χαρακτηριστικά της ροής.

1.2.3 Μοντέλα τύρβης

- ∅ Το *σάνταρ k-ε μοντέλο* χρησιμοποιείται πάνω από δυο δεκαετίες από τη μηχανική. Ανήκει στην κατηγορία των μοντέλων τύρβης «δύο εξισώσεων» που βασίζονται στην αντίληψη του ισοτροπικού τυρβώδους ιξώδους. Οικονομία και ικανοποιητική ακρίβεια για ένα ευρύ πεδίο τυρβωδών ροών εξηγεί γιατί προτιμάται. Είναι ημιεμπειρικό μοντέλο και οι εξισώσεις του μοντέλου μαζί με διάφορες σταθερές βασίζονται σε φαινομενολογικές παρατηρήσεις και στην εμπειρία.
- ∅ Το *Renormalization Group (RNG) k-ε μοντέλο* ανήκει στην οικογένεια των k-ε μοντέλων. Σ' αντίθεση με το σάνταρ χρησιμοποιείται για ροές χαμηλού αριθμού Reynolds. Οι εξισώσεις είναι παρόμοιες μ' αυτές του προηγούμενου μοντέλου, αλλά υπάρχουν κάποιες μεγάλες διαφορές. Το συγκεκριμένο μοντέλο έχει προκύψει χρησιμοποιώντας μια πιο ακριβή στατιστική τεχνική και οι σταθερές του μοντέλου προκύπτουν αναλυτικά. Άλλη σημαντική διαφορά είναι ότι αυτό το μοντέλο περιέχει στην ε-εξίσωσή του έναν πρόσθετο όρο, που βελτιώνει την ακρίβεια για γρήγορα φορτιζόμενες ροές. Ακόμη, συμπεριλαμβάνει την επιρροή του στροβιλισμού (swirl) στην τύρβη κάτι το οποίο βελτιώνει την ακρίβεια. Το μοντέλο προσφέρει αναλυτική φόρμουλα για τους τυρβώδεις αριθμούς Prantl, ενώ το k-ε μοντέλο χρησιμοποιεί σταθερές τιμές καθορισμένες από το χρήστη. Ωστόσο, το RNG k-ε μοντέλο απαιτεί μεγαλύτερο χρόνο επεξεργασίας από το σάνταρ μοντέλο λόγω των παραπάνω όρων και συναρτήσεων, καθώς και της μη γραμμικότητας. Επίσης είναι πιο ασταθές επειδή χρησιμοποιεί το σωστό επίπεδο τυρβώδους ιξώδους και είναι πιο ευαίσθητο στις φυσικές αστάθειες του συστήματος.

Ø Το μοντέλο τάσεων του Reynolds (RSM) αποφεύγοντας την υπόθεση του ισοτροπικού τυρβώδους ιξώδους, κλείνει τις τάσεις Reynolds λύνοντας τις εξισώσεις μεταφοράς (6 επιπρόσθετες εξισώσεις στις 3D, σε σύγκριση με τα k-ε μοντέλα). Τα αποτελέσματα της αεροδυναμικής καμπυλότητας, του στροβιλισμού και της περιστροφής ερμηνεύονται απευθείας μέσω των εξισώσεων μεταφοράς για τις τάσεις Reynolds. Συγκρίνοντας το μοντέλο αυτό με το μοντέλο RNG μπορούμε να διακρίνουμε την ευκολία που προσφέρει το εν λόγω μοντέλο σε ροές όπου η ανισότροπη συμπεριφορά της τύρβης παίζει πρωτεύοντα ρόλο στη μέση ροή. Στο μοντέλο RSM, ροές με ισχυρή στροβιλότητα ή δευτερεύοντα φαινόμενα υπολογίζονται στις εξισώσεις μεταφοράς του Reynolds.

1.2.3.1 Το μοντέλο k-ε

Στο μοντέλο αυτό οι τάσεις του Reynolds σχετίζονται με τη μέση ροή μέσω της υπόθεσης του Boussinesq:

$$\overline{\rho u_i' u_j'} = \rho \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \quad (1.2.12)$$

Το τυρβώδες ιξώδες υπολογίζεται από την κλίμακα της ταχύτητας $k^{1/2}$ και την κλίμακα του μήκους $\left(\frac{k^{3/2}}{\varepsilon}\right)$ που προβλέπονται σε κάθε σημείο της ροής μέσω της λύσης των συναρτήσεων μεταφοράς για τα k και ε: Όπου ε εκφράζει τη σκέδαση της κινητικής ενέργειας.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} + G_k + G_b - \rho \varepsilon \quad (1.2.13)$$

και

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} + C_{1c} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + (1 - C_{3c}) G_b) - C_{2c} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (1.2.14)$$

όπου το G_k είναι παράγωγο του k και δίνεται από:

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (1.2.15)$$

και το G_b είναι παράγωγο της άνωσης:

$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho \sigma_h} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (1.2.16)$$

όπου το σ_h είναι ο τυρβώδης αριθμός Prandtl. Το τυρβώδες ιξώδες συνδέεται τότε με το k και το ε μέσω της έκφρασης:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (1.2.17)$$

Οι συντελεστές C_{1c} , C_{2c} , C_μ , σ_k και σ_c είναι εμπειρικές σταθερές και έχουν τις παρακάτω τιμές:

$$C_{1c} = 1.44, C_{2c} = 1.92, C_\mu = 0.09, \sigma_k = 1.0, \sigma_c = 1.3$$

Ο όρος της άνωσης χρησιμοποιείται στις περιπτώσεις που έχουμε τυρβώδεις ροές και μη μηδενική δύναμη της βαρύτητας.

Το k - ε μοντέλο είναι ένα ημιεμπειρικό μοντέλο, όπως αναφέρεται παραπάνω το οποίο έχει αποδειχθεί ακριβές σε μηχανολογικές εφαρμογές σ' ένα ευρύ πεδίο τυρβωδών ροών συμπεριλαμβανομένων ροών με διατμητικά επίπεδα, όπως ροές jet, σε αγωγούς κτλ. Βέβαια, το μοντέλο υιοθετεί μια ισοτροπική περιγραφή της ροής και γι' αυτό το λόγο δεν είναι κατάλληλο για ροές στις οποίες η ανισότροπη συμπεριφορά της ροής παίζει πρωτεύοντα ρόλο.

Όσον αφορά την αντιμετώπιση κοντά σε τοίχο, αν χρησιμοποιηθεί η στάνταρ συνάρτηση, το FLUENT χρησιμοποιεί μια υπόθεση ισοροπίας για να βγάλει τις οριακές συνθήκες για τα k - ε . Σύμφωνα μ' αυτήν την υπόθεση, κοντά στον τοίχο η παραγωγή και η υποβάθμιση της τύρβης παίρνονται ίσες. Από το τελευταίο προκύπτει και η παρακάτω συνοριακή συνθήκη για το ρυθμό υποβάθμισης στα κελιά κοντά στον τοίχο:

$$\varepsilon_p = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}} k_p^{\frac{3}{2}}}{\kappa y_p} \quad (1.2.18)$$

όπου κ είναι η σταθερά von Karman.

Η τιμή του k κοντά στον τοίχο υπολογίζεται από τη συνάρτηση μεταφοράς για το k , στον όγκο ελέγχου πλησίον του τοίχου, με μηδενική κάθετη κλίση για το k στον τοίχο.

Μια από τις αδυναμίες των συμβατικών μοντέλων τυρβώδους ιξώδους είναι ότι η παράγωγή τυρβώδους κινητικής ενέργειας G_k στην εξίσωση,

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (1.2.19)$$

καταλήγει σε παραπάνω τυρβώδη ενέργεια σε περιοχές όπου η μέση ροή επιταχύνει ή επιβραδύνει πολύ. Μία περίπτωση τέτοιας περιοχής είναι το σημείο λίμνασης όπου η ροή διακόπτεται από κυλινδρικό σώμα. Το πρόβλημα υπάρχει λόγω του τρόπου που έχει μοντελοποιηθεί ο όρος παραγωγής της ενέργειας. Στο μοντέλο οι μη περιστροφικές τάσεις που εμφανίζονται παράγουν πάντα ενέργεια, ανεξάρτητα από το πρόσημο, ενώ στην πραγματικότητα μερικές φορές καταστρέφουν την τύρβη.

Έτσι, υπάρχουν και άλλοι τρόποι για να υπολογιστεί αυτός ο όρος. Όπως προτείνουν οι Menter και Kato & Launder μπορούμε να περιέχουμε ακόμη τον τανυστή μέσης στροβιλότητας, ο οποίος θα απομακρύνει αποτελεσματικά τη συνεισφορά των μη περιστροφικών τάσεων.

Ο Menter συγκεκριμένα πρότεινε:

$$G_k^M = \mu_t \Omega^2 \quad (1.2.20)$$

και οι Kato & Launder πρότειναν:

$$G_k^{KL} = \mu_t S \Omega \quad (1.2.21)$$

όπου

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (1.2.22)$$

και

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (1.2.23)$$

$$\Omega = \sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}} \quad (1.2.24)$$

και

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (1.2.25)$$

1.2.3.2 To Renormalization Group (RNG) k - ε μοντέλο

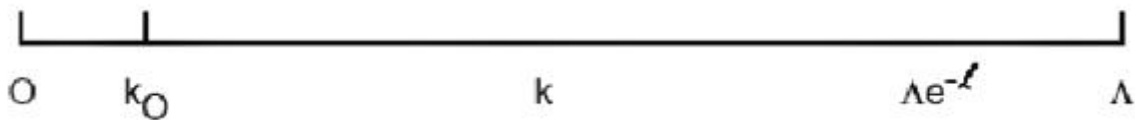
Το μοντέλο αυτό μας δίνει ακρίβεια και αποτελεσματικότητα στη μοντελοποίηση των τυρβωδών ροών. Στηρίζεται στο πλαίσιο της μοντελοποίησης της τύρβης με δύο εξισώσεις και έχει προκύψει από τις πρωτότυπες εξισώσεις που ισχύουν στα ρευστά χρησιμοποιώντας μαθηματικές τεχνικές, αποκαλούμενες Renormalization Group (RNG) methods. Βασισμένο σ' αυτό το μαθηματικό υπόβαθρο, αντίθετα με τις ημιεμπειρικές μεθόδους, το μοντέλο είναι πιο γενικό και θεμελιώδες και μας δίνει βελτιωμένες προβλέψεις για ροές πλησίον του τοίχου, για ροές που έχουν υψηλή αεροδυναμική καμπυλότητα και βαθμό παραμόρφωσης, χαμηλούς αριθμούς Reynolds και μεταβατικές ροές. Ένα όμως πρόβλημα που δεν μπορεί να αντιμετωπιστεί από το μοντέλο αυτό είναι η ροή σε περιστρεφόμενο πλαίσιο αναφοράς και επίσης επιδεικνύεται μια σχετική αδυναμία στις υψηλά στροβιλώδεις ροές.

Οι μέθοδοι αυτές αποτελούν ένα γενικό πλαίσιο για την κατασκευή μοντέλου στο οποίο τα πολύπλοκα δυναμικά φυσικά προβλήματα περιγράφονται με όρους «χονδροκομμένων» εξισώσεων κίνησης της μακροσκοπικής κλίμακας χρόνου και μήκους. Η βασική ιδέα είναι ότι η μέθοδος εφαρμόζεται σε φαινόμενα αδιάφορα για την κλίμακα που δεν τους έχει εξωτερικά επιβληθεί χαρακτηριστική κλίμακα μήκους και χρόνου. Για την τύρβη αυτό σημαίνει ότι η μέθοδος μπορεί να περιγράψει τις μικρές κλίμακες, που είναι στατιστικά ανεξάρτητες από τις εξωτερικές αρχικές συνθήκες και δυνάμεις που τις δημιουργούν. Μ' άλλα λόγια, η μέθοδος δίνει μια θεωρία ισορροπίας της τύρβης του Kolmogorov, που περιλαμβάνει το αποκαλούμενο αδρανειακό πεδίο των μικρών στροβίλων, των οποίων το φάσμα ενέργειας ακολουθεί τον περίφημο νόμο του Kolmogorov $E(k) = k^{-5/3}$. Το σημαντικό είναι ότι όταν οι στροβίλοι του αδρανειακού πεδίου υπολογιστούν ποσοτικά, τότε μπορούμε να λάβουμε εξισώσεις κίνησης για άλλες σχετικές μεταβλητές της τύρβης, όπως η μέση ταχύτητα, η ταχύτητα RMS κτλ.

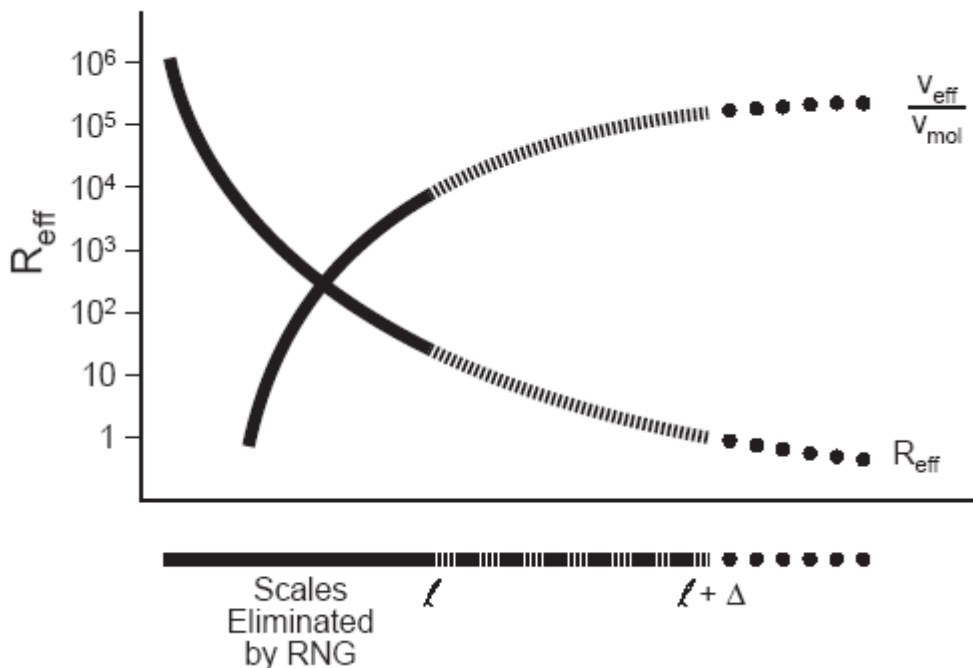
Οι τυρβώδεις ροές έχουν στροβίλους που ποικίλουν σε μέγεθος, ξεκινώντας από τους στροβίλους της μεγάλης κλίμακας L που περιέχουν ενέργεια, μέχρι εκείνους που έχουν μέγεθος $L/Re^{3/4}$, όπου $Re = u_{rms}L/\nu$ είναι ο αριθμός Reynolds. Ακόμα μικρότεροι στροβίλοι υπάρχουν, αλλά έχουν πολύ χαμηλή ενέργεια λόγω της υποβάθμισης από το ιξώδες. Γι' αυτό το λόγο ακριβής λύση των τρισδιάστατων εξισώσεων Navier-Stokes για τυρβώδη ροή απαιτεί αποθήκευση της τάξης του $O(Re^{9/4})$ και υπολογιστικό έργο της τάξης του $O(Re^3)$. Αν ο Re είναι μεγάλος, οι υπολογιστικές απαιτήσεις είναι τεράστιες. Η RNG μέθοδος μειώνει αυτές τις απαιτήσεις εξαλείφοντας τους

στροβίλους του αδρανειακού πεδίου από τις εξισώσεις κίνησης, παρέχοντας εξισώσεις για μέσες ροϊκές ποσότητες στη μεγάλη κλίμακα της τύρβης.

Η απαλοιφή αυτή γίνεται με τις διαδικασίες που περιγράφονται από τα σχήματα 1.2.1 και 1.2.2. Το πρώτο σχήμα δείχνει τις κλίμακες της ενεργούς διέγερσης στην τύρβη, κυμαινόμενες από το χαμηλό κυματαριθμό $k_0 = 2\pi/L$ (μεγάλες κλίμακες) στην ιξώδη αποκοπή μεγάλου κυματαριθμού Λ (μικρότεροι στρόβιλοι που περιέχουν ενέργεια). Η ιδέα του μοντέλου είναι να κόψει ένα στενό πεδίο μορφών κοντά στο Λ αναπαριστώντας τις μορφές αυτές με άλλες μικρότερες, στο διάστημα $k_0 < k < \Lambda e^{-1}$ ($1 \ll 1$). Όταν απομακρυνθεί αυτή η ζώνη μορφών, οι εξισώσεις που προκύπτουν αποτελούν ένα τροποποιημένο σύστημα εξισώσεων Navier-Stokes στο οποίο υπάρχουν ένα τροποποιημένο ιξώδες και μια τροποποιημένη δύναμη. Όταν απομακρυνθεί η πρώτη ζώνη μορφών, η αφαίρεση βαθμών ελευθερίας επαναλαμβάνεται διώχνοντας όλο και περισσότερες μορφές και ο υπολογισμός γίνεται εφικτός. Στο σχήμα 1.2.2, παριστάνεται το αποτέλεσμα της απομάκρυνσης των μορφών. Καθώς απομακρύνονται οι στρόβιλοι μικρής κλίμακας ο ενεργός αριθμός Re μειώνεται και το ιξώδες αυξάνεται.



Σχήμα 1.2.1: Κλίμακες της ενεργούς διέγερσης στην τύρβη



Σχήμα 1.2.2: Ο ενεργός αριθμός Re μειώνεται και το ιξώδες αυξάνεται με την απομάκρυνση των στροβίλων μικρής κλίμακας

Μέσω της παραπάνω διαδικασίας, η RNG θεωρία αναπτύσσει μια εξίσωση για τη μεταβολή του ενεργού ιξώδους με τον αριθμό Reynolds, η οποία είναι της μορφής:

$$\frac{d\mu}{dl} = \frac{A\epsilon l^3}{\mu(l)^2} \quad (1.2.26)$$

όπου A είναι μια σταθερά που προκύπτει από τη θεωρία.

Ολοκληρώνοντας την παραπάνω εξίσωση για το μήκος της κλίμακας του στροβίλου l , σημειώνοντας ότι $\mu = \mu_{mol}$ όταν $l = l_d$ (όπου l_d είναι η κλίμακα υποβάθμισης του Kolmogorov $L/Re^{3/4}$) έχουμε:

$$\mu(l) = \mu_{mol} \left[1 + \frac{3A\epsilon}{4\mu_{mol}^3} (l^4 - l_d^4) \right]^{1/3} \quad (1.2.27)$$

Όπου $l \geq l_d$.

Η εξίσωση αυτή δίνει μια σχέση παρεμβολής για το $\mu(l)$ μεταξύ του μοριακού ιξώδους μ_{mol} της κλίμακας υποβάθμισης και του ορίου υψηλού αριθμού Reynolds του $L \gg l_d$. Σ' αυτό το όριο η εξίσωση δίνει

$$\mu \approx \mu_t = (0.094L)^2 (\nabla \bar{u}) \quad (1.2.28)$$

όπου το μ_t είναι το τυρβώδες ιξώδες ($\mu_{eff} = \mu_{mol}$). Αυτό το αποτέλεσμα είναι κοντά στη θεωρία του Prandtl για το μήκος μίξης. Παρατηρώντας ότι η συνολική κινητική ενέργεια που περιέχεται στους στροβίλους του αδρανειακού πεδίου κλίμακας μικρότερης από L είναι $k = 0.71\epsilon^{2/3} L^{2/3}$, η εξίσωση 1.2.26 γίνεται:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (1.2.29)$$

με $C_\mu = 0.0845$. Αυτό το αποτέλεσμα είναι πολύ κοντά στην έκφραση του στάνταρ k - ϵ μοντέλου για το ενεργό ιξώδες στην οποία το C_μ είναι εμπειρικά καθορισμένο περίπου 0.09.

Το μοντέλο RNG του FLUENT, ωστόσο, επεκτείνει την πρόβλεψη του πραγματικού ιξώδους πέρα από το όριο του υψηλού αριθμού Reynolds υπολογίζοντας ξανά το μ_{eff} χρησιμοποιώντας την εξίσωση 1.2.27 με k και ϵ . Το αποτέλεσμα είναι μια διαφορική σχέση μεταξύ του μ_{eff} και του $k/\sqrt{\epsilon}$. Μια απλοποιημένη μορφή της σχέσης δίνεται παρακάτω:

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_{\text{mol}} \left[1 + \sqrt{\frac{C_{\mu}}{\mu_{\text{mol}}}} \frac{k}{\sqrt{\varepsilon}} \right]^2 \quad (1.2.30)$$

Το μοντέλο χρησιμοποιεί τη διαφορική μορφή της εξίσωσης 1.2.30 στον υπολογισμό του πραγματικού ιξώδους, δίνοντας μια ακριβή περιγραφή του πώς η τυρβώδης μεταφορά επηρεάζεται από την κλίμακα του στροβίλου και τον αριθμό Reynolds, επιτρέποντας την επέκταση του μοντέλου και στους χαμηλούς αριθμούς Reynolds και στις ροές κοντά στον τοίχο.

Στις περιπτώσεις ροών με στροβιλότητα το πραγματικό ιξώδες εξαρτάται από την τοπική στροβιλότητα κι αυτή η παραδοχή παρέχει πιο ακριβή πρόβλεψη της δίνης σε σύγκριση με το στάνταρ k-ε μοντέλο.

Οι εξισώσεις ορμής έχουν την παρακάτω μορφή:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (1.2.31)$$

Το FLUENT, από μόνο του, υπολογίζει το πραγματικό ιξώδες χρησιμοποιώντας την εξίσωση 1.2.29. Ωστόσο, όταν έχουμε χαμηλούς αριθμούς Reynolds χρησιμοποιείται η 1.2.30.

Οι εξισώσεις μεταφοράς για τα k και ε είναι

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_k \mu_{\text{eff}} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \mu_t S^2 - \rho \varepsilon \quad (1.2.32)$$

και

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_{\varepsilon} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t S^2 - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R \quad (1.2.33)$$

όπου α_k και α_{ε} είναι οι αντίστροφοι αριθμοί Prandtl για k και ε αντίστοιχα. Υπολογίζονται από την παρακάτω φόρμουλα:

$$\left[\frac{\alpha - 1.3929}{\alpha_0 - 1.3929} \right]^{0.6321} \left[\frac{\alpha - 2.3929}{\alpha_0 - 2.3929} \right]^{0.3679} = \frac{\mu_{\text{mol}}}{\mu_{\text{eff}}} \quad (1.2.34)$$

όπου $\alpha_0 = 1.0$. Στο όριο υψηλού αριθμού Reynolds ($\mu_{\text{mol}} / \mu_{\text{eff}} \ll 1$), $\alpha_k = \alpha_{\varepsilon} \approx 1.393$.

Το S είναι ο τανυστής του μέσου ρυθμού παραμόρφωσης, S_{ij} , που ορίζεται:

$$S \equiv \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (1.2.35)$$

το R στην εξίσωση ε δίνεται:

$$R = \frac{\frac{C_{\mu}\rho n^3(1-n)}{n_0}}{1+\beta n^3} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (1.2.36)$$

όπου $n \equiv Sk / \varepsilon$, $n_0 \approx 4.38$, $\beta = 0.012$. Οι σταθερές $C_{1\varepsilon}$ και $C_{2\varepsilon}$ έχουν τιμές:

$$C_{1\varepsilon} = 1.42, C_{2\varepsilon} = 1.68$$

Το μοντέλο μοιάζει πολύ με το k-ε αλλά διαφέρει στις σταθερές. Η κύρια διαφορά είναι στην εξίσωση ε στην οποία το RNG μοντέλο έχει έναν όρο που το k-ε δεν τον έχει. Ο όρος R είναι συνάρτηση του S και των k, ε.

Η επίδραση του όρου R μπορεί να γίνει αντιληπτή αν ξαναγράψουμε την εξίσωση 1.2.31. Χρησιμοποιώντας την εξίσωση 1.2.36, η εξίσωση 1.2.33 γράφεται ως:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_{\varepsilon} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t S^2 - C_{2\varepsilon}^* \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (1.2.37)$$

όπου το $C_{2\varepsilon}^*$ δίνεται από:

$$C_{2\varepsilon}^* \equiv C_{2\varepsilon} + \frac{\frac{C_{\mu}\rho n^3(1-n)}{n_0}}{1+\beta n^3} \quad (1.2.38)$$

Σε περιοχές που $n < n_0 = 4.38$, ο όρος R έχει θετική συνεισφορά και $C_{2\varepsilon}^*$ γίνεται μεγαλύτερος από 1.68. Σαν αποτέλεσμα, για ασθενείς με μέτριες παραμορφώσιμες ροές, το RNG μοντέλο δίνει αποτελέσματα συγκρίσιμα με το k-ε μοντέλο. Σε περιοχές υψηλού ρυθμού παραμόρφωσης ($n > n_0 = 4.38$) ο όρος R έχει αρνητική συνεισφορά κάνοντας την τιμή του $C_{2\varepsilon}^*$ μικρότερη από αυτή του $C_{2\varepsilon}$. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να έχουμε μικρότερη τιμή του πραγματικού τυρβώδους ιξώδους.

Για τους παραπάνω λόγους το RNG μοντέλο είναι ευαίσθητο στο μέσο ρυθμό παραμόρφωσης και ανταποκρίνεται στην επίδραση της γρήγορης παραμόρφωσης και της αεροδυναμικής καμπυλότητας. Ο όρος R είναι μείζονος σημασίας καθώς βελτιώνει τα αποτελέσματα στις πολύπλοκες ροές.

Η επίδραση της άνωσης στην τύρβη μπορεί να υπολογιστεί με παρόμοιο τρόπο όπως στο k-ε μοντέλο, προσθέτοντας τους σχετικούς με την άνωση όρους (οι όροι που περιλαμβάνουν το G_b στις εξισώσεις 1.2.13 και 1.2.14 στις αντίστοιχες RNG εξισώσεις).

Η εξίσωση 1.2.14 αντικαθίσταται εδώ από:

$$G_b = -g_t \frac{\epsilon \mu_t}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (1.2.39)$$

όπου α είναι ο αντίστροφος αριθμός Prandtl για την ενέργεια.

Η τύρβη γενικά επηρεάζεται από την περιστροφή και το στροβιλισμό στη μέση ροή. Στο μοντέλο αυτό η επίδραση των παραπάνω λαμβάνεται υπόψιν ευαισθητοποιώντας τη σταθερά C_μ στο στροβιλισμό ως φαίνεται:

$$C_\mu = C_{\mu 0} f \left(\alpha_s, \Omega, \frac{k}{\epsilon} \right) \quad (1.2.40)$$

όπου $C_{\mu 0} = 0.0845$, Ω είναι ένας χαρακτηριστικός αριθμός και α_s είναι μια σταθερά που παίρνει διάφορες τιμές ανάλογα με το πόσο στροβιλώδης είναι η ροή. Για ελαφρώς στροβιλώδεις ροές το α_s το θέτουμε 0.05 και δεν αλλάζει.

Το μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για χαμηλούς αριθμούς Re , προτιμάται όταν συνυπάρχουν στρωτή και τυρβώδης ροή σ' ένα τομέα. Αυτό είναι δυνατόν εξαιτίας της διαφορικής φόρμουλας που δίνει το ιξώδες και του ότι παρέχεται μια αναλυτική φόρμουλα για τον υπολογισμό των αριθμών Prandtl, της τύρβης, τους αριθμούς k , ϵ και τη θερμοκρασία.

1.2.4 Αντιδρώντα συστήματα

Στο FLUENT μπορεί να μοντελοποιηθούν αντιδρώντα συστήματα χρησιμοποιώντας δύο προσεγγίσεις:

1. *Generalized Finite Rate Formulation*: Μοντέλο πεπερασμένου ρυθμού αντίδρασης:

Αυτή η προσέγγιση είναι βασισμένη στη λύση των εξισώσεων μεταφοράς ειδών για τα αντιδραστήρια και τις συγκεντρώσεις προϊόντων, με χημικό μηχανισμό αντίδρασης που επιλέγεται από το χρήστη. Τα ποσοστά αντίδρασης που εμφανίζονται ως όροι πηγής στις εξισώσεις μεταφοράς ειδών υπολογίζονται από τις εκφράσεις ποσοστού Arrhenius ή με τη χρησιμοποίηση της έννοιας υποβάθμισης στροβίλου των Magnussen και Hjertager. Τα πρότυπα αυτού του τύπου είναι κατάλληλα για ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών συμπεριλαμβανομένου

προαναμεμιγμένης, μερικώς προαναμεμιγμένης και μη προαναμεμιγμένης καύσης.

2. *Mixture Fraction/PDF Formulation*: Μοντέλο κλάσματος μίγματος/ διατύπωση PDF:

Σ' αυτή την προσέγγιση ξεχωριστές εξισώσεις μεταφοράς ειδών δελύνονται. Αντί γι' αυτό, λύνονται εξισώσεις μεταφοράς για ένα ή δύο διατηρούμενα βαθμωτά μεγέθη και οι συγκεντρώσεις κάθε συστατικού βγαίνουν από την προβλεπόμενη κατανομή του κλάσματος μίξης. Αυτή η προσέγγιση αναπτύχθηκε κυρίως για την προσομοίωση φλογών διάχυσης και παρόμοιων διαδικασιών και προσφέρει πολλά πλεονεκτήματα. Τα αποτελέσματα της τύρβης λαμβάνονται υπ' όψη με τη βοήθεια μιας συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας ή αλλιώς pdf. Οι μηχανισμοί αντίδρασης δεν καθορίζονται από το χρήστη αλλά το χημικό σύστημα αντιμετωπίζεται μέσω υπολογισμών χημικής ισορροπίας ή της προσέγγισης του «φλογοσέντονου» (flame sheet).

1.2.5 Εξίσωση μεταφοράς ειδών

Το FLUENT έχει τη δυνατότητα να μοντελοποιήσει την ανάμιξη και μεταφορά χημικών ουσιών λύνοντας τις εξισώσεις διατήρησης περιγράφοντας τις πηγές μεταφοράς, διάχυσης και αντίδρασης για κάθε συστατικό.

Όταν επιλέγουμε να λύσουμε εξισώσεις διατήρησης, το FLUENT προβλέπει το τοπικό κλάσμα μάζας κάθε είδους, m_i , μέσα από τη λύση της εξίσωσης μεταφοράς- διάχυσης για το i είδος. Αυτή η εξίσωση έχει τη μορφή:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i m_i) = -\frac{\partial}{\partial x_i} J_{i,i} + R_i + S_i \quad (1.2.41)$$

Όπου R_i , είναι ο ρυθμός παραγωγής ή καταστροφής μάζας από χημική αντίδραση και S_i είναι ο επιπρόσθετος ρυθμός παραγωγής από τη φάση σκέδασης. Μια εξίσωση αυτής της μορφής θα λυθεί για $N-1$ είδη όπου N είναι ο συνολικός αριθμός των χημικών ειδών σε ρευστή φάση που είναι παρόντα στο σύστημα.

Το $J_{i,i}$ είναι ο ρυθμός ροής μάζας του είδους i , που προκύπτει από την κλίση της συγκέντρωσης. Στην πιο απλή περίπτωση, αυτός ο ρυθμός ροής μάζας γράφεται ως εξής:

$$J_{i,i} = -\rho D_{i,m} \frac{\partial m_i}{\partial x_i} \quad (1.2.42)$$

Όπου, $D_{i',m}$ είναι ο συντελεστής διάχυσης για το είδος i' στο μίγμα. Ο ρυθμός ροής μάζας $J_{i',i}$, μπορεί όχι υποχρεωτικά να αυξηθεί από έναν όρο θερμικής διάχυσης, $-D_{i'}^T \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i}$ (ή αλλιώς αποκαλείται διάχυση Soret).

Στις τυρβώδεις ροές, το FLUENT υπολογίζει τη διάχυση μάζας στη μορφή:

$$J_{i',i} = - \left(\rho D_{i',m} + \frac{\mu_t}{\sigma_m} \right) \frac{\partial m_{i'}}{\partial x_i} \quad (1.2.43)$$

όπου σ_m είναι ο αριθμός Schmidt, (με τιμή καθορισμένη στο 0.7).

Η γενική διατύπωση πεπερασμένου ρυθμού για τη μοντελοποίηση αντιδράσεων:

Οι ρυθμοί αντίδρασης που εμφανίζονται σαν όροι πηγής στην εξίσωση 1.2.41 υπολογίζονται από το FLUENT από την έκφραση του Arrhenius ή χρησιμοποιώντας την αντίληψη της σκέδασης του στροβίλου.

-Υπολογισμοί ρυθμού αντίδρασης:

Η πηγή του χημικού είδους i' που οφείλεται στην αντίδραση, $R_{i'}$, υπολογίζεται σαν το άθροισμα των πηγών αντίδρασης στις

k αντιδράσεις που το είδος μπορεί να συμμετέχει:

$$R_{i'} = \sum_k R_{i',k} \quad (1.2.44)$$

όπου το $R_{i',k}$ είναι ο ρυθμός παραγωγής/ καταστροφής του είδους i' στην αντίδραση k . Ο ρυθμός αντίδρασης, $R_{i',k}$, ελέγχεται είτε από την έκφραση κινητικού ρυθμού του Arrhenius, είτε από την ανάμιξη των τυρβωδών στροβίλων που περιέχουν κυμαινόμενες συγκεντρώσεις.

-Ο ρυθμός Arrhenius:

Ο ρυθμός αντίδρασης του Arrhenius υπολογίζεται ως:

$$R_{i',k} = v'_{i',k} M_{i'} T^{\beta_k} A_k \prod_{j \text{ reactants}} C_j^{v_{j',k}} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (1.2.45)$$

Όπου:

$v'_{i',k}$ = μοριακός στοιχειομετρικός συντελεστής για το είδος i' στην αντίδραση k

$M_{i'}$ = μοριακό βάρος είδους i'

β_k = θερμοκρασιακός εκθέτης

A_k = προ-εκθετικός παράγοντας

C_j = μοριακή συγκέντρωση κάθε αντιδρώντος είδους j'

$v_{j',k}$ = εκθέτης στη συγκέντρωση του αντιδρώντος j' στην αντίδραση k

E_k = ενέργεια ενεργοποίησης για την αντίδραση Eddy-Dissipation model
(Μοντέλο υποβάθμισης στροβίλου)

Η επιρροή της τύρβης στο ποσοστό αντίδρασης λαμβάνεται υπ' όψιν με τη χρησιμοποίηση του μοντέλου Magnussen και Hjertager. Σε αυτό το μοντέλο, το ποσοστό αντίδρασης $R_{i',k}$, δίνεται από το μικρότερο των δύο κατωτέρω εκφράσεων:

$$R_{i',k} = v'_{i',k} M_{i'} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{m_R}{v'_{R,k} M_R} \quad (1.2.46)$$

$$R_{i',k} = v'_{i',k} M_{i'} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum p m_p}{\sum_j v''_{j,k} M_j} \quad (1.2.47)$$

Όπου:

m_p , αντιπροσωπεύει το μαζικό μέρος οποιωνδήποτε ειδών προϊόντων, p
 m_R , αντιπροσωπεύει το μαζικό μέρος ενός ιδιαίτερου αντιδραστήριου, R
 ρ , είναι το είδος του αντιδραστήριου που δίνει τη μικρότερη αξία $R_{i',k}$

A , είναι εμπειρική σταθερά ίση με 4.0

B , είναι εμπειρική σταθερά ίση με 0.5

Το μοντέλο υποβάθμισης στροβίλου αφορά το ποσοστό αντίδρασης-υποβάθμισης αντιδραστήριου και προϊόντος που περιέχεται στους στροβίλους. Το k/ε αντιπροσωπεύει το χρονικό διάστημα των τυρβωδών στροβίλων κατά το μοντέλο υποβάθμισης του Spalding. Το μοντέλο είναι χρήσιμο για την πρόβλεψη των προβλημάτων με προανάμιξη ή διάχυση καθώς επίσης και για τις μερικώς προαναμεμιγμένες αντιδρούσες ροές.

-Τυρβώδεις αντιδρούσες ροές:

Στις τυρβώδεις αντιδρούσες ροές το FLUENT υπολογίζει το ποσοστό αντίδρασης Arrhenius, τα ποσοστά αντίδρασης υποβάθμισης στροβίλου ή και τα δύο, ανάλογα με τον καθορισμό του προβλήματος. Εάν υπολογίζονται και τα δύο, το πιο περιοριστικό ποσοστό χρησιμοποιείται ως ποσοστό αντίδρασης και οι συνεισφορές στους όρους πηγής, στη διατήρηση ειδών και στις ενεργειακές εξισώσεις υπολογίζονται από αυτό το ποσοστό αντίδρασης.

Η εισαγωγή του κινητικού όρου στην έκφραση ποσοστού για τις τυρβώδεις ροές είναι χρήσιμη γιατί μπορεί να λειτουργήσει σαν διακοπή στο ελεγχόμενο ποσοστό μίξης όταν η αντίδραση είναι πολύ αργή. Το μοντέλο

επιτρέπει τους υπολογισμούς χωρίς γνώση των ακριβών στοιχείων ποσοστού Arrhenius, τα οποία μπορεί να είναι δύσκολο να ληφθούν για πολλά καύσιμα.

-Σταθερότητα και σύγκλιση στις αντιδρούσες ροές:

Η δυσκολία στην επίτευξη σύγκλισης έγκειται σε διάφορους λόγους. Καταρχήν, η επίπτωση της χημικής αντίδρασης στο μοντέλο της βασικής ροής μπορεί να είναι ισχυρή, οδηγώντας το μοντέλο σε ισχυρή σύζευξη ανάμεσα στις ισορροπίες μάζας/ορμής και στις εξισώσεις μεταφοράς των ειδών. Αυτό συμβαίνει κυρίως στην καύση, όπου οι αντιδράσεις οδηγούν στην απελευθέρωση ενός μεγάλου ποσού θερμότητας και συνεπώς σε αλλαγές στην πυκνότητα και σε μεγάλες επιταχύνσεις στη ροή. Αυτό το θέμα αντιμετωπίζεται καλύτερα με τη χρήση διαδικασίας λύσης δύο βημάτων και πολλαπλών σαρώσεων στη λύση.

Μια δεύτερη πηγή εμποδίου στη σύγκλιση είναι η εξάρτηση των εξισώσεων συγκέντρωσης από τα άλλα χημικά είδη του μοντέλου. Αυτό προκύπτει γιατί αυτή η εξίσωση για ένα είδος μπορεί να κυριαρχείται από τον όρο πηγής της αντίδρασης που είναι εξάρτηση των συγκεντρώσεων των άλλων ειδών.

Επειδή το FLUENT δεν ενημερώνει ταυτόχρονα τις συγκεντρώσεις όλων των ειδών, αυτή η εξάρτηση μπορεί να οδηγήσει σε δυσκολία της σύγκλισης. Αυτό μπορεί να αυξήσει τον αριθμό των επαναλήψεων που απαιτούνται για τη σύγκλιση αλλά και να οδηγήσει πιο εύκολα στη σύγκλιση απλούστερα αντιδρώντα συστήματα.

Ένα τρίτο πρόβλημα στη σύγκλιση περιλαμβάνει την τιμή του όρου πηγής της αντίδρασης. Όταν το μοντέλο του FLUENT περιλαμβάνει υψηλούς ρυθμούς αντίδρασης, η λύση της μεταφοράς των ειδών γίνεται αριθμητικά δύσκολη. Αυτό γιατί οι πίνακες που πρέπει να λυθούν δεν είναι πια διαγώνιοι αλλά εξαρτώνται από μεγάλους όρους, γεγονός που μπορεί να οδηγήσει σε μεγάλες διακυμάνσεις στις συγκεντρώσεις. Αυτά τα συστήματα αποκαλούνται δύσκαμπτα και δημιουργούνται όταν καθορίζονται μοντέλα με πολύ υψηλούς κινητικούς ρυθμούς, ειδικά όταν αυτοί οι ρυθμοί περιγράφουν αντιστρεπτές ή ανταγωνιστικές αντιδράσεις. Η πολύ υψηλή χημεία μπορεί να αντιμετωπιστεί χρησιμοποιώντας το μοντέλο κλάσματος μίγματος/PDF.

1.2.6 Μοντέλο κλάσματος μίγματος/PDF

1.2.6.1 Γενικά

Αυτή η προσέγγιση περιλαμβάνει τη λύση εξισώσεων μεταφοράς για ένα ή περισσότερα συντηρητικά μεγέθη, χωρίς όμως να λύνονται οι εξισώσεις για

μεμονωμένα είδη. Αντίθετα, οι συγκεντρώσεις για μεμονωμένα συστατικά προκύπτουν από την προβλεπόμενη κατανομή του κλάσματος μίξης. Οι μηχανισμοί αντίδρασης, που μπορεί να είναι άγνωστοι ή πολύπλοκοι, δεν είναι καθορισμένοι από το χρήστη. Το σύστημα, έτσι, αντιμετωπίζεται χρησιμοποιώντας υπολογισμούς χημικής ισορροπίας ή χρησιμοποιώντας απείρως γρήγορη χημεία.

Οι φυσικές ιδιότητες των ειδών βρίσκονται σε μια βάση δεδομένων και δεν χρειάζεται να προσδιοριστούν από το χρήστη. Τέλος, η αλληλεπίδραση της τύρβης και η χημεία αντιμετωπίζονται με τη βοήθεια μιας συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας ή pdf.

-Πλεονεκτήματα της προσέγγισης:

Χρησιμοποιείται κυρίως για την προσομοίωση των τυρβωδών φλογών διάχυσης και παρόμοιων αντιδράσεων στις οποίες η τυρβώδης ανάμιξη είναι ο περιοριστικός ρυθμός για την πρόοδο της αντίδρασης. Η μέθοδος επιτρέπει το σχηματισμό ενδιάμεσων ειδών, την επίδραση της διάσπασης και την αντιμετώπιση της σύζευξης των αποτελεσμάτων ανάμεσα στην τύρβη και τη χημεία μ' έναν αυστηρό τρόπο.

Η μέθοδος είναι υπολογιστικά αποτελεσματική διότι δεν απαιτεί τη λύση πολλών εξισώσεων. Ακόμη, επιτρέπει πιο ακριβή εκτίμηση της μέσης πυκνότητας του ροικού πεδίου απ' ότι η προηγούμενη μέθοδος.

-Περιορισμοί της χρήσης της προσέγγισης:

Η μέθοδος μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο όταν η ροή είναι ασυμπίεστη και τυρβώδης, όταν το αντιδρών σύστημα είναι τύπου διάχυσης και όχι προαναμεμιγμένο και τέλος μπορεί να περιλαμβάνει ένα καύσιμο, ένα οξειδωτικό και ένα δευτερεύον ρεύμα.

1.2.6.2 Προσδιορισμός του κλάσματος μίξης

Η βάση αυτής της προσέγγισης είναι ότι κάτω από ένα συγκεκριμένο σετ απλουστευτικών υποθέσεων η στιγμιαία θερμοχημική κατάσταση του ρευστού σχετίζεται με μια συντηρητική βαθμωτή ποσότητα γνωστή σαν κλάσμα μίξης f :

$$f = \frac{Z_k - Z_{k0}}{Z_{kF} - Z_{k0}} \quad (1.2.48)$$

όπου Z_k είναι το κλάσμα μάζας για το στοιχείο k . Ο δείκτης o δηλώνει την τιμή του ρεύματος εισόδου του οξειδωτικού και ο δείκτης F δηλώνει την τιμή του ρεύματος εισόδου του καυσίμου.

Για απλά συστήματα καυσίμου/ οξειδωτικού, το κλάσμα μίξης μπορεί να δοθεί απλούστερα ως:

$$f = \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_F + \dot{m}_O} \quad (1.2.49)$$

Εαν ένα δευτερεύον ρεύμα περιληφθεί, το κλάσμα μίγματος καυσίμου γίνεται:

$$f_{\text{fuel}} = \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_F + \dot{m}_S + \dot{m}_O} \quad (1.2.50)$$

και το δευτερεύον κλάσμα μίξης είναι:

$$f_{\text{sec}} = \frac{\dot{m}_S}{\dot{m}_P + \dot{m}_S + \dot{m}_O} \quad (1.2.51)$$

Ένα μερικό κλάσμα για τη δευτερεύουσα ροή καθορίζεται ως:

$$p_{\text{sec}} = \frac{\dot{m}_S}{\dot{m}_S + \dot{m}_O} \quad (1.2.52)$$

Ακολουθεί ότι:

$$f_{\text{sec}} = p_{\text{sec}} \times (1 - f_{\text{fuel}}) \quad (1.2.53)$$

και ότι f_{sec} και p_{sec} μπορούν να χρησιμοποιηθούν εναλλακτικά, ανάλογα με τον υπολογισμό. Τα μεγέθη αυτά δεν είναι συντηρητικά.

-Εξίσωση μεταφοράς για το κλάσμα μίξης:

Το κλάσμα μίξης είναι συντηρητικό μέγεθος. Η τιμή του σε κάθε σημείο στη ροή υπολογίζεται από τη λύση της ακόλουθης εξίσωσης διατήρησης για τη μέση τιμή του f στο τυρβώδες πεδίο:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \bar{f}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i} \right) + S_m \quad (1.2.54)$$

Ο όρος πηγής S_m οφείλεται μόνο στη μεταφορά μάζας στην αέρια φάση από υγρά σταγονίδια καυσίμου ή αντιδρώντα μόρια. Σε όλες τις άλλες περιπτώσεις δεν υπάρχουν πηγές του \bar{f} .

Επιπροσθέτως, το FLUENT λύνει μια εξίσωση διατήρησης και για την απόκλιση του κλάσματος μίξης \bar{f}'^2 :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}'^2) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \bar{f}'^2) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{f}'^2}{\partial x_i} \right) + C_g \mu_t \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i} \right)^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \bar{f}'^2 \quad (1.2.55)$$

όπου οι σταθερές σ_t , C_g , και C_d παίρνουν τις τιμές 0.7, 2.86 και 2.0 αντίστοιχα. Η διακύμανση χρησιμοποιείται στο μοντέλο τερματισμού περιγράφοντας αλληλεπιδράσεις χημείας-τύρβης.

-Κλάσμα μίξης vs. λόγου ισοδυναμίας:

Ας θεωρήσουμε ένα απλό σύστημα καύσης που περιλαμβάνει ένα ρεύμα καυσίμου και ένα οξειδωτικό, συμβολικά αναπαριστώμενα σε στοιχειομετρικές συνθήκες ως:



όπου r είναι ο λόγος αέρα/καυσίμου στη βάση της μάζας. Δηλώνοντας το λόγο ισοδυναμίας ως φ η αντίδραση κάτω από πιο γενικές συνθήκες μίξης γράφεται:



Κοιτώντας την εξίσωση, το κλάσμα μίξης προκύπτει:

$$f = \frac{\varphi}{\varphi + r} \quad (1.2.58)$$

Αυτό το αποτέλεσμα είναι πολύ σημαντικό, καθώς επιτρέπει τον υπολογισμό του κλάσματος μίξης σε στοιχειομετρικές συνθήκες ($\varphi=1$) ή σε πλούσιο μίγμα ($\varphi=2$).

-Η σχέση του f με τις χημικές ουσίες, την πυκνότητα και τη θερμοκρασία:

Το σημαντικό σημείο της συγκεκριμένης μεθόδου είναι το γεγονός ότι υπολογίζοντας ένα μέγεθος (f), προκύπτουν άλλα μεγέθη χωρίς να λυθούν ξεχωριστές εξισώσεις.

Με δεδομένη την περιγραφή της χημείας του αντιδρώντος συστήματος και ορισμένους περιορισμούς του συστήματος, η τιμή του κλάσματος μίξης σε κάθε σημείο του ροϊκού πεδίου μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της τιμής στιγμιαίων μεγεθών και μεμονωμένων ειδών, όπως μοριακά κλάσματα, πυκνότητα και θερμοκρασία.

Εαν, επιπλέον, το σύστημα είναι αδιαβατικό οι στιγμιαίες τιμές των προηγούμενων μεγεθών εξαρτώνται αποκλειστικά από το στιγμιαίο κλάσμα μίξης,

$$\varphi_i = \varphi_i(f) \quad (1.2.59)$$

για ένα σύστημα ενός καυσίμου/οξειδωτικού.

Αν περιλαμβάνεται δευτερεύουσα ροή οι στιγμιαίες τιμές θα εξαρτώνται από το στιγμιαίο κλάσμα μίγματος καυσίμου f_{fuel} και το δευτερεύον μερικό κλάσμα p_{sec} :

$$\varphi_i = \varphi_i(f_{\text{fuel}}, p_{\text{sec}}) \quad (1.2.60)$$

όπου φ_i η στιγμιαία συγκέντρωση, πυκνότητας ή θερμοκρασίας. Σε μη αδιαβατικά συστήματα, η σχέση γενικεύεται σε,

$$\varphi_i = \varphi_i(f, h^*) \quad (1.2.61)$$

για σύστημα ενός κλάσματος μίξης. Όπου h^* είναι η στιγμιαία ενθαλπία:

$$h^* = \sum_j m_j (h_j + h_j^o) \quad (1.2.62)$$

Το οποίο ισούται με :

$$h^* = \sum_j m_j \left[\int_{T_{\text{ref}}}^T c_{p,j} dT + \frac{h_j^o}{M_j} + \int_{T_{\text{ref},j}}^{T_{\text{ref}}} c_{p,j} dT \right] \quad (1.2.63)$$

Αν έχουμε δευτερεύουσα ροή τότε,

$$\varphi_i = \varphi_i(f_{\text{fuel}}, p_{\text{sec}}, h^*) \quad (1.2.64)$$

Τα μη αδιαβατικά συστήματα περιλαμβάνουν συστήματα στα οποία η συνολική ενθαλπία δεν καθορίζεται μοναδικά βάση του κλάσματος μίξης.

-Περιορισμοί στην προσέγγιση:

- Το χημικό σύστημα πρέπει να είναι τύπου διάχυσης με διακριτές εισόδους καυσίμου και οξειδωτικού.
- Ο αριθμός Lewis πρέπει να είναι μονάδα (όπου ο αριθμός αυτός ισούται με τον λόγο του αριθμού Schmidt προς τον αριθμό Prandtl).
- Όταν χρησιμοποιείται μονό κλάσμα μίξης πρέπει να ακολουθούνται οι παρακάτω συνθήκες:
 - Χρησιμοποιείται μόνο ένα είδος καυσίμου. Το καύσιμο μπορεί να αποτελείται από μίγμα αντιδρώντων και μπορεί να υπάρχουν πολλές εισοδοι, στις οποίες το μίγμα ωστόσο έχει την ίδια σύσταση.

- Χρησιμοποιείται μόνο ένα είδος οξειδωτικού. Το οξειδωτικό μπορεί να αποτελείται από μίγμα ουσιών και μπορεί να υπάρχουν πολλές είσοδοι, στις οποίες το μίγμα ωστόσο έχει την ίδια σύσταση.
- Όταν χρησιμοποιούνται δύο κλάσματα μίξης, μπορούν να περιληφθούν στο σύστημα 3 ρεύματα.

Τονίζουμε για μια ακόμα φορά ότι η συγκεκριμένη μέθοδος δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε προαναμεμιγμένη καύση.

-Χρησιμοποιώντας την προσέγγιση για υγρό καύσιμο:

Σ' αυτή την περίπτωση το καύσιμο μπαίνει στην αέρια φάση στον υπολογιστικό τομέα με ένα ρυθμό που καθορίζεται από νόμους εξάτμισης, εξαέρωσης ή απανθράκωσης.

1.2.6.3 Μοντέλα που περιγράφουν τη χημεία του συστήματος

Το FLUENT προσφέρει δύο επιλογές για την περιγραφή της χημείας του συστήματος όταν χρησιμοποιείται το μοντέλο του κλάσματος μίξης.

Αυτές είναι οι ακόλουθες:

- Η προσέγγιση του φλογοσέντονου (Mixed is Burned):
Αποτελεί την πιο απλή προσέγγιση. Υποθέτουμε ότι η χημεία είναι απείρως γρήγορη και αναντιστρεπτή, με το καύσιμο και το οξειδωτικό να μην συνυπάρχουν ποτέ στο χώρο και με ένα βήμα να μετατρέπονται σε τελικά προϊόντα. Αυτό επιτρέπει οι συγκεντρώσεις να προσδιορίζονται απευθείας από τη στοιχειομετρία της αντίδρασης χωρίς να απαιτείται γνώση του ρυθμού αντίδρασης ή της χημικής ισορροπίας. Αυτό αυξάνει την ταχύτητα των υπολογισμών, παρ' όλα αυτά το μοντέλο περιορίζεται στην πρόβλεψη αντιδράσεων ενός βήματος και δεν ασχολείται με τα ενδιάμεσα προϊόντα. Αυτό πολλές φορές οδηγεί στον υπολογισμό υψηλότερων θερμοκρασιών φλόγας, ιδιαίτερα στα συστήματα που αναπτύσσεται πολύ υψηλή θερμοκρασία.
- Η υπόθεση της ισορροπίας:
Η υπόθεση αυτή προϋποθέτει ότι η χημεία είναι γρήγορη αρκετά ώστε η χημική ισορροπία να διατηρείται πάντα σε μοριακό επίπεδο. Ένας αλγόριθμος βασισμένος στην ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας Gibbs χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των μοριακών κλασμάτων από το f . Το μοντέλο αυτό μπορεί να προβλέψει το σχηματισμό των ενδιάμεσων ειδών και δεν απαιτεί λεπτομερή γνώση χημικών κινητικών δεδομένων. Αντί να καθορίζονται ο μηχανισμός της αντίδρασης και συγκεκριμένοι ρυθμοί αντίδρασης, απλά προσδιορίζονται τα σημαντικότερα χημικά συστατικά που είναι παρόντα στο σύστημα.

Το FLUENT επιτρέπει τον περιορισμό των υπολογισμών εκεί όπου το στιγμιαίο κλάσμα μίξης είναι κάτω από ένα συγκεκριμένο όριο πλούσιου

μίγματος, f_{rich} . Σε περιοχές όπου ξεπερνάμε το όριο αυτό, το FLUENT υποθέτει ότι η καύση εξαφανίζεται και τα άκαυστα συνυπάρχουν με τα παράγωγα της καύσης. Σε τέτοιες πλούσιες περιοχές, η σύσταση σε δοσμένη τιμή του κλάσματος μίξης υπολογίζεται από τη σύνθεση του οριακού μίγματος και αυτή του ρεύματος εισόδου καυσίμου, βασισμένη στη γνωστή στοιχειομετρία.

Η στοιχειομετρία είτε καθορίζεται από το χρήστη ή καθορίζεται από τη χημική ισορροπία στο πλούσιο όριο. Αυτή η προσέγγιση επιτρέπει να παρακάμψουμε πολύπλοκους υπολογισμούς ισορροπίας στην πλούσια περιοχή.

Τα χημικά είδη περιλαμβάνονται στη βάση δεδομένων της χημείας στην οποία έχουμε πρόσβαση μέσω αρχείου prePDF. Στα είδη που περιλαμβάνονται στη χημική ισορροπία δεν συμπεριλαμβάνουμε τα NO_x , καθώς οι αντιδράσεις σχηματισμού τους είναι αργές.

1.2.6.4 PDF μοντελοποίηση στην αλληλεπίδραση τύρβης- χημείας

Οι εξισώσεις 1.2.59, 1.2.60, 1.2.61, 1.2.64, περιγράφουν τη στιγμιαία σχέση μεταξύ κλάσματος μίξης και των ειδών, της πυκνότητας και της θερμοκρασίας, όπως δίνεται από το μοντέλο χημικής ισορροπίας.

Η πρόβλεψη του FLUENT παρ'όλα αυτά, για τη τυρβώδη αντιδρούσα ροή ασχολείται με την πρόβλεψη της μέσης τιμής στο χρόνο αυτών των μεγεθών. Το πώς συνδέονται αυτές οι τιμές με τις στιγμιαίες εξαρτάται από το μοντέλο αλληλεπίδρασης τύρβης-χημείας που χρησιμοποιείται.

Το FLUENT εφαρμόζει τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (PDF) σαν μοντέλο τερματισμού όταν χρησιμοποιεί τη μοντελοποίηση με το κλάσμα μίγματος.

-Περιγραφή της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας:

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας περιγράφει το ποσοστό του χρόνου που η διακυμαινόμενη μεταβλητή f παίρνει μια τιμή μεταξύ του f και του $f+\Delta f$. Η διακυμαινόμενη τιμή f περνάει σε ένα ποσοστό στο διάστημα Δf . Η μαθηματική μορφή της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας είναι η παρακάτω:

$$p(f)\Delta f = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_i \tau_i \quad (1.2.65)$$

όπου τ_i είναι το κλάσμα του χρόνου όπου η f περνά στο διάστημα Δf . Η μορφή της συνάρτησης εξαρτάται από τη φύση των τυρβωδών διακυμάνσεων της f .

1.2.6.5 Καθορίζοντας το μοντέλο του κλάσματος μίγματος στο prePDF

Υπάρχουν συγκεκριμένες διαδικασίες και βήματα για τον καθορισμό του προβλήματος στον προεπεξεργαστή prePDF όπως η περιγραφή των χημικών συστατικών και της αναλογίας τους στο σύστημα, ο καθορισμός του αν είναι αδιαβατικό ή όχι, η δημιουργία βάσης δεδομένων για θερμοδυναμικές και φυσικές ιδιότητες, ο καθορισμός της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας που θα περιγράψει τις διακυμάνσεις της τύρβης και η προετοιμασία πίνακα που περιλαμβάνει μέσες τιμές μοριακών κλασμάτων, πυκνοτήτων και θερμοκρασίας σαν συνάρτηση του μέσου κλάσματος μίγματος, της απόκλισης και της ενθαλπίας.

1.2.7 Συνοριακές συνθήκες

1.2.7.1 Γενικά

Οι συνοριακές συνθήκες παρέχουν στο FLUENT πληροφορίες για ροϊκές/θερμικές συνθήκες στα όρια του φυσικού μοντέλου.

Οι επιλογές που παρέχει το πρόγραμμα περιλαμβάνουν:

- Σημεία εισόδου και εξόδου της ροής
- Τοιχώματα
- Συμμετρικά όρια
- Περιοδικά όρια
- Κυκλικά όρια

Τα σημεία εισόδου και εξόδου της ροής μπορούν να προσδιοριστούν μέσω του καθορισμού της πίεσης και/ή της ταχύτητας. Οι οριακές συνθήκες για τον τοίχο μπορεί να είναι σταθερές ή μεταβλητές και ρυθμίζουν την εξίσωση της αγωγής και γενικά τη θερμική συμπεριφορά του.

Οι συμμετρικές και οι κυκλικές συνοριακές συνθήκες παρέχουν ένα μέσο για να μειωθεί το υπολογιστικό μοντέλο εκμεταλλευόμενοι την επαναληπτική φύση της γεωμετρίας και της ροής. Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες επιτρέπουν τη μοντελοποίηση πλήρως ανεπτυγμένων ροών.

Οι συνοριακές συνθήκες καθορίζονται από το FLUENT με τους παρακάτω τρόπους:

- Αναθέτουμε τις οριακές συνθήκες σε έναν όγκο ελέγχου που καθορίζεται σαν κελί.
- Αναθέτουμε τις τιμές των οριακών συνθηκών σε μεμονωμένο όγκο ελέγχου μέσω του «patching».
- Αναθέτουμε στάνταρ τιμές ξεχωριστά σε όγκους ελέγχου.

Χρησιμοποιώντας την πρώτη προσέγγιση, οι οριακές συνθήκες έχουν ομοιόμορφη τιμή για όλα τα κελιά ή οι τιμές μπορεί να ποικίλουν μέσω μιας πολυωνυμικής, αρμονικής ή άλλης συνάρτησης. Στη δεύτερη προσέγγιση, αριθμητικές τιμές των οριακών συνθηκών ανατίθενται σε μια βάση, κελί με κελί., επιτρέποντας τέλεια ελαστικότητα για την εισαγωγή μη ομοιόμορφων οριακών συνθηκών. Η τρίτη προσέγγιση επιτρέπει τον καθορισμό των τιμών της ταχύτητας, για παράδειγμα, προσομοιώνοντας την επίδραση του ανεμιστήρα χωρίς να απαιτείται η εισαγωγή επιπρόσθετων πληροφοριών στα κελιά.

1.2.7.2 Σημεία εισόδου και εξόδου της ροής

Το FLUENT παρέχει τρεις τύπους συνοριακών κελιών για τη συγκεκριμένη περίπτωση: είσοδος ταχύτητας, είσοδος πίεσης και έξοδος.

-Συνοριακές συνθήκες εισόδου και εξόδου για ασυμπίεστη και υποηχητική ροή:

Οι επιλογές που υπάρχουν σ' αυτήν την περίπτωση είναι οι ακόλουθες:

- Οι οριακές συνθήκες εισόδου της ταχύτητας (velocity inlet) χρησιμοποιούνται για τον καθορισμό των ιδιοτήτων της ταχύτητας και των βαθμωτών μεγεθών της ροής στα όρια εισόδου. Σε κάποιες περιπτώσεις αυτές οι συνθήκες μπορεί να χρησιμοποιηθούν για τον καθορισμό της ταχύτητας στην έξοδο.
- Οι οριακές συνθήκες εισόδου της πίεσης (pressure inlet) χρησιμεύουν στον καθορισμό της συνολικής πίεσης και των άλλων βαθμωτών μεγεθών στην είσοδο της ροής καθώς και της στατικής ροής στην έξοδο. Οι οριακές συνθήκες πίεσης μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον καθορισμό σε σχέση με τον όρο της διαφοράς πίεσης από την είσοδο στην έξοδο αντί του ρυθμού μαζικής ροής: 1) πλήρων ορίων σε εξωτερικές και εσωτερικές ροές, 2) συνθηκών εισόδου-εξόδου σε προβλήματα φυσικής μεταφοράς και πολλαπλών εξόδων ροής.
- Οι οριακές συνθήκες εξόδου χρησιμοποιούνται όταν η ροή βγαίνει από μία και μόνη έξοδο. Είναι κατάλληλες όταν έχουμε ροή σχεδόν πλήρως αναπτυγμένη.

-Δεδομένα στα όρια εισόδου ταχύτητας:

Καθορίζονται τα μεγέθη των ταχυτήτων για όλες τις συνιστώσες της ταχύτητας. Επιπρόσθετα, οι κατάλληλες βαθμωτές ποσότητες απαιτούνται σαν δεδομένα, ανάλογα με την σκοπιά του ζητήματος που έχουμε καθορίσει. Γι' αυτό τα δεδομένα μπορεί να περιλαμβάνουν:

- Τις καρτεσιανές συνιστώσες της ταχύτητας
- Τη ροή της μάζας
- Την κλίμακα μήκους/έντασης της τύρβης
- Τη θερμοκρασία

- Τα μαζικά κλάσματα των χημικών ειδών
- Τη στατική πίεση

-Συνοριακές συνθήκες εισόδου της πίεσης:

Οι συνθήκες αυτές όπως είπαμε παραπάνω χρησιμεύουν για τον προσδιορισμό της πίεσης του ρευστού στα σημεία εισόδου και/ή εξόδου μαζί με άλλες βαθμωτές ιδιότητες της ροής. Χρησιμοποιούνται όταν η αλλαγή της πίεσης από την είσοδο στην έξοδο είναι γνωστή αλλά ο ρυθμός ροής και/ή η ταχύτητα δεν είναι γνωστά. Αυτή η κατάσταση μπορεί να προκύψει σε πολλά πρακτικά προβλήματα, όπως οι ανωστικές ροές που μας ενδιαφέρουν. Οι συνθήκες εισόδου πίεσης χρησιμοποιούνται επίσης στον καθορισμό ενός «ελεύθερου» ορίου σε εξωτερική ροή καθώς και στα προβλήματα με πολλαπλές εξόδους.

Στα κελιά εισόδου της πίεσης, το FLUENT δίνει την δυνατότητα στην εισαγωγή της πίεσης του ρευστού σαν συνοριακή συνθήκη. Όταν η πίεση μπαίνει στον τομέα μέσω του κελιού εισόδου πίεσης, η είσοδος αντιμετωπίζεται σαν ολική πίεση και όταν η ροή εξέρχεται του τομέα, η είσοδος αντιμετωπίζεται σαν στατική πίεση.

Γενικά, οι είσοδοι στα κελιά εισόδου πίεσης μπορεί να περιλαμβάνουν τα ακόλουθα:

- Πίεση (λίμνασης στην είσοδο, στατική στην έξοδο)
- Γωνία ροής
- Θερμοκρασία
- Κλάσματα μάζας των χημικών στοιχείων
- Τυρβώδη κινητική ενέργεια και ρυθμό σκέδασης

Όταν είναι ενεργοποιημένη η λύση της εξίσωσης ενθαλπίας η θερμοκρασία πρέπει να καθορίζεται. Οι συγκεντρώσεις καθορίζονται όταν είναι ενεργοποιημένη η λύση της εξίσωσης μεταφοράς των ειδών.

Οι συνθήκες ορίου πίεσης μπορούν να χρησιμοποιηθούν μόνες τους ή μπορεί να συνδυαστούν με συνθήκες ορίου ταχύτητας μέσω των συνθηκών εισόδου της ταχύτητας. Γενικά, οποιοσδήποτε συνδυασμός ορίων εισόδου πίεσης και ταχύτητας είναι καλά-προσδιορισμένος, αν και προσοχή πρέπει να δοθεί στο να μην χρησιμοποιηθεί μια συνθήκη εισόδου πίεσης σε υπερηχητική έξοδο. Τέλος, οι συνθήκες εισόδου πίεσης δεν πρέπει ποτέ να χρησιμοποιούνται στο ίδιο πρόβλημα σαν συνθήκες εξόδου, εκτός αν η ροή είναι διηχητική.

-Συνοριακές συνθήκες εξόδου:

Χρησιμοποιούνται για τη μοντελοποίηση εξόδου ροής όπου οι λεπτομέρειες της ταχύτητας και της πίεσης της ροής δεν είναι γνωστές πριν τη λύση του προβλήματος. Δεν καθορίζονται συνθήκες στα κελιά εξόδου, το FLUENT παρέχει εσωτερικές οριακές συνθήκες.

Οι εσωτερικές οριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται από το FLUENT στα κελιά εξόδου είναι:

- Μηδενικός ρυθμός διάχυσης για όλες τις μεταβλητές εκτός της πίεσης.
- Μια συνολική διόρθωση ισορροπίας της μάζας (στις υποηχητικές ροές μόνο).

Ο μηδενικός ρυθμός διάχυσης που εφαρμόζεται στα κελιά εξόδου σημαίνει ότι οι συνθήκες του επιπέδου εξόδου παρεκτείνονται από μέσα από τον τομέα και δεν επηρεάζουν την ανάντη ροή. Η διαδικασία παρέκτασης ενημερώνει την ταχύτητα εξόδου και την πίεση με τρόπο που είναι συμβατός με την υπόθεση της πλήρως ανεπτυγμένης ροής, όταν δεν υπάρχει αλλαγή επιφάνειας στην έξοδο.

Η συνολική διόρθωση ισορροπίας της μάζας επιταχύνει τη σύγκλιση, χωρίς να επηρεάζει τη λύση. Αυτή η διόρθωση είναι μηδέν όταν η λύση έχει συγκλίνει και η ισορροπία μάζας εξυπακούεται σε κάθε όγκο ελέγχου. Η διόρθωση είναι αξιοπρόσεχτη σε λύσεις που δεν έχουν συγκλίνει, γιατί η ταχύτητα στο εξωτερικό όριο ενημερώνεται σε κάθε επανάληψη έτσι ώστε η ροή εξόδου να ισοσταθμίζει τη ροή εισόδου.

Η συνθήκη του μηδενικού ρυθμού διάχυσης στα όρια εξόδου χρησιμοποιείται από το FLUENT στις πλήρως ανεπτυγμένες ροές. Οι πλήρως ανεπτυγμένες ροές είναι αυτές στις οποίες το προφίλ της ταχύτητας της ροής δεν αλλάζει στην κατεύθυνση της ροής. Στην κατεύθυνση την κάθετη στη ροή, ωστόσο, μπορεί να υπάρχει κλίση στην ταχύτητα. Κελιά εξόδου μπορούν να χρησιμοποιηθούν επίσης στα φυσικά όρια, όπου η ροή δεν είναι πλήρως ανεπτυγμένη και αυτό μπορεί να γίνει εύκολα όταν η θεώρηση της μηδενικής διακύμανσης της διάχυσης δεν έχει αντίκτυπο στη λύση.

-Συνοριακές συνθήκες τοιχωμάτων (wall):

Στις συνθήκες αυτές το FLUENT υπολογίζει τη διατμητική τάση και τη μεταφορά θερμότητας ανάμεσα στο ρευστό και το τοίχωμα βασιζόμενο στα στοιχεία της ροής του τοπικού ροϊκού πεδίου. Επιπροσθέτως, τα τοιχώματα μπορεί να χρησιμοποιηθούν ως θερμικές οριακές συνθήκες για άλλες συμπαγείς περιοχές (αγωγή κελιά τοιχωμάτων).

Το FLUENT με τη βοήθεια των ιδιοτήτων της ροής της παρακείμενης στα τοιχώματα προβλέπει εκεί τις διατμητικές τάσεις στο ρευστό. Στη περίπτωση της στρωτής ροής αυτός ο υπολογισμός επηρεάζεται απλά από την κλίση της ταχύτητας στο τοίχωμα, ενώ στην τυρβώδη ροή το FLUENT εφαρμόζει το λογαριθμικό νόμο στον τοίχο.

-Συμμετρικές συνοριακές συνθήκες:

Χρησιμοποιούνται όταν η φυσική γεωμετρία που μας ενδιαφέρει και η αναμενόμενη μορφή της ροϊκής/θερμικής λύσης έχουν ομοιότητα κατοπτρικού ειδώλου. Δεν καθορίζονται οριακές συνθήκες στα συμμετρικά όρια, προέρχονται μέσα από το πρόγραμμα. Ωστόσο, πρέπει να δοθεί προσοχή ώστε να προσδιοριστούν σωστά οι περιοχές συμμετρίας.

Το FLUENT υποθέτει μηδενική διακύμανση όλων των ποσοτήτων στα συμμετρικά όρια, κάτι που απαιτείται από τη συμμετρία. Μπορούμε να περιγράψουμε περιληπτικά τις συμμετρικές συνοριακές συνθήκες ως ακολούθως:

- Μηδενική κάθετη ταχύτητα σε συμμετρικό επίπεδο
 - Μηδενικές κάθετες κλίσεις όλων των μεταβλητών σε συμμετρικό επίπεδο
- Άξιο λόγου είναι το γεγονός ότι οι συμμετρικές συνοριακές συνθήκες είναι ταυτόσημες με αυτές του λείου τοιχώματος. Προσοχή σε περιπτώσεις που η γεωμετρία είναι συμμετρική αλλά η ροή δεν είναι.

1.2.8 Η επαναληπτική διαδικασία της λύσης

Το πρόγραμμα χρησιμοποιεί αλγόριθμους για να συσχετίσει τα πεδία ταχύτητας και πίεσης που ικανοποιούν τις γραμμικοποιημένες εξισώσεις ορμής και συνέχειας σε ένα σημείο. Επειδή το FLUENT δεν λύνει τις εξισώσεις σε όλα τα σημεία ταυτόχρονα και επειδή οι εξισώσεις συνδέονται και είναι μη γραμμικές, απαιτείται μια επαναληπτική διαδικασία λύσης, με τις επαναλήψεις να συνεχίζονται έως ότου να ικανοποιηθούν όλες οι εξισώσεις σε όλα τα σημεία.

Κάθε επανάληψη της διαδικασίας λύσης αποτελείται από τα ακόλουθα βήματα:

1. Οι εξισώσεις ορμής των u_1 , u_2 , και u_3 λύνονται με τη σειρά χρησιμοποιώντας το υποθετικό πεδίο πίεσης, p^* .
2. Η εξίσωση διόρθωσης πίεσης (μαζική ισορροπία) λύνεται έπειτα για να γίνουν οι απαραίτητες διορθώσεις στο πεδίο της πίεσης. Αντίστοιχες ρυθμίσεις γίνονται επίσης στις συνιστώσες της ταχύτητας.
3. Για τις τυρβώδεις ροές, οι k και ϵ εξισώσεις (ή οι εξισώσεις μεταφοράς των τάσεων Reynolds) λύνονται χρησιμοποιώντας το ενημερωμένο πεδίο ταχυτήτων για να πάρουμε την κατανομή του ενεργού ιξώδους ή/και των τάσεων Reynolds.
4. Οποιοσδήποτε βοηθητικές εξισώσεις (πχ. ενθαλπίας, διατήρησης των ειδών ή/και ακτινοβολίας) λύνονται χρησιμοποιώντας τις προηγούμενες ενημερωμένες τιμές των άλλων μεταβλητών.
5. Οι ιδιότητες του ρευστού ενημερώνονται (οι ιδιότητες του ρευστού μπορούν να ληφθούν σταθερές ή σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας ή και της σύνθεσης του μίγματος).
6. Όταν η σύζευξη ενδιάμεσης φάσης πρόκειται να περιληφθεί, οι όροι πηγής τις κατάλληλες εξισώσεις συνεχούς φάσης ενημερώνονται μέσω του υπολογισμού της τροχιάς της διασκορπισμένης φάσης.

Τα παραπάνω βήματα μπορούν να συνεχιστούν μέχρι το σφάλμα σε κάθε εξίσωση διατήρησης μέσα σε κάθε όγκο, και ως εκ τούτου σ' ολόκληρη την περιοχή, να μειωθεί στην απαιτούμενη τιμή.

1.2.9 Υπολογιστικό Πλέγμα

1.2.9.1 Γεωμετρικό μοντέλο – Πλέγμα

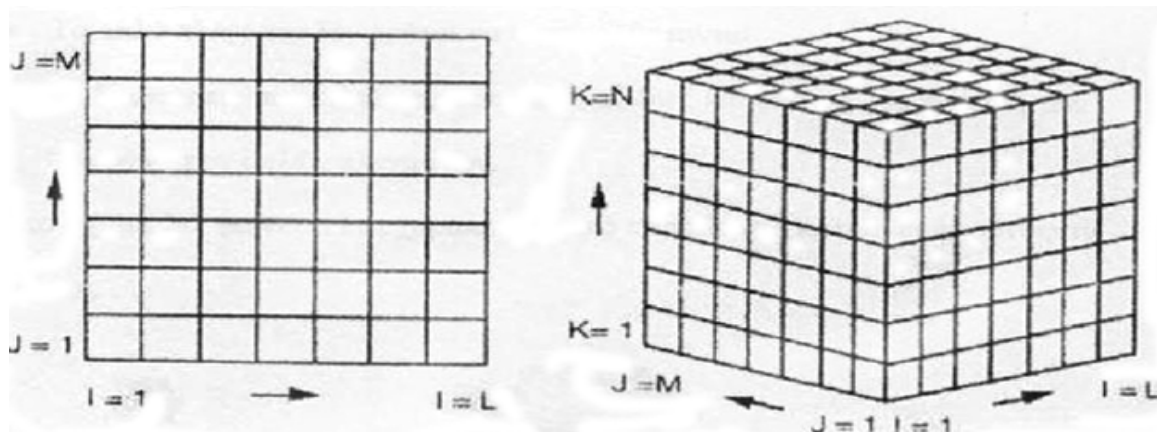
Πριν από την επεξεργασία στο FLUENT είναι απαραίτητη η δημιουργία του γεωμετρικού μοντέλου του προβλήματος και στη συνέχεια η «πλεγματοποίηση» του με τέτοιο τρόπο ώστε να διευκολύνεται η υπολογιστική εργασία του υπολογιστικού προγράμματος. Αυτή η δουλειά μπορεί να γίνει με τη βοήθεια ποικίλων πακέτων, στην περίπτωσή μας προτιμήθηκε το GAMBIT. Η επιτυχία των υπολογισμών στις ανωστικές αντιδρώσες ροές εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το πλέγμα που έχουμε δημιουργήσει.

Απ' τη στιγμή που η τύρβη παίζει κυρίαρχο ρόλο στη μεταφορά μέσης ορμής και άλλων βαθμωτών μεγεθών στην πλειοψηφία των πολύπλοκων ροών, πρέπει να εξασφαλιστεί ότι η τύρβη λύνεται κατάλληλα, με τη σωστή ακρίβεια. Εξαιτίας της δυνατής αλληλεπίδρασης της μέσης ροής με την τύρβη, τα αριθμητικά αποτελέσματα για τις τυρβώδεις ροές τείνουν να είναι πιο επιρρεπή στην εξάρτηση από το πλέγμα απ' ό,τι για τις στρωτές ροές. Γι' αυτό το λόγο, είναι προτιμότερο το πλέγμα να είναι πιο πυκνό στις περιοχές που η μέση ροή αλλάζει απότομα και υπάρχουν διατμητικά στρώματα με υψηλό μέσο ρυθμό παραμόρφωσης.

1.2.9.2 Απλό και σύνθετο δομημένο πλέγμα

Το FLUENT χρησιμοποιεί δομημένη (structured) τοπολογία πλέγματος. Τα πλέγματα αυτά χρησιμοποιούν τον «όγκο ελέγχου» για να διακριτοποιήσουν το ροϊκό πεδίο. Ο χαρακτηρισμός «δομημένος» αφορά τη διάταξη των κελιών σε γραμμές, στήλες και στρώματα. Η θέση κάθε κελιού είναι μοναδικά ορισμένη από μια τριάδα ακεραίων (i, j, k) που αντιστοιχούν στη γραμμή, στήλη και στρώμα του συγκεκριμένου κελιού. Το απλό δομημένο πλέγμα αποτελείται από διάταξη κελιών που σχηματίζουν ένα «υπολογιστικό τετράγωνο» για δισδιάστατα μοντέλα και έναν «υπολογιστικό κύβο» για τρισδιάστατα.

Στη συνέχεια φαίνονται ένα δισδιάστατο (2D) και ένα τρισδιάστατο (3D) πλέγμα με $L \times M$ και $L \times M \times N$ κελιά αντίστοιχα.



Σχήμα 1.2.3: 2D και 3D πλέγμα

Σε περίπλοκα ροϊκά προβλήματα, η κατασκευή του ανωτέρω απλού δομημένου πλέγματος μπορεί να είναι δύσκολη. Σε αυτή την περίπτωση μπορούμε να χωρίσουμε το πεδίο με τέτοιο τρόπο ώστε στο κάθε τμήμα που θα προκύψει να είναι δυνατή η κατασκευή απλού πλέγματος. Στη συνέχεια, ενώνοντας τα επιμέρους απλά πλέγματα προκύπτει το λεγόμενο σύνθετο (multidomain) πλέγμα.

Ωστόσο στη διαδικασία αυτή πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν δύο περιορισμοί:

- Τα απλά πλέγματα δεν πρέπει να υπερκαλύπτονται.
- Οι διαστάσεις των κελιών πρέπει να είναι ίδιες και από τις δύο πλευρές των «ραφών» των απλών πλεγμάτων.

1.2.10 Συστήματα Συντεταγμένων

Χρησιμοποιούνται τρία συστήματα συντεταγμένων:

- Το καρτεσιανό, όπου οι διευθύνσεις του πλέγματος i, j, k συμπίπτουν με τους x, y, z άξονες του καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων
- Το κυλινδρικό, όπου οι διευθύνσεις i, j, k αντιστοιχούν στις ρ, θ, z συντεταγμένες, όπου ρ η απόσταση από τον άξονα z , θ η γωνία από την οριζόντιο και z η προβολή του σημείου στον z .
- Το προσαρμοσμένο στη γεωμετρία (body-fitted ή BFC), όπου οι διευθύνσεις i, j, k καμπυλώνονται στο χώρο ακολουθώντας το σχήμα του πλέγματος.

Γενικά στα συστήματα BFC οι γραμμές του πλέγματος της ίδιας κατεύθυνσης δεν είναι παράλληλες και αντίστοιχα οι γραμμές διαφορετικών κατευθύνσεων δεν είναι κάθετες. Μαθηματικά, το BFC σύστημα μπορεί να θεωρηθεί μετασχηματισμός συντεταγμένων από το φυσικό στον υπολογιστικό χώρο.

Ορισμένα ροϊκά προβλήματα παρουσιάζουν ιδιαιτερότητες. Αν τα στρώματα (i, j) κατά μήκος του άξονα k είναι πανομοιότυπα μπορούμε με ικανοποιητική προσέγγιση να επιλύσουμε το πρόβλημα για ένα μόνο στρώμα, αυτό με $k=1$, έτσι το αρχικά τρισδιάστατο πρόβλημα μετασχηματίζεται σε δισδιάστατο. Έτσι, αν το πρόβλημα είναι δισδιάστατο, ο όγκος των πράξεων που πρέπει να γίνουν ώστε να λυθούν οι ροϊκές εξισώσεις είναι σημαντικά μικρότερος της τρισδιάστατης θεώρησης, πράγμα το οποίο είναι σημαντικό από πλευράς υπολογιστικού χρόνου.

1.3 ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΔΙΑΦΟΡΩΝ

1.3.1 Εισαγωγή

Πολλά προβλήματα ρευστομηχανικής, αντοχής κ.α. διατυπώνονται με διαφορικές εξισώσεις. Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών υπήρξε η πρώτη αριθμητική διαδικασία που χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση προβλημάτων αντοχής κατασκευών. Η πρώτη εφαρμογή σε προβλήματα λεπτότοιχων ελασμάτων χρονολογείται από το 1921, όταν ο Hencky επίλυσε τις εξισώσεις ορθογωνίων ελασμάτων στο πεδίο των μεγάλων μετατοπίσεων.

Η σημασία της μεθόδου είχε αναγνωρισθεί από τότε αλλά μόνο με την ανάπτυξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών κατά την μεταπολεμική περίοδο άρχισε να βρίσκει ευρεία εφαρμογή.

Οι λύσεις που αποκτώνται δεν έχουν την απόλυτη ακρίβεια των αναλυτικών λύσεων, καθώς σύμφωνα με την βασική παραδοχή της μεθόδου, η ροή που είναι ένα συνεχές μέσο, αντικαθίσταται από ένα αντίστοιχο διακριτό, στους κόμβους του οποίου επιλύονται οι εξισώσεις ισορροπίας. Η ακρίβεια της αριθμητικής λύσης εξαρτάται λοιπόν από το κατά πόσο η προσομοίωση προσεγγίζει τις αναλυτικές εξισώσεις ισορροπίας.

Σημαντικοί παράγοντες που επηρεάζουν την ακρίβεια της μεθόδου είναι η συμπεριφορά του υλικού και η πύκνωση των κόμβων. Όταν χρησιμοποιούνται αριθμητικές μέθοδοι οι παράγωγοι εκφράζονται με σχέσεις διαφορών των συναρτήσεων σε καθορισμένα διαστήματα (στο χώρο ή και στο χρόνο). Σε κάθε κόμβο η εξίσωση ισορροπίας εκφράζεται σε μορφή πεπερασμένων διαφορών. Σε συνδυασμό με τις οριακές συνθήκες, ορίζεται σύστημα εξισώσεων για τις επί μέρους λύσεις της εξίσωσης ισορροπίας στους κόμβους. Η αντιστροφή του συστήματος των εξισώσεων ισορροπίας γίνεται εύκολα με έτοιμες διαδικασίες σε μικρο-υπολογιστές. Η πύκνωση των κόμβων εξαρτάται από τη σύγκλιση του αποτελέσματος που έχουμε σε σχέση με το επιθυμητό.

Απ' το σύνολο των αριθμητικών μεθόδων που υπάρχουν, εκείνες οι οποίες χρησιμοποιούν προσεγγίσεις πεπερασμένων διαφορών είναι οι πλέον απλές,

χρησιμοποιούνται συχνότερα και είναι οι γενικά εύκολο να εφαρμοσθούν σε σχέση με άλλες μεθόδους. Η τεχνική των πεπερασμένων διαφορών απαιτεί την αριθμητική προσέγγιση (κεντρικές ή προς τα εμπρός ή προς τα πίσω διαφορές πρώτης, δεύτερης ή ανωτέρας τάξης) των μερικών παραγώγων των εξισώσεων που ελέγχουν τη ροή. Το μεγαλύτερο μειονέκτημα της τεχνικής των πεπερασμένων διαφορών είναι η μη ικανοποιητική ανάδειξη των λύσεων για περιοχές με έντονη μεταβολή της γεωμετρίας σε σταθερή ή μη ροή. Τα πράγματα δυσκολεύουν όταν απαιτείται η χρήση πυκνών δικτύων και επακριβής κάλυψη των οριακών συνθηκών.

1.3.2. Χρήση πεπερασμένων διαφορών

Όπως αναφέρεται και σε προηγούμενες ενότητες του κεφαλαίου, η αναλυτική λύση των εξισώσεων ροής είναι δύσκολη και τις περισσότερες φορές αδύνατη. Η αριθμητική λύση είναι δυνατή αλλά απαιτεί την προσέγγιση του συνεχούς χωροχρονικού πεδίου με τη διακριτοποιημένη αναπαράστασή του.

Τα παρακάτω αποτελούν βασικές αρχές της διαδικασίας διακριτοποίησης:

- Το συνεχές χωροχρονικό πεδίο ορισμού του προβλήματος ροής καλύπτεται από το πλέγμα επίλυσης, το οποίο στην περίπτωσή μας φαίνεται σε επόμενο κεφάλαιο και αντικαθίσταται από ένα αριθμό διακριτών σημείων (σημεία πλέγματος).
- Η συνεχής συνάρτηση (εξαρτημένη μεταβλητή) αναπαρίσταται μ' έναν αριθμό διακριτών τιμών στα σημεία του πλέγματος. Οι μερικές παράγωγοι προσεγγίζονται με πεπερασμένες διαφορές των διακριτών τιμών.
- Οι εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών προκύπτουν από τις εξισώσεις μερικών παραγώγων όταν κάθε παράγωγος, που εμφανίζεται σε αυτές, αντικατασταθεί από κάποια έκφραση πεπερασμένων διαφορών.
- Η εξίσωση μερικών παραγώγων μετατρέπεται, τότε, σε ένα σύνολο αλγεβρικών εξισώσεων πεπερασμένων διαφορών, που μπορούν να λυθούν αριθμητικά.
- Η επίλυση του αλγεβρικού συστήματος επιτρέπει τον υπολογισμό των εξαρτημένων μεταβλητών του προβλήματος (θερμοκρασίες και συνιστώσες της ταχύτητας) στα σημεία του πλέγματος.

Οι πρώτες και δεύτερες παράγωγοι της συνάρτησης $f(x)$ ορίζονται ως μεταβολές της f ή των παραγώγων της ως προς x και εκφράζονται ως εξής:

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta f}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (1.3.1a)$$

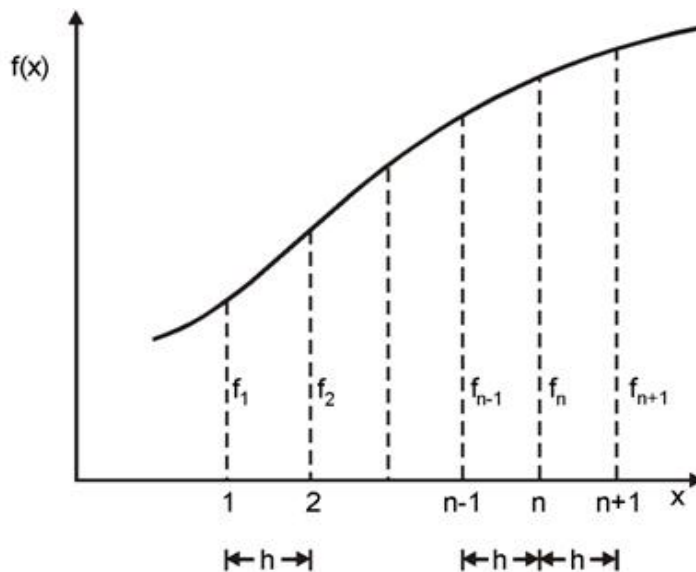
$$\frac{d^2f}{dx^2} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta}{\Delta x} \left[\frac{\Delta f}{\Delta x} \right] = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} - \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x}}{\Delta x} \quad (1.3.1\beta)$$

Όπως φαίνεται από το Σχήμα 1.3.1, όταν το διάστημα Δx δεν πλησιάζει την μηδενική τιμή αλλά διατηρεί πεπερασμένη τιμή h οι παράγωγοι στο σημείο $x = x_n$ δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\left[\frac{\Delta f}{\Delta x} \right]_n = \frac{f_{n+1} - f_n}{h} \quad \text{ή} \quad \frac{f_n - f_{n-1}}{h} \quad (1.3.2\alpha)$$

$$\left[\frac{\Delta^2 f}{\Delta x^2} \right]_n = \frac{\frac{(f_{n+1} - f_n)}{h} - \frac{(f_n - f_{n-1})}{h}}{h} = \frac{f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}}{h^2} \quad (1.3.2\alpha)$$

Οι διαφορές υψηλότερης τάξης δίνονται από ανάλογες σχέσεις. Το σύμβολο Δ καλείται τελεστής διαφορών. Η πρώτη διαφορά Δf είναι $(f_n - f_{n-1})$ και η δεύτερη διαφορά $\Delta^2 f$ είναι $(f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1})$. Οι παράγωγοι $\frac{df}{dx}$, $\frac{d^2f}{dx^2}$ κλπ παριστάνονται με αντίστοιχες πεπερασμένες διαφορές Δf , $\Delta^2 f$ κλπ διαιρούμενες με h , h^2 κλπ. Κάνοντας χρήση διαφορετικών κόμβων, οι πεπερασμένες διαφορές εκφράζονται κατά τρεις διαφορετικούς τρόπους.



Σχήμα 1.3.1: Διατύπωση πεπερασμένων διαφορών

1.3.2.1 Προηγούμενες διαφορές

Οι προηγούμενες διαφορές οποιασδήποτε τάξης εκφράζονται με τιμές στο σημείο i και σε σημεία προηγούμενα αυτού, δηλαδή σε σημεία με τετμημένη μικρότερη της τετμημένης f_n . Έχουμε:

$$\Delta f_n = f_n - f_{n-1} \quad \Delta^2 f_n = f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2} \quad (1.3.3\alpha-\beta)$$

Η γενική σχέση των προηγούμενων διαφορών δίνεται σε πινακοποιημένη μορφή στο Σχήμα 1.3.2. Στο αριστερό σκέλος του σχήματος δίνεται σχηματικά η διαδικασία αναγωγής σε διαφορές υψηλότερης τάξης. Για παράδειγμα, η σχέση,

$$\Delta^2 f_n = \Delta f_n - \Delta f_{n-1} \quad (1.3.4)$$

παριστάνεται με τις δύο γραμμές που συνδέουν το $\Delta^2 f_n$ με το Δf_n και το Δf_{n-1} , τα οποία με τη σειρά τους συνδέονται με τα f_n, f_{n-1} και f_{n-1}, f_{n-2} αντίστοιχα και έτσι έχουμε:

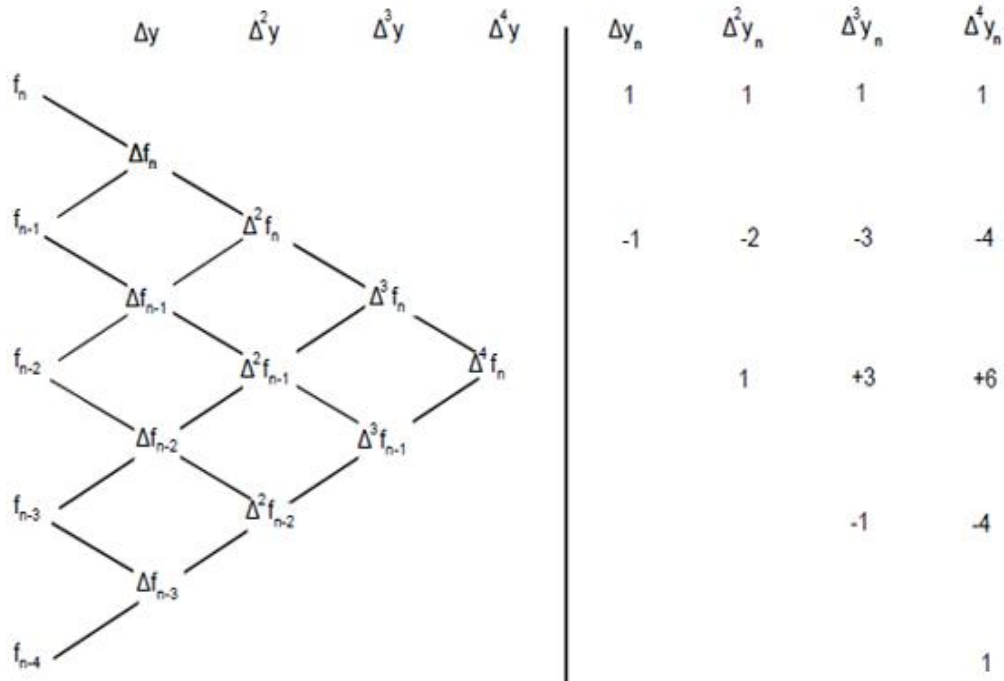
$$\Delta f_n = f_n - f_{n-1} \quad \Delta f_{n-1} = f_{n-1} - f_{n-2} \quad (1.3.5\alpha-\beta)$$

Συνεπώς,

$$\Delta^2 f_n = f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2} \quad (1.3.6)$$

Στο δεξιό σκέλος του Σχήματος 1.3.2 οι διαφορές $\Delta f_n, \Delta^2 f_n$ κλπ εκφράζονται ως άθροισμα των γινομένων των συντελεστών κάτω από αυτές τις διαφορές και τις αντίστοιχες συντεταγμένες f_n, f_{n-1} κλπ. Έτσι,

$$\Delta^4 f_n = f_n - 4f_{n-1} + 6f_{n-2} - 4f_{n-3} + f_{n-4} \quad (1.3.7)$$



Σχήμα 1.3.2: Προηγούμενες διαφορές.

1.3.2.2 Μέσες και επόμενες διαφορές

Οι τετμημένες των σημείων που χρησιμοποιούνται στις επόμενες διαφορές είναι μεγαλύτερες του κόμβου αναφοράς, ενώ οι μέσες διαφορές κάνουν χρήση συμμετρικά διατεταγμένων σημείων.

Η ποσότητα $\Delta f_{n+\frac{2}{3}}$ είναι η διαφορά σε σημείο που ισαπέχει από τους κόμβους $x = x_{n+1}$ και $x = x_{n+2}$. Γενικά οι συντελεστές των τεταγμένων της n-οστής διαφοράς είναι οι συντελεστές του διωνύμου $(a-b)^n$ για τις επόμενες και τις προηγούμενες διαφορές και για τις μέσες διαφορές άρτιας τάξης. Οι περιττές μέσες διαφορές (n) ανακτώνται από τη διαφορά (με διάστημα ίσο με 2h) της (n-1)-οστής διαφοράς των σημείων f_{n+1} και f_{n-1} . Οι τεταγμένες των διαφορών τρίτης τάξης είναι συνεπώς:

$$\left[\frac{\Delta^3 y}{\Delta x^3} \right]_n = \frac{\frac{\Delta^2 y_{n+1}}{h^2} - \frac{\Delta^2 y_{n-1}}{h^2}}{2h} = \frac{y_{n+2} - 2y_{n+1} + 2y_{n-1} - y_{n-2}}{2h^3} \quad (1.3.8)$$

1.4 ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

1.4.1 Εισαγωγή

Η ραγδαία τεχνολογική ανάπτυξη στον τομέα των ηλεκτρονικών υπολογιστών τα τελευταία 30 χρόνια, έδωσε τη δυνατότητα εκτός των άλλων για την αναλυτική μελέτη προβλημάτων και συστημάτων που μέχρι πρότινος ήταν αδύνατον να επιλυθούν με αναλυτικό τρόπο.

Η επίλυση και εύρεση των αγνώστων ποσοτήτων, που υπάρχουν σε έναν εξεταζόμενο χώρο, βασίζεται σε αριθμητικές μεθόδους, οι οποίες δίνουν συνήθως μια προσεγγιστική λύση των ζητούμενων αυτών ποσοτήτων. Αν και οι περισσότερες από τις αριθμητικές μεθόδους αναπτύχθηκαν πολύ πριν τους ηλεκτρονικούς υπολογιστές, μόνο τα τελευταία χρόνια μπόρεσαν να αξιοποιηθούν πλήρως.

Μια από τις μεθόδους αυτές είναι και η Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών, που βρίσκει ευρεία εφαρμογή σε προβλήματα υπολογιστικής ρευστομηχανικής και μεταφοράς θερμότητας.

Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων είναι μια αριθμητική μέθοδος (δηλ. μέθοδος υπολογισμού με χρήση H/Y) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων μερικών διαφορικών εξισώσεων.

Η αναλυτική λύση των εξισώσεων με τις οποίες περιγράφονται τα διάφορα τεχνικά προβλήματα είναι δυνατή μόνο σε ειδικές περιπτώσεις, όπου οι καταπονήσεις και τα γεωμετρικά σχήματα είναι πάρα πολύ απλά. Όμως, υπήρχε η ανάγκη να λυθούν και πιο σύνθετα προβλήματα και γι' αυτό το λόγο αναπτύχθηκαν διάφορες προσεγγιστικές μέθοδοι.

Μία τέτοια μέθοδος είναι και η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων. Αυτή η μέθοδος είναι μεν προσεγγιστική, αλλά μπορεί να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα και έχει το πλεονέκτημα ότι μπορεί να εφαρμοστεί σε όλα τα προβλήματα. Το μειονέκτημά της είναι οι αυξημένες απαιτήσεις σε υπολογιστική ισχύ, ιδίως όταν εφαρμόζεται σε σύνθετα μοντέλα. Αυτό όμως το μειονέκτημα ξεπεράστηκε τα τελευταία χρόνια χάρη στη ραγδαία ανάπτυξη των υπολογιστών. Η επιτυχία αυτής της μεθόδου ήταν τόσο μεγάλη, που ακόμα και σήμερα χρησιμοποιείται στην έρευνα και στην βιομηχανία για τον υπολογισμό και τη μελέτη διάφορων κατασκευών.

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων είναι μία εξέλιξη των μητρικών μεθόδων αριθμητικής επίλυσης διαφορικών εξισώσεων και έγινε από διάφορους σπουδαίους επιστήμονες όπως ο Ιωάννης Αργύρης, ο Clough, ο Ritz και άλλοι.

1.4.2 Απαιτούμενα βήματα

Για να εφαρμοστεί η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων απαιτούνται τα εξής βήματα:

1. Εισάγεται η γεωμετρία της κατασκευής σε ένα πρόγραμμα CAD ή στο GAMBIT που διαθέτει το FLUENT.
2. Χωρίζεται το μοντέλο σε πεπερασμένα στοιχεία και αφού ετοιμαστεί το πλέγμα επιλέγεται το είδος της επίλυσης και εισάγονται τα επιπλέον δεδομένα που απαιτούνται. Παραδείγματος χάριν, αν επιλεγεί να λυθεί το μοντέλο σε στατική καταπόνηση θα πρέπει να δοθούν τα δεδομένα για τις δυνάμεις και τις στηρίξεις. Αυτή η διαδικασία γίνεται με προγράμματα που ονομάζονται pre processor
3. Όταν καθοριστούν τα δεδομένα για επίλυση, εισάγονται σε ένα πρόγραμμα το οποίο θα κάνει την επίλυση του προβλήματος. Τέτοιου είδους προγράμματα λέγονται solver και χρησιμοποιούν για τις επιλύσεις αριθμητικές μεθόδους (πχ. το FLUENT)
4. Όταν τελειώσει η επίλυση τα αποτελέσματα πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένα πρόγραμμα, που αποκαλείται post processor, για να μπορέσει ο μελετητής να δει τα αποτελέσματα.

Κατά την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων ο υπολογιστικός χώρος στον οποίο είναι να επιλύσουμε το πρόβλημα, υποδιαιρείται σε πάρα πολύ μικρές αλληλοσυνδεδεμένες περιοχές ή στοιχεία (τριγωνικά ή τετράπλευρα ή άλλα) για δισδιάστατα προβλήματα (2D) και τετράεδρα ή κυβοειδή ή άλλα για τρισδιάστατα προβλήματα (3D), ώστε οι εξισώσεις της ροής να εφαρμοσθούν σε καθένα ξεχωριστό στοιχείο (ή κόμβο) του χώρου υπολογισμού και όταν γίνει η συνάθροιση τους θα ληφθεί η λύση για όλο τον υπολογιστικό χώρο. Αυτή η τεχνική είναι η καταλληλότερη για επίλυση προβλημάτων μη ομαλής γεωμετρίας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2°

ΤΥΡΒΗ ΚΑΙ ΚΑΥΣΗ

2.1 ΚΑΥΣΗ

Η καύση χαρακτηρίζεται από μια σημαντική αλληλοσυσχέτιση μεταξύ ρευστομηχανικής, χημικών αντιδράσεων και μεταφοράς θερμότητας και μάζας. Όλες αυτές οι διεργασίες περιγράφονται με τις εξισώσεις διατήρησης (conservation equations).

Η επίδραση των χημικών και θερμικών διεργασιών στο πεδίο ροής, προέρχεται από την μεταβολή της πυκνότητας. Η πυκνότητα μεταβάλλεται λόγω των μεταβολών της θερμότητας αλλά και του μέσου μοριακού βάρους.

Οι βαθμωτές εξισώσεις οι οποίες χρησιμοποιούνται για την μεταφορά των διαφόρων συστατικών καθώς και η εξίσωση της ενθαλπίας αποτελούν ένα δύσκολο διαζώντως σύστημα εξισώσεων το οποίο πρέπει να επιλυθεί, λόγω της εξάρτησης των ρυθμών των χημικών αντιδράσεων από την θερμοκρασία.

Στις περιπτώσεις που η ροή είναι τυρβώδης, το οποίο συμβαίνει σχεδόν πάντα, τα πράγματα είναι πιο πολύπλοκα, καθώς όλες οι μεταβλητές διακυμαίνονται στον χρόνο. Αυτές οι διακυμάνσεις της τύρβης έχουν επίδραση στις (βαθμωτές) εξισώσεις μεταφοράς, τόσο τους όρους της μεταφοράς όσο και τους όρους των πηγών/απαγωγών (source terms).

Σύμφωνα με τα παραπάνω, φαίνεται ότι για να επιλυθεί ένα πρόβλημα καύσης ο αριθμός των εξισώσεων μεταφοράς θα πρέπει να μειωθεί και η τύρβη εφόσον δεν μπορεί να λυθεί απευθείας θα πρέπει να μοντελοποιηθεί. Αυτή η μείωση του αριθμού των εξισώσεων μεταφοράς των συστατικών με την ταυτόχρονη επίδραση της τύρβης, στους όρους πηγής/απαγωγής αυτών των εξισώσεων, επιτυγχάνεται με μοντέλα καύσης.

Για την επίλυση των τυρβωδών εξισώσεων μεταφοράς, χρησιμοποιούνται μοντέλα τύρβης που μοιάζουν στις περισσότερες περιπτώσεις με τα μοντέλα τύρβης για ισόθερμες ροές.

2.2 ΤΥΡΒΗ

Η τυρβώδης ροή έχει μια διαφορετική συμπεριφορά, σε σχέση με την στρωτή ροή, τόσο στο χώρο όσο και στο χρόνο, λόγω της διακύμανσης όλων

των μεταβλητών οι οποίες έχουν μια στοχαστική συμπεριφορά. Οι διακυμάνσεις στη τυρβώδη ροή δημιουργούνται λόγω των στρόβιλων. Αυτοί οι στρόβιλοι αναδεύουν την ροή και αυξάνουν με αυτό τον τρόπο τη μεταφορά της μάζας των συστατικών του ρέοντος ρευστού.

Οι παραπάνω δίνες (στρόβιλοι), τις περισσότερες φορές δεν έχουν ένα συγκεκριμένο μέγεθος ή χρονική προτίμηση στην κατανομή τους. Στη τυρβώδη ροή υπάρχει μια ποικιλία από μεγάλες και μικρές δίνες, όπου γενικότερα το μέγεθος των πιο μεγάλων δινών εξαρτάται από την γεωμετρία της ροής. Ακόμα η ενέργεια η οποία χρησιμοποιείται για την παραγωγή αυτών των δινών αφαιρείται από την μέση ροή. Οι μικρότερες δίνες δεν αποκτούν την ενέργειά τους κατευθείαν από την μέση ροή αλλά παίρνουν ενέργεια από μεγαλύτερες δίνες, που συνεχώς διασπώνται σε μικρότερες και έτσι αυτές οι μικρότερες δίνες διασπώνται σε ακόμα μικρότερες μέχρι να φθάσουν στη μικρότερη κλίμακα (εκφυλισμού) της τυρβώδους κίνησης (cascade theory). Αυτή η μικρότερη κλίμακα ονομάζεται κλίμακα Kolmogorov.

2.3 ΤΥΡΒΩΔΗΣ ΚΑΥΣΗ

Στη τυρβώδη καύση, η ύπαρξη ενός μεγάλου εύρους χρονικών και χωρικών βαθμίδων αλλά και η μεγάλη αλληλεπίδραση μεταξύ των ρυθμών των χημικών αντιδράσεων της απελευθερωμένης θερμότητας και της τύρβης περιπλέκει την περιγραφή των τυρβωδών φλογών. Εξαιτίας αυτής της πολυπλοκότητας, τα μοντέλα για τις τυρβώδεις φλόγες είναι λιγότερο εξελιγμένα από αυτά για τις στρωτές ροές και συνήθως βασίζονται στην απλούστευση των πραγματικών φυσικών διαδικασιών.

Η αλληλεπίδραση μεταξύ της χημείας και της τύρβης μπορεί να διαχωριστεί βάσει δύο κριτηρίων: φλόγα προαναμεμειγμένη (premixed) ή διάχυσης (non-premixed) (όπως έχουμε στην περίπτωση μας), αργή ή γρήγορη χημεία (Peters, 1992).

Το πρώτο κριτήριο είναι σχετικό με τις εξής εφαρμογές: η καύση σε μεγάλους φούρνους και σε στρόβιλομηχανές είναι καύση διάχυσης ενώ σε σύγχρονες στρόβιλομηχανές φυσικού αερίου και βενζινομηχανές η καύση είναι προαναμεμειγμένη.

Η αργή χημεία, γενικά, δεν παρουσιάζει ιδιαίτερα πρακτικό ενδιαφέρον. Παρά ταύτα σε περιοχές της φλόγας όπου η χημεία είναι αργή, σε σχέση με τις φυσικές διεργασίες μεταφοράς και διάχυσης, παρατηρούνται φαινόμενα απόσβεσης καθώς επίσης και δημιουργία και εξαφάνιση των ρύπων. Η καύση με γρήγορη χημεία είναι παρούσα σε όλες τις προαναφερθείσες εφαρμογές. Οι καυστήρες στις παραπάνω περιπτώσεις σχεδιάζονται έτσι ώστε να εξασφαλίζουν μια ολοκληρωμένη και σταθερή καύση, δηλαδή, μια κατάσταση η οποία απαιτεί μικρές κλίμακες του χρόνου αντίδρασης.

2.4 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΚΑΥΣΗΣ

2.4.1 Σκοπός τη μοντελοποίησης της καύσης

- Η προσομοίωση των διεργασιών καύσης, καθώς και η ανάπτυξη και εξέλιξη υπολογιστικών δυνατοτήτων για τη μελέτη της συμπεριφοράς συστημάτων καύσης υπό διαφορετικές συνθήκες.
- Η κατανόηση και ερμηνεία των φαινομένων της καύσης.
- Η όσο το δυνατόν αντικατάσταση δύσκολων, δαπανηρών ή και χρονοβόρων πειραμάτων καύσης.
- Η προσφορά πληροφοριών, παρατηρήσεων και καθοδήγηση στον σχεδιασμό πειραμάτων και στα συστήματα καύσης.
- Η διερεύνηση της επίδρασης διαφόρων παραμέτρων στις διεργασίες, καύσης μέσω διεξαγωγής παραμετρικών σπουδών.

2.4.2 Εφαρμογές της μοντελοποίησης της καύσης

Μερικές από τις συνήθεις εφαρμογές της μοντελοποίησης της καύσης είναι οι παρακάτω:

- Στην παραγωγή ενέργειας σε πάρα πολλούς τομείς όπως:
Καύση άνθρακα σε σταθμούς παραγωγής
Καύση υγρών καυσίμων σε Μ.Ε.Κ.
Καύση φυσικού αερίου
Καύση στερεών καυσίμων σε πυραυλοκινητήρες
- Στην βιομηχανία και συγκεκριμένα στην βιομηχανική παραγωγή όπως:
παραγωγή χάλυβα, γυαλιού, κεραμιών, τσιμέντου, πλαστικών κ.τ.λ.
- Πρόληψη αλλά και μελέτη πυρκαγιών καθώς και πυρασφάλεια
- Διερεύνηση και έλεγχος επιπτώσεων της καύσης στο περιβάλλον όπως για παράδειγμα:
 - Σχηματισμό ρυπαντών όπως NO_x, SO_x, CO
 - Σχηματισμό σωματιδίων άνθρακα
 - Μέθοδοι ελέγχου σύνθεσης και θερμοκρασίας των ρύπων που εκπέμπονται από τις μηχανές

2.5 ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗ ΤΩΝ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΚΑΥΣΗΣ

Η ταξινόμηση των προβλημάτων γίνεται λαμβάνοντας υπόψη τη χρονική και χωρική εξάρτηση των μεταβλητών και των παραμέτρων, της αρχικής

κατάστασης των αντιδράσεων, των συνθηκών της ροής, τη φάση των αντιδράσεων, την τοπολογία της αντίδρασης, το ρυθμό της αντίδρασης, τη φυσική ή εξαναγκασμένη μεταφορά θερμότητας, το βαθμό συμπιεστότητας της ροής και την ταχύτητα του κύματος καύσης.

Παρακάτω παρουσιάζονται διάφορες ταξινομήσεις των προβλημάτων της καύσης σύμφωνα με τα παραπάνω που αναφέρθηκαν:

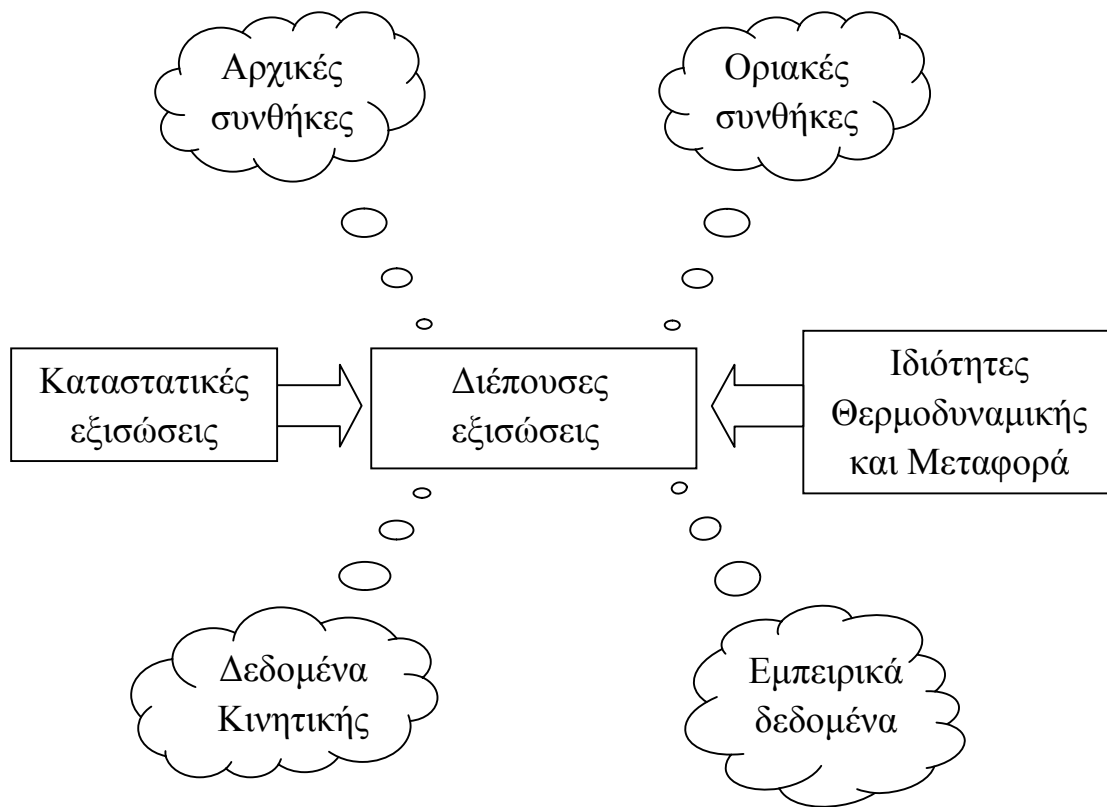
Συνθήκη της καύσης:

- § Χρονική εξάρτηση
- § Χωρική εξάρτηση
- § Κατάσταση ανάμειξης των αρχικών αντιδρώντων
- § Συνθήκες ροής
- § Φάσεις των αντιδρώντων
- § Τυπολογία των αντιδρώντων
- § Ρυθμός αντίδρασης
- § Κατάσταση μετάδοσης θερμότητας
- § Επίδραση συμπιεστότητας
- § Ταχύτητα του κύματος καύσης

Ταξινόμηση:

- § Μόνιμη, μη μόνιμη
- § Μονοδιάστατο (1D), δισδιάστατο (2D), τρισδιάστατο (3D)
- § Μη προαναμεμιγμένη καύση (Non-premixed combustion)
- § Στρωτή (laminar), τυρβώδης (Turbulent)
- § Μονοφασικό (single-phase), πολυφασικό (multi-phase)
- § Ομοιογενή (homogenous), ετερογενή (heterogeneous)
- § Χημική ισορροπία (equilibrium)
- § Πεπερασμένος ρυθμός αντίδρασης (finite reaction rate)
- § Φυσική (physical), Εξαναγκασμένη (forced)
- § Ασυμπίεστο (incompressible), Συμπιεστό (compressible)
- § Υποηχητική (deflagration)
- § Υπερηχητική (detonation)

Στο επόμενο σχήμα (σχήμα 2.1) ακολουθούν σχηματικά οι συνιστώσες για την δημιουργία ενός θεωρητικού μοντέλου.



Σχήμα 2.1: Συνιστώσες ενός θεωρητικού μοντέλου

2.6 ΕΙΣΩΣΕΙΣ ΠΟΥ ΔΙΕΠΟΥΝ ΤΙΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ ΚΑΥΣΗΣ

- Εξισώσεις Διατήρησης
 - ✓ Μάζας (συνέχειας)
 - ✓ Μοριακών (ή ατομικών συστατικών)
 - ✓ Ορμής
 - ✓ Ενέργειας
 - ✓ Γωνιακής στροφορμής
- Εξισώσεις Μεταφοράς

Αυτές οι εξισώσεις συνήθως απαιτούνται για τυρβώδη προβλήματα καύσης και μερικές από αυτές φαίνονται παρακάτω.

 - ✓ Τυρβώδους κινητική ενέργεια
 - ✓ Τυρβώδους σκεδασμού της τυρβώδους κινητικής ενέργεια
 - ✓ Τυρβωδών τάσεων Reynolds
 - ✓ Συνάρτηση πυκνότητας-πιθανότητας
 - ✓ Τυρβώδεις ροές μάζας

Μερικές υποθέσεις που συνήθως (αλλά όχι απαραίτητα) γίνονται στη μοντελοποίηση της καύσης:

- ✓ Το ρευστό που αντιδρά είναι συνεχές
- ✓ Απειροστά γρήγορη χημεία
- ✓ Μια απλού βήματος, πρόσθιας φοράς αντίδραση
- ✓ Ιδανικό αέριο
- ✓ Οι αριθμοί Lewis, Schmidt και Prandtl είναι ίσοι με 1
- ✓ Ίσες διαχυτότητες μάζας για όλα τα συστατικά
- ✓ Σταθερές θερμοχωρητικότητες της αέριας φάσης
- ✓ Οι αντιδρώσες στερεές επιφάνειες είναι ομοιογενείς
- ✓ Ομοιόμορφη ταχύτητα για χαμηλή ταχύτητα καύσης
- ✓ Το ολικό ιξώδες (Stokes) είναι αμελητέο
- ✓ Η παραγόμενη τύρβη από την καύση είναι αμελητέα

2.7 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΥΡΒΩΔΩΝ ΡΟΩΝ ΜΕ ΚΑΥΣΗ

Στη μοντελοποίηση της τυρβώδους καύσης συμπεριλαμβάνεται η προσομοίωση δύο επιδράσεων οι οποίες παίζουν σημαντικό ρόλο στις χημικώς αντιδρώσες ροές υψηλής ταχύτητας. Η πρώτη επίδραση είναι η τυρβώδης ενώ η δεύτερη αλληλοσυνδέεται με την πρώτη και είναι η επίδραση του ρυθμού χημικής αντίδρασης, όπου αυτή είναι παρούσα στις ροές που συνοδεύονται από καύση.

Οι Libby και Williams περιέγραψαν τον τρόπο με τον οποίο η παρουσία των διακυμάνσεων εισάγει επιπρόσθετους όρους στην έκφραση του μέσου ρυθμού αντίδρασης με αποτέλεσμα το πρόβλημα της αντίδρασης να γίνεται πιο πολύπλοκο οπότε και αυξάνεται ο αριθμός των εξισώσεων μεταφοράς και δυσκολεύοντας έτσι το πρόβλημα της μοντελοποίησης. Γι' αυτό το λόγο, για τη λύση αυτού του πολύπλοκου προβλήματος χρησιμοποιείται μια Συνάρτηση Πυκνότητας Πιθανότητας (αλλιώς ή ΣΠΠ ή PDF) για τη λήψη του μέσου ρυθμού αντίδρασης.

Για τον υπολογισμό της ΣΠΠ υπάρχουν δύο εναλλακτικές δυνατότητες. Η πρώτη είναι η παραγωγή και η λύση μιας εξίσωσης μεταφοράς για την εκτίμησή της, η οποία προσφέρει μια αξιόπιστη λύση στο πρόβλημα αλληλεπίδρασης τύρβης/ χημείας διότι στην εξίσωση μεταφοράς της ΣΠΠ, ο ρυθμός αντίδρασης εμφανίζεται επιπλέον σε μια μορφή που μπορεί να επιλυθεί εύκολα και έτσι δε χρειάζεται επιπλέον μοντελοποίηση, όπως κάποιοι άλλοι όροι οι οποίοι εμφανίζονται στην εξίσωση μεταφοράς και οι οποίοι έχουν σχέση με μοριακές διαδικασίες.

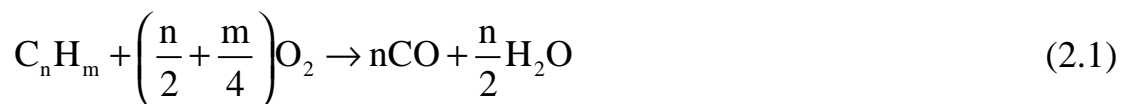
Η δεύτερη προσέγγιση, η εκ των προτέρων παραδοχή μιας καθορισμένης στατιστικής μορφής της ΣΠΠ, δεν είναι τόσο κατάλληλη επειδή δεν έχει όρια

και γιατί οι θερμοχημικές μεταβλητές περιορίζονται και οι αντιδρώσες ροές διαφέρουν κατά πολύ από την Γκουσιανή κατανομή (Gaussian distribution).

2.8 Η ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΤΗΣ ΚΑΥΣΗΣ ΚΑΙ Η ΔΟΜΗ ΤΗΣ ΦΛΟΓΑΣ

Το κυριότερο χαρακτηριστικό της διαδικασίας καύσης των υδρογονανθράκων είναι η παραγωγή μεγάλης ποικιλίας ρύπων. Κυριότερος ρύπος είναι το CO που συγκεντρώνεται στη χαμηλότερη ατμόσφαιρα και παράγεται κατεξοχήν από ανθρώπινες δραστηριότητες. Δεν είναι δυνατόν να αποφευχθεί ο σχηματισμός του γιατί σχηματίζεται ως ενδιάμεσο στοιχείο κατά την οξείδωση των καυσίμων που περιέχουν άνθρακα αλλά το μόνο που μπορούμε να κάνουμε είναι να το μετασχηματίσουμε σε CO₂.

Το CO σχηματίζεται από τον άνθρακα που περιέχεται στο καύσιμο και από το οξυγόνο του μέσου οξείδωσης σύμφωνα με τη σχέση:



Ενώ η αντίδραση του CO σε CO₂ οφείλεται στο παρακάτω στοιχειώδες βήμα:



Για τον πλήρη μετασχηματισμό του καυσίμου σε H₂O και σε CO₂ απαιτείται περίσσεια οξυγόνου για να μετατραπεί το CO σε CO₂ έτσι ώστε το σύστημα να έχει το χρόνο που χρειάζεται για να ολοκληρωθεί η αντίδραση. Αυτό σε συνδυασμό με το γεγονός ότι δεν επιτυγχάνουμε να έχουμε πλήρη καύση των υδρογονανθράκων κυρίως λόγω της πολυπλοκότητας των μηχανισμών σχηματισμού τους, οδηγούν στη μόλυνση του περιβάλλοντος.

Οι αντιδράσεις καύσης είναι ισχυρά εξώθερμες και παράγουν τύρβη. Από αυτό συμπεραίνουμε ότι απαιτείται προσεκτική μοντελοποίηση για τις αλληλεπιδράσεις τύρβης/ χημείας και καύσης/ τύρβης.

2.9 ΧΗΜΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΠΟΥ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΝΤΑΙ

Για να ξεπεράσουμε τη δυσκολία του προβλήματος της μοντελοποίησης των πολυβηματικών χημικών αντιδράσεων στην περίπτωση της τυρβώδους καύσης, χρησιμοποιούμε πολυδιάστατες ΣΠΠ (Συναρτήσεις Πυκνότητας Πιθανότητας) και επίσης για την περιγραφή της χημείας, κάνουμε χρήση συνολικών αντιδράσεων.

Επιπλέον, στις περιπτώσεις των προβλημάτων μοντελοποίησης καύσης ενός ή και δύο βημάτων χρησιμοποιούνται σφαιρικοί μηχανισμοί, όπου απαιτείται σαφής περιγραφή της απελευθέρωσης θερμότητας καθώς και της ταχύτητας μετάδοσης του μετώπου φλόγας.

Στην πρώτη περίπτωση, όταν δηλαδή χρησιμοποιείται η μέθοδος υπολογισμού του ρυθμού αντίδρασης ενός βήματος το βασικότερο μειονέκτημα είναι η υπερεκτίμηση της θερμοκρασίας αλλά και η αδυναμία πρόγνωσης σχηματισμού ενδιάμεσων και δευτερευόντων συστατικών.

Έτσι με την αντίδραση δύο βημάτων έχουμε βελτίωση χωρίς χρήση λεπτομερειών χημικής κινητικής. Από τη δομή των προαναμεμειγμένων φλογών διακρίνονται τρία μέρη χημικής αντίδρασης. Αρχική πυρόλυση υδρογονανθράκων, ταχεία κατανάλωση του καυσίμου και του οξυγόνου και αργές αντιδράσεις των ενδιάμεσων στοιχείων προς δημιουργία τελικών προϊόντων. Οι αντιδράσεις πυρόλυσης των υδρογονανθράκων εξαρτώνται από την χημική σύνθεση του υδρογονάνθρακα και τις φυσικές συνθήκες της φλόγας. Οι καταναλώσεις του καυσίμου είναι πολύ γρήγορες και θεωρούνται σαν το πρώτο βήμα της χημικής διαδικασίας, ενώ το δεύτερο βήμα παρίστανται με την αρχή μετατροπή ενός ενδιάμεσου παράγωγου κατά το πρώτο βήμα.

2.10 ΦΛΟΓΕΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

Στις φλόγες διάχυσης, η χημική τάση προς αντίδραση του καυσίμου θεωρείται τόσο μεγάλη σε σχέση με τις χρονικές βαθμίδες των διαδικασιών ανάμειξης των αντιδρώντων.

Αν θεωρήσουμε ξεχωριστή εισαγωγή καυσίμου και αέρα στο χώρο που γίνεται η καύση, όπως δηλαδή στην περίπτωση που εξετάζουμε στην παρούσα πτυχιακή εργασία, υποθέτοντας ότι όλοι οι ρυθμοί αντίδρασης είναι απερίοριστοι αυτό συνεπάγεται ένα απειροστό πάχος φλόγας. Άρα τα δύο αντιδρώντα ρεύματα, αέρας και καύσιμο, θα διαχωρίζονται από μια λεπτή επιφάνεια στην οποία τα αντιδρώντα καταστρέφονται και δημιουργούνται τα προϊόντα της αντίδρασης.

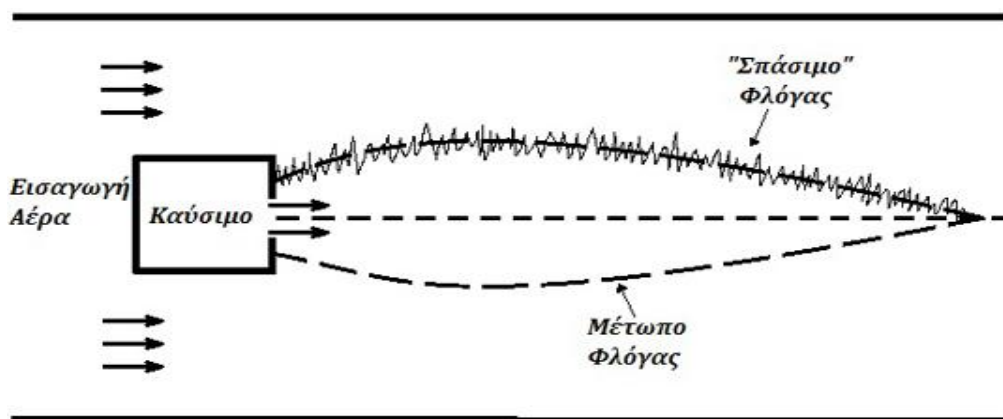
Στο παρακάτω σχήμα (Σχήμα 2.2) παρατηρούμε την παραπάνω ιδεατή τυρβώδη φλόγα διάχυσης. Το «ζάρωμα» του ομαλού περιγράμματος της φλόγας δείχνει τη διασπορά της επιφάνειας της φλόγας λόγω παρουσίας τυρβωδών δινών μεγάλης κλίμακας. Αυτή η σταθερή διακύμανση της επιφάνειας της φλόγας μπορεί να οδηγήσει κατά αυτό τον τρόπο σε κατανομές μέσω χρονικών τιμών, καθιστώντας υπαρκτή τη φαινομενική συνύπαρξη καυσίμου και οξυγόνου. Έτσι, οι χημικές αντιδράσεις περιορίζονται σε μια πάρα πολύ στενή ζώνη, που η εσωτερική δομή της είναι όμοια με εκείνη της στρωτής προαναμεμειγμένης φλόγας.

Στην περίπτωση των φλογών διάχυσης, όπως και στην περιπτώσή μας (μη προαναμεμιγμένης καύσης - non premixed combustion) το καύσιμο και το οξειδωτικό εισέρχονται στον θάλαμο καύσης χωριστά, καίγονται καθώς αναμειγνύονται και η ζώνη της φλόγας παρατηρείται στην περιοχή όπου το καύσιμο και το οξειδωτικό αναμειγνύονται σε στοιχειομετρική αναλογία.

Η ανάμειξη καθορίζει την θέση της φλόγας αλλά και όλη την διαδικασία της καύσης. Στο μπροστινό άκρο της φλόγας, η τιμή της θερμοκρασίας είναι σχεδόν η ίδια με την αδιαβατική θερμοκρασία της φλόγας.

Η ζώνη της φλόγας διαχωρίζει την εισροή του καυσίμου από αυτή του οξειδωτικού. Σε μία τυρβώδη φλόγα διάχυσης η ανάμειξη του καυσίμου με το οξειδωτικό περιγράφεται από το κλάσμα μίγματος, το οποίο είναι ένα βαθμωτό διατηρούμενο μέγεθος και το οποίο έχει την τιμή 1 στο στρώμα του καυσίμου και την τιμή 0 στο στρώμα του οξειδωτικού.

Οι ρυθμοί των χημικών αντιδράσεων έχουν μεγάλες τιμές στις περιοχές όπου το κλάσμα μείξης έχει την στοιχειομετρική τιμή του μεταξύ του φτωχού και του πλούσιου κλάσματος μίγματος. Κύριο χαρακτηριστικό των φλογών διάχυσης είναι ότι ο ρυθμός μείξης είναι πολύ αργός σε σχέση με το ρυθμό χημικής αντίδρασης με αποτέλεσμα η μείξη να ελέγχει τον ρυθμό καύσης.



Σχήμα 2.2: Φλόγα Διάχυσης

Σε αντίθεση με τις προαναμεμιγμένες φλόγες (premixed) που έχουν πολύ λεπτή ζώνη αντίδρασης, οι φλόγες διάχυσης έχουν μία πλατύτερη περιοχή όπου η σύσταση του μίγματος αλλάζει σημαντικά. Η αλλαγή αυτή οφείλεται κυρίως στη διάχυση των αντιδρώντων και προϊόντων, αφού η πραγματική αντίδραση φαίνεται να λαμβάνει χώρα σε μία λεπτή ζώνη. Υπό αυτές τις συνθήκες, η έννοια της ταχύτητας της φλόγας, που υπάρχει στις προαναμεμιγμένες φλόγες, δεν ισχύει στις φλόγες διάχυσης. Σε αυτές χρησιμοποιούνται συνήθως όροι, όπως ρυθμός καύσης καυσίμου ή ύψος φλόγας ή βαθμός σκέδασης του βαθμωτού μεγέθους (scalar dissipation).

Επίσης, μία πολύ σημαντική παράμετρος η οποία χαρακτηρίζει τις τυρβώδεις φλόγες διάχυσης, είναι η αναλογία του χρόνου Kolmogorov προς το χρόνο της χημείας. Αυτή η αναλογία είναι ο αντίστροφος αριθμός Karlovitz.

Αν η διαδικασία της καύσης είναι γρήγορη σε σύγκριση με το χρόνο Kolmogorov, μπορεί να θεωρηθεί φαινομενικά σταθερή. Αν όμως ο αριθμός Kolmogorov είναι της ίδιας τάξης ή και μικρότερος από το χρόνο της χημείας, τότε εμφανίζονται περιοχές όπου συμβαίνει ισχυρή ανάμειξη και αντίδραση. Όπως και στην προαναμεμειγμένη καύση η περιοχή αυτή ονομάζεται περιοχή κατανεμημένης (distributed) ζώνης αντίδρασης.

Μία μέθοδος που υπάρχει για τον υπολογισμό των θερμοχημικών δεδομένων της φλόγας, κάτω από την θεώρηση της ταχείας χημικής κινητικής, είναι εάν υποθέσουμε ότι το μείγμα έχει προχωρήσει σε πλήρη ισορροπία.

Για τις αδιαβατικές φλόγες η κατάσταση ισορροπίας εξαρτάται μόνο από τον Σχετικό Λόγο Καυσίμου-Αέρα (ΣΛΚΑ), Φ . Από την υπολογιστική άποψη το πρόβλημα διατυπώνεται με τέτοιο τρόπο ώστε να αποφεύγεται η χρήση των εξισώσεων μεταφοράς για κάθε ένα χημικό συστατικό. Έτσι, αντί για αυτό, λύνουμε για μια αυστηρώς διατηρούμενη μεταβλητή που καθορίζει την τοπική αναλογία καυσίμου/ αέρα, που παράγεται από τη διαδικασία ανάμειξης μόνο και έπειτα χρησιμοποιούμε τις πληροφορίες της χημικής ισορροπίας ώστε να εξάγουμε την τοπική σύνθεση των καυσαερίων, την πυκνότητα, τη θερμοκρασία κλπ. Αυτή η προσέγγιση αναφέρεται σαν η περιγραφή ενός βαμθωτού (μονοδιάστατη ΣΠΠ).

Η βαθμωτή μεταβλητή ανάμειξης που απαιτείται για αυτούς του υπολογισμούς, καθορίζεται συναρτήσει των συγκεντρώσεων καυσίμου και οξειδωτικού και συνήθως αναφέρεται όπως είπαμε και παραπάνω σαν “κλάσμα μείγματος”.

Το κλάσμα μείγματος f καθορίζεται με την παρακάτω έκφραση:

$$f = \frac{Y - Y_A}{Y_F - Y_A} \quad (2.3)$$

Όπου f είναι μια περιορισμένη μεταβλητή, η οποία λαμβάνει τιμές από 0 έως 1, όπως αναφέραμε και παραπάνω. Η σχέση μεταξύ f και του τοπικού λόγου καυσίμου/αέρα (Λ.Κ.Α .ή Fuel Air Ratio, F.A.R.) και μεταξύ f και Σ.Λ.Κ.Α., Φ είναι:

$$F.A.R. = \frac{f}{1-f} \quad (2.4)$$

$$\Phi = \frac{f}{\text{F.A.R.}_{\text{stoich}}(1-f)} \quad (2.5)$$

Σε μία φλόγα διάχυσης πιθανό είναι να υπάρχουν περιοχές που η στιγμιαία σύνθεση και θερμοκρασία να μην δικαιολογούν συνθήκες κάτω από τις οποίες μπορεί να λάβει χώρα αντίδραση.

Στην περίπτωση που το καύσιμο και το οξειδωτικό συνυπάρχουν, μια συνθήκη για αντίδραση είναι ότι το μείγμα βρίσκεται μέσα στα όρια αναφλεκτικότητας. Αυτό οδηγεί στην αξιοποίηση του πλούσιου ορίου αναφλεκτικότητας, που για μείγμα μεθανίου-αέρα σε 9.5%. Η παραδοχή που γίνεται είναι ότι για μείγματα φτωχότερα εκείνων του ορίου αναφλεκτικότητας η στιγμιαία σύνθεση είναι εκείνη της χημικής ισορροπίας. Ενώ για πλουσιότερα η σύνθεση θεωρείται ότι είναι αυτή της χημικής ισορροπίας στο πλούσιο όριο αναφλεκτικότητας και το επιπλέον καύσιμο παίζει το ρόλο απλού διαλύτη.

Εκτός από την πρακτική τους σημασία, στο σχεδιασμό και στην ασφαλή λειτουργία των διαφόρων συστημάτων στην βιομηχανία, οι τυρβώδεις φλόγες διάχυσης αποτελούν ένα χρήσιμο εργαλείο έρευνας για πειραματικές και υπολογιστικές μελέτες.

Έρευνα σε ανυψωμένες φλόγες διάχυσης γίνεται τα τελευταία 50 χρόνια. Ο μηχανισμός της σταθεροποίησης, μιας ανυψωμένης τυρβώδους φλόγας διάχυσης, αποτελεί ένα αντικείμενο έρευνας για μοντέλα μερικώς προαναμειγμένης τυρβώδους καύσης. Σ' αυτές τις φλόγες, οι διαδικασίες της καύσης γίνονται υπό μερικώς προαναμειγμένη μορφή. Όσο αφορά την διαδικασία σταθεροποίησης της φλόγας, η φλόγα που παράγεται από την μερική προανάμειξη παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στα τεχνικά της χαρακτηριστικά.

Οι τυρβώδεις φλόγες διάχυσης χρησιμοποιούνται σε συστήματα καύσης όπου το καύσιμο και ο αέρας δεν είναι πλήρως αναμειγμένα πριν εισέλθουν στον θάλαμο καύσης, όπως οι μηχανές Diesel, αεροναυπηγικοί θάλαμοι καύσης και φούρνοι (Vervisch, 1998). Υπάρχουν πολλά κίνητρα για την μελέτη τέτοιων τυρβωδών φλογών και ένα τμήμα της παρούσας εργασίας αφορά αυτές τις φλόγες:

- Πολλά πρακτικά συστήματα περιέχουν έγχυση καυσίμου με άλλα λόγια μη προαναμειγμένη καύση.

- Η ανάπτυξη νέων τεχνολογιών καύσης για μηχανές αεροπλάνων και πιο γενικά για στροβιλομηχανές που λειτουργούν στην περιοχή μερικής πρόμειξης απαιτεί τον ακριβή υπολογισμό της θέσης στην ροή όπου αρχίζει η καύση και τον έλεγχο των ρύπων. Η απόκτηση γνώσης σε τυρβώδεις φλόγες διάχυσης χρειάζεται για την μελέτη των παραπάνω σημαντικών προβλημάτων.

- Οι φλόγες διάχυσης και οι μερικώς προαναμειγμένες φλόγες επηρεάζουν πολλούς θαλάμους καύσης όπου η προανάμειξη των

αντιδρώντων στοιχείων δεν είναι πάντα τέλεια σε μοριακό επίπεδο και μπορεί να επιδιωχθεί μερική προανάμειξη για την μείωση των ρύπων.

Γενικά σε συστήματα όπου τα αντιδρώντα εισέρχονται από διαφορετικά στρώματα η αλληλεπίδραση του καυσίμου και του οξειδωτικού με τις μεγάλες δομές της ροής οδηγούν σε μερική και όχι ολική ανάμειξη. Μετά την ανάμειξη με αυτές τις μεγάλες μη σταθερές δομές οι τυρβώδεις μηχανισμοί δρουν στις μικρότερες δομές και έχουν σαν αποτέλεσμα να έρχεται το καύσιμο και το οξειδωτικό σε επαφή μέσα στην περιοχή της αντίδρασης όπου παράγονται τα προϊόντα και εκλύεται θερμότητα. Η μοντελοποίηση των τυρβωδών φλογών διάχυσης απαιτεί την σύγχρονη κατανόηση της τυρβώδους μείξης και των διαδικασιών της καύσης.

2.11 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΤΥΡΒΩΔΟΥΣ ΚΑΥΣΗΣ ΣΤΙΣ ΦΛΟΓΕΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΜΕΣΩ ΧΡΗΣΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑΣ

2.11.1 Συνάρτηση Πυκνότητας Πιθανότητας (ΣΠΠ – PDF)

Για τον υπολογισμό του μέσου ρυθμού αντίδρασης με βάση την χημική περιγραφή, εμπλέκεται η εισαγωγή μίας Συνάρτησης Πυκνότητας Πιθανότητας (εν συντομία: ΣΠΠ ή PDF), της οποίας οι διαστάσεις αντιστοιχούν στον αριθμό των ανεξάρτητων βαθμωτών του μοντέλου καύσης.

Οι δύο βασικοί τύποι ΣΠΠ είναι το μονοδιάστατο μοντέλο ΣΠΠ που χρησιμοποιεί το κλάσμα μείγματος για μεταβλητή και το δισδιάστατο μοντέλο ΣΠΠ το οποίο χρησιμοποιεί το κλάσμα μείγματος και κλάσμα μάζας CO_2 σαν μεταβλητές.

Στο δισδιάστατο μοντέλο ΣΠΠ χρησιμοποιείται μία εκθετικής μορφής δισδιάστατη ΣΠΠ σε συνδυασμό με τη θεώρηση της μερικής ισορροπίας, ενώ στο μονοδιάστατο μοντέλο ΣΠΠ χρησιμοποιείται η συνάρτηση β -ΣΠΠ, σε συνδυασμό με την θεώρηση πλήρους ισορροπίας ή αλλιώς τα δεδομένα λαμβάνονται απευθείας από πειραματικές μετρήσεις.

2.11.2 Συνάρτηση β -ΣΠΠ (β -PDF)

Εάν η στιγμιαία θερμοδυναμική κατάσταση του μείγματος είναι γνωστή σαν συνάρτηση ενός μοναδιαίου διατηρούμενου βαθμωτού, ο προσδιορισμός της μέσης τιμής των συγκεντρώσεων των στοιχείων και της θερμοκρασίας περιλαμβάνουν και τον καθορισμό μιας συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας ΣΠΠ (PDF) για το βαθμωτό. Η μορφή της ΣΠΠ επηρεάζεται από τις συνθήκες

ροής, αλλά ο καθορισμός μιας ή δυο παραμέτρων ΣΠΠ φαίνεται να είναι επαρκής και τα αποτελέσματα να μην είναι τόσο ευαίσθητα από την εκλογή του ακριβούς τύπου της. Η περιγραφή της στατικής συμπεριφοράς ενός διατηρούμενου βαθμωτού με την χρήση της β-ΣΠΠ συνεπάγεται την εκτίμηση δύο παραμέτρων, της μέσης τιμής και της διακύμανσης του βαθμωτού.

Η β-ΣΠΠ εκφραζόμενη σε όρους των δύο πρώτων ροπών της μεταβλητής είναι:

$$f^{\alpha_1}(f) = \frac{f^{\alpha_1-1}(1-f)^{\alpha_2-1}}{\int_0^1 f^{\alpha_1-1}(1-f)^{\alpha_2-1} df} \quad (2.6)$$

Όπου $0 \leq f \leq 1$ και α_1, α_2 είναι θετικοί αριθμοί που καθορίζονται συναρτήσει των πρώτων και δεύτερων στιγμών της κατανομής:

$$\alpha_1 \equiv \frac{\bar{f}^{\alpha_1}}{\bar{f}^{\alpha_1-1}} \left[-1 + \frac{\bar{f}^{\alpha_1}(1-\bar{f}^{\alpha_1})}{\bar{f}^{\alpha_1-1}} \right] \quad (2.7)$$

και

$$\alpha_2 \equiv \alpha_1 \frac{(1-\bar{f}^{\alpha_1})}{\bar{f}^{\alpha_1}} \quad (2.8)$$

Η διακύμανση \bar{f}^{α_1} πρέπει να ικανοποιεί την ακόλουθη συνθήκη:

$$0 \leq \bar{f}^{\alpha_1} \leq \bar{f}^{\alpha_1}(1-\bar{f}^{\alpha_1}) \quad (2.9)$$

Σε επόμενο κεφάλαιο δίνονται η θερμοκρασία και οι κατανομές των κυριότερων στοιχείων που λαμβάνονται από την καύση μεθανίου-αέρα.

2.12 ΣΤΑΘΕΡΟΠΟΙΗΣΗ ΦΛΟΓΑΣ

2.12.1 Τρόποι σταθεροποίησης της φλόγας

Η σταθεροποίηση της φλόγας είναι μια σημαντική διαδικασία, η οποία χρησιμοποιείται σε πολλές εφαρμογές για να διασφαλισθεί η έναυση της φλόγας, επειδή η ταχύτητα της ροής είναι κατά πολύ μεγαλύτερη της ταχύτητας

μετάδοσης του μετώπου της φλόγας. Η σταθεροποίηση επιτρέπει την ύπαρξη φλόγας μέσα σε προκαθορισμένα όρια λειτουργίας.

Η βασική αρχή της σταθεροποίησης για τυρβώδη ροή, σε συνθήκες επαρκείς ώστε να αποφεύγεται το εκφύσιμα (blowout), είναι η εξής: Η τοπική ταχύτητα της τυρβώδους φλόγας πρέπει να είναι συμβατή με την τοπική ταχύτητα της μέσης ροής, πράγμα που συμβαίνει και στις στρωτές φλόγες. Γι' αυτό το λόγο, υπάρχουν αρκετοί τρόποι με τους οποίους επιτυγχάνεται η σταθεροποίηση φλογών και εδώ αναφέρονται μερικοί.

Οι κυριότεροι από αυτούς είναι:

- Στόμια χαμηλής ταχύτητας (low-velocity by-pass ports)
- Στερεά σώματα
- Ροές ανακυκλοφορίας που επηρεάζονται από Στροβίλους ή Jet

Ζώνη ανακυκλοφορίας μπορεί να δημιουργηθεί, μέσω ενός στροβιλώδους στοιχείου στα εισερχόμενα αέρια ή με κατευθυνόμενα jet με κατάλληλο τρόπο στο πλησίον πεδίο της καύσης κλπ. Ο τρόπος αυτός, χρησιμοποιείται συχνά σε βιομηχανικούς καυστήρες και καυστήρες στροβιλοκινητήρων, τόσο πρόμειξης, όσο και διάχυσης. Φυσικά, στις φλόγες διάχυσης, όχι μόνο επιτυγχάνεται ανάμειξη των προϊόντων και αντιδρώντων αλλά επίσης και του καυσίμου με τον αέρα.

Οι δύο βασικές κατηγορίες τεχνικών, που χρησιμοποιούνται στη σταθεροποίηση φλογών είναι:

1. Σταθεροποίηση με στερεές επιφάνειες
2. Σταθεροποίηση μέσω ροϊκών ρευμάτων

Στις περισσότερες περιπτώσεις χρησιμοποιείται η δεύτερη κατηγορία. Στην κατηγορία αυτή, γίνεται εκμετάλλευση των χαρακτηριστικών της ροής με ανακυκλοφορία (recirculation). Τέτοια φαινόμενα ροής εμφανίζονται σε περιοχές απορρέματος πίσω από διάφορα σώματα, όπως στην περίπτωση μας κατά την είσοδο αέρα-καυσίμου πίσω από το τοίχωμα όπως θα φανεί σε επόμενο κεφάλαιο.

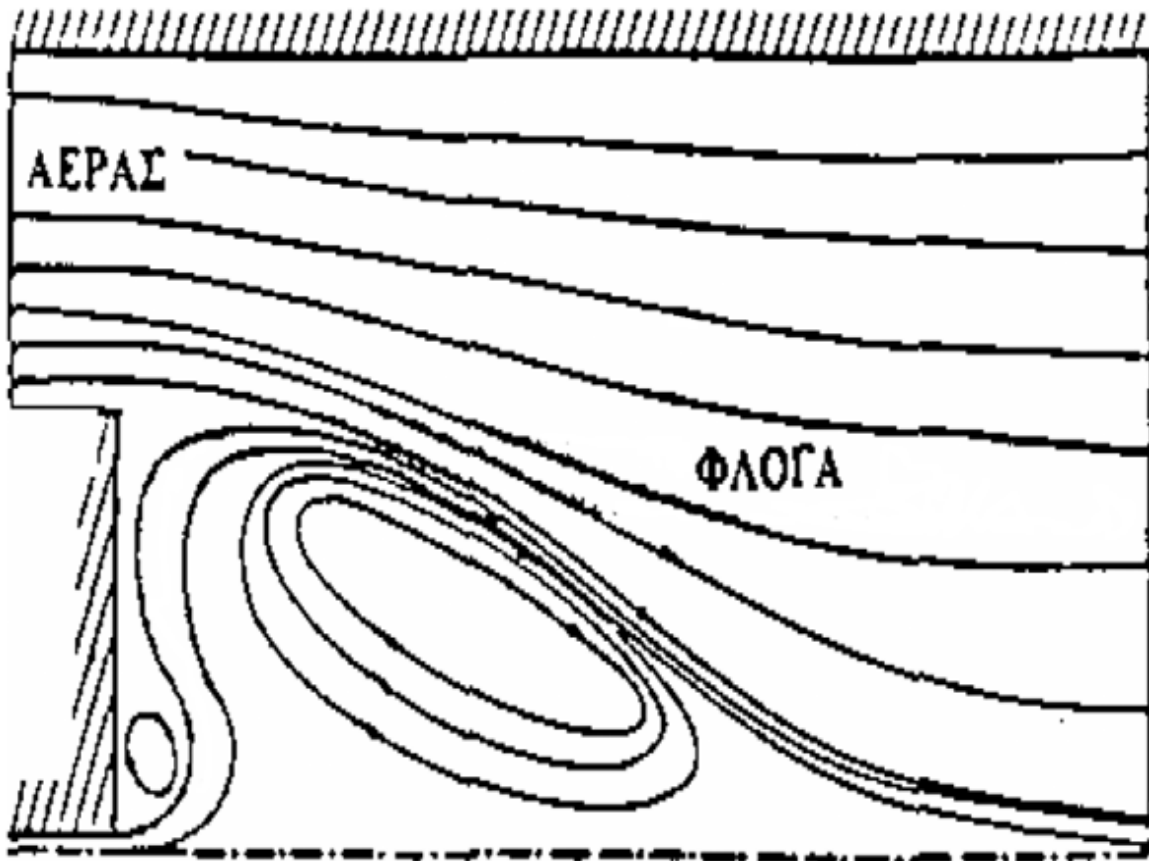
Οι δίνες που δημιουργούνται επαναφέρουν προς τα εμπρός θερμά καυσαέρια, τα οποία με τη σειρά τους προκαλούν έναυση του μείγματος. Το φαινόμενο αυτό βρίσκεται γενικά υπό μελέτη.

Έτσι, παρατηρείται η δράση δύο αντιτιθέμενων δεσμών, της δέσμης του καυσίμου και της δέσμης της ανάστροφης ροής, Σχήμα (2.3). Το πρώτο σημείο μηδενισμού (first of fuel stagnation point) δημιουργείται εκεί όπου παρατηρείται η εξισορρόπηση των δύο δεσμών, ενώ το δεύτερο σημείο μηδενισμού (second of air stagnation point) καθορίζεται από τη δέσμη αέρα και βρίσκεται στο τέλος της ζώνης ανακυκλοφορίας.

Συγκεκριμένα στην ισόθερμη ροή, ο Lightman παρατήρησε, ότι καθώς αυξάνεται η ροή του αέρα, η περιοχή των σημείων μηδενισμού μετατοπίζεται προς το σώμα. Το ίδιο φαινόμενο παρατήρησε και για την περίπτωση καύσης.

Ταυτόχρονα, διαπίστωσε ότι η περιοχή της ανακυκλοφορίας είναι μεγαλύτερη σε μέγεθος απ' ό τι για ισόθερμη ροή, λόγω της επίδρασης της καύσης.

Για σταθερή ροή αέρα, αλλά αυξανόμενη ροή καυσίμου, η περιοχή μηδενισμού απομακρύνεται από το σώμα και για τα δύο είδη ροών και μάλιστα η απομάκρυνση αυτή είναι γραμμική και μεγαλύτερη στη ροή με καύση, (Σχήμα 2.4).

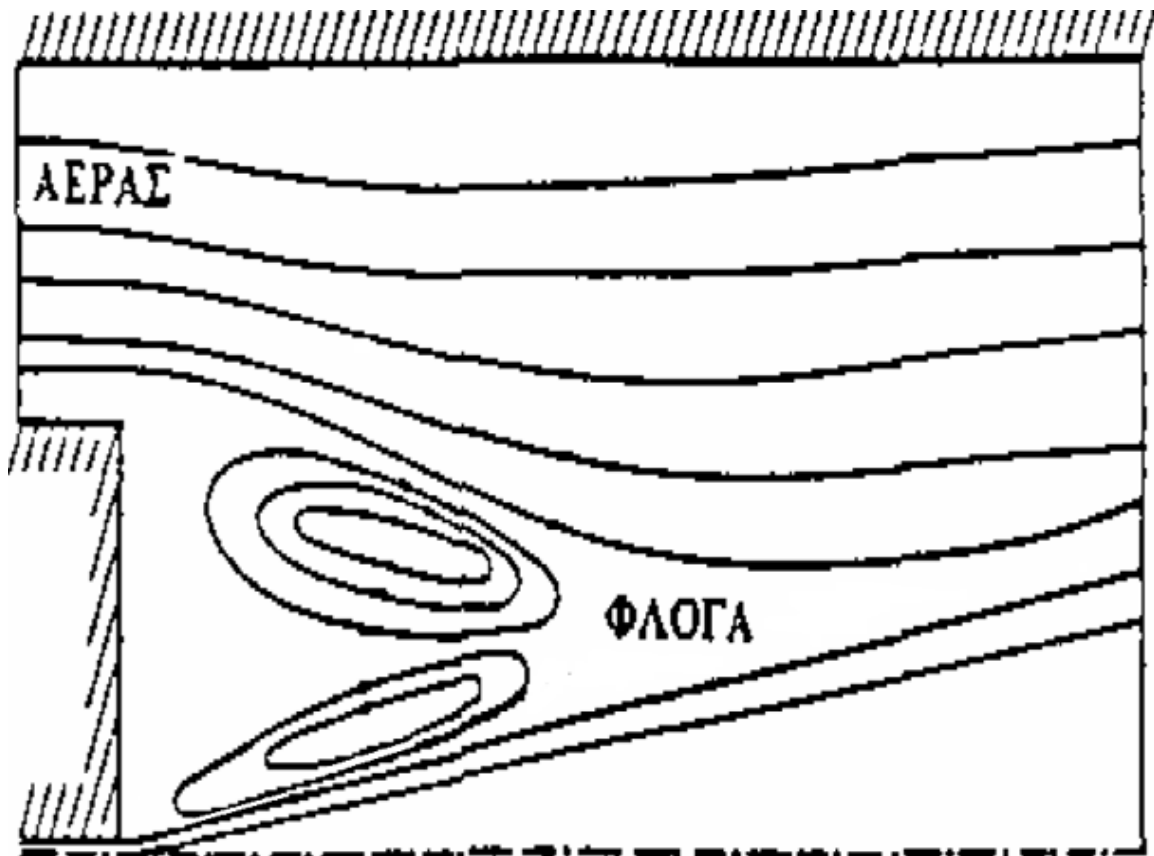


Σχήμα 2.3: Κυριαρχία ροής αέρα

Αυξάνοντας τη ροή καυσίμου πάνω από ένα ρυθμό, παρατηρείται το εξής φαινόμενο: η δέσμη καυσίμου είναι τόσο ισχυρή, με αποτέλεσμα να διατρύπαι τη ζώνη ανακυκλοφορίας και να μην εμφανίζονται τα σημεία μηδενισμού της αξονικής ταχύτητας. Αυτό επιδρά και στο σχήμα της φλόγας και έτσι παίζει ρόλο στη σταθεροποίησή της.

Εξίσου σημαντική είναι η επίδραση της ροής καυσίμου και της ροής αέρα στα όρια ευστάθειας της φλόγας.

Υπάρχουν δύο όρια όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, όπου μέσα σ' αυτά η φλόγα δεν σβήνει. Το συνολικό φτωχό όριο (lean limit), όπου υπάρχει μεγάλη ροή αέρα και το συνολικό πλούσιο (rich limit), όπου υπάρχει μεγάλη ροή καυσίμου.



Σχήμα 2.4: Κυριαρχία ροής καυσίμου

2.12.2 Παράγοντες επίδρασης για τη σταθεροποίηση της φλόγας

Κατά τη διαδικασία σταθεροποίησης μιας φλόγας, υπάρχουν πολλοί παράγοντες που την επηρεάζουν. Οι σημαντικότεροι από αυτούς είναι:

1. Τύρβη
2. Ταχύτητα
3. Θερμοκρασία
4. Πίεση
5. Διαστάσεις και σχήμα στερεού σώματος σταθεροποίησης (bluff-body)

Τέλος, η βιβλιογραφία που αναφέρεται στην υπολογιστική μοντελοποίηση συστημάτων καύσης είναι εκτενής. Αυτό οφείλεται στο μεγάλο ενδιαφέρον που παρουσιάζει η πολλαπλότητα των μοντέλων που απαιτούνται για την προσομοίωση των επί μέρους φυσικών διεργασιών. Τέτοια μοντέλα είναι το μοντέλο της τύρβης, της καύσης, της μεταφοράς θερμότητας και των διαφορετικών αλγορίθμων επίλυσης των εξισώσεων που προκύπτουν.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3^ο

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΡΟΙΚΩΝ ΓΡΑΜΜΩΝ

3.1 ΚΩΔΙΚΑΣ ΕΠΙΛΥΣΗΣ

Ο υπολογιστικός κώδικας που χρησιμοποιήθηκε είναι γραμμένος σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN, για μόνιμη δισδιάστατη (δυνατότητα επέκτασης σε τρισδιάστατη) τυρβώδη (ή στρωτή), επίπεδη (ή αξονοσυμμετρική), ασυμπίεστη ροή με ανακυκλοφορία. Υπάρχει δυνατότητα επέκτασης για εφαρμογή σε μη-μόνιμες τρισδιάστατες ροές.

Ο κύριος κώδικας για την επίλυση υδροδυναμικών μεταβλητών σε καυστήρα (καύση CH_4 , αέρα) επιλύει τη γεωμετρία του προβλήματός μας. Οι εξισώσεις είναι χρονοεξαρτούμενες και ακόμη, περιλαμβάνεται μοντέλο καύσης.

Πέρα από τον κύριο κώδικα και τον κώδικα μετατροπής γραφικών, το οποίο λαμβάνει ταχύτητες κατά την x και y κατεύθυνση και δημιουργεί κάποια αρχεία που αναφέρονται παρακάτω τα οποία επίσης χρησιμοποιήθηκαν ή δημιουργήθηκαν κατά την διαδικασία της επίλυσης και κάποια ακόμα αρχεία όπως:

- Αρχείο που περιέχει τις στιγμιαίες μεταβλητές όλων των μεταβλητών οι οποίες χρειάζονται για να συνεχίσει ο κώδικας σε κάποιο τυχαίο χρονικό σημείο (αρχείο με τις στιγμιαίες τιμές των ρευστοδυναμικών μεταβλητών).
- Αρχείο που γράφονται όλες οι μέσες στατιστικά μεταβλητές αλλά και το αρχείο από το οποίο τις διαβάζουμε (αρχείο με τις μέσες τιμές των ρευστοδυναμικών μεταβλητών).
- Αρχείο με τις μέσες U_x , U_y ταχύτητες στην x και y διευθύνσεις
- Αρχείο με τις στιγμιαίες U_x , U_y ταχύτητες στην x και y διευθύνσεις
- Αρχείο με τις μεταβλητές καύσης, κλάσμα μίγματος, θερμοκρασία σε καθορισμένα σημεία του χώρου, CH_4 (μεθάνιο), CO (μονοξείδιο του άνθρακα).
- Αρχεία που αποθηκεύουν δεδομένα για λήψη scatter, plots, θερμοκρασιών και species καθώς και φάσεις ταχυτήτων και μέσες ταχύτητες. Τα οποία αρχεία χρησιμεύουν σαν δεδομένα στο εμπορικό λογισμικό Origin και στα γραφικά contour-plots κλπ.

Ο κώδικας για το συγκεκριμένο πρόβλημα λύνει όλες τις εξισώσεις σε όλους τους κόμβους της γεωμετρίας μας σε 20 εσωτερικά βήματα ανά STEP. Ο κώδικας επίλυσης του καυστήρα (καύση μεθάνιο-αέρα) εκτελεί 15000 χρονικά βήματα (20 εσωτερικά STEP για κάθε χρονικό βήμα).

3.2 ΠΑΡΕΜΒΟΛΗ

3.2.1 Εισαγωγή

Με τον όρο, παρεμβολή, ουσιαστικά εννοούμε την εύρεση μιας συνάρτησης, όπου έστω ότι έχουμε ένα σύνολο δεδομένων, η συνάρτηση να προσεγγίζει αυτά. Δηλαδή, η τιμή της συνάρτησης, στα δεδομένα σημεία να ισούται με την αντίστοιχη δεδομένη τιμή.

Σε πολλές περιπτώσεις έχουμε προβλήματα παρεμβολής που μπορεί να διαφέρουν στον τρόπο και στο σκοπό ανάλογα. Παρακάτω αναφέρονται μερικά παραδείγματα:

- Η χάραξη μιας γραφικής παράστασης μιας ομαλής καμπύλης η οποία να διέρχεται από ένα σύνολο δεδομένων σημείων.
- Ο υπολογισμός των τιμών μιας μαθηματικής συνάρτησης εύκολα και σε λίγο χρόνο.
- Η αντικατάσταση μιας «δύσκολης» συνάρτησης με μία «εύκολη».
- «Διάβασμα μεταξύ των γραμμών» ενός πίνακα.
- Ολοκλήρωση και διαφορίση διακριτών δεδομένων.

Σε πάρα πολλά προβλήματα υπάρχει η ανάγκη της πρόβλεψης της εξέλιξης μιας διαδικασίας (Πρόβλεψη) ή της εκτίμησης της κατάστασης που βρισκόταν ένα φαινόμενο στο ενδιαμέσο διάστημα δύο μετρήσεων (Παρεμβολή). Αυτή τη τελευταία «ανάγκη» την έχουμε σε πάρα πολλές περιπτώσεις μαθηματικών προβλημάτων αλλά ακόμα και σε πολλά προβλήματα της καθημερινότητάς μας. Για παράδειγμα από ένα μετεωρολογικό σταθμό αν έχουμε την καταγραφή της μεταβολής της θερμοκρασίας για κάθε μία ώρα, θα μπορούσαμε να υπολογίσουμε ποια είναι η θερμοκρασία σε μια τυχαία χρονική στιγμή (π.χ. στις 12:15).

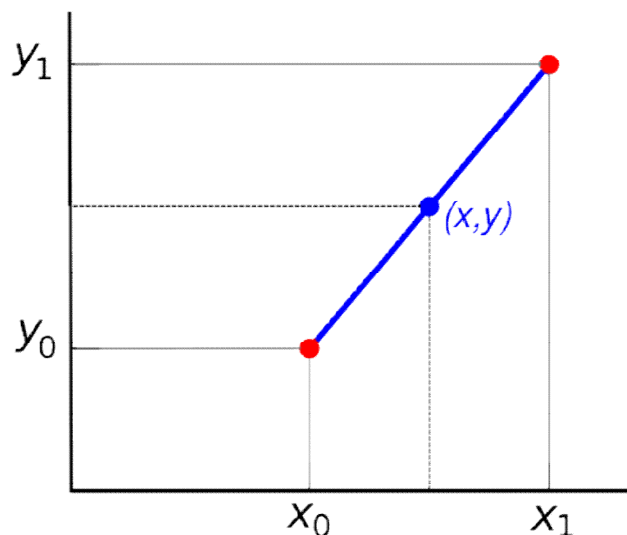
Στα μαθηματικά πολλές φορές απαιτείται ο υπολογισμός μιας συνάρτησης (στην ουσία ενός κανόνα) που να ακολουθούν ζεύγη δοθέντων σημείων. Παρόλα αυτά, ακόμη και αν γνωρίζουμε τη μορφή μιας πολύπλοκης συνάρτησης προτιμούμε να την αντικαταστήσουμε με μια απλούστερη συνάρτηση την οποία στη συνέχεια μπορούμε ευκολότερα να χρησιμοποιήσουμε στους υπολογισμούς μας όπως για παράδειγμα για ολοκληρώσεις ή παραγωγίσεις κλπ. Φυσικά, θα πρέπει η νέα και απλή αυτή

συνάρτηση να αποτελεί όσο το δυνατόν σωστή αναπαράσταση της ακριβούς, και γι' αυτό το λόγο σε κάθε περίπτωση είναι σημαντικό να γνωρίσουμε το σφάλμα αυτής της αντικατάστασης. Η απλούστερη συνάρτηση είναι το πολυώνυμο.

3.2.2 Γραμμική παρεμβολή

Η Γραμμική παρεμβολή, είναι μια απλή μορφή της παρεμβολής, είναι η διαδικασία καθορισμού ενός άγνωστου σημείου που βρίσκεται ανάμεσα σε δύο γνωστά σημεία. Εάν το άγνωστο σημείο βρίσκεται έξω από τα δύο γνωστά σημεία, τότε καλείται προεκβολή ή παρέκταση (extrapolation).

Η μέθοδος αυτή, χρησιμοποιεί γραμμικά πολυώνυμα και επίσης χρησιμοποιείται σε μεγάλο βαθμό στους τομείς των μαθηματικών, κυρίως στην αριθμητική ανάλυση αλλά και σε πολλές ακόμα εφαρμογές, συμπεριλαμβανομένων των γραφικών απεικονίσεων.



Σχήμα 3.1: Γραμμική παρεμβολή μεταξύ δύο γνωστών σημείων

Για παράδειγμα αν έχουμε δεδομένα τα δύο κόκκινα σημεία, η μπλε γραμμή είναι η γραμμική παρεμβολή μεταξύ των σημείων και επίσης η τιμή y στο x μπορεί να βρεθεί με γραμμική παρεμβολή.

Εάν τα δύο γνωστά σημεία δίνονται από τις συντεταγμένες (x_0, y_0) και (x_1, y_1) , η γραμμική παρεμβολή είναι η ευθεία γραμμή μεταξύ των σημείων αυτών. Για μια τιμή x στο διάστημα, η τιμή y κατά μήκος της ευθείας δίνεται από την εξίσωση:

$$\frac{y - y_0}{x - x_0} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \quad (3.1)$$

Όπου η εξίσωση μπορεί να προκύψει γεωμετρικά από το Σχήμα 3.1.

Επιλύοντας την εξίσωση (1) ως προς y , που είναι ο άγνωστος για κάποια τιμή x , μας δίνει:

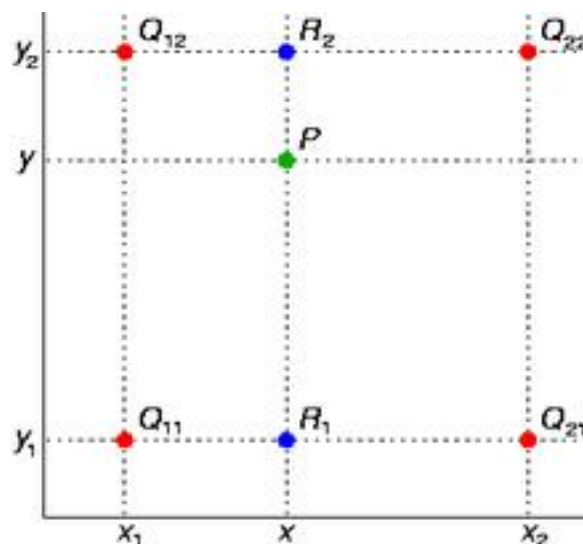
$$y = y_0 + (x - x_0) \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \quad (3.2)$$

Όπου η εξίσωση (3.2) αυτή είναι για γραμμική παρεμβολή στο διάστημα (x_0, x_1) .

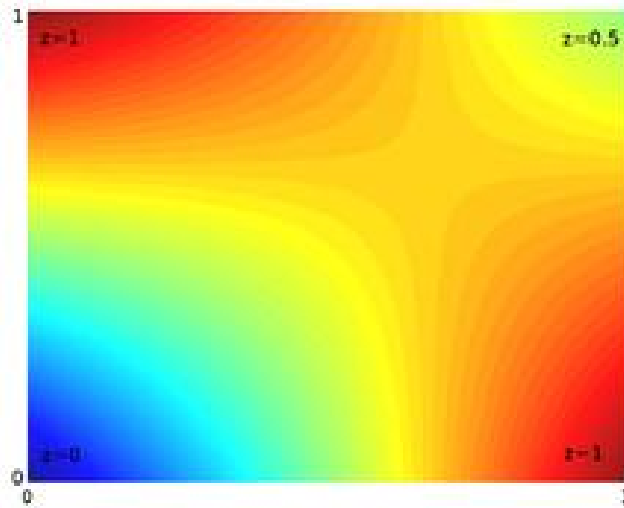
3.2.3 Διγραμμική παρεμβολή

3.2.3.1 Γενικά

Στα μαθηματικά, διγραμμική παρεμβολή είναι μία επέκταση της γραμμικής, για παρεμβολή δύο μεταβλητών σε κανονικό πλέγμα. Η βασική ιδέα είναι να εκτελεί γραμμική παρεμβολή πρώτα σε μία κατεύθυνση και στη συνέχεια προς την άλλη κατεύθυνση.



Σχήμα 3.2: Οι τέσσερις κόκκινες τελείες δείχνουν τα σημεία των δεδομένων και η πράσινη τελεία είναι το σημείο το οποίο θέλουμε να παρεμβάλλεται.



Σχήμα 3.3: Παράδειγμα διγραμμικής παρεμβολής στους κόμβους με τιμές $z=0,1,1$ και 5 όπως υποδεικνύονται στο σχήμα. Οι παρεμβάλλουσες τιμές παριστάνονται με χρώμα.

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να βρούμε τη τιμή της άγνωστης συνάρτησης f στο σημείο $P = (x, y)$. Θεωρείται δεδομένο ότι γνωρίζουμε την τιμή του f στα τέσσερα σημεία $Q_{11} = (x_1, y_1)$, $Q_{12} = (x_1, y_2)$, $E_{21} = (x_2, y_1)$ και $E_{22} = (x_2, y_2)$.

Πρώτα κάνουμε γραμμική παρεμβολή κατά τη x -διεύθυνση. Έτσι έχουμε:

$$f(R_1) \approx \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} f(Q_{11}) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(Q_{21}) \quad (3.3)$$

Όπου: $R_1 = (x, y_1)$

$$f(R_2) \approx \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} f(Q_{12}) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(Q_{22}) \quad (3.4)$$

Όπου: $R_2 = (x, y_2)$

Συνεχίζουμε κάνοντας γραμμική παρεμβολή κατά την y -διεύθυνση:

$$f(P) \approx \frac{y_2 - y}{y_2 - y_1} f(R_1) + \frac{y - y_1}{y_2 - y_1} f(R_2) \quad (3.5)$$

Αυτό μας δίνει την εκτίμηση του $f(x, y)$.

$$\begin{aligned}
f(x,y) &\approx \frac{f(Q_{11})}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}(x_2 - x)(y_2 - y) \\
&+ \frac{f(Q_{21})}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}(x - x_1)(y_2 - y) \\
&+ \frac{f(Q_{12})}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}(x_2 - x)(y - y_1) \\
&+ \frac{f(Q_{22})}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}(x - x_1)(y - y_1).
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Αν επιλέξουμε ένα σύστημα συντεταγμένων, στο οποίο τα τέσσερα σημεία όπου το f είναι γνωστό, είναι $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ και $(1, 1)$, τότε ο τύπος παρεμβολής απλοποιείται σε:

$$\begin{aligned}
f(x,y) &\approx f(0,0)(1-x)(1-y) + f(1,0)x(1-y) + \\
&f(0,1)(1-x)y + f(1,1)xy
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Ή ισοδύναμα:

$$f(x,y) \approx \begin{bmatrix} 1-x & x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(0,0) & f(0,1) \\ f(1,0) & f(1,1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1-y \\ y \end{bmatrix} \tag{3.8}$$

Σε αντίθεση με ό,τι υποδηλώνει το όνομα, η διγραμμική παρεμβολή δεν είναι γραμμική, μάλλον είναι ένα προϊόν δύο γραμμικών συναρτήσεων:

$$(a_1x + a_2)(a_3y + a_4) \tag{3.9}$$

Εναλλακτικά, η παρεμβολή μπορεί να γραφτεί ως:

$$b_1 + b_2x + b_3y + b_4xy \tag{3.10}$$

Όπου: $b_1 = f(0,0)$

$$b_2 = f(1,0) - f(0,0)$$

$$b_3 = f(0,1) - f(0,0)$$

$$b_4 = f(0,0) - f(1,0) - f(0,1) + f(1,1)$$

Και στις δύο περιπτώσεις, ο αριθμός των σταθερών (τέσσερις) αντιστοιχεί στον αριθμό των δεδομένων σημείων, όπου f είναι δεδομένη. Η παρεμβολή είναι γραμμική κατά μήκος των παράλληλων γραμμών είτε προς τη x ή τη y

κατεύθυνση, αντίστοιχα, αν η x ή η y έχει οριστεί σταθερή. Κατά μήκος κάθε άλλης ευθείας γραμμής, η παρεμβολή είναι τετραγωνική.

Το αποτέλεσμα της διγραμμικής παρεμβολής είναι ανεξάρτητο από τη σειρά της παρεμβολής. Δηλαδή, αν είχαμε εκτελέσει πρώτα τη γραμμική παρεμβολή στην y -διεύθυνση και στη συνέχεια στη x -διεύθυνση, η συνακόλουθη προσέγγιση θα ήταν το ίδιο. Επίσης, η προφανής επέκταση της διαγραμμικής παρεμβολής σε τρεις διαστάσεις ονομάζεται τριγραμμική παρεμβολή.

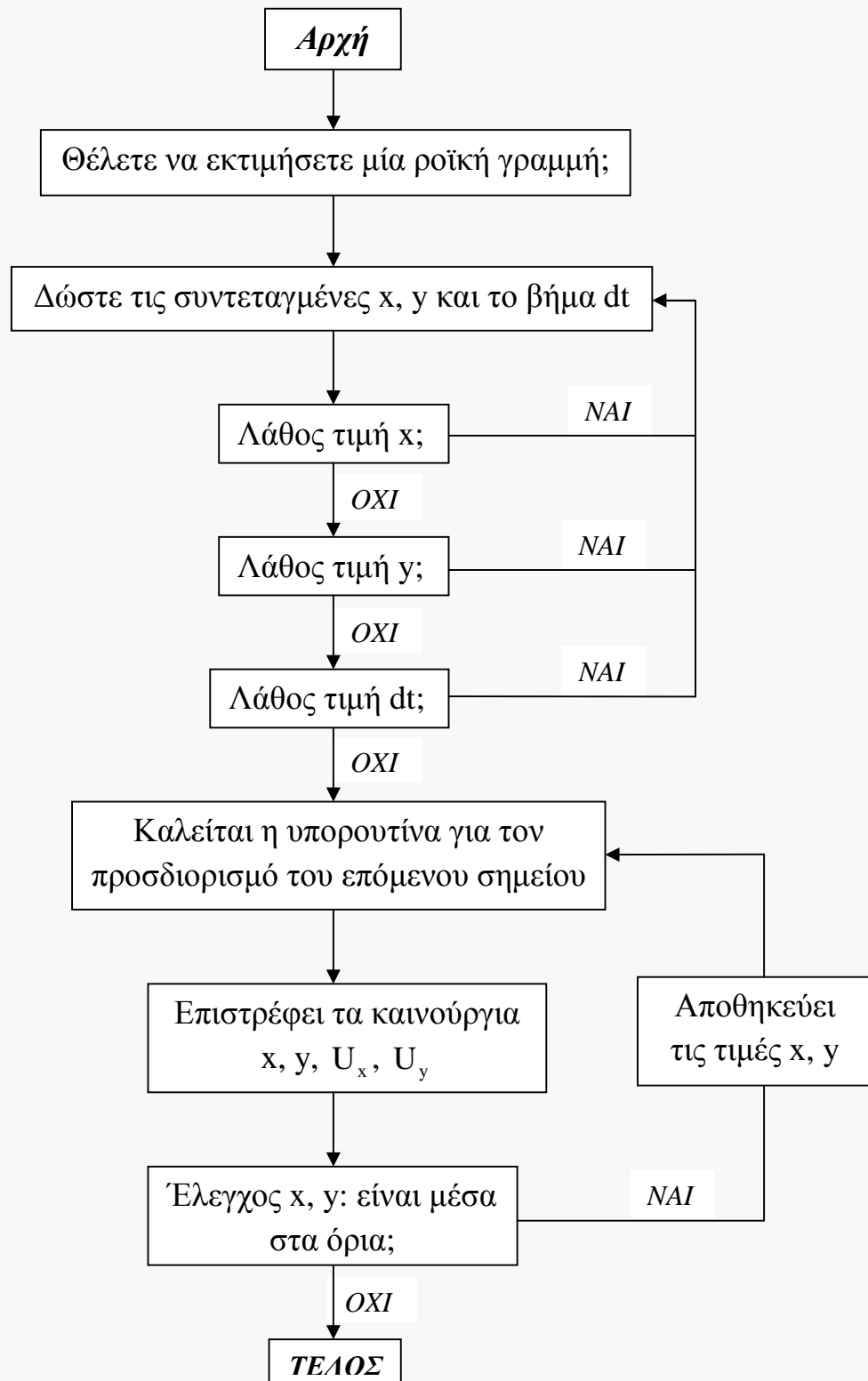
Με προσομοίωση του κώδικα καύσης για την επιθυμητή γεωμετρία και συγκεκριμένο πλέγμα, οι θέσεις του οποίου δίνονται από σημεία (x,y) , υπολογίστηκε το πεδίο ταχυτήτων στις αντίστοιχες θέσεις του πλέγματος, U_x , U_y . Τα δεδομένα αυτά (x, y, U_x, U_y) είναι διακριτά και συνεπώς δεν επαρκούν για την πλήρη απεικόνιση του πεδίου ταχυτήτων στο επίπεδο, ούτε για τον υπολογισμό των ροϊκών γραμμών αυτού.

Για την βέλτιστη απεικόνιση των αποτελεσμάτων του πεδίου ταχυτήτων αναπτύχθηκε κώδικας διγραμμικής παρεμβολής σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran, που να λαμβάνει ως δεδομένα εισόδου το πεδίο ταχυτήτων (x, y, U_x, U_y) και να υπολογίζει τις ταχύτητες και κατά συνέπεια τις ροϊκές γραμμές σε κάθε ενδιάμεσο σημείο ενδιαφέροντος. Η ολοκλήρωση των τροχιών έγινε με μικρό βήμα της τάξεως των 0.0007, ικανό να αναπαραστήσει με ακρίβεια την ροή. Οι υπολογισμοί αποθηκεύτηκαν σε αρχείο κατάλληλης μορφής ώστε να μπορούν να εισαχθούν μετέπειτα στο σχεδιαστικό εμπορικό λογισμικό πρόγραμμα.

Στην επόμενη παράγραφο (3.3) του κεφαλαίου παρουσιάζονται διαγράμματα ροϊκών γραμμών όπως σχεδιάστηκαν με τα αποτελέσματα του υπολογιστικού κώδικα και με τη βοήθεια του προγράμματος Origin.

Στο Παράρτημα στο τέλος της πτυχιακής ο σχετικός κώδικας που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας σε κώδικα Fortran και στην συνέχεια παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής του αλγορίθμου διγραμμικής παρεμβολής:

Διάγραμμα ροής αλγόριθμου διγραμμικής παρεμβολής



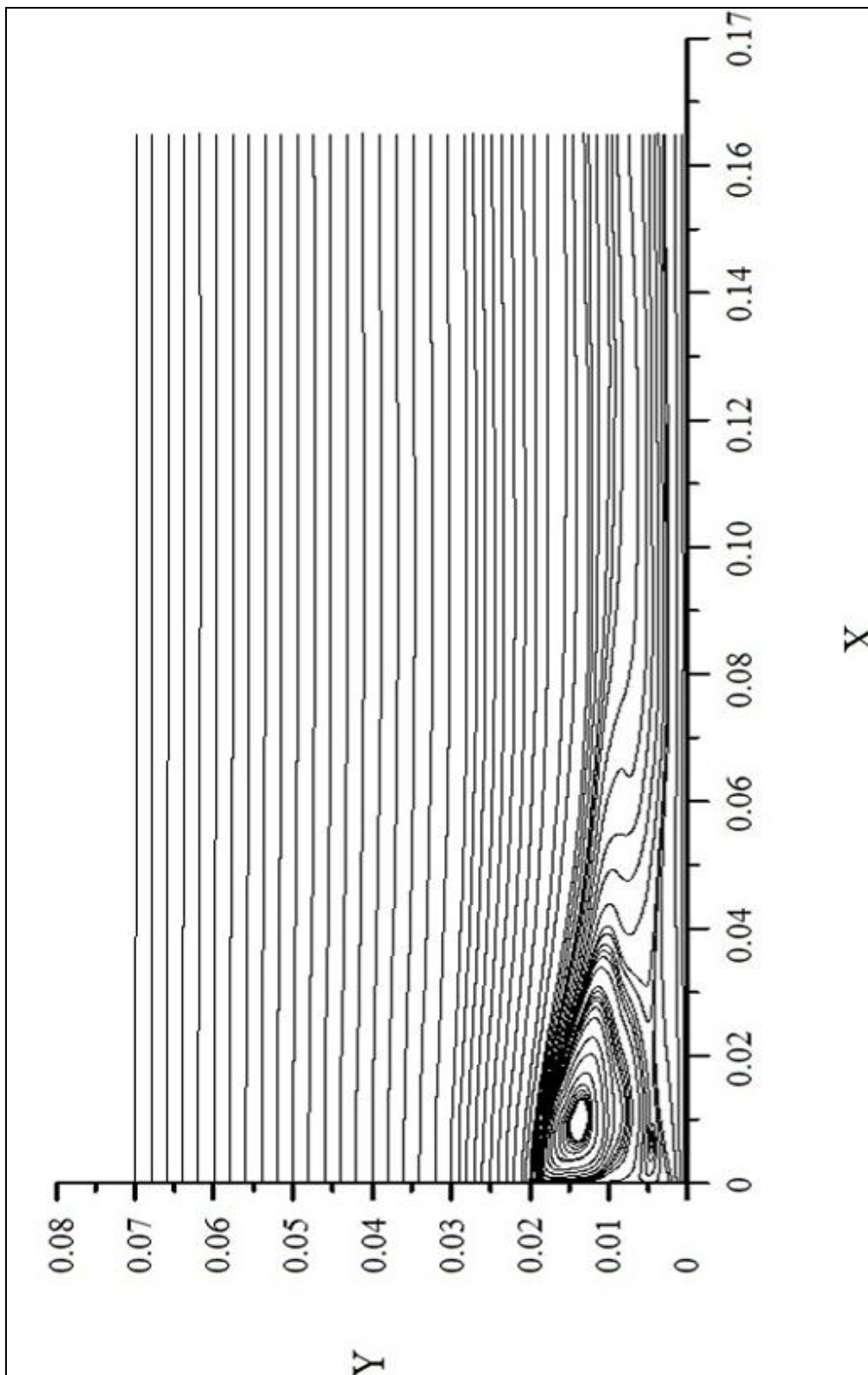
3.3 ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΡΟΪΚΩΝ ΓΡΑΜΜΩΝ

Παρακάτω ακολουθεί ο σχεδιασμός των ροϊκών γραμμών με τη βοήθεια του προγράμματος Origin.

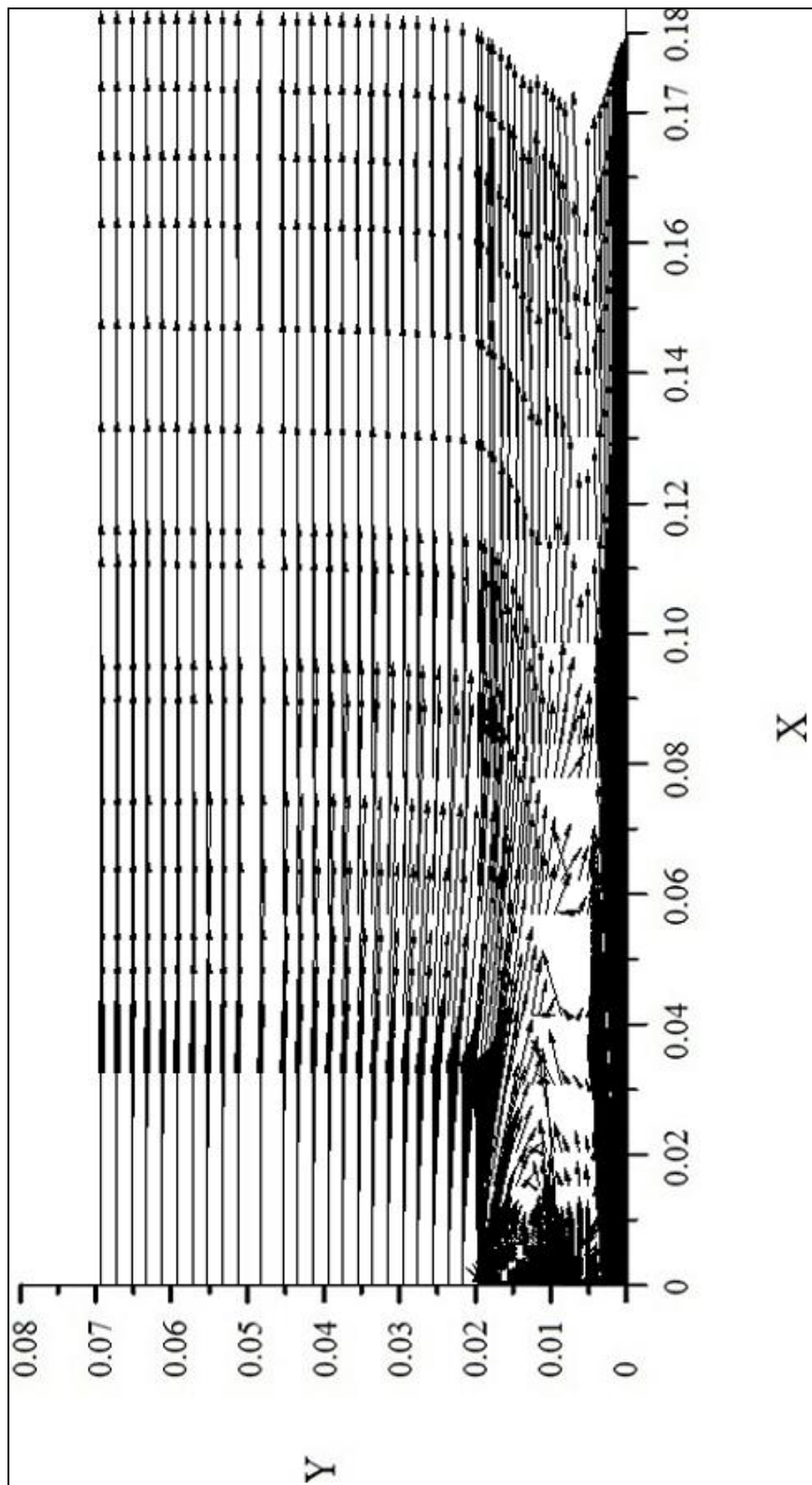
Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε διακρίνουμε την είσοδο του αέρα στη θέση $x=0$ και για $y=0.02$ έως $y=0.07$ (έως το σημείο μέχρι το οποίο εξετάζουμε το πεδίο ροής καθώς πιο «μακριά» δεν υπάρχουν μεταβολές στη κατεύθυνση της ροής του εισερχόμενου αέρα και γι' αυτό δεν παρουσιάζεται ενδιαφέρον) και επίσης διακρίνεται και η είσοδος του καυσίμου στη θέση $x=0$ και για $y=0$ έως $y=0.002$.

Ακόμα, κάτι που παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον στον σχεδιασμό των ροϊκών γραμμών και παρατηρούμε στο παρακάτω Σχήμα 3.4 είναι οι στροβιλισμοί (ζώνες ανακυκλοφορίας) που δημιουργούνται και έχουν αναλυθεί σε προηγούμενο κεφάλαιο.

Τέλος, μετά τον σχεδιασμό των ροϊκών γραμμών από το Origin, ακολουθεί ο σχεδιασμός του πεδίου ταχυτήτων από τα στοιχεία που πήραμε αρχικά, με την επίλυση του υπολογιστικού κώδικα. Παρατηρούμε ότι δεν μπορούμε να δούμε πολλές λεπτομέρειες για την ροή, ειδικά στην περιοχή ανάμειξης που μας ενδιαφέρει πολύ και έτσι ήταν αναγκαίο να προχωρήσουμε στην ανάπτυξη, κατάλληλου κώδικα διγραμμικής παρεμβολής όπως είπαμε παραπάνω.



Σχήμα 3.4: Ροϊκές Γραμμές



Σχήμα 3.5: Πεδίο ταχυτήτων

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4^ο

ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

4.1 ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΕΠΙΛΥΣΗΣ

4.1.1 Σχεδιασμός υπολογιστικού πλέγματος

Πριν από την επεξεργασία στο FLUENT είναι αναγκαία όπως είπαμε και στο πρώτο κεφάλαιο, η δημιουργία του γεωμετρικού μοντέλου του προβλήματος και η «πλεγματοποίηση», έτσι ώστε να διευκολύνεται η υπολογιστική εργασία του υπολογιστικού προγράμματος.

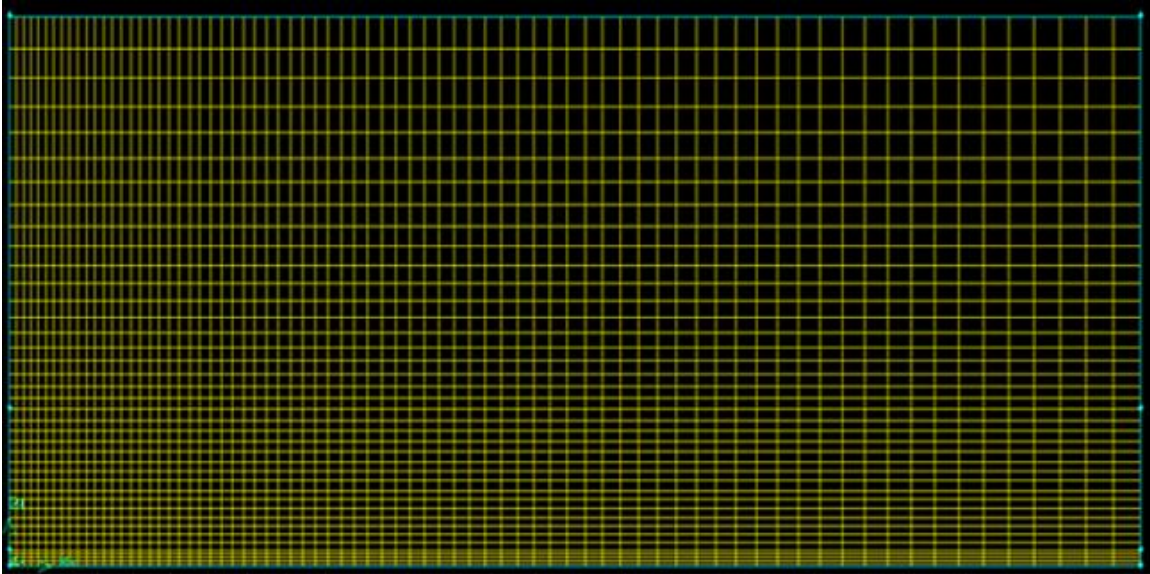
Ο σχεδιασμός του υπολογιστικού πλέγματος έγινε με το πρόγραμμα GAMBIT που είναι ένα πρόγραμμα του FLUENT, όπου στην αρχή φτιάχτηκε η γεωμετρία βάζοντας κάποια σημεία στις σωστές αποστάσεις ώστε στη συνέχεια να φτιάξω τα διάφορα ευθύγραμμα τμήματα και η γεωμετρία να έχει τη μορφή ορθογωνίου παραλληλογράμμου (όπως φαίνεται παρακάτω).

Στη συνέχεια το επόμενο βήμα ήταν να φτιάξω το υπολογιστικό πλέγμα το οποίο για να έχουμε περισσότερη ακρίβεια στις περιοχές που μας ενδιαφέρουν έγινε πιο πυκνό κοντά στην είσοδο (προς τα αριστερά της γεωμετρίας) αλλά και από τη μέση και κάτω, στην περιοχή ανάμειξης του αέρα με το καύσιμο. Αυτό γίνεται όπως επίσης αναφέραμε στο κεφάλαιο ένα, στις περιοχές που η μέση ροή αλλάζει απότομα και υπάρχουν διατμητικά στρώματα με υψηλό μέσο ρυθμο παραμόρφωσης.

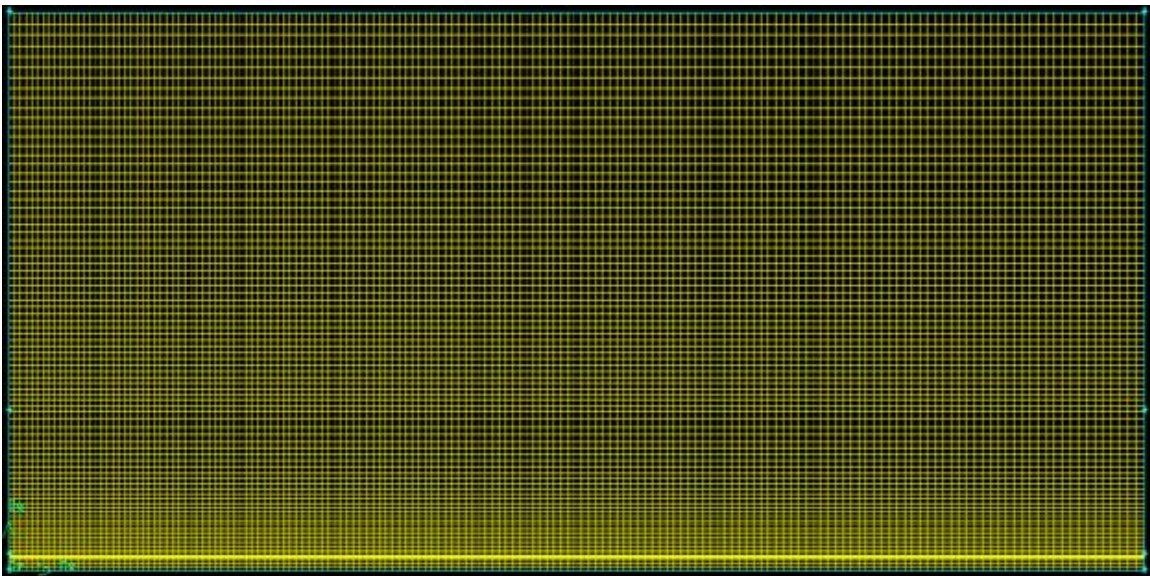
Στο τέλος, αφού έφτιαξα και το υπολογιστικό πλέγμα όρισα το κάθε ευθύγραμμο τμήμα του πρώτου βήματος τι είναι, δηλαδή που είναι η είσοδος του πρώτου ρευστού (του καυσίμου), η είσοδος του δεύτερου ρευστού (του αέρα), το εμπόδιο/τοίχος κλπ. Έτσι το υπολογιστικό πρόγραμμα που θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια να γνωρίζει κάθε σημείο της γεωμετρίας τι είναι.

Τέλος, για όσο το δυνατόν καλύτερα αποτελέσματα επειδή έχουμε τυρβώδη ροή και παίζει σημαντικό ρόλο το πλέγμα που θα δημιουργήσουμε, στην ακρίβεια των υπολογισμών, γι' αυτό έφτιαξα αρχικά τη γεωμετρία με το υπολογιστικό πλέγμα που ακολουθεί στο σχήμα 4.1.1 και στη συνέχεια έφτιαξα την ίδια γεωμετρία με πιο πυκνό πλέγμα, σχήμα 4.1.2 έτσι ώστε να έχουμε

περισσότερη ακρίβεια στους υπολογισμούς (αλλά έτσι χρειάζεται και περισσότερος υπολογιστικός χρόνος).



Σχήμα 4.1.1: Υπολογιστικό πλέγμα (3116 κόμβοι)



Σχήμα 4.1.2: Υπολογιστικό πλέγμα (14608 κόμβοι)

Στα αποτελέσματα που πήραμε δεν υπήρχαν σημαντικές διαφορές κάτι που μας δείχνει ότι το πρώτο υπολογιστικό πλέγμα ήταν επαρκές (αλλά έγινε ο έλεγχος για να έχουμε όσο το δυνατόν αξιόπιστα αποτελέσματα) και γι' αυτό το λόγο οι υπολογισμοί έγιναν με τη πρώτη γεωμετρία. Στα παραπάνω σχήματα 4.1 και 4.2 διακρίνεται η διαφορά των δύο πλεγμάτων.

4.1.2 Διαδικασία επίλυσης στο υπολογιστικό πρόγραμμα FLUENT

Αρχικά, διαβάζουμε τη γεωμετρία από το αρχείο που δημιουργήσαμε με τη βοήθεια του προγράμματος GAMBIT.

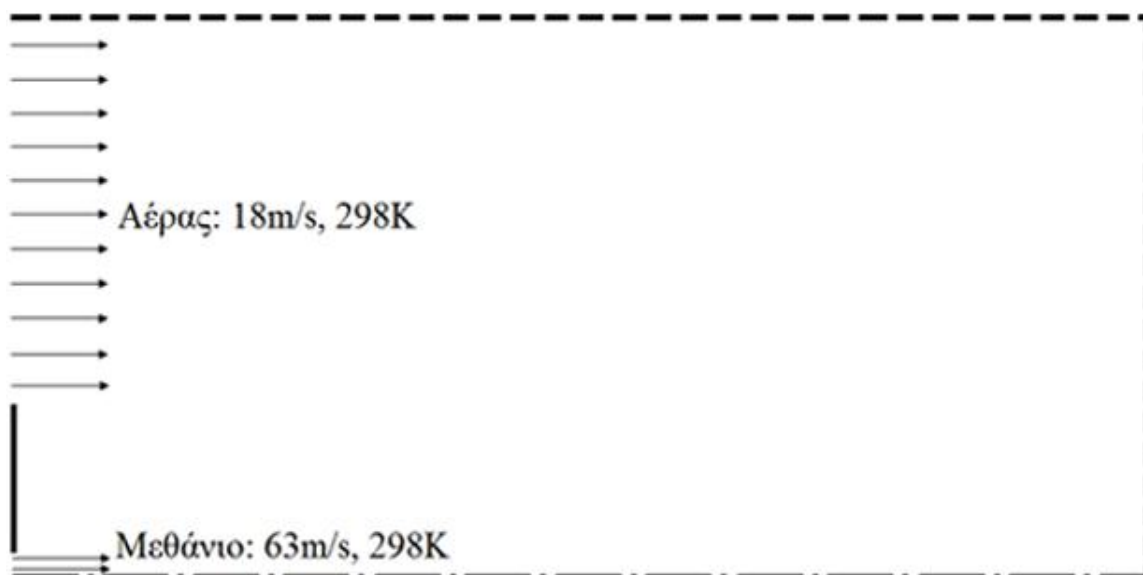
Στη συνέχεια κάνουμε τις απαραίτητες ρυθμίσεις όπως τι πρόβλημα είναι π.χ. αξονοσυμμετρικό, αν είναι χρονομεταβαλλόμενο κλπ., επιλέγουμε το είδος της καύσης (μη προαναμεμειγμένη καύση στη περίπτωσή μας) και τα είδη που αναμειγνύονται δημιουργώντας ακόμη τον πίνακα PDF για τον οποίο έχουμε μιλήσει σε προηγούμενο κεφάλαιο. Κάνουμε τις απαραίτητες ρυθμίσεις για τις συνοριακές συνθήκες κλπ. και επιλύουμε το πρόβλημα για να μελετήσουμε τα αποτελέσματα.

Παρακάτω ακολουθούν τα σχήματα με το σχεδιασμό των ροϊκών γραμμών και τις κατανομές του μεθανίου και των προϊόντων της καύσης που μας ενδιαφέρουν για τη μελέτη και τη μετέπειτα βελτίωση του προβλήματος καύσης που έχουμε προς επίλυση.

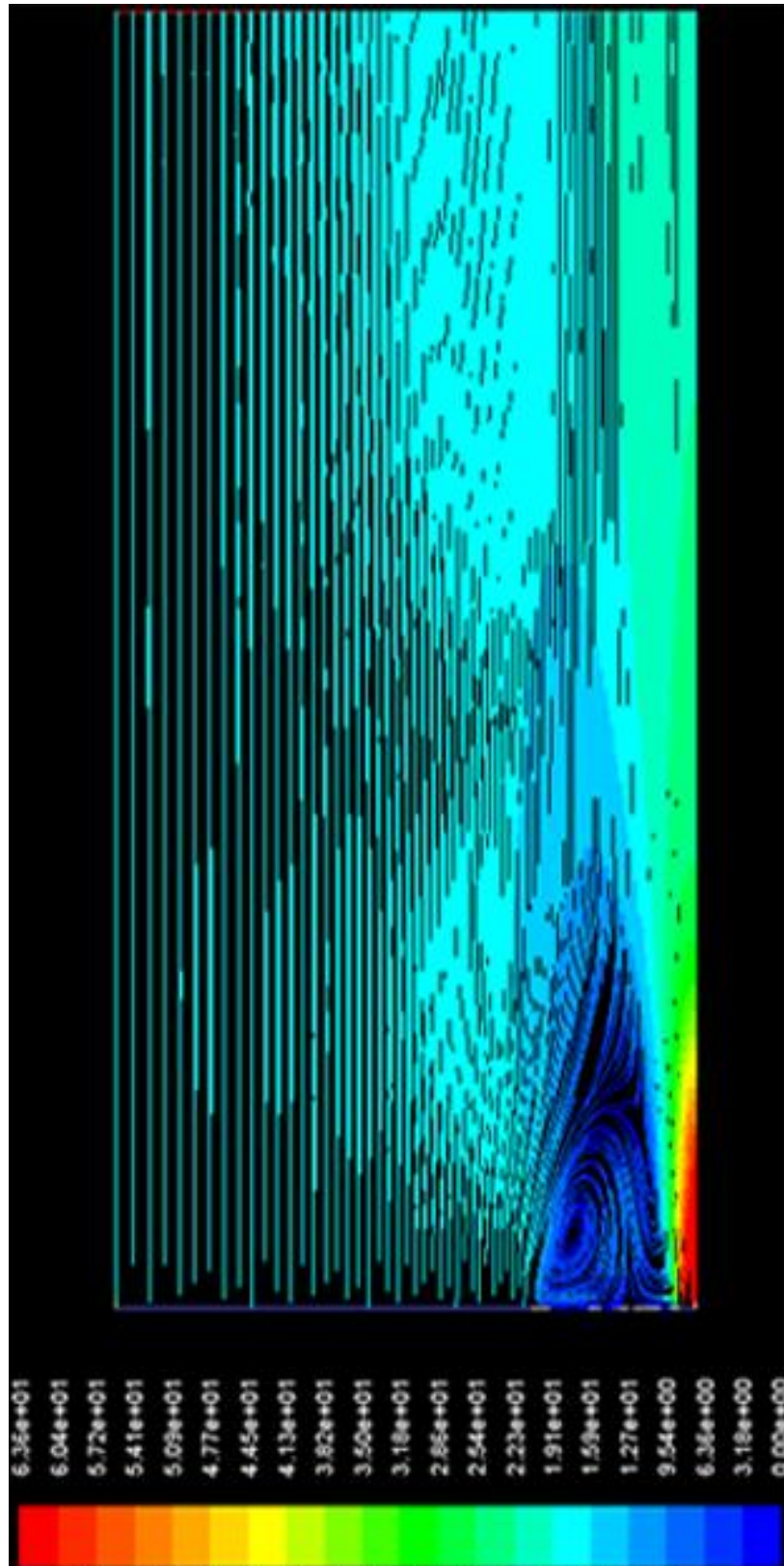
4.2 ΕΠΙΛΥΣΗ ΑΡΧΙΚΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

4.2.1 Επίλυση και αποτελέσματα

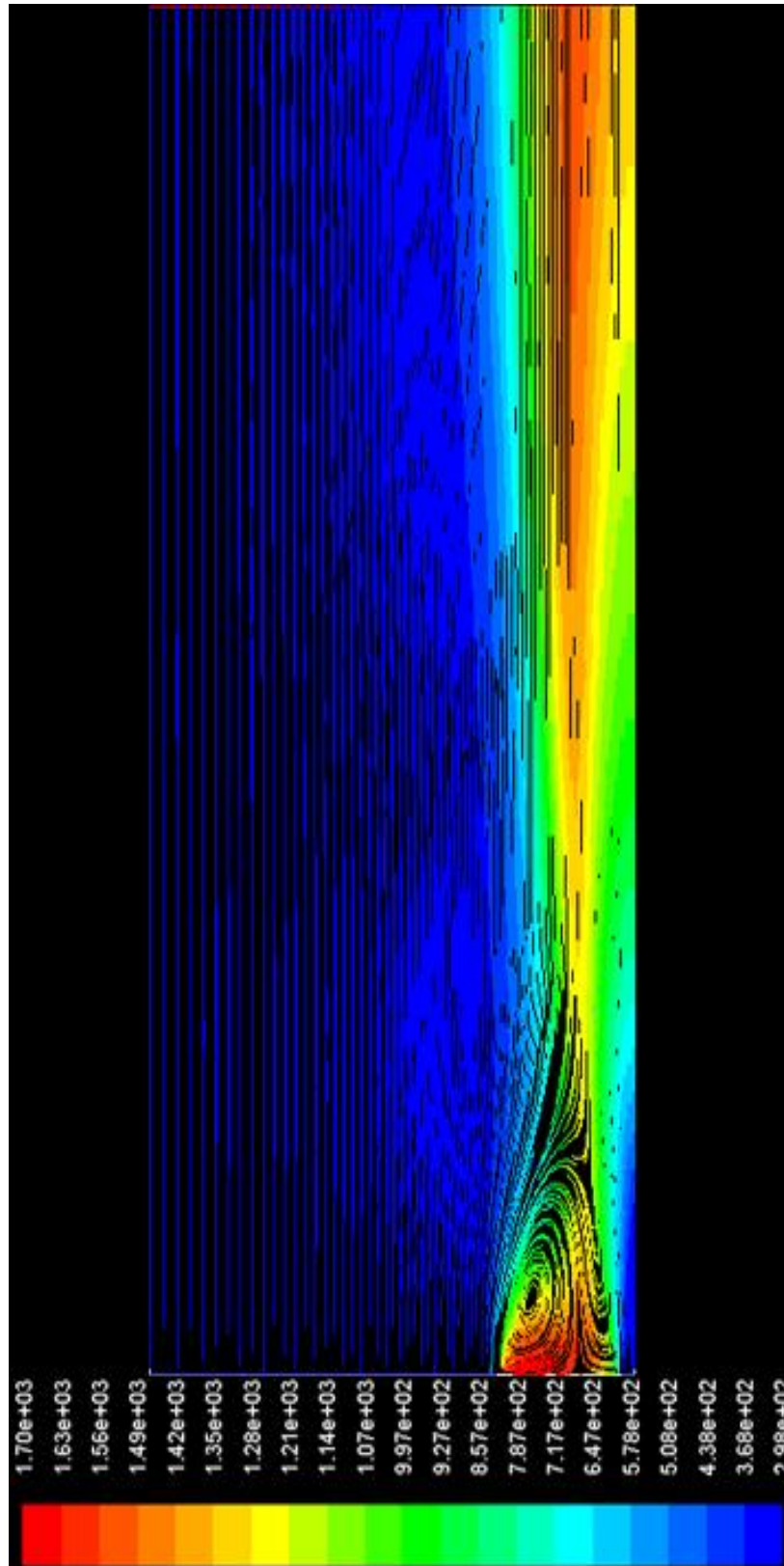
Η γεωμετρία με μερικά από τα δεδομένα που θα εισάγουμε στο πρόγραμμα φαίνονται παρακάτω στο επόμενο σχήμα:



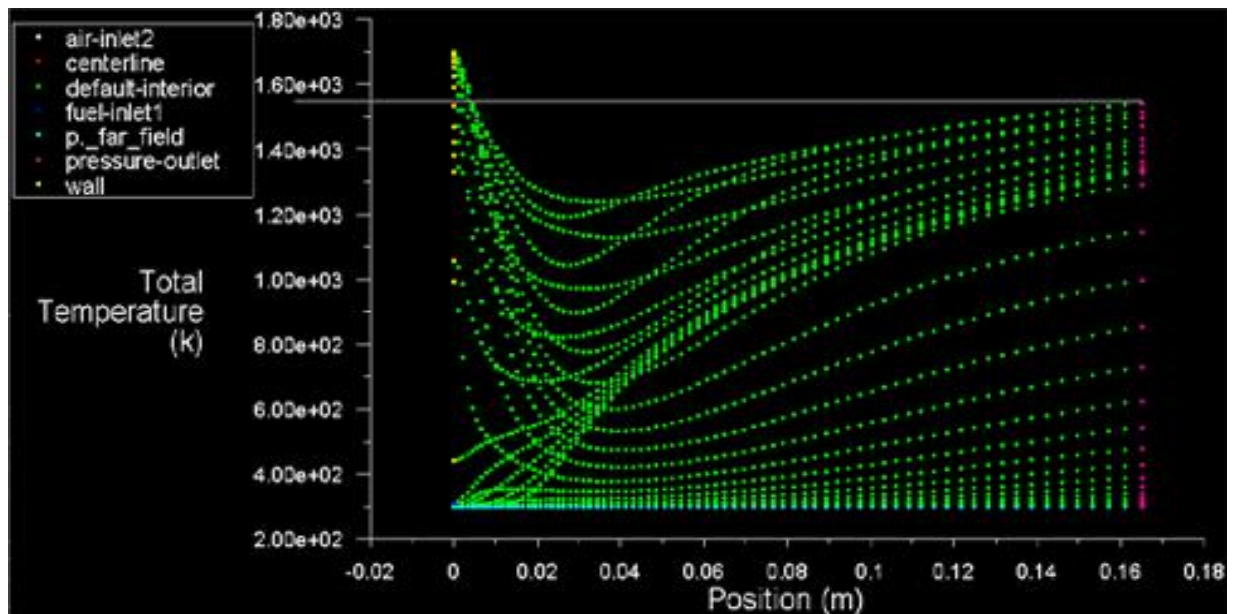
Σχήμα 4.2.1: Γεωμετρία αρχικού προβλήματος καύσης



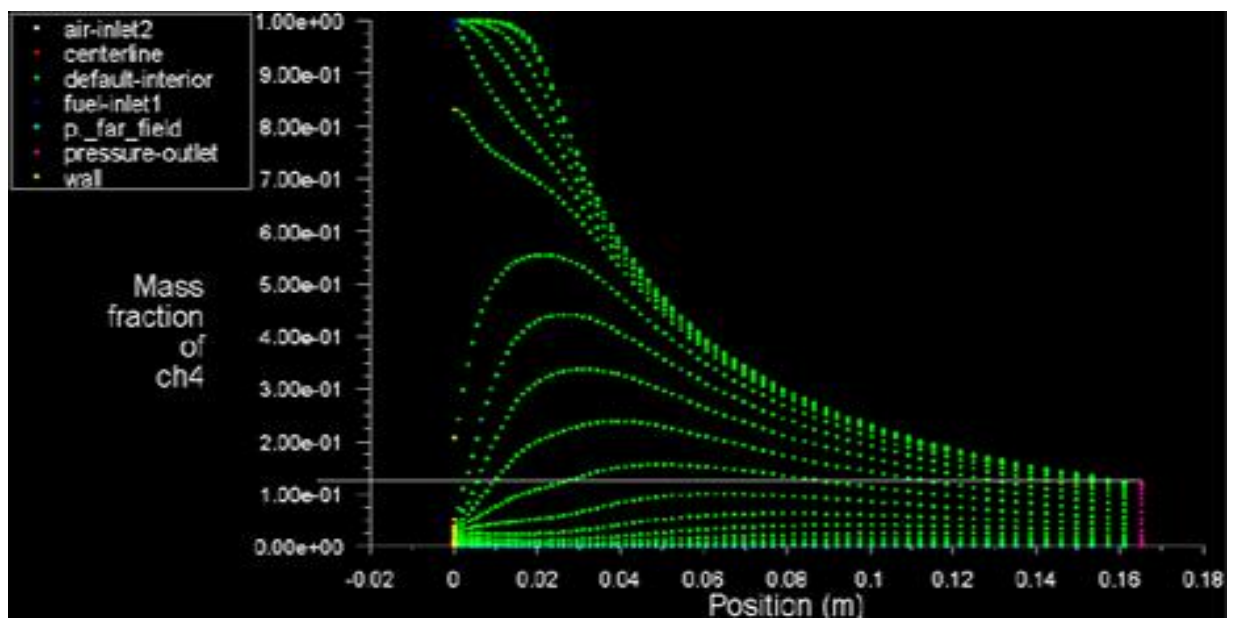
Σχήμα 4.2.2: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με την ταχύτητα)



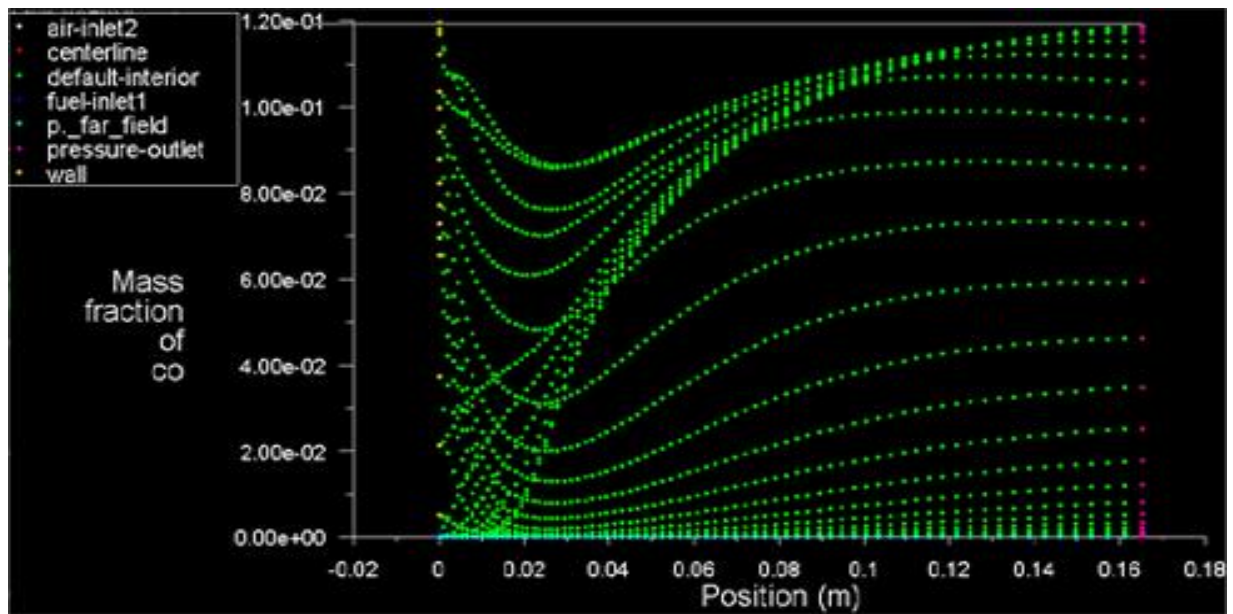
Σχήμα 4.2.3: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με την θερμοκρασία)



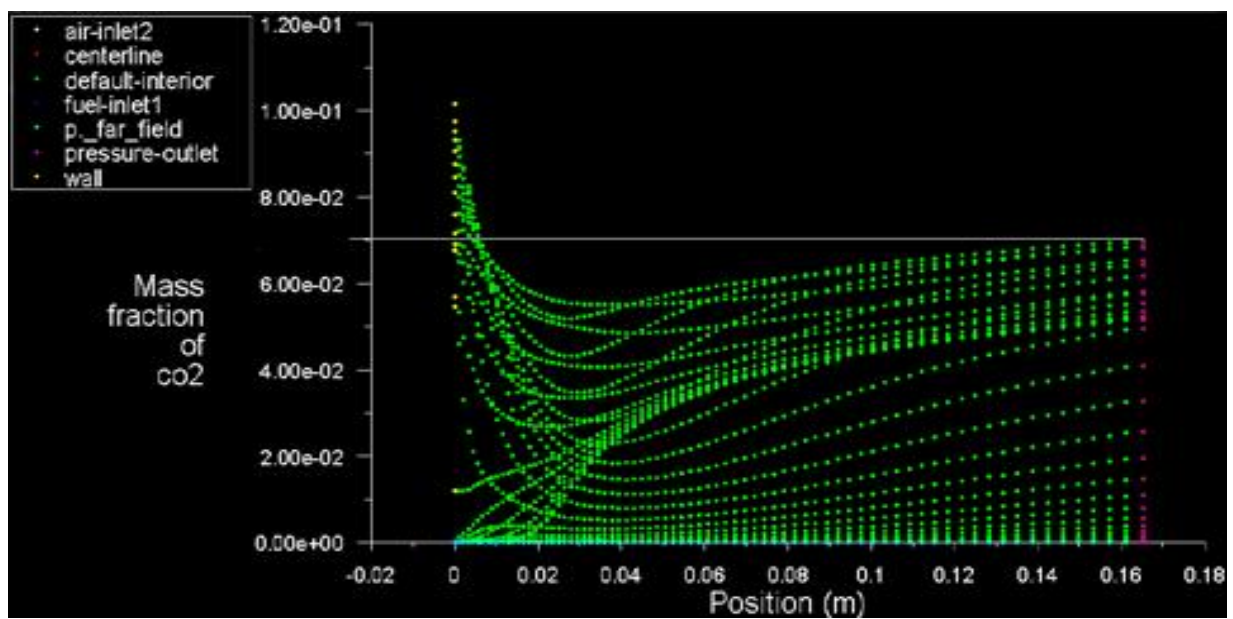
Σχήμα 4.2.4: Κατανομή θερμοκρασίας



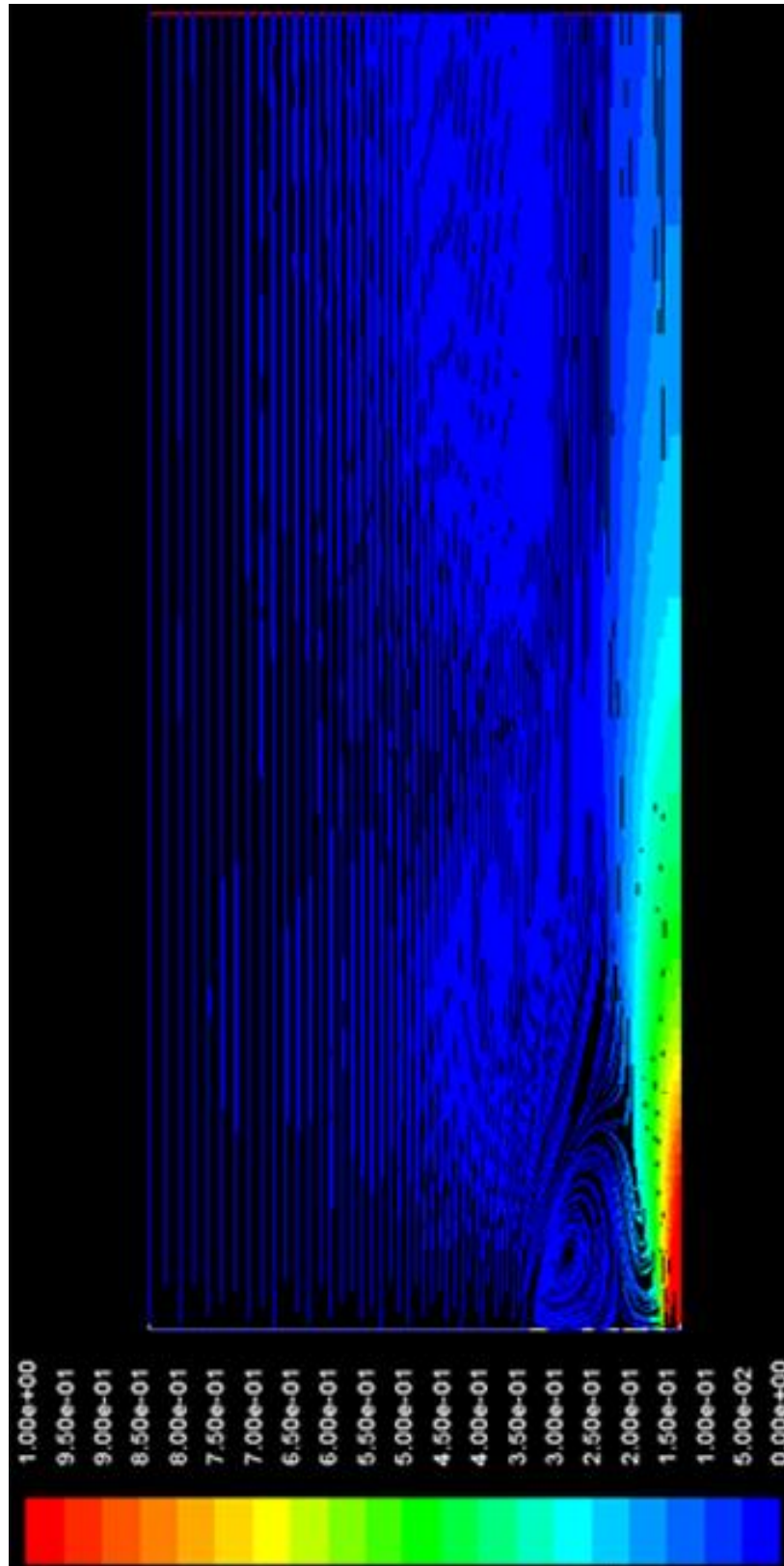
Σχήμα 4.2.5: Κατανομή Μεθανίου (CH_4)



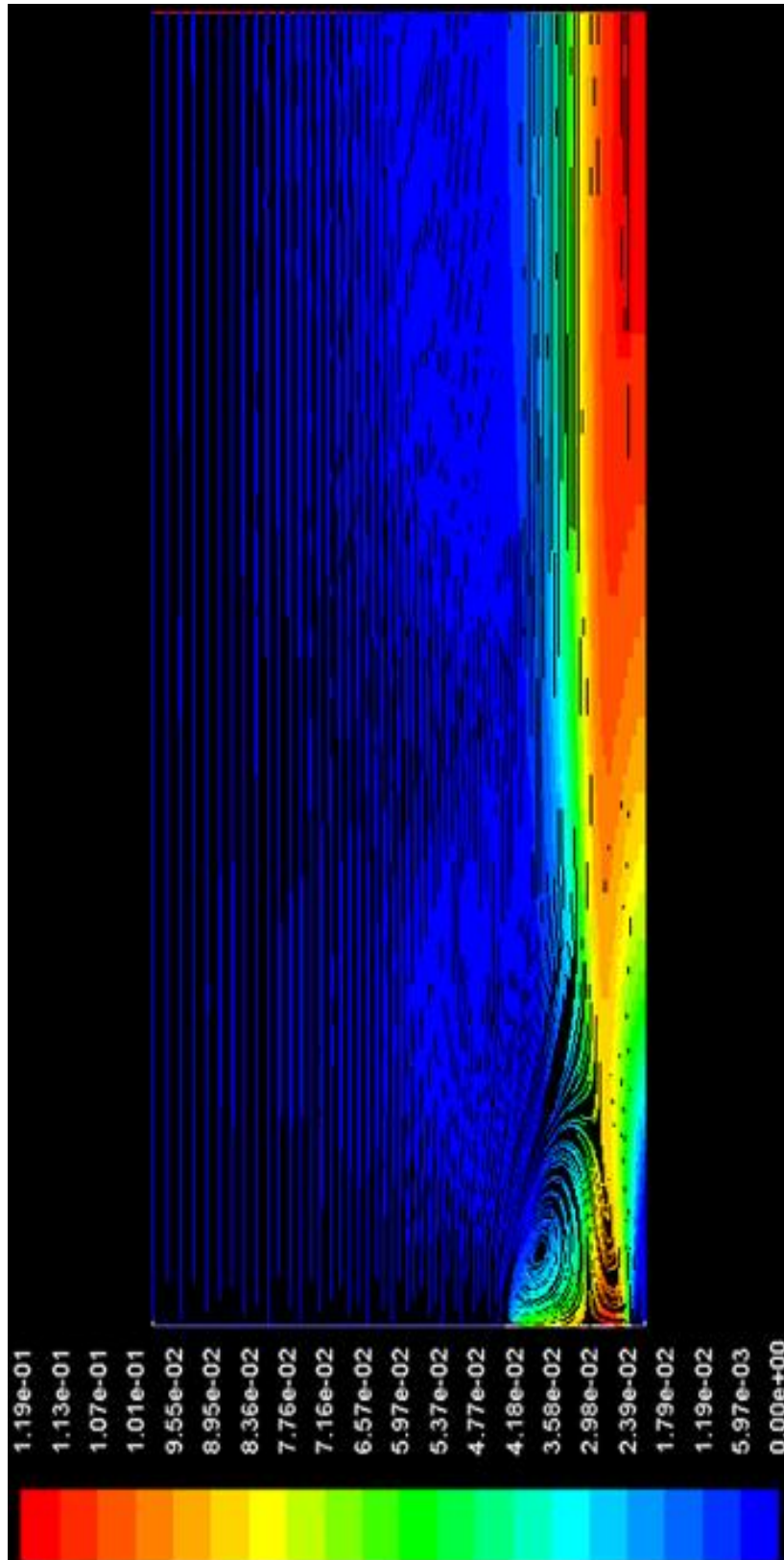
Σχήμα 4.2.6: Κατανομή Μονοξειδίου του άνθρακα (CO)



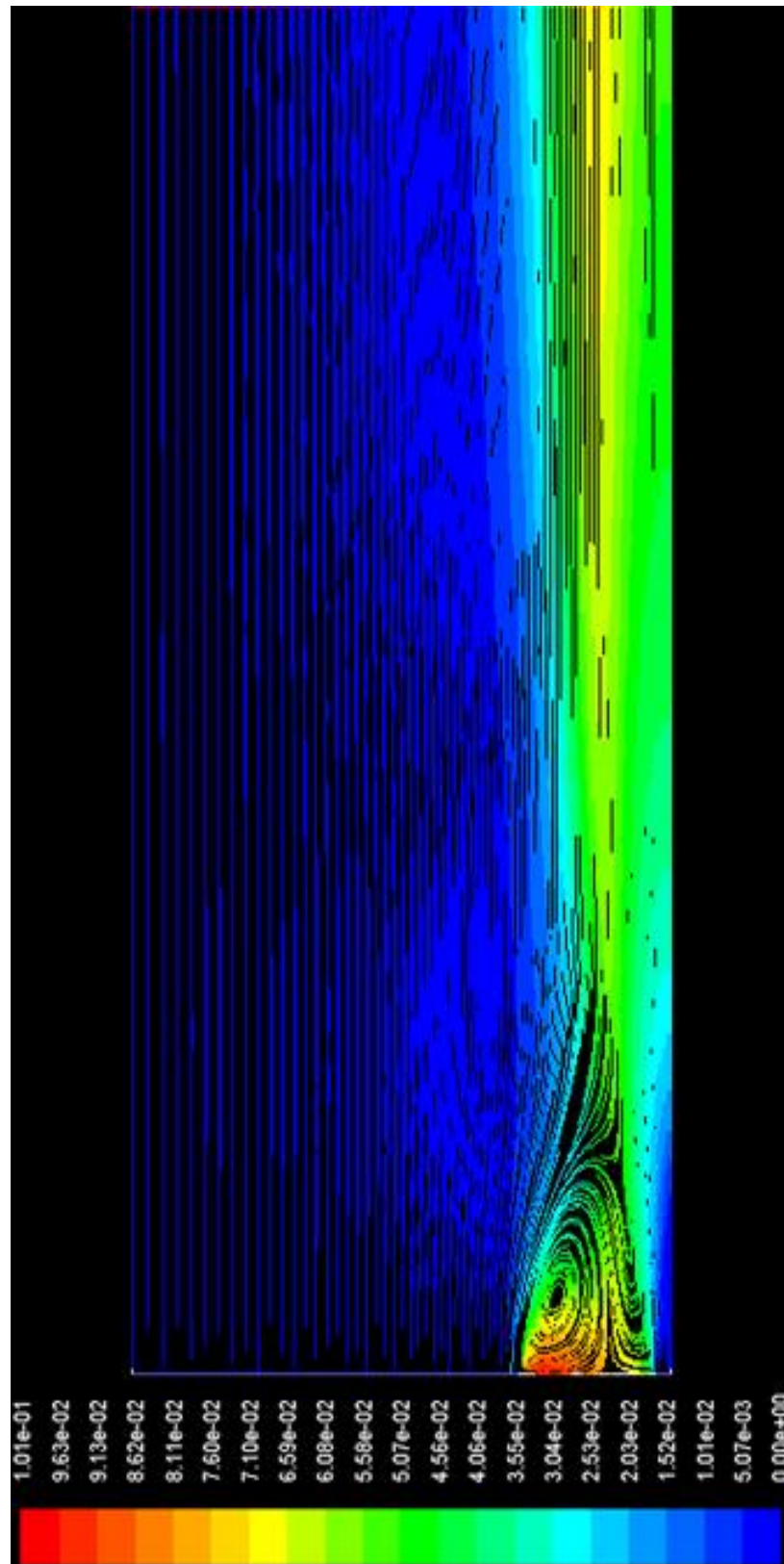
Σχήμα 4.2.7: Κατανομή Διοξειδίου του άνθρακα (CO₂)



Σχήμα 4.2.8: Ροϊκές γραμμές με (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα του μεθανίου)



Σχήμα 4.2.9: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα του μονοξειδίου του άνθρακα)



Σχήμα 4.10: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα του διοξειδίου του άνθρακα)

4.2.2 Ανάλυση των αποτελεσμάτων του αρχικού προβλήματος

Από τα παραπάνω σχήματα μπορούμε να παρατηρήσουμε πολλά πράγματα για τη ροή των ρευστών και την καύση που πραγματοποιείται.

Στα σχήματα 4.2.2 και 4.2.3 μπορούμε να δούμε τις ροϊκές γραμμές σ'όλη τη γεωμετρία, καθώς και τις αυξομειώσεις της ταχύτητας και της θερμοκρασίας αντίστοιχα. Ένα ακόμη ενδιαφέρον στοιχείο που μας δίνει ο σχεδιασμός των ροϊκών γραμμών είναι οι ζώνες ανακυκλοφορίας οι οποίες αναλύονται σε προηγούμενο κεφάλαιο και παίζουν σημαντικό ρόλο στη διαδικασία της καύσης και στη σταθεροποίηση της φλόγας, καθώς ανάλογα με τη ροή του αέρα και του καυσίμου υπάρχει μεγάλη επίδραση στον τομέα αυτό.

Στο σχήμα 4.2.4, έχουμε την κατανομή της θερμοκρασίας σε όλη τη γεωμετρία κάτι που μας ενδιαφέρει πολύ καθώς αυτή είναι που εκμεταλευόμαστε ουσιαστικά σε έναν καυστήρα και στις δοκιμές που έγιναν και παρουσιάζονται παρακάτω ώστε να βελτιώσουμε την καύση.

Στα σχήματα 4.2.5, 4.2.6, 4.2.7 είναι οι κατανομές του μεθανίου (CH_4), του μονοξειδίου του άνθρακα (CO) και του διοξειδίου του άνθρακα (CO_2) αντίστοιχα. Το μεθάνιο που είναι το καύσιμό που χρησιμοποιείται στο πρόβλημα αυτό, θέλουμε να αντιδράσει τελείως κατά τη διαδικασία της καύσης, ώστε να μην έχουμε μεθάνιο κατά την έξοδο. Όπως παρατηρούμε όμως από το σχήμα 4.2.5 το μεθάνιο δεν αντιδράει πλήρως και έτσι περισσεύει. Αυτό δεν το θέλουμε φυσικά και ένας πιθανός λόγος που συμβαίνει αυτό είναι επειδή το καύσιμο και ο αέρας δεν στροβιλίζονται και δεν ανακατεύονται μαζί ικανοποιητικά, ώστε να αποτελούν ομοιογενές μίγμα, κάτι το οποίο θα είχε ως αποτέλεσμα, γύρω από κάθε μόριο καυσίμου να υπάρχουν μόρια οξυγόνου έτοιμα να ενωθούν μαζί του. Με τον τρόπο αυτό θα είχαμε καλύτερη καύση, κάτι το οποίο θέλει βελτίωση στην περίπτωσή μας και όπως θα δούμε παρακάτω έγιναν κάποιες αλλαγές που έφεραν τα αποτελέσματα που θέλαμε.

Στο σχήμα 4.2.6 βλέπουμε την κατανομή του μονοξειδίου του άνθρακα (CO), όπου είναι ένα προϊόν της καύσης που θέλουμε να το έχουμε στην έξοδο σε όσο μικρότερες τιμές γίνεται. Το μονοξείδιο του άνθρακα σαν προϊόν καύσης είναι ζημιογόνο για αρκετούς λόγους. Πρωτίστως, διότι αποτελεί επικίνδυνο ρύπο για τον άνθρωπο καθώς είναι πολύ επικίνδυνος για την υγεία του, αλλά επίσης αυτό που μας ενδιαφέρει είναι ότι η ύπαρξη μονοξειδίου του άνθρακα δηλώνει μη τέλεια καύση και αυτό πρακτικά συνεπάγεται μείωση της παραγόμενης ενέργειας από την καύση. Ακόμη όμως, δημιουργεί λειτουργικά προβλήματα στη μονάδα καύσης αυτήν καθ'εαυτή, ελαττώνει το χρόνο ζωής των εγκαταστάσεων και απαιτεί αυξημένο κόστος συντήρησης σε ανθρωποώρες και ανταλλακτικά. Γι'αυτούς τους πολύ σημαντικούς λόγους θέλουμε να έχουμε και στο μονοξείδιο όσο γίνεται μειωμένες τιμές κατά την έξοδο και είναι άλλος ένας τομέας που βελτιώθηκε με τις δοκιμές που έγιναν και παρουσιάζονται στη συνέχεια.

Στο σχήμα 4.2.7, παρατηρούμε την κατανομή του διοξειδίου του άνθρακα (CO_2), όπου θέλουμε να έχουμε στην περίπτωση αυτή αύξησή του. Αυτό έχει σχέση με το ότι θέλουμε να έχουμε μείωση του προϊόντος του μονοξειδίου του άνθρακα (CO), το οποίο αποτελεί όπως είπαμε προϊόν ατελούς καύσης και παράγεται όταν το μεθάνιο (CH_4), δεν αντιδρά σωστά με το οξυγόνο (O_2) για να παράγει το διοξείδιο του άνθρακα (CO_2). Άρα, αύξηση του διοξειδίου και μείωση του μονοξειδίου του άνθρακα μας δηλώνει ότι έχουμε καλύτερη καύση.

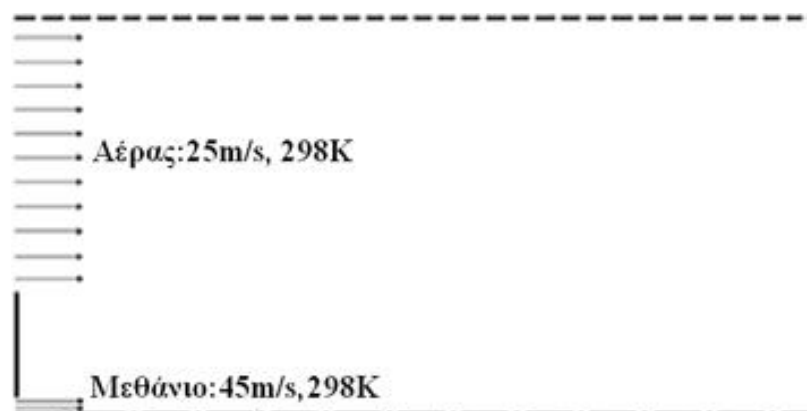
Τα επόμενα τρία σχήματα (σχήμα 4.2.8, 4.2.9 και 4.2.10) παρουσιάζουν πολύ ενδιαφέρον καθώς βλέπουμε τις ροϊκές γραμμές με χρωματισμό ανάλογα με το μεθάνιο, το μονοξείδιο του άνθρακα και το διοξείδιο του άνθρακα σε όλη τη γεωμετρία.

4.3 ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΓΙΑ ΤΗ ΒΕΛΤΙΩΣΗ ΤΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

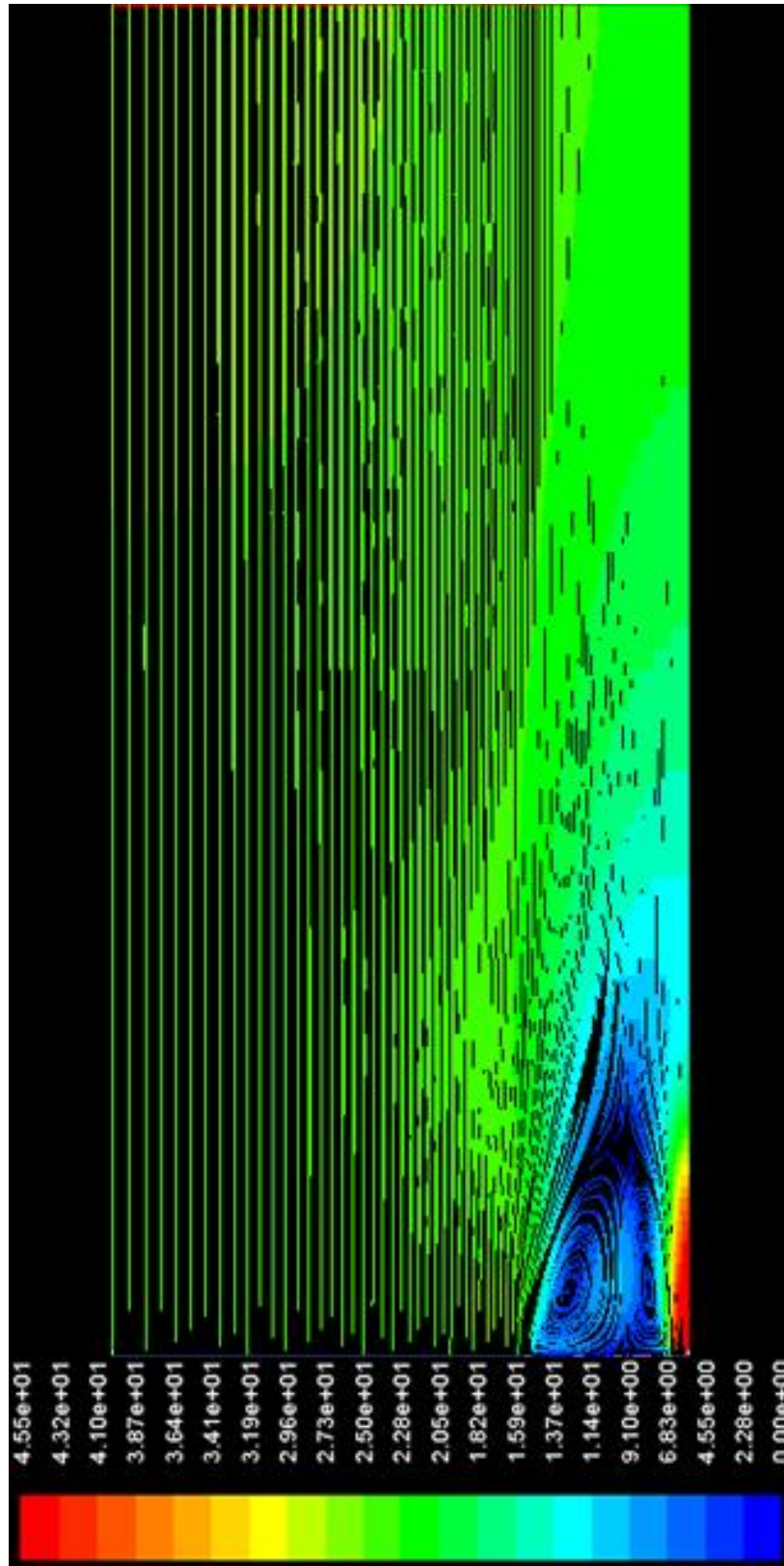
4.3.1 Πρώτη πρόταση και τα αποτελέσματα

Προσπαθώντας να κάνω κάποιες βελτιώσεις και να πάρουμε πιο επιθυμητά αποτελέσματα, έγιναν κάποιες δοκιμές, σε πρώτο στάδιο κυρίως αλλάζοντας τις ταχύτητες εισόδου του αέρα και του καυσίμου κάτι που δεν παρουσιάζει ιδιαίτερη δυσκολία στο να γίνει και πρακτικά στο σύστημά μας, καθώς επίσης και τις θερμοκρασίες τους στη συνέχεια.

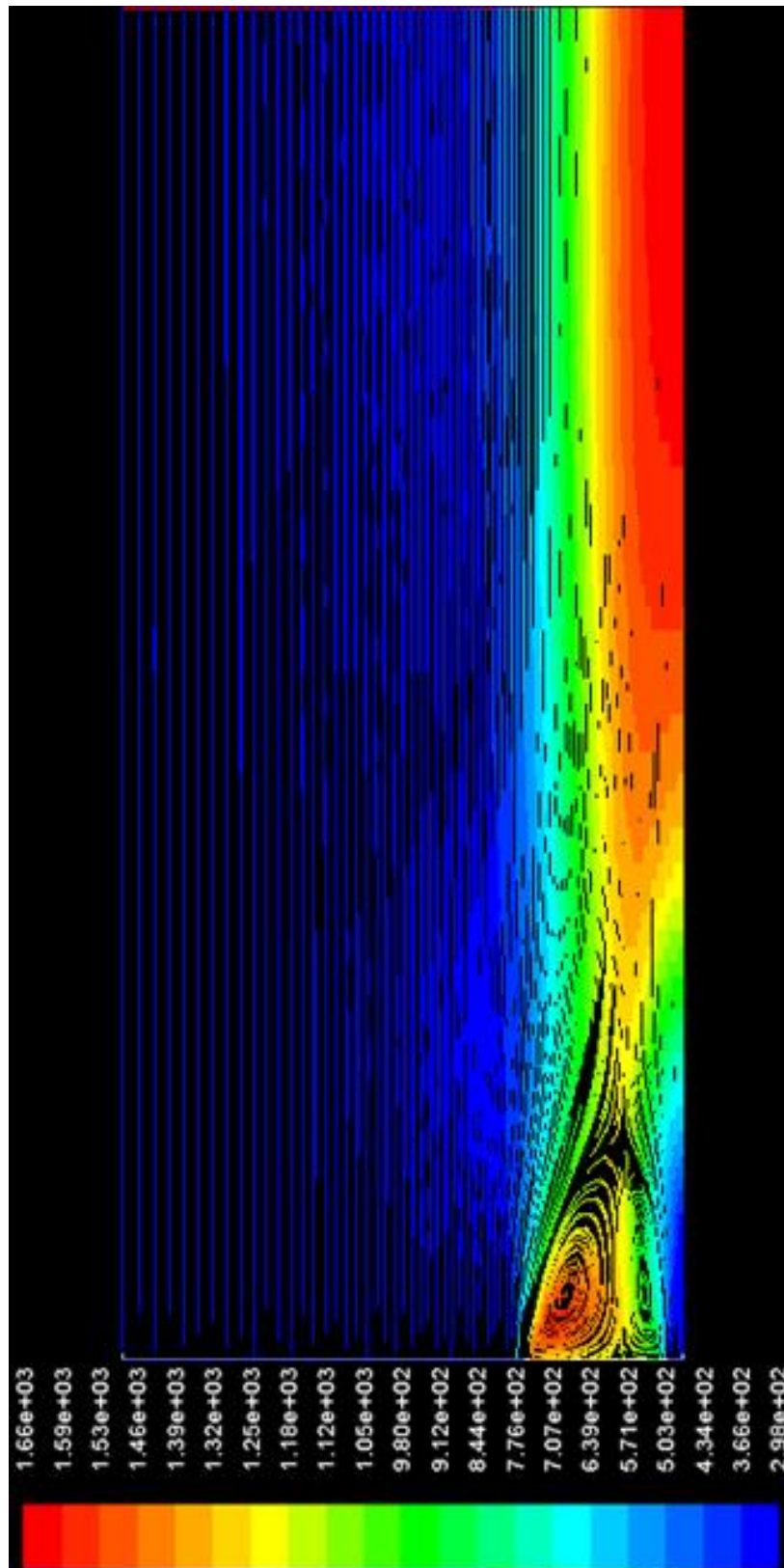
Η γεωμετρία με τις αλλαγές που έγιναν για τη βελτίωση έπειτα από δοκιμές, φαίνονται στο επόμενο σχήμα (Σχήμα 4.3.1) (αύξηση ταχύτητας εισερχόμενου αέρα στα 25m/s και μείωση ταχύτητας καυσίμου στα 45m/s, ενώ οι θερμοκρασίες των ρευστών παρέμειναν 298K, δηλαδή συνθήκες περιβάλλοντος):



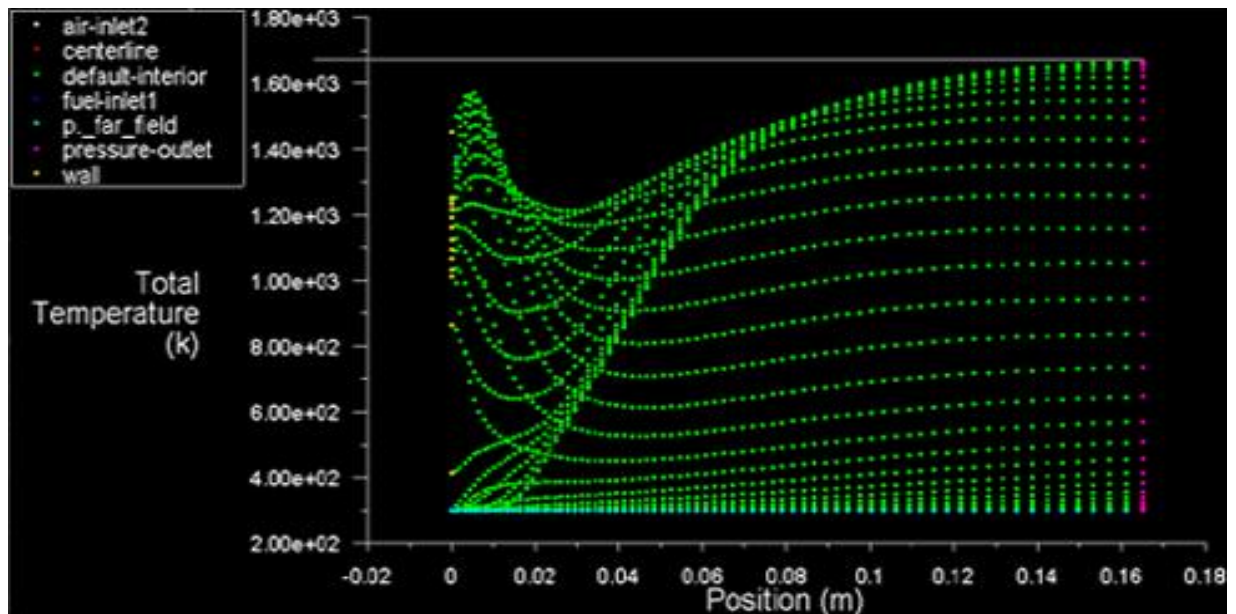
Σχήμα 4.3.1: Γεωμετρία προβλήματος καύσης (πρώτη περίπτωση)



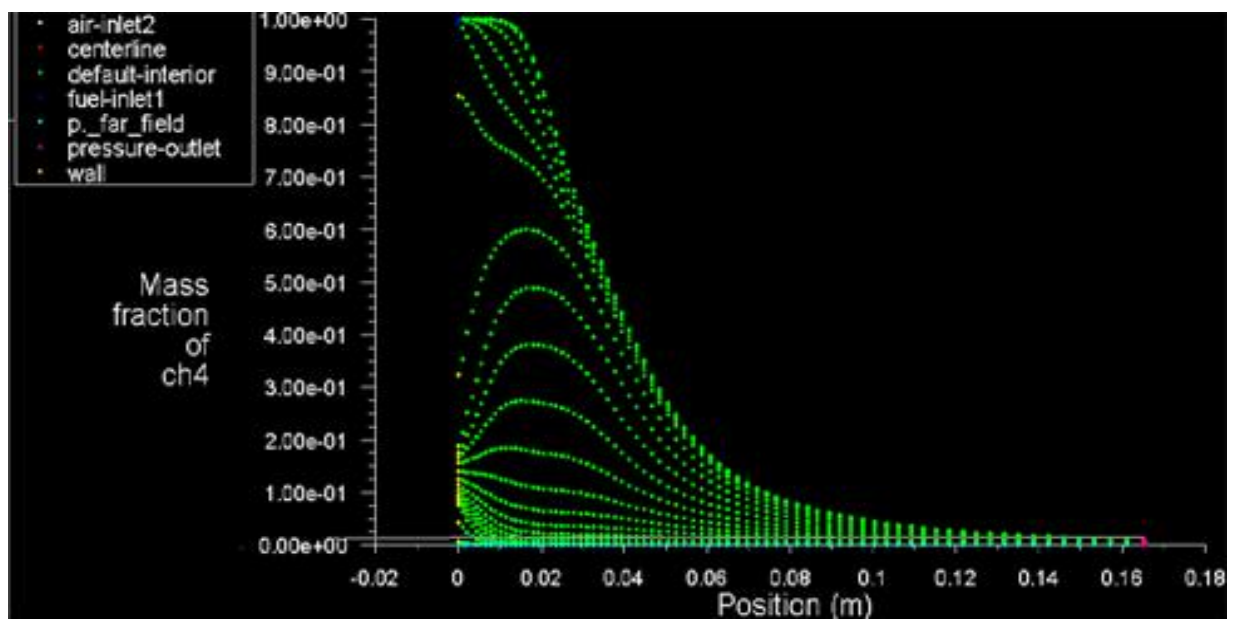
Σχήμα 4.3.2: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη ταχύτητα)



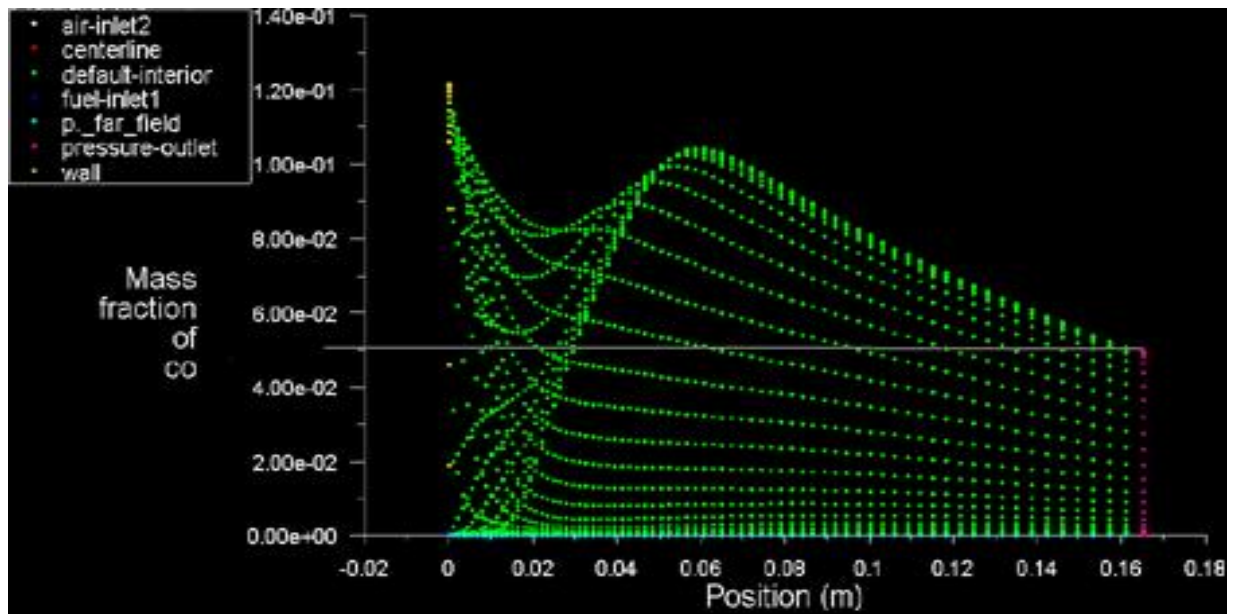
Σχήμα 4.3.3: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με την θερμοκρασία)



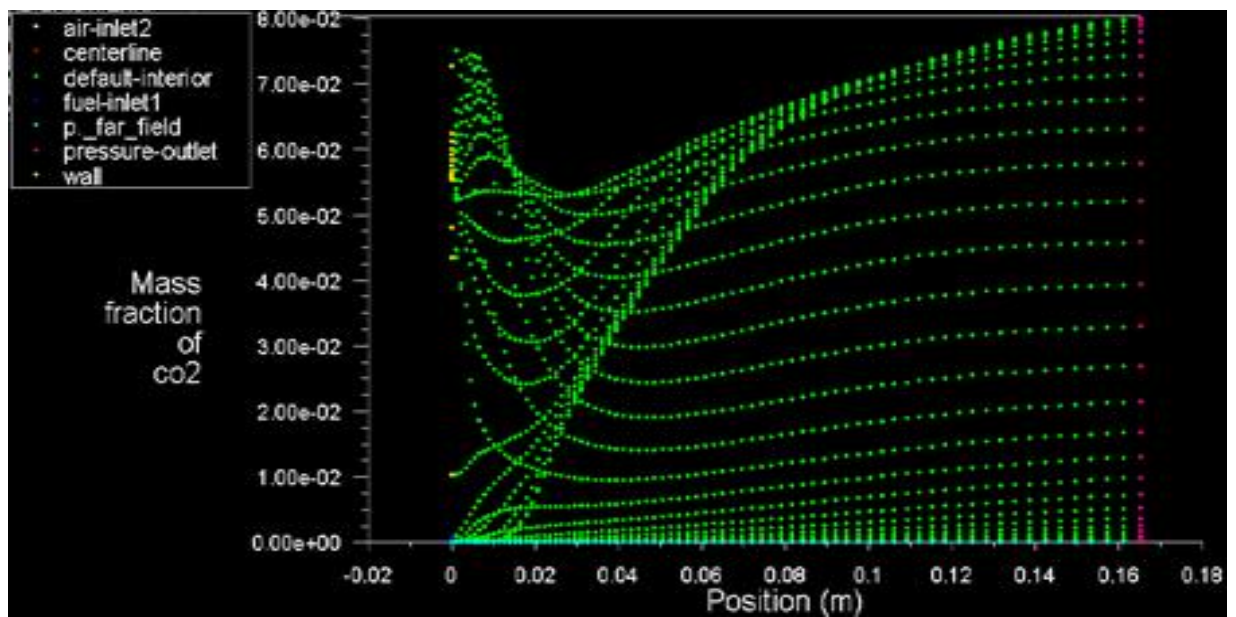
Σχήμα 4.3.4: Κατανομή θερμοκρασίας



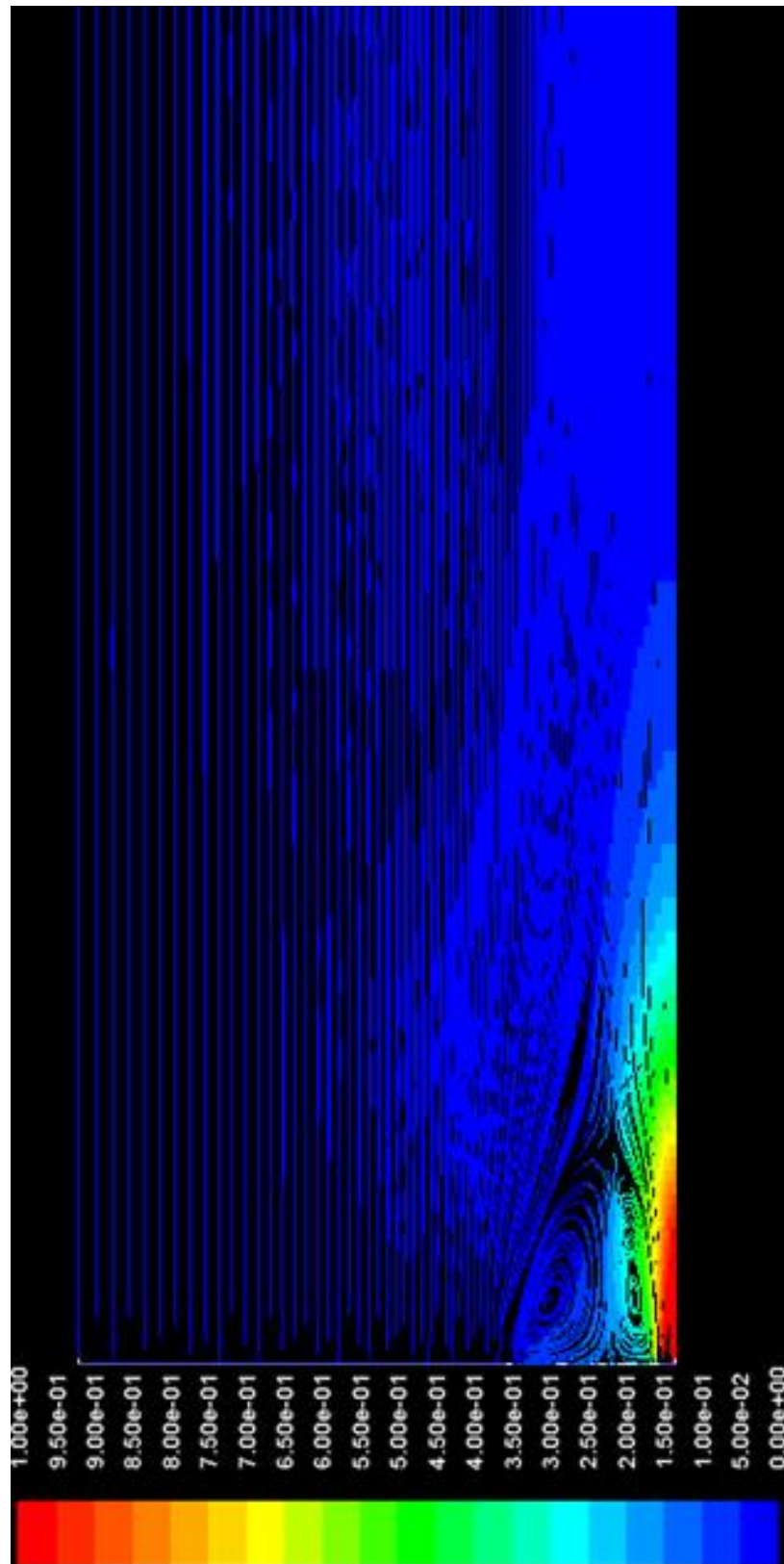
Σχήμα 4.3.5: Κατανομή μεθανίου (CH_4)



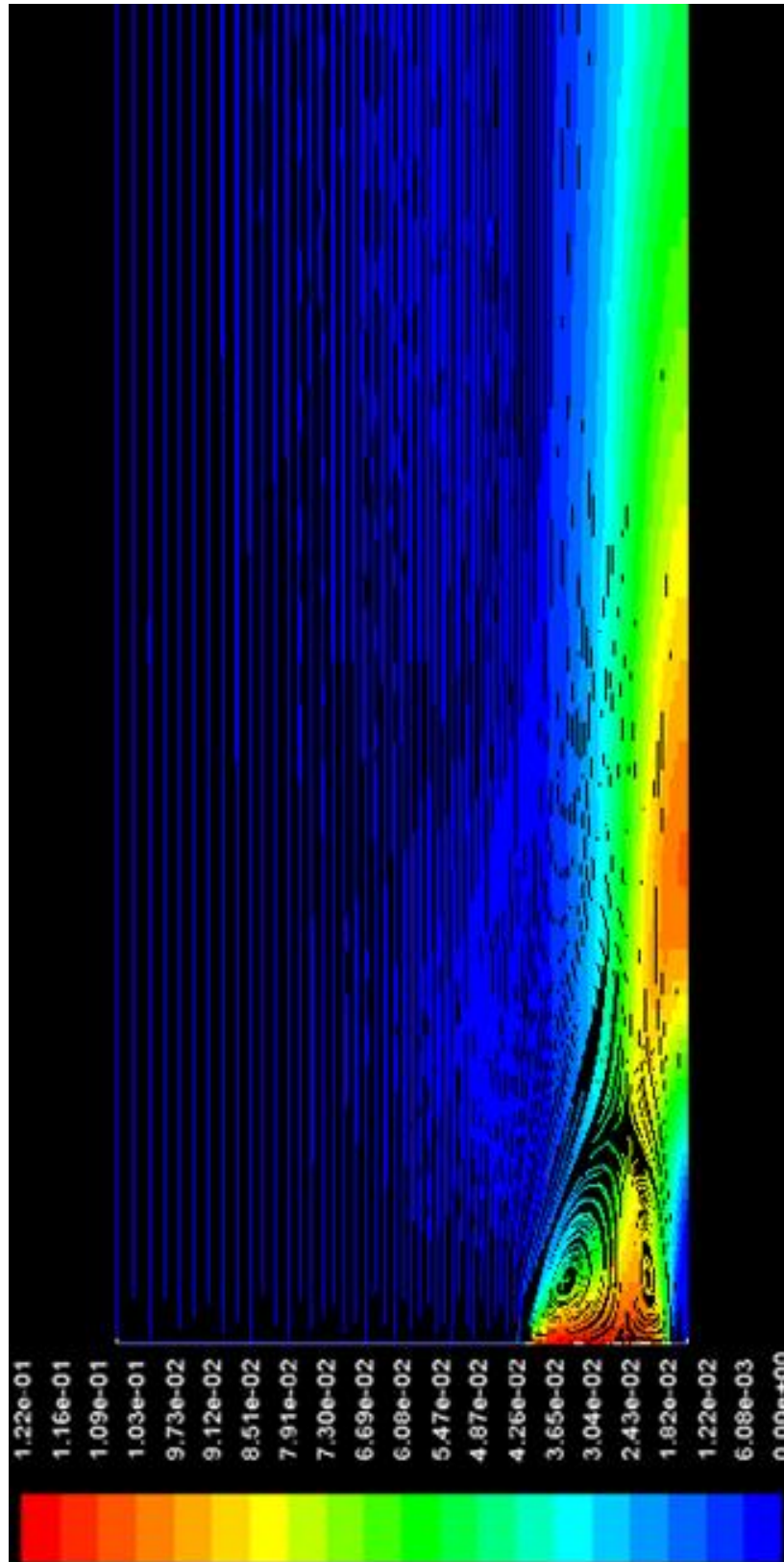
Σχήμα 4.3.6: Κατανομή μονοξειδίου του άνθρακα (CO)



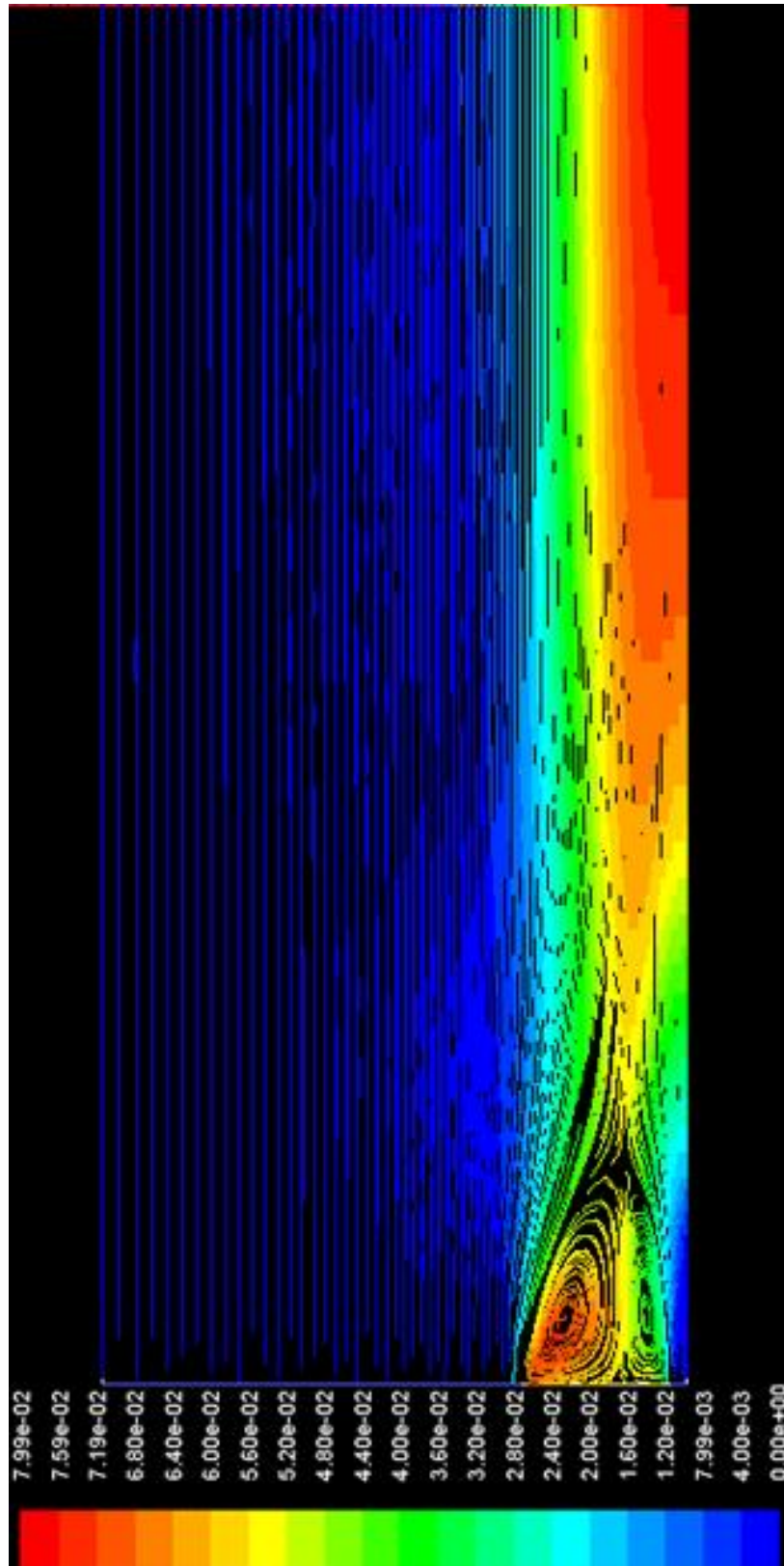
Σχήμα 4.3.7: Κατανομή διοξειδίου του άνθρακα (CO₂)



Σχήμα 4.3.8: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα μεθανίου)



Σχήμα 4.3.9: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα του μονοξειδίου του άνθρακα)



Σχήμα 4.3.10: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα του διοξειδίου του άνθρακα)

4.3.2 Ανάλυση των αποτελεσμάτων της πρώτης πρότασης

Αρχικά, ασχολήθηκα με τις ταχύτητες εισόδου του αέρα και του καυσίμου προσπαθώντας να πετύχω καλύτερες συνθήκες καύσης και άρα καλύτερα αποτελέσματα. Τις καλύτερες τις είχα με αύξηση του εισερχόμενου αέρα από 18m/s σε 25m/s αλλά και μείωση του εισερχόμενου καυσίμου από 63m/s σε 45m/s.

Στα σχήματα 4.3.2 και 4.3.3 παρατηρούμε κάποιες διαφορές στις ροϊκές γραμμές με τη σημαντικότερη στην περιοχή ανακακυκλοφορία ενώ ακόμη στο τελευταίο φαίνεται καθαρά η διαφορά στη θερμοκρασία κατά μήκος της γεωμετρίας.

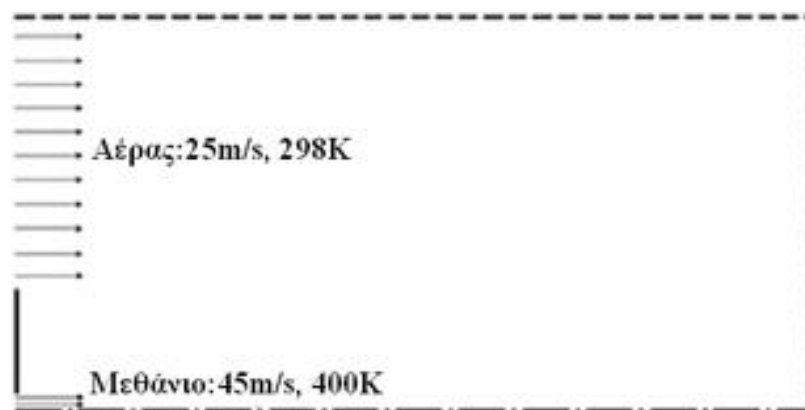
Η αύξηση στη θερμοκρασία είναι σημαντική και φαίνεται πολύ καθαρά αν συγκρίνουμε το σχήμα 4.3.4 όπου έχουμε την κατανομή της θερμοκρασίας, με το αντίστοιχο σχήμα του αρχικού προβλήματος (σχήμα 4.2.4).

Μεγάλες βελτιώσεις βλέπουμε και στα επόμενα σχήματα, όπου έχουμε μηδενικές τιμές μεθανίου στην έξοδο, σημαντική μείωση του μονοξειδίου του άνθρακα και αντίστοιχη αύξηση του διοξειδίου του άνθρακα. Από τις κατανομές στα σχήματα 4.3.5-7 συμπεραίνουμε ότι υπήρξε καλύτερη καύση και άρα οι ρυθμίσεις στις συγκεκριμένες παραμέτρους που έγιναν ήταν σωστές.

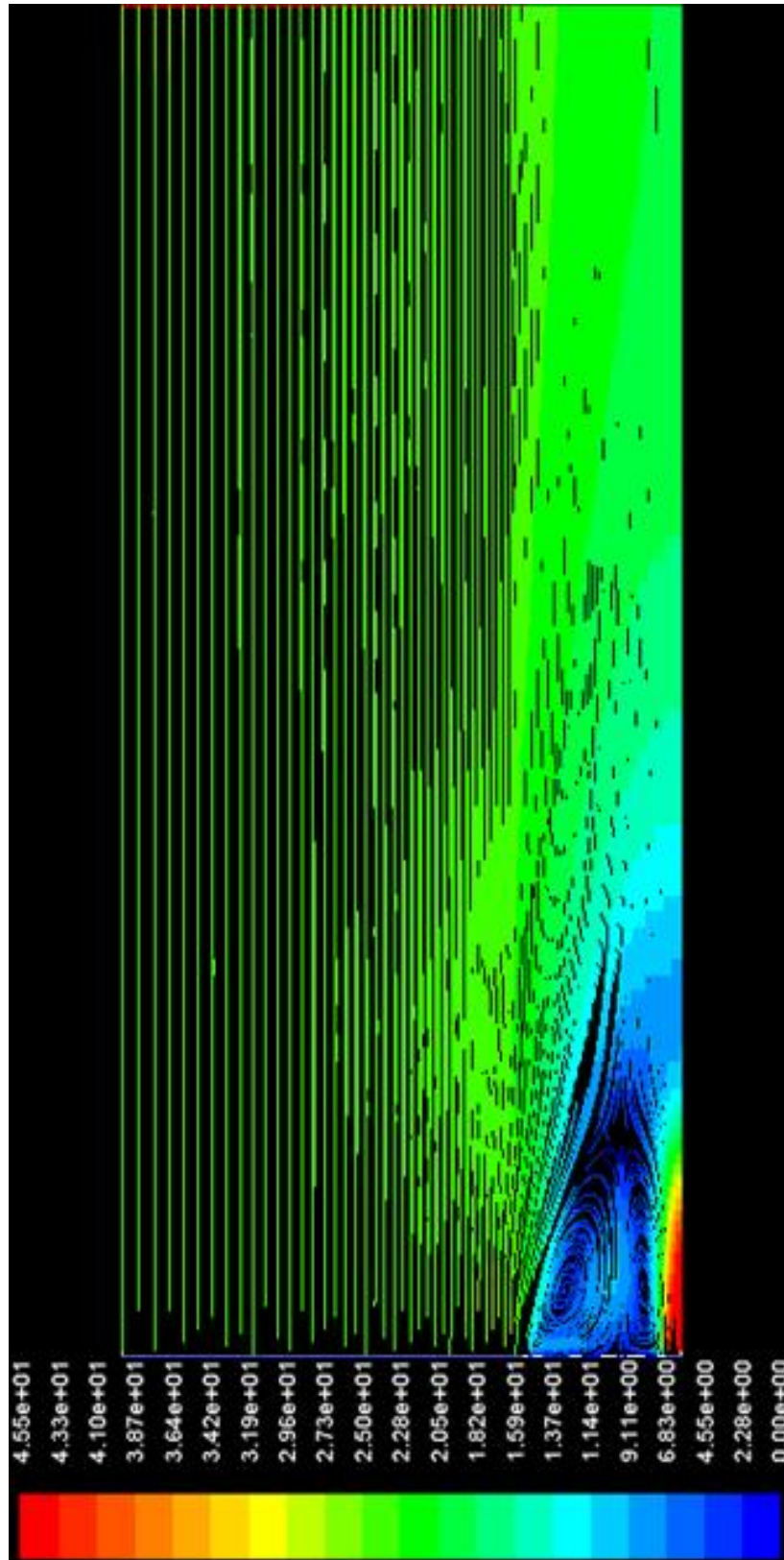
Παρ'όλες τις δοκιμές που έγιναν στις ταχύτητες εισόδου των δύο ρευστών και τη βελτίωση στα αποτελέσματα, υπάρχουν μερικές ακόμα περιπτώσεις που εξετάστηκαν και παρουσιάζουν αρκετό ενδιαφέρον και ακολουθούν παρακάτω.

4.3.3 Δεύτερη πρόταση και τα αποτελέσματα

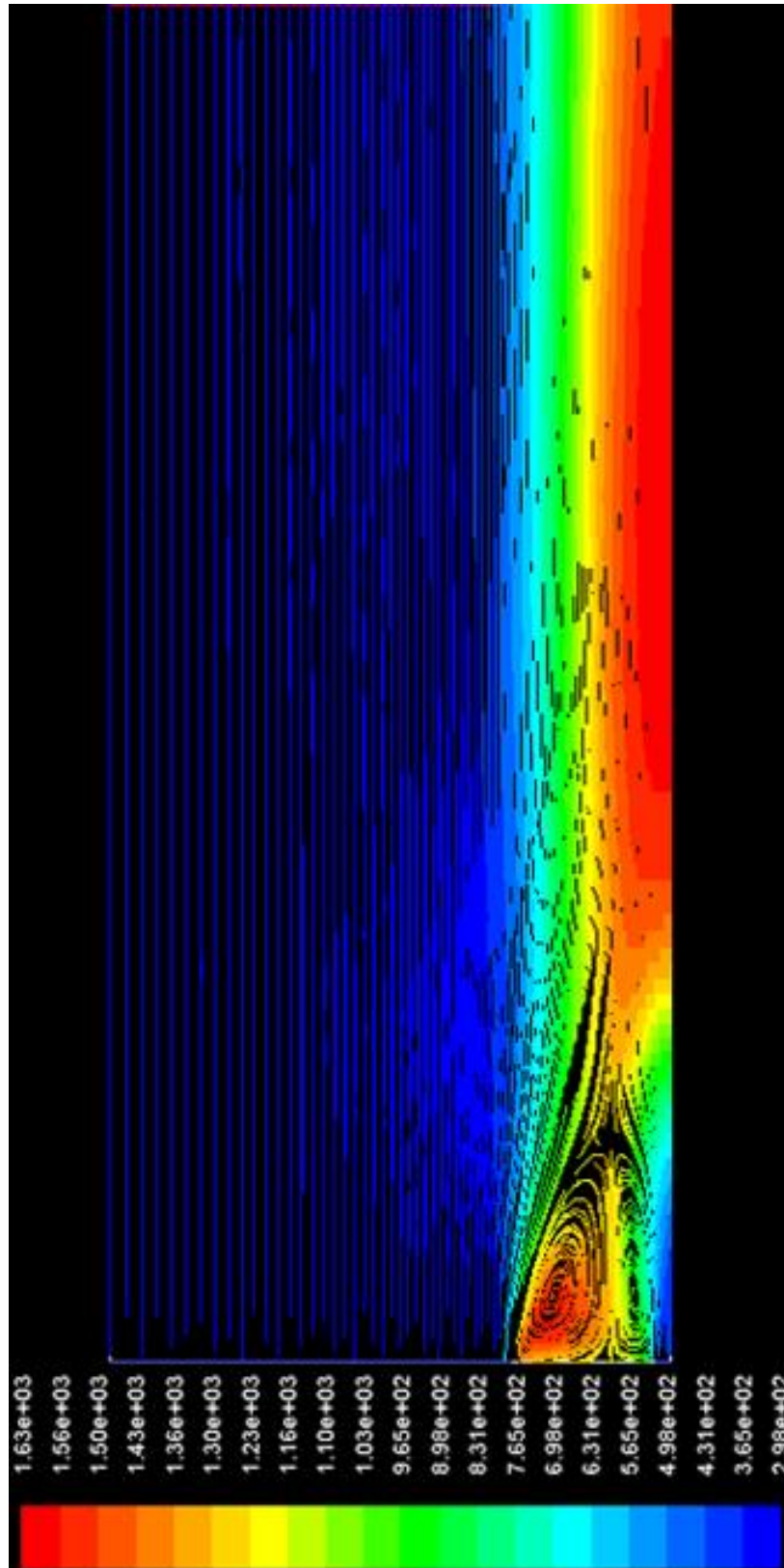
Μια περίπτωση που μας έδωσε ακόμα καλύτερα αποτελέσματα, ήταν όταν αφήνοντας τις αλλαγές της παραπάνω δοκιμής, αυξήσαμε τη θερμοκρασία του εισερχόμενου καυσίμου (από συνθήκες περιβάλλοντος 298K στους 400K, όπως φαίνεται στο σχήμα 4.3.11 που ακολουθεί).



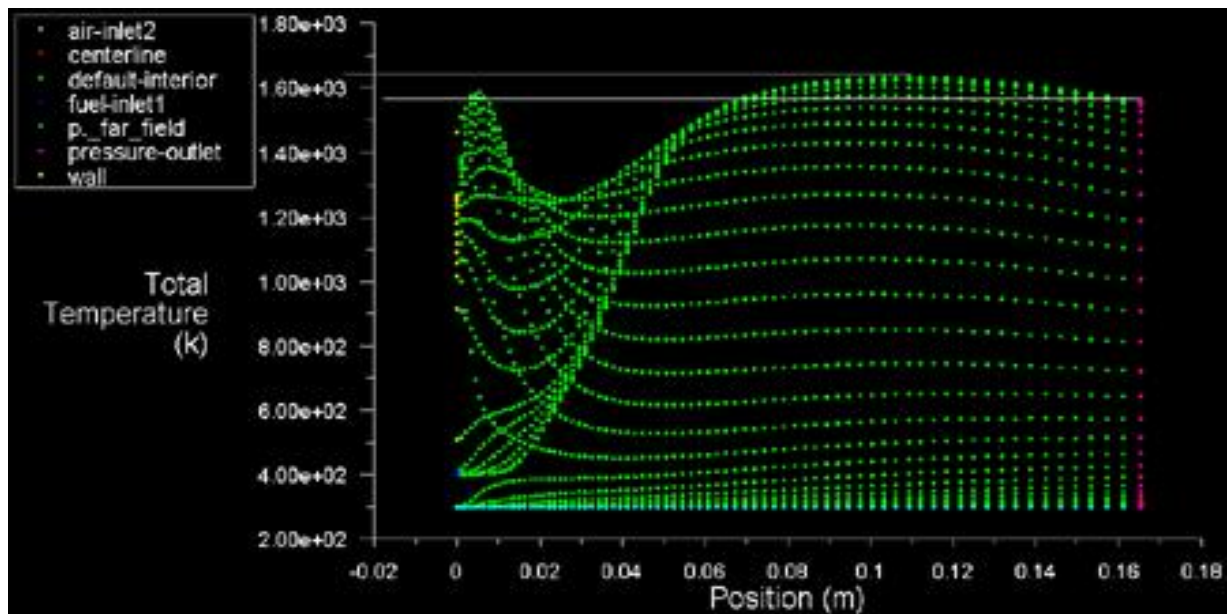
Σχήμα 4.3.11: Γεωμετρία προβλήματος καύσης (δεύτερη περίπτωση)



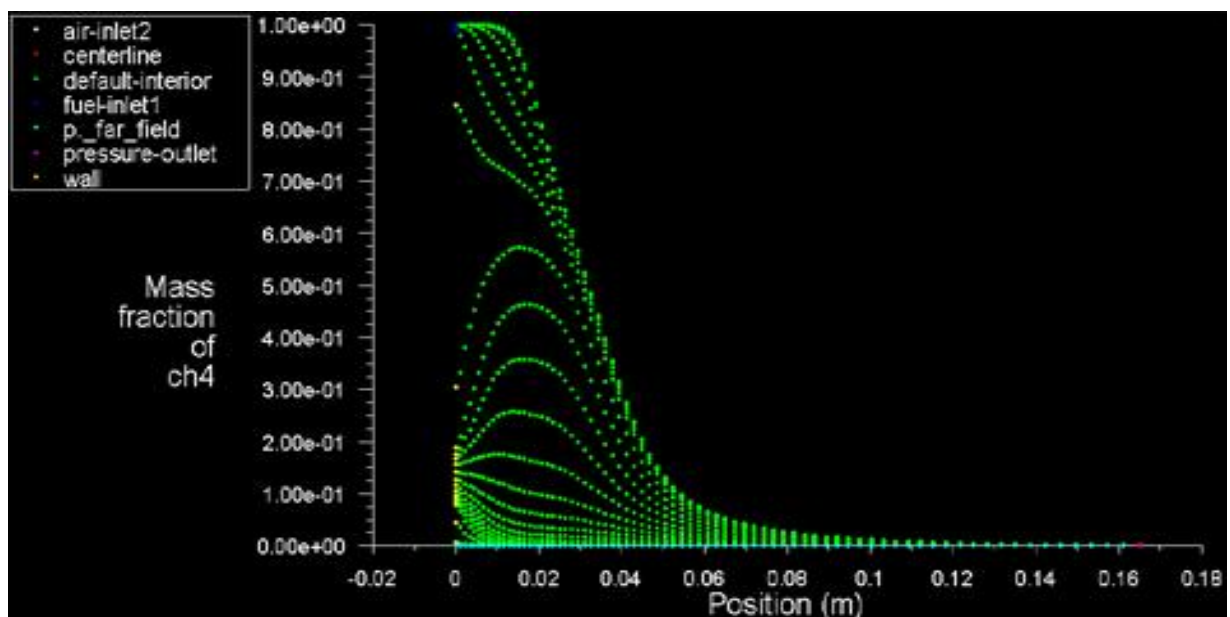
Σχήμα 4.3.12: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη ταχύτητα)



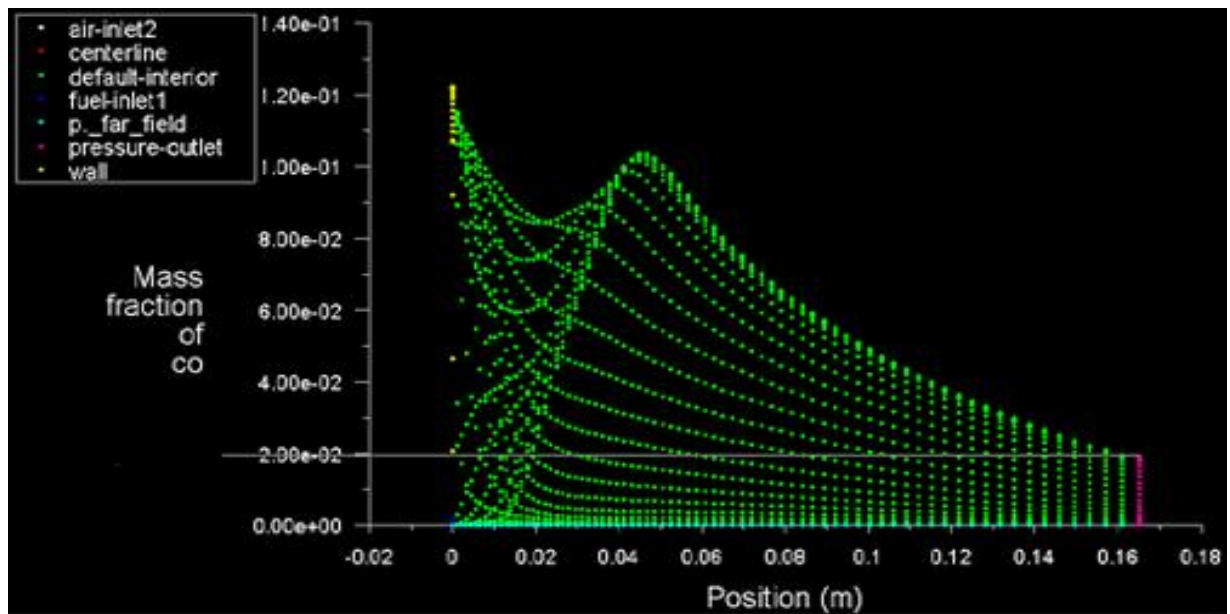
Σχήμα 4.3.13: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη θερμοκρασία)



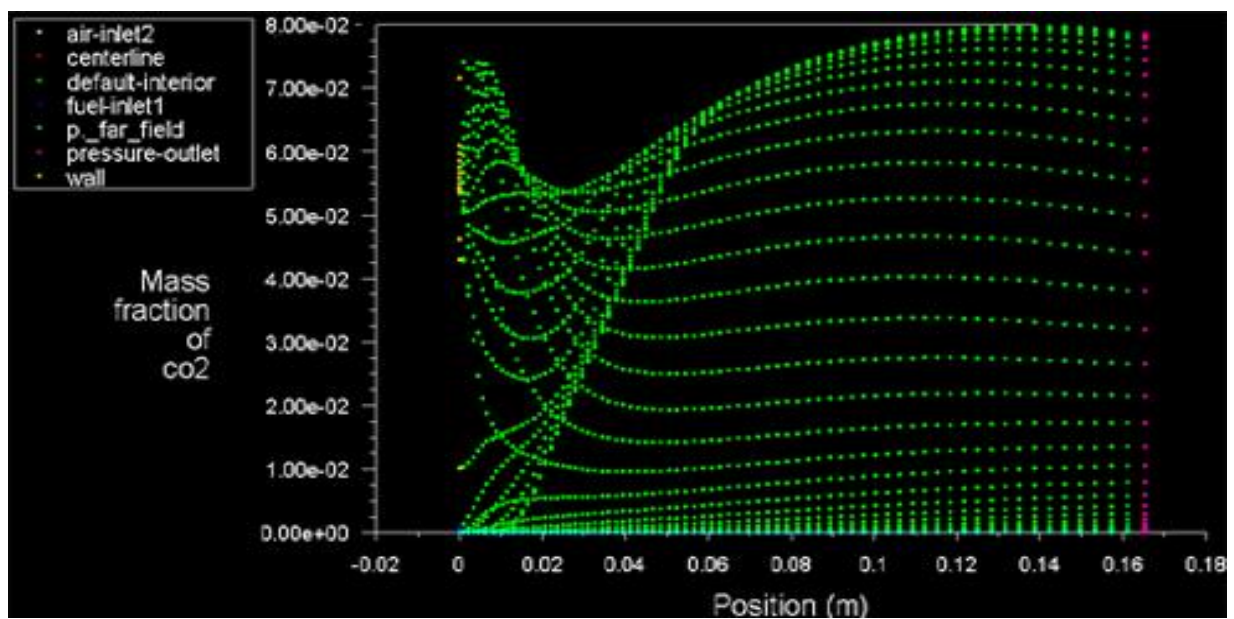
Σχήμα 4.3.14: Κατανομή θερμοκρασίας



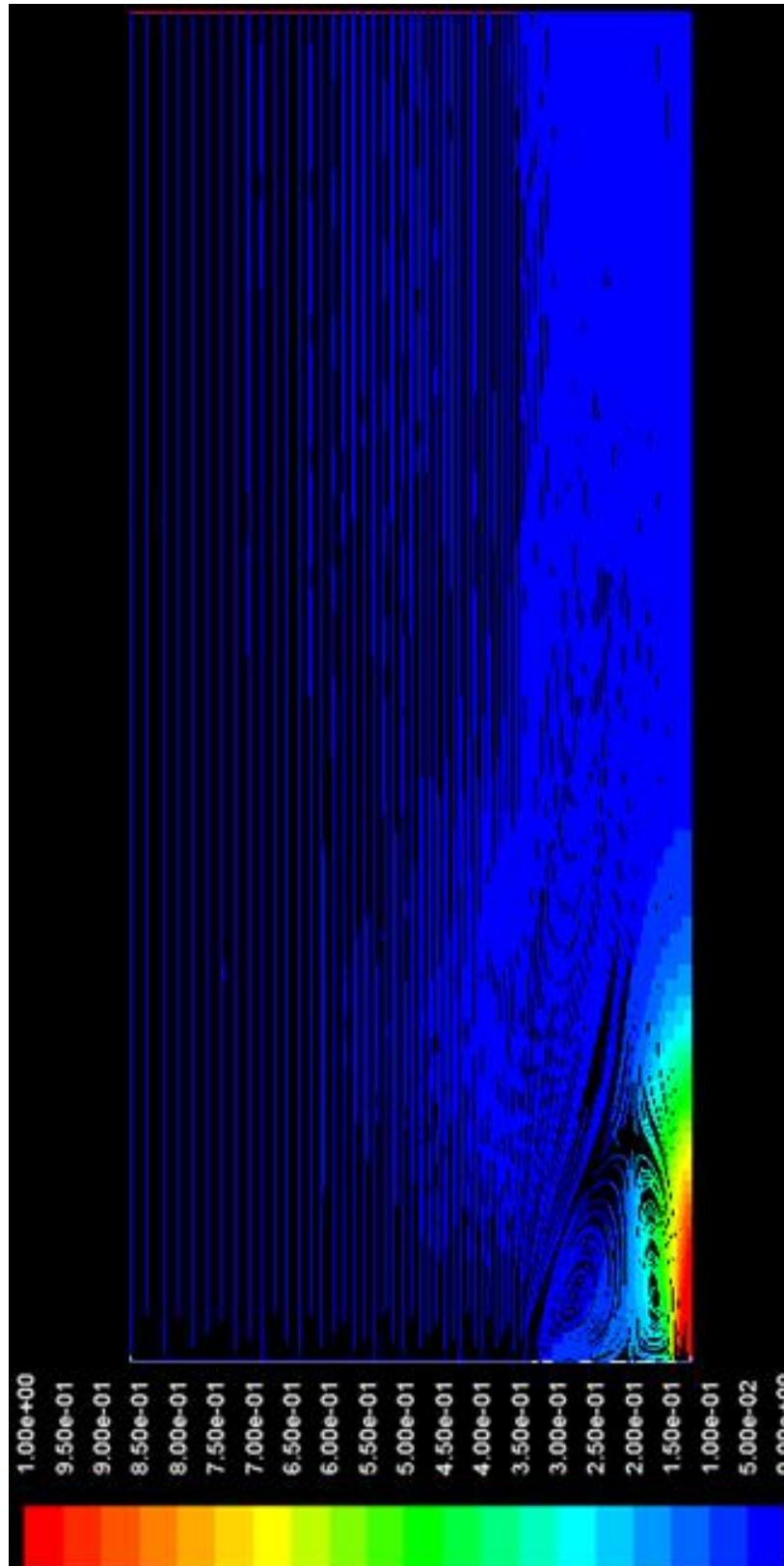
Σχήμα 4.3.15: Κατανομή μάζας μεθανίου (CH₄)



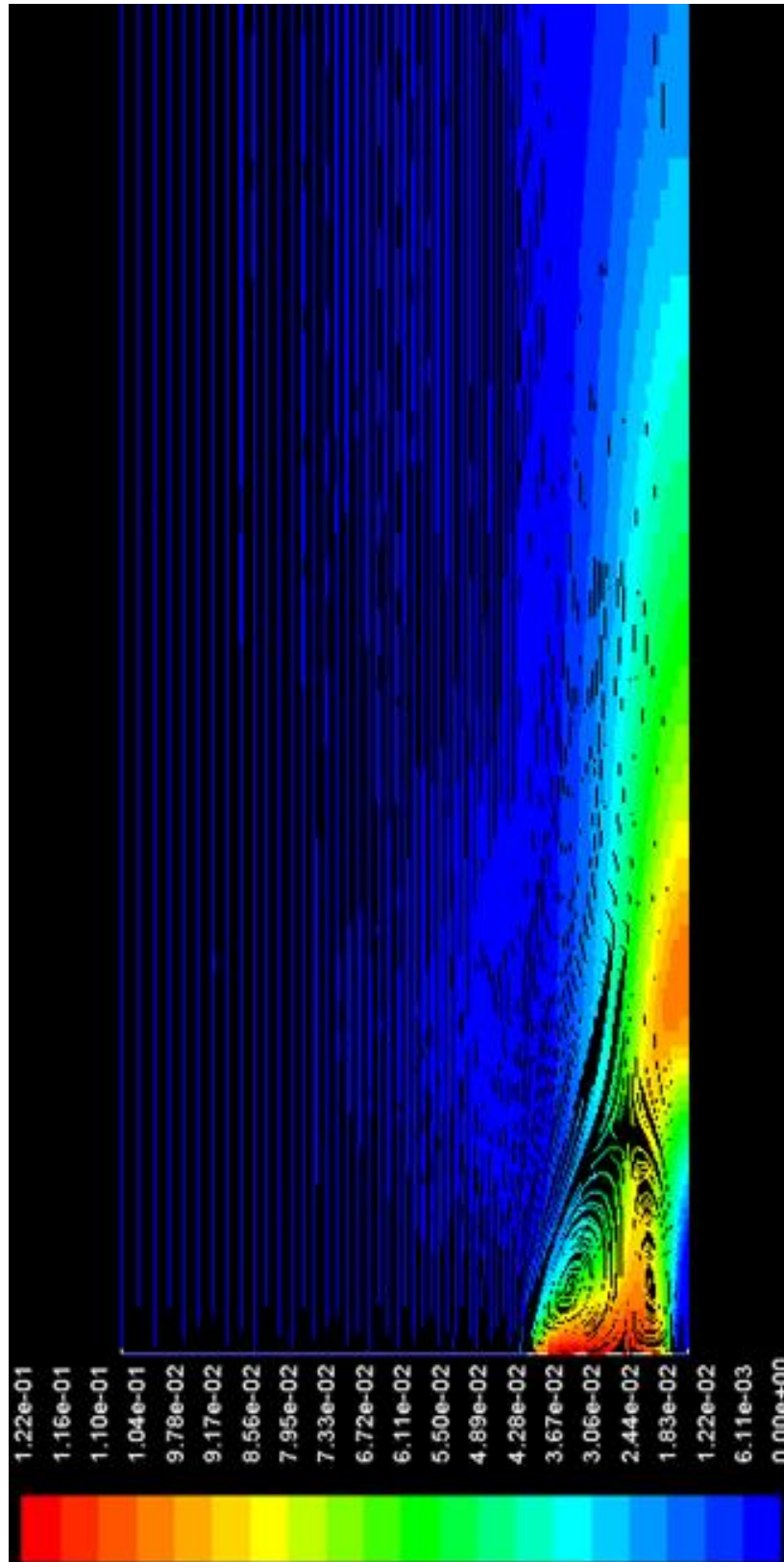
Σχήμα 4.3.16: Κατανομή μάζας μονοξειδίου του άνθρακα (CO)



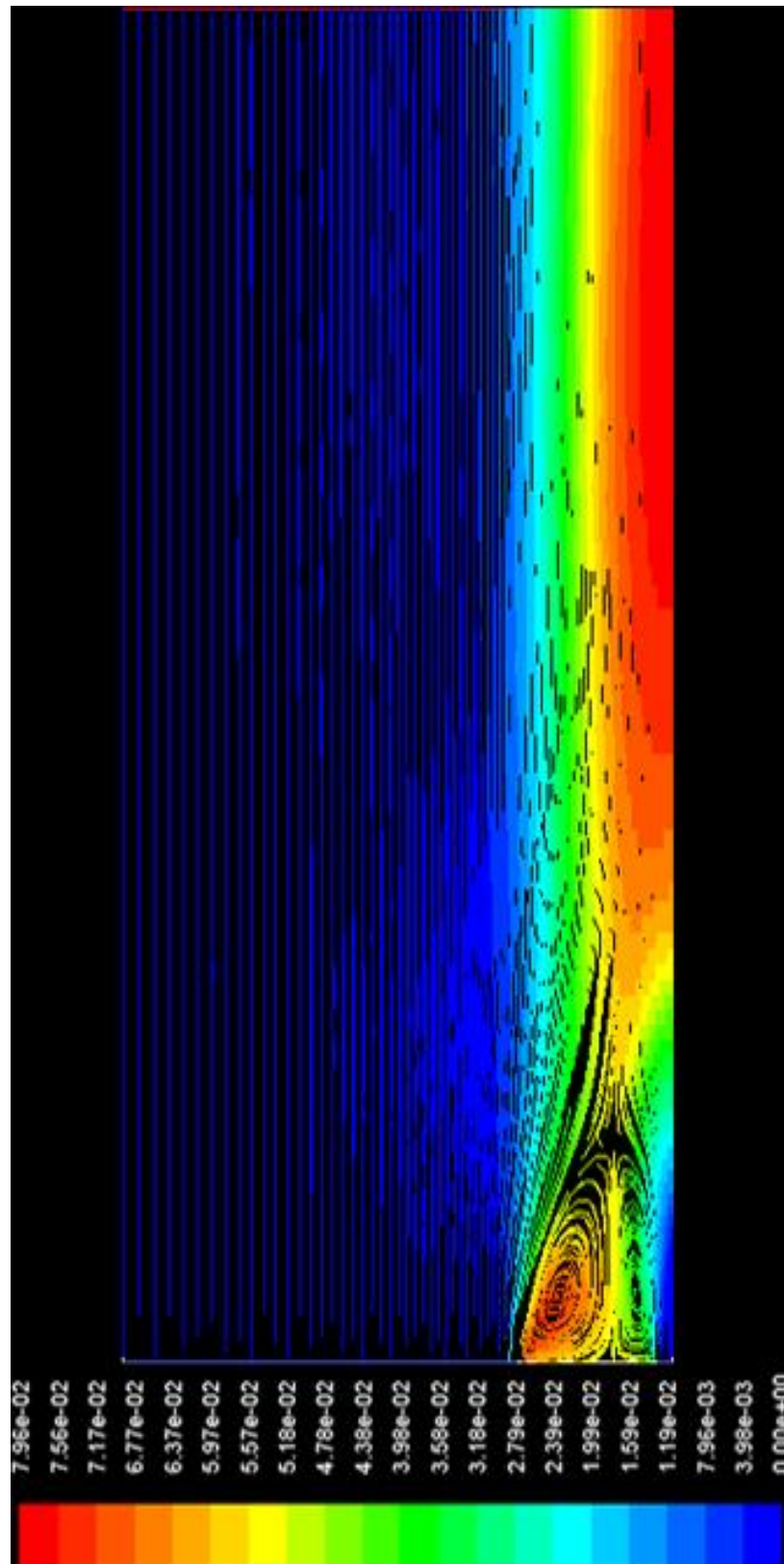
Σχήμα 4.3.17: Κατανομή μάζας διοξειδίου του άνθρακα (CO₂)



Σχήμα 4.3.18: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα μεθανίου)



Σχήμα 4.3.19: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα μονοξειδίου του άνθρακα)



Σχήμα 4.3.20: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα του διοξειδίου του άνθρακα)

4.3.4 Ανάλυση των αποτελεσμάτων της δεύτερης πρότασης

Με τη συνέχιση των δοκιμών που έγιναν, βρήκα περαιτέρω βελτίωση στα αποτελέσματα που εξετάζουμε, με βέλτιστη περίπτωση όταν η θερμοκρασία του εισερχομένου καυσίμου, αυξηθεί στα 400K.

Στην κατανομή θερμοκρασίας υπήρχε κάποια πολύ μικρή μείωση (που δεν θέλουμε) σε σύγκριση με την παραπάνω περίπτωση, αλλά και πάλι η αύξησή της με το αρχικό πρόβλημα είναι σημαντική. Στην κατανομή του μεθανίου βλέπουμε ότι υπάρχει μια ακόμη μικρή βελτίωση από την πρώτη πρόταση που έγινε αλλά στο τομέα αυτό ήδη καταφέραμε να έχουμε μηδενικές τιμές στην έξοδο και δεν παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον το στοιχείο αυτό. Επίσης και η κατανομή του διοξειδίου του άνθρακα είναι παρόμοια και δεν παρουσιάζει κάποια διαφορά μετά την πρώτη βελτίωση που έγινε. Εκεί που παρουσιάζει πολύ ενδιαφέρον είναι στην ακόμη μεγαλύτερη διαφορά της πτώσης του μονοξειδίου του άνθρακα, που όπως αναλύσαμε παραπάνω προσπαθούμε να έχουμε όσο λιγότερο γίνεται κατά την έξοδο.

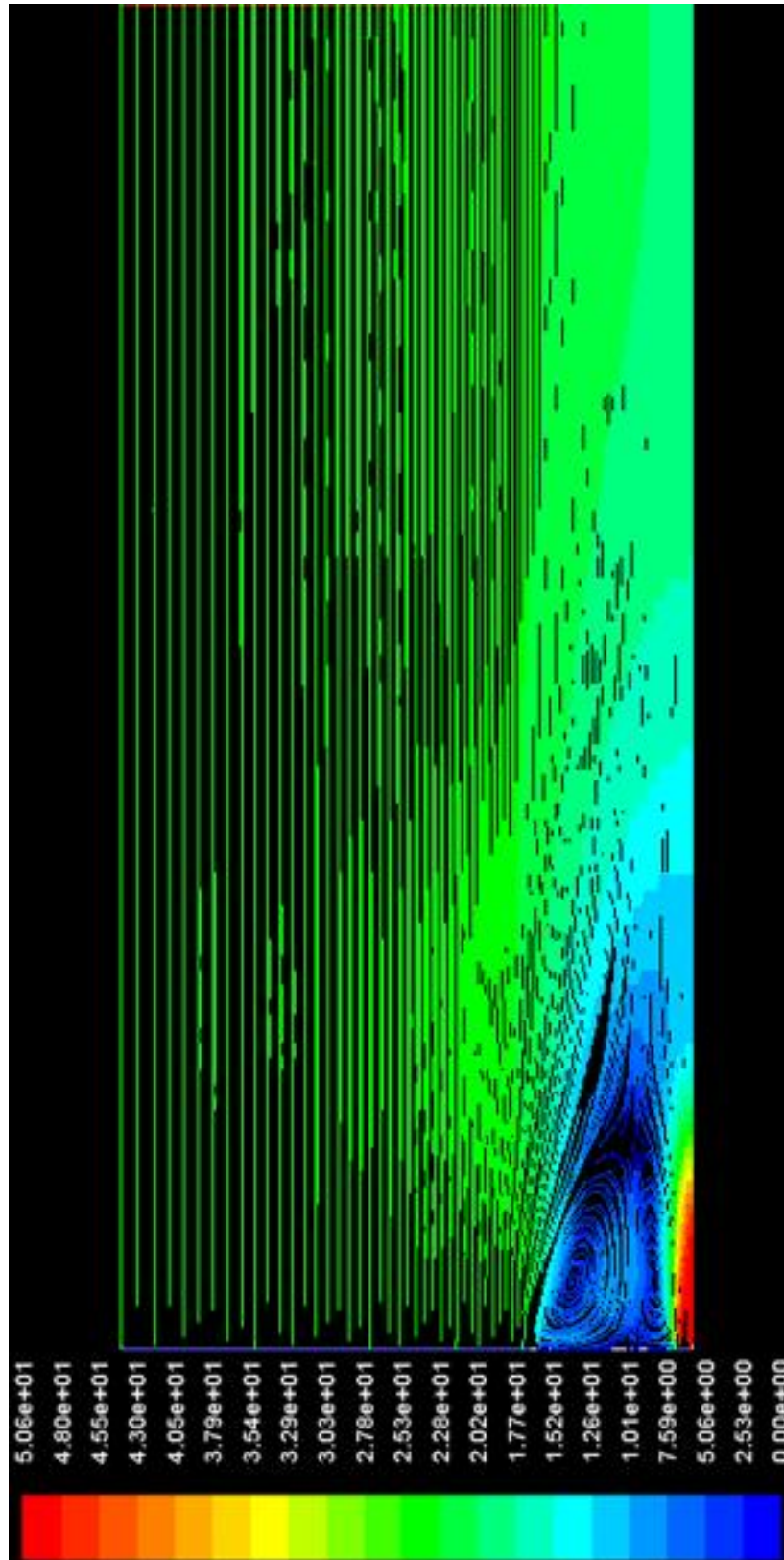
Η αύξηση της θερμοκρασίας του καυσίμου που απαιτείται, μπορεί να επιτευχθεί με προθέρμανση του καυσίμου πριν την είσοδο στο χώρο καύσης, με τη βοήθεια ενός εναλλάκτη θερμότητας. Φυσικά, το ζητούμενο είναι η βελτίωση των απολεσμάτων χωρίς να αυξηθεί το κόστος εγκατάστασης και λειτουργίας της. Μία λύση που μπορεί να εφαρμοσθεί χωρίς να χρειάζεται να σπαταλήσουμε ενέργεια είναι να εκμεταλλευτούμε τη θερμοκρασία των καυσαερίων.

4.3.5 Τρίτη πρόταση και τα αποτελέσματα

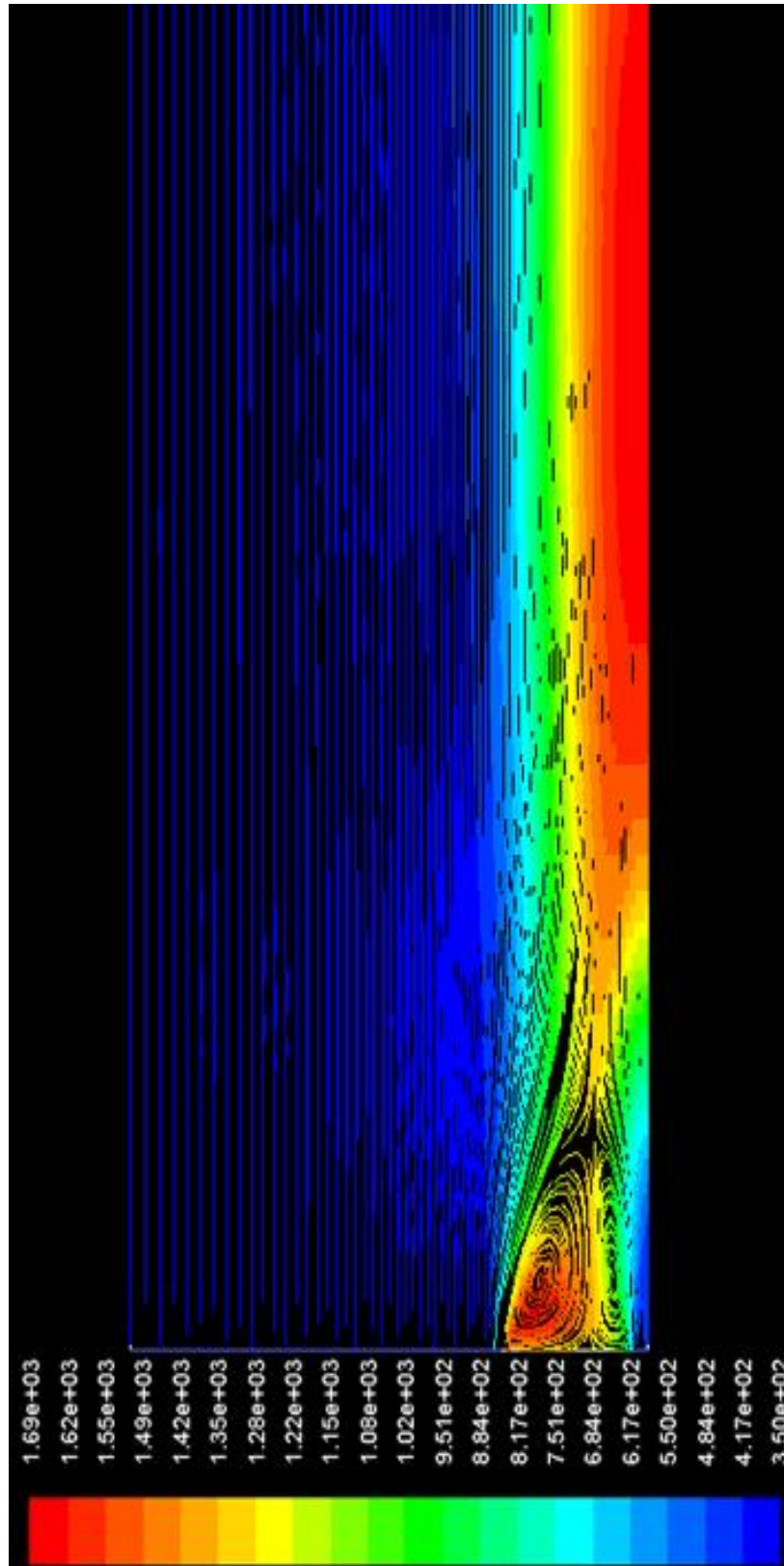
Στην περίπτωσή αυτή, έγινε προσπάθεια βελτίωσης της εκλυόμενης θερμότητας κατά τη διαδικασία της καύσης σε σχέση με την προηγούμενη (δεύτερη) πρόταση. Αυτό επιτεύχθηκε με προθέρμανση του εισερχόμενου αέρα στους 350K, περαιτέρω αύξηση του εισερχόμενου καυσίμου στους 430K και αύξηση κατά 5m/s της ταχύτητας του καυσίμου ενώ ο αέρας παρέμεινε 25 m/s.



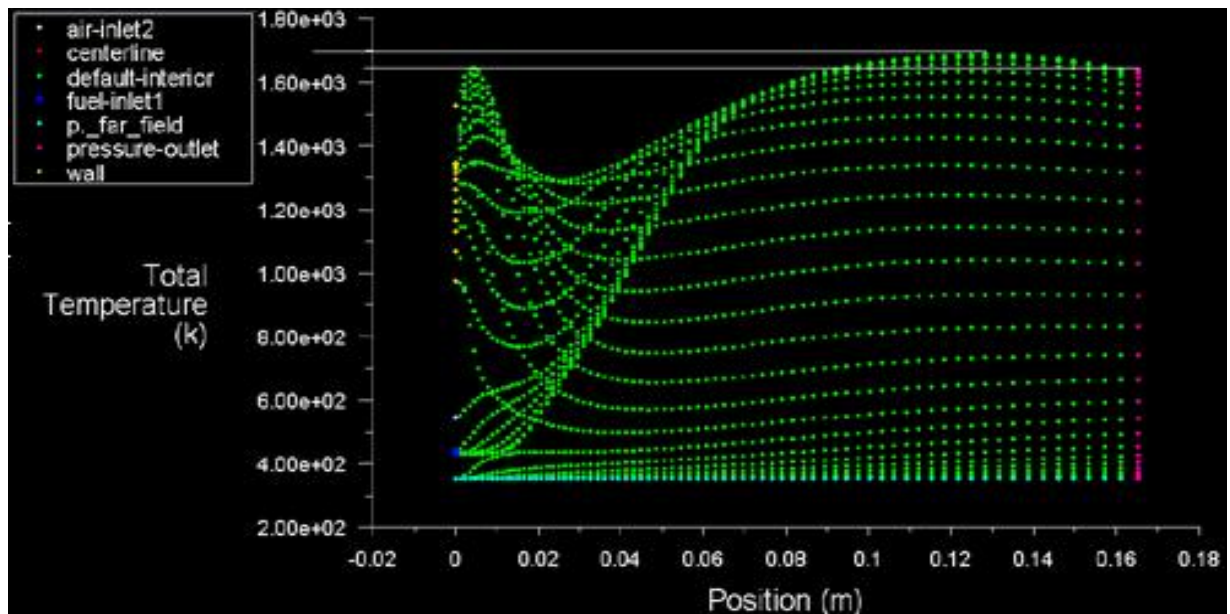
Σχήμα 4.3.21: Γεωμετρία προβλήματος καύσης (τρίτη περίπτωση)



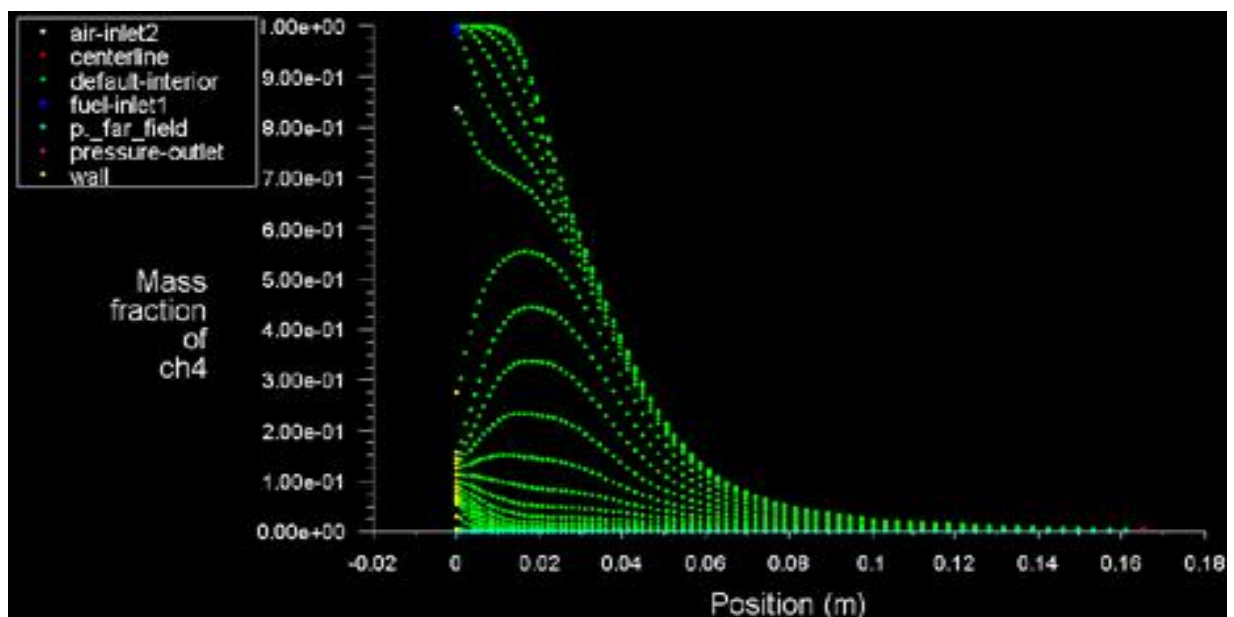
Σχήμα 4.3.22: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη ταχύτητα)



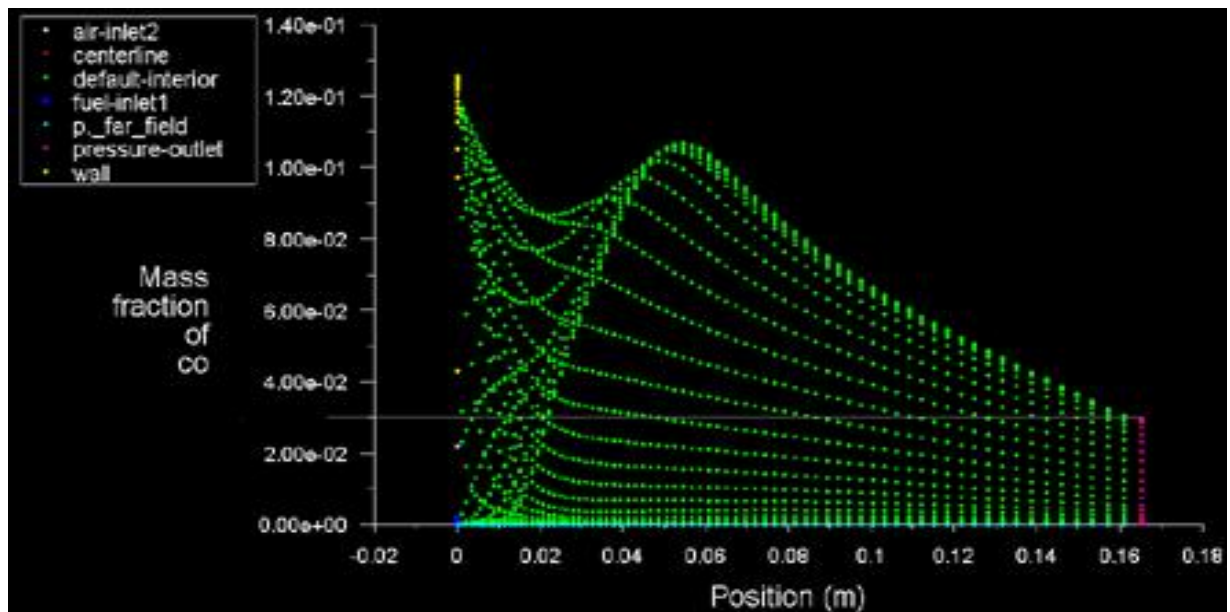
Σχήμα 4.3.23: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη θερμοκρασία)



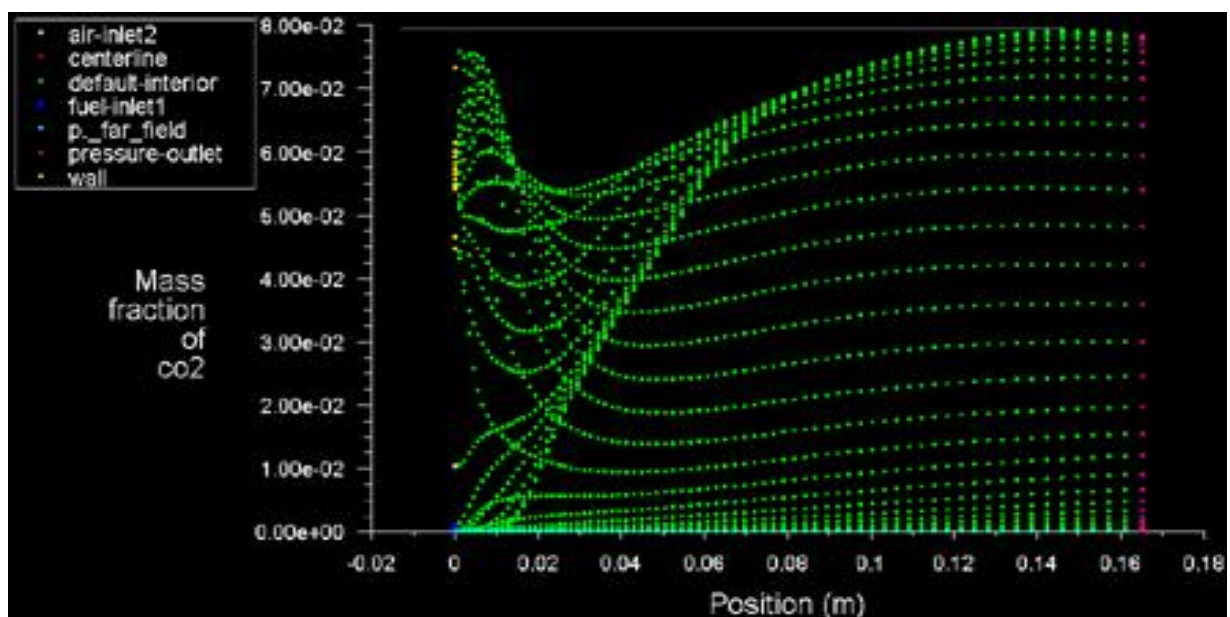
Σχήμα 4.3.24: Κατανομή θερμοκρασίας



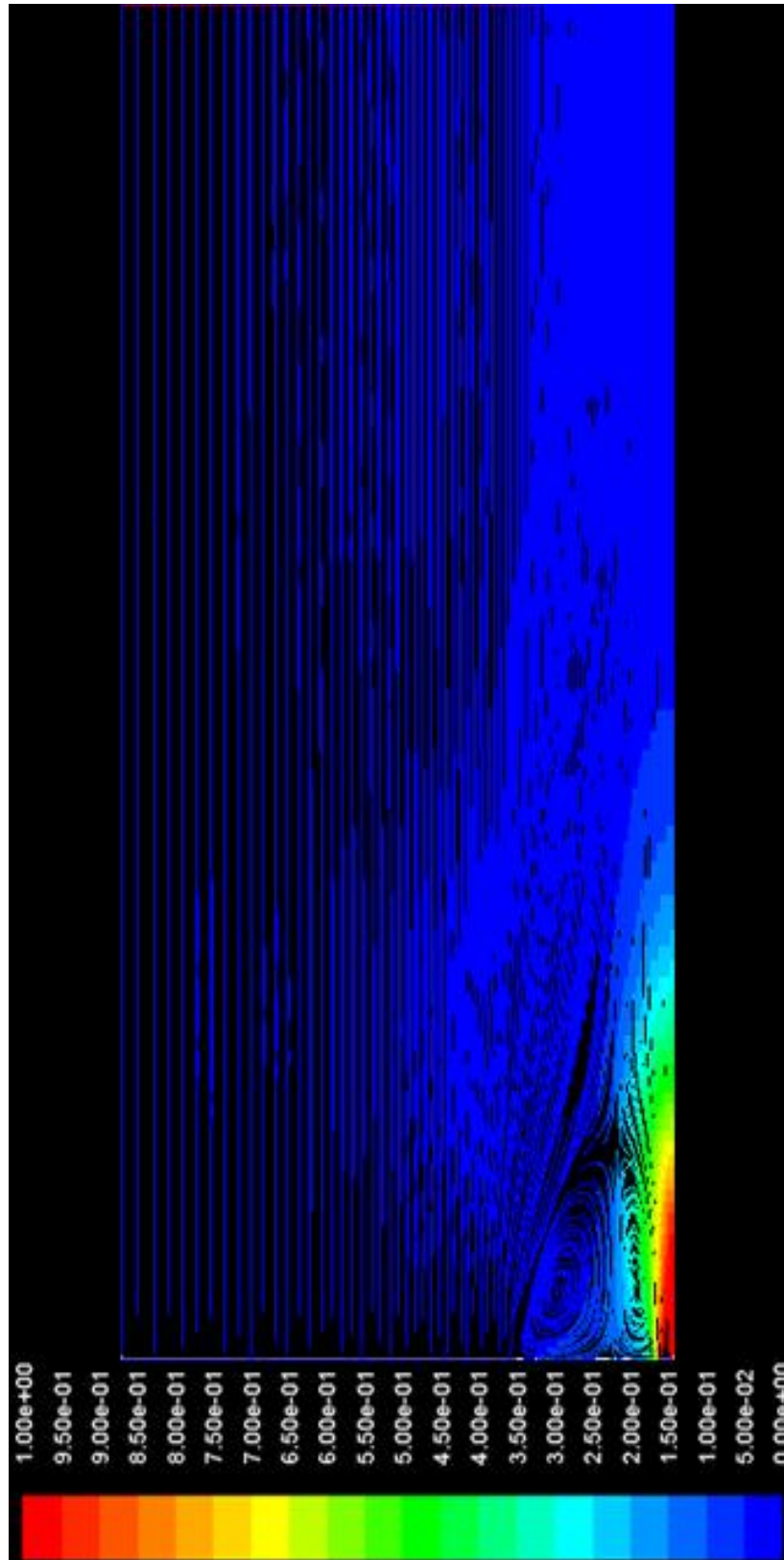
Σχήμα 4.3.25: Κατανομή μάζας μεθανίου (CH_4)



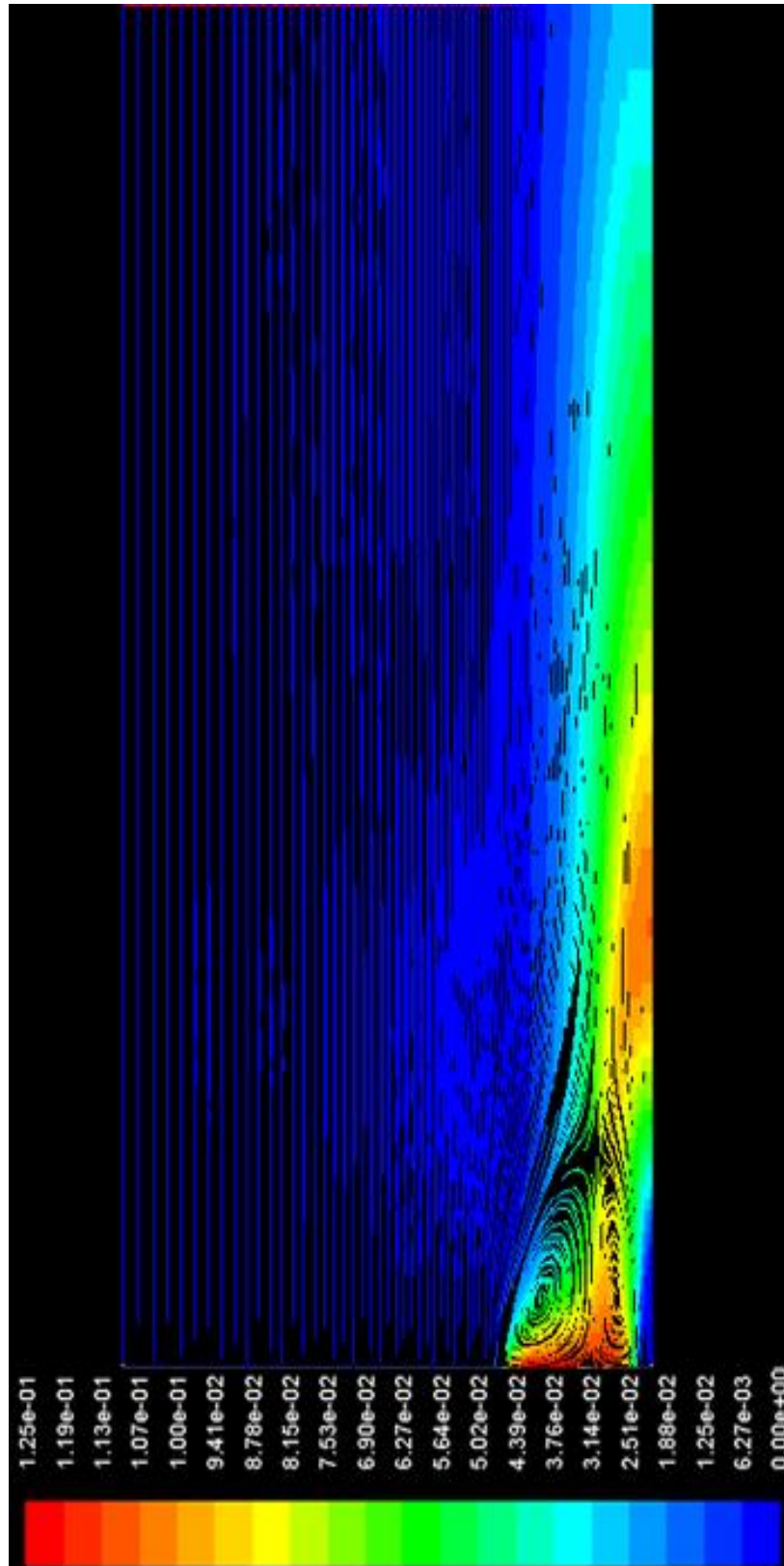
Σχήμα 4.3.26: Κατανομή μάζας μονοξειδίου του άνθρακα (CO)



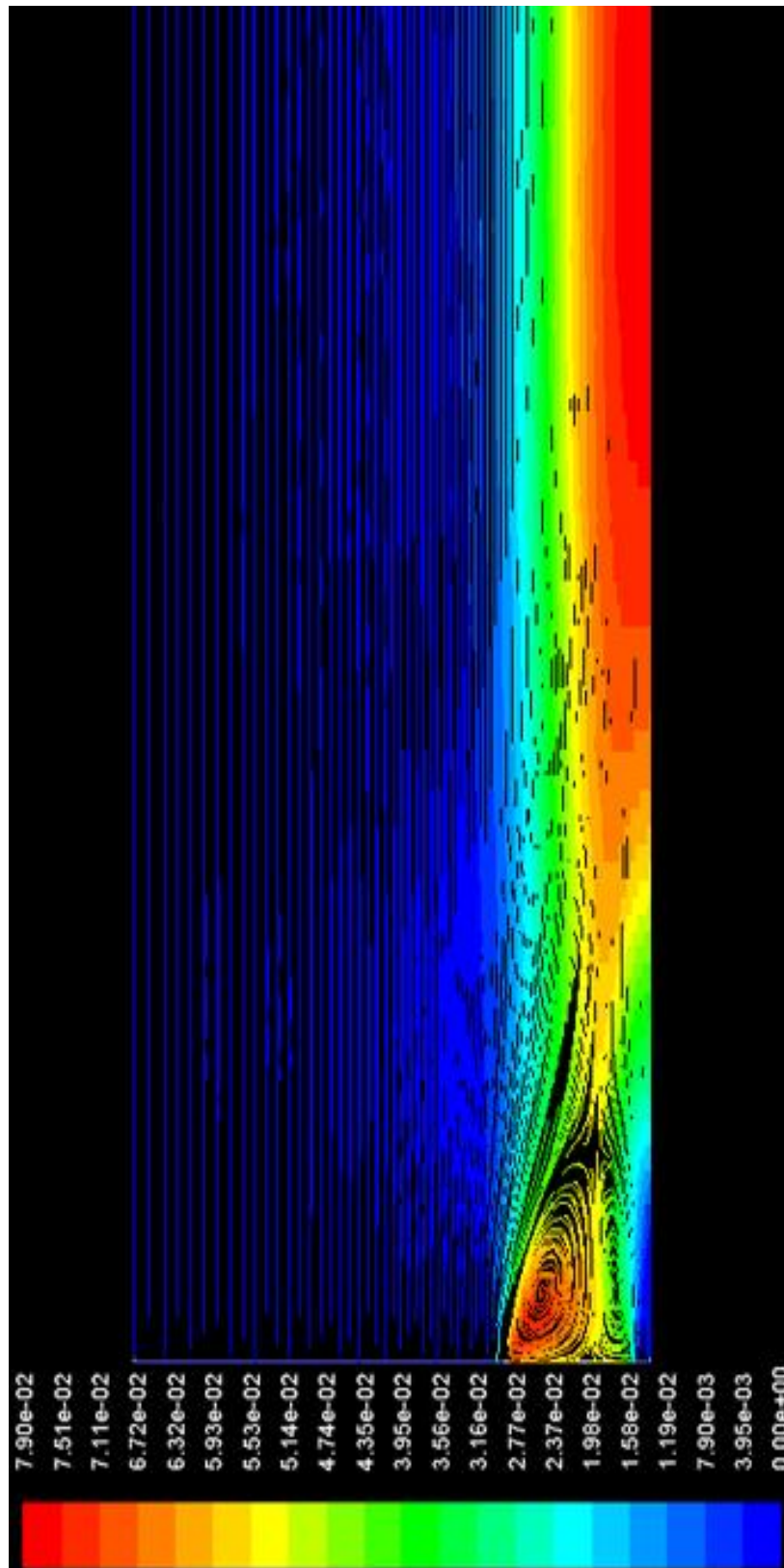
Σχήμα 4.3.27: Κατανομή μάζας διοξειδίου του άνθρακα (CO₂)



Σχήμα 4.3.28: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα μεθανίου)



Σχήμα 4.3.29: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με τη μάζα μονοξειδίου του άνθρακα)



Σχήμα 4.3.30: Ροϊκές γραμμές (χρωματισμός ανάλογα με διοξείδιο του άνθρακα)

4.3.6 Ανάλυση των αποτελεσμάτων της τρίτης πρότασης

Στην τρίτη πρόταση, έγινε προσπάθεια όπως αναφέρεται παραπάνω της αύξησης της εκλυόμενης θερμότητας σε σχέση με τη δεύτερη πρόταση αλλά προσπαθώντας επίσης να μην έχουμε αλλαγές (τουλάχιστον αρνητικές) στα υπόλοιπα αποτελέσματα καθώς υπήρξε σημαντική βελτίωση στους τομείς που εξετάζουμε με τη πιο μεγάλη στην κατανομή του μονοξειδίου του άνθρακα όπου είχαμε μεγάλη μείωση.

Από τα αποτελέσματα τα οποία πήραμε και παρουσιάζονται παραπάνω, παρατηρούμε (σχήμα 4.3.24) ότι ο στόχος επιτεύχθηκε και βλέπουμε ότι στη συγκεκριμένη περίπτωση είχαμε και την υψηλότερη τιμή θερμοκρασίας απ' όλες τις άλλες. Στο σχήμα 4.3.25 φαίνεται ότι και πάλι είχαμε μηδενικές τιμές μεθανίου κατά την έξοδο ενώ το διοξείδιο του άνθρακα παρέμεινε στα ίδια επίπεδα με τις δύο προηγούμενες προτάσεις. Το μοναδικό μειονέκτημα που βλέπουμε είναι στο σχήμα 4.3.26 στη κατανομή του μονοξειδίου που παρατηρείται μια μικρή αύξηση του σε σχέση με τη δεύτερη πρόταση αλλά ωστόσο κυμαίνεται σε μικρότερες τιμές από την πρώτη πρόταση και σημαντικά μικρότερη από τις αντίστοιχες του αρχικού προβλήματος.

4.4 ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΜΕΤΑ ΤΙΣ ΒΕΛΤΙΩΣΕΙΣ

Σκοπός των δοκιμών που έγιναν, είναι η βελτίωση του αρχικού προβλήματος και πιο συγκεκριμένα στην εύρεση όσο το δυνατόν καλύτερων συνθηκών καύσης. Όπως βλέπουμε από τα παραπάνω σχήματα και τα όσα αναλύθηκαν για όλες τις περιπτώσεις που παρουσιάζονται στην πτυχιακή αυτή εργασία, οι αλλαγές που έγιναν έφεραν τα αποτελέσματα που θέλαμε.

Στην πρώτη πρόταση, έγιναν απλές αλλαγές στην ταχύτητα των εισερχομένων ρευστών χωρίς να χρειάζονται αυτά κάποια επεξεργασία όπως στις δύο επόμενες. Στη δεύτερη πρόταση, έγιναν οι αλλαγές της πρώτης, με ωστόσο προθέρμανση του καυσίμου πριν την είσοδο ώστε να μην είναι σε συνθήκες περιβάλλοντος και έτσι είδαμε αρκετές θετικές αλλαγές στα αποτελέσματα με τη μεγαλύτερη στους ρύπους που έχουμε κατά τη διαδικασία της καύσης. Στην τρίτη πρόταση, έπειτα από δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν, βρήκα ότι για συγκεκριμένες ταχύτητες αέρα και μεθανίου αλλά επίσης και προθέρμανσης των δύο ρευστών σε συγκεκριμένες θερμοκρασίες, υπήρξαν διαφορές σε κάποιους τομείς που χρειαζόντουσαν μικρή βελτίωση. Συγκεκριμένα, προσπάθησα να έχω τα ίδια αποτελέσματα με τη δεύτερη πρόταση με στόχο όμως τη βελτίωση της θερμοκρασίας καύσης, κάτι που επιτεύχθηκε, με μόνη διαφορά ότι είχαμε μια αύξηση του μονοξειδίου του άνθρακα όπως αναφέρεται στην ανάλυση των αποτελεσμάτων της

συγκεκριμένης περίπτωσης. Αυτό είναι ένα μειονέκτημα αλλά οι διαφορές δεν είναι ιδιαίτερα σημαντικές σε σχέση με την δεύτερη πρόταση όπου είχαμε και τα βέλτιστα αποτελέσματα στο τομέα αυτό σε σχέση και με τις υπόλοιπες περιπτώσεις που εξετάστηκαν.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5°

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

5.1 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Από τα αποτελέσματα που πήραμε μπορούμε να εξάγουμε πολλά συμπεράσματα για τη διαδικασία της καύσης, στο πρόβλημα που είχαμε προς επίλυση.

Πρώτα απ' όλα, για την πορεία της ροής των ρευστών κατά τη διάρκεια της καύσης μέσω των ροϊκών γραμμών καθώς και για τις αυξομειώσεις των ταχυτήτων και των θερμοκρασιών.

Δεύτερον, για τις περιοχές ανακυκλοφορίας οι οποίες παίζουν σημαντικό ρόλο στις περιπτώσεις που έχουμε καύση, στη σταθεροποίηση και ανάπτυξη της φλόγας αλλά επίσης κυρίως στη σωστή ανάμειξη των αντιδρώντων στοιχείων και κατεπέκταση στην καλύτερη καύση. Αυτό που συμπεραίνουμε με τις δοκιμές που έγιναν με σκοπό τη βελτίωση των αποτελεσμάτων, είναι ότι η γεωμετρία αυτών των ζωνών ανακυκλοφορίας επηρεάζονται σημαντικά από τις συνθήκες εισαγωγής της ροής.

Τρίτον, όπως προκύπτει από τα αποτελέσματα, που πήραμε με την προσομοίωση του προβλήματος, που είχαμε προς εξέταση, στο υπολογιστικό πακέτο που χρησιμοποιήθηκε, παρατηρούμε ότι οι αρχικές συνθήκες καύσης δεν ήταν οι βέλτιστες, καθώς τα αποτελέσματα που πήραμε έδειξαν ότι δε γινόταν σωστά η καύση. Αυτό μπορούμε να το καταλάβουμε από τις κατανομές που παρουσιάζονται παραπάνω. Οι κατανομές δείχνουν ότι το μεθάνιο δεν αντιδρούσε πλήρως και περίσσευε στην έξοδο ενώ επιπλέον παρατηρήθηκε αύξηση του προϊόντος του μονοξειδίου του άνθρακα, το οποίο όπως είπαμε αποτελεί προϊόν ατελούς καύσης του μεθανίου και παράγεται όταν το μεθάνιο δεν αντιδρά σωστά με το οξυγόνο για να παράγει διοξείδιο του άνθρακα. Αυτός ήταν και ο λόγος που δεν είχαμε την ίδια αύξηση του διοξειδίου του άνθρακα, που παρατηρούμε έπειτα από τις αλλαγές που έγιναν.

Τέλος, από τις δοκιμές που έγιναν, συμπεραίνουμε ότι για να έχουμε καλύτερες συνθήκες καύσης, θα πρέπει να υπάρξουν κάποιες αλλαγές στον εισερχόμενο αέρα και στο καύσιμο. Συγκεκριμένα, ανάλογα με τις δυνατότητες που υπάρχουν θα έχουμε καλύτερα αποτελέσματα αν η ταχύτητα του αέρα αυξηθεί από 18m/s σε 25m/s και του καυσίμου μειωθεί από 63m/s σε 45m/s κάτι το οποίο δεν είναι δύσκολο να πραγματοποιηθεί και πρακτικά. Για ακόμη

μεγαλύτερη βελτίωση όμως, βρήκαμε ότι θα πρέπει να έχουμε προθέρμανση του καυσίμου από συνθήκες περιβάλλοντος (298K), στους 400K. Επιπλέον, αν θέλουμε μια περαιτέρω μικρή αύξηση στη θερμοκρασία θα πρέπει ο εισερχόμενος αέρας να έχει ταχύτητα 25m/s και θερμοκρασία 350K και το μεθάνιο 50m/s και 430K αντίστοιχα, δηλαδή να έχουμε στην περίπτωση αυτή προθέρμανση και των δύο ρευστών. Βέβαια στην περίπτωση αυτή, είχαμε μία μικρή αύξηση του μονοξειδίου του άνθρακα όπως αναφέρεται και στην ανάλυση των αποτελεσμάτων αλλά από εκεί και πέρα ανάλογα με τις ανάγκες που υπάρχουν μπορεί τα οφέλη της συγκεκριμένης περίπτωσης (τρίτη πρόταση) να είναι πιο πολλά, αφού σε έναν καυστήρα αυτό που εκμεταλλευόμαστε είναι η θερμότητα που παράγεται κατά την καύση. Η προθέρμανση αυτή επειδή το ζητούμενο είναι η βελτίωση των συνθηκών καύσης χωρίς να αυξάνεται το κόστος λειτουργίας, θα μπορούσε να επιτευχθεί με τη βοήθεια ενός εναλλάκτη θερμότητας αν εκμεταλλευτούμε τη θερμοκρασία των καυσαερίων, η οποία είναι αρκετά υψηλή.

5.2 ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

Θα ήθελα στο σημείο αυτό, κλείνοντας την πτυχιακή εργασία να προτείνω τη μελλοντική περαιτέρω μελέτη και έρευνα του συγκεκριμένου προβλήματος καύσης, με σκοπό τη βελτίωση των συνθηκών καύσης, όπως για παράδειγμα, τη μικρή αλλαγή της γεωμετρίας του εμποδίου στην είσοδο και την ακόμη περισσότερη βελτίωση των συνθηκών εισαγωγής της ροής, ώστε να πάρουμε πιο επιθυμητά αποτελέσματα όσο αυτό είναι εφικτό.

Θα ήθελα επίσης να προτείνω, την προσομοίωση του προβλήματος καύσης σε κάποιο υπολογιστικό πακέτο όπως το FLUENT που χρησιμοποιήσαμε, εξετάζοντας τις αλλαγές που θα είχαμε στην περίπτωση εισόδου του καυσίμου με ψεκασμό ή αν είχαμε προαναμεμιγμένη καύση, ώστε να δούμε τις διαφορές που προκύπτουν για την κάθε μέθοδο.

Ακόμη, θα παρουσίαζε πολύ ενδιαφέρον ένα αντίστοιχο πρόβλημα καύσης σε καυστήρα με καύσιμο όμως το φυσικό αέριο γιατί υπάρχουν πάρα πολλά πρακτικά συστήματα που το χρησιμοποιούν και το προτείνω αυτό, διότι, όπως γνωρίζουμε το κύριο συστατικό του φυσικού αερίου είναι το μεθάνιο και ο καυστήρας του πρόβληματος που εξετάσαμε δεν διαφέρει ιδιαίτερα (εως καθόλου) από αυτόν που χρησιμοποιεί αυτό σαν καύσιμο.

Τέλος, πολύ ενδιαφέρον (ίσως και για εκπαιδευτικούς σκοπούς καθώς δεν είναι εύκολη η πραγματοποίησή του) θα ήταν η εύρεση ή κατασκευή πειραματικής διάταξης, για την πραγματοποίηση της Μεθόδου ταχυμετρίας απεικόνισης τροchioδεικτικών σωματιδίων (μέθοδος P.I.V.), όπου με τη βοήθεια ειδικών λειζερ, κάμερας, οργάνων κλπ. να γίνει πειραματική μελέτη του προβλήματος καύσης, ώστε να εξάγουμε πολλά συμπεράσματα για τη σημασία

της σταθεροποίησης της φλόγας, ελέγχοντας διάφορους παράγοντες που την επηρεάζουν αλλά και γενικά να δούμε τα αποτελέσματα και τις διαφορές στην διαδικασία της καύσης. Η μέθοδος αυτή είναι μία μη παρεμβατική μέθοδο, η οποία έχει τη δυνατότητα ταυτόχρονης μέτρησης του διανύσματος της ταχύτητας (2-D & 3-D) σε μία περιοχή του υπό εξέταση ροϊκού πεδίου ενώ ακόμη παράλληλα δίνει τη δυνατότητα οπτικοποίησης της ροής.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Κωνσταντίνος Π. Μαυρίδης, "Υπολογιστική Ρευστομηχανική", Εκδόσεις ΙΩΝ, 2003
- [2] Νικόλαος Μαρκάτος, Διονύσης Ασημακόπουλος, "Υπολογιστική Ρευστοδυναμική", Εκδόσεις Παπασωτηρίου, Αθήνα 1995
- [3] Ιωάννου Β. Σούλη, "Υπολογιστική Μηχανική Ρευστών", Εκδόσεις Εταιρεία αξιοποίησης και διαχείρισης περιουσίας δημοκριτείου Πανεπιστημίου Θράκης, Ξάνθη 2004
- [4] Δημήτρης Σ. Ματαράς, Φραγκίσκος Α. Κουτελιέρης, "προγραμματισμός FORTRAN 90/95 για επιστήμονες & μηχανικούς", Εκδόσεις ΤΖΟΛΙΑ, Θεσσαλονίκη 2003
- [5] Δημητρακόπουλος Α.Κ., "Ειδικά θέματα υδραυλικής μηχανικής (Τυρβώ-δεις ροές)", Πανεπιστήμιο Πατρών, 2005
- [6] Bilger, R.W. The structure of turbulent non-premixed flames 22nd Int.Symposium on Combustion (The Combustion Institute), 1988
- [7] Liew, S.K., Flamelet models of turbulent non-premixed combustion, University of Southampton PhD Thesis, 1983
- [8] Παναγιώτας Ε. Μαραζιώτη, Διδακτορική διατριβή, "Ανάπτυξη πειραματικής και υπολογιστικής μεθόδου για την μελέτη του αεροθερμοδυναμικού πεδίου και του εκπεμπόμενου θορύβου και ρύπων από συρρέουσες και ανακυκλοφορούσες τυρβώδεις φλόγες προπανίου", Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, 2006
- [9] Αθηνά Πίγκα, Διδακτορική διατριβή, "Προηγμένοι αντιδραστήρες μερικής οξείδωσης του μεθανίου προς αέριο σύνθεσης", Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, 2003

- [10] Ιστοσελίδα από το Διαδύκτιο: Wikipedia the free Encyclopedia, "Bilinear Interpolation",
http://en.wikipedia.org/wiki/Bilinear_interpolation
- [11] Ιστοσελίδα από το Διαδύκτιο: Cornell University, "Fluent Tutorials",
<http://courses.cit.cornell.edu/fluent/pipe2/index.htm>

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Το τμήμα της πτυχιακής αυτό περιλαμβάνει τον υπολογιστικό κώδικα σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN, που αναπτύχθηκε για τη διγραμμική παρεμβολή:

Ø Κύριος κώδικας

Program main

```
implicit none
real*8::x,y,u,v,dt
real*8, allocatable::xx(:), yy(:), uu(:,,:), vv(:,:)
integer*4::nx=59, ny=59, i, j
character(1) answer
allocate(xx(nx),yy(ny),uu(nx,ny), vv(nx,ny))
open(unit=2, file='stream_lines.dat')
close(2, status='delete')
open(unit=1, file='Correct_vel.dat')
  do i=1,nx
    do j=1,ny
      read(1, *) xx(i), yy(j), uu(i,j), vv(i,j)
    enddo
  enddo
close(1)
outer_loop:do
print*, 'do you want to evaluate a streamline? (y/n)'
read(*,*) answer
if(answer/='y') exit outer_loop
do
print*, 'present the intial point, (x,y), & the step, (dt)'
read*, x,y,dt
if (x<0.or.x>=xx(59)) then
  print*, 'lathos timi x'
  cycle
end if
if (y<0.or.y>=yy(59)) then
```

```

    print*, 'lathos timi y'
    cycle
end if
if (dt<=0) then
print*, 'lathos timi dt'
cycle
end if
exit
enddo
i=0
open(unit=2, file='stream_lines.dat',position='append')
write(2,*) 'new line'
inner_loop:do
    write(2,*) x,y
    call sub_bl_intp(nx,ny,u,v,xx,yy,uu,vv,x,y)
    i=i+1
    x=x+u*dt
    y=y+v*dt
if(u>1.d5) then
write(*,*) x,y,u,v
pause
endif
    if (x>=xx(59).or.y>=yy(59).or.u<=1.d-7.or.v<=1.d-7) then

        if (x>=xx(59).or.y>=yy(59).or.dsqr(u**2+v**2)<=1.d-7) then
            exit inner_loop
        end if
    enddo inner_loop
write(2,*) x,y
close(2)
print*, i
enddo outer_loop
10 format(4D12.5)
Stop
End

```

Ø Και η υπορουτίνα που αναπτύχθηκε και καλείται από τον κώδικα:

```

SUBROUTINE sub_bl_intp(nx,ny,u,v,xx,yy,uu,vv,x,y)

```

```

IMPLICIT NONE

```

```

REAL(8), INTENT(OUT) :: u,v
INTEGER, INTENT(IN) :: nx,ny
REAL(8), INTENT(IN) :: x,y
REAL(8), INTENT(IN) :: xx(nx),yy(ny),uu(nx,ny),vv(nx,ny)
REAL(8) :: t,s
INTEGER :: in1,in2
DO in1=1,nx-1
DO in2=1,ny-1
IF (((x .ge. xx(in1)) .and. (x .le. xx(in1+1))) .and.
& ((y .ge. yy(in2)) .and. (y .le. yy(in2+1)))) THEN
t=(x-xx(in1))/(xx(in1+1)-xx(in1))
s=(y-yy(in2))/(yy(in2+1)-yy(in2))
u=(1.0-t)*(1.0-s)*uu(in1,in2)+t*(1.0-s)*uu
& (in1+1,in2)+t*s*uu(in1+1,in2+1)+(1.0-t)*s*uu(in1,in2+1)
v=(1.0-t)*(1.0-s)*vv(in1,in2)+t*(1.0-s)*vv
& (in1+1,in2)+t*s*vv(in1+1,in2+1)+(1.0-t)*s*vv(in1,in2+1)
RETURN
END IF
END DO
END DO
END SUBROUTINE sub_bl_intp

```
