

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Μεταπτυχιακή Εργασία

**ΡΟΕΣ ΑΕΡΙΩΝ ΣΕ ΣΥΓΚΛΙΝΟΝΤΕΣ ΚΑΙ ΑΠΟΚΛΙΝΟΝΤΕΣ  
ΑΓΩΓΟΥΣ ΣΕ ΟΛΟ ΤΟ ΕΥΡΟΣ ΤΟΥ ΑΡΙΘΜΟΥ KNUDSEN**

υπό

**ΧΡΗΣΤΟΥ ΤΑΝΤΟΥ**

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού, Π.Θ, 2011

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των

απαιτήσεων για την απόκτηση του

Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης

2013

© 2013 Χρήστος Τάντος

Η έγκριση της μεταπτυχιακής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/32 αρ. 202 παρ. 2).

## **Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:**

Πρώτος Εξεταστής (Επιβλέπων) Δρ. Δημήτριος Βαλουγεώργης  
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών  
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής Δρ. Αναστάσιος Σταμάτης  
Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών  
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής Δρ. Θεόδωρος Καρακασίδης  
Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών  
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

## Ευχαριστίες

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της μεταπτυχιακής εργασίας μου, καθηγητή Δρ. Δημήτριο Βαλουγεώργη, για την πολύτιμη βοήθεια, την καθοδήγησή του κατά τη διάρκεια της δουλειάς μου και για τη κατανόηση και ανοχή που επέδειξε καθ' όλο το διάστημα της συνεργασίας μας. Επίσης, είμαι ευγνώμων στα άλλα δύο μέλη της εξεταστικής επιτροπής για την προσεκτική ανάγνωση της εργασίας μου. Ακόμη, ευχαριστώ θερμά τον υποψήφιο διδάκτορα Σεραφείμ Μισδανίτη για την υποστήριξη και τη συνεχή βοήθεια που μου παρείχε στη διάρκεια της μεταπτυχιακής εργασίας μου.

Ευχαριστώ τη Βαλίλα Γιαννουτάκη για τη συμπαράστασή της και την κατανόησή της κατά τη διάρκεια εκπόνησης της μεταπτυχιακής μου εργασίας. Πάνω απ' όλα, είμαι ευγνώμων στους γονείς μου, Θεόδωρο και Παναγιώτα Τάντου και στην αδελφή μου Δήμητρα Τάντου για την ολόψυχη αγάπη και υποστήριξή τους όλα αυτά τα χρόνια. Αφιερώνω αυτή την εργασία στην μητέρα μου και στον πατέρα μου.

Τέλος, θέλω να ευχαριστήσω θερμά για την οικονομική στήριξη του προγράμματος EFDA-GOT program Vacuum Technologies and Pumping (VACU-TEC) στο οποίο αποτελώ ενεργό μέλος από τον Ιούνιο του 2011.

Χρήστος Τάντος

# ΡΟΕΣ ΑΕΡΙΩΝ ΣΕ ΣΥΓΚΛΙΝΟΝΤΕΣ ΚΑΙ ΑΠΟΚΛΙΝΟΝΤΕΣ ΑΓΩΓΟΥΣ ΣΕ ΟΛΟ ΤΟ ΕΥΡΟΣ ΤΟΥ ΑΡΙΘΜΟΥ KNUDSEN

ΧΡΗΣΤΟΣ ΤΑΝΤΟΣ

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, 2013

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Δημήτριος Βαλουγεώργης, Καθηγητής Αναλυτικών και  
Υπολογιστικών Μεθόδων Μεσοκλίμακας σε Φαινόμενα Ροής και Μεταφοράς

## Περίληψη

Σκοπός της εργασίας είναι η μελέτη ροών αερίων και μιγμάτων αερίων σε συγκλίνοντες και αποκλίνοντες αγωγούς σε ένα ευρύ φάσμα του αριθμού Knudsen. Μελετάται με βάση το κινητικό μοντέλο BGK η ροή αερίου σε ορθογώνιο αγωγό του οποίου το ύψος παραμένει σταθερό, ενώ το πλάτος μεταβάλλεται γραμμικά στην κατεύθυνση της ροής και η ροή οφείλεται στη διαφορά πίεσης εισόδου-εξόδου του αγωγού. Αναπτύσσεται η κατάλληλη μεθοδολογία υπολογισμού της μαζικής παροχής και των κατανομών πίεσης κατά μήκος του αγωγού και στη συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα τα οποία προκύπτουν με βάση τη συγκεκριμένη μεθοδολογία. Στα αποτελέσματα συγκαταλέγονται κατανομές πίεσης, παροχές μάζας για διάφορους λόγους πίεσης εισόδου-εξόδου του αγωγού και μελέτη επίδρασης της γωνίας του αγωγού στις μαζικές παροχές. Συγκρίνονται οι αντίστοιχες ροές σε συγκλίνοντα και αποκλίνοντα αγωγό και προκύπτει ότι σε όλες τις περιπτώσεις η μαζική παροχή στο συγκλίνοντα αγωγό είναι λίγο μεγαλύτερη από την αντίστοιχη σε αποκλίνοντα. Η σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα από την βιβλιογραφία καταδεικνύει ποιοτική αλλά όχι καλή ποσοτική συμφωνία που οφείλεται κατά πάσα πιθανότητα σε σφάλματα στις μετρήσεις.

Επίσης, εξετάζεται η ροή μίγματος αερίων ανάμεσα σε πλάκες μεταβλητής απόστασης με βάση το κινητικό μοντέλο McCormack. Όπως και στη περίπτωση του ενός αερίου, έτσι και στη ροή μίγματος αερίων εφαρμόζονται οι οριακές συνθήκες Maxwell διαχυτικής - κατοπτρικής ανάκλασης. Στα μίγματα αερίων η πολυπλοκότητα του προβλήματος αυξάνει

σημαντικά επειδή αυξάνει ο αριθμός των παραμέτρων όπως για παράδειγμα, ο τύπος των αερίων που συνιστούν το μίγμα και η γραμμομοριακή σύσταση του μίγματος. Τα αποτελέσματα περιλαμβάνουν τις γραμμομοριακές παροχές των δυο συστατικών των αερίων μιγμάτων He-Ar και Ne-Ar καθώς και κατανομές πίεσης και συγκέντρωσης κατά μήκος των δυο πλακών για διάφορους λόγους πίεσης και διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς του μίγματος. Επιπρόσθετα, μελετάται η επίδραση παραμέτρων όπως, ο συντελεστής διαχυτικής-κατοπτρικής ανάκλασης και η γωνία των δυο πλακών στην συνολική γραμμομοριακή παροχή του μίγματος. Συγκεκριμένα, καθώς μειώνεται η διαχυτική σε σχέση με την κατοπτρική ανάκλαση οι μαζικές παροχές και των δύο συστατικών αυξάνονται.

Τα αποτελέσματα της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας είναι πιθανόν να βοηθήσουν στη μελέτη ροής αραιοποιημένων αερίων σε πορώδη υλικά και στον σχεδιασμό συσκευών και διατάξεων που ενισχύουν ή μειώνουν το φαινόμενο του διαχωρισμού των συστατικών των μιγμάτων όταν η ροή είναι σε αραιοποιημένη κατάσταση.

# Πίνακας Περιεχομένων

<b>Κατάλογος Πινάκων .....</b>	<b>ix</b>
<b>Κατάλογος Σχημάτων .....</b>	<b>xii</b>
<b>Κατάλογος Εικόνων .....</b>	<b>xiii</b>
<b>Κεφάλαιο 1 Εισαγωγή και βιβλιογραφική ανασκόπηση .....</b>	<b>1</b>
1.1 Ροές σε αγωγούς σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.....	1
1.2 Βιβλιογραφική ανασκόπηση .....	6
1.3 Στόχος παρούσας εργασίας και οργάνωση .....	6
<b>Κεφάλαιο 2 Ροή αερίου σε ορθογώνιο αγωγό μεταβλητής διατομής .....</b>	<b>9</b>
2.1 Εισαγωγή.....	9
2.2 Περιγραφή προβλήματος .....	9
2.3 Διατύπωση μαθηματικού μοντέλου.....	11
2.3.1 Κινητικές εξισώσεις και οριακές συνθήκες.....	11
2.3.2 Εξίσωση μαζικής παροχής και κατανομή πίεσης .....	14
2.4 Αριθμητικό σχήμα .....	15
2.4.1 Αδιάστατη παροχή .....	15
2.4.2 Μακροσκοπικές διαστατές ποσότητες .....	17
2.5 Αποτελέσματα και ανάλυση .....	20
2.5.1 Παράμετροι προσομοίωσης.....	20
2.5.2 Παροχές μάζας.....	22
2.5.3 Κατανομές πίεσης .....	23
2.5.4 Μελέτη επίδρασης γωνίας αγωγού .....	24
2.5.5 Συγκρίσεις υπολογιστικών και πειραματικών αποτελεσμάτων..	25
<b>Κεφάλαιο 3 Ροή μίγματος αερίων μεταξύ πλακών μεταβλητής απόστασης.....</b>	<b>39</b>
3.1 Περιγραφή προβλήματος.....	39
3.2 Κινητικό μοντέλο McCormack .....	40
3.3 Εξισώσεις κατανομής πίεσης και συγκέντρωσης.....	46
3.4 Αριθμητικό σχήμα .....	48
3.5 Αποτελέσματα και ανάλυση .....	48
3.5.1 Παράμετροι προσομοίωσης.....	48
3.5.2 Γραμμομοριακές παροχές.....	49

3.5.3 Κατανομές πίεσης και συγκέντρωσης.....	50
3.5.4 Επίδραση γωνίας στις γραμμομοριακές παροχές.....	51
3.5.5 Επίδραση συντελεστή διαχυτικής - κατοπτρικής ανάκλασης στις γραμμομοριακές παροχές.....	52
<b>Κεφάλαιο 4 Ανακεφαλαίωση και μελλοντική έρευνα .....</b>	<b>65</b>
<b>Βιβλιογραφία.....</b>	<b>67</b>
<b>Παραρτήματα.....</b>	<b>69</b>
Παράρτημα Α Βάσεις δεδομένων.....	70
Α.1 Ροή αερίου σε ορθογώνιο αγωγό .....	70
Α.2 Ροή μίγματος διαμέσου παράλληλων πλακών.....	71
Παράρτημα Β Αναλυτική λύση στην υδροδυναμική περιοχή .....	72
Παράρτημα Γ Επίλυση υδροδυναμικής περιοχής με OpenFOAM .....	76
Γ.1 Εισαγωγή .....	76
Γ.2 Φάκελος «constant» .....	77
Γ.3 Φάκελος «0» .....	80
Γ.4 Φάκελος «system» .....	82



## Κατάλογος Πινάκων

<b>Πίνακας 2.1:</b> Παράμετροι προσομοίωσης αδιάστατων παροχών $G_p(z)$ .....	21
<b>Πίνακας 2.2:</b> Μαζικές παροχές για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ για ροή σε αποκλίνοντα αγωγό. ( $W_B/W_A=60$ , $H_A=9\times 10^{-6}$ m, $W_A=2.2\times 10^{-6}$ m).....	27
<b>Πίνακας 2.3:</b> Μαζικές παροχές για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ για ροή σε συγκλίνοντα αγωγό. ( $W_B/W_A=1/60$ , $H_A=9\times 10^{-6}$ m, $W_A=132\times 10^{-6}$ m).....	28
<b>Πίνακας 2.4:</b> Μαζικές παροχές για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ για ροή σε αγωγό σταθερής διατομής. ( $H_A=9\times 10^{-6}$ m, $W_A=132\times 10^{-6}$ m).....	29
<b>Πίνακας 2.5:</b> Μαζικές παροχές για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ για ροή σε αγωγό σταθερής διατομής. ( $H_A=9\times 10^{-6}$ m, $W_A=2.2\times 10^{-6}$ m).....	29
<b>Πίνακας 2.6:</b> Σύγκριση μαζικής παροχής σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ , εφαρμόζοντας διαφορετικές μεθοδολογίες. ( $W_B/W_A=60$ , $H_A=9\times 10^{-6}$ m, $W_A=2.2\times 10^{-6}$ m).....	30
<b>Πίνακας 2.7:</b> Σύγκριση μαζικών παροχών σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ , εφαρμόζοντας διαφορετικές μεθοδολογίες. ( $W_B/W_A=1/60$ , $H_A=9\times 10^{-6}$ m, $W_A=132\times 10^{-6}$ m).....	31
<b>Πίνακας 2.8:</b> Μαζικές παροχές σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας $\omega$ και για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ . ( $H_A=9\times 10^{-6}$ m, $W_B=132\times 10^{-6}$ m).....	32
<b>Πίνακας 2.9:</b> Μαζικές παροχές σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας $\omega$ και για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ . ( $H_A=9\times 10^{-6}$ m, $W_A=132\times 10^{-6}$ m).....	33
<b>Πίνακας 2.10:</b> Μαζικές παροχές σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ . ( $W_B/W_A=114.8$ , $H_A=6.88\times 10^{-6}$ m, $W_A=1.15\times 10^{-6}$ m).....	34
<b>Πίνακας 2.11:</b> Μαζικές παροχές σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορους λόγους πίεσης $P_A/P_B$ . ( $W_B/W_A=0.008712$ , $H_A=6.88\times 10^{-6}$ m, $W_A=132\times 10^{-6}$ m).....	35
<b>Πίνακας 3.1:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς $C_A$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ , $H_A=H_B=1.88\times 10^{-6}$ m).....	54
<b>Πίνακας 3.2:</b> Γραμμομοριακές παροχές του μείγματος He-Ar για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς $C_A$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ , $H_A=H_B=0.376\times 10^{-6}$ m).....	54
<b>Πίνακας 3.3:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς $C_A$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ ).....	55

<b>Πίνακας 3.4:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς $C_A$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ ) .....	55
<b>Πίνακας 3.5:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος Ne-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς $C_A$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ ) .....	56
<b>Πίνακας 3.6:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος Ne-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς $C_A$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ ) .....	56
<b>Πίνακας 3.7:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ και για διάφορους λόγους $P_A/P_B$ . ( $T_0=298.5$ K).....	57
<b>Πίνακας 3.8:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ και για διάφορους λόγους $P_A/P_B$ . ( $T_0=298.5$ K).....	57
<b>Πίνακας 3.9:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας $\omega$ και για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ ) .....	58
<b>Πίνακας 3.10:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας $\omega$ και για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ ) .....	58
<b>Πίνακας 3.11:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας $\omega$ και για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=3$ ) .....	59
<b>Πίνακας 3.12:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό και για διάφορες τιμές της γωνίας $\omega$ και για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=3$ ) .....	59
<b>Πίνακας 3.13:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε ροή ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες για διάφορες τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης τοιχώματος-αερίου $a$ και για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ , $H_A=H_B=0.376\times 10^{-6}$ m) ...	60
<b>Πίνακας 3.14:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε ροή ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες για διάφορες τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης τοιχώματος-αερίου $a$ και για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ , $H_A=H_B=1.88\times 10^{-6}$ m) .....	60
<b>Πίνακας 3.15:</b> Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar για ροή σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης τοιχώματος-αερίου $a$ και για συγκέντρωση αναφοράς $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$ K, $P_A/P_B=6.6$ ).....	61

**Πίνακας 3.16:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar για ροή σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης τοιχώματος-αερίου  $\alpha$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )..... 61

## Κατάλογος Σχημάτων

<b>Σχήμα 2.1:</b> Γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αγωγού. ....	10
<b>Σχήμα 2.2:</b> Υπολογιστικό πλέγμα σε μία τυχαία του ορθογώνιου αγωγού. ....	16
<b>Σχήμα 2.3:</b> Υπολογιστικό πλέγμα κατά μήκος του ορθογώνιου αγωγού. ....	17
<b>Σχήμα 2.4:</b> Κατανομή πίεσης κατά μήκος του αγωγού για υψηλούς λόγους πίεσης σε αποκλίνοντα με $W_B / W_A = 60$ , $H_A = 9 \times 10^{-6}$ m, $W_A = 2.2 \times 10^{-6}$ m (αριστερά) και συγκλίνοντα με $W_B / W_A = 1/60$ , $H_A = 9 \times 10^{-6}$ m, $W_A = 132 \times 10^{-6}$ m (δεξιά) αγωγό.....	36
<b>Σχήμα 2.5:</b> Κατανομή πίεσης κατά μήκος του αγωγού για μικρούς λόγους πίεσης σε αποκλίνοντα με $W_B / W_A = 60$ , $H_A = 9 \times 10^{-6}$ m, $W_A = 2.2 \times 10^{-6}$ m (αριστερά) και συγκλίνοντα με $W_B / W_A = 1/60$ , $H_A = 9 \times 10^{-6}$ m, $W_A = 132 \times 10^{-6}$ m (δεξιά) αγωγό.....	36
<b>Σχήμα 2.6:</b> Αδιάστατη κατανομή πίεσης κατά μήκος αγωγού σταθερής διατομής με $W = 132 \times 10^{-6}$ m (αριστερά) και για $W = 2.2 \times 10^{-6}$ m (δεξιά). ....	37
<b>Σχήμα 2.7:</b> Κατανομή της παραμέτρου αραιοποίησης $\delta(z)$ κατά μήκος αγωγού για σταθερή διατομή με $W = 132 \times 10^{-6}$ m (αριστερά) και για $W = 2.2 \times 10^{-6}$ m (δεξιά). ....	37
<b>Σχήμα 3.1:</b> Γεωμετρικά χαρακτηριστικά του καναλιού.....	39
<b>Σχήμα 3.2:</b> Κατανομή αδιάστατης πίεσης (πάνω), αδιάστατης συγκέντρωσης (μέση) και παραμέτρου αραιοποίησης (κάτω) για ροή μίγματος μεταξύ παράλληλων πλακών με $H_A = H_B = 1.88 \times 10^{-6}$ m (αριστερά) και $H_A = H_B = 0.376 \times 10^{-6}$ m (δεξιά).....	62
<b>Σχήμα 3.3:</b> Κατανομή αδιάστατης πίεσης (πάνω), αδιάστατης συγκέντρωσης (μέση) και παραμέτρου αραιοποίησης (κάτω) για ροή μίγματος He-Ar με λόγο πίεσης $P_A/P_B = 6.6$ σε αποκλίνοντα αγωγό (αριστερά) και σε συγκλίνοντα αγωγό (δεξιά). ....	63
<b>Σχήμα 3.4:</b> Κατανομή αδιάστατης πίεσης (πάνω), αδιάστατης συγκέντρωσης (μέση) και παραμέτρου αραιοποίησης (κάτω) για ροή μίγματος He-Ar με λόγο πίεσης $P_A/P_B = 6.6$ σε αποκλίνοντα αγωγό (αριστερά) και σε συγκλίνοντα αγωγό (δεξιά). ....	64
<b>Σχήμα Γ.1:</b> Πύκνωση πλέγματος κατά μήκος μιας τυχαίας κατεύθυνσης.....	77

## Κατάλογος Εικόνων

<b>Εικόνα Γ.1:</b> Δημιουργία πλέγματος (“blockMeshDict”) .....	78
<b>Εικόνα Γ.2:</b> Το αρχείο “thermophysicalProperties” .....	79
<b>Εικόνα Γ.3:</b> Το αρχείο “p” .....	80
<b>Εικόνα Γ.4:</b> Το αρχείο “U” .....	81
<b>Εικόνα Γ.5:</b> Το αρχείο “T” .....	81
<b>Εικόνα Γ.6:</b> Το αρχείο “controlDict” .....	82
<b>Εικόνα Γ.7:</b> Το αρχείο “fvSchemes” .....	83
<b>Εικόνα Γ.8:</b> Το αρχείο “fvSolution” - Τμήμα Α .....	84
<b>Εικόνα Γ.9:</b> Το αρχείο “fvSolution” - Τμήμα Β .....	85
<b>Εικόνα Γ.10:</b> Το αρχείο “fvSolution” - Τμήμα Γ .....	86
<b>Εικόνα Γ.11:</b> Το αρχείο “fvSolution” - Τμήμα Δ .....	87

# Κεφάλαιο 1 Εισαγωγή και βιβλιογραφική ανασκόπηση

## 1.1 Ροές σε αγωγούς σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen

Τα τελευταία χρόνια παρατηρείται η ανάγκη ανάπτυξης των τεχνολογικών εφαρμογών στα επιστημονικά πεδία της μικρορευστοδυναμικής, της τεχνολογίας κενού και της αεροδιαστημικής. Στις περιπτώσεις αυτές πολλές φορές η μέση ελεύθερη διαδρομή των μορίων είναι συγκρίσιμη με το χαρακτηριστικό μήκος του υπό εξέταση συστήματος και οι γνωστές μέθοδοι επίλυσης Euler και Navier-Stokes [1] δεν περιγράφουν επαρκώς τα συγκεκριμένα φαινόμενα. Για το λόγο αυτό εφαρμόζεται η κινητική θεωρία των αερίων όπου η εξίσωση του Boltzmann χρησιμοποιείται για την επίλυση των φαινομένων ροής σε αυτές τις περιοχές. Η εξίσωση του Boltzmann με απουσία των εξωτερικών δυνάμεων γράφεται στην εξής μορφή [2], [3], [4]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = Q(f, f) \quad (1.1)$$

όπου  $\xi$ ,  $\mathbf{r}$  και  $f(t, \mathbf{r}, \xi)$  είναι το διάνυσμα της μοριακής ταχύτητας, το διάνυσμα της θέσης των σωματιδίων και η συνάρτηση κατανομής των ταχυτήτων των σωματιδίων.  $Q(f, f)$  είναι ο όρος των συγκρούσεων και δίνεται από το πενταπλό ολοκλήρωμα

$$Q(f, f) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_m} (f' f'_* - f f_*) \mathbf{g} b db d\epsilon d\xi_* \quad (1.2)$$

όπου  $\xi$ ,  $\xi_*$ ,  $\xi'$ ,  $\xi'_*$  είναι οι ταχύτητες από ένα ζεύγος σωματιδίων πριν και μετά την σύγκρουση,  $f' = f(t, \mathbf{r}, \xi')$ ,  $f_* = f(t, \mathbf{r}, \xi_*)$ ,  $f'_* = f(t, \mathbf{r}, \xi'_*)$  είναι οι αντίστοιχες κατανομές των σωματιδίων,  $\mathbf{g} = \xi_* - \xi$  είναι η σχετική ταχύτητα των μορίων, ενώ η ποσότητα  $b$  ονομάζεται παράμετρος σύγκρουσης και εξαρτάται από το είδος του ενδομοριακού δυναμικού. Η άγνωστη ποσότητα της εξίσωσης (1.1) είναι η συνάρτηση κατανομής των

σωματιδίων  $f(t, \mathbf{r}, \xi)$  και όλες οι μακροσκοπικές ποσότητες με πρακτικό ενδιαφέρον υπολογίζονται ως ροπές της άγνωστης κατανομής  $f(t, \mathbf{r}, \xi)$ .

Ο αδιάστατος αριθμός Knudsen ( $Kn$ ) ορίζεται ως ο λόγος της μέσης ελεύθερης διαδρομής των σωματιδίων μεταξύ δυο συγκρούσεων  $\lambda$  με το χαρακτηριστικό μέγεθος του προβλήματος  $D$

$$Kn = \frac{\lambda}{D} \quad (1.3)$$

Με βάση τον αριθμό Knudsen μπορούμε να ορίσουμε τέσσερις περιοχές ροής του αερίου:

- Ελεύθερη μοριακή περιοχή ( $Kn > 10$ ),
- Μεταβατική περιοχή ( $10^{-1} \leq Kn \leq 10$ ),
- Περιοχή ολίσθησης ( $10^{-3} \leq Kn \leq 10^{-1}$ ),
- Υδροδυναμική περιοχή ( $Kn < 10^{-3}$ ),
- Υδροδυναμικό όριο ( $Kn = 0$ ).

Στην ελεύθερη μοριακή περιοχή οι συγκρούσεις των σωματιδίων με τα τοιχώματα κυριαρχούν έναντι των συγκρούσεων των σωματιδίων με τα γειτονικά σωματίδια. Αντίθετα, στην υδροδυναμική περιοχή οι συγκρούσεις μεταξύ των μορίων είναι περισσότερες έναντι των συγκρούσεων των σωματιδίων με τα τοιχώματα.

Μία βασική ποσότητα είναι η παράμετρος αραιοποίησης  $\delta$ :

$$\delta = \frac{P D}{\mu v_0} \quad (1.4)$$

όπου  $P$ ,  $v_0$ ,  $D$  και  $\mu$  είναι η πίεση, η πιο πιθανή ταχύτητα, το δυναμικό ιξώδες του αερίου και το χαρακτηριστικό μήκος του εκάστοτε προβλήματος αντίστοιχα. Η παράμετρος αραιοποίησης είναι σχεδόν αντιστρόφως ανάλογη με τον αριθμό Knudsen.

$$Kn \propto \frac{1}{\delta} \quad (1.5)$$

Η ακριβής έκφραση εξαρτάται από το μοντέλο των ενδομοριακών συγκρούσεων. Στην παρούσα εργασία θα χρησιμοποιηθεί η παράμετρος αραιοποίησης  $\delta$  για τον χαρακτηρισμό του επιπέδου αραιοποίησης του αερίου.

Η εξίσωση του Boltzmann (1.1) είναι μια ολοκληροδιαφορική εξίσωση και η επίλυση και εφαρμογή της σε πρακτικές εφαρμογές είναι αρκετά επίπονη. Για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Boltzmann χρησιμοποιούνται τα κινητικά μοντέλα. Τα μοντέλα αυτά αντικαθιστούν τον όρο των συγκρούσεων και διατηρούν τις ιδιότητες που σχετίζονται με τους νόμους διατήρησης της μάζας, της ορμής και της ενέργειας. Επίσης, θα πρέπει να ικανοποιούν το θεώρημα **H** και να δίνουν τους σωστούς συντελεστές μεταφοράς [2]. Στη συνέχεια, θα δοθεί μια σύντομη περιγραφή για τα πιο δημοφιλή κινητικά μοντέλα: BGK, S, ES και για την περίπτωση των μιγμάτων το μοντέλο McCormack.

### Μοντέλο-BGK

Το μοντέλο BGK (Bhathagar-Gross-Krook) προτάθηκε το 1956 [5]. Ο όρος των συγκρούσεων (1.2) για το μοντέλο BGK γίνεται

$$Q(f, f) = \frac{P}{\mu} (f^M - f) \quad (1.6)$$

όπου  $f^M$  είναι η τοπική συνάρτηση κατανομής Maxwell. Από την εξίσωση (1.6) φαίνεται ότι το μοντέλο BGK εκφράζει την απόκλιση της κατανομής των σωματιδίων από την κατανομή Maxwell σε κάθε σημείο του ρευστού. Στα μειονεκτήματα του μοντέλου BGK συγκαταλέγεται το ότι δίνει αριθμό Prandtl ίσο με την μονάδα αντί για 2/3 όπως θα έπρεπε στην περίπτωση των μονοατομικών αερίων. Επίσης, οι συντελεστές της θερμικής αγωγιμότητας και του ιξώδους δεν μπορούν να καθοριστούν ταυτόχρονα.

### Μοντέλο-S

Το μοντέλο S προτάθηκε το 1968 [6] από τον Shakhov. Ο όρος των συγκρούσεων (1.2) για το μοντέλο BGK γίνεται

$$Q(f, f) = \frac{P}{\mu} (f^S - f) \quad (1.6)$$

όπου

$$f^S = f^M \left[ 1 + \frac{2m}{15n(\mathbf{r})(k_B T(\mathbf{r}))^2} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) \mathbf{q} \left( \frac{m(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2k_B T(\mathbf{r})} - \frac{5}{2} \right) \right] \quad (1.7)$$

όπου  $\mathbf{q}$ ,  $k_B$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $n$  και  $T$  είναι η θερμορροή, η σταθερά του Boltzmann, η μακροσκοπική ταχύτητα, η αριθμητική πυκνότητα και η θερμοκρασία αντίστοιχα. Το μοντέλο S δίνει το



σωστό αριθμό Prandtl, αλλά μόνο για την περίπτωση της γραμματικοποιημένης έκφρασης έχει αποδειχθεί ότι ικανοποιεί το θεώρημα **H**.

### Μοντέλο-ES

Το 1966 από τον Holway [7] προτάθηκε το μοντέλο ES, το οποίο βασίζεται στην απαίτηση η συνάρτηση κατανομής του μοντέλου να έχει τις ίδιες πρώτες ροπές με την εξίσωση Boltzmann. Η συνάρτηση κατανομής του μοντέλου ES είναι μια ανισότροπη κατανομή Gauss και ο όρος των συγκρούσεων (1.2) για το μοντέλο ES γίνεται

$$Q(f, f) = \frac{P}{\mu} (f^{\text{ES}} - f) \quad (1.8)$$

όπου  $\text{Pr}$  ο αδιάστατος αριθμός Prandtl και

$$f^{\text{ES}} = \frac{n}{\pi^{3/2} \sqrt{\det A_{ij}}} \exp \left( - \sum_{i,j=1}^3 A_{ij}^{-1} (\xi_i - u_i)(\xi_j - u_j) \right) \quad (1.9)$$

με

$$A_{ij} = \frac{2k_B T}{m\text{Pr}} \delta_{ij} - \frac{2(1-\text{Pr})}{nm\text{Pr}} P_{ij} \quad (1.10)$$

όπου  $\delta_{ij}$  είναι το δέλτα του Krohcker. Επίσης, έχει αποδειχθεί ότι το μοντέλο ES ικανοποιεί το θεώρημα **H**.

### Μοντέλο-McCormack

Για την περίπτωση των μιγμάτων προτάθηκε από τον McCormack [8] το 1973 το ομώνυμο μοντέλο. Ο στόχος του συγκεκριμένου μοντέλου είναι να ικανοποιήσει όλους τους συντελεστές μεταφοράς που εμφανίζονται στις ροές των αέριων μιγμάτων. Σημειώνεται ότι η έκφραση του μοντέλου McCormack είναι γραμμική και μπορεί να εφαρμοστεί μόνο όταν οι ωθούσες δυνάμεις της ροής είναι σχετικά μικρές. Το μοντέλο McCormack γράφεται ως

$$\frac{\partial h_\alpha}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial h_\alpha}{\partial \mathbf{r}} = \sum_\beta L_{\alpha\beta} \quad (1.11)$$

όπου  $h_\alpha$ ,  $\xi_\alpha$  και  $L_{\alpha\beta}$  είναι αντίστοιχα η συνάρτηση κατανομής της απόκλισης του κάθε συστατικού από την ισορροπία, η μοριακή ταχύτητα και ο όρος των συγκρούσεων ο οποίος γράφεται ως

$$\begin{aligned}
L_{\alpha\beta}(c_{\alpha i}) = & -\gamma_{\alpha\beta}h_{\alpha} + \gamma_{\alpha\beta}\rho_{\alpha} + \\
& 2 \left\{ \gamma_{\alpha\beta}u_{\alpha i} - \left( u_{\alpha i} - \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}}}u_{\beta i} \right) v_{\alpha\beta}^{(1)} - \left[ q_{\alpha i} - \left( \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} \right)^{3/2} q_{\beta i} \right] v_{\alpha\beta}^{(2)} \right\} c_{\alpha i} + \\
& \left[ \gamma_{\alpha\beta}T_{\alpha} - 2\frac{m^*}{m_{\beta}}(T_{\alpha} - T_{\beta})v_{\alpha\beta}^{(1)} \right] \left( c_{\alpha}^2 - \frac{3}{2} \right) + \\
& 2 \left[ (\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(3)})P_{\alpha ij} + P_{\beta ij}v_{\alpha\beta}^{(4)} \right] c_{\alpha i}c_{\alpha j} + \\
& \frac{8}{5} \left\{ (\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(5)})q_{\alpha i} + q_{\beta i}v_{\alpha\beta}^{(6)} - \frac{5}{8} \left[ u_{\alpha i} - \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}}}u_{\beta i} \right] v_{\alpha\beta}^{(2)} \right\} \times \\
& c_{\alpha i} \left( c_{\alpha}^2 - \frac{5}{2} \right)
\end{aligned} \tag{1.12}$$

με  $\alpha, \beta = 1, 2$ ,  $i, j = x, y, z$  και  $c_{\alpha i} = \xi_{\alpha i} (m_{\alpha} / 2k_B T)^{1/2}$  η αδιάστατη μοριακή ταχύτητα με  $m_{\alpha}$  η μάζα του συστατικού  $\alpha$ . Επιπλέον, με  $v_{\alpha\beta}^{(k)}$ ,  $\gamma_{\alpha\beta}$ ,  $v_{\alpha}$ ,  $u_{\alpha i}$ ,  $T_{\alpha}$ ,  $P_{\alpha ij}$ ,  $q_{\alpha i}$  και  $m^*$  συμβολίζονται οι δύο διαφορετικοί τύποι συχνοτήτων συγκρούσεων, η αριθμητική πυκνότητα, η μακροσκοπική ταχύτητα, η πίεση, η θερμορροή και η αδιάστατη μάζα αντίστοιχα.

Μια βασική ιδιότητα του μοντέλου McCormack είναι ότι το θεώρημα **H** μπορεί να αποδειχθεί για το συγκεκριμένο μοντέλο. Το μοντέλο McCormack έχει χρησιμοποιηθεί σε μια πληθώρα από πρακτικά προβλήματα [9], [10], [11] για την προσομοίωση ροών μιγμάτων, δίνοντας αξιόπιστα αποτελέσματα σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.

Τα τελευταία χρόνια το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας έχει στραφεί στη μελέτη ροών τόσο ενός συστατικού όσο και μιγμάτων εντός αγωγών σταθερής διατομής υπό την επίδραση κλίσης πίεσης και θερμοκρασίας. Έχουν αντιμετωπιστεί με επιτυχία ροές μεταξύ παράλληλων πλακών [10], μεταξύ κινούμενων πλακών [12], καθώς και εντός αγωγών με τραπεζοειδή - τριγωνική [13], ορθογωνική [14] και κυκλική διατομή [11]. Σε όλες τις προαναφερθείσες περιπτώσεις η επίλυση βασίζεται στην παραδοχή ότι το μήκος του αγωγού είναι πολύ μεγάλο σε σχέση με την χαρακτηριστική του διάσταση και η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη. Ωστόσο σε πολλές πρακτικές εφαρμογές η διατομή του αγωγού μπορεί να μεταβάλλεται στην κατεύθυνση της ροής. Αντίθετα, με τους αγωγούς σταθερής διατομής ο αριθμός των εργασιών σε αγωγούς μεταβλητής διατομής είναι περιορισμένος. Στην παρούσα εργασία γίνεται μια προσπάθεια μελέτης ροών ενός συστατικού και μίγματος συστατικών σε αγωγούς μεταβλητής διατομής στην κατεύθυνση της ροής.

## 1.2 Βιβλιογραφική ανασκόπηση

Εδώ και αρκετά χρόνια έχουν διερευνηθεί οι ροές διαμέσου αγωγών διαφορετικών διατομών σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen εφαρμόζοντας τις αρχές της κινητικής θεωρίας. Σε όλες τις περιπτώσεις η διατομή του αγωγού παραμένει σταθερή στη διεύθυνση της ροής. Σε πολλές πρακτικές εφαρμογές σχετιζόμενες με την τεχνολογία σύντηξης, όπως αντλίες κενού, αντιδραστήρες σύντηξης κ.τ.λ. η διατομή του αγωγού μπορεί να μεταβάλλεται στην κατεύθυνση της ροής. Στις περιπτώσεις αυτές, η ροή μπορεί να ποικίλει από την ελεύθερη μοριακή περιοχή διαμέσου της μεταβατικής έως την υδροδυναμική περιοχή. Ωστόσο, οι εργασίες που σχετίζονται με ροές σε αγωγούς μεταβλητής διατομής είναι πολύ περιορισμένες [15], [16]. Στο άρθρο [15] παρουσιάζεται μια μεθοδολογία υπολογισμού της πτώσης πίεσης και της μαζικής παροχής σε κυκλικό αγωγό μεταβλητής διατομής χρησιμοποιώντας τις αρχές της κινητικής θεωρίας. Στη μεθοδολογία αυτή η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη και χρησιμοποιώντας τα κινητικά δεδομένα που πηγάζουν από τη μελέτη ροών σε αγωγούς σταθερής διατομής υπολογίζεται η μαζική παροχή και η κατανομή της πίεσης κατά μήκος του αγωγού.

Η διερεύνηση των ροών μιγμάτων διαμέσου αγωγών μεταβλητής διατομής παραμένει πολύ περιορισμένη. Ωστόσο μία έντονη προσπάθεια καταβάλλεται από την επιστημονική κοινότητα για την επέκταση της μελέτης των μιγμάτων σε αγωγούς μεταβλητής διατομής. Το ενδιαφέρον στις ροές μιγμάτων στρέφεται κυρίως στο φαινόμενο του διαχωρισμού των δύο συστατικών του μίγματος. Το φαινόμενο του διαχωρισμού μεταξύ των δυο διαφορετικών συστατικών μπορεί να γίνει πολύ σημαντικό σε πρακτικές εφαρμογές όπου ο στόχος είναι ο διαχωρισμός όπως στις περιπτώσεις ροής διαμέσου μεμβρανών και πλεγμάτων. Μία άλλη πρακτική εφαρμογή του φαινομένου του διαχωρισμού είναι στην χρωματογραφία του αερίου. Πρόσφατα το φαινόμενο του διαχωρισμού μελετήθηκε σε αγωγούς μεγάλου μήκους και σταθερής διατομής στο άρθρο [17].

## 1.3 Στόχος παρούσας εργασίας και οργάνωση

Η παρούσα εργασία έχει σαν σκοπό τη μελέτη ροής αερίων διαμέσου αγωγών μεταβλητής διατομής. Η μελέτη αυτή αναφέρεται τόσο στη ροή ενός συστατικού όσο και στη ροή μίγματος. Στην περίπτωση της ροής ενός συστατικού γίνεται η επέκταση της μεθοδολογίας που παρουσιάζεται στο άρθρο [15] και αφορά τη ροή σε αγωγό μεταβλητής

κυκλικής διατομής σε ροή διαμέσου ορθογώνιας μεταβλητής διατομής στην κατεύθυνση της ροής. Εξετάζεται η περίπτωση όπου το πλάτος αυξάνεται στην κατεύθυνση της ροής (αποκλίνων αγωγός) καθώς και η περίπτωση όπου μειώνεται (συγκλίνων αγωγός). Ποσότητες όπως μαζικές παροχές και κατανομές πίεσης δίνονται για διάφορες παραμέτρους και πραγματοποιείται σύγκριση με πειραματικά δεδομένα. Επίσης, εξετάζεται η επίδραση παραμέτρων όπως η γωνία του αγωγού και ο λόγος πίεσης εισόδου-εξόδου του αγωγού.

Στην περίπτωση της ροής μίγματος μελετάται η ροή των αέριων μιγμάτων He-Ar και Ne-Ar διαμέσου δυο πλακών μεταβλητού ύψους. Υπολογίζονται γραμμομοριακές παροχές των δυο συστατικών καθώς και ολόκληρου του μίγματος για την περίπτωση όπου το ύψος των δυο πλακών αυξάνεται στην κατεύθυνση της ροής καθώς και στην αντίθετη περίπτωση. Επιπλέον, υπολογίζονται κατανομές πίεσης και συγκέντρωσης του μίγματος κατά μήκος των δυο πλακών. Τέλος, μελετάται το φαινόμενο του διαχωρισμού των δυο συστατικών καθώς και οι παράγοντες που το επηρεάζουν.

Η εργασία οργανώνεται στα κεφάλαια και υποκεφάλαια ως εξής: Το Κεφάλαιο 2 αναφέρεται στη ροή ενός συστατικού σε ορθογώνιο αγωγό, ενώ το Κεφάλαιο 3 στη ροή μίγματος διαμέσου πλακών μεταβλητής απόστασης.

Στη Παράγραφο 2.1 περιγράφεται η διαμόρφωση και οι βασικές παράμετροι της ροής. Στη συνέχεια στη Παράγραφο 2.3 γίνεται λεπτομερής περιγραφή του μαθηματικού μοντέλου υπολογισμού των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Το μοντέλο αποτελείται από δύο στάδια επίλυσης. Στο πρώτο στάδιο η αδιάστατη παροχή σε κάθε διατομή υπολογίζεται αριθμητικά από την επίλυση της γραμματικοποιημένης εξίσωσης του μοντέλου BGK εισάγοντας την υπόθεση της πλήρους ανεπτυγμένης ροής, ενώ στο δεύτερο στάδιο πραγματοποιείται ο υπολογισμός της μαζικής παροχής του αγωγού ικανοποιώντας την εξίσωση της συνέχειας. Στη Παράγραφο 2.4 περιγράφεται το αριθμητικό σχήμα και ο αλγόριθμος επίλυσης, ενώ στη Παράγραφο 2.5 δίνονται τα κινητικά αποτελέσματα για τις μαζικές παροχές και για τις κατανομές πίεσης, καθώς και τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την επίλυση των υδροδυναμικών εξισώσεων. Επιπλέον γίνεται μελέτη της επίδρασης της γωνίας του αγωγού. Τέλος πραγματοποιείται σύγκριση των κινητικών αποτελεσμάτων με αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα [18].

Στη Παράγραφο 3.1 παρουσιάζεται η διαμόρφωση του προβλήματος που πρόκειται να επιλυθεί στη συνέχεια του κεφαλαίου. Στη Παράγραφο 3.2 παρουσιάζεται το μοντέλο McCormack για την περίπτωση ροής διαμέσου δυο παράλληλων πλακών και ο υπολογισμός

της αδιάστατης παροχής. Στη Παράγραφο 3.3 δίνεται η μεθοδολογία υπολογισμού της γραμμομοριακής παροχής που αναφέρεται σε ροή διαμέσου πλακών μεταβλητού ύψους και προβάλλεται ο τρόπος με τον οποίο σχετίζεται με την αδιάστατη παροχή μεταξύ παράλληλων πλακών. Στη Παράγραφο 3.4 δίνονται πληροφορίες σχετικά με το αριθμητικό σχήμα επίλυσης, ενώ στη Παράγραφο 3.5 παρατίθενται αποτελέσματα καθώς και η επίδραση διαφόρων παραγόντων σε αυτά όπως η γωνία του ακροφυσίου και ο συντελεστής διαχυτικής-κατοπτρικής ανάκλασης.

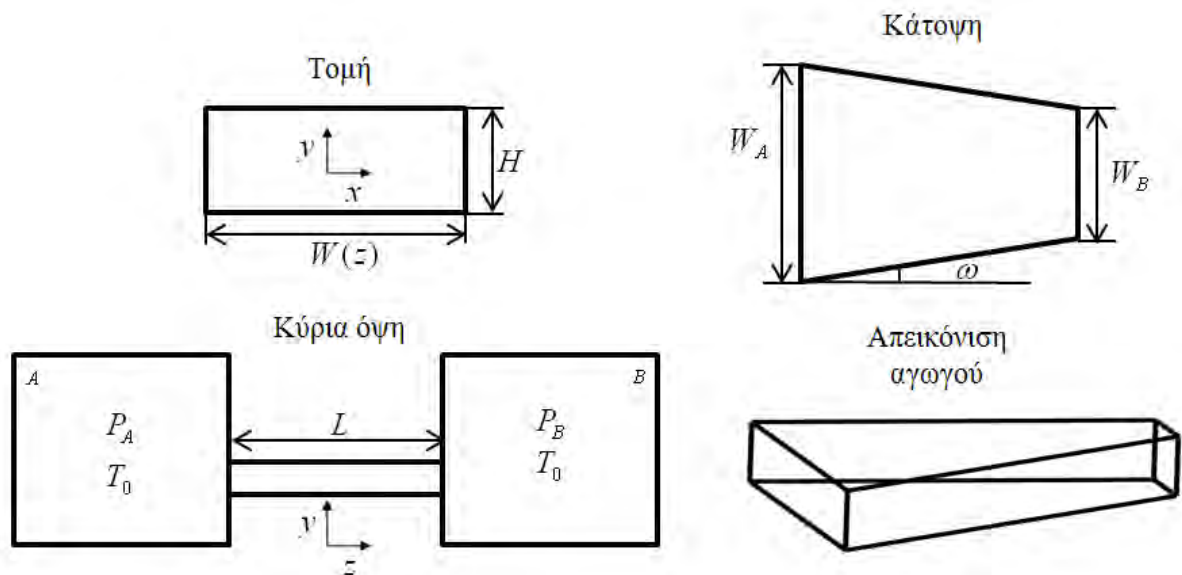
## Κεφάλαιο 2 Ροή αερίου σε ορθογώνιο αγωγό μεταβλητής διατομής

### 2.1 Εισαγωγή

Επιλύεται η ροή μονατομικού αερίου διαμέσου ορθογώνιου αγωγού του οποίου το ύψος ή το πλάτος ή και τα δύο μεταβάλλονται στην κατεύθυνση της ροής. Η ροή οφείλεται σε διαφορά πίεσης. Παρουσιάζεται η μεθοδολογία υπολογισμού της μαζικής παροχής και της πτώσης πίεσης στον αγωγό, τα οποία προκύπτουν από την επίλυση γραμμικών κινητικών εξισώσεων σε διάφορες διατομές κατά μήκος του αγωγού. Η μεθοδολογία για την αριθμητική επίλυση των γραμμικών κινητικών εξισώσεων και για τον υπολογισμό της αδιάστατης παροχής, έχει περιγραφεί λεπτομερώς για κυλινδρικό αγωγό μεταβλητής διαμέτρου [15, 16] και στην παρούσα εργασία επεκτείνεται σε αγωγό μεταβλητής ορθογώνιας διατομής.

### 2.2 Περιγραφή προβλήματος

Θεωρείται η ροή αερίου διαμέσου ορθογώνιου αγωγού ύψους  $H$ , πλάτους  $W(z)$  και μήκους  $L$ , ο οποίος συνδέει δυο μεγάλα δοχεία αποθήκευσης του αερίου, το Α και το Β. Σημειώνεται ότι, ενώ το ύψος παραμένει σταθερό, το πλάτος μεταβάλλεται στη διεύθυνση  $-z$  της ροής. Η γεωμετρική απεικόνιση και το σύστημα συντεταγμένων  $(x, y, z)$  απεικονίζονται στο Σχ. 2.1. Η θερμοκρασία του αερίου και στα δύο δοχεία παραμένει σταθερή και ίση με  $T_0$ . Η πίεση στο δοχείο Α διατηρείται σταθερή και ίση με  $P_A$  ενώ η πίεση στο δοχείο Β διατηρείται σταθερή και ίση με  $P_B$ , ενώ θεωρείται ότι  $P_A > P_B$ . Λόγω της διαφοράς πίεσης έχουμε ροή από το δοχείο Α προς το δοχείο Β.



**Σχήμα 2.1:** Γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αγωγού.

Η κατεύθυνση της ροής συμβολίζεται με  $z$  ενώ η μεταβλητή διατομή του αγωγού βρίσκεται στο επίπεδο  $(xy)$ . Το πλάτος  $W(z)$  μεταβάλλεται γραμμικά σύμφωνα με την σχέση

$$W(z) = W_A + \frac{W_B - W_A}{L} z \quad (2.1)$$

Όπου  $W_A$  και  $W_B$  είναι το πλάτος του αγωγού στα  $z = 0$  και  $z = L$  αντίστοιχα.

Τονίζεται ότι το μήκος  $L$  θεωρείται πολύ μεγαλύτερο σε σχέση με το πλάτος και το ύψος του αγωγού δηλαδή  $L \gg W(z)$  και  $L \gg H$ , έτσι ώστε να ισχύει η υπόθεση της πλήρους ανεπτυγμένης ροής αγνοώντας τα φαινόμενα πτώσης πίεσης στα άκρα του αγωγού. Η γωνία  $\omega$  η οποία απεικονίζεται στην κάτοψη του αγωγού στο Σχ. 2.1 υπολογίζεται από την σχέση

$$\tan \omega = \frac{W_A - W_B}{2L} \quad (2.2)$$

Η περίπτωση όπου  $\omega = 0^\circ$  αντιπροσωπεύει τη ροή διαμέσου αγωγού σταθερής ορθογώνιας διατομής με διαστάσεις  $H \times W_A$ , η οποία έχει μελετηθεί εκτεταμένα στα άρθρα [19, 20]. Στην εξεταζόμενη ροή η πίεση μεταβάλλεται μόνο στην κατεύθυνση της ροής, δηλαδή  $P = P(z) \in [P_A, P_B]$ , ενώ θεωρείται σταθερή σε κάθε διατομή του αγωγού, δηλαδή δεν εξαρτάται από τα  $x$  και  $y$ . Σε πολλές περιπτώσεις επιλέγουμε  $P_B > P_A$ . Τότε η ροή είναι στην αντίθετη κατεύθυνση  $-z$  από τη μικρή προς τη μεγάλη διατομή. Η σύγκριση των

αποτελεσμάτων ανάμεσα στους δύο τύπους ροής αποτελεί αντικείμενο της παρούσας μελέτης. Όταν η ροή έχει την κατεύθυνση στην οποία αυξάνει το πλάτος του καναλιού ονομάζεται ροή σε αποκλίνων αγωγό, ενώ στην αντίθετη περίπτωση ονομάζεται ροή σε συγκλίνων αγωγό.

## 2.3 Διατύπωση μαθηματικού μοντέλου

### 2.3.1 Κινητικές εξισώσεις και οριακές συνθήκες

Παρουσιάζονται οι κινητικές εκφράσεις μέσα από τις οποίες είναι εφικτός ο υπολογισμός της αδιάστατης παροχής  $G_p(z)$ . Οι κινητικές εξισώσεις επιλύονται σε κάθε διατομή από την είσοδο προς την έξοδο του αγωγού δίνοντας μια αδιάστατη παροχή για κάθε θέση. Ορίζεται το σύστημα συντεταγμένων με αρχή των αξόνων στο κέντρο του αγωγού, όπως παριστάνεται στην πλάγια όψη στο Σχ. 2.1. Η διατομή ορίζεται από τις σχέσεις  $-H/2 \leq y \leq H/2$  και  $-W/2 \leq x \leq W/2$ . Το εμβαδόν και η περίμετρος του αγωγού ορίζονται ως  $A(z) = W(z) \times H(z)$  και  $2W(z) \times H(z) / (W(z) + H(z))$  αντίστοιχα με  $0 \leq z \leq L$ . Η υδραυλική διάμετρος  $D_h(z)$  του αγωγού ορίζεται ως

$$D_h(z) = 2 \frac{W \times H}{W + H} \quad (2.3)$$

Η βασική παράμετρος της ροής είναι η παράμετρος αραιοποίησης που ισούται με

$$\delta(z) = \frac{D_h(z) \cdot P(z)}{\mu_0 \cdot \nu_0} \quad (2.4)$$

όπου  $\mu_0$  είναι το ιξώδες του αερίου στη θερμοκρασία  $T_0$  και  $\nu_0 = \sqrt{2RT_0}$  η πιο πιθανή ταχύτητα. Το  $R$  είναι η σταθερά του αερίου και δίδεται από τη σχέση  $R = R^* / m$ . Σημειώνεται ότι, το  $\delta$  είναι αντιστρόφως ανάλογο του αριθμού Knudsen, δηλαδή για  $\delta = 0$  είμαστε στην ελεύθερη μοριακή περιοχή και για  $\delta \rightarrow \infty$ . Η τοπική αδιάστατη βαθμίδα πίεσης ορίζεται ως

$$X_p = \frac{D_h(z)}{P(z)} \frac{dP}{dz} \quad (2.5)$$

Και ισχύει ότι



$$X_p \ll 1 \quad (2.6)$$

Το γεγονός ότι  $D_h/L \ll 1$  επιτρέπει τη χρήση της γραμμικής κινητικής εξίσωσης BGK [20]. Εισάγοντας την ακόλουθη αδιαστατοποίηση της μακροσκοπικής ταχύτητας και των διαστάσεων

$$\tilde{u}(x, y) = \frac{u(x, y)}{v_0} \frac{1}{X_p}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{D_h(z)}, \quad \tilde{y} = \frac{y}{D_h(z)}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{D_h(z)} \quad (2.7)$$

Μετά τη διαδικασία των προβολών [20] η κινητική εξίσωση για το συγκεκριμένο πρόβλημα είναι

$$c_p \cos \theta \frac{\partial \Phi}{\partial x} + c_p \sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \delta \Phi = \delta \tilde{u} - \frac{1}{2} \quad (2.8)$$

όπου  $\Phi = \Phi(x, y, \theta, c_p)$  είναι η συνάρτηση κατανομής,  $\theta$  η πολική γωνία μοριακής ταχύτητας και  $c_p$  το μέτρο της μοριακής ταχύτητας των σωματιδίων. Η μακροσκοπική αδιάστατη ταχύτητα υπολογίζεται σε κάθε σημείο της διατομής από τη σχέση

$$\tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \Phi(\tilde{x}, \tilde{y}, \theta, c_p) c_p e^{-c_p^2} dc_p d\theta \quad (2.9)$$

Η αλληλεπίδραση του αερίου με τα τοιχώματα μοντελοποιείται από οριακές συνθήκες που βασίζονται στην υπόθεση της διαχυτικής ανάκλασης τύπου Maxwell. Οι οριακές συνθήκες διατυπώνονται ως

$$\Phi^+ = 0 \quad (2.10)$$

όπου το σύμβολο (+) συμβολίζει την κατανομή των σωματιδίων που απομακρύνονται από το τοίχωμα. Η κατανομή των σωματιδίων που προσεγγίζει το τοίχωμα είναι άγνωστη και αποτελεί μέρος της λύσης. Λαμβάνοντας υπόψη την αδιαστατοποίηση (2.7) η ροή μάζας που διέρχεται μέσα από τη διατομή σε μία τυχαία θέση  $z$  του αγωγού είναι

$$\dot{M} = \int_A \rho(z) u_z dA = \int_{-H/2}^{H/2} \int_{-W/2}^{W/2} \rho(z) u_z dx dy = \rho(z) D_h^2(z) v_0 \frac{D_h(z)}{P(z)} \frac{dP}{dz} \int_{-H/2D_h}^{H/2D_h} \int_{-W/2D_h}^{W/2D_h} \tilde{u}_z d\tilde{x} d\tilde{y} \quad (2.11)$$

όπου  $\rho(z)$  η πυκνότητα του αερίου. Η αδιάστατη παροχή  $G_p(z)$  ορίζεται ως

$$G_p(z) = 8 \frac{W(z) \cdot H(z)}{(W(z) + H(z))^2} \int_{-H/2D_h}^{H/2D_h} \int_{-W/2D_h}^{W/2D_h} \tilde{u}_z dx dy \quad (2.12)$$

Η κινητική εξίσωση (2.8) με την οριακή συνθήκη (2.10) επιλύονται αριθμητικά και υπολογίζεται το  $\tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y})$  και στη συνέχεια η αδιάστατη παροχή  $G_p(z)$ . Η διαδικασία αριθμητικού υπολογισμού των κινητικών εξισώσεων παρουσιάζεται στην παράγραφο 2.4.1.

Στην υδροδυναμική περιοχή ( $\delta \rightarrow \infty$ ) η ροή του αερίου περιγράφεται από την εξίσωση Stokes. Σε αυτή την περίπτωση είναι εφικτό να παραχθεί μια αναλυτική έκφραση για τον προσδιορισμό της ταχύτητας και για την αδιάστατη παροχή  $G_p^h(z)$ , θεωρώντας οριακές συνθήκες μη ολίσθησης ( $\tilde{u} = 0$ ). Η διαδικασία είναι αντίστοιχη με αυτή των αγωγών σταθερής διατομής και η περιγραφή της λύσης δίνεται στο Παράρτημα [B]. Μετά την επίλυση προκύπτει ότι η κατανομή της αδιάστατη ταχύτητας στην υδροδυναμική περιοχή ορίζεται ως

$$\tilde{u}^h(\tilde{x}, \tilde{y}) = \delta \sum_{i=0}^{\infty} \left[ \frac{1}{n^3} \left( 1 + \frac{H}{W} \right)^2 (-1)^i \left[ 1 - \frac{\cosh\left(\frac{2n\tilde{x}}{1+(H/W)}\right)}{\cosh\left(\frac{n}{2(H/W)}\right)} \right] \right] \cos\left(\frac{2n\tilde{y}}{1+(H/W)}\right) \quad (2.13)$$

όπου  $n = \pi(2i+1)$ . Η ολοκλήρωση της σχέσης (2.13) οδηγεί στην αδιάστατη παροχή στην υδροδυναμική παροχή η οποία δίνεται από την σχέση

$$G_p^h(z) = \frac{\delta(z)}{24} \left( \frac{H(z)}{W(z)} + 1 \right)^2 \left( 1 - 192 \frac{H(z)}{W(z)} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{n^5} \tanh\left(\frac{nW(z)}{2H(z)}\right) \right) \quad (2.14)$$

### 2.3.2 Εξίσωση μαζικής παροχής και κατανομή πίεσης

Η μέθοδος υπολογισμού της μαζικής παροχής ενός αερίου το οποίο διέρχεται από έναν αγωγό μεταβλητής κυκλικής διατομής με γνωστές τις συνθήκες πίεσης στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού έχει διατυπωθεί στο άρθρο [15]. Σε αυτή την παράγραφο γίνεται μία επέκταση αυτής της μεθοδολογίας στην περίπτωση όπου το κανάλι έχει ορθογώνια μεταβλητή διατομή. Εισάγοντας τη σχέση  $\rho(z) = 2P(z)/\nu_0^2$  στη σχέση (2.11) μπορούμε να υπολογίσουμε τη μαζική παροχή με βάση τις συνθήκες εισόδου του αγωγού από τη σχέση

$$\dot{M}_A = G \frac{H_A W_A D_{h,A} P_A}{\nu_0 L} \quad (2.15)$$

όπου το  $G$  είναι μια άγνωστη παράμετρος ώστε να ικανοποιείται η αρχή διατήρησης της μάζας και όπως θα διαπιστωθεί στη συνέχεια αποτελεί το κλειδί για την επίτευξη του υπολογισμού της μαζικής παροχής. Αντικαθιστώντας την (2.12) στην (2.11) η μαζική παροχή σε κάθε διατομή του αγωγού ορίζεται από την σχέση

$$\dot{M} = G_p(z) \frac{H(z) W(z) D_h(z) dP}{\nu_0 dz} \quad (2.16)$$

Βεβαίως αφού  $\dot{M}_A = \dot{M}$ , εξισώνοντας τις (2.15) και (2.16) προκύπτει ότι

$$G_p \frac{H(z) W(z) D_h(z) dP}{\nu_0 dz} = G \frac{H_A W_A D_{h,A} P_A}{\nu_0 L} \Rightarrow$$

$$\frac{dP}{dz} = \frac{G}{G_p(z)} \frac{W_A}{W(z)} \frac{D_{h,A}}{D_h(z)} \frac{P_A}{L} \quad (2.17)$$

Η εξίσωση (2.17) μαζί με τη συνθήκη πίεσης στην είσοδο  $P_A$  αποτελούν ένα πρόβλημα αρχικών τιμών. Υποθέτοντας μία τιμή για το  $G$  το πρόβλημα αρχικών τιμών μπορεί να επιλυθεί εφαρμόζοντας μια από τις γνωστές μεθόδους Euler ή Runge-Kutta. Η τιμή του  $G$  αλλάζει κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης μέσα από μία επαναληπτική διαδικασία έτσι ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη πίεσης στην έξοδο. Το αριθμητικό σχήμα και ο αλγόριθμος θα αναφερθούν με λεπτομέρεια στην Παράγραφο 2.4.2. Μετά το τέλος της επίλυσης η ποσότητα  $G$  και η κατανομή της πίεσης κατά μήκος του αγωγού είναι γνωστές ποσότητες και η παροχή μάζας υπολογίζεται από την σχέση (2.15) με βάση την ποσότητα  $G$ .

## 2.4 Αριθμητικό σχήμα

### 2.4.1 Αδιάστατη παροχή

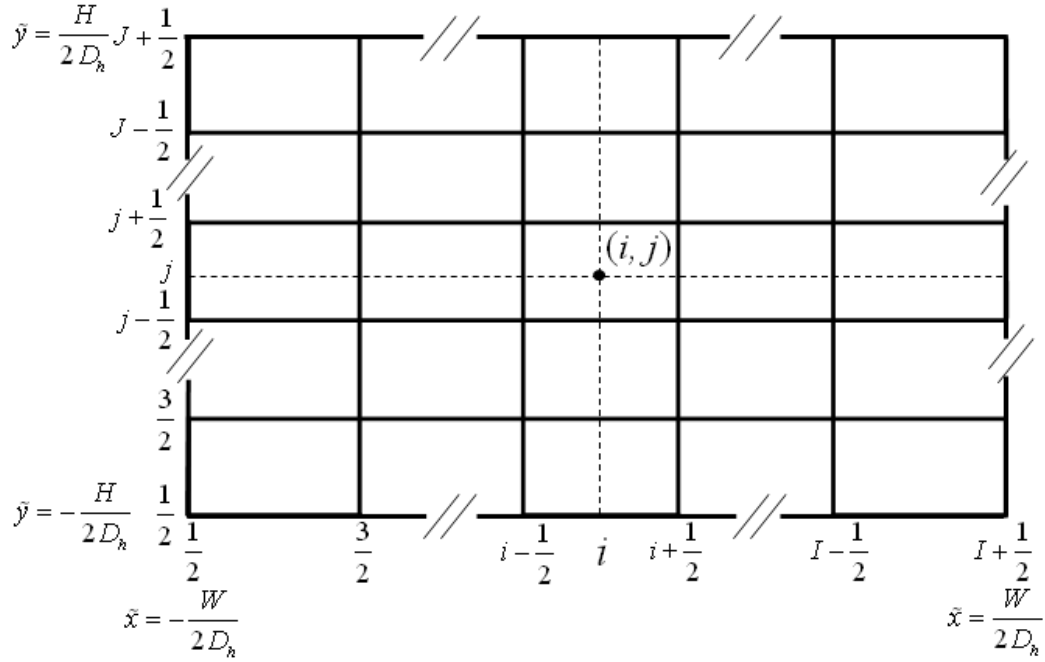
Παρουσιάζεται η μεθοδολογία αριθμητικής επίλυσης των εξισώσεων (2.8), (2.9) και (2.10) προκειμένου να υπολογιστεί η αδιάστατη παροχή  $G_p(z)$  σε μία τυχαία διατομή στην κατεύθυνση της ροής. Αρχικά, η χωρική διακριτοποίηση της εξίσωσης (2.8) γίνεται με την επιλυόμενη διατομή να χωρίζεται σε ορθογώνια στοιχεία και η εξίσωση να επιλύεται στο κέντρο αυτών. Η διακριτοποίηση στο χώρο των ταχυτήτων γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε να είναι εφαρμόσιμη η μέθοδος διακριτής μοριακής ταχύτητας. Οι πρώτες παράγωγοι προσεγγίζονται με κεντρώα διαφοράση στην αντίστοιχη διεύθυνση και στη συνέχεια γίνεται σταθμισμένη παρεμβολή στα γωνιακά σημεία του κάθε στοιχείου. Με τον τρόπο αυτό επιτυγχάνεται ακρίβεια δεύτερης τάξης. Με βάση το Σχ. 2.2 η διακριτοποιημένη μορφή της εξίσωσης (2.8) στον τυχαίο κόμβο  $(i, j)$  για την τυχαία ταχύτητα  $m$  και την τυχαία γωνία  $n$  διαβάζεται ως

$$\begin{aligned} & \frac{c_{p,m} \cos \theta_n}{2h_x} \left( \Phi_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} + \Phi_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} - \Phi_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} - \Phi_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} \right) + \\ & \frac{c_{p,m} \sin \theta_n}{2h_y} \left( \Phi_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} + \Phi_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} - \Phi_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} - \Phi_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} \right) + \\ & \frac{\delta}{4} \left( \Phi_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} + \Phi_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} + \Phi_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} + \Phi_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, m, n}^{(k+1/2)} \right) = \\ & = \frac{\delta}{4} \left( \tilde{u}_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{(k)} + \tilde{u}_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{(k)} + \tilde{u}_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{(k)} + \tilde{u}_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{(k)} \right) - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Αντίστοιχα το ολοκλήρωμα (2.9) στον τυχαίο κόμβο  $(i, j)$  διακριτοποιείται ως

$$\begin{aligned} \tilde{u}_i^{(k+1)} &= \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{N/4} \sum_{m=1}^M Y_{i,j,c_{pm}, 0 < \theta_n < \pi/2}^{(k+1/2)} e^{-c_{pm}^2} c_{pm} w_m w_n + \frac{1}{\pi} \sum_{n=N/4}^{N/2} \sum_{m=1}^M Y_{i,j,c_{pm}, \pi/2 < \theta_n < \pi}^{(k+1/2)} e^{-c_{pm}^2} c_{pm} w_m w_n + \\ & + \frac{1}{\pi} \sum_{n=N/2}^{3N/4} \sum_{m=1}^M Y_{i,j,c_{pm}, \pi < \theta_n < 3\pi/2}^{(k+1/2)} e^{-c_{pm}^2} c_{pm} w_m w_n + \frac{1}{\pi} \sum_{n=3N/4}^N \sum_{m=1}^M Y_{i,j,c_{pm}, 3\pi/2 < \theta_n < 2\pi}^{(k+1/2)} e^{-c_{pm}^2} c_{pm} w_m w_n \end{aligned} \quad (2.19)$$

όπου με δείκτη  $k$  δηλώνεται ο αριθμός επανάληψης της επαναληπτικής διαδικασίας, ενώ με  $w$  οι συντελεστές βαρύτητας από την αριθμητική ολοκλήρωση. Επίσης με  $N$  και  $M$  συμβολίζεται ο αριθμός των γωνιών στο  $[0, 2\pi]$  και ο αριθμός των διακριτών ταχυτήτων αντίστοιχα.



**Σχήμα 2.2:** Υπολογιστικό πλέγμα σε μία τυχαία του ορθογώνιου αγωγού.

Στο πεδίο ταχυτήτων έχει επιλεγεί η αριθμητική ολοκλήρωση Gauss-Legendre, ενώ για τις πολικές γωνίες ο κανόνας του τραπεζίου. Η επαναληπτική διαδικασία έχει ως εξής: Με γνωστές τις οριακές συνθήκες μέσω της σχέσης (2.10) και με χρήση της σχέσης (2.18) υπολογίζονται οι τιμές της συνάρτησης κατανομής  $\Phi$  σε όλους τους κόμβους για όλες τις γωνίες και για όλες τις ταχύτητες. Με γνωστή τη συνάρτηση κατανομής  $\Phi$  υπολογίζεται μέσω της σχέσης (2.19) η νέα τιμή της ταχύτητας. Στη συνέχεια γίνεται έλεγχος του απόλυτου σφάλματος της νέας υπολογισμένης ταχύτητας σε σχέση με την τιμή της στην προηγούμενη επανάληψη, όπου υπάρχει η απαίτηση να είναι μικρότερο από μία ορισμένη τιμή. Όταν το κριτήριο σύγκλισης ικανοποιηθεί η τελική τιμή της ταχύτητα σε όλους τους κόμβους είναι πλέον γνωστή ποσότητα.

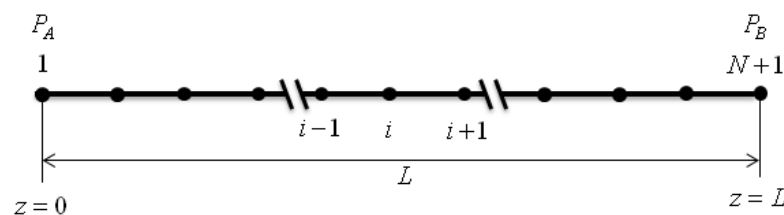
Όπως έχει ήδη αναφερθεί ο υπολογισμός της αδιάστατης παροχής πραγματοποιείται μέσα από την σχέση (2.12). Με γνωστές τις τιμές της ταχύτητας σε όλες τις θέσεις του υπολογιστικού πεδίου η αδιάστατη παροχή  $G_p(z)$  υπολογίζεται αριθμητικά κάνοντας χρήση του κανόνα του τραπεζίου. Η διακριτοποιημένη σχέση της αδιάστατης παροχής είναι

$$G_p(z) = 8h_x h_y F(z) \left[ \frac{1}{4} (\tilde{u}_{11} + \tilde{u}_{1J} + \tilde{u}_{I1} + \tilde{u}_{IJ}) + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=2}^{I-1} (\tilde{u}_{i1} + \tilde{u}_{iJ}) + \sum_{j=2}^{J-1} (\tilde{u}_{1j} + \tilde{u}_{Ij}) \right) + \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{j=2}^{J-1} \tilde{u}_{ij} \right] \quad (2.20)$$

όπου  $F(z) = W(z) \cdot H(z) / (W(z) + H(z))^2$ . Με  $I$  και  $J$  συμβολίζεται ο συνολικός αριθμός κόμβων στην  $\tilde{x}$  και  $\tilde{y}$  κατεύθυνση αντίστοιχα. Με  $h_x$  και με  $h_y$  συμβολίζεται η αδιάστατη απόσταση μεταξύ των κόμβων στην  $\tilde{x}$  και  $\tilde{y}$  κατεύθυνση αντίστοιχα. Από την παρουσίαση του αριθμητικού σχήματος προκύπτει ότι οι παράμετροι που καθορίζουν την τιμή της αδιάστατης παροχής σε μία τυχαία διατομή είναι ο λόγος  $H(z)/W(z)$ , η παράμετρος αραιοποίησης  $\delta$ , ο αριθμός των γωνιών  $n$  και των ταχυτήτων  $m$  και ο αριθμός των κόμβων  $I$  και  $J$ . Προκειμένου να εφαρμοστεί η μεθοδολογία της παραγράφου 2.4.2 και να υπολογιστεί η μαζική παροχή του αγωγού είναι απαραίτητη η δημιουργία μιας βάσης δεδομένων με τις τιμές της αδιάστατης παροχής  $G_p$ . Κάθε τιμή της βάσης δεδομένων αποτελεί μία λύση για έναν συνδυασμό  $(H/W, \delta)$  του αριθμητικού σχήματος που προαναφέρθηκε. Οι βάσεις δεδομένων που χρησιμοποιήθηκαν στα πλαίσια της παρούσας εργασίας δίνονται σε ηλεκτρονική μορφή (CD) και περισσότερες πληροφορίες για την οργάνωση των αρχείων τα οποία περιέχει στο (CD) δίνονται στο παράρτημα [Α].

## 2.4.2 Μακροσκοπικές διαστατές ποσότητες

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται το αριθμητικό σχήμα επίλυσης της συνήθους διαφορικής εξίσωσης (2.17), η οποία δίδει την κατανομή της πίεσης  $P(z)$  κατά μήκος του αγωγού καθώς και την ποσότητα  $G$  από την οποία υπολογίζεται η μαζική παροχή (σχέση 2.15). Το πρόβλημα αρχικών τιμών που δόθηκε στην παράγραφο 2.3.2 επιλύεται με τη μέθοδο Runge-Kutta 4<sup>ης</sup> τάξης, η οποία απαιτεί αραιότερο πλέγμα σε σχέση με τη μέθοδο Euler για την ίδια ακρίβεια. Στο Σχ. 2.3. δίνεται το υπολογιστικό πλέγμα, το οποίο εκτείνεται κατά μήκος του αγωγού. Ο αγωγός διακριτοποιείται σε  $N$  διαστήματα  $h_z$ , ενώ οι αντίστοιχοι κόμβοι είναι  $i = 1, 2, \dots, N+1$ . Η πίεση στην έξοδο και την είσοδο του αγωγού είναι  $P_1 = P_A$  και  $P_{N+1} = P_B$  αντίστοιχα.



**Σχήμα 2.3:** Υπολογιστικό πλέγμα κατά μήκος του ορθογώνιου αγωγού.

Η διακριτοποιημένη μορφή της εξίσωσης (2.17) στον τυχαίο κόμβο  $i$  δίνεται ως

$$P_{i+1} = P_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (2.21)$$

όπου

$$\begin{aligned} k_1 &= h_z f(z_i, P_i) \\ k_2 &= h_z f\left(z_i + \frac{1}{2}h_z, P_i + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= h_z f\left(z_i + \frac{1}{2}h_z, P_i + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 &= h_z f(z_i + h_z, P_i + k_3) \end{aligned}$$

και

$$f(z, P) = \frac{G}{G_p(z)} \frac{W_A}{W(z)} \frac{D_{h,A}}{D_h(z)} \frac{P_A}{L}$$

Υποθέτοντας μία αρχική τιμή του  $G$  η επίλυση αρχίζει από τον κόμβο  $i=2$  εφαρμόζοντας τη σχέση (2.21) για  $i=2,3,\dots,N$  και τελικά προκύπτει η πίεση στον κόμβο  $N+1$ . Η τιμή της ποσότητας  $G$  αλλάζει με μία επαναληπτική διαδικασία έως η υπολογιζόμενη τιμή της πίεσης στον κόμβο  $N+1$  να γίνει ίση με την απαιτούμενη τιμή πίεσης  $P_B$ . Σε κάθε κόμβο  $i$  είναι απαραίτητη η γνώση της αδιάστατης παροχής  $G_p$ , η οποία αποτελεί συνάρτηση του λόγου  $H/W$  και της παραμέτρου αραιοποίησης  $\delta$  που αντιστοιχούν στον κόμβο  $i$ .

Η περιγραφή του αλγορίθμου έχει ως εξής: Μετά την εισαγωγή των παραμέτρων ο αλγόριθμος αρχίζει την επαναληπτική διαδικασία με μία αρχική υπόθεση της ποσότητας  $G$ . Με βάση την παράμετρο αραιοποίησης στην είσοδο και το λόγο  $H/W$  υπολογίζεται με γραμμική παρεμβολή δύο διαστάσεων η αδιάστατη παροχή στην διατομή εισόδου (κόμβος 1). Στη συνέχεια, υπολογίζεται η ποσότητα  $k_1$  με βάση τις συνθήκες στον κόμβο 1. Έχοντας υπολογίσει την ποσότητα  $k_1$  υπολογίζεται μια τιμή της πίεσης σε σχέση με την ποσότητα  $k_1$  και την πίεση στον κόμβο 1. Το επόμενο βήμα είναι ο καθορισμός της παραμέτρου αραιοποίησης σε σχέση με τη νέα τιμή της πίεσης και του μέσου του διαστήματος μεταξύ του κόμβου 1 και 2. Επιπλέον υπολογίζεται και ο λόγος  $H/W$  στη μέση του διαστήματος μεταξύ των κόμβων 1 και 2. Γνωρίζοντας το νέο λόγο  $H/W$  και την νέα παράμετρο

αραιοποίησης υπολογίζεται η νέα αδιάστατη παροχή. Αυτή η νέα αδιάστατη παροχή μαζί με τις γεωμετρικές διαστάσεις της διατομής που βρίσκονται στο μέσο του διαστήματος των κόμβων 1 και 2 χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της ποσότητας  $k_2$ . Στη συνέχεια υπολογίζεται μια τιμή της πίεσης σε σχέση με την ποσότητα  $k_2$  και ακολουθεί ξανά ο υπολογισμός της παραμέτρου αραιοποίησης, του λόγου  $H/W$  και της αδιάστατης παροχής  $G_p$ . Η ίδια διαδικασία ακολουθείται για τον υπολογισμό των ποσοτήτων  $k_3$  και  $k_4$ . Ειδικά, στην περίπτωση του υπολογισμού του  $k_4$  η αδιάστατη παροχή  $G_p$  προκύπτει από της γεωμετρικές διαστάσεις της διατομής στον κόμβο 2. Με γνωστά τα  $k_1, k_2, k_3, k_4$  υπολογίζεται η τιμή της πίεσης στον κόμβο 2. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για όλους τους κόμβους μέχρι των κόμβο  $N+1$ . Στη συνέχεια, ακολουθεί ο έλεγχος του απόλυτου σφάλματος της υπολογιζόμενης πίεσης από την πίεση στην έξοδο του αγωγού απαιτώντας να είναι μικρότερο από μία δεδομένη τιμή. Σε περίπτωση μη ικανοποίησης του κριτηρίου γίνεται μία νέα υπόθεση της τιμής της παραμέτρου  $G$  και επαναλαμβάνεται η διαδικασία έως ότου ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης. Στο τέλος του αλγορίθμου τυπώνονται οι τιμές της πίεσης στους υπολογιστικούς κόμβους καθώς και η τιμή της ποσότητας  $G$  και ο υπολογισμός της μαζικής παροχής πραγματοποιείται μέσω της σχέσης (2.15).

Ειδικότερα στην υδροδυναμική περιοχή ( $\delta \rightarrow \infty$ ), στην οποία υπάρχει αναλυτική έκφραση για τον υπολογισμό της αδιάστατης παροχής  $G_p^h$ , η ποσότητα  $G$  μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά δίνοντας μια αναλυτική έκφραση για την μαζική παροχή. Αντικαθιστώντας την σχέση (2.14) στην (2.17) και ολοκληρώνοντας αναλυτικά προκύπτει η αναλυτική έκφραση της ποσότητας  $G^h$  ως

$$G^h = \frac{\delta_A L}{48 W_A} \left[ \left( \frac{P_B}{P_A} \right)^2 - 1 \right] \left( 1 + \frac{H_A}{W_A} \right)^2 \left[ \int_0^L \frac{1}{\left( W(z) - 192 H_A \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{n^5} \tanh \left( \frac{nW(z)}{2H_A} \right) \right)} dz \right]^{-1} \quad (2.22)$$

όπου με δείκτη  $h$  συμβολίζεται η υδροδυναμική περιοχή και με  $\delta_A$  συμβολίζεται η παράμετρος αραιοποίησης στην είσοδο του αγωγού. Η απόδειξη της σχέσης (2.22) παρατίθεται στο Παράρτημα [B]. Έχοντας την ποσότητα  $G^h$  η υδροδυναμική μαζική παροχή υπολογίζεται από την σχέση (2.15) με αντικατάσταση του  $G$  με  $G^h$ . Επίσης ο υπολογισμός



της μαζικής παροχής στην υδροδυναμική περιοχή μπορεί να πραγματοποιηθεί μέσω της υπολογιστικής πλατφόρμας του OpenFOAM. Στα πλαίσια της συγκεκριμένης εργασίας υλοποιήθηκε σε περιβάλλον OpenFOAM η επίλυση της ροής σε αγωγό μεταβλητής διατομής στην κατεύθυνση της ροής. Περισσότερες λεπτομέρειες δίνονται στο Παράρτημα [Γ].

## 2.5 Αποτελέσματα και ανάλυση

### 2.5.1 Παράμετροι προσομοίωσης

Αριθμητικά αποτελέσματα παρατίθενται για ροή διοξειδίου του άνθρακα σε ορθογώνιο αγωγό μεταβλητής ορθογώνιας διατομής. Η ροή θεωρείται ισοθερμοκρασιακή σε θερμοκρασία αναφοράς  $T_0 = 293 \text{ K}$ . Για όλες τις εξεταζόμενες περιπτώσεις το μήκος του αγωγού θεωρείται σταθερό και ίσο με  $L = 15 \text{ mm}$ . Το μήκος του αγωγού είναι πολύ μεγαλύτερο σε σχέση με το ύψος και το πλάτος του αγνοώντας τα φαινόμενα των άκρων (end effects). Το πλάτος του αγωγού μεταβάλλεται γραμμικά στην κατεύθυνση ανάπτυξης της ροής λαμβάνοντας τις δύο ακραίες τιμές στην είσοδο και στην έξοδο του αγωγού. Η μεταβολή του πλάτους περιγράφεται από την σχέση (2.1). Εξετάζονται δύο περιπτώσεις, στη πρώτη το πλάτος μεταβάλλεται από  $W_A = 2.2 \text{ }\mu\text{m}$  έως  $W_B = 132 \text{ }\mu\text{m}$ , ενώ στη δεύτερη περίπτωση από  $W_A = 1.15 \text{ }\mu\text{m}$  έως  $W_B = 132 \text{ }\mu\text{m}$ . Στην πρώτη περίπτωση το ύψος του αγωγού θεωρείται ίσο με  $H = 9 \text{ }\mu\text{m}$ , ενώ στη δεύτερη περίπτωση ίσο με  $H = 6.88 \text{ }\mu\text{m}$ . Το ύψος του αγωγού δε μεταβάλλεται στην κατεύθυνση της ροής. Για τη δεύτερη περίπτωση πραγματοποιείται σύγκριση με αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα [18]. Εξετάζονται οι ροές από τη μικρή προς τη μεγάλη διατομή όπως και η αντίθετη από τη μεγάλη προς τη μικρή διατομή. Τα αποτελέσματα αφορούν ένα εύρος του λόγου πίεσης από  $P_A / P_B \approx 1.333$  έως  $P_A / P_B \approx 11.80$  και για τρεις τιμές της διαφοράς πίεσης  $\Delta P = 30, 45$  και  $60 \text{ kPa}$ . Επιπλέον παρουσιάζονται αποτελέσματα για αγωγό με σταθερή διατομή για  $H = 9 \text{ }\mu\text{m}$ ,  $W = 132 \text{ }\mu\text{m}$  και για  $H = 9 \text{ }\mu\text{m}$ ,  $W = 2.2 \text{ }\mu\text{m}$ . Τα δεδομένα για τις πιέσεις ανάντη και κατάντη του αγωγού για όλες τις εξεταζόμενες περιπτώσεις έχουν ληφθεί από πειραματικά δεδομένα [18] με τα οποία πραγματοποιείται σύγκριση στην παράγραφο 2.5.4.

Στην παράγραφο 2.4.1 παρουσιάστηκε η μεθοδολογία υπολογισμού της αδιάστατης παροχής  $G_p(z)$  ώστε να δημιουργηθεί μια βάση δεδομένων στην οποία κάθε σημείο

υπολογίζεται σαν συνάρτηση των ακόλουθων ποσοτήτων: ο λόγος  $H(z)/W(z)$ , η παράμετρος αραιοποίησης  $\delta$ , ο αριθμός των γωνιών  $n$  και των ταχυτήτων  $m$  και ο αριθμός των κόμβων  $I, J$ . Στον Πίνακα 2.1 παρουσιάζονται οι τιμές των παραμέτρων για τον υπολογισμό των  $G_p(z)$  που περιέχονται στις βάσεις δεδομένων που χρησιμοποιήθηκαν σε όλες τις προσομοιώσεις.

**Πίνακας 2.1:** Παράμετροι προσομοίωσης αδιάστατων παροχών  $G_p(z)$

<i>ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ</i>	<i>ΤΙΜΕΣ</i>
Λόγος ύψους προς πλάτος $H(z)/W(z)$	0.01 - 10
Παράμετρος αραιοποίησης ( $\delta$ )	0 - 1000
Αριθμός ταχυτήτων ( $n$ )	64
Αριθμός γωνιών ( $m$ ) στο $[0, 2\pi]$	400
Αριθμός κόμβων ( $I = J$ )	201
Κριτήριο σύγκλισης	$10^{-7}$

Ο υπολογισμός της μαζικής παροχής εξαρτάται από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αγωγού και το λόγο πίεσης εξόδου-εισόδου  $P_B/P_A$ . Ο αριθμός των κόμβων στην κατεύθυνση της ροής θεωρήθηκε ίσος με  $N=500$ . Επιπλέον, η επαναληπτική διαδικασία εύρεσης της μαζικής παροχής λαμβάνει τέλος με κριτήριο σύγκλισης  $10^{-6}$ .

Στην περίπτωση του τρισδιάστατου υδροδυναμικού λύτη του υπολογιστικού πακέτου OpenFOAM χρησιμοποιήθηκε ανομοιόμορφο πλέγμα με 400 στοιχεία στην κατεύθυνση της ροής  $z$ , 15 στοιχεία στην κατεύθυνση  $y$  και 10 στοιχεία στην κατεύθυνση  $x$ . Περισσότερες πληροφορίες για την δημιουργία του πλέγματος δίνονται στο Παράρτημα [Γ].

## 2.5.2 Παροχές μάζας

Στους Πίνακες 2.2-2.11 παρουσιάζεται η μαζική παροχή σε συνάρτηση με τις παραμέτρους προσομοίωσης, δηλαδή την πίεση εισόδου και την διαφορά πίεσης για συγκλίνοντα και αποκλίνοντα αγωγό. Στους Πίνακες 2.8-2.9 εξετάζεται η εξάρτησή της μαζικής παροχής από τη γωνία  $\omega$  του αγωγού. Επίσης οι Πίνακες 2.10-2.11 αναφέρονται στη σύγκριση των αριθμητικών αποτελεσμάτων με τα αντίστοιχα πειραματικά [18].

Οι Πίνακες 2.2-2.3 περιέχουν τα αποτελέσματα για την περίπτωση όπου το πλάτος του αγωγού μεταβάλλεται από  $W_A = 2.2 \mu\text{m}$  έως  $W_B = 132 \mu\text{m}$  και το ύψος του καναλιού είναι  $H = 9 \mu\text{m}$ . Ειδικότερα ο Πίνακας 2.2 αναφέρεται στην περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού, ενώ ο Πίνακας 2.3 στην περίπτωση του συγκλίνοντος αγωγού. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για τρεις διαφορές πίεσης  $\Delta P = 30, 45$  και  $60\text{kPa}$  και για διάφορους λόγους  $P_A / P_B$  ανά περίπτωση. Από τους δύο πίνακες προκύπτει ότι καθώς η διαφορά πίεσης  $\Delta P$  αυξάνει, ανεξάρτητα από το αν το ακροφύσιο είναι συγκλίνων ή αποκλίνων, η παροχή μάζας οδηγείται σε αύξηση. Επίσης για σταθερή διαφορά πίεσης παρατηρείται αύξηση της μαζικής παροχής με μείωση του λόγου  $P_A / P_B$ . Η αύξηση της μαζικής παροχής δικαιολογείται από την αύξηση της παραμέτρου αραιοποίησης  $\delta(z)$ . Όσο η παράμετρος αραιοποίησης αυξάνει τόσο η ροή προσεγγίζει την υδροδυναμική περιοχή με αποτέλεσμα να αυξάνεται η μαζική παροχή. Από την σύγκριση των μαζικών παροχών στους Πίνακες 2.2-2.3 παρατηρείται ότι η παροχή μάζας για συγκεκριμένη διαφορά πίεσης  $\Delta P$  και συγκεκριμένο λόγο πίεσης εισόδου-εξόδου  $P_A / P_B$  είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση του συγκλίνοντος ακροφυσίου. Επιπλέον από τους δύο πίνακες εξάγεται το συμπέρασμα ότι για μία συγκεκριμένη διαφορά πίεσης η παροχή μάζας στο συγκλίνων ακροφύσιο αυξάνεται σε σχέση με το αποκλίνων καθώς ο λόγος πίεσης  $P_A / P_B$  αυξάνεται. Από τα παραπάνω προκύπτει ότι διατηρώντας τα ίδια γεωμετρικά χαρακτηριστικά και απλώς αντιστρέφοντας τις πιέσεις εισόδου/εξόδου επιτυγχάνεται αύξηση της μαζικής παροχής στην περίπτωση που η ροή έχει την κατεύθυνση μείωσης του πλάτους του αγωγού. Το αποτέλεσμα αυτό ισχύει για τις συγκεκριμένες συνθήκες ροής.

Στους Πίνακες 2.4-2.5 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τις μαζικές παροχές ορθογώνιου αγωγού σταθερής διατομής. Στον Πίνακα 2.4 τα αποτελέσματα αφορούν αγωγό

με  $W = 132 \mu\text{m}$  και  $H = 9 \mu\text{m}$ , ενώ στον Πίνακα 2.5 αγωγό με  $W = 2.2 \mu\text{m}$  και ύψος  $H = 9 \mu\text{m}$ . Τα αποτελέσματα αφορούν τρεις τιμές της διαφοράς πίεσης  $\Delta P = 30, 45, 60 \text{ kPa}$  και λόγους πίεσης  $P_A / P_B = 11.93, 10.40, 8.193$ . Από τους Πίνακες 2.4-2.5 παρατηρείται ότι καθώς αυξάνεται η διατομή του αγωγού αυξάνεται και η παροχή μάζας, κάτι το οποίο δικαιολογείται από την σχέση (2.16) για σταθερά γεωμετρικά χαρακτηριστικά. Αυτό οφείλεται στην αύξηση της αδιάστατης παροχής  $G_p(z)$  με την αύξηση της παραμέτρου αραιοποίησης  $\delta$ . Επιπλέον, από τους Πίνακες 2.1-2.5 φαίνεται ότι η παροχή σε έναν αγωγό μεταβλητής διατομής κυμαίνεται ανάμεσα στις παροχές που υπολογίζονται από τους αγωγούς με σταθερή διατομή με την μικρότερη και την μεγαλύτερη διάσταση του πλάτους του αγωγού.

Στους Πίνακες 2.6-2.7 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των μαζικών παροχών με διαφορετικές μεθοδολογίες επίλυσης τόσο για αποκλίνων (Πίνακας 2.6) όσο και για συγκλίνων (Πίνακας 2.7) αγωγό. Τα αποτελέσματα αφορούν τις ίδιες παραμέτρους προσομοίωσης με εκείνες που υπολογίστηκαν οι μαζικές παροχές στους Πίνακες 2.2-2.3. Οι μαζικές παροχές που προκύπτουν από την κινητική θεωρία βρίσκονται στην 6<sup>η</sup> στήλη. Η 7<sup>η</sup> στήλη στους Πίνακες 2.6 και 2.7 αναφέρεται στην μαζική παροχή με χρήση του υπολογιστικού πακέτου OpenFOAM, ενώ η 8<sup>η</sup> στήλη αφορά τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την αναλυτική σχέση (2.2). Από την σύγκριση των αποτελεσμάτων φαίνεται η καλή συμφωνία των δύο υδροδυναμικών λύσεων, ενώ παράλληλα αυτή η συμφωνία διατηρείται σε υψηλές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης και με τα κινητικά αποτελέσματα  $\dot{M}_{Kinetic}$ . Η μικρή διαφορά ανάμεσα στις υδροδυναμικές λύσεις και στη λύση που βασίζεται στα κινητικά αποτελέσματα οφείλεται στην υπόθεση της συνθήκης μη ολίσθησης αερίου-τοιχώματος, η οποία χρησιμοποιήθηκε στις περιπτώσεις των υδροδυναμικών λύσεων.

### 2.5.3 Κατανομές πίεσης

Στο Σχ. 2.5 παρουσιάζονται οι αδιάστατες κατανομές πίεσης κατά μήκος του αγωγού ως προς την πίεση εισόδου του αποκλίνοντος και συγκλίνοντος αγωγού για τρεις περιπτώσεις του λόγου πίεσης  $P_A / P_B \approx 12, 10, 8.2$ , οι οποίες αντιστοιχούν σε τρεις διαφορές πίεσης  $\Delta P = 60, 45, 30 \text{ kPa}$ . Στο Σχ. 2.6 δίνονται οι αντίστοιχες κατανομές πίεσης κατά μήκος του αγωγού για  $P_A / P_B \approx 1.33, 1.50, 1.67$ . Σε όλες τις περιπτώσεις το πλάτος του αγωγού μεταβάλλεται από  $W_A = 2.2 \mu\text{m}$  έως  $W_B = 132 \mu\text{m}$  και το ύψος του καναλιού είναι

$H = 9 \mu\text{m}$ . Από τα γραφήματα παρατηρείται ότι στην περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού η πίεση παρουσιάζει μία απότομη μείωση στην αρχή του αγωγού και στη συνέχεια μειώνεται σχεδόν γραμμικά έως την πίεση εξόδου. Αντίθετα, στην περίπτωση του συγκλίνοντος αγωγού η πίεση παρουσιάζει μια πολύ μικρή πτώση από την αρχή του αγωγού έως την έξοδο ενώ λίγο πριν την έξοδο παρουσιάζεται μια απότομη πτώση στην πίεση εξόδου. Η ίδια συμπεριφορά παρουσιάζεται τόσο σε υψηλούς όσο και σε χαμηλούς λόγους πίεσης  $P_A / P_B$ .

Στο Σχ. 2.7 παρουσιάζονται οι αδιάστατες κατανομές πίεσης κατά μήκος του αγωγού ως προς την πίεση εισόδου για αγωγό σταθερής διατομής για τις περιπτώσεις  $W = 132 \times 10^{-6} \text{ m}$  και  $W = 2.2 \times 10^{-6} \text{ m}$ , ενώ το ύψος παραμένει το ίδιο  $H = 9 \times 10^{-6} \text{ m}$ . Από τα γραφήματα φαίνεται ότι η πίεση παρουσιάζει μία μη γραμμική συμπεριφορά και στις δύο περιπτώσεις. Επίσης, παρατηρείται ότι η πίεση παρουσιάζει μεγαλύτερη κλίση καθώς ο λόγος πίεσης αυξάνει. Στο Σχ. 2.8 δίνονται οι μεταβολές της παραμέτρου αραιοποίησης για την περίπτωση της μικρής και της μεγάλης διατομής. Φαίνεται ότι η καμπύλη της παραμέτρου αραιοποίησης παρουσιάζει ανάλογη συμπεριφορά με την πίεση κάτι που είναι αναμενόμενο εφόσον στην περίπτωση αυτή οι διαστάσεις του αγωγού δεν αλλάζουν στην κατεύθυνση ανάπτυξης της ροής και η μόνη παράμετρος που επηρεάζει την παράμετρο αραιοποίησης είναι η πίεση.

#### 2.5.4 Μελέτη επίδρασης γωνίας αγωγού

Μελετάται η επίδραση της γωνίας  $\omega$  του αγωγού στις μαζικές παροχές  $\dot{M}$  για συγκλίνοντα και αποκλίνοντα αγωγό. Στην περίπτωση του συγκλίνοντος αγωγού το πλάτος στην είσοδο παραμένει σταθερό σε όλες τις περιπτώσεις και ίσο με  $W_A = 132 \mu\text{m}$ , ενώ μεταβάλλεται το πλάτος στην έξοδο σύμφωνα με τη γωνία  $\omega$  (Σχέση 2.2). Αντίθετα στην περίπτωση του αποκλίνοντος ακροφυσίου το πλάτος στην έξοδο του αγωγού παραμένει σταθερό και μεταβάλλεται το πλάτος στην είσοδο. Το μήκος και το ύψος του αγωγού λαμβάνονται σε όλες τις περιπτώσεις σταθερά στην κατεύθυνση της ροής και ίσα με  $L = 15 \text{ mm}$  και  $H = 9 \mu\text{m}$  αντίστοιχα. Οι τιμές της γωνίας  $\omega$  για τις οποίες υπολογίζεται η μαζική παροχή είναι  $\omega = 0^\circ, 0.05^\circ, 0.1^\circ, 0.15^\circ, 0.2^\circ, 0.25^\circ$ . Επιπλέον, στη συγκεκριμένη μελέτη για την κάθε τιμή της γωνίας  $\omega$  έχουν ληφθεί υπόψη τρεις λόγοι πίεσης  $P_A / P_B = 1.022, 6.407, 10.34$  με αντίστοιχες τιμές διαφοράς πίεσης  $\Delta P = 2, 45, 60 \text{ kPa}$ .

Στους Πίνακες 2.8-2.9 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον αποκλίνοντα και συγκλίνοντα αγωγό αντίστοιχα. Από τα αποτελέσματα φαίνεται ότι η παροχή αυξάνεται με τη μείωση της γωνίας  $\omega$ , λαμβάνοντας τη μέγιστη τιμή στην οριακή περίπτωση  $\omega = 0^\circ$  η οποία αντιστοιχεί σε αγωγό σταθερής διατομής. Επιπλέον, συγκρίνοντας τις παροχές ανάμεσα στον συγκλίνοντα και αποκλίνοντα αγωγό παρατηρείται ότι στους υψηλούς λόγους πίεσης  $P_A / P_B = 6.407, 10.34$  η διαφορά στις παροχές γίνεται έντονη όταν η γωνία ξεπεράσει μια κρίσιμη τιμή, η οποία στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι  $\omega = 0.15^\circ$ . Αντίθετα, στον μικρό λόγο πίεσης  $P_A / P_B = 1.022$  οι μαζικές παροχές του συγκλίνοντος και αποκλίνοντος αγωγού παραμένουν ίδιες για όλες τις τιμές της γωνίας  $\omega$ .

Από την παραπάνω ανάλυση γίνεται σαφές ότι κατά τον σχεδιασμό αγωγών με μεταβλητή διατομή η γωνία  $\omega$  είναι μία βασική παράμετρος και θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη σε εφαρμογές στις οποίες η μαζική παροχή είναι κρίσιμος παράγοντας.

### **2.5.5 Συγκρίσεις υπολογιστικών και πειραματικών αποτελεσμάτων**

Στη συνέχεια πραγματοποιούνται συγκρίσεις μεταξύ υπολογιστικών και πειραματικών αποτελεσμάτων που δίνονται στο άρθρο [18]. Τα πειραματικά αποτελέσματα αφορούν τη ροή διοξειδίου του άνθρακα διαμέσου αγωγού μεταβλητής ορθογώνιας διατομής. Το ύψος του αγωγού θεωρείται σταθερό και ίσο με  $H = 6.88 \mu\text{m}$ , ενώ το πλάτος του αγωγού μεταβάλλεται γραμμικά από  $W_A = 1.15 \mu\text{m}$  έως  $W_B = 132 \mu\text{m}$ . Το μήκος του αγωγού θεωρείται σταθερό και ίσο με  $L = 15 \text{mm}$ . Επίσης, το αέριο θεωρείται ότι βρίσκεται σε θερμοκρασία αναφοράς  $T_0 = 293 \text{K}$ .

Στους Πίνακες 2.10 και 2.11 παρουσιάζονται οι μαζικές παροχές για αποκλίνοντες και συγκλίνοντες αγωγούς αντίστοιχα. Επιπλέον, τα αποτελέσματα αναφέρονται σε 375 κανάλια. Οι πίνακες περιέχουν τόσο τις μετρούμενες πειραματικά τιμές της μαζικής παροχής όσο και τις τιμές της μαζικής παροχής που έχουν υπολογιστεί με βάση τον κινητικό αλγόριθμο. Σε όλες τις περιπτώσεις υπάρχει καλή ποιοτική συμφωνία των αποτελεσμάτων αλλά όχι καλή ποσοτική συμπεριφορά. Παντού οι υπολογιζόμενες τιμές της μαζικής παροχής είναι διπλάσιες σε σχέση με τις αντίστοιχες πειραματικές. Από τα πειραματικά και τα υπολογιστικά αποτελέσματα προκύπτει ότι σε όλες τις περιπτώσεις η παροχή μάζας στην περίπτωση του

συγκλίνοντος αγωγού είναι υψηλότερη σε σύγκριση με την παροχή μάζας του αποκλίνοντος αγωγού.

Η ποσοτική διαφορά στα αποτελέσματα μπορεί να οφείλεται σε δυο κατηγορίες σφαλμάτων. Στην πρώτη, ανήκουν τα σφάλματα μοντελοποίησης όπως η επιλογή του κινητικού μοντέλου για τον υπολογισμό της αδιάστατης παροχής  $G_p(z)$ , η επιλογή των οριακών συνθηκών καθώς και η μη θεώρηση των άκρων (end-effects). Στη δεύτερη, κατηγορία ανήκουν κυρίως σφάλματα που προέρχονται από τα όργανα μέτρησης.

Όσο αφορά την πρώτη κατηγορία σφαλμάτων δεν ισχύει στην περίπτωση μας αφού η εφαρμογή του κινητικού μοντέλου BGK καθώς και των συνοριακών συνθηκών Maxwell - diffuse που χρησιμοποιήθηκαν για την συγκεκριμένη μοντελοποίηση έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν δίνοντας αξιόπιστα αποτελέσματα συγκρίνοντάς τα με πειράματα [20]. Επίσης, τα φαινόμενα των άκρων (end-effects) είναι αμελητέα στη συγκεκριμένη περίπτωση αφού η μεθοδολογία της παραγράφου 2.3.2 βασίζεται στην παραδοχή  $L \gg H, W$ , η οποία ισχύει στην περίπτωσή μας. Η ποσοτική απόκλιση των αποτελεσμάτων μάλλον οφείλεται σε σφάλματα που ανήκουν στην δεύτερη κατηγορία.

**Πίνακας 2.2:** Μαζικές παροχές για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A/P_B$  για ροή σε αποκλίνοντα αγωγό. ( $W_B/W_A=60$ ,  $H_A=9\times 10^{-6}$  m,  $W_A=2.2\times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$P_A/P_B$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}$ ( $10^{-10}$ Kg/s)
65483	5489	60	11.93	47.83	19.11	1.096
66752	6713	60	9.944	48.75	23.37	1.123
71372	10996	60	6.49	52.13	38.28	1.246
80716	20443	60	3.948	58.95	71.16	1.491
150274	89817	60	1.673	109.8	312.6	3.289
34175	4171	30	8.194	24.96	14.52	0.3370
35812	574	30	6.239	26.16	19.98	0.3592
40733	10321	30	3.947	29.75	35.93	0.4270
50277	19993	30	2.515	36.72	69.59	0.5516
119929	89644	30	1.338	87.59	312.0	1.45169
49785	4789	45	10.40	36.36	16.67	0.6596
51239	6184	45	8.286	37.42	21.53	0.6888
56016	10622	45	5.274	40.91	36.97	0.7859
65469	20194	45	3.242	47.82	70.29	0.9719
135231	89726	45	1.507	98.77	312.3	2.325



**Πίνακας 2.3:** Μαζικές παροχές για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A/P_B$  για ροή σε συγκλίνοντα αγωγό. ( $W_B/W_A = 1/60$ ,  $H_A = 9 \times 10^{-6}$  m,  $W_A = 132 \times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$P_A / P_B$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}$ ( $10^{-10}$ Kg / s)
65533	5553	60	11.80	228.1	4.056	1.249
66834	6774	60	9.867	232.6	4.948	1.284
71172	11098	60	6.407	247.7	8.106	1.400
80741	20776	60	3.886	281.1	15.17	1.656
150325	90166	60	1.667	523.3	65.86	3.571
34142	414	30	8.247	118.8	3.024	0.3937
35809	5717	30	6.263	124.6	4.176	0.4162
40484	10435	30	3.88	140.9	7.622	0.4779
50326	20332	30	2.475	175.2	14.85	0.6100
119963	8998	30	1.333	417.6	65.72	1.565
49809	4818	45	10.338	173.4	3.519	0.7639
51286	6208	45	8.261	178.5	4.534	0.7937
55757	10734	45	5.194	194.1	7.840	0.8823
6552	20539	45	3.19	228.1	15.00	1.079
135263	90065	45	1.502	470.8	65.78	2.524

**Πίνακας 2.4:** Μαζικές παροχές για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A / P_B$  για ροή σε αγωγό σταθερής διατομής. ( $H_A=9 \times 10^{-6}$  m,  $W_A = 132 \times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$P_A / P_B$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}_S$ ( $10^{-9}$ Kg / s)
65483	5489	60	11.93	227.9	18.95	1.481
49785	4789	45	10.40	173.34	16.53	0.8770
34175	4171	30	8.193	119	14.40	0.4307

**Πίνακας 2.5:** Μαζικές παροχές για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A / P_B$  για ροή σε αγωγό σταθερής διατομής. ( $H_A=9 \times 10^{-6}$  m,  $W_A = 2.2 \times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$P_A / P_B$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}_S$ ( $10^{-12}$ Kg / s)
65483	5489	60	11.93	47.83	3.976	1.689
49785	4789	45	10.40	36.36	3.469	1.064
34175	4171	30	8.193	24.96	3.021	0.5779

**Πίνακας 2.6:** Σύγκριση μαζικής παροχής σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A/P_B$ , εφαρμόζοντας διαφορετικές μεθοδολογίες. ( $W_B/W_A=60$ ,  $H_A=9\times 10^{-6}$  m,  $W_A=2.2\times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}_{kinetic}$ ( $10^{-10}$ Kg / s)	$\dot{M}_{OpenFOAM}$ ( $10^{-10}$ Kg / s)	$\dot{M}_{Stokes}$ ( $10^{-10}$ Kg / s)
65483	5489	60	47.83	19.11	1.096	0.9921	0.9786
66752	6713	60	48.75	23.37	1.123	1.028	1.014
71372	10996	60	52.13	38.28	1.246	1.159	1.143
80716	20443	60	58.95	71.16	1.491	1.421	1.401
150274	89817	60	109.8	312.6	3.289	3.386	3.336
40733	10321	30	29.75	35.93	0.4270	0.3617	0.3568
50277	19993	30	36.72	69.59	0.5516	0.4958	0.4891
49785	4789	45	36.36	16.67	0.6596	0.5721	0.5644
51239	6184	45	37.42	21.53	0.6888	0.6028	0.5946
56016	10622	45	40.91	36.97	0.7859	0.7045	0.6952
65469	20194	45	47.82	70.29	0.9719	0.9037	0.8914
135231	89726	45	98.77	312.3	2.325	2.387	2.3523

**Πίνακας 2.7:** Σύγκριση μαζικών παροχών σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A/P_B$ , εφαρμόζοντας διαφορετικές μεθοδολογίες. ( $W_B/W_A = 1/60$ ,  $H_A = 9 \times 10^{-6}$  m,  $W_A = 132 \times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}_{kinetic}$ ( $10^{-10}$ Kg / s)	$\dot{M}_{OpenFOAM}$ ( $10^{-10}$ Kg / s)	$\dot{M}_{Stokes}$ ( $10^{-10}$ Kg / s)
65533	5553	60	228.1	4.056	1.249	0.9917	0.9799
66834	6774	60	232.6	4.948	1.284	1.016	1.016
71172	11098	60	247.7	8.106	1.400	1.140	1.136
80741	20776	60	281.1	15.17	1.656	1.410	1.399
150325	90166	60	523.3	65.86	3.571	3.353	3.325
40484	10435	30	140.9	7.622	0.4779	0.3549	0.3517
50326	20332	30	175.2	14.85	0.6100	0.4920	0.4871
49809	4818	45	173.4	3.519	0.7639	0.5647	0.5649
51286	6208	45	178.5	4.534	0.7937	0.5968	0.5957
55757	10734	45	194.1	7.840	0.8823	0.6926	0.6880
65520	20539	45	228.1	15.00	1.079	0.8979	0.8897
135263	90065	45	470.8	65.78	2.524	2.362	2.341

**Πίνακας 2.8:** Μαζικές παροχές σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας  $\omega$  και για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A/P_B$ . ( $H_A=9\times 10^{-6}$  m,  $W_B=132\times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$P_A / P_B$	$\omega$ (°)	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}$ ( $10^{-11}$ Kg / s)
91691	89677	2	1.022	0	316.6	309.61	11.79
91691	89677	2	1.022	0.05	311.6	309.61	10.52
91691	89677	2	1.022	0.1	303.8	309.61	9.131
91691	89677	2	1.022	0.15	289.4	309.61	7.541
91691	89677	2	1.022	0.2	254.3	309.61	5.551
91691	89677	2	1.022	0.25	36.67	309.61	0.3297
71109	11098	60	6.407	0	247.5	38.32	169.5
71109	11098	60	6.407	0.05	243.7	38.32	151.3
71109	11098	60	6.407	0.1	237.6	38.32	131.3
71109	11098	60	6.407	0.15	226.3	38.32	108.4
71109	11098	60	6.407	0.2	198.8	38.32	79.84
71109	11098	60	6.407	0.25	28.69	38.32	5.122
49809	4818	45	10.34	0	173.4	16.63	87.76
49809	4818	45	10.34	0.05	170.7	16.63	78.32
49809	4818	45	10.34	0.1	166.4	16.63	67.98
49809	4818	45	10.34	0.15	158.5	16.63	56.16
49809	4818	45	10.34	0.2	139.3	16.63	41.35
49809	4818	45	10.34	0.25	20.10	16.63	2.856

**Πίνακας 2.9:** Μαζικές παροχές σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας  $\omega$  και για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A/P_B$ . ( $H_A=9\times 10^{-6}$  m,  $W_A=132\times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$P_A/P_B$	$\omega$ (°)	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}$ ( $10^{-11}$ Kg/s)
91691	89677	2	1.022	0	319.2	309.6	11.79
91691	89677	2	1.022	0.05	319.2	304.8	10.52
91691	89677	2	1.022	0.1	319.2	297.14	9.131
91691	89677	2	1.022	0.15	319.2	283.1	7.542
91691	89677	2	1.022	0.2	319.2	248.7	5.552
91691	89677	2	1.022	0.25	319.2	35.89	0.3299
71109	11098	60	6.407	0	247.5	38.32	169.5
71109	11098	60	6.407	0.05	247.5	37.72	151.3
71109	11098	60	6.407	0.1	247.5	36.77	131.3
71109	11098	60	6.407	0.15	247.5	35.03	108.5
71109	11098	60	6.407	0.2	247.5	30.78	79.88
71109	11098	60	6.407	0.25	247.5	4.442	5.649
49809	4818	45	10.34	0	173.4	16.63	87.76
49809	4818	45	10.34	0.05	173.4	16.38	78.33
49809	4818	45	10.34	0.1	173.4	15.96	67.99
49809	4818	45	10.34	0.15	173.4	15.21	56.18
49809	4818	45	10.34	0.2	173.4	13.36	41.38
49809	4818	45	10.34	0.25	173.4	1.928	3.283

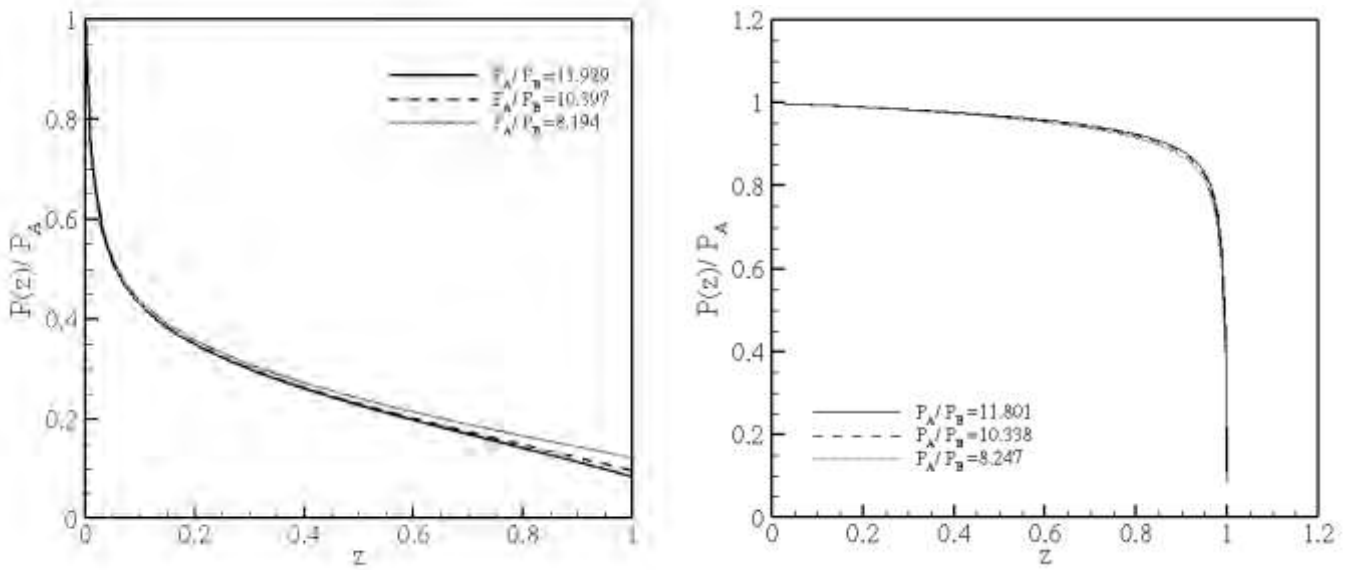
**Πίνακας 2.10:** Μαζικές παροχές σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A/P_B$ .  
 ( $W_B/W_A=114.8$ ,  $H_A=6.88 \times 10^{-6}$  m,  $W_A=1.15 \times 10^{-6}$  m)

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$P_A/P_B$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}_E$ , [18] ( $10^{-9}$ Kg/s)	$\dot{M}_S$ ( $10^{-9}$ Kg/s)
65483	5489	60	11.93	26.66	14.71	6.758	12.52
66752	6713	60	9.944	27.17	17.99	6.982	12.87
71372	10996	60	6.49	29.05	29.46	7.648	14.18
80716	20443	60	3.948	32.86	54.78	9.108	16.75
150274	89817	60	1.673	61.17	240.7	18.58	35.44
34175	4171	30	8.194	13.91	11.18	1.963	4.176
35812	574	30	6.239	14.58	15.38	2.153	4.415
40733	10321	30	3.947	16.58	27.66	2.502	5.143
50277	19993	30	2.515	20.47	53.57	3.273	6.459
119929	89644	30	1.338	48.82	240.2	8.204	15.80
49785	4789	45	10.40	20.27	12.83	4.072	7.808
51239	6184	45	8.286	20.86	16.57	4.286	8.119
56016	10622	45	5.274	22.80	28.46	4.810	9.152
65469	20194	45	3.242	26.65	54.11	5.943	11.10
135231	89726	45	1.507	55.05	240.42	13.30	25.21

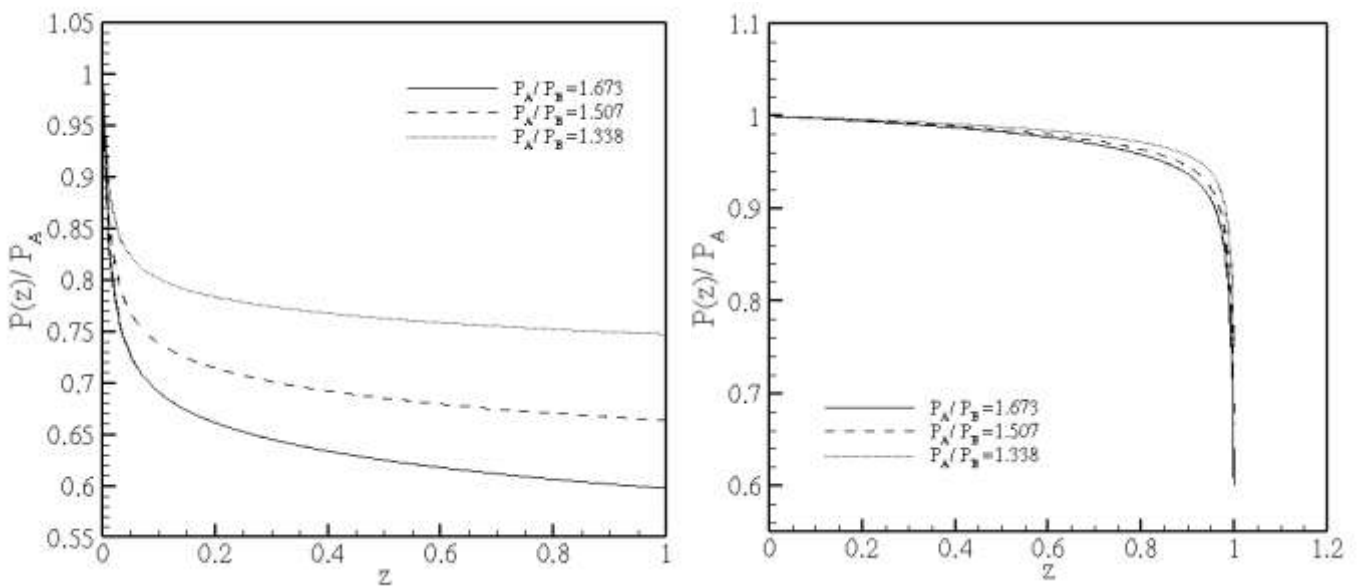
**Πίνακας 2.11:** Μαζικές παροχές σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A/P_B$ . ( $W_B/W_A=0.008712$ ,  $H_A=6.88 \times 10^{-6}$  m,  $W_A=132 \times 10^{-6}$  m).

$P_A$ (Pa)	$P_B$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$P_A/P_B$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\dot{M}_{E,[18]}$ ( $10^{-9}$ Kg/s)	$\dot{M}_S$ ( $10^{-9}$ Kg/s)
65533	5553	60	11.80	177.0	2.242	7.403	14.10
66834	6774	60	9.867	180.6	2.735	7.509	14.42
71172	11098	60	6.407	192.3	4.481	8.108	15.48
80741	20776	60	3.886	218.1	8.388	9.578	17.85
150325	90166	60	1.667	406.1	36.40	18.83	35.83
34142	414	30	8.247	92.24	1.671	2.270	4.807
35809	5717	30	6.263	96.74	2.308	2.378	5.017
40484	10435	30	3.88	109.4	4.213	2.638	5.586
50326	20332	30	2.475	136.0	8.209	3.450	6.815
119963	8998	30	1.333	324.1	36.33	8.305	15.80
49809	4818	45	10.338	134.6	1.945	4.558	8.905
51286	6208	45	8.261	138.6	2.506	4.673	9.181
55757	10734	45	5.194	150.6	4.334	5.110	9.992
6552	20539	45	3.19	177.0	8.292	6.264	11.82
135263	90065	45	1.502	365.4	36.36	13.55	25.39

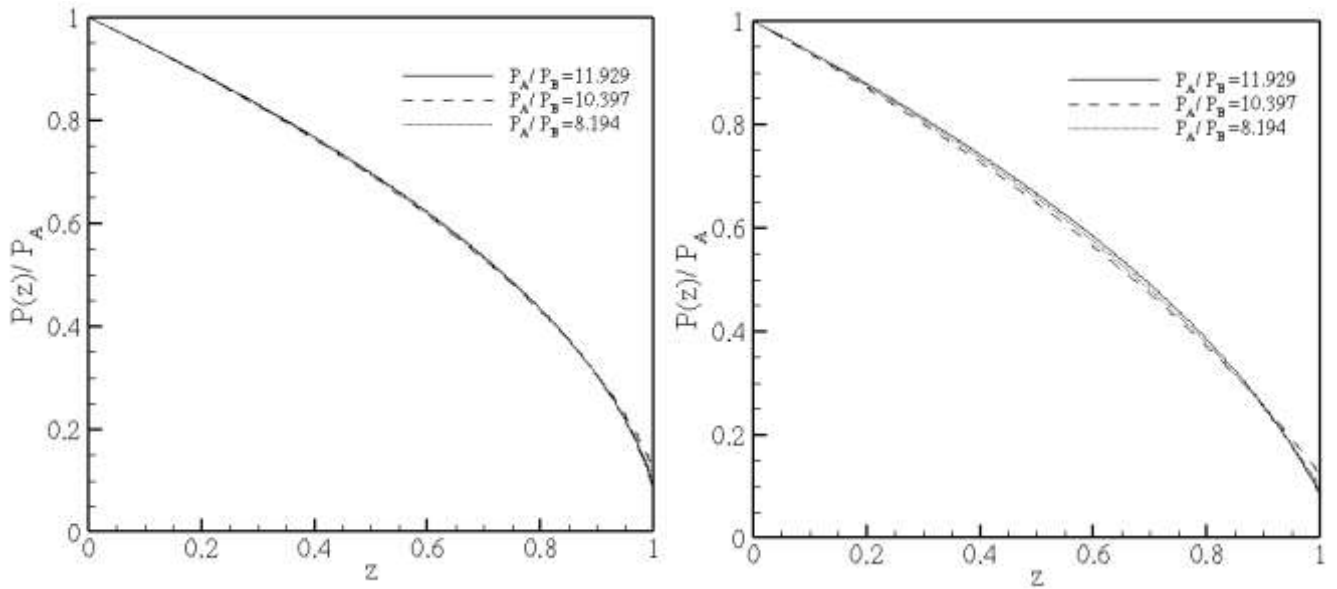




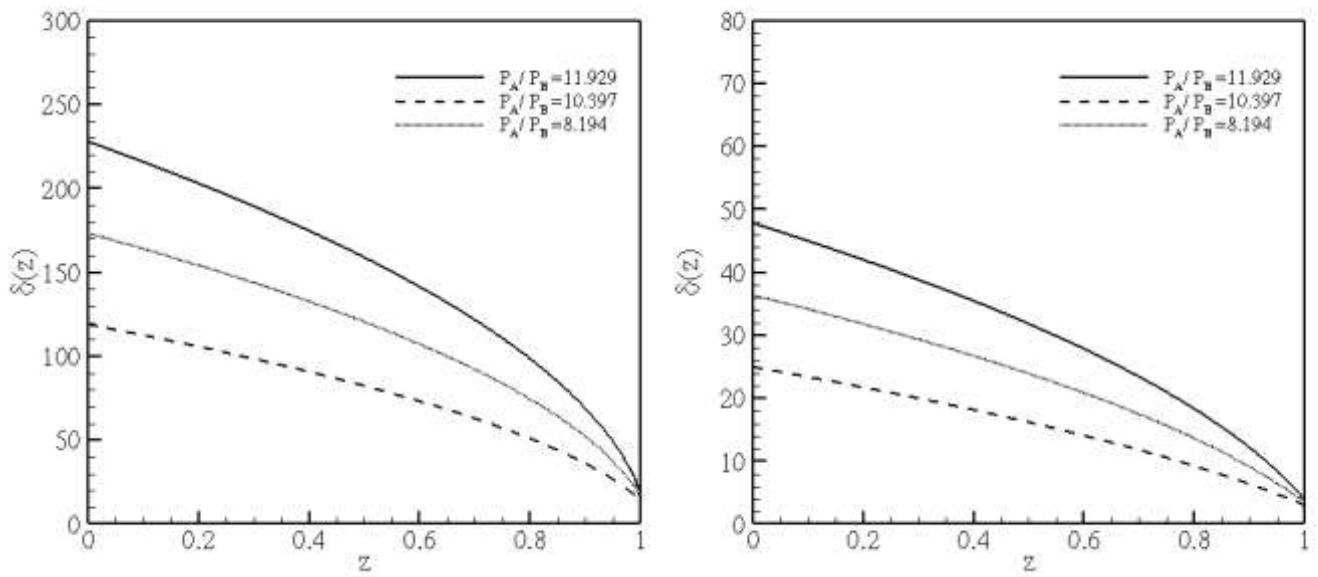
**Σχήμα 2.4:** Κατανομή πίεσης κατά μήκος του αγωγού για υψηλούς λόγους πίεσης σε αποκλίνοντα με  $W_B/W_A = 60$ ,  $H_A = 9 \times 10^{-6}$  m,  $W_A = 2.2 \times 10^{-6}$  m (αριστερά) και συγκλίνοντα με  $W_B/W_A = 1/60$ ,  $H_A = 9 \times 10^{-6}$  m,  $W_A = 132 \times 10^{-6}$  m (δεξιά) αγωγό.



**Σχήμα 2.5:** Κατανομή πίεσης κατά μήκος του αγωγού για μικρούς λόγους πίεσης σε αποκλίνοντα με  $W_B/W_A = 60$ ,  $H_A = 9 \times 10^{-6}$  m,  $W_A = 2.2 \times 10^{-6}$  m (αριστερά) και συγκλίνοντα με  $W_B/W_A = 1/60$ ,  $H_A = 9 \times 10^{-6}$  m,  $W_A = 132 \times 10^{-6}$  m (δεξιά) αγωγό.



**Σχήμα 2.6:** Αδιάστατη κατανομή πίεσης κατά μήκος αγωγού σταθερής διατομής με  $W = 132 \times 10^{-6}$  m (αριστερά) και για  $W = 2.2 \times 10^{-6}$  m (δεξιά).



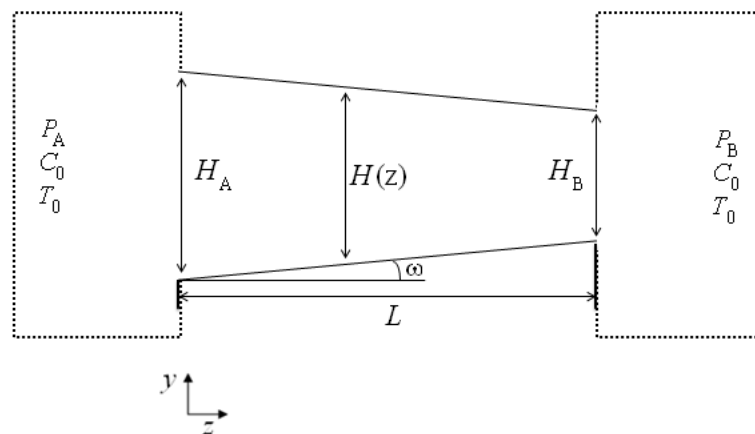
**Σχήμα 2.7:** Κατανομή της παραμέτρου αραιοποίησης  $\delta(z)$  κατά μήκος αγωγού για σταθερή διατομή με  $W = 132 \times 10^{-6}$  m (αριστερά) και για  $W = 2.2 \times 10^{-6}$  m (δεξιά).



## Κεφάλαιο 3 Ροή μίγματος αερίων μεταξύ πλακών μεταβλητής απόστασης

### 3.1 Περιγραφή προβλήματος

Οι εσωτερικές αραιοποιημένες ροές των μονοατομικών αερίων μιγμάτων παρουσιάζουν έντονο ενδιαφέρον και συναντώνται σε ένα πλήθος εφαρμογών του κλάδου της φυσικής και της μηχανικής. Στο παρόν κεφάλαιο μελετώνται οι ροές μονοατομικών αερίων διαμέσου δυο πλακών μήκους  $L$ . Οι πλάκες συνδέουν δυο δοχεία τα οποία περιέχουν ένα μείγμα μονοατομικών αερίων σε θερμοκρασία αναφοράς  $T_0$  και συγκέντρωση αναφοράς  $C_0 = C_A = C_B$ . Οι πλάκες και τα δυο δοχεία απεικονίζονται στο Σχ. 3.1. Το αριστερό και το δεξί δοχείο διατηρούνται σε πιέσεις  $P_A$  και  $P_B$  αντίστοιχα με  $P_A > P_B$ . Η απόσταση των δύο πλακών  $H$  μεταβάλλεται γραμμικά στην κατεύθυνση της ροής  $z$ , λαμβάνοντας τις δύο ακραίες τιμές στην είσοδο  $H_A$  και στην έξοδο  $H_B$  αντίστοιχα ( $H_A \leq H(z) \leq H_B$ ).



Σχήμα 3.1: Γεωμετρικά χαρακτηριστικά του καναλιού.

Η γωνία  $\omega$  η οποία εικονίζεται στο Σχ. 3.1 υπολογίζεται από τη σχέση

$$\tan \omega = \frac{H_A - H_B}{2L} \quad (3.1)$$

Η περίπτωση όπου  $\omega = 0^\circ$  αντιπροσωπεύει τη ροή διαμέσου παράλληλων πλακών. Το μήκος  $L$  θεωρείται πολύ μεγάλο σε σχέση με την απόσταση  $H$  των δυο πλακών ( $H \ll L$ ). Στην περίπτωση αυτή μπορεί να εφαρμοστεί και η γραμμική προσέγγιση της λύσης. Η προσομοίωση βασίζεται σε δυο στάδια.

Στο πρώτο στάδιο υπολογίζονται οι τοπικές ιδιότητες επιλύοντας σε διάφορες διατομές κατά μήκος της ροής. Το κινητικό μοντέλο McCormack [8] χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με τη μέθοδο διακριτών ταχυτήτων (DVM). Στο δεύτερο στάδιο, βασιζόμενοι στις τοπικές ιδιότητες του ρευστού που έχουν υπολογιστεί στο προηγούμενο βήμα, υπολογίζονται οι γραμμομοριακές παροχές και οι κατανομές των μακροσκοπικών ποσοτήτων (πίεση, συγκέντρωση). Τα δυο συστατικά του αέριου μίγματος έχουν διαφορετικές ταχύτητες κατά την διέλευση τους μέσα από τις πλάκες, γεγονός που δημιουργεί μια κατανομή συγκέντρωσης κατά μήκος των πλακών. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται φαινόμενο διαχωρισμού και η σημασία του είναι έντονη ακόμα και όταν η ροή του ρευστού οφείλεται αποκλειστικά σε διαφορά πίεσης [13].

### 3.2 Κινητικό μοντέλο McCormack

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται ο υπολογισμός των τοπικών μακροσκοπικών ποσοτήτων του ρευστού, βασιζόμενος στην υπόθεση της γραμμικότητας. Οι τοπικές κλίσεις πίεσης και συγκέντρωσης ορίζονται ως

$$X_P = \frac{H(z)}{P(z)} \frac{dP}{dz} \ll 1, \quad X_C = \frac{H(z)}{C(z)} \frac{dC}{dz} \ll 1 \quad (3.2)$$

Η κλίση της πίεσης ωθεί και τα δυο συστατικά προς την ίδια κατεύθυνση, ενώ η κλίση της συγκέντρωσης στην αντίθετη κατεύθυνση. Με βάση την υπόθεση της γραμμικότητας αυτές οι κλίσεις ορίζονται ως ποσότητες πολύ μικρότερες από τη μονάδα. Το γραμμομοριακό κλάσμα του μίγματος ορίζεται ως

$$C(z) = \frac{n_1(z)}{n_1(z) + n_2(z)}$$

όπου με  $n_1, n_2$  ορίζεται η αριθμητική πυκνότητα από το ελαφρύ και το βαρύ συστατικό του μίγματος αντίστοιχα. Μια βασική παράμετρος του προβλήματος είναι η τοπική παράμετρος αραιοποίησης  $\delta(z)$  και ισούται με

$$\delta(z) = \frac{H(z) P(z)}{\mu(C)} \sqrt{\frac{m(C)}{2k_B T_0}} \quad (3.3)$$

όπου με  $\mu$  συμβολίζεται το ιξώδες του μίγματος στη θερμοκρασία αναφοράς  $T_0$ ,  $k_B = 1.3807 \times 10^{-23}$  J/K είναι η σταθερά του Boltzmann και  $P(z) = n(z) k_B T_0$  είναι η πίεση κατά μήκος των δυο πλακών. Επιπλέον, η μάζα του μίγματος δίνεται από

$$m(C) = C(z)m_1 + [1 - C(z)]m_2 \quad (3.4)$$

όπου  $m_1, m_2$  οι μοριακές μάζες από το ελαφρύ και το βαρύ συστατικό αντίστοιχα.

Το μικρό μέγεθος των εξωτερικών δυνάμεων που προκαλούν την ροή, επιτρέπουν τη χρήση της γραμμικοποιημένης εξίσωσης του Boltzmann, με τον όρο των συγκρούσεων να είναι το κινητικό μοντέλο McCormack. Για το κάθε συστατικό του μίγματος ορίζεται μια συνάρτηση κατανομής και αντίστοιχα μια κατανομή ισορροπίας. Επειδή το σύστημα βρίσκεται κοντά στην ισορροπία η συνάρτηση κατανομής του κάθε συστατικού γραμματικοποιείται σύμφωνα με

$$f_\alpha(y, z, c_\alpha) = f_\alpha^{(0)}(z, c_\alpha) [1 + h(y, c_\alpha)], \quad |h| \ll 1 \quad (3.5)$$

με

$$f_\alpha^{(0)}(z, c_\alpha) = n_\alpha^0(z) \left[ \frac{m_\alpha}{2\pi k_B T_0} \right]^{3/2} \exp \left[ -\frac{m_\alpha \xi_\alpha^2}{2 k_B T_0} \right], \quad \alpha = 1, 2 \quad (3.6)$$

όπου  $h(y, c_\alpha)$  είναι η συνάρτηση κατανομής, η οποία εκφράζει την απόκλιση της κατανομής  $f$  από την κατανομή ισορροπίας  $f^{(0)}$  και με  $\xi_\alpha, c_\alpha$  συμβολίζονται η διαστατή και η αδιάστατη μοριακή ταχύτητα του κάθε συστατικού αντίστοιχα.

Η αδιαστατοποίηση των μεγεθών μήκους γίνεται ως προς την απόσταση των δυο πλακών, ενώ η μακροσκοπικές ταχύτητες και οι μοριακές ταχύτητες του κάθε συστατικού

αδιαστατοποιούνται ως προς της χαρακτηριστική ταχύτητα του μίγματος και την χαρακτηριστική ταχύτητα του κάθε συστατικού αντίστοιχα. Επομένως ισχύει:

$$\tilde{u}_\alpha(y) = \frac{u_\alpha(y)\sqrt{m}}{\sqrt{2k_B T_0}}, \quad c_\alpha = \frac{\xi_\alpha \sqrt{m_\alpha}}{\sqrt{2k_B T_0}}, \quad \tilde{y} = \frac{y}{H(z)}, \quad \alpha = 1, 2 \quad (3.7)$$

Έτσι το σύστημα των δύο διαφορικών εξισώσεων έχει την μορφή

$$\begin{aligned} c_{1y} \frac{\partial h_1}{\partial y} &= \delta \left[ \frac{C}{\gamma_1} + \frac{1-C}{\gamma_2} \right] \frac{\sqrt{m_1}}{\sqrt{m}} (L_{11}h_1 + L_{12}h_1) - c_{1z} (X_P + \eta_1 X_C) \\ c_{2y} \frac{\partial h_2}{\partial y} &= \delta \left[ \frac{C}{\gamma_1} + \frac{1-C}{\gamma_2} \right] \frac{\sqrt{m_1}}{\sqrt{m}} (L_{21}h_2 + L_{22}h_2) - c_{2z} (X_P + \eta_2 X_C) \end{aligned} \quad (3.8)$$

όπου

$$\eta_1 = 1, \quad \eta_2 = -\frac{C_A}{1-C_A} \quad (3.9)$$

όπου  $\gamma_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2$ ) είναι οι συχνότητες των συγκρούσεων. Οι όροι των συγκρούσεων  $L_{11}h_1, L_{12}h_1, L_{21}h_2$  και  $L_{22}h_2$  αντικαθίστανται από το μοντέλο McCormack [8], όπου στην εξεταζόμενη περίπτωση διαμορφώνονται ως

$$\begin{aligned} L_{11}h_1 &= -\gamma_{11}h_1 + 2\sqrt{\frac{m_1}{m}} (\gamma_{11}\tilde{u}_1) c_{1z} + 4 \left[ (\gamma_{11} - v_{11}^{(3)})\Pi_1 - v_{11}^{(4)}\Pi_1 \right] c_{1z}c_{1y} \\ &\quad + \frac{4}{5}\sqrt{\frac{m_1}{m}} \left[ (\gamma_{11} - v_{11}^{(5)})q_1 + v_{11}^{(6)}q_1 \right] c_{1z} \left( c_1^2 - \frac{5}{2} \right), \\ L_{12}h_1 &= -\gamma_{12}h_1 + 2\sqrt{\frac{m_1}{m}} \left[ \gamma_{12}\tilde{u}_1 - v_{12}^{(1)} (\tilde{u}_1 - \tilde{u}_2) - \frac{1}{2}v_{12}^{(2)} \left( q_1 - \frac{m_1}{m_2}q_2 \right) \right] c_{1z} \\ &\quad + 4 \left[ (\gamma_{12} - v_{12}^{(3)})\Pi_1 - v_{12}^{(4)}\Pi_2 \right] c_{1z}c_{1y} + \frac{4}{5}\sqrt{\frac{m_1}{m}} \left[ (\gamma_{12} - v_{12}^{(5)})q_1 \right. \\ &\quad \left. + v_{12}^{(6)}\sqrt{\frac{m_2}{m_1}}q_2 - \frac{5}{4}v_{12}^{(2)} (\tilde{u}_1 - \tilde{u}_2) \right] c_{1z} \left( c_1^2 - \frac{5}{2} \right), \\ L_{22}h_2 &= -\gamma_{22}h_2 + 2\sqrt{\frac{m_2}{m}} (\gamma_{22}\tilde{u}_2) c_{2z} + 4 \left[ (\gamma_{22} - v_{22}^{(3)})\Pi_2 - v_{22}^{(4)}\Pi_2 \right] c_{2z}c_{2y} \\ &\quad + \frac{4}{5}\sqrt{\frac{m_2}{m}} \left[ (\gamma_{22} - v_{22}^{(5)})q_2 + v_{22}^{(6)}q_2 \right] c_{2z} \left( c_2^2 - \frac{5}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned}
L_{21}h_2 = & -\gamma_{21}h_2 + 2\sqrt{\frac{m_2}{m}} \left[ \gamma_{21}\tilde{u}_2 - v_{21}^{(1)}(\tilde{u}_2 - \tilde{u}_1) - \frac{1}{2}v_{21}^{(2)} \left( q_2 - \frac{m_2}{m_1}q_1 \right) \right] c_{2z} \\
& + 4 \left[ (\gamma_{21} - v_{21}^{(3)})\Pi_2 - v_{21}^{(4)}\Pi_1 \right] c_{2z}c_{2y} + \frac{4}{5}\sqrt{\frac{m_2}{m}} \left[ (\gamma_{21} - v_{21}^{(5)})q_2 \right. \\
& \left. + v_{21}^{(6)}\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}q_1 - \frac{5}{4}v_{21}^{(2)}(\tilde{u}_2 - \tilde{u}_1) \right] c_{2z} \left( c_2^2 - \frac{5}{2} \right)
\end{aligned}$$

όπου  $q_\alpha, \Pi_\alpha$  με  $\alpha=1, 2$  συμβολίζεται η αδιάστατη θερμοροή και η αδιάστατη πίεση του κάθε συστατικού. Σημειώνεται ότι με (1) συμβολίζεται το ελαφρύ συστατικό και με (2) το βαρύ συστατικό. Επίσης, οι ποσότητες  $\gamma_{\alpha\beta}, v_{\alpha\beta}$  με  $\alpha, \beta=1, 2$  υπολογίζονται με βάση τα ολοκληρώματα Charman - Cowling  $\Omega_{\alpha\beta}^{ij}$  ως εξής

$$\begin{aligned}
v_{\alpha\beta}^{(1)} &= \frac{16}{3} \frac{m^*}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha\beta}^{11} \\
v_{\alpha\beta}^{(2)} &= \frac{64}{15} \left( \frac{m^*}{m_\alpha} \right)^2 n_\beta \left( \Omega_{\alpha\beta}^{12} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{11} \right) \\
v_{\alpha\beta}^{(3)} &= \frac{16}{5} \frac{(m^*)^2}{m_\alpha m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{22} \right) \\
v_{\alpha\beta}^{(4)} &= \frac{16}{5} \frac{(m^*)^2}{m_\alpha m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{11} - \Omega_{\alpha\beta}^{22} \right) \\
v_{\alpha\beta}^{(5)} &= \frac{64}{15} \left( \frac{m^*}{m_\alpha} \right)^3 \left( \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right) n_\beta \left[ \Omega_{\alpha\beta}^{22} + \left( \frac{15m_\alpha}{4m_\beta} + \frac{25}{8} \frac{m_\beta}{m_\alpha} \right) \Omega_{\alpha\beta}^{11} \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \frac{m_\beta}{m_\alpha} \left( 5\Omega_{\alpha\beta}^{12} - \Omega_{\alpha\beta}^{13} \right) \\
v_{\alpha\beta}^{(6)} &= \frac{64}{15} \left( \frac{m^*}{m_\alpha} \right)^3 \left( \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \left( -\Omega_{\alpha\beta}^{22} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha\beta}^{11} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{12} - \frac{1}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{13} \right)
\end{aligned}$$

Τα ολοκληρώματα Charman - Cowling  $\Omega_{\alpha\beta}^{ij}$  υπολογίζονται με προκαθορισμένο το μοντέλο των ενδομοριακών συγκρούσεων. Στη παρούσα εργασία τα ολοκληρώματα Charman - Cowling έχουν υπολογιστεί με βάση το μοντέλο του πραγματικού δυναμικού (realistic



potential) το οποίο βασίζεται σε πειραματικά δεδομένα [21]. Η ποσότητα  $m^*$  υπολογίζεται σε σχέση με της μάζες των δύο συστατικών ως

$$m^* = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \quad (3.11)$$

Οι συχνότητες σύγκρουσης  $\gamma_\alpha = \gamma_{\alpha\alpha} + \gamma_{\alpha\beta}$  υπολογίζονται από

$$\gamma_\alpha = \frac{s_\alpha s_\beta - v_{\alpha\beta}^{(4)} v_{\beta\alpha}^{(4)}}{s_\beta + v_{\alpha\beta}^{(4)}} \quad (3.12)$$

όπου  $s_\alpha = v_{\alpha\alpha}^{(3)} - v_{\alpha\alpha}^{(4)} + v_{\alpha\beta}^{(3)}$ . Με ορισμένες όλες τις παραμέτρους του μοντέλου McCormack οι αδιάστατες μακροσκοπικές ποσότητες υπολογίζονται από

$$\begin{aligned} \tilde{u}_\alpha(y) &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int c_{\alpha z} h_\alpha e^{-c_\alpha^2} dc_\alpha \\ \Pi_\alpha(y) &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_{\alpha z} c_{\alpha y} h_\alpha e^{-c_\alpha^2} dc_\alpha \\ q_\alpha(y) &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_{\alpha z} \left( c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) h_\alpha e^{-c_\alpha^2} dc_\alpha \end{aligned} \quad (3.13)$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες (3.13) με τις διαφορικές εξισώσεις (3.8) επιλύονται αριθμητικά θεωρώντας οριακές συνθήκες διαχυτικής–κατοπτρικής ανάκλασης, όπου ένα ποσοστό των σωματιδίων απομακρύνεται από το τοίχωμα με βάση την κατανομή των σωματιδίων που προσπίπτουν σε αυτό. Οι οριακές συνθήκες διατυπώνονται για το κάθε συστατικό ως

$$h_\alpha^+ = (1-a) h_\alpha^-, \quad \alpha = 1, 2 \quad (3.14)$$

όπου  $0 < a < 1$  είναι ο συντελεστής διαχυτικής ανάκλασης, ενώ με (+) και (-) συμβολίζονται οι κατανομές των σωματιδίων που αναχωρούν και προσπίπτουν στο τοίχωμα αντίστοιχα.

Εφόσον οι εξισώσεις (3.8) είναι γραμμικές μπορεί να γίνει ο διαχωρισμός της λύσης ως

$$h_\alpha = h_\alpha^P X_P + h_\alpha^C X_C, \quad \alpha = 1, 2 \quad (3.15)$$

και επομένως οι μακροσκοπικές ποσότητες μπορούν να γραφούν ως

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_\alpha &= \tilde{u}_\alpha^P X_P + \tilde{u}_\alpha^C X_C \\
q_\alpha &= q_\alpha^P X_P + q_\alpha^C X_C \\
\Pi_\alpha &= \Pi_\alpha^P X_P + \Pi_\alpha^C X_C
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Από την ολοκλήρωση της αδιάστατης ταχύτητας προκύπτουν οι ανοιγμένες παροχές μάζας

$$\begin{aligned}
G_\alpha^P &= -2 \int_{-1/2}^{1/2} \tilde{u}_\alpha^P(\tilde{y}) d\tilde{y} \\
G_\alpha^C &= -2 \int_{-1/2}^{1/2} \tilde{u}_\alpha^C(\tilde{y}) d\tilde{y}
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Οι θερμοδυναμικές παροχές [22], οι οποίες σχετίζονται με τις τοπικές κλίσεις της πίεσης και της συγκέντρωσης ορίζονται ως

$$\begin{aligned}
J_P &= -(n_1 + n_2) \int_{-H/2}^{H/2} \frac{n_1 u_1 + n_2 u_2}{n_1 + n_2} dy \\
J_C &= -n_1 \int_{-H/2}^{H/2} (u_1 - u_2) dy
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Επιπλέον, σημειώνεται ότι οι θερμοδυναμικές παροχές συνδέονται με τις τοπικές κλίσεις [x] ως

$$\begin{aligned}
J_P &= \frac{n H \sqrt{2 k_B T_0}}{2 \sqrt{m(C)}} [A_{PP} X_P + A_{PC} X_C] \\
J_C &= \frac{n H \sqrt{2 k_B T_0}}{2 \sqrt{m(C)}} [A_{CP} X_P + A_{CC} X_C]
\end{aligned} \tag{3.19}$$

όπου  $A_{PP}, A_{PC}, A_{CP}$  και  $A_{CC}$ , με  $A_{PC} = A_{CP}$  μέσα από της σχέσεις ισοδυναμίας Onsager - Casimir, είναι οι αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές [22]. Οι κινητικοί συντελεστές υπολογίζονται με βάση τις σχέσεις (3.18) σύμφωνα με τις ακόλουθες σχέσεις

$$A_{PP} = C G_1^P + (1 - C) G_2^P, \quad A_{CP} = C(G_1^P - G_2^P) \tag{3.20}$$

για ροή λόγω διαφοράς πίεσης και

$$A_{PC} = CG_1^C + (1-C)G_2^C, \quad A_{CC} = C(G_1^C - G_2^C) \quad (3.21)$$

για ροή που οφείλεται σε διαφορά συγκέντρωσης.

Συνοψίζοντας, οι κινητικοί συντελεστές υπολογίζονται για εύρος των παραμέτρων  $\delta$ ,  $C$  και για ένα συγκεκριμένο μίγμα μονοατομικών αερίων δημιουργώντας κατάλληλες βάσεις δεδομένων. Όπως θα περιγραφεί στην Παράγραφο 3.3 οι βάσεις δεδομένων χρησιμοποιούνται στον υπολογισμό των γραμμομοριακών παροχών των δύο συστατικών καθώς και στην γραμμομοριακή παροχή του μίγματος.

### 3.3 Εξισώσεις κατανομής πίεσης και συγκέντρωσης

Στόχος της συγκεκριμένης παραγράφου είναι ο υπολογισμός της γραμμομοριακής παροχής ολόκληρου του αέριου μίγματος καθώς και του κάθε συστατικού ξεχωριστά. Επίσης, όπως θα φανεί στη συνέχεια, η συγκεκριμένη μεθοδολογία επιτρέπει τον υπολογισμό της κατανομής πίεσης και συγκέντρωσης κατά μήκος των δύο πλακών στις οποίες, όπως έχει ήδη περιγραφεί στην Παράγραφο 3.1, υπάρχει ροή που οφείλεται αποκλειστικά σε διαφορά πίεσης.

Η γραμμομοριακή παροχή του μίγματος ορίζεται ως

$$J = J_1 + J_2 \quad (3.22)$$

όπου  $J_1$  και  $J_2$  είναι οι γραμμομοριακές παροχές από το ελαφρύ και το βαρύ συστατικό αντίστοιχα. Οι γραμμομοριακές παροχές των επιμέρους συστατικών του μίγματος υπολογίζονται από τα ολοκληρώματα

$$J_1 = n_1 \int_{-H/2}^{H/2} u_1(y) dy \quad (3.23)$$

$$J_2 = n_2 \int_{-H/2}^{H/2} u_2(y) dy$$

Από τις σχέσεις (3.23), (3.18) και (3.19) προκύπτει ότι

$$J_1 = -CJ_P - (1-C)J_C$$

$$J_2 = -(1-C)(J_P - J_C) \quad (3.24)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (3.19) και (3.24) προκύπτει το ακόλουθο σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων

$$J_1 = -\frac{n H^2 \sqrt{2 k_B T_0}}{2 \sqrt{m(C)}} \left\{ [C A_{PP} + (1-C) A_{CP}] \frac{1}{P} \frac{dP}{dz} + [C A_{PC} + (1-C) A_{CC}] \frac{1}{C} \frac{dC}{dz} \right\}$$

$$J_2 = -(1-C) \frac{n H^2 \sqrt{2 k_B T_0}}{2 \sqrt{m(C)}} \left\{ [A_{PP} - A_{CP}] \frac{1}{P} \frac{dP}{dz} + [C A_{PC} - A_{CC}] \frac{1}{C} \frac{dC}{dz} \right\}$$
(3.25)

Εισάγοντας την ακόλουθη αδιαστατοποίηση στην (3.25)

$$\tilde{J}_i = -\frac{2 L \sqrt{2 k_B T_0} J_i}{n_A H_A^2 2 \sqrt{m(C_0)}}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{L}$$
(3.26)

όπου  $i = 1, 2$ , τελικά προκύπτει

$$\frac{dP}{d\tilde{z}} = \frac{\sqrt{m(C)}}{\sqrt{m(C_0)}} \left( \frac{P_A}{C(\tilde{z})-1} \right) \left( \frac{H_A}{H(\tilde{z})} \right)^2 \left\{ \frac{(C(\tilde{z})-1)(\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2) \Lambda_{CC}(\tilde{z}) + [(1-C(\tilde{z}))\tilde{J}_1 - C(\tilde{z})\tilde{J}_2] \Lambda_{CP}(\tilde{z})}{\Lambda_{CP}^2(\tilde{z}) - \Lambda_{CC}(\tilde{z}) \Lambda_{PP}(\tilde{z})} \right\}$$
(3.27)

$$\frac{dC}{d\tilde{z}} = \frac{P_A}{P(\tilde{z})} \frac{\sqrt{m(C)}}{\sqrt{m(C_0)}} \left( \frac{C(\tilde{z})}{C(\tilde{z})-1} \right) \left( \frac{H_A}{H(\tilde{z})} \right)^2 \left\{ \frac{(1-C(\tilde{z}))(\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2) \Lambda_{CP}(\tilde{z}) + [(C(\tilde{z})-1)\tilde{J}_1 - C(\tilde{z})\tilde{J}_2] \Lambda_{PP}(\tilde{z})}{\Lambda_{CP}^2(\tilde{z}) - \Lambda_{CC}(\tilde{z}) \Lambda_{PP}(\tilde{z})} \right\}$$

όπου  $0 \leq \tilde{z} \leq 1$ . Οι ποσότητες  $\tilde{J}_1, \tilde{J}_2$  είναι σταθερές κατά μήκος των δύο πλακών.

Το σύστημα (3.27) μαζί με τις οριακές συνθήκες

$$\begin{aligned} P(0) &= P_A, & P(1) &= P_B \\ C(0) &= C_0, & C(1) &= C_0 \end{aligned}$$
(3.28)

επιλύονται αριθμητικά προκειμένου να υπολογιστούν οι αδιάστατες γραμμομοριακές παροχές  $\tilde{J}_1, \tilde{J}_2$  καθώς και οι κατανομές πίεσης και συγκέντρωσης κατά μήκος των δύο πλακών. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι οι γραμμομοριακές παροχές είναι άγνωστες ποσότητες και αποτελούν μέρος της επίλυσης του συστήματος. Η αναλυτική περιγραφή του αλγορίθμου της επίλυσης του συστήματος περιγράφεται στην παράγραφο που ακολουθεί.

### 3.4 Αριθμητικό σχήμα

Η επίλυση του συστήματος των συνήθων διαφορικών εξισώσεων (3.27) με τις οριακές συνθήκες (3.28) πραγματοποιείται με τη μέθοδο Runge-Kutta 4<sup>ης</sup> τάξης. Η αδιάστατη απόσταση  $\tilde{z}$  κατά μήκος των δύο πλακών διακριτοποιείται σε ίσα διαστήματα  $h_z$ . Σε όλες τις περιπτώσεις ο αριθμός των κόμβων που χρησιμοποιήθηκε είναι 501.

Η λύση του συστήματος ξεκινάει από την είσοδο των δύο πλακών με γνωστές τις ποσότητες της πίεσης  $P_A$  και της συγκέντρωσης  $C_A$  από τις οριακές συνθήκες. Υποθέτοντας τις γραμμομοριακές παροχές  $\tilde{J}_1, \tilde{J}_2$ , το σύστημα (3.27) επιλύεται υπολογίζοντας την τιμή της πίεσης  $P_B^C$  και της συγκέντρωσης  $C_B^C$  στην έξοδο. Οι τιμές της πίεσης και της συγκέντρωσης που υπολογίστηκαν ελέγχονται σε σχέση με τις δοσμένες συνθήκες στην έξοδο των δυο πλακών  $P_B$  και  $C_0$ . Σε περίπτωση όπου  $P_B^C \neq P_B$  και  $C_B^C \neq C_0$  πραγματοποιείται μια νέα εκτίμηση για τις γραμμομοριακές παροχές  $\tilde{J}_1, \tilde{J}_2$  και το σύστημα (3.27) επιλύεται ξανά. Η διαδικασία τερματίζεται όταν οι διαφορές στις υπολογιζόμενες ποσότητες στην έξοδο με τις δοσμένες συνθήκες είναι μικρότερες από  $10^{-6}$ . Όταν η διαδικασία υπολογισμού λάβει τέλος οι αδιάστατες γραμμομοριακές παροχές  $\tilde{J}_1, \tilde{J}_2$  καθώς και οι κατανομές της πίεσης και της συγκέντρωσης είναι γνωστές. Με βάση τις αδιάστατες παροχές  $\tilde{J}_1, \tilde{J}_2$  και τη σχέση (3.26) μπορούν να υπολογιστούν οι διαστατές γραμμομοριακές παροχές. Τέλος, θα πρέπει να σημειωθεί ότι κατά την επίλυση του συστήματος είναι απαραίτητη η γνώση των κινητικών συντελεστών  $A_{PP}, A_{PC}, A_{CP}$  και  $A_{CC}$  κατά μήκος της ροής. Αυτός είναι ο λόγος της δημιουργίας των βάσεων δεδομένων για αυτούς τους συντελεστές με βάση τη μεθοδολογία που αναπτύχθηκε στην παράγραφο 3.2.

### 3.5 Αποτελέσματα και ανάλυση

#### 3.5.1 Παράμετροι προσομοίωσης

Τα αριθμητικά αποτελέσματα παρατίθενται για ροή μονοατομικού αερίου μίγματος διαμέσου πλακών μεταβλητής απόστασης και μήκους  $L = 5 \times 10^{-3}$  m. Έχουν εξεταστεί δυο τύποι αέριων μιγμάτων He-Ar και Ne-Ar. Τα αποτελέσματα περιλαμβάνουν τόσο την περίπτωση όπου η ροή του ρευστού έχει την κατεύθυνση όπου η απόσταση των πλακών

αυξάνει (αποκλίνων αγωγός), όσο και την αντίθετη περίπτωση (συγκλίνων αγωγός). Επίσης, εξετάζεται και η περίπτωση των παράλληλων πλακών. Η απόσταση των δύο πλακών μεταβάλλεται μεταξύ των τιμών  $H = 1.88 \times 10^{-6}$  m και  $H = 0.376 \times 10^{-6}$  m. Αποτελέσματα δίνονται για διάφορους λόγους πίεσης  $P_A / P_B = 2, 3, 4, 5, 6.6$  και για διάφορες συγκεντρώσεις αναφοράς  $C_0 = 0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1$ . Σε όλες τις εξεταζόμενες περιπτώσεις η πίεση εξόδου θεωρείται ίση με 2 kPa.

### 3.5.2 Γραμμομοριακές παροχές

Στους Πίνακες 3.1-3.8 δίνεται η γραμμομοριακή παροχή του μίγματος και του κάθε συστατικού ξεχωριστά σε  $mol / (m \cdot s)$ . Στους Πίνακες 3.1-3.2 παρατίθενται οι γραμμομοριακές παροχές για ροή μίγματος He-Ar σε θερμοκρασία αναφοράς  $T_0 = 298.5$  K διαμέσου παράλληλων πλακών απόστασης  $H_A = H_B = 1.88 \times 10^{-6}$  m και  $H_A = H_B = 0.376 \times 10^{-6}$  m. Σε όλες τις περιπτώσεις ο λόγος πίεσης είναι  $P_A / P_B = 6.6$ , ενώ η συγκέντρωση λαμβάνει τις τιμές  $C_0 = 0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1$ . Από τα αποτελέσματα παρατηρείται ότι καθώς το μίγμα γίνεται πιο πλούσιο σε He η συνολική γραμμομοριακή παροχή του μίγματος αυξάνεται, γεγονός που οφείλεται στην μεγαλύτερη ταχύτητα που αποκτά το αέριο μίγμα εξαιτίας της μικρότερης μάζας των ατόμων του He σε σύγκριση με τα άτομα του Ar. Επιπλέον, εξαιτίας της αύξησης της γραμμομοριακής συγκέντρωσης του He η γραμμομοριακή παροχή του ελαφριού συστατικού αυξάνει ενώ, η γραμμομοριακή παροχή από το βαρύτερο συστατικό παρουσιάζει αντίθετη συμπεριφορά. Η αύξηση της απόστασης των δύο πλακών οδηγεί σε αύξηση της συνολικής γραμμομοριακής παροχής του αέριου μίγματος. Ανάλογη συμπεριφορά παρατηρήθηκε και στην περίπτωση της ροής ενός αερίου στο Κεφάλαιο 2 με αύξηση της επιφάνειας του αγωγού.

Στους Πίνακες 3.3-3.6 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που αφορούν τις ροές αέριων μιγμάτων He-Ar και Ne-Ar διαμέσου πλακών των οποίων η απόσταση μεταβάλλεται κατά μήκος ανάπτυξης της ροής. Επιπλέον, οι Πίνακες 3.3-3.6 αναφέρονται σε θερμοκρασία αναφοράς του μίγματος  $T_0 = 298.5$  K. Σε όλες τις περιπτώσεις η γραμμομοριακή παροχή του συγκλίνοντος αγωγού είναι υψηλότερη από την αντίστοιχη του αποκλίνοντος. Ακόμη, παρατηρείται ότι η μεγαλύτερη τιμή της γραμμομοριακής παροχής επιτυγχάνεται όταν ολόκληρη η ροή απαρτίζεται από άτομα He, γεγονός που δικαιολογείται από την υψηλή

κινητική ενέργεια τους λόγω του μικρότερου μοριακού βάρους. Επίσης, εξετάζοντας το λόγο  $J_1/(J_1 + J_2)$  προκύπτει το συμπέρασμα ότι η συνεισφορά του ελαφριού συστατικού στη συνολική γραμμομοριακή παροχή του μίγματος είναι μεγαλύτερη στον αποκλίνοντα αγωγό. Τέλος, στην περίπτωση όπου η γραμμομοριακή συγκέντρωση του μίγματος είναι κάτω από 0.5, το μεγαλύτερο ποσοστό της γραμμομοριακής παροχής του μίγματος ανήκει στο βαρύ συστατικό, ενώ όταν είναι πάνω από 0.5 παρατηρείται ότι το μεγαλύτερο ποσοστό καταλαμβάνεται από το ελαφρύ συστατικό.

Στους Πίνακες 3.3-3.6 δίνονται τα αποτελέσματα των γραμμομοριακών παροχών για ροή μίγματος He-Ar διαμέσου συγκλίνοντος και αποκλίνοντος ακροφυσίου για συγκέντρωση αναφοράς  $C_0 = 0.5$  και για λόγους πίεσης  $P_A/P_B = 2, 3, 4, 5, 6.6$ . Είναι ξεκάθαρο ότι η αύξηση της διαφοράς πίεσης οδηγεί σε αύξηση της συνολικής γραμμομοριακής παροχής ολόκληρου του μίγματος. Επίσης, στην περίπτωση του συγκλίνοντος αγωγού η επιρροή από το ελαφρύ συστατικό στην ολική παροχή είναι μικρότερη σε σχέση με την περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού.

### 3.5.3 Κατανομές πίεσης και συγκέντρωσης

Με βάση τη μεθοδολογία που αναπτύχθηκε στην Παράγραφο 3.4 εκτός από τις γραμμομοριακές παροχές μπορούν να υπολογιστούν οι κατανομές πίεσης και συγκέντρωσης. Η συγκέντρωση που απεικονίζεται στα Σχ. 3.1-3.3 είναι κανονικοποιημένη και ορίζεται σε σχέση με τη συγκέντρωση αναφοράς ως

$$c(\tilde{z}) = \left| \frac{C_0 - C(\tilde{z})}{C_0} \right|$$

Στο Σχ. 3.1 δίνονται οι κατανομές πίεσης, συγκέντρωσης και της παραμέτρου αραιοποίησης για ροή μίγματος διαμέσου παράλληλων πλακών, όταν η μεταξύ τους απόσταση είναι  $H_A = H_B = 1.88 \times 10^{-6}$  m και  $H_A = H_B = 0.376 \times 10^{-6}$  m. Από τα αποτελέσματα προκύπτει, ότι στην περίπτωση όπου οι πλάκες είναι παράλληλες το προφίλ της πίεσης κατά μήκος των πλακών παρουσιάζει μια “σχεδόν” γραμμική συμπεριφορά. Το αποτέλεσμα αυτό είναι ανεξάρτητο από την συγκέντρωση αναφοράς. Επίσης, είναι ξεκάθαρο ότι η συγκέντρωση δεν είναι σταθερή κατά μήκος των δύο παράλληλων πλακών. Η συγκέντρωση παρουσιάζει μείωση στην αρχή αποκτώντας μία ελάχιστη τιμή προς την έξοδο

και στη συνέχεια επανέρχεται στα αρχικά επίπεδα. Η ύπαρξη της πτώσης της συγκέντρωσης κατά μήκος του αγωγού σηματοδοτεί την ύπαρξη του φαινομένου του διαχωρισμού (separation phenomenon). Η κλίση της συγκέντρωσης δικαιολογείται από το γεγονός ότι το ελαφρύ συστατικό έχει μεγαλύτερη ταχύτητα λόγω του μικρότερου μοριακού βάρους.

Στο Σχ. 3.2 δίνονται οι κατανομές πίεσης, συγκέντρωσης και της παραμέτρου αραιοποίησης για την περίπτωση όπου η απόσταση μεταξύ των πλακών μεταβάλλεται. Τα αποτελέσματα προβάλλονται για ροή αερίου μίγματος He-Ar και για λόγο πίεσης  $P_A / P_B = 6.6$ . Από τα αποτελέσματα παρατηρείται ότι η πίεση για την περίπτωση του αποκλίνοντος και του συγκλίνοντος αγωγού παρουσιάζει μια μη γραμμική πτώση κατά μήκος των δύο πλακών. Στην περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού η πίεση πέφτει απότομά στην είσοδο των δύο πλακών ενώ η πτώση της πίεσης συνεχίζεται αλλά με μικρότερη κλίση από τη μέση του αγωγού προς την έξοδο. Αντίθετα, στην περίπτωση του συγκλίνοντος ακροφυσίου η πίεση παρουσιάζει μεγαλύτερη κλίση στην έξοδο των δυο πλακών από στην είσοδο. Η συγκέντρωση στην περίπτωση του συγκλίνοντος αγωγού παρουσιάζει το ελάχιστο κοντά στην έξοδο από της δυο πλάκες, ενώ στην περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού το ελάχιστο παρουσιάζεται κοντά στη μέση της απόστασης που διανύει η ροή.

Στο Σχ. 3.3 δίνονται οι κατανομές των μακροσκοπικών ποσοτήτων για την περίπτωση ροής μίγματος Ne-Ar διαμέσου συγκλίνοντος και αποκλίνοντος αγωγού. Ο λόγος πίεσης παραμένει όπως και πριν ίσος με  $P_A / P_B = 6.6$ . Όπως και στην περίπτωση του μίγματος He-Ar, έτσι και στην περίπτωση του μίγματος Ne-Ar η πίεση παρουσιάζει τη διαφορετική συμπεριφορά για τα δύο είδη αγωγού. Ο τρόπος με τον οποίο μεταβάλλεται η πίεση κατά μήκος της ροής για τον συγκλίνοντα και αποκλίνοντα αγωγό είναι παρόμοιος για τα δύο αέρια μίγματα. Ωστόσο, στην περίπτωση του μίγματος He-Ar η συγκέντρωση παρουσιάζει μεγαλύτερη πτώση κατά μήκος της ροής. Επειδή στην περίπτωση αυτή το φαινόμενο του διαχωρισμού προκαλείται εξαιτίας της μεγαλύτερης διαφοράς στις ατομικές μάζες των δύο συστατικών. Τέλος, η μορφή των κατανομών της συγκέντρωσης για το αέριο μίγμα Ne-Ar είναι παρόμοια με αυτή του μίγματος He-Ar.

#### 3.5.4 Επίδραση γωνίας στις γραμμομοριακές παροχές

Στους Πίνακες 3.9-3.12 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα σε σχέση με τη γωνία  $\omega$  του αγωγού. Τα αποτελέσματα αναφέρονται τόσο στην περίπτωση του συγκλίνοντος όσο και



στην περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού. Το αέριο μίγμα που έχει μελετηθεί για την περίπτωση αυτή είναι το He-Ar. Εξετάστηκαν δύο λόγοι πίεσης  $P_A / P_B = 3, 6.6$  και μία συγκέντρωση αναφοράς του μίγματος  $C_0 = 0.5$ . Οι τιμές της γωνίας που εξετάστηκαν είναι  $\omega = 0^\circ, 0.002^\circ, 0.004^\circ, 0.0086^\circ, 0.01^\circ$ . Από τα αποτελέσματα φαίνεται ότι καθώς η γωνία αυξάνεται παρατηρείται μείωση στη συνολική γραμμομοριακή παροχή του μίγματος. Η μέγιστη παροχή παρατηρείται όταν οι δυο πλάκες είναι παράλληλες  $\omega = 0^\circ$ . Επιπλέον, οι διαφορές ανάμεσα στις παροχές του συγκλίνοντος και του αποκλίνοντος αγωγού είναι ορατές για τιμές της γωνίας μεγαλύτερες από  $0.0086^\circ$ . Ένα ακόμα σημαντικό συμπέρασμα είναι ότι η αύξηση της γωνίας οδηγεί σε μεγαλύτερη συμμετοχή του ελαφριού συστατικού στη συνολική παροχή του μίγματος.

### 3.5.5 Επίδραση συντελεστή διαχυτικής-κατοπτρικής ανάκλασης στις γραμμομοριακές παροχές

Στους Πίνακες 3.13-3.16 παρουσιάζονται οι γραμμομοριακές παροχές του μίγματος σε σχέση με το συντελεστή διαχυτικής-κατοπτρικής ανάκλασης  $a$ . Το αέριο μίγμα που εξετάζεται είναι το He-Ar. Η μελέτη αφορά τόσο την περίπτωση των παράλληλων πλακών, όσο και την περίπτωση του συγκλίνοντος και του αποκλίνοντος αγωγού. Σε όλες τις περιπτώσεις ο λόγος πίεσης θεωρείται ίσος με  $P_A / P_B = 6.6$ , ενώ η συγκέντρωση αναφοράς ισούται με  $C_0 = 0.5$ .

Στους Πίνακες 3.13-3.14 δίνονται οι γραμμομοριακές παροχές μίγματος διαμέσου δύο παράλληλων πλακών για  $H_A = H_B = 1.88 \times 10^{-6}$  m και  $H_A = H_B = 0.376 \times 10^{-6}$  m. Από τα αποτελέσματα φαίνεται ότι όταν τα μόρια τόσο από το βαρύ συστατικό όσο και από το ελαφρύ συγκρούονται κατά ένα ποσοστό διαχυτικά ( $a_{He}=0.7$  και  $a_{Ar}=0.7$ ) επιτυγχάνεται αύξηση της συνολικής παροχής του μίγματος. Αντίθετα, παρατηρείται ότι όταν και τα δυο είδη μορίων διαχέονται με μια κατανομή Maxwell μετά τη σύγκρουση τους με τα στερεά τοιχώματα ( $a_{He}=1$  και  $a_{Ar}=1$ ) η συνολική παροχή του μίγματος παρουσιάζει την ελάχιστη τιμή. Επίσης, φαίνεται ότι η παροχή του μίγματος αυξάνεται όσο πιο κατοπτρική είναι η σύγκρουση των μορίων του ελαφριού συστατικού με τα τοιχώματα των πλακών.

Στους Πίνακες 3.15-3.16 παρατίθενται οι γραμμομοριακές παροχές μίγματος διαμέσου συγκλίνοντος και αποκλίνοντος αγωγού. Όπως στην περίπτωση των παράλληλων

πλακών έτσι και εδώ η παροχή του μίγματος αυξάνεται όσο οι συγκρούσεις με το τοίχωμα γίνονται πιο κατοπτρικές. Επιπλέον, φαίνεται ότι η παροχή στο συγκλίνοντα αγωγό γίνεται μεγαλύτερη από τον αποκλίνοντα αγωγό όσο λιγότερο κατοπτρική είναι η σύγκρουση των μορίων από το ελαφρύ συστατικό με τα στερεά τοιχώματα. Τέλος, παρατηρείται ότι μεγαλύτερο ποσοστό της συνολικής παροχής καταλαμβάνει το ελαφρύ συστατικό, όταν τα μόριά του συγκρούονται κατοπτρικά με τα στερεά τοιχώματα, ενώ τα μόρια του άλλου συστατικού συγκρούονται με συνθήκες διάχυσης Maxwell.

**Πίνακας 3.1:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς  $C_A$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ ,  $H_A=H_B=1.88\times 10^{-6}$  m)

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$P_A/P_B$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0	3.10	0.469	6.60	0.00	9.08 (-07)	9.08 (-07)	0
0.1	2.93	0.443	6.60	1.66 (-07)	8.50 (-07)	1.02 (-06)	0.16
0.3	2.58	0.391	6.60	5.44 (-07)	7.21 (-07)	1.27 (-06)	0.43
0.5	2.21	0.336	6.60	1.01 (-06)	5.71 (-07)	1.58 (-06)	0.64
0.7	1.83	0.277	6.60	1.59 (-06)	3.88 (-07)	1.98 (-06)	0.80
1	1.12	0.169	6.60	2.87 (-06)	0.00	2.87 (-06)	1

**Πίνακας 3.2:** Γραμμομοριακές παροχές του μίγματος He-Ar για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς  $C_A$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ ,  $H_A=H_B=0.376\times 10^{-6}$  m)

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$P_A/P_B$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0	0.619	0.0939	6.60	0.00	3.87 (-07)	3.87 (-07)	0
0.1	0.585	0.0887	6.60	1.07 (-08)	3.58 (-08)	4.65 (-08)	0.23
0.3	0.516	0.0782	6.60	3.38 (-08)	2.96 (-08)	6.34 (-08)	0.53
0.5	0.443	0.0671	6.60	6.00 (-08)	2.27 (-08)	8.26 (-08)	0.73
0.7	0.366	0.0554	6.60	9.02 (-08)	1.48 (-08)	1.05 (-07)	0.86
1	0.223	0.0338	6.60	1.48 (-07)	0.00	1.48 (-07)	1

**Πίνακας 3.3:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς  $C_A$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$P_A/P_B$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0	0.619	0.469	6.60	0.00	1.79 (-07)	1.79 (-07)	0
0.1	0.585	0.443	6.60	4.56 (-08)	1.67 (-07)	2.12 (-07)	0.22
0.3	0.516	0.390	6.60	1.45 (-07)	1.38 (-07)	2.84 (-07)	0.51
0.5	0.443	0.336	6.60	2.60 (-07)	1.06 (-07)	3.66 (-07)	0.71
0.7	0.366	0.277	6.60	3.93 (-07)	6.96 (-08)	4.63 (-07)	0.85
1	0.223	0.169	6.60	6.44 (-07)	0.00	6.44 (-07)	1

**Πίνακας 3.4:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς  $C_A$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$P_A/P_B$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0	3.10	0.0939	6.60	0.00	1.88 (-07)	1.88 (-07)	0
0.1	2.93	0.0887	6.60	4.26 (-08)	1.76 (-07)	2.18 (-07)	0.20
0.3	2.58	0.0782	6.60	1.38 (-07)	1.48 (-07)	2.86 (-07)	0.48
0.5	2.21	0.0671	6.60	2.50 (-07)	1.16 (-07)	3.66 (-07)	0.68
0.7	1.83	0.0554	6.60	3.87 (-07)	7.80 (-08)	4.65 (-07)	0.83
1	1.16	0.0338	6.60	6.72 (-07)	0.00	6.72 (-07)	1

**Πίνακας 3.5:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος Ne-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς  $C_A$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$P_A/P_B$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0	0.619	0.469	6.60	0.00	1.79 (-07)	1.79 (-07)	0
0.1	0.586	0.444	6.60	2.34 (-08)	1.64 (-07)	1.87 (-07)	0.12
0.3	0.521	0.395	6.60	7.22 (-08)	1.31 (-07)	2.03 (-07)	0.36
0.5	0.459	0.347	6.60	1.24 (-07)	9.68 (-08)	2.21 (-07)	0.56
0.7	0.398	0.302	6.60	1.80 (-07)	6.01 (-08)	2.40 (-07)	0.75
1	0.313	0.237	6.60	2.73 (-07)	0.00	2.73 (-07)	1

**Πίνακας 3.6:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος Ne-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης αναφοράς  $C_A$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$P_A/P_B$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0	3.10	0.0939	6.60	0.00	1.88 (-07)	1.88 (-07)	0
0.1	2.93	0.0888	6.60	2.33 (-08)	1.72 (-07)	1.96 (-07)	0.12
0.3	2.61	0.0790	6.60	7.24 (-08)	1.39 (-07)	2.12 (-07)	0.34
0.5	2.29	0.0695	6.60	1.26 (-07)	1.04 (-07)	2.29 (-07)	0.55
0.7	1.99	0.0604	6.60	1.84 (-07)	6.50 (-08)	2.49 (-07)	0.74
1	1.56	0.0474	6.60	2.84 (-07)	0.00	2.84 (-07)	1

**Πίνακας 3.7:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$  και για διάφορους λόγους  $P_A/P_B$ . ( $T_0=298.5$  K)

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$P_A/P_B$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	0.134	0.336	2.00	5.66 (-08)	2.04 (-08)	7.70 (-08)	0.74
0.5	0.201	0.336	3.00	1.06 (-07)	3.95 (-08)	1.46 (-07)	0.73
0.5	0.268	0.336	4.00	1.52 (-07)	5.82 (-08)	2.10 (-07)	0.72
0.5	0.336	0.336	5.00	1.95 (-07)	7.68 (-08)	2.72 (-07)	0.72
0.5	0.443	0.336	6.60	2.60 (-07)	1.06 (-07)	3.66 (-07)	0.71

**Πίνακας 3.8:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$  και για διάφορους λόγους  $P_A/P_B$ . ( $T_0=298.5$  K)

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$P_A/P_B$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	0.671	0.0671	2.00	5.65 (-08)	2.10 (-08)	7.74 (-08)	0.73
0.5	1.01	0.0671	3.00	1.05 (-07)	4.13 (-08)	1.46 (-07)	0.72
0.5	1.34	0.0671	4.00	1.49 (-07)	6.16 (-08)	2.11 (-07)	0.71
0.5	1.68	0.0671	5.00	1.90 (-07)	8.23 (-08)	2.72 (-07)	0.70
0.5	2.21	0.0671	6.60	2.50 (-07)	1.16 (-07)	3.66 (-07)	0.68

**Πίνακας 3.9:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας  $\omega$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\omega$ ( $^\circ$ )	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	2.21	0.336	0	1.01 (-06)	5.71 (-07)	1.58 (-06)	0.64
0.5	1.80	0.336	0.002	8.43 (-07)	4.55 (-07)	1.30 (-06)	0.65
0.5	1.39	0.336	0.004	6.76 (-07)	3.44 (-07)	1.02 (-06)	0.66
0.5	0.443	0.336	0.0086	2.60 (-07)	1.06 (-07)	3.66 (-07)	0.71
0.5	0.159	0.336	0.01	1.13 (-07)	4.08 (-08)	1.54 (-07)	0.74

**Πίνακας 3.10:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας  $\omega$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\omega$ ( $^\circ$ )	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	2.21	0.336	0	1.01 (-06)	5.71 (-07)	1.58 (-06)	0.64
0.5	2.21	0.273	0.002	8.34 (-07)	4.64 (-07)	1.30 (-06)	0.64
0.5	2.21	0.211	0.004	6.62 (-07)	3.57 (-07)	1.02 (06)	0.65
0.5	2.21	0.0671	0.0086	2.50 (-07)	1.16 (-07)	3.66 (-07)	0.68
0.5	2.21	0.0240	0.01	1.11 (-07)	4.53 (-08)	1.56 (-07)	0.71

**Πίνακας 3.11:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές της γωνίας  $\omega$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=3$ )

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\omega$ (°)	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	1.01	0.336	0	4.16 (-07)	1.91 (-07)	6.07 (-07)	0.69
0.5	0.820	0.336	0.002	3.48 (-07)	1.55 (-07)	5.03 (-07)	0.69
0.5	0.633	0.336	0.004	1.95 (-07)	7.68 (-08)	2.72 (-07)	0.72
0.5	0.201	0.336	0.0086	1.06 (-07)	3.95 (-08)	1.46 (-07)	0.73
0.5	0.0721	0.336	0.01	4.69 (-08)	1.61 (-08)	6.30 (-08)	0.75

**Πίνακας 3.12:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε συγκλίνοντα αγωγό και για διάφορες τιμές της γωνίας  $\omega$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=3$ )

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$\omega$ (°)	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	1.01	0.336	0	4.16 (-07)	1.91 (-07)	6.07 (-07)	0.69
0.5	1.01	0.273	0.002	3.47 (-07)	1.56 (-07)	5.03 (-07)	0.69
0.5	1.01	0.211	0.004	2.76 (-07)	1.21 (-07)	3.98 (-07)	0.70
0.5	1.01	0.0671	0.0086	1.05 (-07)	4.13 (-08)	1.46 (-07)	0.72
0.5	1.01	0.0240	0.01	4.69 (-08)	1.69 (-08)	6.38 (-08)	0.74



**Πίνακας 3.13:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε ροή ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες για διάφορες τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης τοιχώματος-αερίου  $a$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ ,  $H_A=H_B=0.376\times 10^{-6}$  m)

$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$a_{He}$	$a_{Ar}$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	0.443	0.0671	1	1	6.00 (-08)	2.27 (-08)	8.26 (-08)	0.73
0.5	0.443	0.0671	0.7	0.7	8.86 (-08)	3.64 (-08)	1.25 (-07)	0.71
0.5	0.443	0.0671	0.7	1	8.57 (-08)	2.41 (-08)	1.10 (-07)	0.78
0.5	0.443	0.0671	1	0.7	6.19 (-08)	3.42 (-08)	9.61 (-08)	0.64

**Πίνακας 3.14:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar σε ροή ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες για διάφορες τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης τοιχώματος-αερίου  $a$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ ,  $H_A=H_B=1.88\times 10^{-6}$  m)

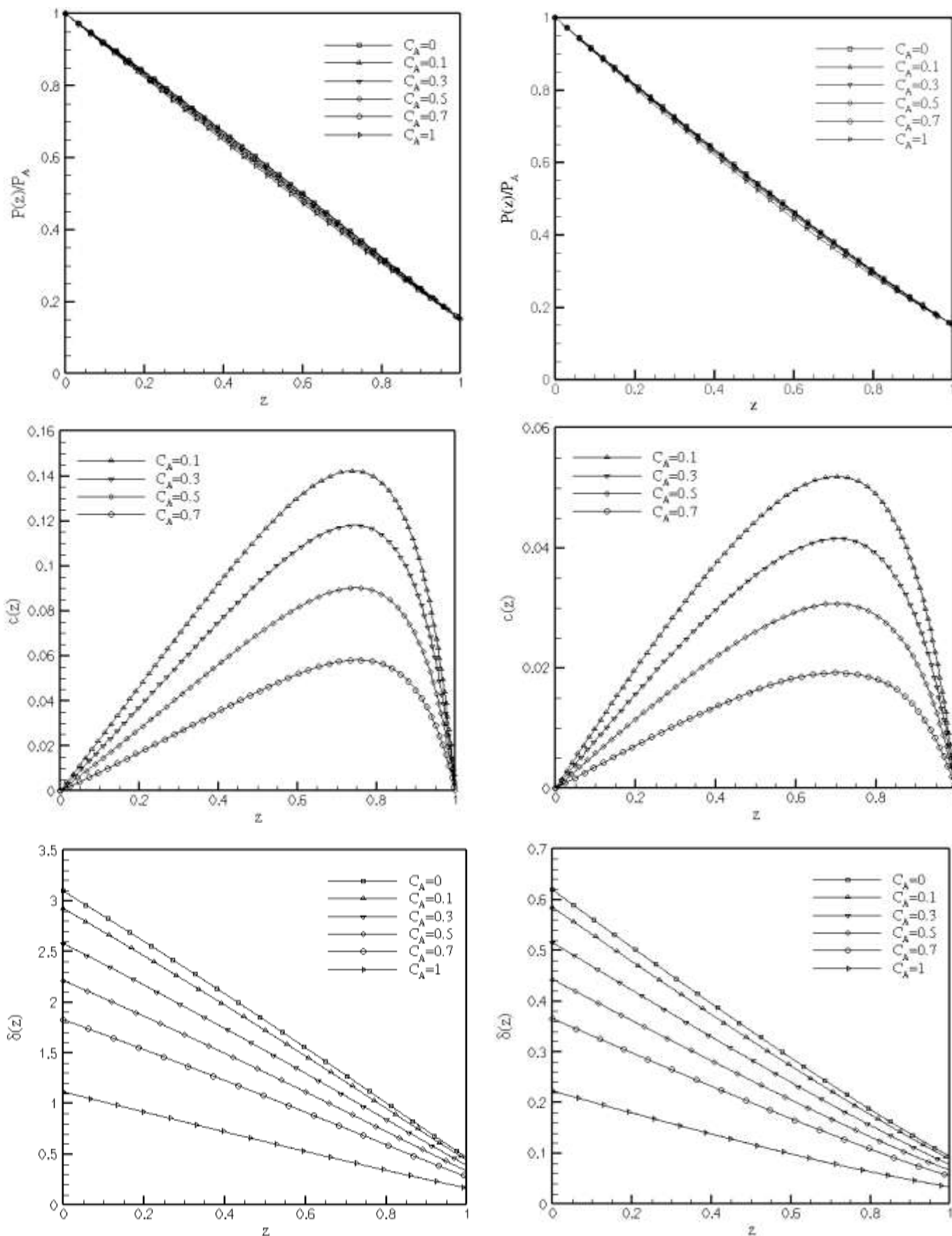
$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$a_{He}$	$a_{Ar}$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	2.21	0.336	1	1	1.01 (-06)	5.71 (-07)	1.58 (-06)	0.64
0.5	2.21	0.336	0.7	0.7	1.40 (-06)	8.98 (-07)	2.30 (-06)	0.61
0.5	2.21	0.336	0.7	1	1.24 (-06)	6.30 (-07)	1.87 (-06)	0.66
0.5	2.21	0.336	1	0.7	1.12 (-06)	8.05 (-07)	1.92 (-06)	0.58

**Πίνακας 3.15:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar για ροή σε αποκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης τοιχώματος-αερίου  $a$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )

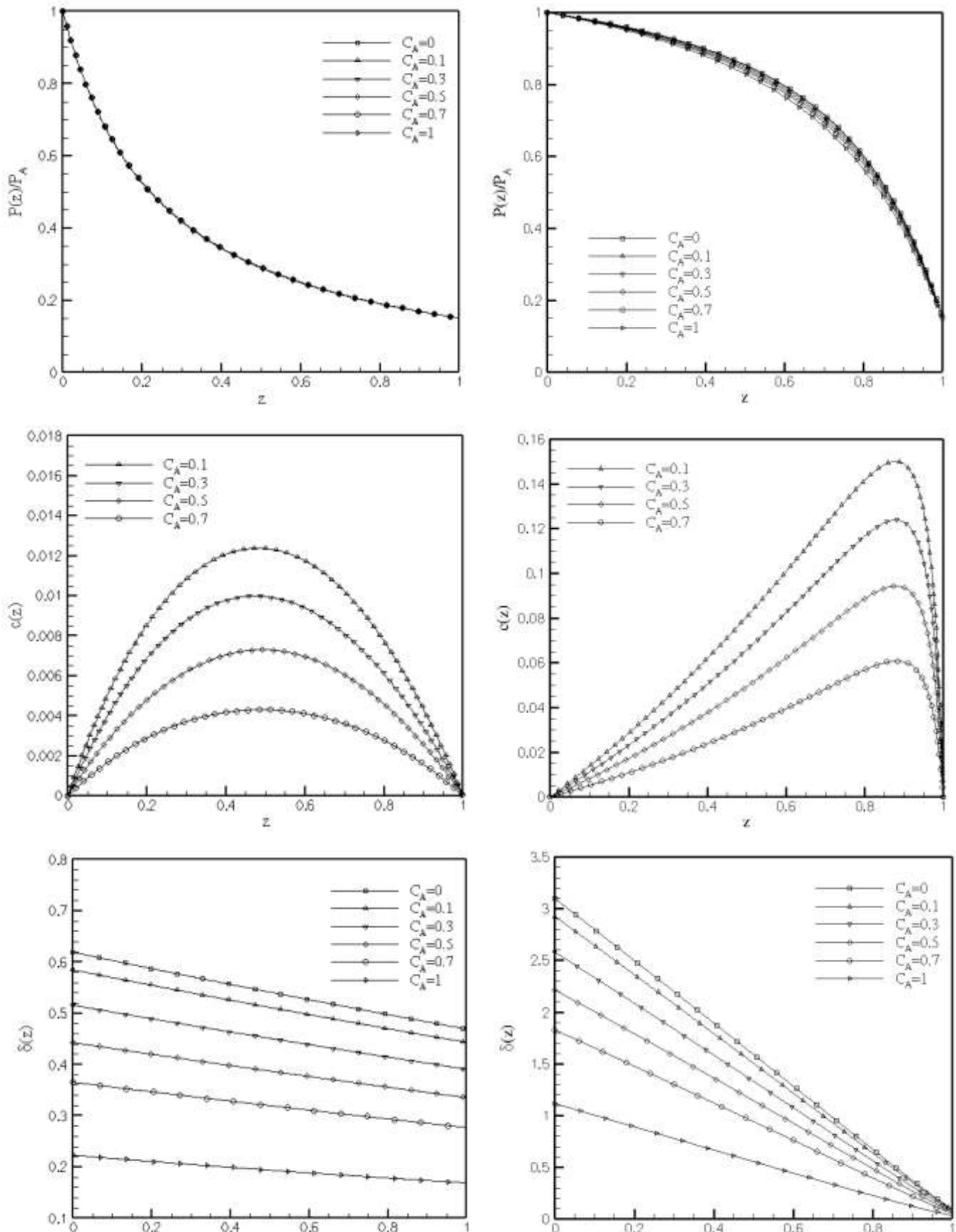
$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$a_{He}$	$a_{Ar}$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	0.443	0.336	1	1	2.60 (-07)	1.06 (-07)	3.66 (-07)	0.71
0.5	0.443	0.336	0.7	0.7	3.78 (-07)	1.70 (-07)	5.47 (-07)	0.69
0.5	0.443	0.336	0.7	1	3.60 (-07)	1.15 (-07)	4.74 (-07)	0.76
0.5	0.443	0.336	1	0.7	2.71 (-07)	1.58 (-07)	4.29 (-07)	0.63

**Πίνακας 3.16:** Γραμμομοριακές παροχές μίγματος He-Ar για ροή σε συγκλίνοντα αγωγό για διάφορες τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης τοιχώματος-αερίου  $a$  και για συγκέντρωση αναφοράς  $C_A=0.5$ . ( $T_0=298.5$  K,  $P_A/P_B=6.6$ )

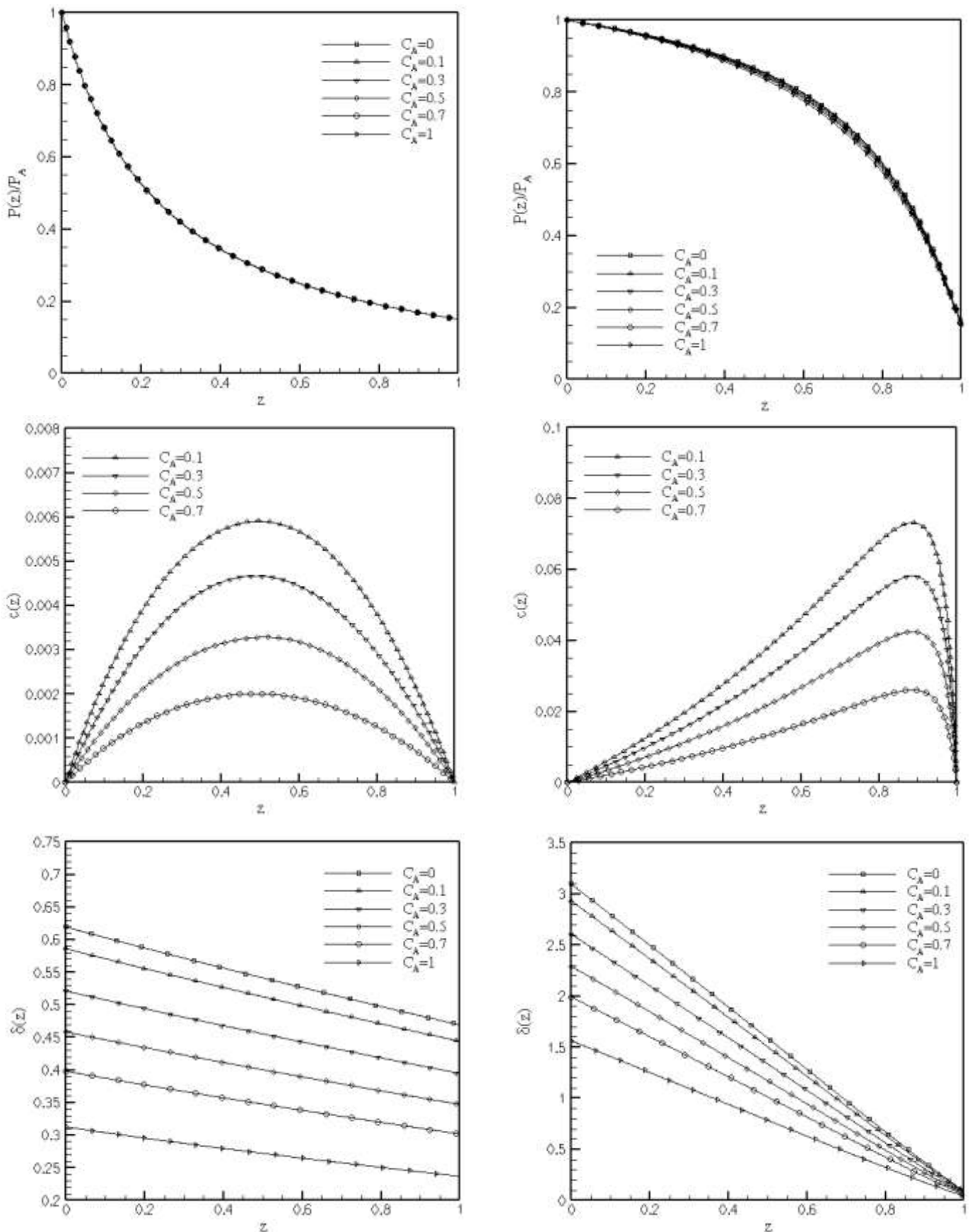
$C_A$	$\delta_A$	$\delta_B$	$a_{He}$	$a_{Ar}$	$J_1$ (mol/m s)	$J_2$ (mol/m s)	$J$ (mol/m s)	$J_1/(J_1+J_2)$
0.5	2.21	0.0671	1	1	2.50 (-07)	1.16 (-07)	3.66 (-07)	0.68
0.5	2.21	0.0671	0.7	0.7	3.54 (-07)	1.87 (-07)	5.41 (-07)	0.65
0.5	2.21	0.0671	0.7	1	3.28 (-07)	1.27 (-07)	4.56 (-07)	0.72
0.5	2.21	0.0671	1	0.7	2.67 (-07)	1.70 (-07)	4.37 (-07)	0.61



**Σχήμα 3.2:** Κατανομή αδιάστατης πίεσης (πάνω), αδιάστατης συγκέντρωσης (μέση) και παραμέτρου αραιοποίησης (κάτω) για ροή μίγματος μεταξύ παράλληλων πλακών με  $H_A = H_B = 1.88 \times 10^{-6}$  m (αριστερά) και  $H_A = H_B = 0.376 \times 10^{-6}$  m (δεξιά).



**Σχήμα 3.3:** Κατανομή αδιάστατης πίεσης (πάνω), αδιάστατης συγκέντρωσης (μέση) και παραμέτρου αραιοποίησης (κάτω) για ροή μίγματος He-Ar με λόγο πίεσης  $P_A/P_B=6.6$  σε αποκλίνοντα αγωγό (αριστερά) και σε συγκλίνοντα αγωγό (δεξιά).



**Σχήμα 3.4:** Κατανομή αδιάστατης πίεσης (πάνω), αδιάστατης συγκέντρωσης (μέση) και παραμέτρου αραιοποίησης (κάτω) για ροή μίγματος He-Ag με λόγο πίεσης  $P_A/P_B=6.6$  σε αποκλίνοντα αγωγό (αριστερά) και σε συγκλίνοντα αγωγό (δεξιά).

## Κεφάλαιο 4 Ανακεφαλαίωση και μελλοντική έρευνα

Το αντικείμενο της παρούσας εργασίας είναι η μελέτη ροών σε αγωγούς μεταβλητής διατομής. Εξετάζεται η ροή ενός συστατικού διαμέσου ορθογώνιου αγωγού του οποίου το ύψος παραμένει σταθερό ενώ το πλάτος μεταβάλλεται γραμμικά στην κατεύθυνση της ροής. Επίσης, η φορά της ροής εξετάστηκε και για την περίπτωση στην οποία έχει την κατεύθυνση αύξησης του πλάτους (αποκλίνων αγωγός) και για την αντίθετη περίπτωση (συγκλίνων αγωγός) και για διάφορους λόγους πίεσης εισόδου-εξόδου. Σε όλες τις περιπτώσεις η μαζική παροχή υπολογίστηκε να είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση του συγκλίνοντος αγωγού έναντι του αποκλίνοντος αγωγού. Η κατανομή της πίεσης κατά μήκος του αγωγού δεν είναι γραμμική, σε αντίθεση με την περίπτωση του αγωγού σταθερής διατομής. Στην περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού, η πίεση δηλώνει μία απότομη πτώση στην είσοδο του αγωγού και στη συνέχεια οδηγείται με μικρότερη κλίση στην πίεση εξόδου του. Ενώ στην περίπτωση του συγκλίνοντος αγωγού, η πίεση μειώνεται με μικρό ρυθμό στην είσοδο του αγωγού ενώ μειώνεται με μεγαλύτερο ρυθμό κοντά στην έξοδο του αγωγού. Επιπλέον, πραγματοποιήθηκαν συγκρίσεις με πειραματικά δεδομένα και διαπιστώθηκε η καλή ποιοτική αλλά η όχι καλή ποσοτική συμπεριφορά.

Επίσης, εξετάστηκε η ροή των αέριων μιγμάτων He-Ar και Ne-Ar σε ημιάπειρες πλάκες με μεταβαλλόμενο ύψος στη διεύθυνση της ροής. Μελετήθηκε τόσο η περίπτωση του συγκλίνοντος όσο και η περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού. Η συμπεριφορά των γραμμομοριακών παροχών του μίγματος προέκυψε ανάλογη με αυτή της περίπτωσης της ροής ενός συστατικού. Συμπληρωματικά, παρατηρήθηκε ότι στην περίπτωση που η σύγκρουση των μορίων με τα στέρεα τοιχώματα είναι κατοπτρική προκαλείται αύξηση στη γραμμομοριακή παροχή του μίγματος. Επιπλέον, από τα αποτελέσματα παρατηρείται μεταβολή της κατανομής συγκέντρωσης κατά μήκος των δυο πλακών γεγονός που σηματοδοτεί την ύπαρξη του φαινομένου του διαχωρισμού.

Με την παρούσα εργασία ολοκληρώνεται η πρώτη προσπάθεια μελέτης ροής μίγματος σε ημιάπειρες πλάκες μεταβλητού ύψους. Θα ακολουθήσει η επέκταση του προβλήματος σε ροή μιγμάτων διαμέσου ορθογώνιου αγωγού μεταβλητής διατομής αφού συναντάται συχνά σε πρακτικές εφαρμογές. Επιπλέον, η συγκεκριμένη εργασία θα μπορούσε να εξελιχθεί ώστε να συμπεριλαμβάνει ροές που οφείλονται σε θερμοκρασιακές διαφορές (thermal creep flow) και στην περίπτωση των μιγμάτων σε ροές που οφείλονται σε διαφορές συγκέντρωσης (barodiffusion flow). Επίσης, είναι σημαντικό να εξετασθούν περισσότερες περιπτώσεις μιγμάτων με διαφορετικούς λόγους πίεσης και για διαφορετικές συγκεντρώσεις στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού ώστε να μελετηθεί ενδελεχώς η επίδρασή όλων των παραμέτρων στο φαινόμενο του διαχωρισμού. Αρκετά ενδιαφέροντα θα είναι η αντίστοιχη μελέτη με οριακές συνθήκες Cercignani-Lampis [23]. Οι οριακές συνθήκες Cercignani-Lampis επιτρέπουν την μοντελοποίηση επιλεκτικής ανάκλασης σωματιδίων αντίθετα με την κύρια κατεύθυνση της ροής και θεωρείται ότι μοντελοποιούν καλύτερα και πληρέστερα τη διαδικασία της αλληλεπίδρασης αερίου-τοιχώματος σε σχέση με τις οριακές συνθήκες Maxwell. Τέλος, τονίζεται ότι η παρούσα προσέγγιση βασίζεται στη γραμμική κινητική θεωρία, αφού ο λόγος του μήκους των αγωγών ως προς την υδραυλική διάμετρο είναι μεγάλος. Εφαρμόζοντας τις μη γραμμικές κινητικές εξισώσεις ή τη μεθοδολογία Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) θα μπορούσαν να μελετηθούν οι αντίστοιχες ροές σε αγωγούς μεταβλητής διατομής και μικρού μήκους.

## Βιβλιογραφία

- [1] F. M. White, “Viscous Fluid Flows”, *McGraw-Hill*, New York, 1974.
- [2] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, “Mathematical Theory of Transport Processes in Gases”, *North-Holland Publishing Company*, Amsterdam, 1972.
- [3] C. Cercignani, “The Boltzmann equation and its applications”, *Springer*, New York, 1988.
- [4] C. Shen, “Rarefied Gas Dynamics”, *Springer*, New York, 2005.
- [5] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross and M. A. Krook, “A model for collision processes in gases”, *Phys. Rev.*, 94:511-525, 1954.
- [6] E. M. Shakhov, “Generalization of the Krook kinetic equation”, *Fluid Dynamics*, 3(95), 1968.
- [7] L. H. Holway, “New statistical models for kinetic theory: methods of construction”, *Physics of fluids*, 9(9), 1966.
- [8] F. J. McCormack, “Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases”, *Physics of Fluids*, 16(12), 2095-2105, 1973.
- [9] S. Naris, D. Valougeorgis, D. Kalempa and F. Sharipov, “Flows of gaseous mixture through rectangular microchannel driven by pressure, temperature and concentration gradients”, *Physics of Fluids*, 17, 100607, 2005.
- [10] S. Naris, D. Valougeorgis, D. Kalempa and F. Sharipov, “Gaseous mixture flow between two parallel plates in the whole range of the gas rarefaction”, *Physica A*, 336, 294-318, 2004.
- [11] F. Sharipov and D. Kalempa, “Gaseous mixture flow through a long tube at arbitrary Knudsen numbers”, *J. Vac. Sci. Tech. A*, 20, 814-822, 2002.
- [12] F. Sharipov, L.M.G. Cumin and D. Kalempa, “Plane Couette of binary gaseous mixture in the whole range of the Knudsen number”, *Eur. J. Mesh. B/Fluids*, 23, 899-906, 2004.



- [13] L. Szalmas and D. Valougeorgis, “Rarefied gas flow mixtures through long channels with triangular and trapezoidal cross section”, *Microfluidics and Nanofluidics*, 9, 471-487, 2010.
- [14] S. Naris, D. Valougeorgis, D. Kalempa and F. Sharipov, “Flows of gaseous mixture through rectangular microchannel driven by pressure, temperature and concentration gradients”, *Phys. Fluids*, 17, 100607, 2005.
- [15] F. Sharipov and G. Bertoldo, “Rarefied gas flow through a long tube of variable radius”, *J. Vac. Sci. Tech. A*, 23 (3), 531-533, 2005.
- [16] S. Misdanitis and D. Valougeorgis, “Vacuum gas flows through channels with cross sections varying in the flow direction”, *Annex Progress Report 34 in Fusion Project*, Association EURATOM-Hellenic Republic, 123-125, 2009.
- [17] L. Szalmas, J. Pitakarnnop, S. Geoffroy, S. Colin and D. Valougeorgis, “Comparative study between computational and experimental results for binary rarefied gas flows through long microchannels”, *Microfluidics and Nanofluidics*, 9:1103-1114, 2010.
- [18] T. Veltzke, M. Baune and J. Thoming, “The contribution of diffusion to gas microflow: An experimental study”, *Physics of fluids*, 24, 2012.
- [19] F. Sharipov, “Rarefied gas flow through a long rectangular channel”, *J. Vac. Sci. Tech. A* 17(5), 1999.
- [20] S. Varoutis, V. Hauer, C. Day and D. Valougeorgis, “Experimental and computational study of gas flows through long channels of various cross sections in the whole range of the Knudsen number”, *J. Vac. Sci. Tech. A*, 27 (1), 89-100, 2009.
- [21] J. Kestin, K. Knierim, E. A. Mason, B. Najafi, S. T. Ro and M. Waldman, “Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixture at low densities”, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 13(1), 229–303, 1984.
- [22] S. R. De Groot and P. Mazur, “Non-Equilibrium Thermodynamics”, New York, 1984.
- [23] F. Sharipov “Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. I. Plane flow between two parallel plates”, *Eur. J. Mech. B / Fluids*, 21(1):113-123, 2002.

## **Παραρτήματα**

## Παράρτημα Α

### Βάσεις δεδομένων

Οι βάσεις δεδομένων που δημιουργήθηκαν με βάση τις μεθοδολογίες των παραγράφων 2.4.1 και 3.2 δίνονται σε ηλεκτρονική μορφή (CD) μαζί με την παρούσα εργασία. Το CD περιέχει δυο φακέλους με την ονομασία “single gas” και “mixture”. Τα περιεχόμενα του φακέλου “single gas” αναλύονται στο A1 και αναφέρονται στη μεθοδολογία της παραγράφου 2.4.1, ενώ του φακέλου “mixture” αναλύονται στο A2 και αναφέρονται στη μεθοδολογία της παραγράφου 3.2.

#### A.1 Ροή αερίου σε ορθογώνιο αγωγό

Ο φάκελος “single gas” περιέχει τρία αρχεία με τις εξής ονομασίες: “Rarefaction parameters”, “Ratio H over W” και “GP”. Το αρχείο “Rarefaction parameters” περιλαμβάνει τις τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης  $\delta$ , οι οποίες κυμαίνονται από 0 έως 1000. Συνολικά το αρχείο περιέχει 89 τιμές. Το αρχείο “Ratio H over W” περιέχει τις τιμές του λόγου  $H/W$ . Συνολικά υπάρχουν 39 τιμές του λόγου  $H/W$  μεταξύ των τιμών 0.01 και 10. Τέλος, στο αρχείο “GP” περιλαμβάνονται οι τιμές της αδιάστατης παροχής  $G_p$ . Το αρχείο περιέχει συνολικά 3471 τιμές της αδιάστατης παροχής και κάθε τιμή αντιστοιχεί σε ένα συνδυασμό της παραμέτρου αραιοποίησης  $\delta$  του αρχείου “Rarefaction parameters” και του λόγου  $H/W$  του αρχείου “Ratio H over W”. Η αντιστοίχιση των τιμών γίνεται ως εξής: κάθε γραμμή του αρχείου “GP” αντιστοιχεί σε μια τιμή της παραμέτρου αραιοποίησης. Η πρώτη γραμμή του αρχείου “GP” αντιστοιχεί στην πρώτη τιμή του αρχείου “Rarefaction parameters”, η δεύτερη γραμμή του αρχείου “GP” στη δεύτερη γραμμή του αρχείου “Rarefaction parameters” κ.ο.κ. Κάθε στήλη του αρχείου “GP” αντιστοιχεί σε μια τιμή του λόγου  $H/W$ . Η πρώτη στήλη του αρχείου “GP” αντιστοιχεί στην πρώτη τιμή του αρχείου “Ratio H over W”, η δεύτερη στήλη του αρχείου “GP” στη δεύτερη γραμμή του αρχείου “Ratio H over W”, κ.ο.κ.

## A.2 Ροή μίγματος διαμέσου παράλληλων πλακών

Ο φάκελος “single gas” περιέχει δυο φακέλους με την ονομασία “He-Ar” και “Ne-Ar”. Ο πρώτος αναφέρεται στο μίγμα “He-Ar”, ενώ ο δεύτερος στο μίγμα “Ne-Ar”. Στο φάκελο “He-Ar” περιέχονται τέσσερις υποφάκελοι με τις ονομασίες “a\_He\_1\_Ar\_1”, “a\_He\_07\_Ar\_07”, “a\_He\_1\_Ar\_07” και “a\_He\_07\_Ar\_1”. Οι ονομασίες των υποφακέλων δηλώνουν τις διαφορετικές περιπτώσεις του συντελεστή διαχυτικής ανάκλασης. Για παράδειγμα ο φάκελος “a\_He\_07\_Ar\_1” αντιστοιχεί στην περίπτωση όπου  $a_{He} = 0.7$  και  $a_{Ar} = 1$ . Σε κάθε ένα από αυτούς τους τέσσερις υποφακέλους υπάρχουν τέσσερα αρχεία με τις ονομασίες “Rarefaction parameters”, “Concentration”, “LPP”, “LCP” και “LCC”. Στον φάκελο “Ne-Ar” περιέχονται μόνο τέσσερα αρχεία με τις ονομασίες “Rarefaction parameters”, “Concentration”, “LPP”, “LCP” και “LCC”. Στον φάκελο “Ne-Ar” υπάρχουν μόνο τέσσερα αρχεία γιατί μόνο το αέριο μίγμα “He-Ar” εξετάστηκε σε σχέση με τη μεταβολή του συντελεστή διαχυτικής ανάκλασης. Σε όλες τις περιπτώσεις το αρχείο “Rarefaction parameters” περιέχει τις τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης  $\delta$ , ενώ το αρχείο “Concentration” περιέχει τις τιμές της συγκέντρωσης. Τα αρχεία “LPP”, “LCP” και “LCC” αντιστοιχούν στους κινητικούς συντελεστές  $A_{PP}$ ,  $A_{CP}$  και  $A_{CC}$ . Κάθε τιμή των τριών αυτών αρχείων σχετίζεται με μία τιμή του αρχείου “Rarefaction parameters” και του αρχείου “Concentration”. Η συσχέτιση γίνεται ως εξής: Η πρώτη γραμμή από τα αρχεία “LPP”, “LCP” και “LCC” αντιστοιχεί στην πρώτη τιμή του αρχείου “Rarefaction parameters”, η δεύτερη γραμμή από τα αρχεία “LPP”, “LCP” και “LCC” στην δεύτερη γραμμή του αρχείου “Rarefaction parameters” κ.ο.κ. Κάθε στήλη από τα αρχεία “LPP”, “LCP” και “LCC” αντιστοιχεί σε μια τιμή της συγκέντρωσης. Η πρώτη στήλη από τα αρχεία “LPP”, “LCP” και “LCC” αντιστοιχεί στην πρώτη τιμή του αρχείου “Concentration”, η δεύτερη στήλη των αρχείων “LPP”, “LCP” και “LCC” στην δεύτερη γραμμή του αρχείου “Concentration”, κ.ο.κ.

## Παράρτημα Β

### Αναλυτική λύση στην υδροδυναμική περιοχή

Στην υδροδυναμική περιοχή ( $\delta \rightarrow \infty$ ) η ροή του αερίου περιγράφεται από την εξίσωση Stokes, η οποία για το υπό εξέταση πρόβλημα διατυπώνεται ως

$$\mu \left( \frac{\partial^2 u^h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^h}{\partial y^2} \right) = \frac{dP}{dz} \quad (\text{B.1})$$

χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (2.4) και (2.17) προκύπτει η αδιάστατη εξίσωση

$$\frac{\partial^2 \tilde{u}^h}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{u}^h}{\partial \tilde{y}^2} = -\delta \quad (\text{B.2})$$

οι συνθήκες μη ολίσθησης ορίζονται ως

$$\tilde{u}^h \left( \frac{-W}{2D_h}, \tilde{y} \right) = 0, \quad \tilde{u}^h \left( \tilde{x}, \frac{-H}{2D_h} \right) = 0, \quad \tilde{u}^h \left( \frac{W}{2D_h}, \tilde{y} \right) = 0, \quad \tilde{u}^h \left( \tilde{x}, \frac{H}{2D_h} \right) = 0 \quad (\text{B.3})$$

η μερική διαφορική εξίσωση (B.2) μαζί με τις οριακές συνθήκες (B.3) αποτελούν ένα πρόβλημα συνοριακών τιμών με υπάρχουσα αναλυτική λύση. Η λύση προκύπτει αναπτύσσοντας σε σειρά Fourier την αδιάστατη ταχύτητα  $\tilde{u}$  ως

$$\tilde{u}^h(\tilde{x}, \tilde{y}) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i(\tilde{x}) \cos(\lambda_i \tilde{y}) \quad (\text{B.4})$$

ικανοποιώντας τις οριακές συνθήκες (B.3) στο  $\tilde{y} = \pm \frac{H}{2D_h}$  προκύπτει

$$\tilde{u}^h \left( \tilde{x}, \pm \frac{H}{2D_h} \right) = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i(\tilde{x}) \cos \left( \lambda_i \frac{H}{2D_h} \right) = 0 \Rightarrow \cos \left( \frac{\lambda_i H}{2D_h} \right) = 0 \Rightarrow \frac{\lambda_i H}{2D_h} = \frac{i\pi}{2} \Rightarrow \lambda_i = \frac{i\pi D_h}{H}, i = 1, 3, 5, \dots$$

Αντικαθιστώντας την (B.4) στην (B.2) προκύπτει

$$\sum_{i=1,3,\dots}^{\infty} \left\{ \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \tilde{x}^2} \cos(\lambda_i \tilde{y}) - \lambda_i^2 \alpha_i(\tilde{x}) \cos(\lambda_i \tilde{y}) \right\} = -\delta \quad (\text{B.5})$$

Πολλαπλασιάζοντας με  $\cos(\lambda_j \tilde{y})$ ,  $j=1,3,5,\dots$  και τα δυο μέλη της εξίσωσης (B.5) και ολοκληρώνουμε ως προς  $\tilde{y} \in \left(-\frac{H}{2D_h}, \frac{H}{2D_h}\right)$ , έχοντας υπόψη τις σχέσεις ορθογωνιότητας

$$\int_{-\frac{H}{2D_h}}^{\frac{H}{2D_h}} \cos(\lambda_i \tilde{y}) d\tilde{y} = \frac{1}{\lambda_i} \sin(\lambda_i \tilde{y}) \Big|_{-\frac{H}{2D_h}}^{\frac{H}{2D_h}} = \frac{2}{\lambda_i} \sin\left(\lambda_i \frac{H}{2D_h}\right)$$

και

$$\int_{-\frac{H}{2D_h}}^{\frac{H}{2D_h}} \cos(\lambda_i \tilde{y}) \cos(\lambda_j \tilde{y}) d\tilde{y} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ \frac{H}{2D_h}, & i=j \end{cases}$$

προκύπτει το εξής σύστημα διαφορικών εξισώσεων

$$\frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \tilde{x}^2} \frac{H}{2D_h} - \lambda_i^2 \alpha_i \frac{H}{2D_h} = -\frac{\delta}{\lambda_i} \frac{2}{H} \sin\left(\lambda_i \frac{H}{2D_h}\right) \Rightarrow \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \tilde{x}^2} - \lambda_i^2 \alpha_i = -\frac{\delta 4 D_h}{\lambda_i H} \sin\left(\lambda_i \frac{H}{2D_h}\right) \Rightarrow$$

$$\frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \tilde{x}^2} - \lambda_i^2 \alpha_i = -\kappa_i \quad (\text{B.6})$$

με  $\kappa_i = \frac{\delta 4 D_h}{\lambda_i H} \sin\left(\lambda_i \frac{H}{2D_h}\right)$ ,  $i=1,3,5,\dots$ . Από την επίλυση του συστήματος (B.6) προκύπτουν

οι άγνωστες συναρτήσεις  $\alpha_i(\tilde{x})$ . Η λύση γράφεται σαν επαλληλία της ομογενούς και της μερικής λύσης στη μορφή

$$\alpha_i = \alpha_i^{(H)} + \alpha_i^{(P)} \quad (\text{B.7})$$

Η ομογενής λύση προκύπτει από την λύση της

$$\frac{d^2 \alpha_i^{(H)}}{d\tilde{x}^2} - \lambda_i^2 \alpha_i^{(H)} = 0 \quad (\text{B.8})$$

εισάγοντας στην (B.8) την εκθετική αντικατάσταση  $\alpha_i^{(H)} = e^{p_i \tilde{x}}$  προκύπτει η αλγεβρική εξίσωση 2<sup>ης</sup> τάξης

$$p_i^2 - \lambda_i^2 = 0 \Rightarrow p_i^{1,2} = -\lambda_i, \lambda_i$$

Άρα η χαρακτηριστική εξίσωση έχει δυο πραγματικές ρίζες και η γενική ομογενής λύση γράφεται στην μορφή

$$\alpha_i^{(H)} = c_i^1 \exp(p_i^1 \tilde{x}) + c_i^2 \exp(p_i^2 \tilde{x})$$

Με τη μέθοδο των συντελεστών προκύπτει η μερική λύση  $\alpha_i^P = A_i$  και αντικαθιστώντας στην (B.6) προκύπτουν οι ακόλουθες μερικές λύσεις

$$-\lambda_i^2 A_i = -\kappa_i \Rightarrow A_i = \frac{\kappa_i}{\lambda_i^2}$$

Άρα οι γενικές λύσεις των άγνωστων συναρτήσεων  $\alpha_i(\tilde{x})$  είναι

$$\alpha_i(\tilde{x}) = \frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} + c_i^1 \left[ \sinh(p_i^1 \tilde{x}) + \cosh(p_i^1 \tilde{x}) \right] + c_i^2 \left[ \sinh(p_i^2 \tilde{x}) + \cosh(p_i^2 \tilde{x}) \right] \quad (B.9)$$

με βάση τις οριακές συνθήκες  $\tilde{u} \left( \pm \frac{W}{2D_h}, \tilde{y} \right) = 0$  και τις σχέσεις (B.4) και (B.9) προκύπτει

$$\frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} + c_i^1 \left[ \sinh \left( p_i^1 \frac{W}{2D_h} \right) + \cosh \left( p_i^1 \frac{W}{2D_h} \right) \right] + c_i^2 \left[ \sinh \left( p_i^2 \frac{W}{2D_h} \right) + \cosh \left( p_i^2 \frac{W}{2D_h} \right) \right] = 0 \quad (B.10)$$

και

$$\frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} + c_i^1 \left[ -\sinh \left( p_i^1 \frac{W}{2D_h} \right) + \cosh \left( p_i^1 \frac{W}{2D_h} \right) \right] + c_i^2 \left[ -\sinh \left( p_i^2 \frac{W}{2D_h} \right) + \cosh \left( p_i^2 \frac{W}{2D_h} \right) \right] = 0 \quad (B.11)$$

αφαιρώντας κατά μέλη τις εξισώσεις (B.10) και (B.11) προκύπτει

$$2c_i^1 \sinh \left( p_i^1 \frac{W}{2D_h} \right) + 2c_i^2 \sinh \left( p_i^2 \frac{W}{2D_h} \right) = 0 \Rightarrow c_i^2 = \frac{-c_i^1 \sinh(p_i^1 W / 2D_h)}{\sinh(p_i^2 W / 2D_h)} \quad (B.12)$$

Αντικαθιστώντας την (B.12) στην (B.10) προκύπτουν οι σταθερές  $c_i^1$  ως

$$\frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} + c_i^1 \left[ \sinh \left( p_i^1 \frac{W}{2D_h} \right) + \cosh \left( p_i^1 \frac{W}{2D_h} \right) \right] - \frac{c_i^1 \sinh(p_i^1 W / 2D_h)}{\sinh(p_i^2 W / 2D_h)} \left[ \sinh \left( p_i^2 \frac{W}{2D_h} \right) + \cosh \left( p_i^2 \frac{W}{2D_h} \right) \right] = 0 \Rightarrow$$

$$c_i^1 = -\frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} \left[ \frac{\sinh(p_i^2 W / 2D_h)}{\sinh(p_i^2 W / 2D_h) \cosh(p_i^1 W / 2D_h) - \sinh(p_i^1 W / 2D_h) \cosh(p_i^2 W / 2D_h)} \right]$$

$$c_i^1 = -\frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} \left[ \frac{1}{2 \cosh(p_i^2 W / 2D_h)} \right] \quad (B.13)$$

από τις σχέσεις (B.13) και (B.12) προκύπτουν οι σταθερές  $c_i^2$  ως

$$c_i^2 = \frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} \left[ \frac{1}{2 \cosh(p_i^2 W / 2D_h)} \right] \frac{\sinh(p_i^1 W / 2D_h)}{\sinh(p_i^2 W / 2D_h)} = -\frac{\kappa_i}{2\lambda_i^2 \cosh(p_i^2 W / 2D_h)}$$

με γνωστές τις σταθερές  $c_1^1$  και  $c_1^2$  μέσω της σχέσεις (B.9) προκύπτουν οι  $\alpha_i(\tilde{x})$  ως

$$\alpha_i(\tilde{x}) = \frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} \left[ 1 - \frac{\cosh(p_i^1 \tilde{x})}{\cosh(p_i^2 W / 2D_h)} \right]$$

με γνωστές τις συναρτήσεις συναρτήσεων  $\alpha_i(\tilde{x})$  και με βάση την εξίσωση (B.4) δίνεται η αναλυτική έκφραση της αδιάστατης ταχύτητας ως

$$\begin{aligned} \tilde{u}^h(\tilde{x}, \tilde{y}) &= \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i(\tilde{x}) \cos(\lambda_i \tilde{y}) = \sum_{i=1,3,\dots}^{\infty} \left[ \frac{\kappa_i}{\lambda_i^2} \left[ 1 - \frac{\cosh(p_i^1 \tilde{x})}{\cosh(p_i^2 W / 2D_h)} \right] \right] \cos(i\pi D_h / H \tilde{y}) \Rightarrow \\ \tilde{u}^h(\tilde{x}, \tilde{y}) &= \sum_{i=1,3,\dots}^{\infty} \left[ \frac{1}{\lambda_i^3} \frac{\delta 4 D_h}{H} \sin\left(\frac{i\pi}{2}\right) \left[ 1 - \frac{\cosh(i\pi D_h \tilde{x} / H)}{\cosh(i\pi D_h W / 2HD_h)} \right] \right] \cos(i\pi D_h \tilde{y} / H) \Rightarrow \end{aligned}$$

Εισάγοντας τις ποσότητες  $n = \pi(2i+1) = \frac{i\pi}{0,1,\dots}$  και  $\sin\left(\frac{i\pi}{2}\right) = (-1)^i$  προκύπτει

$$\tilde{u}^h(\tilde{x}, \tilde{y}) = \delta \sum_{i=0}^{\infty} \left[ \frac{1}{n^3} \left(1 + \frac{H}{W}\right)^2 (-1)^i \left[ 1 - \frac{\cosh\left(\frac{2n\tilde{x}}{1+(H/W)}\right)}{\cosh\left(\frac{n}{2(H/W)}\right)} \right] \right] \cos\left(\frac{2n\tilde{y}}{1+(H/W)}\right) \quad (\text{B.14})$$

Ο υπολογισμός της αδιάστατης παροχής  $G_p$  πραγματοποιείται μέσα από την σχέση

$$G_p^h = 8 \frac{W \cdot H}{(W + H)^2} \int_{-H/2D_h}^{H/2D_h} \int_{-W/2D_h}^{W/2D_h} \tilde{u}^h(\tilde{x}, \tilde{y}) d\tilde{x} d\tilde{y} \quad (\text{B.15})$$

από τις σχέσεις (B.14) και (B.15) προκύπτει

$$\begin{aligned} G_p^h &= 8 \frac{H \delta}{W} \sum_{i=0}^{\infty} \left[ \frac{1}{n^3} (-1)^i (-1)^i \left( \frac{(H+W)^2}{2H n^2 W^2} \left( nW - 2H \tanh\left(\frac{nW}{2H}\right) \right) \right) \right] \Rightarrow \\ G_p^h &= 4\delta \left( \frac{H}{W} + 1 \right)^2 \left( \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{n^4} - 2 \frac{H}{W} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{n^5} \tanh\left(\frac{nW}{2H}\right) \right) \Rightarrow \\ G_p^h &= \frac{\delta}{24} \left( \frac{H}{W} + 1 \right)^2 \left( 1 - 192 \frac{H}{W} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{n^5} \tanh\left(\frac{nW}{2H}\right) \right) \end{aligned}$$



## Παράρτημα Γ

### Επίλυση υδροδυναμικής περιοχής με OpenFOAM

#### Γ.1 Εισαγωγή

Το OpenFOAM αποτελεί μια υπολογιστική πλατφόρμα που περιλαμβάνει ένα σύνολο από λύτες, που στοχεύουν στην επίλυση διαφόρων προβλημάτων της μηχανικής. Ανάμεσα στους λύτες της υπολογιστικής πλατφόρμας διατίθεται και ο λύτης με την ονομασία rhoSimpleFoam ο οποίος εφαρμόζεται σε προβλήματα μόνιμης κατάστασης. Επιπλέον, ο λύτης rhoSimpleFoam μπορεί να εφαρμοστεί τόσο σε τυρβώδης όσο και σε στρωτές ροές. Λεπτομέρειες σχετικά με την εγκατάσταση και τη χρήση του OpenFOAM δίνονται στο εγχειρίδιο χρήσης της υπολογιστικής πλατφόρμας που διατίθεται δωρεάν στο διαδίκτυο. Στην παρούσα εργασία μοντελοποιείται το πρόβλημα ροής σε ορθογώνιο αγωγό μεταβλητής διατομής χρησιμοποιώντας το λύτη rhoSimpleFoam.

Οι εξισώσεις που επιλύονται με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων από τον λύτη rhoSimpleFoam είναι οι ακόλουθες:

#### Εξίσωση συνέχειας

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad i, j = x, y, z$$

#### Εξίσωση της ορμής

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_j}, \quad i, j = x, y, z$$

#### Εξίσωση ενέργειας

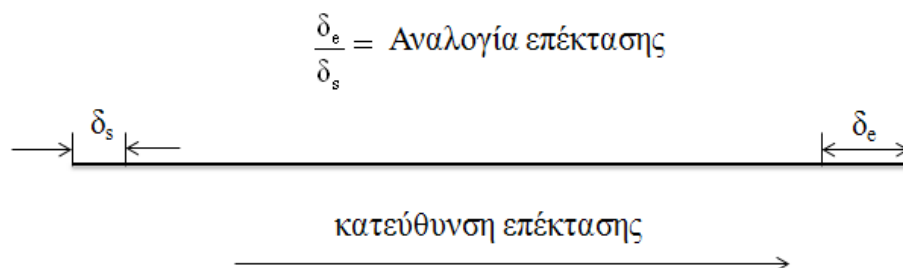
$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{k}{C_p} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad i, j = x, y, z$$

όπου  $\rho$ ,  $C_p$ ,  $k$ ,  $\mu$ ,  $p$ ,  $u$  και  $T$  είναι η πυκνότητα, η ειδική θερμότητα υπό σταθερή πίεση, η θερμική αγωγιμότητα, το δυναμικό ιξώδες, η πίεση, η ταχύτητα και η θερμοκρασία αντίστοιχα.

Μέσα στο φάκελο `rhoSimpleFoam` δημιουργείται ένας κατάλογος με την ονομασία “duct”, μέσα στον οποίο δημιουργούνται οι φάκελοι “0”, “constant”, “system”. Στη συνέχεια θα παρουσιαστεί η επεξεργασία των προαναφερθέντων φακέλων που απαιτείται για την επίλυση του προβλήματος.

## Γ.2 Φάκελος «constant»

Η διαμόρφωση του πλέγματος γίνεται μέσα από το αρχείο “blockMeshDict” που υπάρχει στον υποφάκελο “polyMesh” του φακέλου constant. Η μορφή του αρχείου “blockMeshDict” φαίνεται στην Εικόνα Γ.1. Με τη λέξη `inlet` δηλώνεται η είσοδος του αγωγού, με τη λέξη `walls` δηλώνονται τα τοιχώματα του αγωγού και με τη λέξη `outlet` καθορίζεται η έξοδος του αγωγού. Για την συγκεκριμένη προσομοίωση χρησιμοποιήθηκαν 400 κελιά στην κατεύθυνση της ροής, ενώ στην καθετή διατομή σε αυτή 15x10 κελιά. Επίσης, το OpenFOAM δίνει την δυνατότητα της δημιουργίας ανομοιόμορφου πλέγματος. Με την λέξη `simpleGrading` δηλώνονται οι αναλογίες επέκτασης των κελιών προς τις τρεις κατευθύνσεις  $-x, y, z$ . Στο Σχ. Γ.1 δίνεται σχηματικά ο τρόπος με τον οποίο δημιουργείται το ανομοιόμορφο πλέγμα προς μία τυχαία κατεύθυνση. Στα πλαίσια της συγκεκριμένης εργασίας χρησιμοποιήθηκε ανομοιόμορφο πλέγμα στην κατεύθυνση ανάπτυξης της ροής. Για την περίπτωση του αποκλίνοντος αγωγού η αναλογία επέκτασης είναι 15, ενώ στην περίπτωση του συγκλίνοντος αγωγού είναι 0.00001.



**Σχήμα Γ.1:** Πύκνωση πλέγματος κατά μήκος μιας τυχαίας κατεύθυνσης.

```

convertToMeters 1e-06;
vertices
(
(0 0 0) //0
(15000 0 -64.9) //1
(15000 9 -64.9) //2
(0 9 0) //3
(0 0 2.2) //4
(15000 0 67.1) //5
(15000 9 67.1) //6
(0 9 2.2) //7 );
blocks
(
// αποκλίνοντας αγωγός: hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (400 15 10) simpleGrading (15 1 1)
// συγκλίνοντας αγωγός: hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (400 15 10) simpleGrading (0.00001 1 1)
);
edges
(
);
boundary
(
inlet
{
type patch;
faces
(
(7 4 0 3)
);
}

walls
{
type wall;
faces
(
(3 7 6 2)
(0 1 2 3)
(4 5 6 7)
(4 5 1 0)
);
}
outlet
{
type patch;
faces
(
(5 6 2 1)
);
}
); mergePatchPairs
(
);

```

**Εικόνα Γ.1:** Δημιουργία πλέγματος (“blockMeshDict”)

Στη συνέχεια, εισάγονται στο πρόγραμμα κάποιες ιδιότητες που είναι αναγκαίες για την επίλυση του προβλήματος. Οι ιδιότητες εισάγονται στο αρχείο “thermophysicalProperties” που βρίσκεται και αυτό μέσα στον κατάλογο “constant”. Στην Εικόνα Γ.1 δίνεται το αρχείο “thermophysicalProperties”, το οποίο χρησιμοποιήθηκε για το συγκεκριμένο πρόβλημα. Με τις λέξεις molWeight, Cp και Hf δηλώνεται το μοριακό βάρος, η ειδική θερμότητα και η ενέργεια σύντηξης του αερίου. Το ιξώδες υπολογίζεται σαν συνάρτηση με τη θερμοκρασία από τη σταθερά του Sutherland As και τη θερμοκρασία του Sutherland Ts. Το ιξώδες υπολογίζεται με βάση την σχέση

$$\mu = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + T_s / T}$$

με τις λέξεις As και Ts στο τέλος του αρχείου “thermophysicalProperties” δίνονται οι τιμές της σταθεράς και της θερμοκρασίας του Sutherland για το συγκεκριμένο αέριο.

```
thermoType
hPsiThermo<pureMixture<sutherlandTransport<specieThermo<hConstThermo<perfectGas>>>>>;

mixture
{
  specie
  {
    nMoles 1;
    molWeight 44.01;
  }
  thermodynamics
  {
    Cp 834;
    Hf 0;
  }
  transport
  {
    As 1.5721e-06;
    Ts 240;
  }
}
```

**Εικόνα Γ.2:** Το αρχείο “thermophysicalProperties”.

### Γ.3 Φάκελος «0»

Ο φάκελος «0» βρίσκεται μέσα στο φάκελο "duct". Εδώ συναντώνται τα εξής αρχεία "p", "T", "U". Στα αρχεία "p", "T" και "U" ορίζονται οι οριακές συνθήκες για την πίεση, τη θερμοκρασία και την ταχύτητα αντίστοιχα. Στις Εικόνες Γ.3, Γ.4 και Γ.5 δίνονται τα αρχεία "p", "T" και "U" αντίστοιχα. Στο αρχείο "p", ορίζεται η ολική πίεση στην έξοδο και την είσοδο του αγωγού καθώς και η πίεση αρχικά στο εσωτερικό του αγωγού. Στο αρχείο "U" δίνονται οι οριακές συνθήκες της ταχύτητας. Στα τοιχώματα θεωρούνται συνθήκες μη ολίσθησης, ενώ στην είσοδο και την έξοδο αρχικά η ταχύτητα ορίζεται μηδενική. Στο αρχείο "T" δίνονται οι τιμές της θερμοκρασίας σε όλο το υπολογιστικό πεδίο και στην εξεταζόμενη περίπτωση δίνεται παντού η τιμή 293 K.

```
internalField uniform 0;

boundaryField
{
  inlet
  {
    type totalPressure;
    p0 uniform Πίεση εισόδου;
    U U;
    phi phi;
    rho none;
    psi none;
    gamma 1.295;
    value uniform Πίεση εισόδου;
  }
  walls
  {
    type zeroGradient;
  }
  outlet
  {
    type totalPressure;
    p0 uniform Πίεση εξόδου;
    U U;
    phi phi;
    rho none;
    psi none;
    gamma 1.291;
    value uniform Πίεση εξόδου;
  }
}
```

Εικόνα Γ.3: Το αρχείο "p".

```

internalField uniform (0 0 0);

boundaryField
{
  inlet
  {
    type      pressureInletOutletVelocity;
    value     uniform (0 0 0);
  }
  walls
  {
    type      fixedValue;
    value     uniform (0 0 0);
  }
  outlet
  {
    type      pressureInletOutletVelocity;
    value     uniform (0 0 0);
  }
}

```

**Εικόνα Γ.4:** Το αρχείο “U”.

```

internalField uniform 293;

boundaryField
{
  inlet
  {
    type      fixedValue;
    value     uniform 293;
  }
  walls
  {
    type      fixedValue;
    value     uniform 293;
  }
  outlet
  {
    type      fixedValue;
    value     uniform 293;
  }
}

```

**Εικόνα Γ.5:** Το αρχείο “T”.

#### Γ.4 Φάκελος «system»

Σε αυτό το φάκελο υπάρχουν πέντε αρχεία με τις εξής ονομασίες: “controlDict”, “fvSchemes” και “fvSolution”. Το αρχείο “controlDict” έχει ως ρόλο του τη ρύθμιση των αριθμών επανάληψης, την εγγραφή των δεδομένων καθώς και τον τερματισμό του προγράμματος. Στην Εικόνα Γ.6 απεικονίζεται το αρχείο “controlDict” για την εξεταζόμενη περίπτωση. Στο αρχείο “fvSchemes” παρέχονται στο λύτη τα στοιχεία τα οποία σχετίζονται με το αριθμητικό σχήμα επίλυσης. Το OpenFOAM παρέχει μια πληθώρα από αριθμητικά σχήματα. Στην εξεταζόμενη περίπτωση χρησιμοποιήθηκε Gauss upwind για τις ποσότητες  $\nabla \cdot ()$  και Gauss linear για τις ποσότητες  $\nabla$ . Στην Εικόνα Γ.7 απεικονίζεται το αρχείο “fvSchemes”. Στο αρχείο “fvSolution” εισάγονται οι ποσότητες που σχετίζονται με την ακρίβεια και τις ανοχές του αριθμητικού σχήματος. Η ανοχή του λύτη αντιπροσωπεύει το επίπεδο στο οποίο το υπόλοιπο ανά επανάληψη είναι αρκετά μικρό ώστε η λύση να μπορεί να θεωρηθεί ακριβής. Στην Εικόνα Γ.8 (Τμήματα Α - Δ) δίνεται το αρχείο “fvSolution”.

```
application    rhoSimpleFoam;

startFrom      startTime;

startTime      0;

stopAt         endTime;

endTime        100;

deltaT         1;

writeControl   timeStep;
writeInterval  100;

purgeWrite     0;

writeFormat    ascii;
writePrecision 6;

writeCompression off;

timeFormat     general;
timePrecision  6;

graphFormat    raw;
runTimeModifiable true;
```

**Εικόνα Γ.6:** Το αρχείο “controlDict”.

```

ddtSchemes
{
  default      steadyState;
}

gradSchemes
{
  default      Gauss linear;
}

divSchemes
{
  default      none;

  div(phi,U)      Gauss upwind; //limitedLinearV 1; //upwind;
  div((muEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
  div(phi,h)      Gauss upwind; //limitedLinear 1; //upwind;
  div(phi,epsilon) Gauss upwind;
  div(phi,k)      Gauss upwind;

  div(phid,p)     Gauss upwind;
  div(U,p)        Gauss linear;
}

laplacianSchemes
{
  default      Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
  default      none;
  interpolate(rho) linear;
  div(U,p)     upwind phi;
  interpolate((psi*U)) linear;
  interpolate(U) linear;
  UD          upwind phid;
  interpolate(p) linear;
  interpolate(((rho|A(U)-H(1))-(rho|A(U)))) linear;
}

snGradSchemes
{
  default      corrected;
}

fluxRequired
{
  default      no;
  p;
  pCorr;
}

```

**Εικόνα Γ.7:** Το αρχείο “fvSchemes”



```

{
  p0
  {
    solver      PBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance    1e-08;
    relTol      0.01;
  }

  p
  {
    solver      GAMG;
    tolerance    1e-08;
    relTol      0.1;
    smoother    GaussSeidel;
    nPreSweeps  0;
    nPostSweeps 2;
    nFinestSweeps 2;
    cacheAgglomeration true;
    nCellsInCoarsestLevel 20;
    agglomerator faceAreaPair;
    mergeLevels 1;
  }

  U0
  {
    solver      PBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance    1e-08;
    relTol      0.1;
  }

  U1
  {
    solver      smoothSolver;
    smoother    GaussSeidel;
    nSweeps     1;
    tolerance    1e-08;
    relTol      0.1;
  }

  U
  {
    solver      GAMG;
    tolerance    1e-08;
    relTol      0.1;
    smoother    GaussSeidel;
    nPreSweeps  0;
    nPostSweeps 2;
    nFinestSweeps 2;
    cacheAgglomeration true;
    nCellsInCoarsestLevel 20;
    agglomerator faceAreaPair;
    mergeLevels 1;
  }
}

```

**Εικόνα Γ.8:** Το αρχείο “fvSolution” - Τμήμα Α.

```

h0
{
  solver      PBiCG;
  preconditioner DILU;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
}
h1
{
  solver      smoothSolver;
  smoother    GaussSeidel;
  nSweeps     1;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
}
h
{
  solver      GAMG;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
  smoother    GaussSeidel;
  nPreSweeps  0;
  nPostSweeps 2;
  nFinestSweeps 2;
  cacheAgglomeration true;
  nCellsInCoarsestLevel 20;
  agglomerator faceAreaPair;
  mergeLevels  1;
}
k0
{
  solver      PBiCG;
  preconditioner DILU;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
}
k1
{
  solver      smoothSolver;
  smoother    GaussSeidel;
  nSweeps     1;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
}
epsilon0
{
  solver      PBiCG;
  preconditioner DILU;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
}

```

**Εικόνα Γ.9:** Το αρχείο “fvSolution” - Τμήμα Β.

```

k
{
  solver      GAMG;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
  smoother    GaussSeidel;
  nPreSweeps  0;
  nPostSweeps 2;
  nFinestSweeps 2;
  cacheAgglomeration true;
  nCellsInCoarsestLevel 20;
  agglomerator faceAreaPair;
  mergeLevels 1;
}
epsilon1
{
  solver      smoothSolver;
  smoother    GaussSeidel;
  nSweeps     1;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
}
epsilon
{
  solver      GAMG;
  tolerance   1e-08;
  relTol      0.1;
  smoother    GaussSeidel;
  nPreSweeps  0;
  nPostSweeps 2;
  nFinestSweeps 2;
  cacheAgglomeration true;
  nCellsInCoarsestLevel 20;
  agglomerator faceAreaPair;
  mergeLevels 1;
}
}
SIMPLE
{
  nNonOrthogonalCorrectors 0;
  rhoMin      rhoMin [1 -3 0 0 0] 0.099;
  rhoMax      rhoMax [1 -3 0 0 0] 1.18;
  transonic   yes;
}
relaxationFactors
{
  p          1;
  rho        1; //0.1;
  U          0.9;
  h          0.95;
  k          0.9;
  epsilon    0.9;
}

```

**Εικόνα Γ.10:** Το αρχείο “fvSolution” - Τμήμα Γ.

```
relaxationFactors0
{
  p      0.3;
  rho    0.1;
  U      0.7;
  h      0.7;
  k      0.7;
  epsilon 0.7;
}
```

**Εικόνα Γ.11:** Το αρχείο “fvSolution” - Τμήμα Δ.

Με την δημιουργία όλων των προαναφερθέντων αρχείων ολοκληρώνεται η διαμόρφωση του περιβάλλοντος OpenFOAM για την εξεταζόμενη περίπτωση. Η εκτέλεση του κώδικα χωρίζεται σε δυο βήματα. Στο πρώτο βήμα γίνεται ο έλεγχος και η δημιουργία του πλέγματος που ορίζεται στο αρχείο “blockMesh” με τις εντολές

```
$ blockMesh
```

```
$ checkMesh
```

Μετά την εκτέλεση των εντολών δημιουργούνται τα απαραίτητα αρχεία που περιέχουν τα στοιχεία του πλέγματος. Το δεύτερο βήμα είναι η εκτέλεση του λύτη rhoSimpleFoam με χρήση της εντολής

```
$ rhoSimpleFoam
```

Μετά την εκτέλεση του κώδικα έχουν εξαχθεί αρχεία που περιέχουν πληροφορίες σχετικά με την ταχύτητα, την πίεση και την θερμοκρασία σε κάθε θέση του υπολογιστικού πλέγματος. Με βάση τα εξαγόμενα αρχεία μπορεί να υπολογιστεί η μαζική παροχή στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού σε (Kg/s) μέσω της εντολής

για την είσοδο:

```
$ patchIntegrate phi inlet
```

για την έξοδο:

```
$ patchIntegrate phi outlet
```